

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Національний аерокосмічний університет ім. М. Є. Жуковського
«Харківський авіаційний інститут»

Ю. О. Скоб, М. В. Нечипорук, М. Л. Угрюмов

**МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ФОРМУВАННЯ І РУХУ ГАЗОВИХ
СУМІШЕЙ В АТМОСФЕРІ ПІД ЧАС ТЕХНОГЕННИХ АВАРІЙ
І В СИСТЕМАХ ПРОМИСЛОВОЇ АЕРОДИНАМІКИ**

Харків «ХАІ» 2022

УДК 533.27:004.942:504.05
С44

Рецензенти:
д-р техн. наук, проф. О. А. Тарасенко,
д-р техн. наук, проф. В. О. Лифар

Затверджено на засіданні вченої ради університету як монографію
(протокол № 9 від 28.04.2021)

Скоб, Ю. О.

С44 Моделювання процесів формування і руху газових сумішей в атмосфері під час техногенних аварій і в системах промислової аеродинаміки [Текст] : монографія / Ю. О. Скоб, М. В. Нечипорук, М. Л. Угрюмов. – Харків : Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т», 2022. – 288 с.

ISBN 978-966-662-901-5

Монографію присвячено аналізу й прогнозуванню наслідків впливу хімічно-складового, баричного й термічного збурення повітря на навколишнє середовище в зоні функціонування техногенного об'єкта під час аварійного викиду токсичних і хімічно активних газоподібних домішок на основі математичного моделювання руху багатокомпонентних газових сумішей у приземному шарі атмосфери з урахуванням складного рельєфу місцевості. Особливу увагу приділено ймовірнісному аналізу наслідків впливу шкідливих факторів на людину й промислові конструкції в зоні аварії на основі пробіт-аналізу під час оцінювання безпекового стану техногенного об'єкта, де зберігаються, використовуються або транспортуються токсичні або вибухонебезпечні гази.

Для наукових співробітників, аспірантів, магістрів і студентів старших курсів, які спеціалізуються в області математичного моделювання екологічних процесів у приземному шарі атмосфери й технологічних процесів, пов'язаних з рухом багатокомпонентних газових сумішей у системах промислової аеродинаміки.

Іл. 190. Табл. 19. Бібліогр.: 348 назв

УДК 533.27:004.942:504.05

© Скоб Ю. О., Нечипорук М. В.,
Угрюмов М. Л., 2022
© Національний аерокосмічний
університет ім. М. Є. Жуковського
«Харківський авіаційний інститут», 2022

ISBN 978-966-662-901-5

ЗМІСТ

ВСТУП.....	8
Розділ 1. СИСТЕМНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОМИСЛОВИХ ГАЗОПОДІБНИХ ВИКИДІВ НА ОСНОВІ СУЧАСНИХ ПІДХОДІВ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ.....	16
1.1. Системний аналіз фізичних процесів у приземному шарі атмосфери, які є наслідком виробничої діяльності людини	16
1.2. Огляд наявних математичних моделей руху газових сумішей.....	21
1.3. Аналітичний огляд обчислювальних методів газової динаміки.....	32
1.4. Постановка завдання дослідження	34
1.5. Основні положення системної методології оцінювання стану повітря техногенного об'єкта в умовах збурення	36
Висновки до розділу 1	39
Розділ 2. РОЗРОБЛЕННЯ СИСТЕМНОЇ МЕТОДОЛОГІЇ ІНЖЕНЕРНОГО АНАЛІЗУ ПРОЦЕСІВ ПРОМИСЛОВИХ ГАЗОПОДІБНИХ ВИКИДІВ	40
2.1. Тривимірна нестационарна математична модель руху суміші в багатозв'язному просторі з урахуванням хімічної взаємодії, розпилення крапель рідини (частинок пилу твердих фракцій).....	41
2.1.1. Тривимірна математична модель руху багатокомпонентної суміші	41
2.2. Тривимірна математична модель миттєвого вивільнення стисненої газоповітряної суміші («фізичний» вибух)	44
2.2.1. Тривимірна математична модель миттєвого вибуху газоповітряної суміші («хімічний» вибух).....	45
2.2.2. Моделювання процесу дефлаграційного горіння газоподібної домішки в атмосфері.....	48
2.2.2.1. Загальна постановка задачі горіння суміші газів	48
2.2.2.2. Математична модель горіння суміші газів	49
2.2.3. Моделювання наявності крапель рідини (частинок пилу) під час вибуху газоповітряної суміші	51
2.2.3.1. Урахування розпилення крапель рідини (твердих частинок пилу)	51
2.2.3.2. Урахування впливу аеродинамічного опору крапель рідини (частинок вугільного пилу) на течію газоповітряної суміші	52
2.2.3.3. Урахування впливу тепловиділення внаслідок кипіння (горіння) дисперсних частинок на течію газоповітряної суміші... ..	53
2.3. Тривимірна математична модель випаровування з плями пролиття	54
2.3.1. Постановка задачі розсіювання токсичної речовини з плями пролиття	55
2.3.2. Моделювання випаровування з плями пролиття.....	56
2.3.3. Узагальнене розв'язання задачі розпаду розриву	58

2.3.4. Інтерполяція функції інтенсивності випаровування	63
2.4. Обчислювальна технологія врахування вентиляції під час розрахунку руху газової суміші в приміщенні	65
2.4.1. Постановка задачі моделювання руху газу крізь вентиляційний отвір.....	67
2.4.2. Метод дискретизації поверхонь вентиляційних отворів	68
2.5. Математичне моделювання струминного витікання суміші із заданою концентрацією домішки	69
2.6. Тривимірна математична модель нестационарного процесу спряженого теплообміну між газом і твердим тілом	71
2.7. Метод подання розрахункової області.....	73
2.8. Постановка граничних і початкових умов	73
2.9. Методи оцінювання наслідків впливів, спричинених факторами ураження техногенних аварій.....	74
2.9.1. Негативні фактори впливу під час техногенних аварій.....	75
2.9.2. Детерміноване оцінювання наслідків впливу негативних факторів	77
2.9.3. Імовірнісне оцінювання наслідків негативних факторів впливу	77
Висновки до розділу 2	80
Розділ 3. РОЗРОБЛЕННЯ СТРУКТУРИ ПРОГРАМНОГО ЗАСОБУ КОМП'ЮТЕРНОЇ РЕАЛІЗАЦІЇ МОДЕЛІ ІНЖЕНЕРНОГО АНАЛІЗУ ПРОЦЕСІВ ВИКИДУ, РОЗСІЮВАННЯ Й ВИБУХУ ГАЗОПОДІБНИХ ДОМІШОК В АТМОСФЕРІ	81
3.1. Узагальнений алгоритм системного моделювання руху сумішей з урахуванням тепломасообміну.....	82
3.2. Технологія розроблення САЕ-системи	85
3.2.1. Проектування комп'ютерної системи засобами IDEF-методології.....	85
3.2.2. Проектування комп'ютерної системи засобами Rational Rose.....	90
3.2.2.1. Побудова діаграми варіантів використання.....	90
3.2.2.2. Побудова діаграми діяльності	92
3.2.2.3. Побудова діаграми класів системи.....	92
3.2.2.4. Вибір мови програмування	95
3.3. Організація паралельних обчислень нестационарних задач газової динаміки	97
3.3.1. Аналіз технологій розпаралелення розрахунку	98
3.3.2. Особливості математичної моделі руху суміші газів щодо паралелізації розрахунку.....	100
3.3.3. Алгоритм паралельного розрахунку	100
3.3.4. Апробація розробленої технології паралельного розрахунку.....	102
Висновки до розділу 3	104

Розділ 4. АНАЛІЗ ОСОБЛИВОСТЕЙ ПРОЦЕСІВ ВИКИДУ Й ПОШИРЕННЯ ГАЗОПОДІБНИХ СУМІШЕЙ У ВІДКРИТОМУ ПРОСТОРИ ЗІ СКЛАДНИМ РЕЛЬЄФОМ МІСЦЕВОСТІ	105
4.1. Верифікація й валідація математичної моделі тепломасоперенесення під час руху багатокomпонентної суміші	105
4.1.1. Методи верифікації і валідації математичних моделей.....	105
4.1.2. Статистичні показники ефективності математичних моделей	106
4.1.3. Числове моделювання процесу дефлаграції газової домішки в атмосфері	106
4.1.4. Моделювання випаровування з поверхні пролиття зрідженого газу	110
4.1.4.1. Моделювання випаровування з поверхні пролиття зрідженого пропану	110
4.1.4.2. Моделювання випаровування з поверхні пролиття зрідженого водню	112
4.1.5. Верифікація математичної моделі випаровування з поверхні пролиття зрідженого токсичного газу.....	113
4.1.6. Моделювання теплообміну в суцільних «твердих» тілах	116
4.1.6.1. Тестова задача теплообміну за схемою 1.....	116
4.1.6.2. Тестова задача теплообміну за схемою 2.....	118
4.1.6.3. Тестова задача теплообміну за схемою 3.....	120
4.1.7. Числове моделювання процесів теплообміну в твердих тілах складної геометричної форми	122
4.1.7.1. Розрахунок теплоперенесення в твердих об'єктах простих форм	124
4.1.7.2. Розрахунок теплоперенесення в тілах з порожнинами	124
4.1.7.3. Розрахунок теплоперенесення в тілах складних форм	125
4.1.8. Охолодження твердих тіл потоком теплопровідного газу	126
4.2. Числове моделювання процесу струминного витікання газової домішки в атмосферу	127
4.3. Числове моделювання процесу миттєвого вибуху газоподібної домішки в атмосфері	132
4.4. Числове моделювання дефлаграційного горіння водню в гаражному приміщенні	133
4.4.1. Визначальні геометричні параметри розрахункової області.....	134
4.4.2. Сценарії розвитку водневої пожежі.....	134
4.4.3. Результати моделювання водневої пожежі в приміщенні	135
4.5. Числове моделювання процесу переходу дефлаграційного горіння газоподібної домішки в детонацію.....	140

4.5.1. Актуальність проблеми переходу дефлаграції в детонацію	141
4.5.2. Загальна постановка задачі горіння суміші в детонаційній трубі.....	142
4.5.3. Математична модель горіння суміші в трубі	143
4.5.4. Метод числового розв'язання	143
4.5.5. Результати моделювання газофазної детонації в трубі	143
4.6. Числове моделювання впливу водяної завіси на вибух суміші метану й вугільного пилу в шахті	146
Висновки до розділу 4	148
Розділ 5. АНАЛІЗ І ПРОГНОЗУВАННЯ ФІЗИЧНИХ ПОЛІВ ПАРАМЕТРІВ ПОТОКУ В ПРОЦЕСІ ВЕНТИЛЯЦІЇ ПРИМІЩЕНЬ	150
5.1. Аналіз розподілу концентрації домішки під час вентиляції боксу	151
5.2. Дослідження ефективності вентилятора під час вентиляції.....	152
5.2.1. Характеристики мережі і вентилятора.....	153
5.2.2. Геометричні параметри решіток профілів	154
5.2.3. Газодинамічні параметри потоку в осьовому вентиляторі ...	154
5.2.4. Аналіз ефективності роботи осьового вентилятора	155
5.3. Аналіз ефективності схеми розміщення вентиляційної витяжки в гаражі	157
5.4. Детермінований аналіз схем множинної вентиляції в гаражі	162
Висновки до розділу 5	164
Розділ 6. АНАЛІЗ І ПРОГНОЗУВАННЯ ПОЛІВ ФІЗИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ПОТОКУ В КАМЕРАХ ТЕРМООБРОБКИ	165
Висновки до розділу 6	167
Розділ 7. АНАЛІЗ І ПРОГНОЗУВАННЯ БЕЗПЕКИ ПІД ЧАС ТЕХНОГЕННИХ АВАРІЙ	168
7.1. Аналіз імовірності ураження персоналу отруйними хімічними речовинами	168
7.1.1. Математичне моделювання наслідків випаровування аварійного пролиття токсичних речовин на залізничному транспорті	169
7.1.1.1. Вплив загромождження простору на наслідки випаровування аварійного пролиття токсичних речовин	169
7.1.1.2. Вплив форми плями аварійного пролиття токсичних речовин на наслідки випаровування в повітря	173
7.1.1.3. Числове оцінювання впливу швидкості вітру на наслідки випаровування пролітої токсичної речовини	177
7.1.2. Числове моделювання струминного витікання в атмосферу газоповітряної суміші з різною концентрацією домішок	182
7.2. Числове оцінювання впливу вибуху водню на споруди навколишньої забудови	184

7.2.1. Постановка задачі вибуху водню на заправній станції	185
7.2.2. Вибух хмари водню на заправній станції.....	185
7.3. Детерміноване числове оцінювання ефективності захисних споруд для зниження надлишкового тиску під час вибуху водню	192
7.4. Аналіз впливу розташування захисної стіни відносно епіцентру вибуху	200
7.5. Імовірнісний аналіз впливу вибухової ударної хвилі на навколишнє середовище	204
7.5.1. Числове дослідження впливу рельєфу місцевості на наслідки впливу вибухової хвилі.....	204
7.5.2. Числове оцінювання габаритів захисної споруди під час вибуху	205
7.5.2.1. Розроблення карти об'єктів промислового майданчика	207
7.5.2.2. Визначення впливу ширини стіни на стан безпеки	207
7.5.2.3. Визначення впливу висоти стіни на стан безпеки	210
7.5.2.4. Визначення співвідношення потрібних габаритів стіни	212
7.5.2.5. Визначення впливу стіни з раціональними габаритами на стан безпеки	213
7.5.2.6. Числове оцінювання згинальної міцності захисної стіни під час аварійного вибуху водню.....	215
7.5.3. Числовий аналіз наслідків водневого вибуху в тунелі видобувної шахти	223
7.6. Математичне моделювання наслідків впливу вибуху об'ємного шлангового заряду на рослинний покрив	231
7.7. Моделювання області обриву лісогорючих матеріалів, що формується під час вибуху паливоповітряних зарядів у лісовому фітоценозі	234
7.8. Числовий аналіз ураження персоналу тепловим випромінюванням.....	238
Висновки до розділу 7	242
ВИСНОВКИ.....	245
БІБЛІОГРАФІЧНИЙ СПИСОК.....	250
Додаток 1. СТРУКТУРНА СХЕМА ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ ЗБУРЕННЯ ПОТОКУ ПОВІТРЯ ТЕХНОГЕННОГО ОБ'ЄКТА.....	282
Додаток 2. ЗАГАЛЬНА СХЕМА ОЦІНЮВАННЯ НАСЛІДКІВ ЗБУРЕННЯ ПОВІТРЯ.....	283
Додаток 3. ТОКСИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ОТРУЙНИХ РЕЧОВИН	284
Додаток 4. ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ МЕТОД НАСКРІЗНОГО РОЗРАХУНКУ РУХУ СУМІШІ	285
Додаток 5. АЛГОРИТМ ПАРАЛЕЛЬНОГО ОБЧИСЛЕННЯ	286
Додаток 6. СХЕМА ВЕРИФІКАЦІЇ Й ВАЛІДАЦІЇ МОДЕЛІ.....	287

ВСТУП

Надійне й безпечне функціонування індустріальних техногенних об'єктів, робочим середовищем яких є повітря приземного шару атмосфери, тимчасово збурене аварійними або контрольованими викидами токсичних і займистих газів, значною мірою визначає динамічний розвиток відповідних галузей промисловості сучасного суспільства. Крайньому усвідомленню такого стану речей має сприяти критичний аналіз аварій на техногенних об'єктах, які супроводжуються руйнуванням інфраструктури й ураженням персоналу. Усе це, безумовно, призводить і до неефективного функціонування аеродинамічних систем техногенних об'єктів. Для усунення цих негативних явищ потрібно розробити комплекс заходів, зокрема попередній моніторинг стану повітря техногенного об'єкта під час найбільш песимістичних сценаріїв розвитку аварійних ситуацій, інтегрування процесів аналізу, накопичення інформації про фактори впливу хімічно-складових, баричних і термічних збурень на навколишнє середовище й прогнозування їх умовної ймовірності ураження до єдиної системи моделювання з метою пошуку раціональних конструкцій захисних засобів, які усувають або пом'якшують наслідки цього негативного впливу. Проте в сучасній інженерній практиці використовуються розрізнені комп'ютерні засоби, які базуються на математичних моделях різної досконалості і є пристосованими до аналізу окремих факторів впливу, деякі без урахування тривимірності й нестационарності актуальних фізичних процесів, складного характеру рельєфу місцевості, неінтегрованими до загального процесу прогнозування наслідків з візуальним визначенням умовної ймовірності ураження (руйнування). Тому технічна проблема зниження ризиків порушення безпечного функціонування техногенного об'єкта на основі аналізу руху багатокomпонентної газової суміші в зоні аварійних або контрольованих викидів газових домішок і прогнозування стану повітря техногенного об'єкта в умовах формування факторів впливу збурень на навколишнє середовище й пошуку засобів усунення негативних наслідків цього впливу є важливою й актуальною.

Математичному моделюванню зовнішніх і внутрішніх течій повітря й газоповітряних сумішей і розробленню обчислювальних методів для аналізу полів параметрів сталого й збуреного потоків повітря в приземному шарі атмосфери й прогнозування наслідків впливу надлишкових параметрів збурення на навколишнє середовище приділяють значну увагу вітчизняні науковці, зокрема М. М. Біляєв, Ю. О. Абрамов, В. П. Ляшенко, О. Є. Басманов, М. Л. Угрюмов, В. І. Кривцова, М. М. Налісько, О. Д. Волков, учені ближнього зарубіжжя, такі як В. В. Батурін, В. Н. Богословський, Н. Н. Брушлинський, А. М. Гришин, В. М. Колодкін, В. А. Макашев, С. М. Когарко, Н. А. Яришев,

Ю. А. Золотухін, а також іноземні науковці Д. Нолан, Р. Ханкін, М. Ассаель, О. Хансен, В. Мольков, С. Дорофєєв, К. Такено, В. Брайтунг, Х. Шнайдер, Е. Галлего, Е. Папаніколау, А. Венецанос, С. Ханна, Дж. Чанг, Р. Віткофські, Г. Путток, Е. Оран, Дж. Борис, М. Маркевич. Їх наукові розробки стали базовою науково-дослідною основою подальших пошуків перспективних шляхів удосконалення методологічних основ аналізу й прогнозування наслідків впливу збурення багатокомпонентної газової суміші на навколишнє середовище.

Через складність реальних проблем, які виникають під час руху просторового збуреного повітряного потоку в умовах складного рельєфу місцевості, хімічної взаємодії, нестационарного впливу надлишкових факторів на навколишнє середовище, ставляться нові вимоги до їх математичних моделей. Наявні математичні моделі, методи й комп'ютерні системи, які їх реалізують, – або швидкодійні, але не дуже точні, або дуже складні й неефективні з огляду на отримання результату в інженерно прийнятні терміни, або не дають змоги отримати комплексне оцінювання негативних наслідків техногенних аварій на основі обчислювального експерименту. Це свідчить про актуальність цієї роботи й необхідність удосконалення наявних і будівання нових математичних моделей руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери.

Характерною особливістю приземного шару атмосфери є його функціонування як складної динамічної системи, стійкий стан якої визначається локально незмінними в розглянутий проміжок часу кліматичними умовами й рельєфом місцевості, а поведження – законами збереження маси, імпульсу й енергії газового середовища певного хімічного складу. Аварійний або контрольований викид в атмосферу й подальше розсіювання токсичної або горючої газової домішки можна розглядати як локальне й тимчасове збурення параметрів сталого стану динамічної системи, порушення її хімічного складу і, як наслідок, перехід до нестійкого стану. Найважливішим показником ступеня такого збурення є відносна масова концентрація домішки – один із небезпечних параметрів багатокомпонентної газової суміші, який у разі токсичного газу формує фактор впливу, що вражає людину, – інгаляційну токсичну дозу. У випадку хімічно активної домішки має місце вибух (детонація), який генерує такі негативні навантаження на навколишнє середовище, як ударно-імпульсне (від вибухової ударної хвилі) і термічне (під впливом теплового потоку випромінювання від полум'я). Розроблення методів оцінювання й прогнозування впливів таких небезпечних факторів і генерація експертних рекомендацій для пом'якшення наслідків негативного впливу на навколишнє середовище або запобігання їм ґрунтуються на двох головних напрямках: експериментальних і теоретичних методах молекулярної фізики газових сумішей та феноменологічному підході нестационарної газової динаміки на основі моделі суцільного середовища, незрівноваженої термодинаміки, хімічної кінетики й математичної фізики. Перший напрям є

більш органічним під час фундаментальних досліджень і формування бази для оцінювання адекватності методів другого напрямку й ефективно використовується при розв'язанні прикладних задач. У межах останнього напрямку методи можна поділити на аналітичні й числові.

Крім того, під час розв'язання екологічних проблем математична модель є лише інструментом отримання додаткової інформації про збурений потік газової суміші для подальшого оцінювання наслідків впливу негативних факторів на навколишнє середовище. Традиційно в інженерній практиці використовують детермінований підхід, коли отримані розрахункові точкові значення факторів впливу (ударно-імпульсного, токсичного й термічного) «вручну» порівнюються з табличними нормативними діапазонами для окремих ступенів ураження або експерт розраховує локальні значення умовної ймовірності ураження людини чи ступеня руйнування споруди на основі ймовірнісного підходу. Однак сучасні ризико-орієнтовані документи законодавчого й регламентного рівня все більш нагально потребують для техногенного об'єкта наявності просторових розподілів умовної ймовірності ураження для різних сценаріїв аварій, що в умовах, коли теорія суттєво нелінійних динамічних систем хімічної природи все ще перебувають у стані становлення, а обчислювальна техніка розвивається високими темпами, потребує нових комплексних нестационарних математичних моделей більш високої точності з убудованими підмоделями ймовірнісного оцінювання впливу збуреного потоку багатокомпонентної газової суміші на навколишнє середовище.

Із системного аналізу сучасних літературних джерел випливає, що задача аналізу особливостей розсіювання хімічно активної і/або токсичної газової домішки в повітрі приземного шару атмосфери з урахуванням складного рельєфу місцевості є окремим випадком потоку повітря, тимчасово збуреного випадковим або контрольованим викидом домішки. Задачу системного прогнозування впливу на навколишнє середовище факторів, що виникають і зникають з часом, можна звести до задачі ймовірнісного пробіт-аналізу в кожній точці розрахункового простору. Ці нестационарні, просторові задачі мають зазвичай велику розмірність і є дуже інформаційно-ресурсомісткими, а обчислювальні методи їх розв'язання можуть втрачати стійкість до збурення параметрів потоку в часі, що призводить до похибок обчислень.

Виходячи із зазначеного, можна констатувати існування стійкої **суперечності**, яка полягає в невідповідності вимог, що підвищуються, до ефективності функціонування промислових аеродинамічних систем і надійності захисної інфраструктури аварійних техногенних об'єктів в умовах поширеного використання обчислювального експерименту, з *одного боку*, і наявним рівнем розвитку методологічної бази, яка містить моделі, методи й програмні засоби комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень на основі числового аналізу змінних

стану повітря техногенного об'єкта для забезпечення вимог безпеки, – з іншого.

Зважаючи на це, у роботі вирішується **актуальна науково-прикладна проблема** розроблення математичних моделей, методології та комп'ютерних засобів для аналізу руху багатокomпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери й прогнозування стану повітряного середовища техногенного об'єкта в умовах формування факторів впливу збурень на навколишнє середовище й пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

Тематика роботи відповідає пріоритетним дослідженням за напрямом запобігання виникненню надзвичайних ситуацій природного й техногенного характеру, що передбачає аналіз і прогнозування екологічних ризиків, які ґрунтуються на результатах стратегічного екологічного оцінювання наслідків впливу на навколишнє середовище, а також комплексного моніторингу стану навколишнього природного середовища згідно з «Національним планом дій з охорони навколишнього природного середовища на період до 2025 року» і відповідає вимогам Закону України «Про Основні засади (стратегію) державної екологічної політики України на період до 2030 року», який набув чинності 31 березня 2019 року.

Для розв'язання сформульованої проблеми запропоновано підхід, який базується на таких припущеннях:

– основний вплив на перенесення компонентів домішок здійснюється завдяки конвективному масообміну, що забезпечує можливість для опису руху багатокomпонентної газової суміші використовувати модель нев'язкої течії – усічену систему рівнянь, так звану систему рівнянь динаміки багатокomпонентної газової суміші багатозв'язним простором, замість повної системи усереднених за Рейнольдсом – Фавром рівнянь Нав'є – Стокса;

– для опису процесів хімічної кінетики використовується модель «брутто»-взаємодії пального й окиснювача (кисню повітря). Результатом такої реакції є виникнення третьої компоненти продуктів горіння.

Мета й завдання дослідження. Метою роботи є системне вдосконалення й підвищення ефективності математичних моделей, методології та програмних засобів комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень для аналізу руху багатокomпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери й прогнозування стану повітряного середовища техногенного об'єкта в умовах формування факторів впливу збурень на навколишнє середовище й пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

Для досягнення поставленої мети необхідно виконати такі **завдання**:

- 1) проаналізувати спеціальну наукову літературу з проблематики

основних тенденцій розвитку концепцій, математичних моделей, методів і програмних засобів комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень для аналізу руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери й прогнозування стану повітряного середовища техногенного об'єкта в умовах формування ФП збурень на навколишнє середовище та забезпечення ефективної роботи аеродинамічних промислових систем;

2) розробити концепцію, принципи, клас ефективних тривимірних математичних моделей, які різняться розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення й руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери зі складним рельєфом і в системах промислової аеродинаміки;

3) розробити нестационарні математичні моделі розподілу тиску з використанням нелокальних початкових умов для моделювання таких сценаріїв баричного збурення повітря, як швидкоплинні процеси вивільнення стисненого газу та хімічної реакції в області займистості;

4) розробити нестационарні математичні моделі руху хімічно активної газової суміші зі складними граничними умовами для моделювання дефлаграційного горіння, детонації та врахування наявності частинок вугільного пилу й дисперсних крапель води в суміші;

5) розробити нестационарні математичні моделі потрапляння (відбору) газової домішки в актуальну область крізь отвори довільної форми для моделювання таких сценаріїв хімічно-складового збурення повітря, як випаровування рідини з плями пролиття, потік суміші в вентиляційному отворі та струминне витікання змінної інтенсивності суміші певної відносної масової концентрації;

6) розробити системну методологію оцінювання змінних стану повітря, яка на основі отриманих унаслідок моделювання нестационарних просторових розподілів таких факторів впливу, як інгаляційна токсична доза небезпечної хімічної речовини, ударно-імпульсне навантаження у фронті вибухової ударної хвилі та густина потоку теплового випромінювання;

7) розробити метод розв'язання задачі розпаду довільного розриву параметрів газу для отримання потоків маси, імпульсу й енергії суміші під час взаємодії на основі загального інтегрально-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для розв'язання системи інтегральних рівнянь руху суміші в розрахунковому просторі;

8) розробити метод моделювання спряженого теплообміну газової суміші й твердих тіл у розрахунковому просторі для розв'язання спряженої задачі конвективного перенесення тепла в газовому середовищі, теплопровідності в твердих тілах і теплообміну на поверхнях їх дотику з газом на основі загального інтегрально-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку;

9) розробити метод пробіт-аналізу наслідків впливу збурення

змінних стану повітря для автоматизації обчислення умовної ймовірності ураження, інтегрування його в загальний метод і здійснення моніторингу просторових розподілів умовної ймовірності ураження;

10) побудувати програмний засіб комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень на основі запропонованих математичних моделей, методів аналізу й прогнозування стану повітряного середовища техногенного об'єкта в умовах формування факторів впливу збурень на навколишнє середовище з використанням технології паралельної організації обчислювального процесу.

Об'єктом дослідження є процеси аналізу й прогнозування стану повітряного середовища техногенного об'єкта в умовах формування факторів впливу збурень на навколишнє середовище та пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

Предметом дослідження є тривимірні математичні моделі й обчислювальні методи аналізу процесів формування й руху багатокомпонентної газової суміші в повітряному середовищі техногенного об'єкта в умовах формування факторів впливу збурень на навколишнє середовище.

Методи дослідження. Теоретичною основою роботи є методи математичного моделювання, обчислювальні методи математичної фізики, обчислювальної математики, пробіт-аналізу, теорії оцінювання ризиків і прийняття рішень. Для побудови програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень використовувалися принципи теорії комп'ютерних систем моделювання.

Наукова новизна одержаних результатів. На основі проведених теоретичних та експериментальних досліджень отримано нове рішення важливої науково-прикладної проблеми, сформовано й розвинуто новий науковий напрям – розроблення, узагальнення й розвиток теоретичних основ математичного й комп'ютерного моделювання руху небезпечних газоповітряних сумішей у розрахунковому просторі техногенного об'єкта, що відрізняється від наявних рішень більш повним відображенням процесів тепломасоперенесення, розробленням ефективних обчислювальних методів, призначених для розв'язання нестационарних початково-крайових і нелокальних задач, на основі сучасних технічних та інформаційних засобів.

У межах запропонованого напрямку на основі сформованих принципів підвищення ефективності процесу визначення безпекового стану техногенного об'єкта за умов збурення його повітря на основі розроблених математичних моделей і методів розв'язання задач отримано такі наукові результати.

Уперше розроблено новий клас ефективних тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними граничними умовами, які різняться розрахунковими схемами

для моделювання характерних сценаріїв виникнення й руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери зі складним рельєфом і в системах промислової аеродинаміки, і, на відміну від наявних, базуються на запропонованому єдиному підході до моделювання актуальних процесів:

- нестационарні математичні моделі розподілу тиску, у яких, на відміну від наявних, використовуються нелокальні початкові умови, що забезпечує можливість моделювати такі сценарії баричного збурення повітря, як «фізичний» (вивільнення стисненого газу) і «хімічний» (миттєва хімічна реакція «брутто» в області займистості) вибухи, для оцінювання наслідків негативного впливу хвилі тиску на навколишнє середовище й ефективність захисних засобів від її дії;

- нестационарні математичні моделі руху хімічно активної газової суміші зі складними граничними умовами, у яких, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовується розрахункова схема «брутто»-взаємодії пального й кисню повітря, що дає змогу моделювати дефлаграційне горіння й детонацію з метою оцінювання наслідків негативного впливу баричного й термічного збурення на навколишнє середовище й ефективність захисних засобів від їх дії;

- нестационарні математичні моделі руху хімічно активної газової суміші зі складними граничними умовами, у яких, на відміну від наявних, урахується наявність частинок вугільного пилу й дисперсних крапель води у формі додаткових джерельних членів у правих частинах рівнянь руху й енергії суміші, що забезпечує можливість оцінювати вплив горіння частинок пилу та випаровування й опору крапель на просторові розподіли тиску й температури під час аварійних вибухів з метою пошуку ефективних засобів захисту навколишнього середовища;

- нестационарні математичні моделі потрапляння (відбору) газової домішки в актуальну область, у яких, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми, що дає змогу моделювати такі сценарії хімічно-складового збурення, як випаровування рідини з плями пролиття, потік суміші у вентиляційному отворі й струминне витікання змінної інтенсивності суміші певної відносної масової концентрації.

Удосконалено системну методологію оцінювання змінних стану повітря, яка, на відміну від наявних, на основі отриманих унаслідок моделювання нестационарних просторових розподілів таких ФП, як інгаляційна токсична доза небезпечної хімічної речовини, ударно-імпульсне навантаження у фронті вибухової ударної хвилі й густина потоку теплового випромінювання, дає змогу оцінити наслідки негативного впливу й прийняти рішення щодо ефективності засобів захисту навколишнього середовища:

- метод розв'язання задачі розпаду довільного розриву параметрів газу Годунова, у якому, на відміну від оригінальної схеми, розглядається

взаємодія двох газоповітряних сумішей з різною відносною масовою концентрацією домішок і припускається адіабатичний процес з усередненим коефіцієнтом адіабати, що забезпечує можливість використовувати оригінальні співвідношення на розриві для отримання потоків маси, імпульсу й енергії суміші унаслідок його розпаду, обчислювати інтегральні закони збереження на гранях розрахункових комірок для реалізації загального інтегрально-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для розв'язання системи інтегральних рівнянь руху суміші розрахунковим простором;

– метод моделювання спряженого теплообміну газової суміші й твердих тіл у розрахунковому просторі, у якому використовується розв'язання зв'язної задачі теплообміну з умовами сполучення у вигляді граничних умов III роду, на основі загального інтегрально-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для отримання просторово-часових розподілів температури в зоні термічного збурення;

– метод пробіт-аналізу наслідків впливу, у якому, на відміну від наявного, табличну залежність умовної ймовірності ураження від пробіт-функції замінено кусково-кубічним сплайном, що забезпечує можливість автоматизувати обчислення умовної ймовірності ураження, інтегрувати його в загальний метод і здійснювати моніторинг просторових розподілів умовної ймовірності ураження, а це підвищило ефективність діагностики стану техногенного об'єкта й пошуку ефективних засобів захисту навколишнього середовища.

Набув подальшого розвитку метод побудови програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень на основі запропонованих математичних моделей, методів аналізу й прогнозування стану повітряного середовища техногенного об'єкта в умовах формування факторів впливу збурень на навколишнє середовище з використанням технології паралельної організації обчислювального процесу, що забезпечує підвищення ефективності пошуку раціональних конструкцій засобів захисту навколишнього середовища.

Практичне значення одержаних результатів полягає в тому, що запропоновані моделі й методологія є науково-методичною основою для розроблення методів, методик та інструментальних засобів прикладної інформаційної технології аналізу й прогнозування стану повітряного середовища техногенного об'єкта в умовах формування факторів впливу збурень на навколишнє середовище й пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу. Усі розроблені математичні моделі, методи й програмні засоби їх комп'ютерної реалізації доведено до рівня інженерних методик, високу ефективність яких обґрунтовано теоретично й підтверджено практично. Наукові принципи, основні висновки, рекомендації й обчислювальні результати, які отримали, обґрунтували й запропонували автори в цьому дослідженні, було підтверджено впровадженням у діяльність деяких

підприємств і навчальний процес. Основні результати монографії опубліковано в роботах [1–76].

Розділ 1. СИСТЕМНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОМИСЛОВИХ ГАЗОПОДІБНИХ ВИКИДІВ НА ОСНОВІ СУЧАСНИХ ПІДХОДІВ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

На основі системного аналізу фізичних процесів у приземному шарі атмосфери, що виникають унаслідок промислової діяльності людини, виокремлено основні шляхи керованого й аварійного (некерованого) потрапляння в повітря й поширення токсичних і вибухонебезпечних газових домішок та основні параметри збуреної газоповітряної суміші, що формують негативні для людини й інфраструктурних конструкцій токсичне, ударно-імпульсне й теплове навантаження та наслідки їх впливу на навколишнє середовище.

Здійснено аналітичний огляд, критичний аналіз і класифікацію наявних підходів розв'язання проблеми математичного моделювання утворення й руху багатокомпонентних газових сумішей з урахуванням хімічної взаємодії компонентів, турбулентної дифузії й складної форми актуального простору. Розглянуто обчислювальні методи газової динаміки для розв'язання задач тепломасообміну, класифіковано основні підходи числового оцінювання факторів впливу параметрично збуреного газового середовища на людину й навколишнє середовище в зоні навколо епіцентру збурення. Розроблено постановку задачі дослідження.

Наведено основні положення вдосконаленої системної методології оцінювання змінних стану збуреного повітря техногенного об'єкта, яка на основі отриманих за результатами моделювання нестационарних просторових розподілів таких факторів впливу, як інгаляційна токсична доза хімічної речовини, ударно-імпульсне навантаження у фронті вибухової хвилі й густина потоку теплового випромінювання, забезпечує можливість оцінити наслідки впливу та прийняти рішення щодо ефективності засобів захисту навколишнього середовища. Сформульовано концепцію й вибрано підхід, на основі яких розв'язується основна наукова проблема дослідження, та кілька наукових принципів, узгоджене використання яких буде сприяти підвищенню ефективності процесів аналізу й прогнозування стану повітря техногенного об'єкта в цілому.

1.1. Системний аналіз фізичних процесів у приземному шарі атмосфери, які є наслідком виробничої діяльності людини

У дослідженні розглядається найнижчий шар тропосфери, який має назву атмосферного прилеглового шару, де сконцентровано основні негативні наслідки промислової діяльності людини у вигляді шкідливих

викидів у атмосферу. Температура в цьому шарі зменшується зі збільшенням висоти до інверсійного шару, у якому температура збільшується зі збільшенням висоти. Частина атмосферного прилежого шару до інверсійного шару називають шаром змішування, і саме він зазвичай є актуальним простором більшості математичних моделей транспортування й розсіювання домішок у повітрі.

Повітря є сталою сумішшю газів, хімічно нейтральних один відносно одного, основу якої становлять азот і кисень із незначною наявністю водяної пари, аргону, вуглекислого газу й водню. Тому до повітря під час математичного моделювання можна застосовувати «брутто»-підхід і розглядати газову суміш як єдиний газ з молярною масою 0,029, а суміш повітря з додатковою газовою домішкою – як двокомпонентну суміш, хімічний склад якої визначається відносною масовою концентрацією цієї домішки. У разі хімічної взаємодії домішки з киснем повітря речовини, які утворилися внаслідок реакції, разом із залишками повітря, кисень якого прореагував, можна також розглядати як продукти горіння – єдиний газ зі сталою молярною масою. Таким чином, утворюється трикомпонентна суміш, яка складається з чистого повітря, продуктів горіння й можливих залишків надлишкової домішки, що не прореагували.

Основний потік чистого повітря в приземному шарі атмосфери можна розглядати як ядро незбуреного хімічними викидами зазвичай суттєво дозвукового сталого потоку двокомпонентної суміші з нульовою відносною масовою концентрацією газової домішки, який супроводжується звичайними для повітря фізичними процесами тепло- і масоперенесення. Під час турбулентного обтікання твердих непроникних поверхонь землі, стінок приміщень, тунелів та інших суцільних об'єктів, які знаходяться у межах актуального розрахункового простору, безпосередньо біля поверхонь утворюються так звані прилежові шари, де на формування профілю швидкості потоку суттєво впливають ефекти в'язкості, що є основною причиною турбулентного перемішування шарів повітря [3, 5]. Товщина прилежого шару є незначною порівняно з масштабами зон утворення й руху газоповітряної суміші в приземному шарі атмосфери, тому в подальшому під час моделювання об'єкта дослідження в'язкістю потоку можна знехтувати й розглядати потік як ідеальний [28]. Сталий стан течії повітря в розрахунковому просторі техногенного об'єкта як складної системи визначається локально незмінними в розглянутий проміжок часу кліматичними умовами й рельєфом місцевості, а поводження – законами збереження маси, імпульсу й енергії однокомпонентного газового середовища.

Аварійний (або контрольований) викид токсичної або горючої газової домішки в атмосферу й подальше її розсіювання можна розглядати як локальне й тимчасове збурення динамічної системи, порушення її хімічного складу і, як наслідок, перехід до нестійкого стану (рис. 1.1).

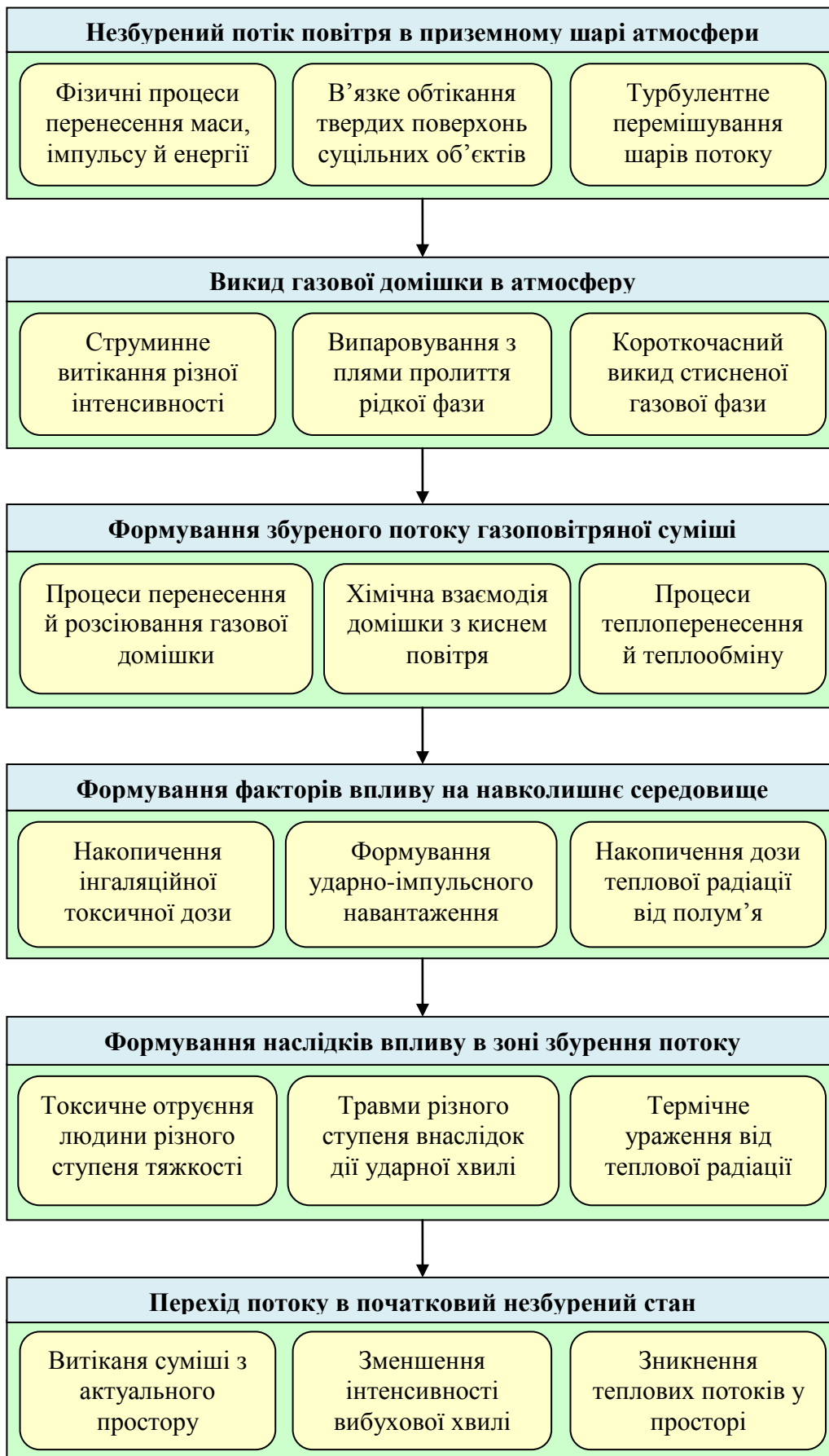


Рис. 1.1. Схема фізико-хімічних процесів під час руху газових сумішей

Основним вихідним показником ступеня такого збурення є відносна масова концентрація домішки – один із параметрів багатокомпонентної газової суміші, який є джерелом формування небезпечних впливів на навколишнє середовище. У разі отруйної газової домішки накопичується інгаляційна токсична доза – фактор, який негативно впливає на організм людини в зоні викиду [22, 24]. У випадку хімічно активної домішки має місце вибух (детонація) газоповітряної суміші [6, 7, 18], який генерує такі негативні навантаження на навколишнє середовище, як ударно-імпульсне (від вибухової ударної хвилі [31]) і термічне (під впливом теплового потоку випромінювання від полум'я або продуктів горіння [12, 15, 21]).

За відношенням густини хімічної речовини домішки до густини повітря викиди можна класифікувати у вигляді трьох великих груп: легкої (газова домішка піднімається вгору), важкої (газова домішка рухається вниз) і нейтральної (пасивної) плавучості. Так, важкі газові домішки після викиду можуть накопичуватися до небезпечної кількості в нижній частині приміщень або в заглибленнях складного рельєфу місцевості, водночас легкі газові домішки, навпаки, піднімаються до стелі приміщень з утворенням суміші з повітрям небезпечної концентрації вгору.

Викиди газових домішок у повітря зазвичай можна класифікувати за способом потрапляння в приземний шар атмосфери:

- залповий викид великого об'єму газової домішки, наприклад, під час швидкого руйнування посудини для зберігання високого тиску;
- випаровування зрідженого газу в повітря з плями пролиття після втрати герметичності посудини для зберігання, інтенсивність якого залежить від багатьох термодинамічних параметрів рідини, повітря атмосфери та поверхні під рідиною;
- струминне неконтрольоване витікання газової домішки в повітря різної інтенсивності після часткової втрати герметичності посудини для зберігання (або транспортування) [23] або контрольоване витікання заданої інтенсивності під час технологічного процесу (наприклад, у камері термообробки або під час вентиляції [17]).

Після потрапляння в приземний шар атмосфери газова домішка утворює із набіжним повітрям газоповітряну суміш, яка рухається (транспортується) за вітром. При цьому газова домішка продовжує весь час розсіюватись у просторі завдяки турбулентній дифузії та гравітаційному ефекту для важких і легких газів. З часом газова хмара залишає актуальний простір, унаслідок чого приземний шар атмосфери набуває початкового сталого й незбуреного стану (див. дод. 1).

Хімічна взаємодія активної газової домішки зазвичай має місце, коли відносна масова концентрація її перебуває в межах займистості й співвідношення кількості кисню повітря й домішки є достатнім для перебігу хімічної реакції [10]. Для вибухонебезпечних газів швидкість такої реакції є дуже великою, що призводить до вибуху газоповітряної суміші. Зазвичай така реакція є екзотермічною з вивільненням великої кількості енергії у

вигляді тепла під час формування продуктів горіння з високим значенням тиску. Вибухова ударна хвиля є утотожненням баричного збурення газового середовища й характеризується надлишковим порівняно з нормальним тиском і тривалістю дії фази стиснення у фронті хвилі, інтегральною характеристикою якої є імпульс. Вибухова ударна хвиля швидко поширюється від епіцентру вибуху, одночасно втрачаючи інтенсивність фази стиснення і, таким чином, зменшуючи ударно-імпульсне навантаження на навколишнє середовище. Залежно від значень надлишкового тиску (НТ) та імпульсу вибухової хвилі людина в зоні вибуху може зазнавати баричних травм, а споруди – руйнування різного ступеня. Продукти горіння, своєю чергою, випромінюють теплову енергію в навколишнє середовище, залежно від густини потоку теплового випромінювання якої об'єкти впливу можуть зазнавати термічних травм різного ступеня важкості.

З іншого боку, контрольований струминний викид газової домішки заданої інтенсивності, наприклад, у камерах заморожування, забезпечує можливість здійснювати обтікання струменем кріогенного газу об'єктів впливу і завдяки процесам теплообміну й теплопровідності надавати об'єкту необхідної (згідно з технологічним процесом) температури. Аналогічно працюють високотемпературні камери оброблення, у яких об'єкти впливу нагріваються.

Процеси теплообміну мають суттєву важливість також під час початкової стадії пожежі, коли високотемпературні газові потоки продуктів горіння обтікають суцільні тверді об'єкти в зоні пожежі, здійснюючи термічне навантаження. Нагріваючись завдяки теплообміну й тепловому випромінюванню, ці тіла можуть займатися, доводячи пожежу до небезпечних масштабів, тліти, виділяючи в атмосферу токсичні забруднювальні речовини. Тому важливо мати температурні поля для аналізу, щоб оптимально керувати тепловими потоками або мати змогу прогнозувати виникнення критичних температурних перепадів, недопустимого перевищення температури в умовах неконтрольованих теплових процесів під час техногенних аварій.

Додаткову складність у сукупність фізико-хімічних процесів, які супроводжують вибух газової суміші, може вносити й суттєво підсилювати негативні наслідки від вибуху наявність у суміші пилу (наприклад, вугільного пилу в шахті) [16, 77]. Для запобігання вибуху газоповітряної суміші достатньо зменшити концентрацію пилу [78, 79]. Ефективним засобом запобігання масштабній аварії є утворення водяних завіс за допомогою як звичайних розпилювачів, так і більш ефективних атомайзерів [80, 81] для захоплення й осадження пилу.

Як сама газова домішка, так і продукти її горіння в атмосфері можуть бути токсичними для людини, яка знаходиться в зоні поширення газоповітряної суміші. Природно, що незахищена людина дихає цим забрудненим повітрям та отримує якусь кількість токсичної речовини –

інгаляційну токсичну дозу для легень. Залежно від шкідливості отруйної хімічної речовини людина може зазнати інтоксикації організму різного ступеня.

Тому експертам з безпеки виробництва важливо мати комп'ютерні інструменти числового оцінювання просторового розподілу відносної масової концентрації отруйної хімічної речовини (ОХР), яка потрапила в повітря приземного шару атмосфери й прогнозування баричного, термічного й токсичного навантаження на навколишнє середовище в зоні викиду для запобігання можливим наслідкам негативного впливу й генерації рекомендацій щодо застосування споруд певної конструкції для пом'якшення негативних ефектів (див. дод. 2).

1.2. Огляд наявних математичних моделей руху газових сумішей

Усі наявні математичні моделі руху багатокомпонентної газової суміші різняться між собою рівнем завершеності й методами відображення фізичних і хімічних процесів, які мають місце під час руху газових домішок у повітрі приземного шару атмосфери, сценарієм потрапляння домішок у повітря, вимогами до організації вихідних даних, експертним рівнем користувача програмних засобів комп'ютерної реалізації, потужністю й вартістю наявних комп'ютерних ресурсів [82, 83]. Критеріїв, за якими можна поділити математичні моделі, дуже багато, що визначається складністю розглядуваних фізичних процесів (рис. 1.2).

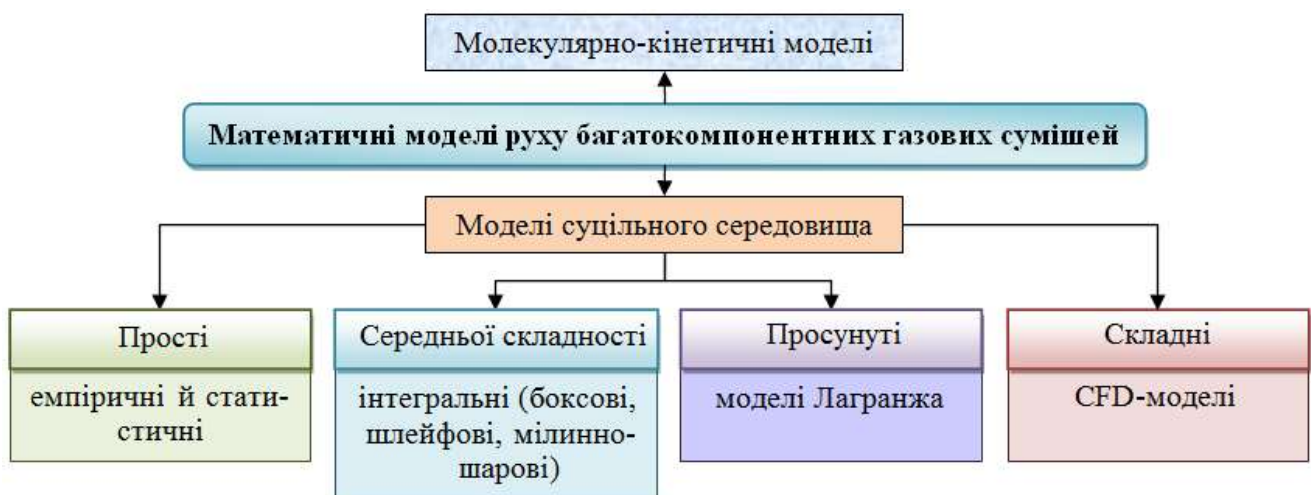


Рис. 1.2. Класифікація математичних моделей руху газоповітряних сумішей

Під час моделювання можна брати до уваги, наприклад, густину забруднювальної домішки (легкі, важкі й нейтральні гази), різновиди форми джерела витоків (точкові, одновимірні або лінійні, плоскі й об'ємні), рухливість джерела викиду (стаціонарні й мобільні), часові терміни витоків (швидкоплинні й довготривалі), висоту розташування джерела над

поверхнею землі (поверхневі, навкологемні й висотні), складний рельєф місцевості, наявність у просторі непроникних об'єктів загромождження, наявність хімічної взаємодії під час руху газоповітряної суміші та багато інших факторів. Зазвичай можливості й обмеження моделі визначають її ефективність і подальше застосування в інженерній практиці.

Одним з основних класифікаційних критеріїв можна вважати ступінь складності моделі, який органічно пов'язаний з довершеністю математичного опису нею актуальних фізичних процесів. Як зазначається в роботі Ю. К. Чернишова [84], розроблення методів аналізу й прогнозування впливів небезпечних факторів, що виникають під час руху газоповітряної суміші, і генерація експертних рекомендацій щодо пом'якшення наслідків негативного впливу на навколишнє середовище або запобігання їм ґрунтуються на двох головних напрямках: молекулярно-кінетичному й феноменологічному. В останньому напрямі нестационарна газова динаміка розглядається на основі припущення про суцільність газового середовища, а також на основі незрівноваженої термодинаміки, хімічної кінетики й математичної фізики. У першому напрямі газоповітряна суміш розглядається як динамічна система об'єктів (молекул газових компонентів суміші), динаміка розвитку якої визначається послідовністю взаємодій об'єктів [85–88] і подальшим обчисленням шляхом статистичного усереднення імпульсів та енергії окремих частинок з отриманням макроскопічних параметрів газоповітряної суміші, наприклад сил тиску на стінки внутрішнього каналу або опору потоку з боку твердого тіла перешкоди, які легко розраховуються додаванням імпульсів окремих молекул [84]. Головним недоліком молекулярно-кінетичного підходу в розв'язанні практичних задач є надзвичайно велика кількість молекул у розрахунковому просторі, які розглядаються в задачах руху газоповітряної суміші в приземному шарі атмосфери, що не дає можливості виконати обчислення з використанням наявних електронно-обчислювальних засобів. Заміщення реальних газових молекул «модельними частинками» більших розмірів у методах «великих частинок у комірках» Білоцерківського й Давидова [89], «частинок» Хокні, Іствуда [90], «молекулярної динаміки» Бірда [86] або Чернишова [84] забезпечує можливість лише частково просунутися у спробі зменшити потрібні обчислювальні ресурси наявної комп'ютерної техніки, але зовсім не усувають головного недоліку молекулярно-кінетичної моделі. Тому цей напрям можна вважати більш органічним під час фундаментальних досліджень і формування бази для оцінювання адекватності методів другого напрямку для ефективного використання під час розв'язання прикладних проблем динаміки розрідженого газу в невеликих об'ємах [85, 88].

Подальший огляд базується на класифікаціях моделей суцільного середовища, які було побудовано в дослідженнях М. Маркевич [91, 92] з моделювання поширення важких газів у приземному шарі атмосфери,

роботах наукової групи О. Ю. Гунько, П. Б. Машихіної і А. Н. Пшінько під керівництвом професора М. М. Біляєва [93, 94], спрямованих на моделювання забруднення атмосфери під час техногенних аварій з метою оцінювання екологічної безпеки. Особливу увагу в роботах [95–101] приділено числовому оцінюванню наслідків такого хімічно-складового збурення повітря приземного шару атмосфери й розробленню засобів пом'якшення негативних наслідків. У науково-дослідній групі під керівництвом професора Ю. О. Абрамова за участі вчених О. Є. Басманова, В. І. Кривцової протягом багатьох років вивчаються проблеми хімічної взаємодії в газоповітряній суміші, моделювання баричного й термічного збурення повітря в приземному шарі атмосфери [102–105]. Значну увагу проблемам математичного моделювання руху теплових потоків у суцільних тілах, що знаходяться в зоні термічного впливу, приділяють у групі вчених під науковим керівництвом професора В. П. Ляшенка [106–110]. Числовий аналіз процесів вибуху газоповітряних сумішей у спорудах великої протяжності на основі математичного моделювання описано в роботах групи вчених на чолі з професором М. М. Налісько [111–114].

Відповідно до градації ознак складності й довершеності моделі суцільного середовища поширення газових домішок у приземному шарі атмосфери можна поділити на чотири головні групи: нескладні (прості) емпіричні моделі; проміжні за складністю (середньої складності) інтегральні моделі; просунуті за складністю моделі Лагранжа; складні моделі CFD (Computational Fluid Dynamics). Така класифікація може розглядатися як узагальнення поділу моделей, запропонованого групою MEG (Model Evaluation Group) [115] для дослідження основних промислових небезпек у Європі й розвинутого М. Т. Маркевич [91, 92] для важких газів на увесь спектр газових домішок з різною густиною. У класифікації MEG розглядаються три основні групи моделей: феноменологічні, проміжні й тривимірні. В оглядових роботах [93, 94] наявні моделі прогнозування якості атмосфери умовно поділено на три основні групи: емпіричні, аналітичні й числові.

Треба зазначити, що ця класифікація є ідеалізованою в тому сенсі, що деякі математичні моделі складно чітко віднести до якоїсь певної категорії. До речі, існує кілька пакетів прикладних комп'ютерних програм, що мають модулі з реалізацією одразу декількох моделей розсіювання газів, тому різні модулі можуть бути віднесені до різних категорій класифікації. Також важливо зазначити такі оглядові роботи [116, 117], у яких до класифікації важких газів долучають групу модифікованих моделей розсіювання для гауссова шлейфа газової домішки. То були спроби використати конвенціональні гауссові шлейфові моделі (наприклад, як у методиці [118]), розроблені для пасивних домішок нейтральної плавучості, шляхом модифікації значень параметрів розсіювання відносно вертикальної координати. Наприклад, у моделі Кленсі [119] гауссове

рівняння дифузії має вертикальний дифузійний параметр C_y , удвічі менший, ніж відповідні параметри в горизонтальних (поперечному й поздовжньому) напрямках $C_x = C_z$, що не завжди відповідає експериментальним даним.

Прості емпіричні моделі розсіювання хмар важких газів у приземному шарі атмосфери являють собою серії номограм або простих алгебричних співвідношень між потрібним невідомим значенням і кількома параметрами-аргументами, що впливають на забруднення приземного шару атмосфери [120, 121], і були розроблені на основі польових вимірювань, обмежених пласким рельєфом місцевості з трав'яним покривом у приблизно стабільних нейтральних атмосферних умовах. Вимірювані відносні масові концентрації домішок осереднювалися за часом. Для отримання базових співвідношень впливом атмосферної стабільності, шорсткістю земної поверхні й усередненням часу було знехтувано. Розглядалися миттєві й безперервні викиди домішки. Одновимірний розподіл відносної масової концентрації обчислювався в умовах задавання таких параметрів, як швидкість вітру, об'єм викиду або інтенсивність витoku газової домішки, відносна різниця густини домішки й повітря, гравітаційна постійна, відстань за вітром. Типовими з цієї категорії є модель B&McQ [120], яку було інтегровано до пакета програм TSCREEN, і модель VDI Guidelines [122, 123] у складі пакета STOER для аварійних викидів. Модель VDI Guidelines було розвинуто з огляду на можливість обчислити неплаский ландшафт при наявності загромождження завдяки вимірюванням на вулицях різної конфігурації [124, 125].

За даними праці [93], емпіричні моделі широко використовуються у вітчизняній практиці прогнозування масштабів забруднення під час аварій [126–128] і є базовими в нормативній методиці оцінювання наслідків надзвичайних ситуацій на транспорті й хімічно небезпечних об'єктах [129]. У дослідженні [128] наведено основні емпіричні моделі, що застосовуються для прогнозування наслідків техногенних аварій на залізниці: визначення габаритів зон хімічного забруднення, ураження людини тепловою радіацією від вогняної кулі тощо. Безумовними перевагами емпіричних моделей можна вважати простоту їх розрахункових співвідношень, використання мінімальної кількості вихідних даних, яких потребує прогнозування, і можливість обійтися «ручними» розрахунками з використанням незначних комп'ютерних ресурсів тільки для візуалізації результатів розрахунку. Ці моделі можуть бути використані виключно в разі базових сценаріїв експериментальних вимірювань і не дають габаритів хмари, необхідних для кількісного оцінювання ризиків [130, 131]. Як зазначається в роботі [93], в емпіричних моделях не враховується вплив складного рельєфу місцевості, наявності в актуальному просторі непротічних об'єктів, які загромождують потік газоповітряної суміші, на процес транспортування й розсіювання газової домішки. Крім того, з їх допомогою неможливо прогнозувати динаміку поширення газових домішок

у просторі й часі, а також враховувати профіль швидкості вітру, змінення значень коефіцієнтів атмосферної дифузії та інших параметрів приземного шару атмосфери. Емпіричні моделі неможливо використати для моделювання складних тривимірних процесів викиду газових домішок у повітря, нестационарної хімічної взаємодії її з киснем повітря, будування просторових розподілів таких небезпечних факторів, як ударно-імпульсне, токсичне й термічне навантаження на навколишнє середовище, і застосування ймовірнісного підходу для аналізу наслідків аварій.

До групи простих можна віднести й статистичні математичні моделі, які описано в роботах [93, 94]. У цих моделях для встановлення зв'язку між відносною масовою концентрацією газової домішки й параметрами, що впливають на фізичний процес забруднення приземного шару атмосфери і які вимірювалися під час спостережень, використовуються стохастичні співвідношення. Моделі ці є дуже простими у використанні й не потребують комп'ютерної підтримки, однак залежать тільки від умов виконуваних спостережень, тому що основним припущенням під час будування цих моделей є незмінність розташування й інтенсивності джерел забруднення за час спостережень і прогнозування [132].

До інтегральних моделей другої групи згідно з МEG-класифікацією належать коробкові моделі, моделі стаціонарного шлейфа, узагальнені стаціонарні шлейфові моделі, одновимірні інтегральні моделі шлейфа й найбільш складні моделі мілинного шару.

Коробкові моделі [133–151] описують швидкоплинні викиди у вигляді приземних хмар і базуються на консервативному рівнянні балансу мас для актуального контрольного об'єму камери-боксу, якість повітря в якому прогнозується. Ван Ульден [133] сформулював основні ідеї цього підходу, згідно з яким припускалося, що хмара газової домішки мала форму циліндра певного розміру. Систему звичайних диференціальних рівнянь, що описувала горизонтальне поширення газової домішки, підмішування повітря до хмари й змінення її теплового стану, було зінтегровано за часом. Відносну масову концентрацію домішки визначають як осереднену масу викиду відносно коробкового об'єму. Вихідними даними є швидкість повітря, поверхнева шорсткість та атмосферна стабільність, яка зазвичай описується класом за градацією Pasquill-Gifford (від найбільш турбулентної і нестабільної до найменш турбулентної і найбільш стабільної) або довжиною Моніна – Обухова (висота, де турбулентність генерується більше ефектом плавучості, ніж зсувом вітру). Газова домішка розсіюється в нерухомому повітрі або рухається за вітром зі швидкістю, що залежить від його швидкості, тоді як горизонтальне поширення, тобто радіус хмари, розраховується за допомогою гравітаційної швидкості фронту, яка, своєю чергою, залежить від гравітаційної константи, густин хмари й повітря та висоти хмари. Масообмін між хмарою й повітрям крізь поверхні циліндра залежить від вхідних швидкостей, що визначаються емпіричними залежностями, які зазвичай містять число Річардсона (Ri). Цей

безрозмірний параметр описує гравітаційний вплив і залежить від співвідношення складників плавучості хмари й зсуву повітря, геометричного масштабу витоку (розміру хмари або витікання) і характерної турбулентної швидкості (швидкості вітру, тертя або конвекції). Розсіювання хмари під впливом різниці густин буде мати місце, якщо число Ri вийде за межі критичного значення. Теплообмін хмари зазвичай обчислюється на контактній поверхні із землею й з урахуванням розчинення в приземному шарі атмосфери. У більш просунутих коробкових моделях ураховуються такі ефекти нестационарного теплообміну, як фазовий перехід або наявність водяної пари, які базуються на гомогенній рівновазі [151]. Деякі математичні моделі мали термодинамічні модулі врахування хімічної взаємодії окремих хімічних речовин. Для терміну нейтральної плавучості хмари розподіл відносної масової концентрації зазвичай отримують за допомогою рівняння Гаусса для викиду газової домішки. У більшості коробкових моделей припускається наявність плаского рельєфу місцевості. Тільки в декількох окремих моделях розглядається розсіювання на поверхні з ухилом або з простою перешкодою. Коробкові моделі задовільно відповідають результатам польових і лабораторних досліджень. За висновками М. Т. Маркевич [91], емпіричний характер коробкових моделей, як і інших інтегральних моделей, має ясне фізичне пояснення. Невибагливість моделей до комп'ютерних ресурсів (і, як наслідок, низькі витрати) і вимог до потенційних користувачів, простий спосіб отримання вихідних даних роблять коробкові моделі та інші інтегральні моделі привабливими інструментами в інженерному застосуванні під час оцінювання впливу на навколишнє середовище та ризико-орієнтованого прогнозування наслідків впливу, планування заходів щодо пом'якшення наслідків впливу або запобігання їм [152–154]. Водночас головним недоліком коробкових моделей є їх нездатність до тривимірної диференціації розподілу відносної масової концентрації домішки, яка є однією з вимог до математичних моделей, призначених для прогнозування аварійного забруднення приземного шару атмосфери.

Стаціонарні шлейфові моделі призначено для моделювання безперервних приземних викидів газових домішок [155–158]. Як зазначено в роботі [91], основою перших математичних моделей цієї категорії були ті ж базові фізичні передумови, що й у коробкових моделях, за виключенням того, що інтегрування звичайних диференціальних рівнянь проводилося вздовж напрямку вітру й передбачалося, що форма поперечного перерізу шлейфа є прямокутником, де всі параметри усереднено. Усереднене значення відносної масової концентрації домішки визначається масовою інтенсивністю викиду й об'ємною інтенсивністю течії у шлейфі. Вихідні метеорологічні дані є такими самими, як і в коробкових моделях: швидкість вітру на актуальній висоті, клас стабільності атмосфери, температура повітря й поверхні землі, атмосферний тиск і відносна вологість повітря. Передбачається, що рельєф місцевості є пласким, а шосткість поверхні є

єдиним параметром, який визначає рельєф місцевості. Швидкість вітру є основою для обчислення швидкості шлейфа, або остання визначається згідно з рівнянням збереження імпульсу. Урахування основних термодинамічних ефектів, використання профілю Гаусса або інших профілей подібності для відносної масової концентрації, обчислення швидкостей підмішування повітря до шлейфа, гравітаційної течії для генерації горизонтального розсіювання, критерію переходу до пасивної плавучості та практична неможливість наявності перешкод для розсіювання є такими самими, як і в ранніх коробкових моделях.

В узагальнених стаціонарних шлейфових моделях [159–165] просторовий розподіл відносної масової концентрації та інших параметрів у поперечному перерізі відповідає узагальненим профілям, які змінюються під час руху хмари за вітром, що забезпечує безперервність обчислення навіть після переходу гравітаційного стану суміші від важкого до пасивного і не потребує окремих математичних моделей для різних режимів плавучості. Модель HAGADAS (розсіювання важкого газу з поверхневого джерела) [159, 162], яка є складовою комп'ютерного пакета HGSYSTEM [161], і модель DEGADIS (розсіювання щільного газу) [163] є найбільш використовуваними представниками зазначеної модельної категорії. DEGADIS інтегровано в комп'ютерну систему ALOHA, яка, своєю чергою, є складовою пакета CAMEO. Згідно з даними роботи [91], поперечний переріз шлейфа в цих математичних моделях є прямокутником, вертикальний профіль відносної масової концентрації є гауссовим, а горизонтальний поперечний є гауссовим на краях, постійним у середині шлейфа та стає повністю гауссовим зі зникненням серединної плоскої частини. Інші математичні моделі цієї категорії мають еліптичну форму поперечного перерізу та концентраційний профіль з гладким переходом від верхнього до гауссового вздовж шляху шлейфа. Вони здатні відтворювати термодинамічні ефекти, хімічну взаємодію та метеорологічні умови, як і кращі коробкові моделі.

Одновимірні шлейфові інтегральні моделі призначено для математичного опису безперервних наземних викидів [166–177]. Дослідження цього фізичного явища почалося з робіт Г. Умса [166] і групи авторів Я. Хут, Р. Мерони та Й. Петерка [167]. М. Т. Маркевич в огляді [91] зазначає, що моделі цієї категорії базуються на законах збереження маси домішок, поздовжнього й поперечного за вітром імпульсу й осередненої в поперечному перерізі шлейфа енергії. Система цих співвідношень дає змогу обчислити всі параметри шлейфа, осереднені в його поперечному перерізі. Рівномірний, гауссів або узагальнений профіль подібності зазвичай використовується для просторового опису змінних шлейфа в його поперечному перерізі. У сталих за часом математичних моделях параметри шлейфа обчислюються вздовж його траєкторії. У нестаціонарних математичних моделях вони змінюються не тільки вздовж траєкторії, але й з часом. Шлях шлейфа змінюється під впливом гравітації,

сил тертя основного потоку й імпульсу підмішуваного повітря [91], швидкість якого залежить від різних факторів, у тому числі й від турбулентності струменя, поперечного потоку [175] та атмосфери. Остання складова в деяких моделях не враховується, в інших виводиться зі співвідношень для коефіцієнтів розсіювання згідно зі звичайним гауссовим шлейфом. Вихідні дані для моделей цієї категорії, питання щодо врахування термодинаміки й хімічної кінетики є схожими з іншими інтегральними методами.

До цієї категорії можна віднести й аналітичні моделі точного розв'язання рівняння перенесення домішки, що широко використовуються для моделювання точкового, лінійного й обмеженого площиною джерел викиду, серед яких виділяється модель Гаусса [118, 178, 179], яка є аналітичним розв'язком рівняння транспортування пасивної газової домішки при умовах деяких спрощень (стаціонарно діюче постійне точкове джерело або точковий миттєвий викид, незмінна за висотою швидкість вітру тощо). У роботі [93] зазначається загальна перевага гауссової моделі – простота розрахункового співвідношення поширення газових домішок у приземному шарі атмосфери, але підкреслюються й недоліки, притаманні всім аналітичним моделям: потреба корегування коефіцієнтів дисперсії, неможливість комплексного врахування під час прогнозування різних форм первинної хмари, змінність швидкості вітру й коефіцієнтів дифузії за висотою, деформація профілю швидкості повітря, спричинена обтіканням складного рельєфу місцевості.

Згідно з класифікацією [91] для важких газів одно- або двовимірні математичні моделі поверхневого (міліного) шару зазвичай розроблялися й використовувалися для симуляції приземних викидів [180–191], і основу для розвинення цієї групи моделей заклав О. Земан [180], розглянувши закони збереження маси, імпульсу й енергії суміші у вигляді диференціальних рівнянь у частинних похідних, причому у двовимірному випадку рівняння осереднено в напрямку глибини хмари, оскільки висота її є незначною. Для одновимірного випадку осереднення виконано в поперечному перерізі. Масообмін між хмарою й повітрям моделюється з урахуванням швидкості засмокування. У деяких моделях, наприклад у SLAM (моделі міліного шару) [185], тиск не розглядається як гідростатичний, а швидкість засмокування визначається з балансу кінетичної енергії турбулентності. Для моделювання гравітаційних ефектів у випадку складного рельєфу місцевості додаткові члени додаються до рівняння імпульсу, хоча врахування наявності непроникних перешкод є утрудненим. Крім того, математичні моделі цієї групи не призначено для газових домішок пасивної плавучості й легких газів, їх лімітовано тільки однофазними випадками викидів. Зазвичай у цих моделях ураховується теплообмін з поверхнею землі, і моделі базуються на стандартних метеорологічних даних в єдиній точці вимірювання для задавання вихідних параметрів середовища навколо хмари. Моделі достатньо

реалістично описують рух хмар важких газів у просторі над пласкою поверхнею або з ухилом. Вони є більш вільними від емпірики інтегральними моделями і є більш простими в застосуванні, ніж моделі RANS (усереднені за Рейнольдсом рівняння Нав'є – Стокса), які є складовою групи моделей CFD. За часом виконання симуляції вони займають проміжне місце. За твердженнями М. Т. Маркевич [91], математичні моделі цієї групи мають потенціал використання як інструмента оцінювання наслідків впливу, але поки немає свідoctв їх застосування в інженерній практиці.

Наступними за складністю є просунуті лагранжеві моделі для траєкторії частинки й для хмари. Перші беруть свій початок з кодів для домішок пасивної плавучості [192–199], маса яких подається уявними частинками, а переміщення й розсіювання останніх розглядається вздовж траєкторій. Шлях частинки за часовий крок обчислюється з урахуванням середньої швидкості потоку, атмосферної турбулентності та надлишку густини. Середня швидкість вітру зазвичай є вихідним параметром для траєкторних моделей і обчислюється попередньо за допомогою інших метеорологічних моделей. Як зазначає М. Т. Маркевич в огляді [91], турбулентні швидкості отримують розв'язанням тривимірної форми рівняння Ланжевена для броунівського руху частинок. Інші характеристики турбулентного потоку (турбулентну кінетичну енергію, інтенсивність її дисипації, лагранжеві масштаби часу) також беруть з метеорологічних моделей. Для моделювання плавучості використовують локальне змінення числа Ri з метою обчислення впливу різниці густин частинок і повітря на турбулентність. У сучасних математичних моделях для надземних шлейфів газових домішок траєкторія частинки визначається розв'язанням системи рівнянь збереження енергії, маси й складових імпульсу. Згідно з оглядом [91] майже всі сучасні лагранжеві моделі для траєкторії частинки ураховують термодинамічні процеси, складну топографію й наявність суцільних перешкод у потоці та використовуються сумісно з тривимірними метеорологічними моделями аналізу й прогнозування. Траєкторні лагранжеві моделі в класифікації знаходяться десь між інтегральними й RANS-моделями. Як зазначає М. Т. Маркевич, ці моделі добре підходять для підготовчого етапу завдяки їх робастності, тому можна відносно швидко отримати результат.

Крім траєкторних математичних моделей до тієї ж категорії можна віднести лагранжеву модель розсіювання газових домішок різної плавучості [200], розвинену з коду SCIPUFF, яка використовувалася для газів нейтральної плавучості. Основою моделі є гауссова хмара для обчислення розподілу відносної масової концентрації як суми внесків комбінації хмар, причому можна користуватися різними метеорологічними даними. Оригінальну модель було модифіковано з метою врахування динамічних властивостей, що виникають завдяки активній плавучості, і зменшення турбулентної дифузії у вертикальному напрямку. Недоліком

моделі є те, що не враховуються термодинамічні процеси.

Останньою за складністю є категорія CFD-моделей [91], у яких розглядається тривимірний система нестационарних диференціальних рівнянь у частинних похідних. Рівняння є відображенням законів збереження маси, імпульсу й енергії суміші та маси газових домішок. Зазвичай ці математичні моделі опрацьовують усі можливі сценарії потрапляння домішки в повітря, складний характер рельєфу місцевості та умови навколишнього середовища, а для врахування ефектів тяжіння використовуються принципи збереження. Усі фізичні процеси описуються детально і в повному обсязі. Зазвичай уся категорія CFD-моделей поділяється на три базові підгрупи залежно від форми рівнянь, що розглядаються: моделі RANS, моделі LES (симуляція великих вихорів) і моделі DNS (пряма числова симуляція).

Більшість кодів CFD, здатних описувати газові домішки різної плавучості, реалізують моделі RANS [201–231], що розв'язують систему рівнянь Нав'є – Стокса для осереднених за Рейнольдсом параметрів потоку із застосуванням для замкнення системи моделі турбулентності (MT). Для розв'язання рівнянь використовують скінченно-різницеві методи, методи скінченних елементів або методи скінченних об'ємів. Значної уваги зазвичай потребує моделювання турбулентності. На початку розвитку моделей RANS воно базувалося на K -теорії замкнення, на сучасному етапі використовується $(k-\varepsilon)$ -модель, хоча існують й інші співвідношення: $(k-l)$ -замкнення, $(k-\omega)$ -модель, замкнення SST і SSG. Усі MT потребують задавання емпіричних коефіцієнтів. Це стосується й підгрупи LES-моделей для моделювання турбулентності на підсітковому рівні. Треба зауважити, що ступінь застосування емпіричних даних у моделях RANS є значно меншим, ніж в інтегральних моделях. У K -теорії, що є основою всіх MT, припускається наявність місцевої рівноваги й використовуються дифузійні коефіцієнти, які визначаються локальними властивостями газоповітряної суміші й навколишнього середовища й базуються на числі Ri [91]. В інших MT не допускається наявність місцевої рівноваги й дозволяються утворення, переміщення й зникнення турбулентності. М. Т. Маркевич в огляді MT [91] зазначає, що $(k-\varepsilon)$ -модель належить об'єднанню так званих MT в'язкості, і в ній вводяться дві нові змінні до системи рівнянь збереження: k – турбулентна кінетична енергія; ε – інтенсивність турбулентної дисипації, які безпосередньо обчислюються виходячи з транспортних диференціальних рівнянь для турбулентної кінетичної енергії й інтенсивності зникнення турбулентності. Причому припускається, що турбулентна в'язкість залежить від значень цих двох параметрів. Як і SST-модель, $(k-l)$ -модель є різновидом моделі турбулентної в'язкості, де остання залежить від турбулентної кінетичної енергії k і масштабу довжини турбулентності l . Як зазначено в роботі [91], турбулентна кінетична енергія обчислюється із рівняння збереження, однією з найважливіших складових якого є кінетична енергія дисипації.

Співвідношення замикання $k-\omega$ належить до моделей дисипації вихорів, у яких турбулентна в'язкість має зв'язок з турбулентними кінетичною енергією k і частотою ω , що обчислюються з рівнянь збереження турбулентних кінетичної енергії й частоти. Модель замикання SST розроблялася з метою виправлення недоліку моделей $k-\varepsilon$ і $k-\omega$, у яких не враховується турбулентне напруження зсуву, що призводить до завищеної прогнозованої вихорової в'язкості. Для досягнення цієї мети до $k-\omega$ МТ замикання додається запобіжник, який лімітує розвиток вихорової в'язкості. М. Т. Маркевич зазначає, що модель зсуву Рейнольдса базується на рівняннях руху для всіх компонентів тензора зсуву Рейнольдса й інтенсивності дисипації. Загальна гнучкість МТ супроводжується збільшенням кількості рівнянь руху і, як наслідок, ускладненням математичних моделей, зменшенням робастності й збільшенням обчислювальних витрат. Результати використання призначених для щільних газових домішок моделей MERCURE-GL [209] і ADREA-HF (розсіювання важких забруднювачів в атмосфері над нерегулярною поверхнею землі) [210, 211] показали достатньо задовільні результати щодо відтворення концентраційних розподілів за допомогою $(k-\varepsilon)$ - і $(k-l)$ -моделей для розсіювання важких хмар [215]. Як зазначається в огляді [91], результати обчислень авторів С. Склавунос і Ф. Ригас у роботі [223] з використанням моделей замикання SSG, $k-\varepsilon$, $k-\omega$ і SST на основі загальноцільового коду CFX [228, 229] показали хороший збіг з експериментальними даними, покращання робастності $(k-\omega)$ - і SST-моделей, тоді як SSG-модель мала збільшення часу використання центрального процесора комп'ютера без будь-якого покращання в точності результатів. Моделі SSG, $k-\varepsilon$ і SST результували завищеними максимальними концентраціями, а модель $k-\omega$, навпаки, занижувала їх. До перелічених раніше RANS-моделей треба додати ще кілька призначених спеціально для щільних газів математичних моделей, які інтегровано в такі коди: SIGMET [201], TRANSLOCK [204], HEAVYGAS [202, 203], FEM3 (модель скінченних елементів) [205–207], MARIAN [208], MDPG (модель розсіювання важкого газу) [212], моделей Й. Перейри і К. Чен [213], Й. Бьормана [214], моделей колективів авторів на чолі з І. Баяновим [219], Р. Охба [217], Ф. Скар'ялі [218]. На додачу до CFX до моделей RANS загального призначення можна віднести такі, як FLACS [219–225] і FLUENT [226, 227]. Виходячи з огляду, моделі RANS вважаються прийнятною альтернативою в намаганні досягти потрібної точності результатів розрахунку, але нераціонально витрачаючи наявні комп'ютерні ресурси. Їх можна розглядати в перспективі задовільним інструментом оцінювання наслідків техногенних аварій зі складним комплексом сценаріїв і складною топографією актуальної локальної місцевості. Однак більшість МТ не описують однаково адекватно різноманітні типи течії. Особливо це стосується течії з інтенсивними відривами потоку і/або великими градієнтами тиску й температури, що є характерним для процесів вибуху й детонації. До того ж, інженерне використання моделей RANS є

проблематичним через наявність таких недоліків, як високі вимоги до рівня експертної компетентності користувача, висока ціна закуплі програмного продукту та великі витрати на придбання потрібних комп'ютерних ресурсів.

У математичних моделях групи LES розв'язуються рівняння збереження для основного осередненого потоку й великих вихорів, застосовується моделювання турбулентності на малих масштабах [232, 233] із використанням, наприклад, моделі замикавання Смагорінські [234]. Як зазначається в огляді [91], моделі великих вихорів поки не стали інструментом у розв'язанні практичних задач, оскільки великою проблемою для них є великі комп'ютерні витрати, високі вимоги до підготовки вихідних даних і значна інтенсивність праці. Таким чином, моделі цієї групи – більш прийнятні як дослідні засоби покращання наукового розуміння фізичних процесів і забезпечення правильного напрямку для вдосконалення менш дорогих комп'ютерних моделей.

У моделях групи DNS розв'язуються точні рівняння Нав'є – Стокса з використанням дуже дрібних обчислювальних сіток і часових кроків без використання турбулентних замикальних співвідношень [235, 236], але ці моделі є надзвичайно вимогливими до комп'ютерних ресурсів і є придатними для обчислень практично простих течій з малими значеннями числа Re . Наприклад, у роботі [235] Х. Хатторі, Т. Хоура й Я. Нагано застосували пряме числове моделювання стабільних і нестабільних турбулентних теплових примежових шарів, а автори Я. Люо, З. Лю й Ю. Ліу [236] використали модель DNS для порівняння з результатами обчислень розсіювання на основі стохастичної моделі Лагранжа. Моделі групи DNS уведено до пакетів PHOENICS [236], STAR [237], FDS (симулятор динаміки пожежі) [238–240]. Комп'ютерні коди з DNS є надзвичайно вибагливими з технічної точки зору й до рівня експертної компетентності користувача. Тому їх використання обмежено виключно дослідним колом задач для специфічних випадків обчислень, які зазвичай супроводжуються одночасним експериментальним дослідженням фізичного процесу.

Що стосується математичного моделювання теплоперенесення в актуальних задачах, які розглядаються в цій роботі, то зазвичай дослідники нехтують теплопровідністю газового середовища [243], не розглядають нестационарний характер передавання теплового потоку до суцільних твердих тіл, які обтікаються газом, що унеможлиблює адекватне оцінювання просторового характеру термічного стану цих суцільних об'єктів та його змінення з часом під впливом навколишнього газового середовища. Це потребує від моделі здатності розв'язання спряжених задач тепло- і масоперенесення.

1.3. Аналітичний огляд обчислювальних методів газової динаміки

Наявні аналітичні методи розв'язання задач теплопровідності в суцільних тілах є ефективними тільки для однозв'язних тіл простої форми [303–305]. У цьому випадку розрахункові нестационарні залежності поля

температур мають вигляд експоненціальних рядів, збіжність яких залежить від місця розташування контрольної точки всередині тіла й часу з моменту початку процесу. Числові методи на базі сучасної обчислювальної техніки забезпечують можливість вирішити проблеми й виконати поставлене завдання вже без застосування комплексних ієрархічних методів, таких як поетапне моделювання [305]. У багатьох роботах пропонується спосіб моделювання, який базується на застосуванні скінченно-різницевого методу й методу скінченних елементів [306], однак зазвичай розрахунки проводяться без урахування багатовимірності процесу [307] або тільки для нескінченно великих інтенсивностей теплообміну твердих тіл з навколишнім середовищем [308].

Для обчислення адіабатичного ядра потоку повітря взятої математичної моделі треба застосувати якийсь із числових методів нестационарної газової динаміки [262], до яких зазвичай відносять скінченно-різницеві [320, 321], скінченно-об'ємні [322, 323] за варіантом розбиття обчислювального простору на дискретні розрахункові комірки, явні [320, 321, 324, 325] і неявні [324, 326, 327] з урахуванням дискретизації за часом.

На ефективність обчислювального методу, точність результатів розрахунку й легкість використання значно впливає вибір обчислювальної сітки, за яким алгоритми можна поділити на такі характерні групи [330, 333]:

- методи характеристик, що працюють на гладких областях [328, 329, 330];
- обчислювальні схеми, побудовані на використанні в системі ейлерових координат на основі сіток, які не рухаються в просторі [331];
- схеми, задіяні в ейлерово-лагранжевих координатах [330, 332];
- схеми обчислення з використанням рухомої ейлерової сітки [262];
- метод частинок в обчислювальних комірках [328, 330, 334], у якому використовується нерухома розрахункова сітка й зберігається інформація про шлях частинок.

З огляду різноманітних методів газової динаміки для розв'язання задачі руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери з урахуванням складного рельєфу місцевості й хімічною взаємодією газової домішки з киснем повітря найбільш придатним є явний за часом метод скінченних об'ємів, побудований на основі задачі розпаду довільного розриву параметрів газу на поверхнях контакту газових сумішей у сусідніх розрахункових комірках [262]. Під час розрахунку стану потоку одного режиму зазвичай використовується метод установлення [28, 67], за яким часовий крок обчислюється індивідуально для кожної розрахункової комірки на кожній ітерації згідно з умовою Фрідрікса – Куранта – Леві стійкості алгоритму до розбалансування. Але в задачі, що розглядається, важливо рухатися в усіх комірках одночасно (тобто з

єдиним часовим кроком) для нестационарного відстежування поточної картини надлишкових параметрів збурення й накопичення факторів негативного впливу на навколишнє середовище з метою застосування пробіт-аналізу для отримання в кожен мить полів умовної ймовірності наслідків впливу збурення повітря на людину й конструкції в зоні збурення. Як зазначалося раніше, для контролю за поведінкою домішок розрахункова схема для газоповітряної суміші має бути доповнена скінченно-об'ємним рівнянням для кожного з диференціальних рівнянь руху газових домішок.

1.4. Постановка завдання дослідження

Для розв'язання технічної проблеми отримання просторово-часових розподілів газотермодинамічних параметрів газової суміші в зоні хімічно-складового, баричного й термічного збурення сталого потоку повітря в приземному шарі атмосфери внаслідок неконтрольованого або керованого викиду займистих (вибухонебезпечних) і токсичних газових домішок будемо розглядати простір техногенного об'єкта, де зберігаються, транспортуються або використовуються в технологічному процесі ці газові домішки. Сталий потік незбуреного повітря переходить до стану хімічно-складового збурення внаслідок потрапляння газової домішки до атмосфери з утворенням газоповітряної суміші, яка рухається разом з основним потоком за напрямком вітру, обтікаючи на своєму шляху суцільні об'єкти інфраструктури й поверхню ландшафту. З часом збурення хімічного складу повітря в просторі техногенного об'єкта поступово зменшується, повертаючись до початкового незбуреного стану. У разі наявності токсичної домішки надлишковим параметром під час збурення є відносна масова концентрація газової домішки. Якщо в зоні збурення (у якійсь точці простору, що розглядається) перебуває людина, то вона потрапляє під вплив інгаляційної токсичної дози, інтегральної часової характеристики, що є необхідним значенням для отримання експертної оцінки негативного впливу під час застосування детермінованого підходу і вихідним аргументом для отримання умовної ймовірності ураження людини внаслідок токсичного отруєння із застосуванням пробіт-аналізу. У випадку наявності вибухонебезпечної газової домішки утворена під час хімічно-складового збурення газоповітряна суміш може вибухнути, якщо відносна масова концентрація газової домішки потрапляє у межі займання. У разі вибуху (швидкоплинного горіння) формуються нові складові збурення: баричне й термічне. Унаслідок вибуху утворюється вибухова ударна хвиля, яка рухається в усіх напрямках від епіцентру вибуху, стикаючись з перешкодами у вигляді об'єктів інфраструктури й людьми і поступово втрачаючи свою інтенсивність. Кожна точка руху вибухової ударної хвилі характеризується надлишковим тиском і часом цього впливу (тобто імпульсом). Негативними факторами впливу в цьому випадку є

максимальний надлишковий тиск і максимальний імпульс первинної фази стиснення у фронті вибухової ударної хвилі. Як і під час токсичного ураження, негативні фактори можуть використовуватися для детермінованого оцінювання ступеня наслідків або бути вихідними даними для пробіт-аналізу з подальшим прогнозуванням просторово-часового розподілу умовної ймовірності наслідків різного ступеня ураження людини й інфраструктури ударно-імпульсним навантаженням. Якщо збурення супроводжується екзотермічною хімічною реакцією, то полум'я й продукти горіння є джерелом формування ще одного небезпечного параметра потоку – високої температури і, отже, фактора впливу – густини потоку теплового випромінювання, яке діє на навколишнє середовище. Аналогічно цей параметр може бути використаний під час аналізу й прогнозування можливих наслідків негативного впливу.

Для застосування такого підходу простір у зоні збурення дискретизується за трьома напрямками декартової системи координат скінченною кількістю з утворенням комірок скінченно-об'ємної обчислювальної сітки, одна частина яких є газовими, а інша – суцільними (твердими), бо вони потрапили до об'ємів об'єктів інфраструктури (будівлі, споруди, складний рель'єф). До всіх газових комірок буде застосовано закони збереження маси, імпульсу й енергії газоповітряної суміші та закони збереження газових домішок у вигляді скінченно-об'ємних аналогів. Для розрахунку параметрів суміші й домішок у часі застосуємо явний метод Годунова. З метою нестационарного аналізу параметрів потоку на попередньому часовому «шарі» розрахунку будемо знаходити мінімальний у просторі часовий крок для наступного часового «шару». Для забезпечення гарантованої стійкості розв'язання на часовий крок будемо накладати обмеження у вигляді коефіцієнта «запасу».

Розрахункова схема Годунова потребує задавання початкового розподілу параметрів незбуреного потоку й граничних умов на поверхнях розрахункового простору, землі, суцільних об'єктів інфраструктури. Спеціальних граничних умов потребують поверхні вентиляційного отвору й випаровування з плями пролиття зрідженого газу. Кожна розрахункова комірка в разі явної схеми має зберігати всі геометричні характеристики сітки (координати центра, вершин, площі проєкцій усіх граней, об'єм), свій стан (густину, складові вектора швидкості, тиск і температуру суміші, масову концентрацію домішок) на попередньому часовому шарі, щоб обчислити параметри стану на новому часовому «шарі». Крім того, кожна розрахункова комірка має накопичувати й визначати максимальні інтегральні характеристики впливу (надлишковий тиск та імпульс фази стиснення у фронті вибухової ударної хвилі й густину потоку теплового випромінювання), які в будь-який момент часу можуть бути застосовані для пробіт-аналізу з метою розрахунку пробіт-функції певного ступеня впливу і, отже, умовної ймовірності ураження. Остання інформація є базою для оцінювання ризиків техногенного об'єкта.

1.5. Основні положення системної методології оцінювання стану повітря техногенного об'єкта в умовах збурення

Наведено основні положення вдосконаленої системної методології оцінювання змінних стану збуреного повітря техногенного об'єкта, яка на основі отриманих за результатами моделювання нестационарних просторових розподілів таких факторів впливу, як інгаляційна токсична доза отруйної хімічної речовини, ударно-імпульсне навантаження у фронті вибухової ударної хвилі та густина потоку теплового випромінювання, забезпечує можливість оцінити наслідки впливу й прийняти рішення щодо ефективності засобів захисту навколишнього середовища. Структуру методології зображено на рис. 1.3.

Вирішення виявленої наукової проблеми потребує розв'язання багатьох трудомістких взаємозв'язаних задач у таких наукових областях, як якісний і кількісний аналіз, семантичний аналіз інформації про складну систему, прийняття рішень, інформаційне забезпечення досліджень складної системи.

Тому під час розв'язання основної наукової проблеми було взято за основу *концепцію структурованості*, згідно з якою процеси аналізу параметрів стану повітря техногенного об'єкта, збуреного викидами газоподібних хімічних речовин, і прогнозування наслідків впливу збурень на навколишнє середовище з метою пошуку раціональної конструкції засобів захисту подаються у вигляді множини паралельних або послідовних операцій, виконання яких пов'язано з матеріальними й часовими витратами.

Для вдосконалення захисних споруд з метою гарантування безпечного й безперервного функціонування техногенного об'єкта визнано необхідними розроблення й використання в інженерній практиці узгоджених ефективних методів розв'язання задач сформульованої міждисциплінарної проблеми. З метою її вирішення в цілому було використано системний підхід. Згідно з узятою концепцією й вибраним підходом сформульовано кілька загальних *наукових принципів* у вигляді тверджень, узгоджене використання яких сприятиме підвищенню ефективності процесу аналізу й прогнозування стану повітря техногенного об'єкта в цілому:

1. В області якісного аналізу – *принцип цілеспрямованих модельних досліджень*. Ефективне розв'язання задач якісного аналізу досягається шляхом планування цілеспрямованих числових експериментів на моделях, для яких з використанням спеціально підібраного різновиду систем вимірювання отримано розподіли параметрів хімічно-складових, баричних і термічних збурень повітря.

2. В області кількісного аналізу – *принципи: узгодженості методів,*

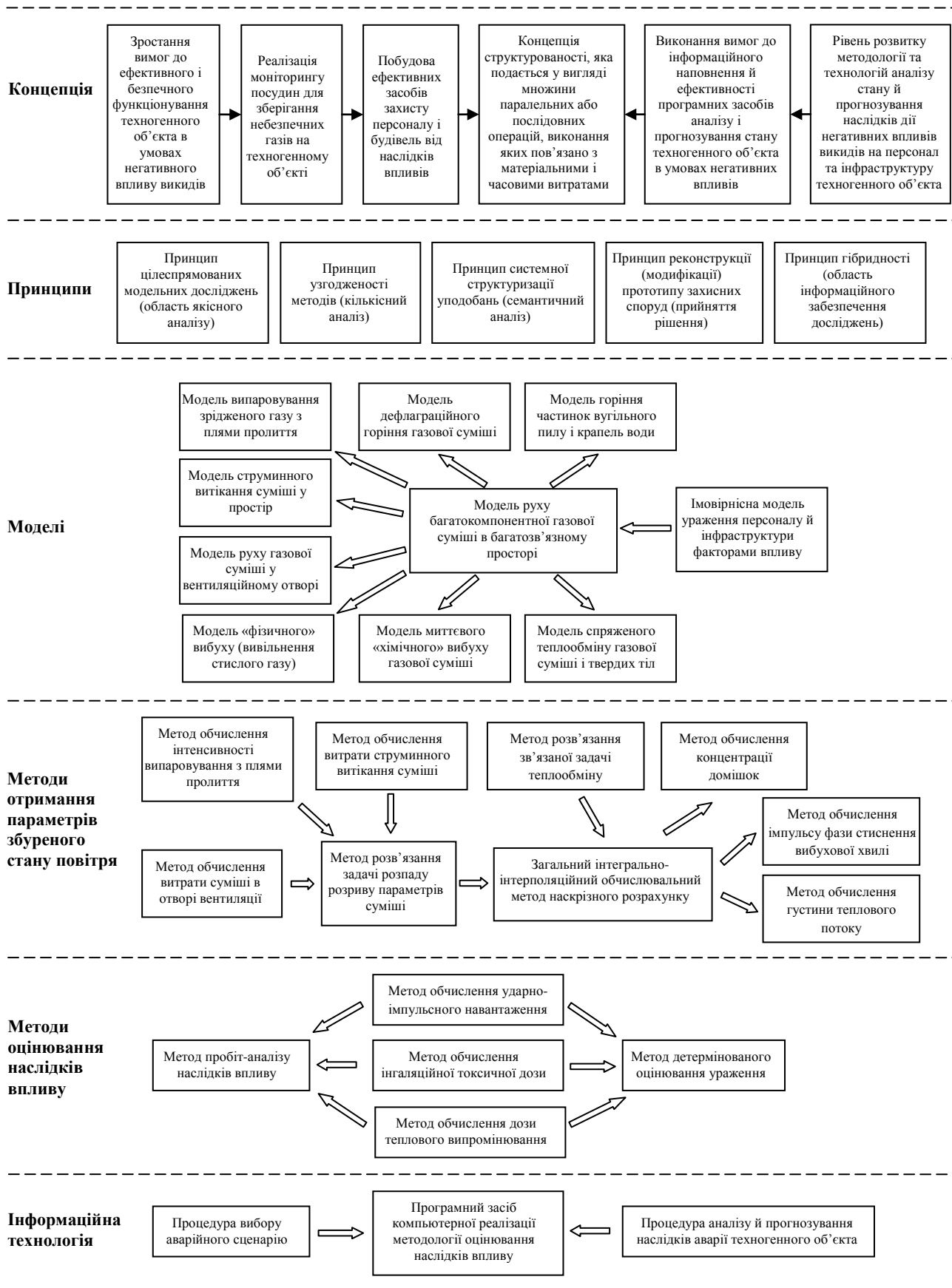


Рис. 1.3. Системна методологія оцінювання змінних стану повітря техногенного об'єкта в умовах впливів збурень

оптимального керування процесом обчислень відносно похибки. Ефективного розв'язання задач кількісного аналізу можна досягти (в умовах відомої точності експерименту), якщо вибрати моделі мінімальної складності, здійснювати декомпозицію загальних задач на підзадачі на основі системної структуризації фізичних процесів, використовувати послідовні (адаптивні) обчислювальні алгоритми з відкладеною корекцією розв'язків поставлених підзадач.

3. В області семантичного аналізу інформації про стан повітря техногенного об'єкта – *принцип системної структуризації уподобань*, суть якого полягає в тому, що ефективного розв'язання семантичного аналізу можна досягти шляхом вибору системи вподобань спеціаліста-експерта, структуруючи її у вигляді набору правил формування керувальних змінних під час синтезу альтернатив на основі системних технічних вимог та обмежень.

4. В області раціоналізації й прийняття рішення – *принцип реконструкції (модифікації) прототипу* захисних споруд, суть якого полягає в тому, що ефективного розв'язання задачі пошуку раціональної конструкції засобу захисту від впливу фактора збурень і прийняття рішення можна досягти таким чином: маючи якийсь варіант конструкції захисної споруди (прототип), треба, мінімально відхиляючись від заданих геометричних параметрів споруди чи її локації, виявляти такий вплив на збурений потік повітря техногенного об'єкта, який відповідає заданому рівню умовної ймовірності наслідків впливу в контрольній точці.

5. В області інформаційного забезпечення досліджень складної системи – *принцип гібридності*, суть якого полягає в тому, що ефективні програмні засоби комп'ютерної реалізації можна створити, якщо під час синтезу їх структури виходити з пріоритету моделей і підпорядкування цьому всіх форм подання знань, інформації та засобів їх оброблення.

Згідно з вибраною концепцією структурованості, яка базується на сформульованих принципах, розроблено системну модель аналізу стану повітря техногенного об'єкта, збуреного викидами газових домішок, і прогнозування наслідків їх впливу на навколишнє середовище. Постановкою різних початково-крайових умов до загальної моделі руху багатокомпонентної суміші багатозв'язним простором створено новий клас моделей для аналізу хімічно-складового, баричного й термічного збурення повітря й прогнозування наслідків впливу збурення на персонал та інфраструктуру техногенного об'єкта.

За результатами узгодження методів отримання надлишкових параметрів збуреного стану повітря об'єкта й методів оцінювання наслідків впливів на навколишнє середовище та будування програмного засобу комп'ютерної реалізації методології отримано інформаційну технологію, що дає змогу здійснити пошук раціональних конструкцій захисних споруд для уникнення або пом'якшення наслідків впливів.

Висновки до розділу 1

1. За результатами аналізу комплексу фізичних процесів, що виникають у приземному шарі атмосфери внаслідок тимчасового локального збурення хімічного складу повітря через аварійний або контрольований викид у загальному випадку токсичних і вибухонебезпечних газових домішок, узяті як припущення, що на весь процес руху багатокомпонентної суміші газів в основному впливають конвективний обмін масою, імпульсом та енергією, турбулентна дифузія, хімічна кінетика горіння домішок у кисні повітря, термодинаміка внаслідок теплообміну між газовою сумішшю й суцільними об'єктами, що обтікаються, і перехідні процеси теплопровідності в матеріалі цих об'єктів. Ці фізичні процеси формують баричний, токсичний і термічний впливи на об'єкти (людину й споруди) у зоні збурення внаслідок поширення ударної вибухової хвилі, накопичення інгаляційної токсичної дози й дози теплового випромінювання продуктів горіння.

2. За результатами структурного аналізу й декомпозиції повної математичної моделі термогазодинамічного процесу прийнято, що для адекватного опису руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери:

– достатньо використовувати диференціальні рівняння в наближенні Ейлера (скорочені диференціальні рівняння Нав'є – Стокса, отримані шляхом ігнорування членів, які відповідають за в'язкість);

– урахування структурованих процесів хімічної взаємодії домішки з киснем повітря здійснити додаванням до рівнянь руху суміші (які відображають закони збереження маси, імпульсу й енергії) джерельних членів;

– процеси струминного викиду домішки в повітря, випаровування з поверхні плями пролиття рідкої фази, витікання суміші (втікання повітря) у вентиляційний отвір у приміщенні виконати шляхом моделювання граничних умов протікання;

– розсіювання домішки в просторі завдяки турбулентній дифузії здійснити додаванням джерельних членів до рівнянь перенесення компонент суміші (токсична або вибухонебезпечна домішка й продукти горіння) з урахуванням швидкості дифузії;

– вплив наявності в газоповітряній суміші аерозольних домішок горючого пилу й крапель водяної завіси, що пригнічують горіння, здійснити додаванням джерельних членів до рівнянь перенесення енергії суміші;

– для замикання системи рівнянь використати рівняння стану суміші для ідеального газу.

3. Оцінювання наслідків впливу на навколишнє середовище збуреного повітряного потоку в приземному шарі атмосфери здійснити:

– детермінованим шляхом – обчисленням факторів баричного

впливу вибухової хвилі (надлишкового тиску та імпульсу фази стиснення у фронті хвилі), впливу інгаляційної токсичної дози й термічного ураження тепловим випромінюванням високотемпературних продуктів горіння (густини потоку теплового випромінювання) і порівнянням отриманих значень з пороговими для різного ступеня впливу на людину (споруду);

– імовірнісним шляхом – обчисленням умовної ймовірності ураження людини (руйнування споруди) на основі пробіт-аналізу з метою отримання нестационарного просторового розподілу ймовірності ураження різного ступеня.

4. Сформульовано основні положення вдосконаленої системної методології оцінювання змінних стану збуреного повітря техногенного об'єкта, яка на основі моделювання нестационарних просторових розподілів основних факторів впливу забезпечує можливість прогнозувати наслідки впливу й приймати рішення щодо ефективності засобів захисту навколишнього середовища. Сформульовано концепцію й вибрано підхід, на основі яких розв'язується наукова проблема дослідження, і наукові принципи, узгоджене використання яких сприятиме підвищенню ефективності процесів аналізу й прогнозування стану повітря техногенного об'єкта в цілому.

Розділ 2. РОЗРОБЛЕННЯ СИСТЕМНОЇ МЕТОДОЛОГІЇ ІНЖЕНЕРНОГО АНАЛІЗУ ПРОЦЕСІВ ПРОМИСЛОВИХ ГАЗОПОДІБНИХ ВИКИДІВ

На основі запропонованої системної методології інженерного аналізу фізичних процесів викиду й поширення в повітрі приземного шару атмосфери шкідливих газоподібних домішок, які мають місце під час аварійної фази функціонування техногенних об'єктів підвищеної небезпеки, розроблено тривимірну нестационарну математичну модель руху багатокомпонентної газової суміші в багатозв'язному просторі з урахуванням хімічної взаємодії, розпилення крапель рідини (або частинок твердих фракцій). Тривимірною математичною моделлю описується системою диференціальних рівнянь руху газової суміші в актуальному просторі, які відповідають фундаментальним законам збереження маси, імпульсу й енергії для газоповітряної суміші. Система замикається рівнянням ідеального стану й доповнюється законами збереження маси газових домішок. Розроблено тривимірні математичні моделі: миттєвого «фізичного» вибуху газоповітряної суміші без урахування хімічної взаємодії для моделювання процесів вивільнення в приземний шар атмосфери хімічно пасивних газових домішок, що виникають внаслідок швидкоплинного руйнування посудини для зберігання газу під високим тиском; миттєвого «хімічного» вибуху газоповітряної суміші з урахуванням хімічної реакції газової домішки з киснем повітря з утворенням високотемпературних продуктів горіння й високим тиском і генерацією вибухової ударної хвилі; дефрагаційного горіння газової домішки в повітрі

приземного шару атмосфери на основі моделі «брутто» хімічної реакції із певною швидкістю горіння; випаровування з поверхні плями аварійного пролиття зрідженого газу довільної форми; витяжної (напорної) механічної вентиляції з поверхні вентиляційного отвору; струминного витікання в актуальний простір з поверхні отвору газоповітряної суміші заданої концентрації домішки; нестационарного спряженого теплообміну між газовим середовищем і суцільним твердим тілом. Розроблено метод дискретизації актуального простору на скінченно-об'ємні обчислювальні комірки. Здійснено постановку граничних і початкових умов.

Розглянуто методи числового оцінювання впливу на людину й споруди в зоні параметричного (баричного, хімічно-складового, термічного) збурення повітряного потоку. Виокремлено негативні фактори впливу залежно від параметра збурення. Розглянуто алгоритм детермінованого підходу до оцінювання наслідків негативного впливу та ймовірнісного підходу, який базується на пробіт-аналізі. Розроблено обчислювальну технологію автоматизованого нестационарного пробіт-аналізу з використанням кусково-кубічного сплайну.

2.1. Тривимірна нестационарна математична модель руху суміші в багатозв'язному просторі з урахуванням хімічної взаємодії, розпилення крапель рідини (частинок пилу твердих фракцій)

2.1.1. Тривимірна математична модель руху багатокomпонентної суміші

Повна система диференціальних рівнянь, що описує нестационарний тривимірний потік багатокomпонентної газової суміші, у запропонованій постановці має такий вигляд [3, 22, 23]:

$$\partial \vec{a} / \partial t + \partial \vec{b} / \partial x + \partial \vec{c} / \partial y + \partial \vec{d} / \partial z = \rho \vec{f}, \quad (2.1)$$

де \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , \vec{d} , \vec{f} – вектор-стовпці такого вигляду [67]:

$$\vec{a} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, E]^T, \quad (2.2)$$

$$\vec{b} = [\rho u, P + \rho u^2, \rho uv, \rho uw, (E + P)u]^T, \quad (2.3)$$

$$\vec{c} = [\rho v, \rho vu, P + \rho v^2, \rho vw, (E + P)v]^T, \quad (2.4)$$

$$\vec{d} = [\rho w, \rho wu, \rho wv, P + \rho w^2, (E + P)w]^T, \quad (2.5)$$

$$\vec{f} = [0, 0, -g, 0, -gv + e_s / \rho]^T. \quad (2.6)$$

Тут t – час;

u, v, w – складові вектора швидкості суміші \vec{q} ;
 P, ρ – тиск і густина газоповітряної суміші;
 E – повна енергія одиниці об'єму газоповітряної суміші,

$$E = \rho(e + (u^2 + v^2 + w^2)/2), \quad (2.7)$$

де e – внутрішня енергія одиниці маси газоповітряної суміші;

\vec{f} – вектор розподілених об'ємних джерел;

g – прискорення вільного падіння;

e_s – інтенсивність тепловиділення в одиниці об'єму газу внаслідок хімічної реакції.

Закон перенесення компоненти газоповітряної суміші з урахуванням швидкості турбулентної дифузії має такий вигляд [33]:

$$\frac{\partial(\rho Q_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Q_i)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v Q_i)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w Q_i)}{\partial z} = \rho_{Q_{it}} + \rho_{Q_{is}}, \quad (2.8)$$

де Q_i – відносна масова густина домішки (відношення густини газоподібної речовини домішки до густини суміші); $\rho_{Q_{it}}$ – інтенсивність змінення густини газових домішок унаслідок турбулентної дифузії відповідно до закону Фіка $\rho_{Q_{it}} = \text{div}(\rho \mathcal{G}_D \text{grad} Q_i)$; $\rho_{Q_{is}}$ – інтенсивність змінення густини компоненти суміші внаслідок хімічної реакції; \mathcal{G}_D – коефіцієнт турбулентної дифузії, який визначався за методикою Берлянда [241].

Коефіцієнт турбулентної дифузії можна знайти за допомогою числа Шмідта

$$Sc_t = \mu_t / (\rho \mathcal{G}_D), \quad (2.9)$$

де μ_t – коефіцієнт динамічної в'язкості для турбулентного режиму течії.

Відомо, що коефіцієнт кінематичної в'язкості $\mathcal{G}_t = \mu_t / \rho$, звідки випливає, що

$$\mathcal{G}_D = \mathcal{G}_t / Sc_t. \quad (2.10)$$

Надалі будемо враховувати анізотропію турбулентної дифузії. Будемо вважати, що коефіцієнт турбулентної дифузії у різних напрямках є пропорційним модулю повної швидкості потоку

$$\mathcal{G}_{ii} = k_i |q|, \quad (2.11)$$

де $k_i = (k_z, k_x, k_y)$ – коефіцієнти пропорційності; $|q| = \sqrt{u^2 + w^2 + v^2}$ – модуль повної швидкості потоку.

Будемо вважати, що з урахуванням формули Берлянда [241]

$$k_y = \begin{cases} k_{01}, & y \leq y_1; \\ k_{01} (y/y_1)^{(1-1/p)}, & y > y_1 \end{cases} I(y^0), \quad (2.12)$$

де $k_{01} = \chi^2 y_1 / \ln(y_1/y_0)$, $\chi = 0,38$ – константа Кармана; y_1 – висота точки вимірювання; y_0 – шорсткість поверхні; $I(y^0)$ – поправка Моніна – Обухова; $y^0 = y_1/L'$ – масштаб Моніна – Обухова.

З урахуванням того, що масштаб Моніна – Обухова визначається як

$$y^0 = \frac{k-1}{k} \frac{q\lambda}{\chi^2} \frac{\partial T/\partial y}{P} \left(\frac{\ln(y_1/y_0)}{u_1} \right)^3 y_1, \quad (2.13)$$

поправку Моніна – Обухова можна обчислити таким чином:

$$I(y^0) = \begin{cases} 1 + 0,54 |y^0|^{0,8}, & y^0 < 0; \\ (1 + 0,9y^0)^{-1}, & 0 < y^0 < 1; \\ 0,53 (y^0)^{-1}, & y^0 \geq 1. \end{cases} \quad (2.14)$$

Величина p задавалася залежно від типу стабільності атмосфери (інверсія, конвекція, ізотермія):

$$p = \begin{cases} \infty, & \partial T/\partial y > 0; \\ 2,5, & \partial T/\partial y < 0; \\ 10, & \partial T/\partial y = 0. \end{cases} \quad (2.15)$$

Для врахування архімедівських сил (стратифікації) скористаємося поправками, що містять число Річардсона Ri :

$$Sc_t = \frac{Sc_{t_0} S(Ri)}{L^2(Ri)}, \quad (2.16)$$

де число Річардсона Ri визначається таким чином:

$$Ri = -\frac{g}{\rho} \frac{\partial \rho / \partial y}{(\partial q / \partial y)^2} = -\frac{g R_x}{a_{кр}^2} \frac{\partial \bar{\rho} / \partial \bar{y}}{\bar{\rho} (\partial \bar{q} / \partial \bar{y})^2}. \quad (2.17)$$

У цьому випадку коефіцієнт турбулентної дифузії [242]

$$g_D = g_t / Sc_t = (g_{t_0} L^2(Ri)) / (Sc_{t_0} S(Ri)), \quad (2.18)$$

де g_{t_0} – коефіцієнт турбулентної в'язкості без урахування стратифікації в приземному шарі атмосфери; $Sc_{t_0} = 0,9$ – число Шмідта; функція

$$S(Ri) = \frac{(1 + 3,33 Ri)^{1,5}}{(1 + 10 Ri)^{0,5}}; \text{ функція } L(Ri) = \begin{cases} 1 - \beta_1 Ri, & Ri \geq 0, \beta_1 \approx 7; \\ (1 - \beta_1 Ri)^{-1/4}, & Ri < 0, \beta_1 \approx 14. \end{cases}$$

Система рівнянь (2.1)–(2.8) є незамкненою. Доповнимо її рівняннями, які визначають теплофізичні властивості компонент газоповітряної суміші. Для ідеального політропного газу значення e зв'язане з тиском P і густиною ρ суміші такою залежністю:

$$e = P / ((k - 1) \rho). \quad (2.19)$$

2.2. Тривимірна математична модель миттєвого вивільнення стисненої газоповітряної суміші («фізичний» вибух)

Модель «фізичного» вибуху є напростішою серед розроблених математичних моделей, які забезпечують можливість імітувати фізичний процес формування баричного й термічного збурення параметрів приземного шару атмосфери внаслідок вибуху газоповітряної суміші [6, 7]. Процеси викиду займистої газової домішки й формування суміші не розглядаються. Припускається, що процес горіння є миттєвим і вибух проходить з початку розрахунку. Тобто подробиці складних фізико-хімічних перетворень не розглядаються, а в момент вибуху в об'ємі, де відбулося горіння, газове середовище набуває параметрів продуктів горіння (рис. 2.1). Таким чином, згідно з цією моделлю, починаючи з початкового моменту (часу вибуху) із локалізованого об'єму розрахункового простору починається розширення стисненого високотемпературного газу з параметрами горіння займистого газу в повітрі. У цей час формується суміш продуктів горіння з повітрям і відбувається подальший рух двокомпонентної неактивної суміші в розрахунковому просторі.

Аналогічну математичну модель «фізичного» вибуху можна застосувати для моделювання руху ударної хвилі, яка генерується, наприклад, під час швидкоплинного руйнування посудини для зберігання стиснених вибухонебезпечних або токсичних хімічних речовин у

газоподібному стані. Їх вивільнення також формує ударну, хоча й невибухову, хвилю тиску, яка поширюється від епіцентру руйнування й створює баричне збурення сталого стану атмосфери у вигляді ударно-імпульсного навантаження на навколишнє середовище.

Рух двокомпонентної газоповітряної суміші вивільненого газу й повітря атмосфери описується системою рівнянь (2.1)–(2.19).

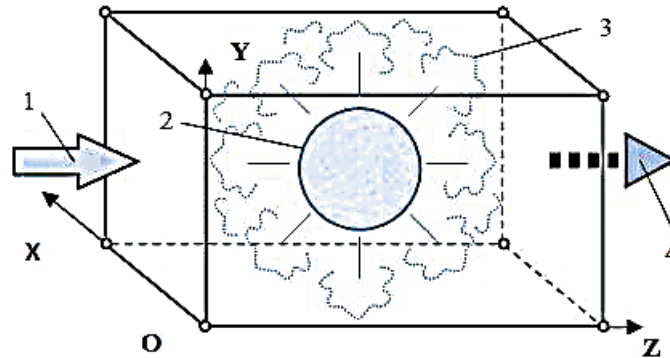


Рис. 2.1. Розрахункова схема моделі «фізичного» вибуху: 1 – набіжне повітря; 2 – газова хмара продуктів горіння; 3 – турбулентне змішування продуктів горіння з повітрям; 4 – газоповітряна суміш

2.2.1. Тривимірна математична модель миттєвого вибуху газоповітряної суміші («хімічний» вибух)

Фізичний процес розсіювання в повітрі вибухонебезпечної газової домішки в якийсь момент часу може призвести до такого стану суміші, коли активна газова домішка почне реагувати з киснем повітря з вивільненням великого обсягу тепла й утворенням значного надлишкового тиску, що є характерним для вибуху.

Процес горіння проходить за дуже короткий проміжок часу, тому під час моделювання часто припускають, що процес вибуху є миттєвим і подробицями складних фізико-хімічних перетворень можна знехтувати. Також припускається, що горіння має місце при постійному об'ємі. Таке припущення суттєво спрощує модель і зменшує час розрахунку. Таким чином, згідно з цією моделлю в заданий момент вибуху в локалізованому об'ємі розрахункового простору газодинамічні параметри двокомпонентної суміші (повітря й паливо) миттєво змінюються на газодинамічні параметри трикомпонентної суміші (повітря, продукти горіння й залишок пального), і ця трикомпонентна суміш продовжує рух в актуальному розрахунковому просторі (рис. 2.2).

У момент вибуху в тому об'ємі розрахункової області, у якому розташовується вибухонебезпечна суміш з концентрацією домішки в діапазоні між мінімальною й максимальною концентраційними межами займистості $Q_{\min} \leq Q \leq Q_{\max}$, значення газодинамічних параметрів двокомпонентної суміші (повітря й паливо) миттєво змінювалися на

значення газодинамічних параметрів трикомпонентної суміші (повітря, продукти горіння й залишок пального).

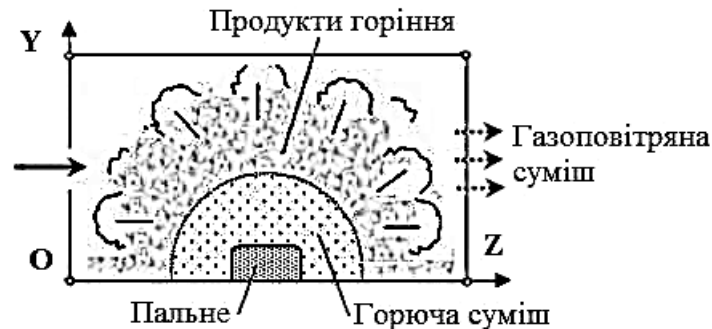


Рис. 2.2. Розрахункова схема миттєвого вибуху газової хмари:
1 – повітря; 2 – стиснений газ; 3 – горюча суміш; 4 – продукти горіння

Маса пального, що бере участь у горінні, визначається як сума мас домішки для елементарних об'ємів з концентрацією в межах займистості:

$$m' = \sum(\rho Q \Delta V). \quad (2.20)$$

Маса пального, що не бере участі в горінні, визначається для елементарних об'ємів з концентрацією домішки $Q < Q_{\min}$ і $Q > Q_{\max}$:

$$m''_0 = \sum(\rho Q \Delta V). \quad (2.21)$$

Загальна маса суміші в об'ємі, де відбудеться горіння, визначається для елементарних об'ємів з концентрацією домішки $Q_{\min} \leq Q \leq Q_{\max}$:

$$m = \sum(\rho \Delta V). \quad (2.22)$$

З іншого боку, загальна маса суміші m містить маси окиснювача m' , пального m'' , яке бере участь у горінні, і пального m''_0 , яке не бере участі в хімічній реакції:

$$m = m' + m'' + m''_0. \quad (2.23)$$

Зі співвідношення (2.23) маса окиснювача в суміші визначається так:

$$m' = m - m'' - m''_0. \quad (2.24)$$

Масові концентрації компонент суміші, усереднені за обсягом розрахункової області, де відбудеться горіння, визначаються формулами

$$Q'' = m''/m, \quad (2.25)$$

$$Q_0'' = m_0''/m, \quad (2.26)$$

$$Q' = m'/m = 1 - Q'' - Q_0''. \quad (2.27)$$

Коефіцієнт надлишку повітря в суміші

$$\alpha = m'/(g_0 m'') = (1 - Q'' - Q_0'')/(g_0 Q''), \quad (2.28)$$

де $g_0 = m'_{th}/m''$ – стехіометричне число;

m'_{th} – маса повітря, теоретично необхідна для повного згорання 1 кг палива.

Задаємо нижню теплоту згорання горючої домішки H_u з таблиць теплофізичних властивостей речовин [314]. Молярна маса $\mu_{пр}$ і коефіцієнти адіабати $k_{пр}$ продуктів горіння визначаються на основі гіпотези оборотності хімічних реакцій, що реалізуються.

У разі надлишку повітря ($\alpha > 1$) теплофізичні властивості газової суміші (μ – молярна маса, C_p – теплоємність при постійному тиску, C_v – теплоємність при постійному об'ємі) після вибуху визначаються такими формулами:

$$\mu = 1 / \left(\left((1 - (g_0 + 1)Q'' - Q_0'') / \mu' + (g_0 + 1)Q'' / \mu_{пр} + Q_0'' / \mu'' \right) \right); \quad (2.29)$$

$$C_p = \left[1 - (g_0 + 1)Q'' - Q_0'' \right] C_p' + (g_0 + 1)Q'' C_p^{пр} + Q_0'' C_p''; \quad (2.30)$$

$$C_v = \left[1 - (g_0 + 1)Q'' - Q_0'' \right] C_v' + (g_0 + 1)Q'' C_v^{пр} + Q_0'' C_v'', \quad (2.31)$$

де C_p' , $C_p^{пр}$, C_p'' – теплоємність при постійному тиску окиснювача, продуктів горіння й пального в суміші відповідно;

C_v' , $C_v^{пр}$, C_v'' – теплоємність при постійному об'ємі окиснювача, продуктів горіння й пального в суміші відповідно.

Якщо повітря бракує для горіння ($\alpha < 1$), то теплофізичні властивості газоповітряної суміші після вибуху визначаються так:

$$\mu = g_0 / \left(\left((1 + g_0)Q' \right) / \mu_{пр} + (g_0 - (1 + g_0)Q') / \mu'' \right); \quad (2.32)$$

$$C_p = (1 - Q_{пр}) C_p'' + Q_{пр} C_p^{пр}; \quad (2.33)$$

$$C_v = (1 - Q_{пр}) C_v'' + Q_{пр} C_v^{пр}. \quad (2.34)$$

В обох випадках після вибуху газодинамічні параметри суміші мають такий вигляд:

$$P = \frac{H_u m''_{th} (k-1)}{V} + P_a = \frac{H_u (1 - Q'' - Q''_0) m'' (k-1)}{g_0 Q'' V} + P_a; \quad (2.35)$$

$$T = PV\mu / (mR_{yH}); \quad (2.36)$$

$$\rho = m/V; \quad (2.37)$$

$$k = C_p / C_v, \quad (2.38)$$

де P, T, ρ, k – тиск, температура, густина, коефіцієнт адіабати суміші відповідно; R_{yH} – універсальна газова стала; P_a – атмосферний тиск.

Таким чином, розроблена математична модель вибуху газоповітряної суміші є джерелом отримання просторово-часових розподілів надлишкового тиску й імпульсу у фронті вибухової хвилі [1] і в подальшому може бути використана для детермінованого аналізу полів фізичних параметрів збуреного вибухом потоку в зоні можливого аварійного вибуху, а також для ймовірнісного аналізу фізичного вибуху з метою оцінювання й прогнозування можливих наслідків впливу вибуху на людину і споруди.

2.2.2. Моделювання процесу дефлаграційного горіння газоподібної домішки в атмосфері

Іноді важливо мати детальну інформацію в часі про розвиток процесів займання в суміші повітря з вибухонебезпечним газом, поширення фронту полум'я в просторі газоповітряної хмари, динаміку перебігу хімічної реакції горіння, розподілу нестационарних полів газових домішок, чистого повітря й продуктів горіння. Розвиток розробленої математичної моделі руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери з урахуванням зазначених вище процесів забезпечить можливість отримати більш точну інформацію про вибухову ударну хвилю у фазі стиснення для обчислення полів максимального надлишкового тиску й імпульсу в актуальному просторі з метою побудови розподілу умовної ймовірності ураження людини й руйнування навколишніх будівель у зоні техногенної аварії.

2.2.2.1. Загальна постановка задачі горіння суміші газів

Розглядаються процеси дефлаграційного горіння займистої газової домішки в повітрі приземного шару атмосфери й подальшого розсіювання продуктів горіння й залишків горючого у відкритому просторі або в закритому приміщенні з природною або механічною вентиляцією (рис. 2.3).

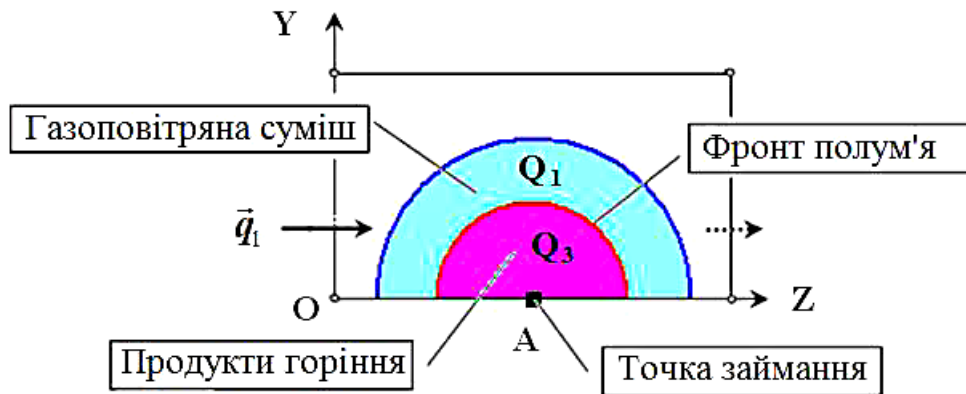


Рис. 2.3. Розрахункова схема руху хімічно активної суміші газів

Відомими є параметри навколишнього середовища (температура, тиск, вектор швидкості набіжного потоку \vec{q}_1), хімічний склад газоповітряної суміші (відносна масова концентрація домішки Q_1), граничні й початкові умови формування суміші. Розрахунковою областю Ω є паралелепіпед, розташований у правій декартовій системі координат (X, Y, Z) із основою в земній площині XOZ . Розрахунковий простір розбивається на просторові комірки, причому розміри граней підбираються відповідно до характерного розміру особливостей розрахункового простору (шорсткості поверхні, що обтікається, розмірності об'єктів).

2.2.2.2. Математична модель горіння суміші газів

Повна система рівнянь, що описує нестационарний тривимірний потік двокомпонентної газоповітряної суміші (2.1), зазнає змін. Вектор-стовпець проєкцій розподілених об'ємних джерел \vec{f} тепер має такий вигляд [1, 10]:

$$\vec{f} = \left[0, 0, -g, 0, -gv + \frac{e_s}{\rho} \right]^T, \quad (2.39)$$

де g – прискорення вільного падіння; v – вертикальна складова вектора швидкості потоку \vec{q} ; e_s – інтенсивність тепловиділення в одиниці об'єму газу внаслідок хімічної реакції.

Закон (2.8) перенесення компонент суміші (горючий газ, повітря, продукти горіння) з урахуванням швидкості дифузії також зазнає змін з метою урахування хімічної реакції горіння [33, 39]

$$\frac{\partial(\rho Q_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Q_i)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v Q_i)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w Q_i)}{\partial z} = \rho_{Q_{it}} + \rho_{Q_{is}}, \quad (2.40)$$

де Q_i – відносна масова густина i -ї компоненти суміші, яка є густинною

часткою домішки в суміші (індекс $i=1...3$: 1 – займиста домішка, 2 – повітря, 3 – продукти горіння); u, v, w – складові вектора швидкості потоку \vec{q} ; $\rho_{Q_{it}}$ – інтенсивність змінення густини домішки внаслідок турбулентної дифузії відповідно до закону Фіка $\rho_{Q_{it}} = \text{div}(\rho \mathcal{G}_D \text{grad} Q_i)$; \mathcal{G}_D – коефіцієнт турбулентної дифузії за Берляндом [241]; $\rho_{Q_{is}}$ – інтенсивність змінення густини компоненти суміші внаслідок хімічної реакції.

Систему рівнянь (2.1) зі зміненим вектором \vec{f} правих частин (2.39) разом з рівнянням (2.40) замкнемо рівняннями, що визначають теплофізичні властивості компонент суміші:

$$\mu = 1 / \sum_{i=1}^3 \frac{Q_i}{\mu_i}, C_P = \sum_{i=1}^3 Q_i (C_P)_i, C_V = \sum_{i=1}^3 Q_i (C_V)_i, \sum_{i=1}^3 Q_i = 1, k = \frac{C_P}{C_V}. \quad (2.41)$$

Для ідеального політропного газу внутрішня енергія e зв'язана з тиском P і густиною ρ суміші залежністю

$$e = \frac{P}{(k-1)\rho}. \quad (2.42)$$

Інтенсивність змінення густини пального $\rho_{Q_{1s}}$ унаслідок хімічної реакції визначалася як добуток молекулярної маси пального μ_1 на швидкість його мольного змінення w_1 . Розглядали хімічну реакцію «брутто»



де ν_i – стехіометричні коефіцієнти; χ_i – хімічні речовини. Швидкість мольного змінення w_1 визначали за формулою

$$w_1 = -\nu_1 A_1 T^{\beta_1} \exp[-E_1 / (R_{yH} T)] \prod_{i=1}^2 [\chi_i]^{\nu_i}, \quad (2.44)$$

де $A_1, \beta_1, E_1, \nu_1', \nu_2'$ – параметри, отримані узагальненням експериментальних даних [342]; $[\chi_i] = \rho Q_i / (\mu_i \nu_i)$ – мольна концентрація i -ї компоненти суміші. Інтенсивність змінення густини продуктів горіння $\rho_{Q_{3s}}$ визначали на основі закону рухомих мас:

$$\rho_{Q_{1s}} / (\mu_1 \nu_1) = \rho_{Q_{2s}} / (\mu_2 \nu_2) = -\rho_{Q_{3s}} / (\mu_3 \nu_3). \quad (2.45)$$

Інтенсивність тепловиділення в одиниці об'єму газу внаслідок хімічної

реакції визначали за формулою

$$e_s = -\xi H_{u1} \rho_{Q1s}, \quad (2.46)$$

де ξ – коефіцієнт повноти згорання; H_{u1} – нижня теплота згорання пального.

Припускається, що хімічна взаємодія має місце там, де локалізована газоповітряна суміш із концентрацією пального в діапазоні між мінімальною Q_{1min} і максимальною Q_{1max} концентраційними межами займистості: $Q_{1min} \leq Q_1 \leq Q_{1max}$. Величини Q_{1min} і Q_{1max} задавали на основі узагальнення експериментальних даних [264].

2.2.3. Моделювання наявності крапель рідини (частинок пилу) під час вибуху газоповітряної суміші

Наявність твердих частинок пилу в суміші повітря з вибухонебезпечним газом (наприклад, вугільного пилу в шахті, де має місце аварійний викид метану) може суттєво впливати на фізико-хімічні процеси горіння газоповітряних сумішей під час аварії [16, 29]. Одним із засобів пом'якшення ударно-імпульсного впливу вибухової ударної хвилі й теплового навантаження від високотемпературних продуктів горіння є водяна завіса. Вугільний пил являє собою тонко подрібнену тверду речовину корисних копалин. Перебуваючи в завислому стані в повітрі, пил і вода утворюють дисперсну систему (аерозоль). Частинки пилу й краплі води становлять дисперсну фазу, повітря є дисперсійним середовищем.

2.2.3.1. Урахування розпилення крапель рідини (твердих частинок пилу)

Якість розпилення, як відомо, характеризується інтегральними й диференціальними кривими розподілу об'ємів (кількості, поверхні) крапель за їх діаметрами й різними поняттями середнього діаметра крапель. Здебільшого розпилена рідина складається з крапель різних розмірів, тобто є полідисперсною. Для опису кривих розподілу крапель за розмірами запропоновано різні залежності. Розподіл габаритів крапель частіше проводять згідно з рівнянням Розіна – Рамлера [343]

$$P = 1 - \exp\left(-\left(d/d_+\right)^n\right), \quad (2.47)$$

де P – об'ємна частина крапель розміром у перерізі менше d ; d_+ – розмір, що відповідає певному значенню $P = 0,3679$; n – константа розподілу, що характеризує ступінь неоднорідності розпилення ($2 \leq n \leq 4$). У цьому випадку густина дисперсних крапель за габаритами набуває такого

вигляду:

$$\rho(d/d_+) = n(d/d_+)^{n-1} \exp(-(d/d_+)^n). \quad (2.48)$$

2.2.3.2. Урахування впливу аеродинамічного опору крапель рідини (частинок вугільного пилу) на течію газоповітряної суміші

Сила опору, що діє на краплю (частинку пилу), визначається формулою

$$\vec{F}_{оп} = -C_d \left(\frac{\rho q^2}{2} \right) \sigma_k \frac{\vec{q}}{|\vec{q}|}, \quad (2.49)$$

де $\sigma_k = \pi d^2/4$ – площа поверхні; C_d – коефіцієнт аеродинамічного опору; \vec{q} – вектор швидкості потоку. Якщо крапля зберігає сферичну форму, то для визначення C_d можна рекомендувати співвідношення [344]

$$C_d = 24/Re + 4,4/\sqrt{Re} + 0,35, \quad (2.50)$$

де $Re = \rho q d / \mu$ – число Рейнольдса. Тоді усереднена за діаметрами крапель сила аеродинамічного опору для вибраного контрольного об'єму визначається формулою

$$\vec{F}_{оп} = N_k \sum_{i=1}^l \rho(d_i) \vec{F}_{оп}(d_i), \quad (2.51)$$

де $N_k = G_{H_2O} \tau / \left(m \rho_{H_2O} \sum_{i=1}^l \rho(d_i) V_{ki} \right)$ – кількість крапель у контрольному об'ємі;

G_{H_2O} – загальна витрата води (передбачається, що вода безперервно подається в розрахункову область); τ – крок за часом; m – кількість контрольних об'ємів в області з джерелами (крапель, частинок пилу твердих фракцій); $V_{ki} = (\pi/6) d_i^3$ – об'єм дисперсної частинки.

Кількість частинок пилу в об'ємі визначають за формулою

$$N_k = \rho_{C+} \Delta V / \left(\rho_C \sum_{i=1}^l \rho(d_i) V_{ki} \right), \quad (2.52)$$

де ρ_{C+} – концентрація пилу в завислому стані; ΔV – контрольний об'єм; ρ_C – густина вугільного пилу.

Вплив аеродинамічного опору дисперсних частинок на параметри течії газоповітряної суміші ураховувався введенням у рівняння руху усередненої об'ємної сили опору

$$\vec{f}_{оп} = (1/\rho) / (\vec{F}_{оп}/\Delta V). \quad (2.53)$$

При цьому передбачалося, що сума питомих потужностей сил опору й дисипації дорівнює нулю: $(\rho \vec{f}_{оп}, \vec{q}) + N_d = 0$.

2.2.3.3. Урахування впливу тепловиділення внаслідок кипіння (горіння) дисперсних частинок на течію газоповітряної суміші

Швидкість змінення маси газової домішки внаслідок кипіння води визначимо за формулою

$$\rho_{H_2O_s} = G_{H_2O} / (m \Delta V), \quad (2.54)$$

а швидкість змінення маси газової домішки внаслідок хімічної взаємодії (реакції горіння частинок пилу) – за формулою

$$\rho_{Cs} = G_C / (m \Delta V), \quad (2.55)$$

де G_C – загальне змінення за одиницю часу маси частинок пилу твердих фракцій унаслідок хімічної реакції горіння.

Припустимо, що співвідношення для визначення часу згорання дисперсної частинки є функцією її маси на початку:

$$t_i = k d_i^2 = k (6M_{0i} / (\pi \rho_C))^{2/3}, \quad (2.56)$$

де $k = 6,14 \cdot 10^6$; $M_{0i} = \rho_C V_{ki}$. Відповідно до відомих з математичного аналізу й теорії звичайних диференціальних рівнянь перетворень поточна маса твердої частинки, яка горить, є такою:

$$M_i = \left[M_{0i}^{2/3} - 1,06 \cdot 10^{-7} \rho_C^{2/3} t \right]^{3/2}, \quad (2.57)$$

а швидкість змінення маси твердих частинок унаслідок згорання має такий вигляд:

$$G_{Ci} = 1,6 \cdot 10^{-7} \rho_C^{2/3} \left(M_{0i}^{2/3} - 1,06 \cdot 10^{-7} \rho_C^{2/3} t \right)^{1/2}, \quad (2.58)$$

де t – час.

Зміну сумарної маси твердих дисперсних частинок унаслідок згоряння можна визначити за формулою

$$G_C = mN_k \sum_{i=1}^l \rho(d_i) G_{Ci}. \quad (2.59)$$

Урахування впливу фазового переходу під час кипіння крапель води (хімічної реакції горіння частинок пилу твердих фракцій) на параметри руху газоповітряної суміші здійснювалося шляхом уведення в рівняння енергії інтенсивностей тепловиділення в контрольному об'ємі:

$$e_{H_2O_s} = -r(P)\rho_{H_2O_s}, \quad e_{C_s} = \xi H_{uc}\rho_{C_s}, \quad (2.60)$$

де $r(P)$ – питома теплота пароутворення; ξ – коефіцієнт повноти згоряння; H_{uc} – найнижча теплота згоряння.

2.3. Тривимірна математична модель випаровування з плями пролиття

У технологічних процесах сучасних промислових підприємств застосовується використання, транспортування й зберігання отруйних хімічних речовин у зрідженому стані [243]. Порушення правил експлуатації обладнання призводить до його відмов, які супроводжуються викидом в атмосферу отруйної хімічної речовини з утворенням токсичних хмар [245]. Одним із найбільш небезпечних видів техногенної аварії є руйнування посудини для зберігання або транспортування зрідженого газу з утворенням плями пролиття [335] (рис. 2.4).

Відносна масова концентрація токсичної газоподібної речовини в газоповітряній суміші характеризує відхилення від нормального хімічного складу повітря й разом з часом експозиції є небезпечним параметром для обслугового персоналу, який опинився в межах зони техногенної аварії.

Експозиція обслугового персоналу техногенного об'єкта певним концентраціям отруйної хімічної речовини формує уражальний фактор – інгаляційну токсичну дозу. Перевищення граничних значень допустимого діапазону токсичної дози призводить до соціальних наслідків – отруєння різного ступеня тяжкості й людських жертв. Отже, визначення ризику підприємства для такого роду аварії є важливим та актуальним інженерно-практичним завданням.

Оцінювання наслідків техногенної аварії полягає у визначенні ймовірності ураження обслугового персоналу, який може зазнати впливу

отруйної хімічної речовини, на основі математичного моделювання розсіювання токсичної домішки в атмосфері [246].

Математичне моделювання фізичних процесів викиду й розсіювання шкідливої газової домішки в приземному шарі атмосфери забезпечує можливість здійснити прогнозування полів масової концентрації отруйної хімічної речовини, визначити інгаляційну токсичну дозу й отримати поля умовної ймовірності ураження персоналу техногенного об'єкта [22, 33].

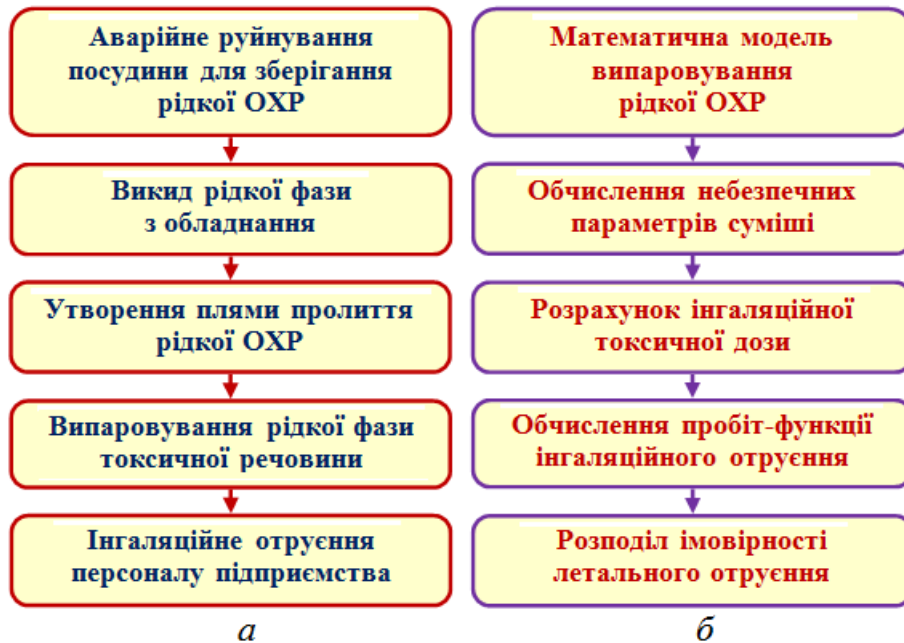


Рис. 2.4. Схема пролиття токсичної речовини: а – розвиток аварії; б – числове оцінювання впливу на людину

Сучасні методики оцінювання забруднення базуються на детермінованому підході [243, 244], а при ймовірнісному підході визначення наслідків ураження обслугового персоналу на основі пробіт-аналізу використовують залежність умовної ймовірності ураження від пробіт-функції в табличному вигляді для експертного аналізу [33]. Це не дає змоги застосувати такий підхід в автоматичному режимі за допомогою комп'ютерної системи для отримання нестационарних полів уражальних факторів та умовної ймовірності ураження й потребує вдосконалення обчислювальної технології.

2.3.1. Постановка задачі розсіювання токсичної речовини з плями пролиття

Розглянемо формування й рух газоповітряної суміші на відкритому майданчику, де сталося аварійне руйнування посудини для зберігання токсичного зрідженого газу (рис. 2.5).

Під впливом навколишнього середовища зріджений газ

випаровується з плями пролиття й надходить до приземного шару атмосфери із сумарною інтенсивністю G_{Σ} . Свіже повітря зі швидкістю вітру надходить крізь вхідну грань розрахункової області, перемішується з газовою домішкою, утворюючи газоповітряну хмару з масовою концентрацією Q . Для спрощення моделі й прискорення комп'ютерних обчислень припускаємо, що фізичні процеси переходу речовини з рідкого в газоподібний стан (закипання) проходять миттєво в нескінченно-тонкому за висотою приземному шарі атмосфери. Це припущення трохи огрубляє розрахунки, але загалом дає змогу досить адекватно описати процес потрапляння газової домішки в повітря розрахункового простору.

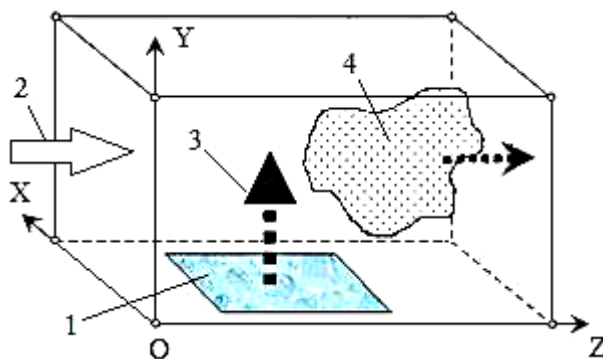


Рис. 2.5. Схема аварійного пролиття: 1 – пляма пролиття; 2 – потік повітря; 3 – газова домішка; 4 – газоповітряна хмара

Рух газової суміші в розрахунковій області буде визначатися параметрами навколишньої атмосфери, площею плями пролиття, параметрами газової домішки, що надходить унаслідок випаровування в атмосферу. У якийсь момент часу випаровування може припинитися й надходження газової домішки в область не буде.

2.3.2. Моделювання випаровування з плями пролиття

Унаслідок дискретизації розрахункової області поверхня плями пролиття зрідженого газу також розбивається на скінченно-об'ємні комірки біля землі в площині XOZ (рис. 2.6, а).

При рівномірному розбитті в напрямку осей OX і OZ грані комірок, що «випаровують» газову домішку, мають однакову площу. Припускаючи рівномірність потоку з плями пролиття, можна визначити індивідуальну задану витрату газу $G_i = G_{\Sigma}/k$ для кожної з комірок «випаровування», де k – кількість комірок, що прилягають до плями пролиття зрідженого газу.

Нехай ϵ газове середовище, для якого термодинамічні величини (тиск p , густина ρ , внутрішня енергія одиниці маси ϵ) підпорядковуються рівнянню стану. Припустимо, що в початковий момент часу t для «нижнього» півпростору $y < 0$ середовище характеризується параметрами

ρ_1, ρ_1, u_1 , а для «верхнього» півпростору $y > 0$ – параметрами ρ_2, ρ_2, u_2 (тут u є компонентою вектора швидкості в напрямку координати y , а інші її компоненти дорівнюють нулю) (рис. 2.6, б).

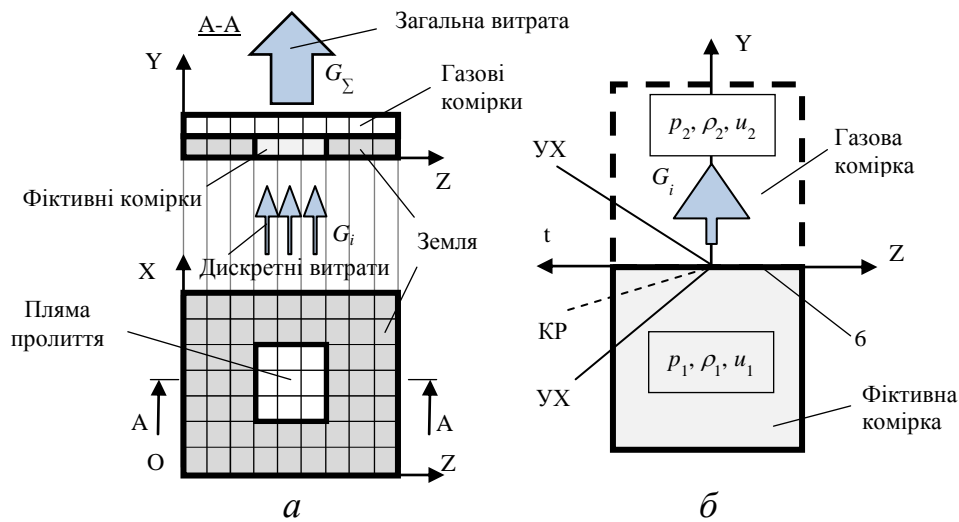


Рис. 2.6. Схема розрахунку для визначення швидкості випаровування рідини: а – дискретизація плями пролиття; б – схема випаровування

Якщо привести до стикання дві маси газу, стиснені до різних тисків (p_1 – тиск з боку плями пролиття, p_2 – тиск з боку атмосфери), і прибрати перегородку між ними, то поверхня їх стикання буде поверхнею розриву в початковому розподілі тиску. Початковий розрив розпадається на декілька розривів, які з плином часу будуть відходити один від одного. На контактному розриві відбувається стрибок густини R , а отже, і внутрішньої енергії E (R_1, E_1 – для нижньої і R_2, E_2 – для верхньої областей), а тиск P і поперечна компонента швидкості U – безперервні.

Своєю чергою, ці області відокремлені від незбурених областей з параметрами (ρ_1, ρ_1, u_1) знизу і (ρ_2, ρ_2, u_2) зверху або ударною хвилею (УХ) або хвилею розрідження (ХР).

Розв'язуючи задачу розпаду розриву на межах комірок, які прилягають до плями пролиття (випаровування), можна визначити густину R і швидкість U потоку, а отже, й індивідуальну витрату газу G_i крізь розглядувану грань. Використовуючи метод ітерацій, можна підібрати тиск p_2 таким чином, щоб розрахункова витрата газу G_i відрізнялася від заданої G_3 на наперед задану малу величину ε (рис. 2.7).

Тестування такого ітераційного алгоритму показало швидку збіжність процесу підбору тиску «випаровування» і незначне збільшення загального часу нестационарного розрахунку руху газоповітряної суміші в розрахунковій області. Оскільки знайдена інформація про «випаровування» на попередньому часовому шарі запам'ятовувалася в спеціальній структурі даних, ітераційний процес підбору протитиску під час загального розрахунку прискорювався.

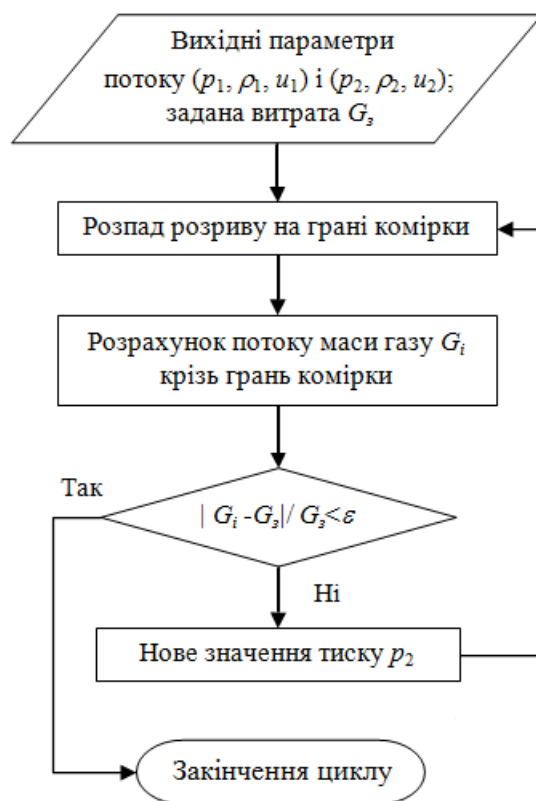


Рис. 2.7. Ітераційний алгоритм підбору протитиску в поточний момент часу процесу випаровування

2.3.3. Узагальнене розв'язання задачі розпаду розриву

Узагальнене розв'язання задачі розпаду довільного розриву для однокомпонентного газового середовища запропонував С. К. Годунов [262]. Модифікуємо розв'язок для суміші газів.

Нехай є багатокомпонентне газове середовище, для якого термодинамічні величини (тиск p , густина ρ , внутрішня енергія одиниці маси ε і коефіцієнт адіабати k) підпорядковуються рівнянню стану ідеального газу $\varepsilon = p / ((k - 1)\rho)$.

Припустимо, що в початковий момент часу $t = 0$ для півпростору «ліворуч» $x < 0$ середовище характеризується параметрами p_1, ρ_1, u_1, k_1 , а для півпростору «праворуч» $x > 0$ – параметрами p_2, ρ_2, u_2, k_2 (тут u є компонентою вектора швидкості в напрямку координати x , тоді як інші її компоненти дорівнюють нулю). Якщо зробити припущення, що в зоні розпаду розриву параметрів середовища коефіцієнт адіабати має єдине осереднене значення $k = (k_1 + k_2) / 2$, то всі співвідношення С. К. Годунова для одного газу [262], можуть бути використані для суміші газів (рис. 2.8).

Якщо привести до контакту дві суміші газів, стиснених по-різному (тиск p_1 – «ліворуч», p_2 – «праворуч»), і прибрати перегородку між ними, то поверхня їх стикання буде поверхнею розриву в початковому розподілі тиску. При цьому стрибки на розриві можуть бути довільними [262].

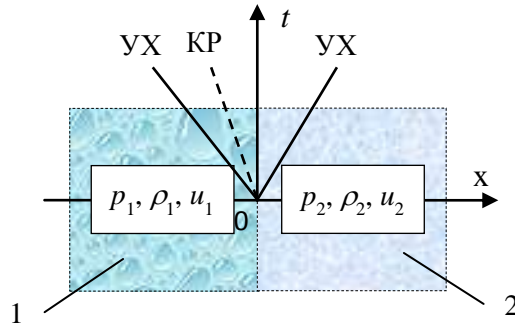


Рис. 2.8. Схема задачі розпаду довільного розриву:
1 – середовище «ліворуч»; 2 – середовище «праворуч»

Початковий розрив розпадається на декілька розривів, які з плином часу будуть відходити один від одного. Схематично автомодельна картина течії, що виникає в площині (x, t) , відбувається в одній з п'яти конфігурацій (рис. 2.9).

Перші чотири конфігурації (рис. 2.9, а–г) долучають контактний розрив (КР), де має місце стрибок густини R , а отже, і внутрішньої енергії E (R_1, E_1 – для області «ліворуч» і R_2, E_2 – для області «праворуч»), а тиск P і поперечна компонента швидкості U є безперервними. Ці області відокремлені від незбурених зон із параметрами (ρ_1, ρ_1, u_1) «ліворуч» і (ρ_2, ρ_2, u_2) «праворуч» або ударною хвилею, або хвилею розрідження. Конфігурація на рис. 2.9, д є граничною.

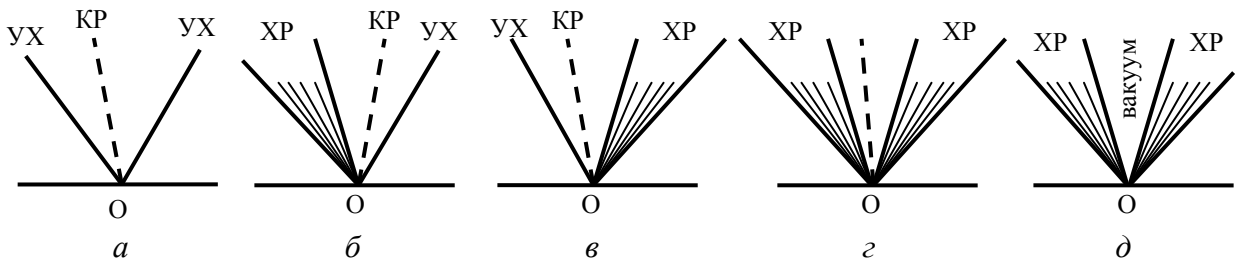


Рис. 2.9. Можливі конфігурації автомодельної течії

У реальних течіях є поверхні (ударні хвилі й контактні розриви), де параметри потоку змінюються стрибком [262]. З інтегральних законів збереження маси, імпульсу й енергії для одновимірного випадку були виведені співвідношення на УХ, які зв'язують параметри потоку з обох боків від розриву. Якщо D є швидкістю поширення розриву, то в кожній його точці будуть виконуватися такі умови на УХ, які зв'язують швидкість УХ і параметри перед фронтом і після нього (квадратні дужки означають різницю постійних значень відповідних параметрів у зонах, що прилягають до розриву «ліворуч» і «праворуч»):

$$\begin{aligned}
[\rho]D - [\rho u] &= 0, \\
[\rho u]D - [\rho + \rho u^2] &= 0, \\
[\rho(\varepsilon + u^2/2)]D - [\rho u(\varepsilon + u^2/2) + \rho u] &= 0.
\end{aligned} \tag{2.61}$$

За допомогою рівняння стану (2.19) із рівнянь (2.61) у роботі [262] було отримано адіабату Гюгоніо

$$R = \rho((k+1)P + (k-1)\rho) / ((k-1)P + (k+1)\rho), \tag{2.62}$$

де ρ, p, ε – параметри до УХ; P, R, E – параметри після фронту УХ.

Якщо ввести масову швидкість $a_1 = \rho_1 (u_1 - D_1) = R_1 (U - D_1)$, то для лівої УХ (якщо вона є такою) можна записати такі співвідношення:

$$U - u_1 + (P - p_1)/a_1 = 0, \tag{2.63}$$

$$a_1 = \sqrt{\rho_1 [P(k+1)/2 + p_1(k-1)/2]}. \tag{2.64}$$

Таким же чином, якщо ввести масову швидкість для правої УХ (якщо вона є такою) $a_2 = \rho_2 (D_2 - u_2) = R_2 (D_2 - U)$, то можна отримати співвідношення

$$U - u_2 + (P - p_2)/a_2 = 0, \tag{2.65}$$

$$a_2 = \sqrt{\rho_2 [P(k+1)/2 + p_2(k-1)/2]}. \tag{2.66}$$

У випадку ХР замість співвідношень (2.61) треба використати умови безперервності ріманових інваріантів [262]

$$[u] \pm [c]2/(k-1) = 0, \tag{2.67}$$

де $c = \sqrt{k\rho/p}$ – швидкість звуку.

Якщо ввести умовні масові швидкості

$$a_1 = ((k-1)/(2k))\rho_1 c_1 (1 - P/p_1) / \left(1 - (P/p_1)^{(k-1)/(2k)}\right), \tag{2.68}$$

$$a_2 = (k-1)/(2k)\rho_2 c_2 (1 - P/p_2) / \left(1 - (P/p_2)^{(k-1)/(2k)}\right), \tag{2.69}$$

то й для випадку ХР маємо співвідношення

$$U - u_1 + (P - p_1)/a_1 = 0, \tag{2.70}$$

$$U - u_2 + (P - p_2)/a_2 = 0 \tag{2.71}$$

для лівої і правої хвиль відповідно.

У роботі [262] наведено загальний алгоритм ітераційного процесу знаходження «великих» параметрів тиску й густини на розриві (рис. 2.10).

На кожній ітерації (i) можна обчислити нове значення «великого» тиску $P^{(i)}$ при ітераційно незмінних «малих» параметрах тиску і швидкості з обох боків від розриву й масових швидкостей для попередньої ітерації ($i-1$), користуючись формулою, яка є похідною формул (2.65) і (2.66):

$$P^{(i)} = \varphi(P^{(i-1)}) = \frac{a_2^{(i-1)} \rho_1 + a_1^{(i-1)} \rho_2 + a_1^{(i-1)} a_2^{(i-1)} (u_1 - u_2)}{a_1^{(i-1)} + a_2^{(i-1)}}. \quad (2.72)$$

За початкове значення тиску візьмемо «звуковий розпад розриву»

$$P^{(0)} = \frac{\rho_1 \rho_2 c_2 + \rho_2 \rho_1 c_1 + (u_1 - u_2) \rho_1 c_1 \rho_2 c_2}{\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2}. \quad (2.73)$$

Ітераційний процес швидко збігається. «Велику» швидкість контактного розриву можна обчислити після його завершення

$$U = \frac{a_1 u_1 + a_2 u_2 + \rho_1 - \rho_2}{a_1 + a_2}, \quad (2.74)$$

а «велика» густина розраховується за адіабатою Гюгоніо

$$R_1 = \rho_1 \frac{(k+1)P + (k-1)\rho_1}{(k-1)P + (k+1)\rho_1} = \frac{\rho_1 a_1}{a_1 - \rho_1 (u_1 - U)}. \quad (2.75)$$

Якщо ліва хвиля є хвилею розрідження, то швидкості її крайніх характеристик обчислюються за формулами

$$D_1 = u_1 - c_1, \quad D_1^* = U - c_1^*, \quad (2.76)$$

де $c_1^* = c_1 + (k-1)/2(u_1 - U)$.

Густина «ліворуч» контактного розриву обчислюється за формулою

$$R_1 = kP / (c_1^*)^2. \quad (2.77)$$

Подібні формули записано і для правої хвилі. Якщо вона є ударною, то її швидкість і густину можна обчислити за такими співвідношеннями:

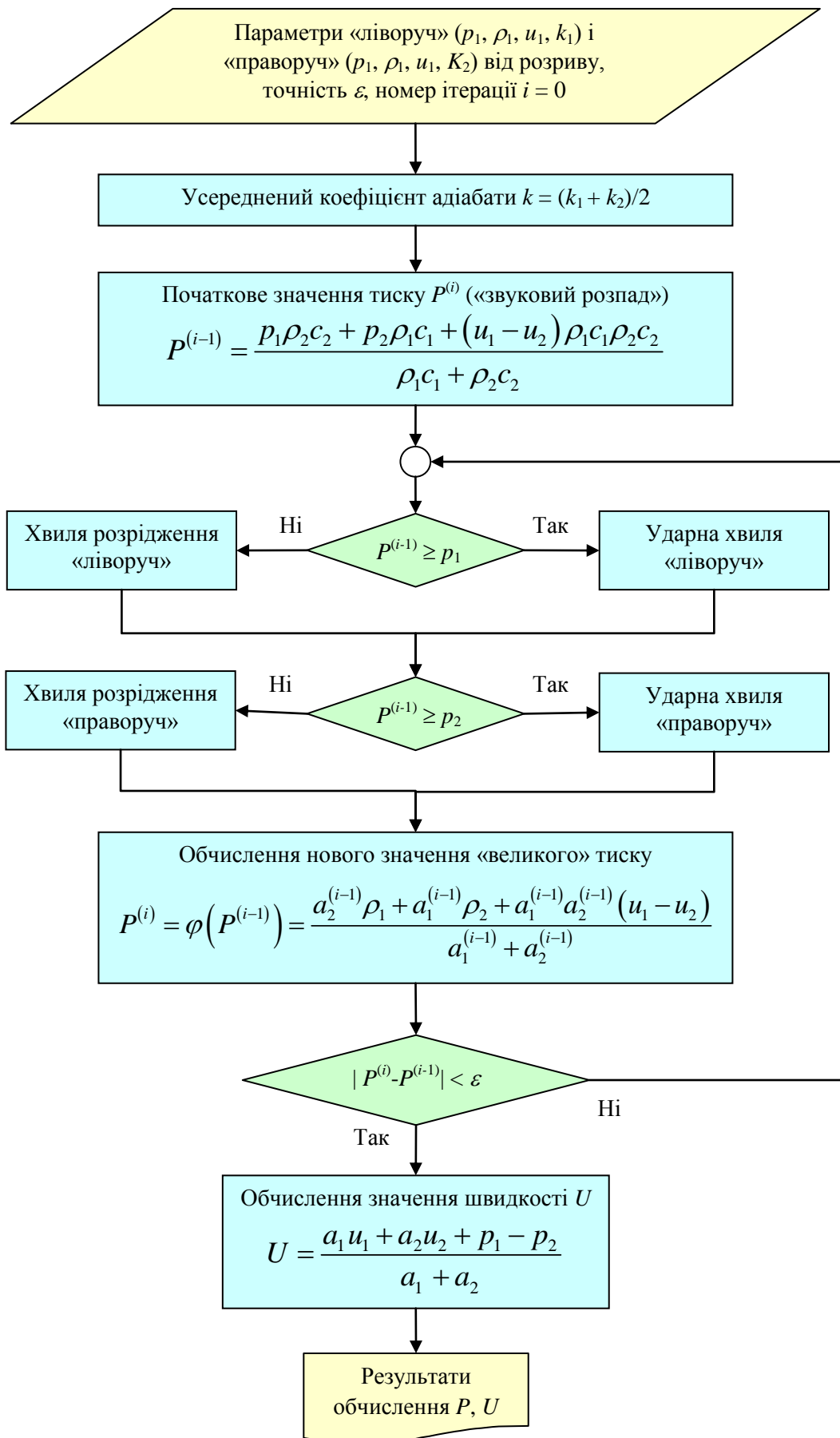


Рис. 2.10. Блок-схема алгоритму узагальненої схеми розпаду розриву

$$D_2 = u_2 - a_2/\rho_2, R_2 = \rho_2 a_2 / (a_2 - \rho_2 (u_2 - U)). \quad (2.78)$$

Якщо вона є хвилею розрідження, то її «великі» параметри можна розрахувати за формулами

$$D_2 = u_2 + c_2, c_2^* = c_2 - (k-1)/2(u_2 - U), \quad (2.79)$$

$$D_2^* = U + c_2^*, R_2 = kP / (c_2^*)^2. \quad (2.80)$$

Таким чином, алгоритм розв'язання задачі розпаду розриву [262] було модифіковано для поширення дії співвідношень на розриві на газоповітряні суміші.

2.3.4. Інтерполяція функції інтенсивності випаровування

Під час моделювання випаровування з плями пролиття інтенсивність «викиду» домішки в газовій фазі в атмосферу зазвичай вважають сталою: $G = const$ (рис. 2.11, а) і визначають за формулою (2.81).

Якщо відомими є сумарна маса m пролитого зрідженого газу, час початку t_1 і закінчення t_2 процесу випаровування, то поточну інтенсивність випаровування можна знайти із такого співвідношення [24]:

$$G = \frac{m}{t_2 - t_1} = const. \quad (2.81)$$

Іноді закон інтенсивності випаровування $G_3 = f(t)$ (рис. 2.11, б) є таблично заданою функцією, яку отримано або з експерименту, або за допомогою аналітичної моделі.

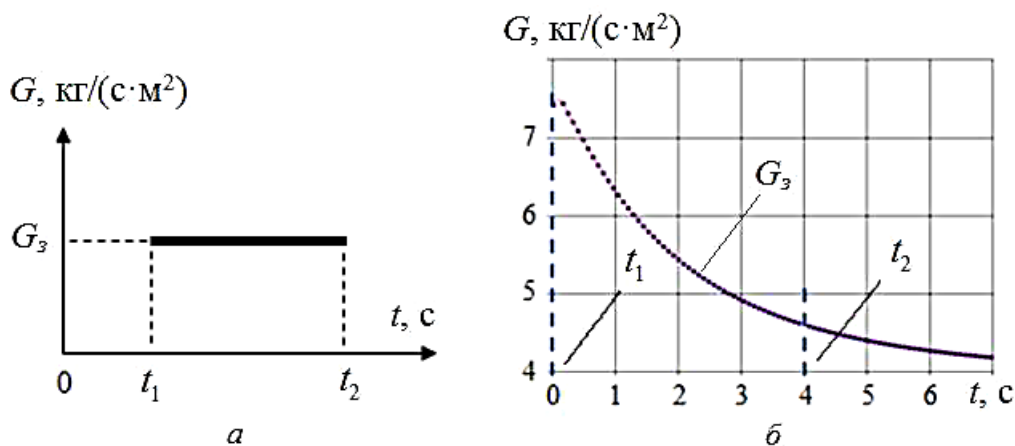


Рис. 2.11. Закони інтенсивності випаровування G : а – сталий; б – змінний; t_1 і t_2 – час початку і закінчення випаровування; G_3 – задана інтенсивність випаровування

У цьому разі виникає проблема інтерполяції таблично заданої функції. Під час вибору відповідного методу інтерполяції слід ураховувати можливий складний характер функції і нерівномірність розташування вузлів інтерполяції [247]. У роботі [248] Ю. К. Чернишов виконав аналітичний огляд найбільш відомих методів інтерполяції (метод конформних відображень, ермітовий сплайн, сплайн Безьє), розглянув їх переваги й недоліки. Він дійшов висновку, що найбільш придатними є кусково-кубічні ермітові сплайни, основою яких є методика Х. Акіми побудови нелінійних наближень першої похідної у вузлах інтерполяції та її узагальнення [249]. Було запроваджено додаткові проміжні вузли інтерполяції й доведено, що цей прийом усуває коливання знака другої похідної.

Площу плями пролиття рідини F , м², можна визначити за такою формулою:

$$F = \frac{M^p - M^e - M_a^p}{0,05 \rho_p}, \quad (2.82)$$

де ρ_p – густина рідкої небезпечної речовини, кг/м³;

M^p – сумарна маса пролітої рідкої небезпечної речовини, кг;

M^e – маса небезпечної речовини, яка переходить у газову фазу первинної хмари під час миттєвого закипання перегрітої речовини, кг;

M_a^p – маса рідини, яка переходить в аерозоль первинної хмари, кг.

Швидкість випаровування, кг/с, з поверхні пролиття й витрата небезпечної речовини у вторинній хмарі, яка утворюється на стадії випаровування з плями пролиття, визначаємо за формулою

$$q^e = F \sqrt{\mu} 10^{-6} (5,38 + 4,1 u_{0\text{еф}}^e) P_H, \quad (2.83)$$

де μ – молярна маса небезпечної речовини, кг/моль;

$u_{0\text{еф}}^e$ – початкова ефективна швидкість вторинної хмари, що утворюється на стадії випаровування з плями пролиття, м/с;

P_H – тиск насиченої пари небезпечної речовини при температурі повітря, мм рт. ст.,

$$P_H = 760 \exp \left(\Delta H_{\text{кип}} \mu \left(\frac{1}{T_{\text{кип}}} - \frac{1}{T_{\text{пов}}} \right) / R \right). \quad (2.84)$$

Тут $T_{\text{пов}}$ – температура повітря, К;

$T_{\text{кип}}$ – температура кипіння рідкої небезпечної речовини при тиску в

нормальних умовах P_0 , K ;

$\Delta H_{\text{кип}}$ – теплота випаровування (кипіння) рідкої небезпечної хімічної речовини, Дж/кг.

2.4. Обчислювальна технологія врахування вентиляції під час розрахунку руху газової суміші в приміщенні

При сучасному рівні технічного прогресу передбачається широке використання в промисловості, транспорті й побуті вибухонебезпечних і токсичних газів [265]. Відмови в роботі обладнання призводять до аварійних викидів газів в атмосферу, формування вибухонебезпечних і токсичних хмар, розсіювання їх у приміщеннях, вибухів і пожеж [10], що супроводжуються людськими жертвами й значними матеріальними збитками [266, 267].

Одним із засобів підвищення рівня пожежної та вибухової безпеки виробничих і побутових приміщень є їх вентиляція (природна й примусова) [268]. Для грамотного планування роботи вентиляційних систем у будівлях потребуються ефективні математичні моделі й комп'ютерні системи, які дають змогу ще на етапі проєктування виконати аналіз і прогнозування руху газоповітряних сумішей у будівлях у разі реалізації різних аварійних сценаріїв [269].

Проблему оцінювання ризиків виникнення надзвичайних ситуацій, пов'язаних з витоком водню з автомобілів, обладнаних водневими паливними баками у вентиляльованих тунелях, було розглянуто в роботі [276], що базується на застосуванні CFD. Отримано базові дані про поведінку водню під впливом умов примусової вентиляції.

Моделювання на основі CFD-коду ADREA-HF одного з найбільш імовірних сценаріїв аварійної ситуації – повільного й тривалого за часом викиду водню з транспортного засобу в приватному гаражі з природною вентиляцією – було виконано (на прикладі гелію) у роботі [270].

Проблема природної вентиляції закритого приміщення для паркування автомобіля, у якому сталося витікання водню, досліджується в роботі [277]. Bazуючись на CFD-коді FLUENT, автори розглянули різні варіанти вентиляційного отвору в типовому двосекційному гаражі, вивчили вплив термічного фактора на циркуляцію домішки.

Питання детонації внаслідок аварійного викиду водню в замкненому просторі розглянуто в роботі [278]. На основі технології CFD отримано, що умови попереднього формування вибухонебезпечної хмари мають істотний вплив на масштаб наслідків від подальшого детонаційного вибуху.

Розсіювання водню в приміщенні було досліджено числовим шляхом у роботі [279] з використанням аналітичних моделей і CFD-підходу, що ґрунтується на LES-моделі. Виявлено, що аналітичне розв'язання не забезпечує можливості адекватно відтворити явища турбулентної дифузії і

стратифікації на етапі змішування в процесі формування газоповітряних сумішей.

У роботі [280] проведено комплексне порівняння можливостей різних CFD-моделей прогнозувати різні за тривалістю варіанти розсіювання й змішування водню в гаражі. Виявлено істотні розбіжності в результатах моделювання, що пояснюється відмінностями у МТ і точності розрахунків (дискретизація в часі й просторі, порядок апроксимації скінченно-різницевої схеми).

У розрахунково-експериментальному дослідженні [281] вивчалися можливості доправлення трубопроводом кінцевому користувачеві воднево-метанової суміші, екстрагування водню із суміші й використання в різних побутових пристроях. Аварійні викиди водню являють собою загрозу для громадської безпеки, рівень якої оцінюється в роботі на базі розробленої моделі. Інтерпретація результатів показує, що як фактор плавучості, так і вентиляція відіграють важливу роль у розсіюванні водню в атмосфері.

В експериментальній роботі [282] вивчався вплив вентиляції та інтенсивність витікання водню на розподіл його концентрації в закритій системі та оцінювалися ризики, асоційовані з дефлаграційним горінням. Виявлено, що надлишковий тиск під час дефлаграції у більшості випадків є незначним і несе невеликий ризик ураження людей і руйнування приміщення. Основний ризик несе термічне навантаження на навколишнє середовище, що призводить до пожеж. Із дослідження випливає, що максимальна концентрація водню є пропорційною відношенню інтенсивності витікання до швидкості вентиляції. Тому потрібну швидкість вентиляції можна оцінити виходячи із передбачуваної інтенсивності витікання водню.

У роботі [283] розглядаються ризики виникнення вибухонебезпечної ситуації внаслідок неконтрольованого викиду водню з автомобіля, що працює на водні і який розташовано в закритому просторі гаража. Як захід щодо зменшення масштабу наслідків від можливого вибуху й пожежі розглядається вентиляція гаража і проведено оцінювання її оптимальної роботи.

У розрахунковому дослідженні [284] було виконано комп'ютерне моделювання викиду й розсіювання стисненого водню у вентилязованому боксі на заправній станції на основі CFD-коду ADREA-HF. Структура потоків, що виникають, аналізувалася на базі прогнозованих розподілів концентрації водню. Досліджувався також вплив параметрів викиду, природної вентиляції й вітрових умов.

Наведений огляд показує, що комп'ютерне моделювання вентиляції на базі CFD є найбільш загальним методологічним підходом. З іншого боку, специфічні сценарії розвитку розглянутих аварійних ситуацій містять умови для повільних типів течій (ламінарних і перехідних), вибір МТ для яких не є тривіальною задачею. Крім того, кожна з великої кількості МТ

добре поводиться тільки для того типу течії, для якого її було розроблено. Унаслідок того, що через масштаби й складність задачі припускаються величезні витрати ресурсів обчислювальної техніки, виникає необхідність різного роду спрощень, які не призведуть до зниження точності отриманого розв'язку [270–273]. Застосуємо розроблену математичну модель руху багатокомпонентної газової суміші до моделювання вентиляції у приміщеннях.

2.4.1. Постановка задачі моделювання руху газу крізь вентиляційний отвір

Зазвичай вентиляційні системи є розгалуженими інженерними спорудами, газодинамічний розрахунок течії у внутрішніх каналах яких є складною самостійною задачею. У загальному випадку розрахунковий простір є багатозв'язним і має набір каналів і пристроїв витяжки газоповітряної суміші або напору чистого повітря.

Оскільки для отримання тривимірної картини руху газової суміші в самому вентиляційному приміщенні знання багатьох характеристик вентиляційної системи (довжини й геометрії каналів, конструкції вентиляторів тощо) не є принципово важливим, роботу вентиляційної системи в цілому можна не розглядати детально, а враховувати лише параметри потоку (наприклад, витрату газу), які вона забезпечує. Абстрагуємося від вентиляційної системи, а для врахування впливу її роботи на загальну картину течії в приміщенні будемо ставити додаткові граничні умови на поверхнях основної розрахункової області, які прилягають до вентиляційного отвору.

Розглянемо рух газоповітряної суміші в приміщенні, де стався аварійний викид небезпечної газової домішки (рис. 2.12). Під впливом роботи витяжного вентилятора у вихідний отвір буде надходити газова суміш із приміщення з сумарною витратою G_{Σ} . Подавання свіжого повітря зі швидкістю C_1 здійснюється крізь вхідний отвір приміщення.

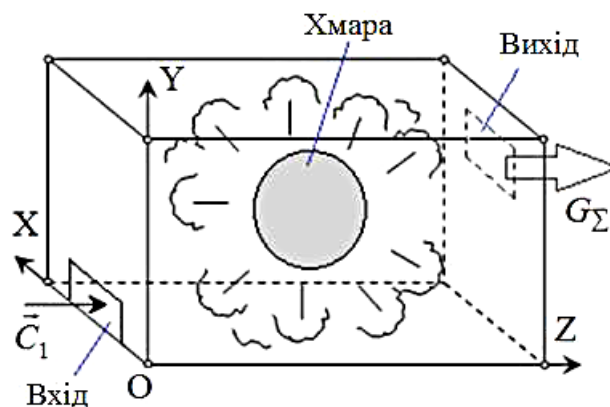


Рис. 2.12. Розрахункова схема витяжної вентиляції приміщення

Картина течії газової суміші в приміщенні буде визначатися режимом роботи вентилятора, площею й місцем розташування отворів вентиляційної системи. Газова вибухонебезпечна (токсична) домішка, розсіюючись, виходить із приміщення крізь вихідний отвір під впливом вентиляції. Загальна маса домішки в приміщенні буде, таким чином, зменшуватися, знижуючи рівень його небезпеки [17].

2.4.2. Метод дискретизації поверхонь вентиляційних отворів

За результатами дискретизації розрахункового простору поверхня кожного вентиляційного отвору також розбивається на багато скінченно-об'ємних комірок, які прилягають до отвору (рис. 2.13).

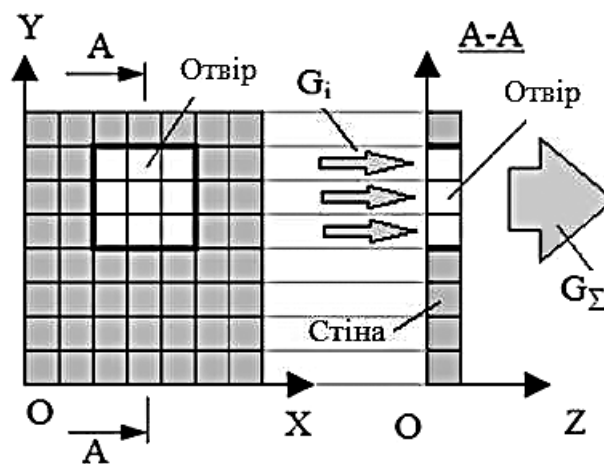


Рис. 2.13. Дискретизація стіни з отвором вентиляції

В умовах рівномірного розбиття отвору в напрямку відповідних осей площі граней «вентиляційних» комірок є однаковими. Припустивши рівномірність потоку у вентиляційному отворі, можна визначити індивідуальну задану витрату газу для кожної з «вентиляційних» комірок $G_i = G_\Sigma / k$, де k – кількість комірок, що прилягають до отвору.

Розглядається схема, подібна до схеми «випаровування». Тільки замість фіктивних комірок під поверхнею випаровування розташуємо фіктивні «вентиляційні» комірки, що знаходяться в отворі вентиляції. Відмінність полягає в тому, що вентиляційні отвори можуть бути в будь-якій площині в просторі (на стелі, підлозі, стінах приміщення) [19].

Тому залежно від нормалі до площини вентиляційного отвору параметри газоповітряної суміші й чистого зовнішнього повітря можуть мінятися місцями під час розгляду задачі довільного розпаду («ліворуч» або «праворуч»). Крім того, залежно від типу примусової вентиляції (витяжна або напірна) і місця розташування отвору відносно системи координат одновимірної задачі розпаду розриву задана витрата газу крізь отвір буде мати додатне або від'ємне значення (рис. 2.14).

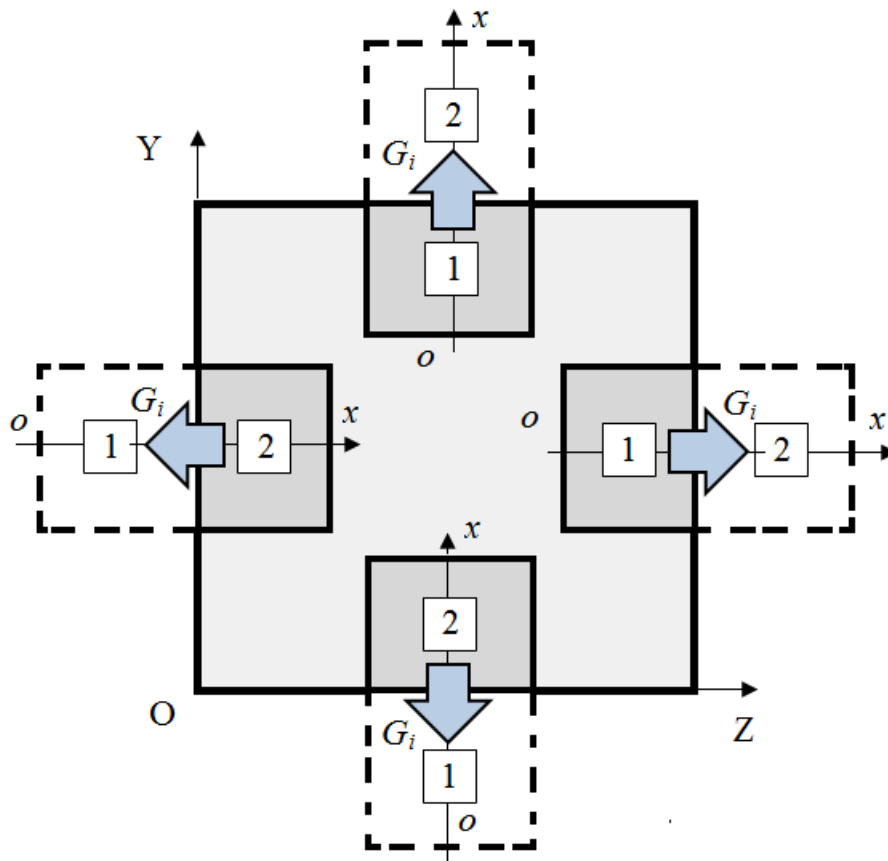


Рис. 2.14. Схема варіантів задачі довільного розпаду в площині YOZ для витяжної вентиляції: 1 – параметри «ліворуч»; 2 – параметри «праворуч»; G_i – витрата газу крізь одну комірку «вентиляції»

Таким чином, маємо 12 різних варіантів схеми розпаду довільного розриву параметрів газу для всіх варіантів розташування вентиляційного отвору й типу примусової вентиляції.

Порядок обчислення «вентиляційної» грані комірки збігається з наведеним раніше (див. підрозд. 2.2.3) порядком для грані комірки «випаровування» [20].

Ітераційний алгоритм «підбору» протитиску під час розв'язання задачі розпаду довільного розриву параметрів газу для вентиляції має таку саму структуру, що й алгоритм для моделі випаровування (див. рис. 2.10).

2.5. Математичне моделювання струминного витікання суміші із заданою концентрацією домішки

Іноді обладнання для зберігання, транспортування або використання в техпроцесі суміші газів з певною відносною масовою концентрацією зазнає часткового руйнування, і крізь аварійний отвір починає витікати вибухонебезпечна або токсична суміш із певною витратою (рис. 2.15) [23].

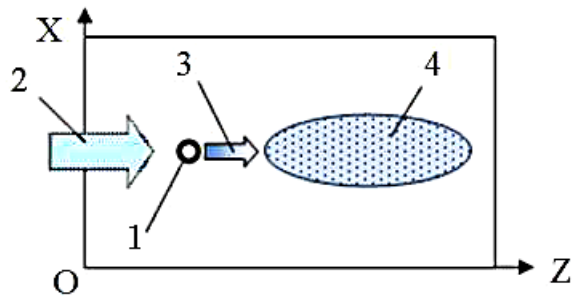


Рис. 2.15. Схема струминного витікання суміші: 1 – джерело забруднення; 2 – потік повітря; 3 – струмінь суміші; 4 – газоповітряна хмара

Газоповітряна суміш турбулентно змішується із повітрям, яке набігає із входу в актуальний простір, і результівна хмара продовжує свій рух у приземному шарі атмосфери. Якщо газова домішка є горючим газом, то можливим є вибух з формуванням ударно-імпульсного впливу на навколишнє середовище. У випадку токсичної речовини можливим є інгаляційне отруєння людей.

Рух газоповітряної суміші в розрахунковому просторі буде визначатися параметрами атмосфери, площею отвору струминного витікання, параметрами газової домішки (у тому числі її відносною масовою концентрацією). У якийсь момент часу струминне витікання може припинитися й надходження домішки в область завершиться. Як і у випадку випаровування, витрата газоповітряної суміші в отворі є функцією часу.

Для моделювання струминного витікання газоповітряної суміші заданої концентрації домішки з отвору заданої площі використовуємо розроблену модель випаровування з поверхні плями пролиття зрідженого газу. Модель базується на розв'язанні задачі розпаду довільного розриву параметрів газу на поверхні контакту газоповітряної суміші з параметрами всередині обладнання й параметрами середовища, куди витікає струмінь.

Відмінністю від розглянутої раніше моделі випаровування є задана масова концентрація домішки в суміші, що витікає, тоді як під час випаровування розглядалась «чиста» домішка (тобто, суміш зі 100%-вою концентрацією домішки).

Процеси дискретизації поверхні отвору струминного витікання, ітераційного алгоритму розрахунку потоків маси, імпульсу й енергії крізь отвір витікання мають такий же вигляд і структуру, як і під час моделювання випаровування або вентиляції.

Таким чином, модель струминного витікання може мати шість варіантів схеми розташування в розрахунковому просторі, які визначаються площиною, з поверхні якої відбувається струминне витікання, і напрямком вектора нормалі до цієї площини. Це схоже з варіантами вентиляції (див. рис. 2.14).

2.6. Тривимірна математична модель нестационарного процесу спряженого теплообміну між газом і твердим тілом

Тверді тіла, які потрапили в потік газоповітряної суміші, можуть мати іншу температуру, ніж суміш. У цьому разі відбуваються процеси теплообміну між потоком і твердим тілом крізь поверхню твердого тіла [15] і подальше поширення теплових потоків усередині твердого тіла завдяки теплопровідності (рис. 2.16) [12].

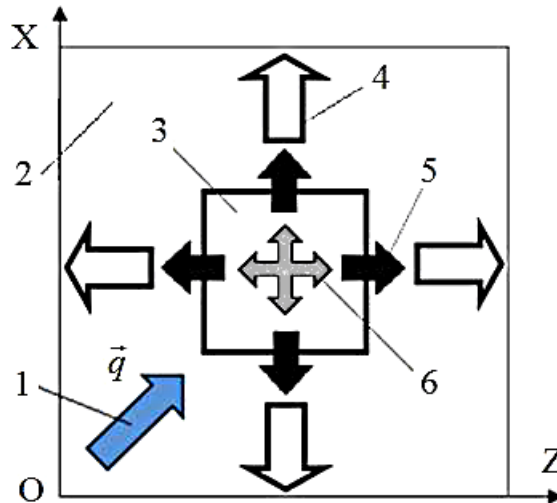


Рис. 2.16. Загальна розрахункова схема спряженого теплообміну: 1 – набіжний газ; 2 – зона теплообміну; 3 – тверде тіло; 4 – теплові потоки в газовому середовищі; 5 – теплообмін між твердим тілом і газом; 6 – теплові потоки всередині твердого тіла

Закон збереження енергії для кожного елементарного «твердого» об'єму V (без джерел тепла всередині) можна подати в інтегральній формі:

$$\iiint_V \rho \frac{d(C_v T)}{dt} dV = \iiint_V \operatorname{div} q dV, \quad (2.85)$$

де V – об'єм елементарний розрахунковий об'єм; T – температура; C_v – теплоємність при постійному об'ємі матеріалу «твердого» тіла; t – час; q – векторне поле теплового потоку, який визначається згідно із законом Фур'є

$$q = -\lambda \operatorname{grad} T, \quad (2.86)$$

де λ – коефіцієнт теплопровідності.

Застосуємо теорему Остроградського – Гаусса до правої частини рівняння (2.85):

$$\iiint_V \operatorname{div}(-\lambda \operatorname{grad} T) dV = \iint_{\sigma} (-\lambda \operatorname{grad} T, \vec{n}) d\sigma, \quad (2.87)$$

де σ – площа поверхні, що обмежує твердий об'єм і має зовнішню нормаль $\vec{n}(\sigma\vec{n})$.

Схему розрахунку процесу тепловіддачі між газовим середовищем і твердим тілом зображено на рис. 2.17.

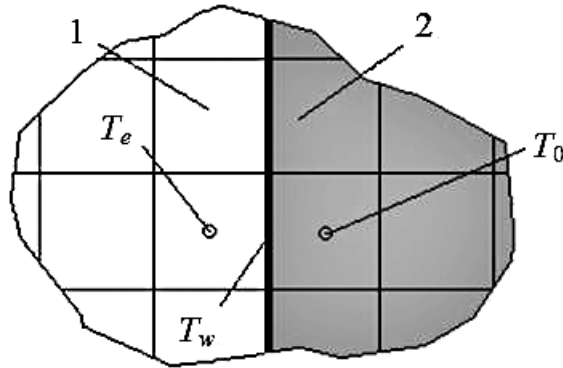


Рис. 2.17. Розрахункова схема тепловіддачі на межі «газ – тіло»:
1 – газ; 2 – «тверде» тіло

Тепловий потік на межі твердої комірки, спряженої із газовою коміркою, можна визначити відповідно до закону Ньютона

$$q_w = \alpha(T_w - T_e) = -\lambda \frac{\partial T}{\partial n}, \quad (2.88)$$

де T_w – температура на стінці; T_e – температура у спряженій газовій комірці; α – коефіцієнт тепловіддачі.

Припустивши однаковий розмір h комірок у всіх напрямках, рівняння (2.88) можна спростити таким чином:

$$\alpha(T_w - T_e) \cong -\lambda \frac{T_w - T_0}{2h}. \quad (2.89)$$

Виконавши ряд тотожних перетворень, отримаємо співвідношення для температури на стінці «твердого» тіла:

$$T_w = (h\alpha T_e + 2\lambda T_0) / (h\alpha + 2\lambda). \quad (2.90)$$

Коефіцієнт температуропровідності для матеріалу твердого тіла з теплоємністю C_v і густиною ρ визначається таким чином:

$$a = \frac{\lambda}{C_v \rho}. \quad (2.91)$$

Уведемо безрозмірний параметр теплообміну Bi для комірки (число Біо):

$$\overline{Bi} = \alpha h / \lambda, \quad (2.92)$$

тоді співвідношення (2.90) можна звести до зручного вигляду

$$T_w = \left(T_e \frac{\overline{Bi}}{2} + T_0 \right) / \left(\frac{\overline{Bi}}{2} + 1 \right). \quad (2.93)$$

2.7. Метод подання розрахункової області

Розрахунковим простором Ω є паралелепіпед (див. рис. 2.1) у правій декартовій системі координат (X, Y, Z) з поверхнею Землі в площині XOZ . Обчислювальний простір дискретизується об'ємними комірками, розміри яких відповідають характерному розміру особливостей розрахункової області (шорсткості обтічної поверхні, розмірності обтічних об'єктів).

Тверді суцільні об'єкти, які обтікає газовий потік, піддаються дискретизації просторовими «твердими» комірками, якщо геометричний центр елементарного об'єму комірки потрапив до вихідного простору тіла.

Поверхні вентиляційних отворів і плями пролиття зрідженого газу дискретизуються гранями шару обчислювальних комірок, що прилягають до відповідних поверхонь. Грань комірки вважається поверхнею отвору вентиляції або плями пролиття зрідженого газу, якщо геометричний центр грані потрапляє до контуру відповідної поверхні.

2.8. Постановка граничних і початкових умов

Під час постановки граничних умов передбачається, що витратна складова швидкості не перевищує швидкості звуку. Вхідні граничні умови будемо задавати на поверхнях тих граней розрахункових комірок, що прилягають до меж розрахункового простору й крізь які в обчислювальний простір надходить повітря. Вхідними є такі параметри течії:

– повна ентальпія

$$I_{00} = \frac{k}{k-1} \frac{P}{\rho} + \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2}; \quad (2.94)$$

– ентропійна функція

$$S_0 = P/\rho^k; \quad (2.95)$$

– напрямок вектора швидкості потоку (з кутами α_x , α_y , α_z до осей координат);

– відносна масова густина газової домішки Q , якщо надходить повітря, забруднене газоподібною речовиною домішки ($0 \leq Q \leq 1$).

Параметри потоку на вході визначають з рівнянь (2.94, 2.95) з урахуванням заданих кутів α_x , α_y , α_z і використанням співвідношень для «лівого» інваріанта Рімана [262, 345]. На непроникних ділянках, що обмежують розрахункову область поверхонь, виконуються граничні умови «непротікання» $q_n = 0$, де \vec{n} – вектор нормалі до поверхні комірки, що розглядається.

Граничні умови на виході будемо ставити на поверхнях тих граней розрахункових комірок, що прилягають до меж на виході з розрахункової області й крізь які передбачається витікання газоповітряної суміші. На виході з області крім атмосферного тиску P_A , яке береться, наприклад, з експерименту, використовувалися співвідношення для «правого» інваріанта Рімана [262, 345].

У початковий момент розрахунку в усіх «газоподібних» розрахункових комірках розрахункової області задаються параметри навколишнього середовища. У комірках, геометричні центри яких розташовані всередині хмари газоподібною домішки, яка утворилася внаслідок залпового викиду, відносна масова концентрація домішки береться такою: $Q \leq 1$ ($\leq 100\%$).

У сукупності «твердих» комірок, які репрезентують суцільні тіла, що обтікаються газоповітряною сумішшю, задається вихідна температура, рівномірно розподілена по об'єму твердого тіла.

На гранях розрахункових комірок, які прилягають до плями аварійного пролиття зрідженого газу і де передбачається випаровування, або до отворів, з яких очікується струминне витікання газової домішки чи потоки механічної вентиляції, задається початкове значення витрати суміші згідно із заданим часовим законом.

2.9. Методи оцінювання наслідків впливів, спричинених факторами ураження техногенних аварій

Із системного аналізу фізичних процесів, що супроводжують збурення повітряного потоку в приземному шарі атмосфери під час техногенних аварій, можна виділити такі основні фактори негативного впливу на навколишнє середовище: максимальна інгаляційна токсична доза для отруйних викидів, ударно-імпульсне навантаження від вибухової ударної хвилі й густина потоку теплового випромінювання від

високотемпературних продуктів горіння. В інженерній практиці найбільш поширеними є детермінований і ймовірнісний підходи до аналізу негативного впливу цих факторів на людину й споруди в зоні навколо епіцентру параметричного збурення.

2.9.1. Негативні фактори впливу під час техногенних аварій

Вибухова хвиля зазвичай є баричним збуренням атмосферного повітря, яке поширюється від епіцентру збурення, поступово втрачаючи свою інтенсивність (рис. 2.18).

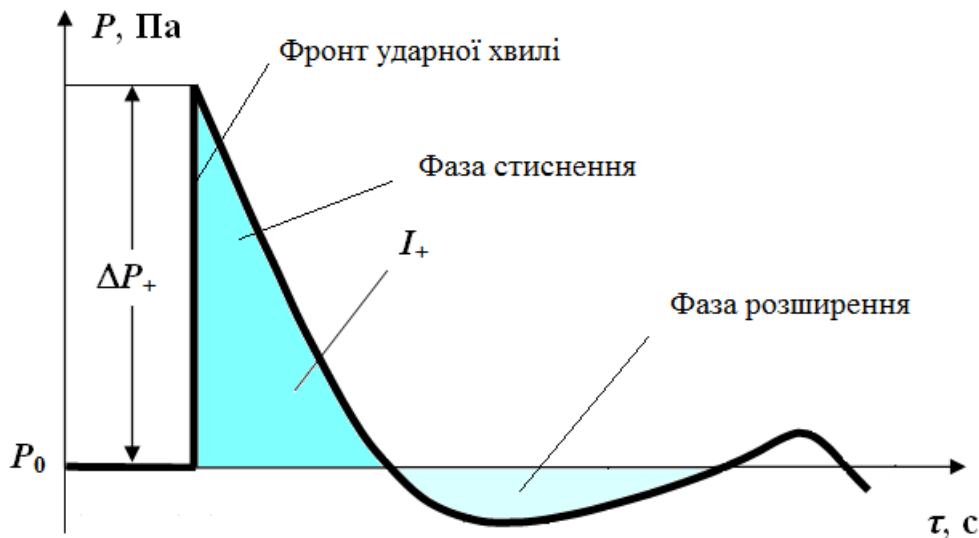


Рис. 2.18. Типовий профіль вибухової хвилі тиску

Вибухова ударна хвиля має характерні параметри, які визначають її вплив на навколишнє середовище:

– максимальний надлишковий тиск ΔP_+ відносно атмосферного тиску у фронті хвилі:

$$\Delta P_+ = P_1 - P_0, \quad (2.96)$$

де P_1 , P_0 – максимальний та атмосферний тиск, Па;

– імпульс фази стиснення I_+ , Па·с:

$$I_+ = \int_{\tau_a}^{\tau_a + \tau_+} \Delta P dt, \quad (2.97)$$

де τ_a , τ_+ – час прибуття фронту хвилі й тривалість фази стиснення, с. Перший параметр визначає ударну складову, другий – інтегрально-

імпульсну. В інженерній практиці прогнозування наслідків аварійного вибуху полягає в визначенні розмірів зон можливих втрат, ступеня впливу ударно-імпульсного навантаження на людину й обладнання.

Фактором впливу газоподібної отруйної хімічної речовини на людину в зоні аварійного викиду є інгаляційна токсична доза, отримана під час експозиції отруйної хмари (рис. 2.19).

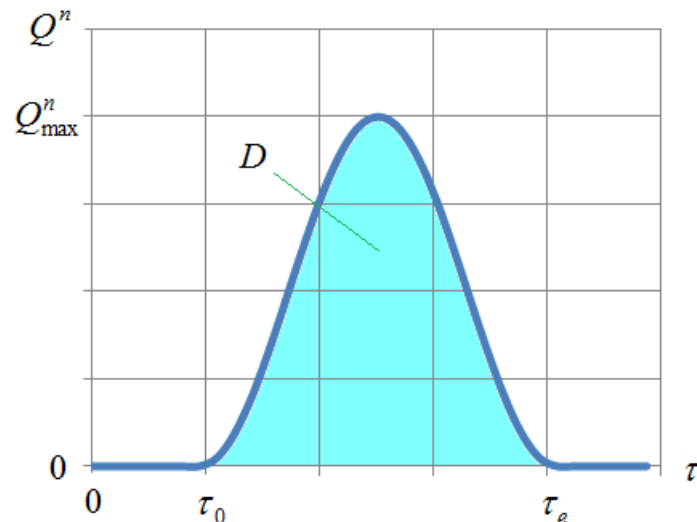


Рис. 2.19. Токсична доза інгаляційного ураження людини

Унаслідок моделювання руху токсичної газової домішки в приземному шарі атмосфери можна отримати просторово-часові функції змінення відносної масової концентрації домішки Q . Виходячи із припущення, що максимальна концентрація домішки потрапляє до легенів людини, можна обчислити інгаляційну токсичну дозу D – інтеграл за часом від масової концентрації отруйної речовини в повітрі (рис. 2.19) [22]:

$$D = \int_{\tau_0}^{\tau_e} Q^n d\tau, \quad (2.98)$$

де τ_0 і τ_e – час початку й закінчення експозиції токсичної газоповітряної суміші (час, за який накопичується інгаляційна токсична доза), с;

Q – просторово-часове значення відносної масової концентрації отруйної хімічної речовини, ppm (млн^{-1});

n – табличний коефіцієнт для отруйної хімічної речовини (див. дод. 3).

Фактором негативного впливу теплового випромінювання є густина його потоку [21], максимальне значення якої можна обчислити за результатами математичного моделювання горіння горючої газової домішки в кисні атмосферного повітря [54]:

$$q_{\max} = C_0 \left[\left(\frac{T_1}{100} \right)^4 - \left(\frac{T_2}{100} \right)^4 \right] \left(\frac{\Delta F_1}{\pi r^2} \right) \bar{p}, \quad (2.99)$$

де C_0 – коефіцієнт випромінювання полум'я, кВт/(м²·К⁴);
 T_1 – середня температура поверхні, що випромінює, К;
 T_2 – середня температура поверхні приймача випромінювання, К;
 r – відстань від поверхні випромінювання до приймача, м;
 ΔF_1 – площа поверхні випромінювання, м².

2.9.2. Детерміноване оцінювання наслідків впливу негативних факторів

Згідно з детермінованим підходом вплив негативного фактора обчислюється на основі математичної моделі, його абсолютні значення порівнюються з пороговими діапазонами допустимих значень відповідно до ступенів наслідків впливу.

Уражальний ефект вибухової ударної хвилі визначається величиною максимального надлишкового тиску у фронті хвилі ΔP_+ , яку порівнюють з пороговими значеннями для знаходження ступеня ураження (табл. 2.1) [314].

Таблиця 2.1
Порогові значення ураження

ΔP_+ , кПа	Ступінь ураження людини
< 10	Безпечне
10...40	Легке (забиття, втрата слуху)
40...60	Середнє (кровотеча, вивихи)
60...100	Важке (контузія)
> 100	Летальний наслідок

2.9.3. Імовірнісне оцінювання наслідків негативних факторів впливу

Значення максимального надлишкового тиску й імпульсу фази стиснення вибухової хвилі в кожній контрольній точці актуального простору можна використовувати для визначення індивідуального ризику ураження персоналу (руйнування споруд). Оцінювання ризику шкідливого впливу уражаючих факторів на організм людини в зоні аварії є одним з основних етапів процесу аналізу безпеки й величини загального ризику функціонування техногенного об'єкта (поряд з виявленням небезпечного обладнання, дослідженням експлуатаційних загроз, оцінюванням імовірності аварії). Визначення ризику забезпечує можливість зробити висновки про прийнятність ризику й оцінити ефективність захисних споруд і дій персоналу. Імовірність конкретного сценарію розвитку аварії P_{Σ} залежить від статистичної ймовірності виникнення такої аварії P_a та

умовної ймовірності ураження постраждалої людини P , яку можна отримати завдяки математичному моделюванню аварії:

$$P_{\Sigma} = P_a P. \quad (2.100)$$

Умовна ймовірність P шкідливого впливу ударної хвилі вибуху на людину залежить від значення пробіт-функції Pr – верхньої межі певного інтеграла нормального закону розподілу з математичним сподіванням 5 і дисперсією 1:

$$P_c = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{Pr} e^{-\frac{1}{2}(t-5)^2} dt, \quad (2.101)$$

де t – інтегральний ступінь впливу.

З іншого боку, інтегральний ступінь впливу t можна оцінити за допомогою рівняння регресії $t = a + b f(\bar{x})$, де $\bar{x} = \{x_k\}$ – кількісні показники уражальних факторів, a і b – коефіцієнти рівняння регресії. Задаючи верхню межу інтеграла (2.101) (пробіт-функція $Pr = t|_{\bar{x}}$), можна визначити умовну ймовірність ураження.

В інженерній практиці фахівці з безпеки працюють із таблицею дискретних значень інтеграла (2.101), візуально оцінюючи ймовірність для конкретного розрахованого значення пробіт-функції для певного ступеня ураження (табл. 2.2).

Таблиця 2.2

Табличні значення ймовірності наслідків впливу

$P, \%$	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
0		2,67	2,95	3,12	3,25	3,38	3,45	3,52	3,59	3,66
10	3,72	3,77	3,82	3,86	3,92	3,96	4,01	4,05	4,08	4,12
20	4,16	4,19	4,23	4,26	4,29	4,33	4,36	4,39	4,42	4,45
30	4,48	4,50	4,53	4,56	4,59	4,61	4,64	4,67	4,69	4,72
40	4,75	4,77	4,80	4,82	4,85	4,87	4,90	4,92	4,95	4,97
50	5,00	5,03	5,05	5,08	5,10	5,13	5,15	5,18	5,20	5,23
60	5,25	5,28	5,31	5,33	5,36	5,39	5,41	5,44	5,47	5,50
70	5,52	5,55	5,58	5,61	5,64	5,67	5,71	5,74	5,77	5,81
80	5,84	5,88	5,92	5,95	5,99	6,04	6,08	6,13	6,18	6,23
90	6,28	6,34	6,41	6,48	6,55	6,64	6,75	6,88	7,05	7,33
99	7,33	7,37	7,41	7,46	7,51	7,58	7,65	7,75	7,88	8,09

Візуальний пошук ймовірності ураження в таблиці є незручним і не забезпечує можливості використовувати цей апарат інтегрованим у комп'ютерній системі оцінювання техногенної безпеки. З метою автоматизації обчислювального процесу аналізу й прогнозування таблицю дискретних значень залежності «пробіт-функція – ймовірність ураження» було замінено кусково-кубічним ермітовим сплайном (рис. 2.20), узагальненим Ю. К. Чернишовим [248] для контуру лопатки.

Характеристики такого сплайну дають змогу уникнути можливих коливань апроксимованої функції в проміжках. Якщо необхідно визначити ймовірність ураження P^* у заданий момент часу в заданій комірці сітки, то виконується розрахунок параметрів для фактора впливу й пробіт-функції для цього фактора Pr^* і застосовується сплайн ймовірності.

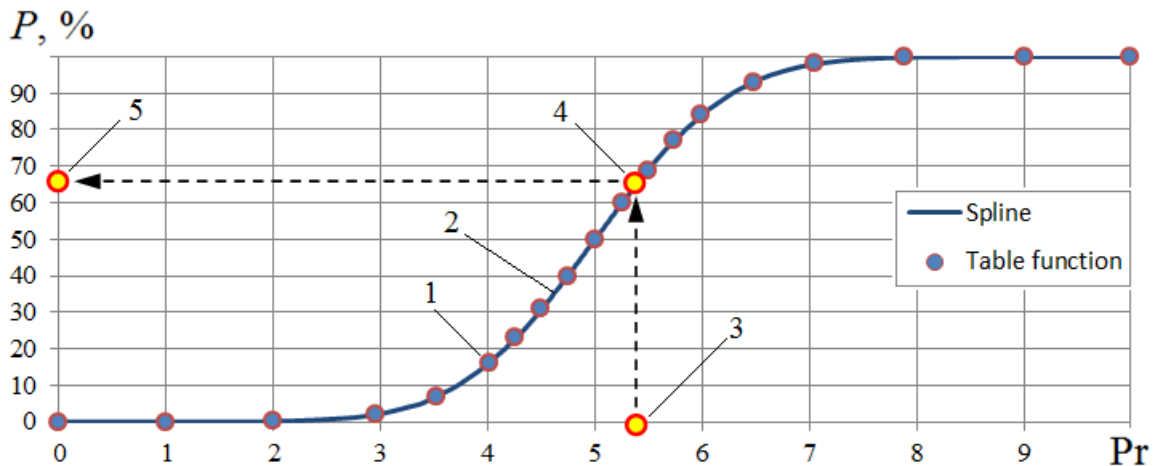


Рис. 2.20. Інтерполяція табличної залежності «пробіт-функція – умовна ймовірність ураження»: 1 – таблиця; 2 – сплайн; 3 – обчислена пробіт-функція Pr^* ; 4 – точка на сплайні; 5 – обчислена умовна ймовірність ураження P^*

Щоб визначити інтегральний ступінь впливу ударної хвилі, потребується розрахунок обох параметрів фази стиснення вибухової хвилі (див. рис. 2.18): максимального надлишкового тиску ΔP_+ у фронті хвилі й імпульсу фази стиснення I_+ . Наприклад, пробіт-функцію для летального наслідку для людини, спричиненого вибуховою ударною хвилею, можна визначити таким чином [340]:

$$Pr_1 = 5 - 0,26 \ln \left[\left(\frac{17500}{\Delta P_+} \right)^{8,4} + \left(\frac{290}{I_+} \right)^{9,3} \right]. \quad (2.102)$$

Пробіт-функція для розриву барабаних перетинок у людини залежить тільки від рівня надлишкового тиску й може бути знайдена за формулою [341]

$$Pr_2 = -15,6 + 1,93 \ln(\Delta P_+). \quad (2.103)$$

Пробіт-функція для ураження людини внаслідок впливу інгаляції смертельної токсичної дози D (2.98) отруйної хімічної речовини в загальному випадку визначається такою формулою:

$$Pr_2 = A + B \ln(D), \quad (2.104)$$

де A і B – табличні напівемпіричні коефіцієнти [313] (див. дод. 3).

Пробіт-функція для летального наслідку для персоналу внаслідок теплового впливу в загальному випадку визначається формулою [54]

$$Pr = -14 + 2,56 \ln(q^{1,33} \tau), \quad (2.105)$$

де τ – час експозиції теплового потоку.

У зазначений момент часу, маючи розраховані в математичній моделі небезпечні параметри і фактори ураження, за формулами (2.103)–(2.106) можна обчислити відповідні пробіт-функції і, використавши сплайн (див. рис. 2.20), визначити наслідки впливу відповідних факторів у вигляді значення умовної ймовірності ураження (негативного впливу).

Висновки до розділу 2

1. У роботі вперше розроблено новий клас ефективних тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними граничними умовами, які відрізняються одна від одної розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення й руху газоповітряної суміші в приземному шарі атмосфери зі складним рельєфом і в системах промислової аеродинаміки та, на відміну від наявних, базуються на запропонованому єдиному підході до моделювання актуальних процесів. Уперше розроблено:

– нестационарні математичні моделі розподілу тиску, у яких, на відміну від наявних, використовуються нелокальні початкові умови, що забезпечує можливість моделювати такі сценарії баричного збурення повітря, як «фізичний» (вивільнення стисненого газу) і «хімічний» (миттєва хімічна реакція «брутто» в області займистості) вибухи, для оцінювання наслідків впливу вибухової ударної хвилі на навколишнє середовище та ефективності засобів захисту від її дії;

– нестационарну математичну модель руху хімічно активної газоповітряної суміші зі складними граничними умовами, у якій, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовується розрахункова схема «брутто»-взаємодії пального й кисню повітря;

– нестационарну математичну модель руху хімічно активної газової суміші зі складними граничними умовами, у якій, на відміну від наявних, ураховується наявність частинок пилу й дисперсних крапель рідини у формі додаткових джерельних членів у правих частинах рівнянь руху й енергії суміші;

– нестационарну математичну модель потрапляння (відбору) газової домішки в актуальну область, у якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми.

2. Удосконалено системну методологію оцінювання змінних стану повітря, яка, на відміну від наявних, на основі отриманих за результатами

моделювання нестационарних просторових розподілів таких факторів впливу, як інгаляційна токсична доза небезпечної хімічної речовини, ударно-імпульсне навантаження у фронті вибухової хвилі та густина потоку теплового випромінювання, дає змогу оцінити наслідки впливу й прийняти рішення щодо ефективності засобів захисту навколишнього середовища.

3. Удосконалено обчислювальний метод розв'язання задачі розпаду довільного розриву параметрів газу Годунова, у якій, на відміну від оригінальної схеми, розглядається взаємодія двох газоповітряних сумішей різної масової концентрації домішок і припускається адіабатичний процес з усередненим коефіцієнтом адіабати, що забезпечує можливість використовувати оригінальні співвідношення на розриві для отримання потоків маси, імпульсу й енергії суміші внаслідок його розпаду, обчислювати інтегральні закони збереження на гранях розрахункових комірок для реалізації загального інтегрально-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для розв'язання системи інтегральних рівнянь руху суміші розрахунковим простором.

4. Удосконалено обчислювальний метод моделювання спряженого теплообміну газової суміші й твердих тіл, у якому, на відміну від наявних, використовується розв'язання зв'язної задачі теплообміну з умовами спряження у вигляді граничних умов III роду.

5. Удосконалено обчислювальний метод пробіт-аналізу наслідків впливу основних факторів (надлишкового тиску, імпульсу первинної фази стиснення вибухової ударної хвилі, густини потоку теплового випромінювання) на навколишнє середовище, у якому, на відміну від наявних, табличну залежність умовної ймовірності ураження від пробіт-функції замінено кусково-кубічним сплайном, що забезпечило зниження на порядок часової складності розробленого методу прогнозування наслідків впливу викидів техногенного об'єкта на навколишнє середовище та пошуку ефективних засобів його захисту.

6. Достовірність розроблених моделей, методів обчислення, комп'ютерних систем їх реалізації підтверджено валідацією й верифікацією з використанням показників ефективності математичних моделей на основі порівняння з результатами наявних експериментальних і розрахункових досліджень.

Розділ 3. РОЗРОБЛЕННЯ СТРУКТУРИ ПРОГРАМНОГО ЗАСОБУ КОМП'ЮТЕРНОЇ РЕАЛІЗАЦІЇ МОДЕЛІ ІНЖЕНЕРНОГО АНАЛІЗУ ПРОЦЕСІВ ВИКИДУ, РОЗСІЮВАННЯ Й ВИБУХУ ГАЗОПОДІБНИХ ДОМІШОК В АТМОСФЕРІ

У третьому розділі досліджуються стадії розроблення структури засобів прикладної інформаційної технології інженерного аналізу процесів потрапляння газової домішки в повітря й поширення її в приземному шарі

атмосфери. Наведено основні етапи узагальненого алгоритму системного моделювання руху багатокомпонентної газової суміші з урахуванням обміну теплом і масою. Розглянуто формалізоване подання й призначення CAE-системи. Описано структуру програмного засобу, основні складові технології розроблення CAE-системи. Спроектовано комп'ютерну інформаційну технологію із застосуванням IDEF-методології. Розроблено загальну контекстну діаграму IDEF0, яку деталізовано до основних функціональних процесів у IDEF0-методології. Подальшу деталізацію процесів зроблено засобами IDEF3-методології для виявлення послідовності основних робіт програмного засобу. Потіки даних в інформаційній системі проведено засобами DFD-методології. Розглянуто перспективи й поточне застосування засобів організації паралельних обчислень для прискорення розв'язання поставлених проблем дослідження. Об'єктно-орієнтовану класову ієрархію комп'ютерної системи спроектовано за допомогою мови UML засобами Rational Rose. Проведено аналіз сучасних мов програмування для реалізації інформаційної системи у вигляді програмного засобу комп'ютерної реалізації системної математичної моделі.

Проведено аналіз технологій паралелізації розрахунку. Проаналізовано особливості розробленої математичної моделі руху суміші газів з огляду на використання вбудованих у мову програмування засобів паралелізації обчислення. Розроблено алгоритм паралельного розрахунку. Розроблено й реалізовано алгоритм розбиття простору обчислення на підпростори, що обчислюються паралельно своїми робочими потоками в різних ядрах багатоядерного процесора, на прикладі руху газової суміші.

3.1. Узагальнений алгоритм системного моделювання руху сумішей з урахуванням тепломасообміну

Векторне рівняння, що є висновком законів збереження маси, імпульсу й енергії суміші, можна подати в інтегральній формі для кожної розрахункової комірки [1]

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V a dV + \oiint_{\sigma} \hat{A} d\sigma = \iiint_V \rho f dV, \quad (3.1)$$

де V – об'єм елементарної розрахункової комірки; σ – обмежувальна поверхня цієї комірки, яка має зовнішню нормаль \vec{n} ($\vec{\sigma} = \sigma \vec{n}$); \hat{A} – тензор густини потоку консервативних змінних a , стовпцями якого є відповідно вектори \vec{b} , \vec{c} , \vec{d} .

Закон перенесення кожної компоненти суміші також можна подати в інтегральній формі для кожної розрахункової комірки [1]

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho Q_i dV + \oiint_{\sigma} \rho Q_i q d\sigma = \iiint_V (\rho_{Q_{it}} + \rho_{Q_{is}}) dV. \quad (3.2)$$

Під час числового моделювання поширення газоподібних домішок в атмосфері розрахункова область Ω розбивається трьома сім'ями поверхонь зі скінченною кількістю елементарних об'ємів (обчислювальних комірок). Визначимо локацію вузлів розрахункової комірки трійкою індексів (i, j, k) , причому індекси граней комірок змінюються в таких межах: $i \in [0, L]$; $j \in [0, M]$; $k \in [0, N]$, де L, M, N – кількість обчислювальних комірок у відповідних напрямках розрахункового простору. Кожному параметру течії в комірці буде відповідати трійка півцілих чисел $(i - 1/2, j - 1/2, k - 1/2)$, а потокам маси, імпульсу й енергії крізь кожен грань – одне ціле (грань, нормаль до якої має напрямок відповідної осі) і два півцілих числа.

Згідно з методом Годунова [262, 263] для побудови різницевої схеми було застосовано інтегральні закони збереження (3.1), (3.2) до елементарного об'єму комірки з номером $(i - 1/2, j - 1/2, k - 1/2)$. Параметри суміші газів для фіксованого часу t^n усередині кожної комірки вважаються постійними, усередненими за її об'ємом. Під час обчислення відповідних поверхневих інтегралів уважали, що «великі» потокові величини на гранях є незмінними протягом кроку за часом τ і розраховуються як розв'язки задачі розпаду довільного розриву параметрів газу. Сукупність газодинамічних параметрів у всіх комірках розрахункової області в момент часу t^n є відомим розв'язком у часовому шарі з індексом n . Газодинамічні параметри в момент часу $t^{n+1} = t^n + \tau$ (у часовому шарі $n+1$) розраховувалися за допомогою застосування явних різницевих апроксимацій для співвідношень (3.1), (3.2) у межах загального інтегрально-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку [262], згідно з яким розв'язок знаходиться за такою скінченно-різницевою схемою першого порядку апроксимації з урахуванням наявності джерельних членів, що відповідають за дифузію і горіння:

$$\begin{aligned} \bar{a}_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1} = & \bar{a}_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^n - \tau \left[(\hat{A}\bar{\sigma})_{i-1, j-1/2, k-1/2} + \right. \\ & + (\hat{A}\bar{\sigma})_{i, j-1/2, k-1/2} + (\hat{A}\bar{\sigma})_{i-1/2, j-1, k-1/2} + (\hat{A}\bar{\sigma})_{i-1/2, j, k-1/2} + \\ & \left. + (\hat{A}\bar{\sigma})_{i-1/2, j-1/2, k-1} + (\hat{A}\bar{\sigma})_{i-1/2, j-1/2, k} \right] / V_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} + \tau (\rho \bar{f})_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}; \quad (3.3) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (\rho Q)_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^{n+1} = & (\rho Q)_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}^n - \tau \left[(\rho Q \bar{q}\bar{\sigma})_{i-1, j-1/2, k-1/2} + \right. \\ & + (\rho Q \bar{q}\bar{\sigma})_{i, j-1/2, k-1/2} + (\rho Q \bar{q}\bar{\sigma})_{i-1/2, j-1, k-1/2} + (\rho Q \bar{q}\bar{\sigma})_{i-1/2, j, k-1/2} + \\ & + (\rho Q \bar{q}\bar{\sigma})_{i-1/2, j-1/2, k-1} + (\rho Q \bar{q}\bar{\sigma})_{i-1/2, j-1/2, k} \left. \right] / V_{i-1/2, j-1/2, k-1/2} + \\ & + \tau (\rho_{Q_t} + \rho_{Q_s})_{i-1/2, j-1/2, k-1/2}, \quad (3.4) \end{aligned}$$

де $(\hat{A}\vec{\sigma})_{l,m} = (\hat{A}_{l,1}\alpha_m + \hat{A}_{l,2}\beta_m + \hat{A}_{l,3}\gamma_m)\sigma_m$, $l = 1...5$;

$\hat{A}_{l,i}$ – компоненти тензора \hat{A} , стовпцями якого є вектори \vec{e} , \vec{c} , \vec{d} системи рівнянь (2.1) відповідно;

$\vec{\sigma}_m = \sigma_m \vec{n}$, $\vec{n} = (\alpha, \beta, \gamma)$ – вектор одиничної нормалі до бічної грані σ_m ;

m – трійка чисел, що визначає бічну грань комірки з номером $(i - \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k - \frac{1}{2})$.

За аналогією з [262] вирази для потоків векторів і тензорів крізь бічні грані елементарного об'єму будемо називати великими параметрами, тоді як параметри течії в об'ємних розрахункових комірках – малими. Іншими словами, відповідно до рівнянь (3.3) для визначення малих величин $(\vec{a}, Q)^{n+1}$ у момент часу t^{n+1} для комірки з номером $(i - \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k - \frac{1}{2})$ необхідно знати малі величини $(\vec{a}, Q)^n$ у момент часу t^n у цій же розрахунковій комірці й великі величини цих параметрів на бічних гранях розглядуваної розрахункової комірки.

Числове розв'язання основних рівнянь ґрунтується на використанні схеми розпаду довільного розриву параметрів газу. У рівняннях (3.3), (3.4) допускається виникнення й існування поверхонь розриву трьох видів: ударних хвиль, контактних поверхонь і хвиль розрідження. Функції, що задовольняють рівнянням (3.3), (3.4), можна розглядати як узагальнені розв'язки рівнянь газової динаміки. Використання інтегральних законів збереження маси, імпульсу, енергії й концентрації газової домішки як вихідних для побудови різницевої схеми забезпечує побудову розривних розв'язків без виокремлення розривів (див. дод. 4).

На першому етапі неперервний розподіл параметрів замінюється кусково-постійними середньоінтегральними значеннями в кожній розрахунковій комірці. При цьому межі комірки є нестійкими поверхнями довільного розриву, які розпадаються на стійкі хвильові елементи: УХ, контактну поверхню й ХР. Для кожного типу такого розриву визначається кількість маси, імпульсу й енергії газоповітряної суміші, що перерізає грань між сусідніми комірками.

Стійкість скінченно-різницевої схеми забезпечується вибором величини кроку за часом τ . Для газової комірки цей крок інтегрування τ визначався з умови стійкості різницевої схеми для лінеаризованої системи рівнянь [10]

$$\tau \leq \frac{\tau_x \tau_y \tau_z}{\tau_x \tau_y + \tau_y \tau_z + \tau_x \tau_z}, \quad (3.5)$$

де τ_x , τ_y , τ_z – значення часу, за які звукові хвилі досягають відповідних

граней сусідніх комірок. На відміну від задачі встановлення, коли для кожної комірки розраховуються й використовуються свої індивідуальні часові кроки згідно з формулою (3.5), нестационарна задача, що розглядається, потребує єдиного для всіх комірок розрахункової області часового кроку, значення якого визначається як мінімальне значення серед часових кроків усіх комірок на попередньому часовому шарі.

Для твердої комірки з розмірами h_x , h_y і h_z уздовж осей координат умова стійкості скінченно-різницевої схеми має такий вигляд:

$$2a\tau \leq \frac{1}{1/h_x^2 + 1/h_y^2 + 1/h_z^2}. \quad (3.6)$$

У такому випадку безпечний з огляду на неруйнування обчислювального процесу крок за часом для явної скінченно-різницевої схеми розрахунку можна визначити зі співвідношення [12, 15]

$$\tau \leq \frac{1}{2a(1/h_x^2 + 1/h_y^2 + 1/h_z^2)}. \quad (3.7)$$

У зв'язку з тим, що крок за часом для газових комірок на порядок менше, ніж крок для «твердих» комірок, у разі нерухомої або усталеної течії газу навколо твердого тіла доцільно «заморозити» за часом параметри газу. Це забезпечує можливість знизити часові витрати на виконання розрахунку в області, яка містить не тільки газове середовище, але й багатозв'язні суцільні тверді об'єкти.

Запропонований алгоритм числового моделювання змішування й руху суміші газів описує процес поширення в просторі з часом газоподібних токсичних і вибухонебезпечних речовин у приземному шарі атмосфери, забезпечує можливість аналізувати поля температури, тиску й концентрації домішок в зазначеному об'ємі, прогнозувати зони негативного впливу на навколишнє середовище небезпечних факторів в зоні аварії.

3.2. Технологія розроблення САЕ-системи

3.2.1. *Проектування комп'ютерної системи засобами IDEF-методології*

Базовою методологією проектування сучасних інформаційних систем є методологія IDEF0 [319], мета застосування якої – визначення вимог і виокремлення функцій системи, що розробляється. За результатами використання IDEF0 виникає модель цієї системи у вигляді ієрархічно впорядкованого комплексу діаграм, зв'язаних за допомогою перехресних посилань. Найбільш важливими компонентами такої моделі є роботи у

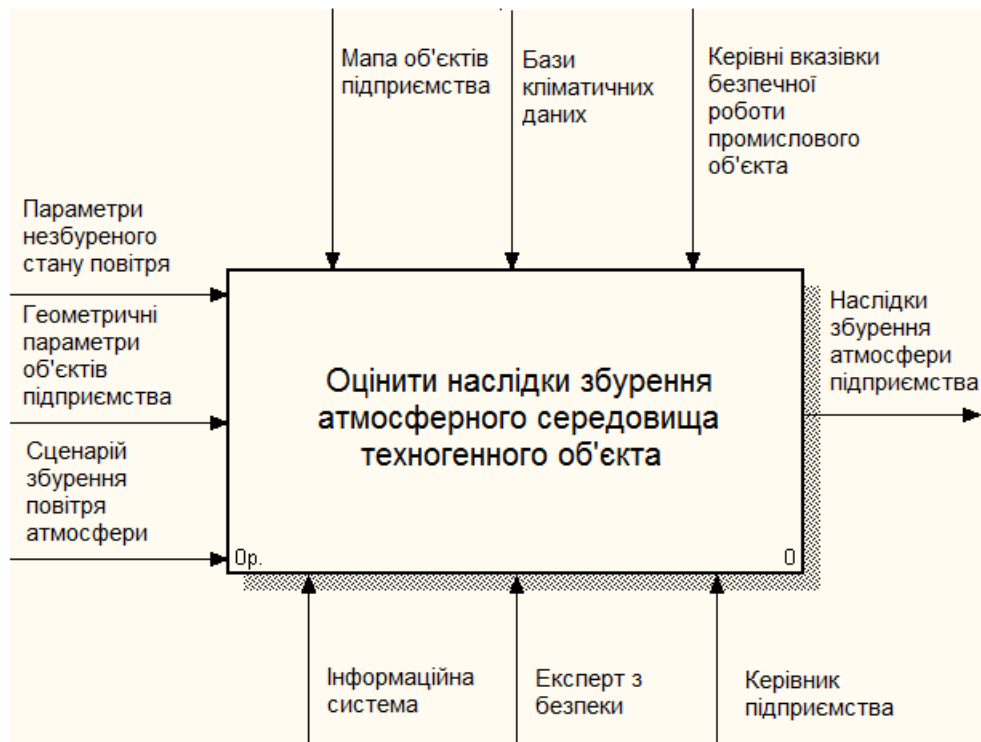
вигляді прямокутників і дані й об'єкти, зображені стрілками, що зв'язують роботи. Головна діаграма (контекстна) в ієрархії моделі відображає функціонування системи загалом (рис. 3.1, а).

До контекстного змісту першої діаграми додають загальний опис мети моделювання, області (опис того, що буде розглядатися компонентом системи й зовнішнім впливом) і точки зору, з якої будується модель. Вихідними даними для системи будуть параметри незбуреного стану повітря, геометричні характеристики непроникних для повітря об'єктів підприємства та варіант сценарію збурення навколишнього середовища. Керувальними параметрами для системи будуть карта об'єктів і рельєфу місцевості підприємства, банки кліматичних даних, нормативні документи, що регламентують безпечне функціонування техногенного об'єкта. Як механізми можна вважати саму інформаційну систему, експерта з питань безпеки й керівника техногенного об'єкта. За результатами роботи інформаційної системи експерт оцінить наслідки негативного збурення повітряного середовища й розробить рекомендації щодо підвищення рівня безпеки для керівництва підприємства. Після більш детального опису контексту застосовується функціональна декомпозиція системи на підсистеми з використанням того ж синтаксису (рис. 3.1, б). Подальшу декомпозицію системи проведемо в нотації IDEF3 (прямокутники – функції, роботи, процеси, а стрілки – послідовність виконання функцій).

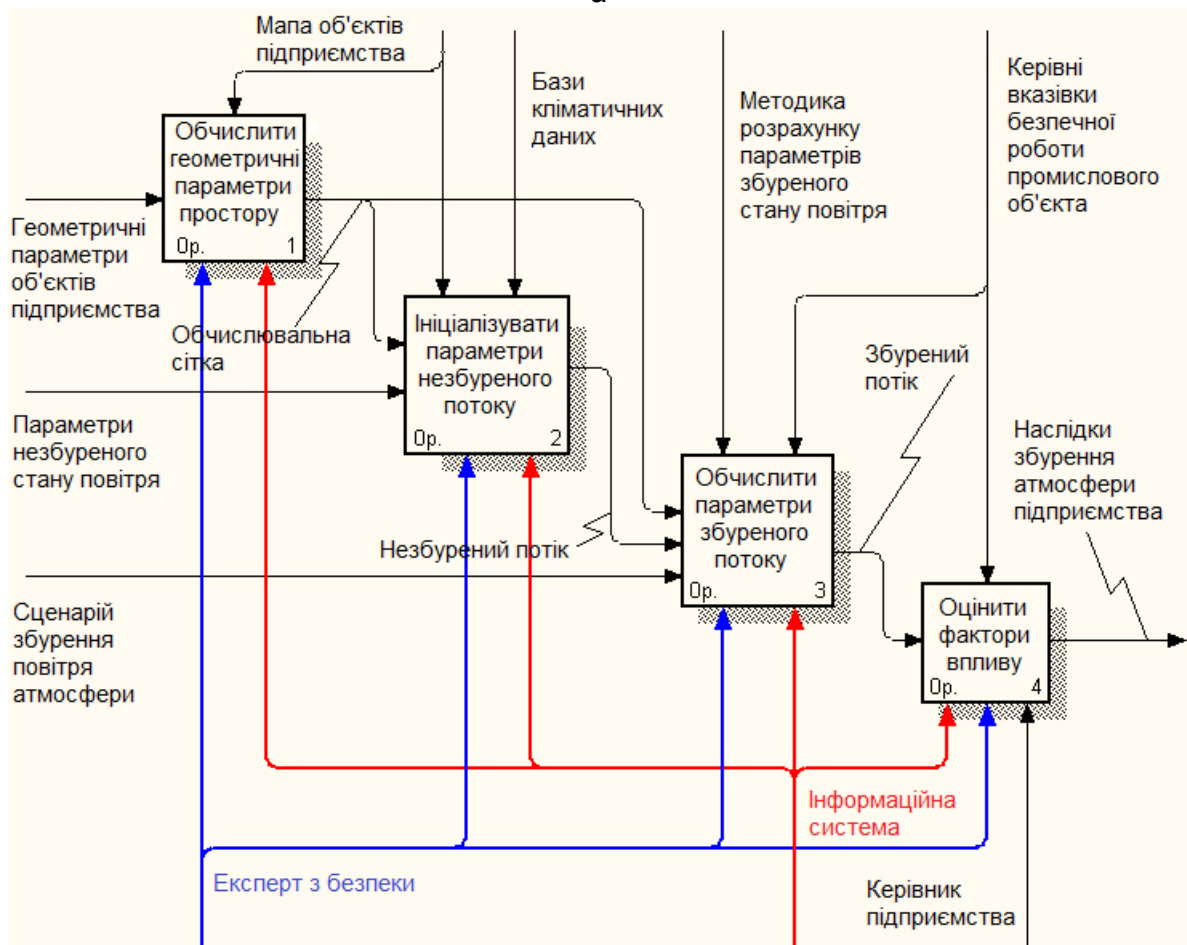
IDEF3 є засобом опису процесів з використанням структурованого методу, який дає змогу спеціалісту в предметній області репрезентувати стан речей у вигляді впорядкованої послідовності подій поряд з одночасним описом об'єктів, що мають безпосереднє відношення до процесу. Таку логічну послідовність подій, пов'язаних з розрахунком скінченно-різницевої сітки, зображено на рис. 3.2, а. Використовуючи дані, уведені експертом, та інформацію про колекцію об'єктів на мапі підприємства, проводиться рівномірна дискретизація габаритних розмірів простору вздовж напрямків тривимірної системи координат. Отримані координати формують вершини розрахункових комірок у формі паралелепіпедів.

Для кожної розрахункової комірки просторової обчислювальної сітки розраховується цілий комплекс геометричних характеристик: площі всіх плоских граней комірки та їх проєкцій на відповідні площини декартової системи координат, координати геометричного центра, об'єм. Ці параметри є незмінними під час нестационарного процесу розрахунку властивостей об'єкта індивідуальної комірки.

Логічну послідовність взаємодії інформаційних потоків, пов'язаних з ініціалізацією параметрів потоку в комірках розрахункового простору, зображено на рис. 3.2, б, більш детальний опис контексту, що стосується процесу розрахунку параметрів газоповітряної суміші, – на рис. 3.3, а, а функціональну декомпозицію процесу пробіт-аналізу – на рис. 3.3, б.

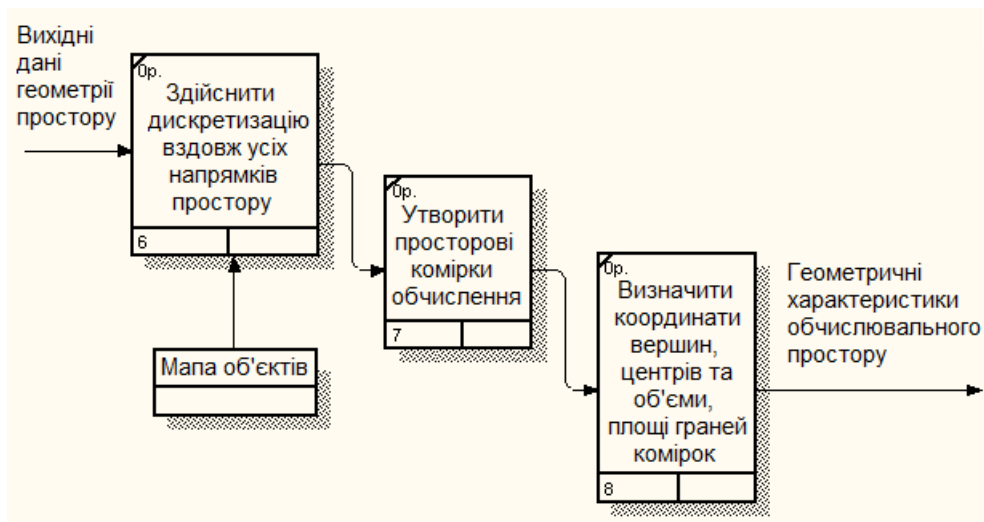


а

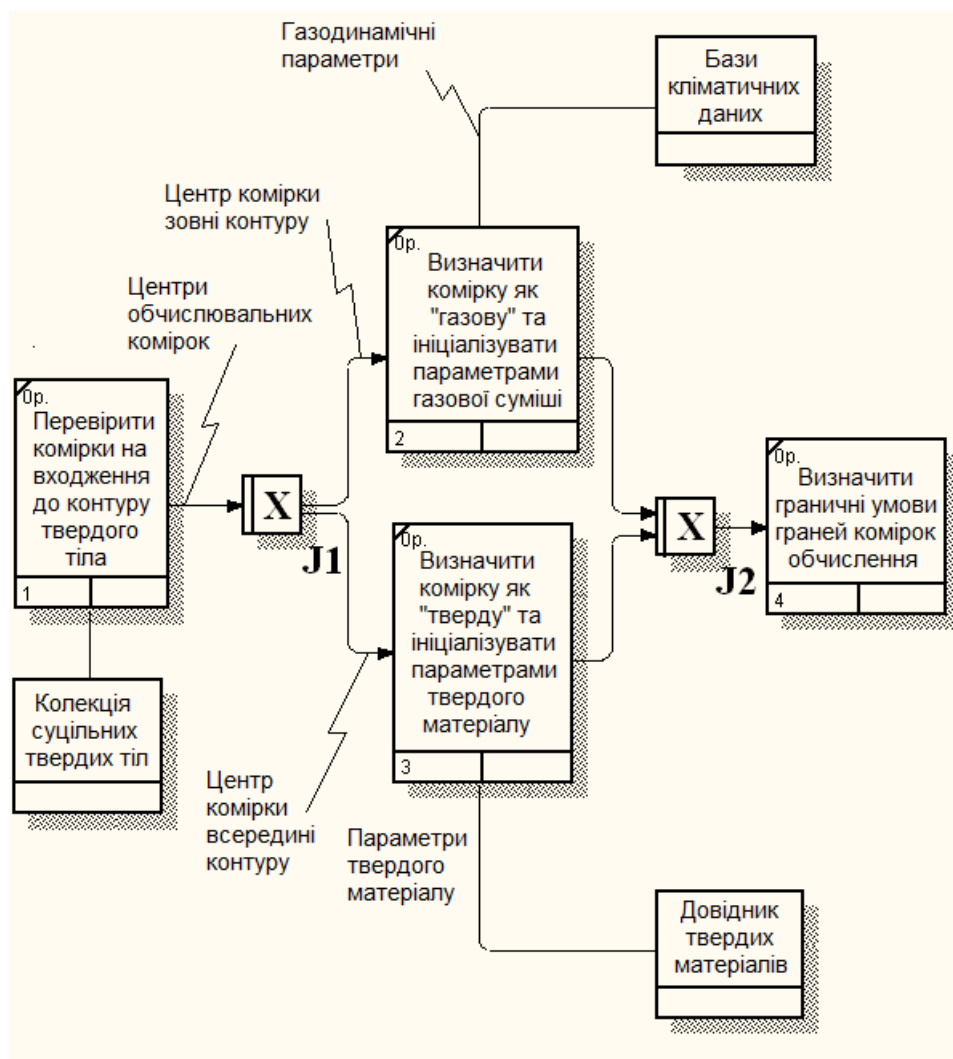


б

Рис. 3.1. Діаграми комп'ютерної системи: а – контексна діаграма IDEF0; б – діаграма IDEF0-декомпозиції системи



а



б

Рис. 3.2. Діаграми IDEF3-декомпозиції процесів: а – дискретизації розрахункової області; б – ініціалізації параметрів розрахункового простору

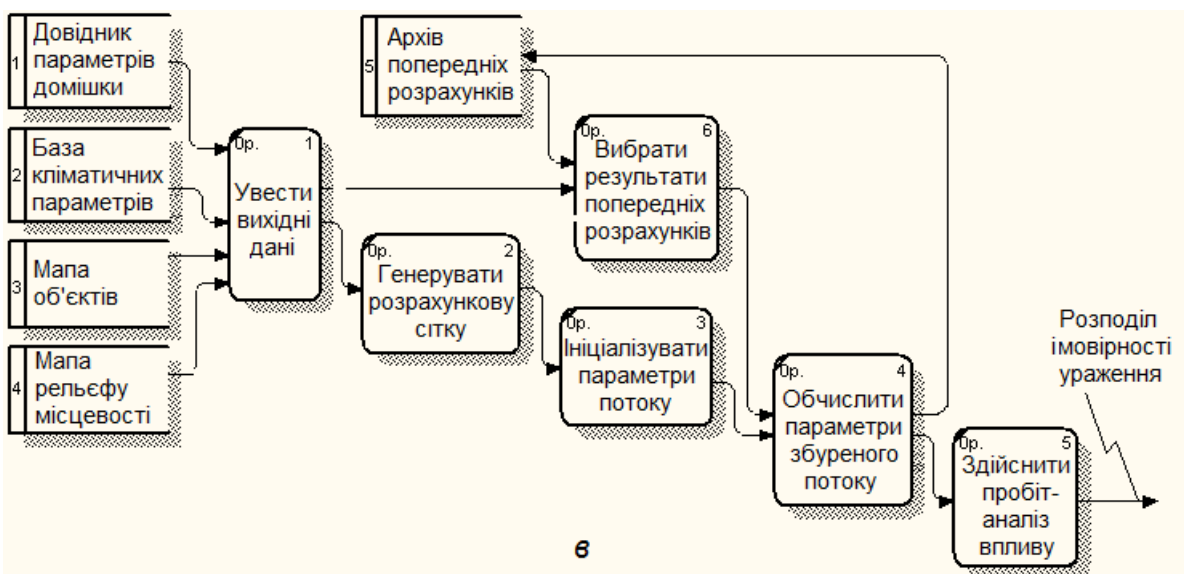
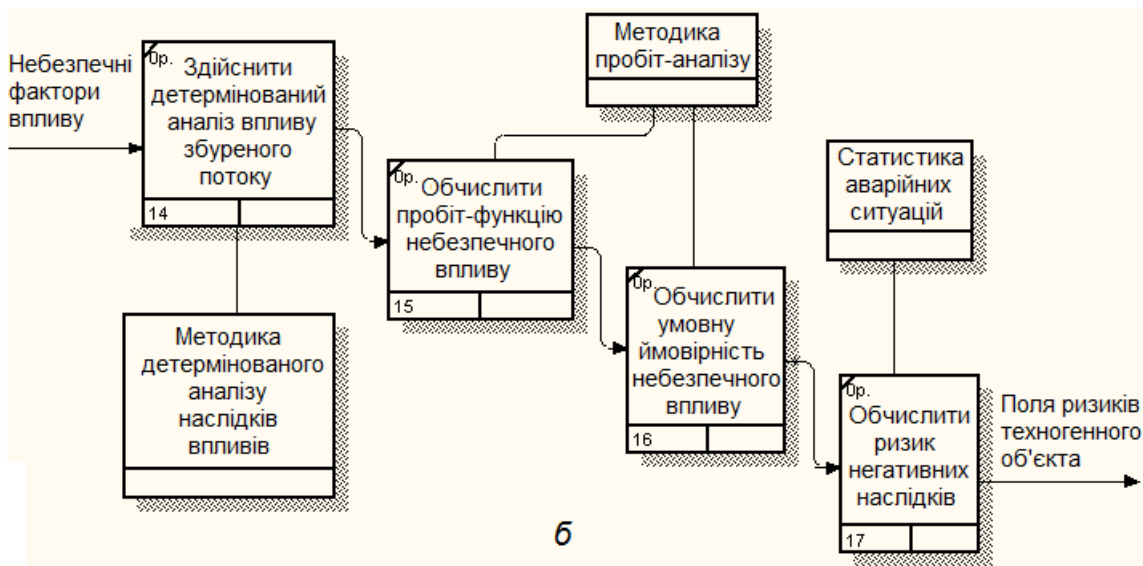
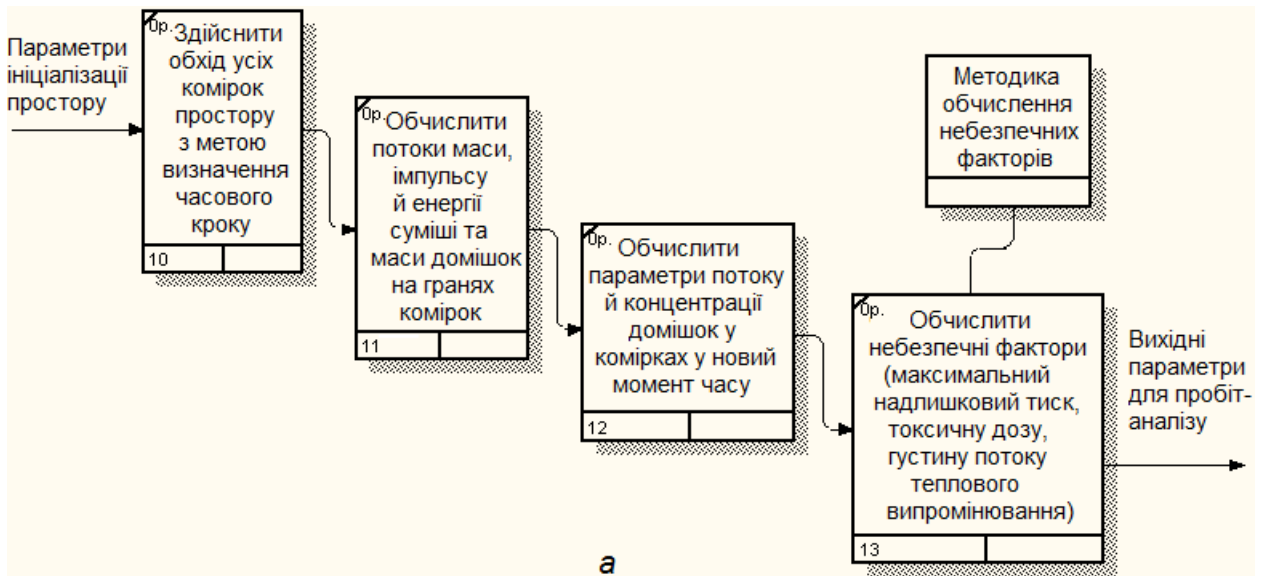


Рис. 3.3. Діаграми IDEF3-декомпозиції: а – процесу розрахунку параметрів газоповітряної суміші; б – пробіт-аналізу; в – потоків даних у системі

З метою документування механізмів трансферу й оброблення інформації в комп'ютерній інформаційній системі, що розробляється, використаємо діаграму потоків даних DFD (Data Flow Diagrams) (рис. 3.3, в). Діаграма DFD зазвичай є органічним доповненням моделі бізнес-процесів, яку виконано в нотації IDEF0. Роботами в нотації DFD будуть процеси, які обробляють і змінюють інформацію, стрілки від об'єкта-джерела до об'єкта-приймача відображають інформаційні потоки в комп'ютерній інформаційній системі, репозитарій (сховище) даних репрезентують основні дані, до яких здійснюється доступ і які можуть утворюватися або змінюватися роботами.

3.2.2. Проектування комп'ютерної системи засобами Rational Rose

За результатами аналізу розроблених математичних моделей і методу обчислення скористаємося системою позначень або нотацією уніфікованої мови моделювання UML.

Уніфікована мова UML дає змогу виражати й фіксувати ідеї, роздуми над архітектурою майбутнього додатка й поведженням комп'ютерної системи, що виникають під час аналізу. UML є системою позначень, яку можна застосовувати для об'єктно-орієнтованого аналізу й проектування [315]. UML використано для візуалізації, специфікації, конструювання й документування програмних продуктів комп'ютерних систем.

Зазвичай модель UML визначає комплекс таких графічних діаграм:

- діаграми варіантів використання (класів);
- діаграми опису поведження (стану, активності);
- діаграми взаємодії (послідовності, кооперації);
- діаграми реалізації (компонентів, топології, розгортання).

Під час аналізу й розроблення цей комплекс діаграм дає множинне уявлення про види системи, що проєктується. Модель UML інтегрує всі ці види таким чином, що внутрішньоузгоджену комп'ютерну інформаційну систему можна проаналізувати й побудувати.

3.2.2.1. Побудова діаграми варіантів використання

Діаграми варіантів використання є послідовністю дій, які виконуються системою у відповідь на подію, що ініціюється зовнішнім об'єктом (дійовою особою – користувачем).

Варіанти використання подають типову взаємодію між користувачем і системою, описують, що повинна буде робити система. Однак, щоб фактично розробити систему, належить подати більш конкретні деталі, які описуються в документі «потоків подій». Основною метою потоку подій є документування процесу оброблення даних, реалізованого в межах

варіанта використання. Цей документ детально описує як дії користувача системи, так і дії самої системи. Хоча потік подій і описується докладно, він також не повинен залежати від реалізації, оскільки його метою є опис того, що буде робити система, а не як вона буде робити це.

Зазвичай потік подій містить таке: стислий опис, передумови, основний потік подій, альтернативний потік подій і післяумови.

Після аналізу предметної області було виявлено єдиного актора «інженера», який є можливим користувачем системи й має повні привілеї на запуск програми на виконання й змінення вихідних і поточних даних.

Також було виокремлено певні варіанти використання.

1. Прецедент «Увести вихідні дані».

Передумовою є факт попереднього запуску додатка на виконання.

Розглядаються такі потоки:

а) основний (інженер стає об'єктом запиту на значення вихідних параметрів розрахунку, які він має ввести у відповідні вікна редагування додатка);

б) альтернативний (у випадку некоректного заповнення якогось поля введення даних виводиться відповідне повідомлення про необхідність повторного введення даних).

Післяумовою є факт коректного введення всіх вихідних параметрів, необхідних для початку розрахунку.

2. Прецедент «Розрахунок параметрів потоку» є основним обчисленням параметрів збуреного потоку суміші за математичною моделлю, яке відповідає варіанту набору введених даних.

Передумовами є факт уведення всіх даних і вибір типу розрахунку – передбаченого можливого сценарію розвитку ситуації в актуальному просторі приземного шару атмосфери.

Розглядаються такі потоки:

а) основний 1 – базовий розрахунок основних параметрів потоку згідно з математичною моделлю руху суміші в просторі;

б) потоки помилок – збій у роботі додатка (виводиться повідомлення про виключну ситуацію й оброблення виключення).

Післяумовою є виконання певної за часом частини обчислення.

3. Прецедент «Розрахунок імовірності наслідків» є обчисленням показників імовірних наслідків впливу параметрів збуреного потоку суміші на людину й споруди на основі пробіт-аналізу.

Передумовою є накопичення інформації про інтегральні за часом значення основних факторів впливу на стан навколишнього середовища в актуальному просторі приземного шару атмосфери.

Розглядаються такі потоки:

а) основний 1 – базовий розрахунок пробіт-функції для наслідків можливого негативного впливу відповідних факторів згідно з формулами пробіт-аналізу;

б) основний 2 – обчислення умовної ймовірності можливих наслідків

впливу на навколишнє середовище на основі пробіт-функцій, отриманих в основному потоці 1;

в) потоки помилок – збій у роботі додатка (виводиться повідомлення про виключну ситуацію й оброблення виключення).

Післяумовою є виконання певної за часом частини обчислення.

Діаграму використання для цього проєкту зображено на рис. 3.4, а.

3.2.2.2. Побудова діаграми діяльності

Варіанти використання лише починають описувати, що повинна буде робити система. Фактичне розроблення системи, однак, потребує більш детальної конкретизації. Діаграми варіантів використання є відображенням лише набору функцій комп'ютерної системи, але послідовність їх виконання залишається невизначеною. З метою подання процесів взаємодії користувачів з системою розробникам треба застосовувати діаграми діяльності, що відображають взаємний зв'язок і порядок виконання функцій системи, яка проєктується (рис. 3.4, б, в).

3.2.2.3. Побудова діаграми класів системи

Діаграма класів є основною ланкою об'єктно-орієнтованих методів проєктування сучасного додатка, призначеного для обчислення руху газових сумішей в атмосфері. Діаграма класів визначає типи класів системи й різного роду статичні зв'язки, що поєднують їх. Діаграма класів є тим місцем, де відображено атрибути класів, операції класів і обмеження доступу, які накладаються на зв'язки між класами. Діаграма класів відображає взаємодію між класами.

Класи можна розглядати як типи користувача об'єктів. Згідно з принципом інкапсуляції класи містять змінні, які описують поточний стан об'єкта й функції (методи), що відображають його поведінку. Діаграма класів засобами таких CASE-інструментів, як середовище Rational Rose, може бути основою для побудови реального коду додатка – його каркасу. У подальшому цей каркас додатка заповнюється розробниками реалізацією конкретних обчислень вибраною мовою програмування. Користуючись діаграмою класів, аналітики можуть показати конкретні деталі системи, а архітектори – зрозуміти її на стадії проєктування. Діаграма класів допоможе виявити незбалансованість функціонального навантаження між класами й перерозподілити його оптимальним чином.

Відсутність зв'язків на діаграмі також виявить недоліки проєктування. Діаграма класів покаже класи у взаємодії під час будь-якого використання.

Існують три різні точки зору на побудову діаграм класів:

– концептуальна (діаграми класів будуть відображати поняття досліджуваної предметної області);

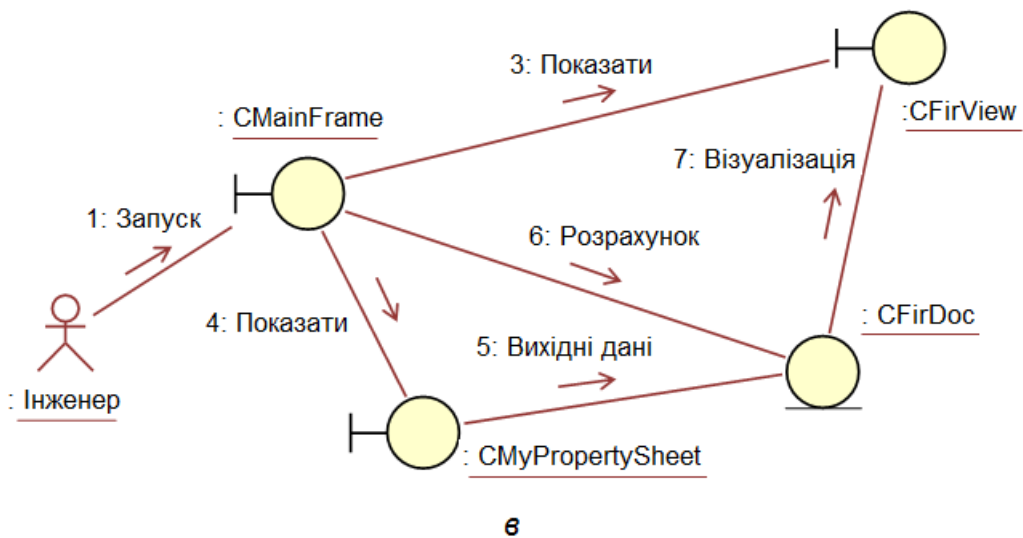
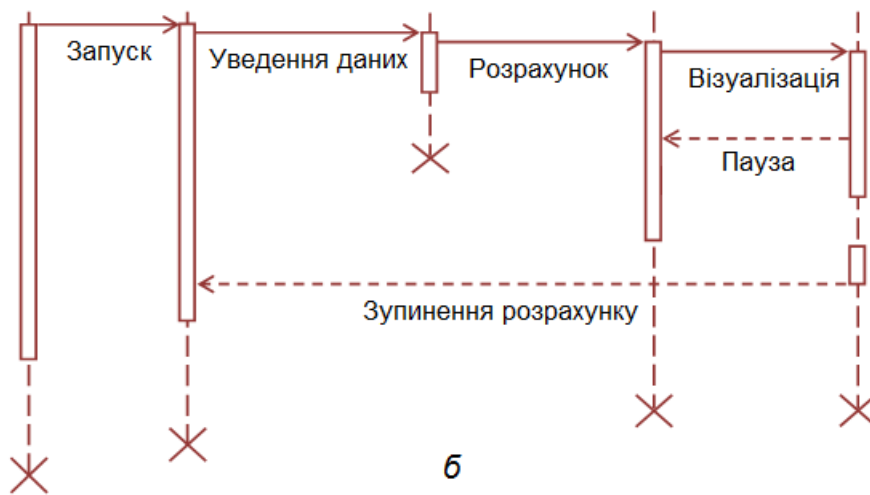
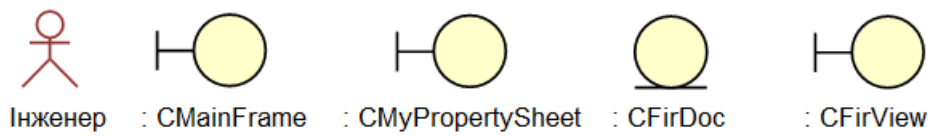
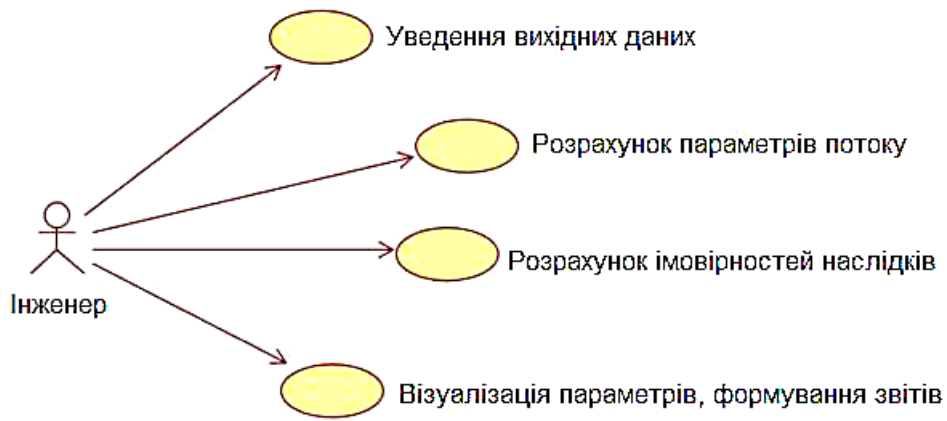


Рис. 3.4. Діаграми системи: а – використання; б – послідовності подій (пунктир – лінія життя; смуга – подія на лінії життя); в – кооперативна діаграма взаємодії

- специфікаційна (на рівні програмного забезпечення розглядаються тільки інтерфейси без програмної реалізації);
- реалізаційна (модель визначає реалізацію класів).

Під час побудови діаграми точка зору має бути ясною і єдиною. Відповідно до цієї вимоги будемо дотримуватися специфікаційної точки зору, маючи функціональну таблицю можливостей кожного класу. З іншого боку, побудова діаграми класів на стадії формування вимог до програмного засобу комп'ютерної реалізації має виконуватися з концептуальної точки зору, оскільки треба визначити класи, які будуть розв'язувати математичну модель, вводити вихідні й початкові дані, візуалізувати проміжні та фінальні результати обчислення, контролювати хід виконання й координувати функціонування всіх класів додатка.

Не уникнути часткової відповідності й реалізаційної точки зору, тому що технологія реалізації додатка потребує конкретної структури класів, тим паче що конструкції UML можна використовувати з будь-якою з трьох точок зору.

Зазвичай класи поділяються на категорії із використанням спеціального механізму стереотипів. Мова UML визначає три основні стереотипи класів: примежові (класи, що межують між системою й навколишнім середовищем), сутнісні (класи, що містять постійну інформацію) і керувальні (класи, що відповідають за координацію дій інших класів).

Попередньо маючи на увазі застосування технології Майкрософт «Документ-Вигляд» та однодокументного шаблона додатка й базуючись на вибраній змішаній точці зору проєктування, під час аналізу предметної області виявили такі основні класи [347]:

1. «Додаток» (CFirApp), що забезпечує базову функціональність об'єкта, побудованого на однодокументному шаблоні за технологією «Документ-Вигляд», який координує роботу класів Документа (CFirDoc), Виду (CFirView) і головного вікна додатка (CMainFrame). Клас є похідним від класу CApp стандартної бібліотеки класів MFC (Microsoft Foundation Classes).

2. «Головна рамка» (CMainFrame), що забезпечує функціонування інтерфейсу користувача (меню команд, панель інструментальних кнопок, вікно Виду для візуалізації). Є похідним від класу CFrame бібліотеки MFC.

3. «Вихідні дані» (CMyPropertySheet), що описує всі вихідні дані (параметри потоку й розрахункової області), необхідні для початку розрахунку. Успадковує клас CPropertySheet бібліотеки MFC, що забезпечує можливості введення вихідних даних, які є функціонально згрупованими й містяться на окремих сторінках властивостей.

4. «Розрахунок» (CFirDoc), що є класом Документа, який реалізує алгоритм основного розрахунку й зберігає основні параметри потоку й розрахункової області. Успадковує базову функціональність класу CDocument бібліотеки MFC.

5. «Візуалізація» (CFirView) є класом Виду, який за технологією Microsoft реалізує відображення результатів основного розрахунку (поля параметрів, графіки) у своєму єдиному вікні «Головної рамки». Успадковує клас CView бібліотеки MFC. Загальну діаграму класів проєкту показано на рис. 3.5, а.

6. «Вихідні дані» (CMyPropertySheet) є класом, який репрезентує групу сторінок для введення вихідних даних. Він виконується після команд класу CFirDoc або CFirView із застосуванням графічного інтерфейсу у вікні CMainFrame.

Група «Алгоритм» є уособленням класу Документа CFirDoc, що відповідає за розрахунок і зберігання важливих даних математичної моделі. Групу «Результати розрахунку» представлено безпосередньо класами Документа CFirDoc, який містить усі масиви параметрів потоку й серіалізує дані на диск, і Виду CFirView, що виводить поля й графіки параметрів потоку в своє вікно.

Опис основних класів зі специфікаційної, частково концептуальної і реалізаційної точок зору зображено на рис. 3.5, б.

Маючи на увазі загальний хід комп'ютерної реалізації математичної моделі із застосуванням явного за часом методу обчислення, розробили загальний алгоритм розрахунку, який показано на рис. 3.5, в. Він фактично відображає діаграму станів системи й визначає всі основні можливі стани, у яких перебувають об'єкти класів після деяких подій у системі. Переважно ця діаграма стосується поводження класу Документа.

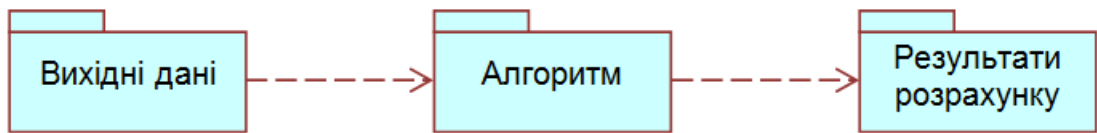
3.2.2.4. Вибір мови програмування

Під час вибору мови програмування було взято до уваги необхідність об'єктно-орієнтованого підходу до розроблення програмного забезпечення, а також підтримку мови популярними інтегрованими середовищами програмування, вимоги замовників, відповідність мови паралелізації обчислення тощо. Якщо розглянути статистику використання мов програмування останніми роками (рис. 3.6) і результати опитування програмістів про рівень їх задоволеності вибраною мовою програмування (рис. 3.7), то стає зрозумілим, що найбільш популярними є Java і C-подібні об'єктно-орієнтовані мови програмування [316].

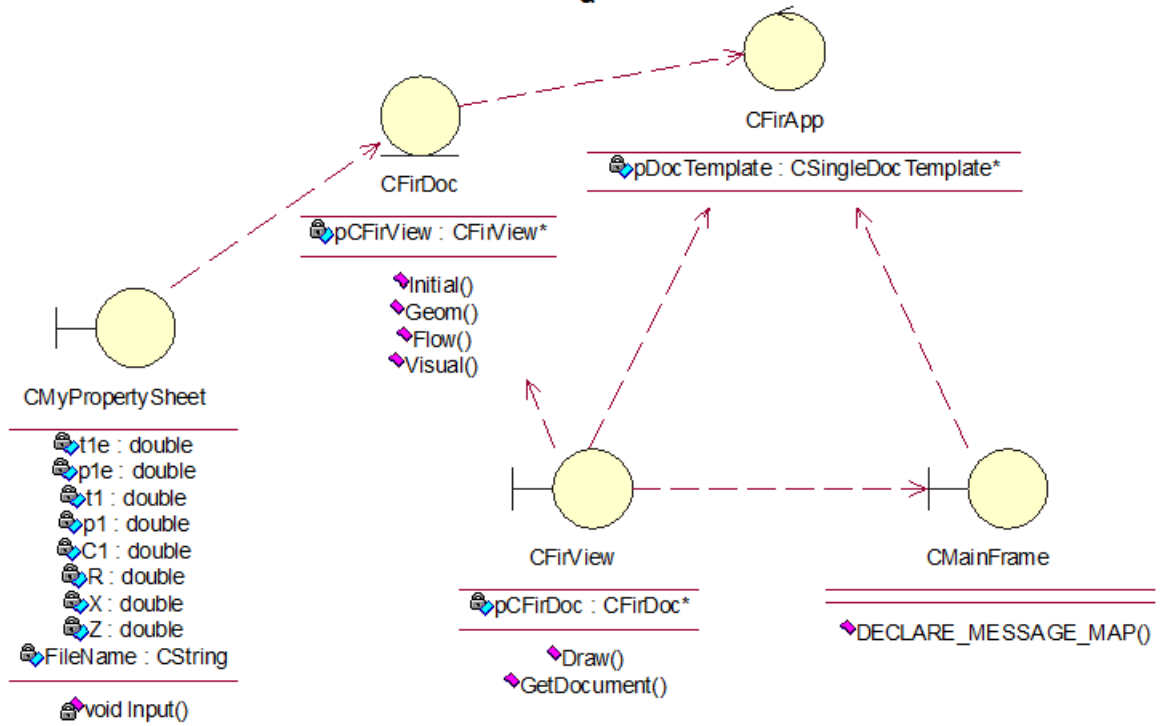
Виходячи з огляду найбільш поширених і популярних серед програмістів мов і зважаючи на специфіку математичної моделі фізичних процесів, що розглядаються, виявили багато переваг мови C++.

1. Якщо інфраструктуру проєкту вже утворено, основні підходи й бібліотеки вибрано, то швидкість розроблення мовою C++ є майже такою самою, що й популярними Java і C#.

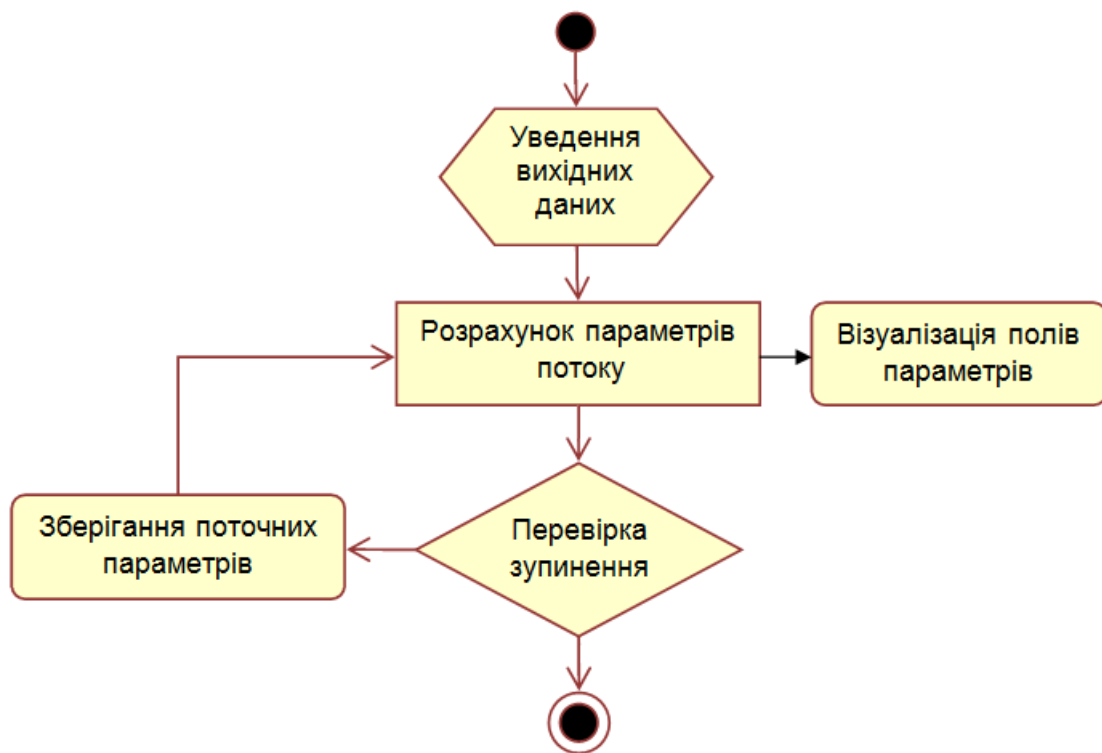
2. Фундаментальні переваги C++ криються в можливостях писати код для виконання безпосередньо процесором і прямого доступу до пам'яті.



a



б



в

Рис. 3.5. Діаграми додатка: а – загальна; б – класів; в – станів

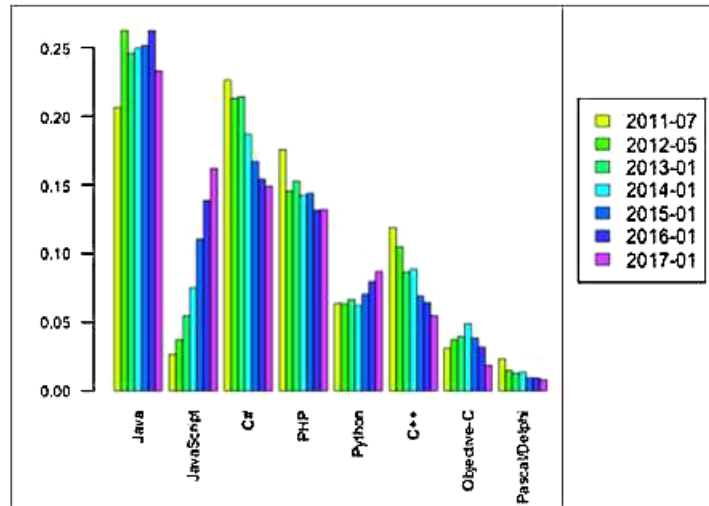


Рис. 3.6. Рейтинг використання мов програмування

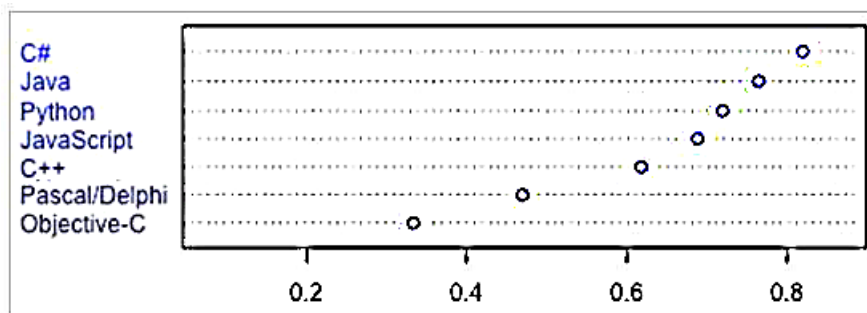


Рис. 3.7. Діаграма задоволеності мовами програмування

3. Зручність налаштування коду в середовищі Microsoft Visual Studio.
 4. Синтаксис C++ традиційно вважається простим і лаконічним.
 5. Система проектування програмного забезпечення Rational Rose може безпосередньо утворювати каркас додатка мовою C++ за результатами проектування.
 6. Найбільш відомі й популярні системи інженерного аналізу руху газових сумішей в атмосфері (наприклад, FLUENT) дають можливість користувачеві робити додаткові вставки коду C++.
 7. Є можливість використання технології архітектури Microsoft «Документ-Вигляд» із застосуванням бібліотеки основних класів MFC.
- Зважаючи на перелічені переваги, було вирішено вибрати мову програмування Visual C++ [348].

3.3. Організація паралельних обчислень нестационарних задач газової динаміки

Існує безліч задач, розв'язання яких потребує величезних витрат часових ресурсів процесора електронно-обчислювальної техніки. До таких

задач належать і нестационарні тривимірні задачі газової динаміки, зокрема задачі екології атмосфери, у яких розглядаються процеси формування, подальшого розсіювання й горіння газових домішок у приземному шарі атмосфери з урахуванням складного рельєфу місцевості, що виникають унаслідок техногенних аварій (пролиття зрідженого токсичного газу з посудини для зберігання та його випаровування, залповий викид стисненого газу внаслідок руйнування балонів високого тиску, вибух пального з утворенням токсичної хмари тощо). Унаслідок того, що процес розрахунку є досить тривалим, виникає необхідність скоротити його будь-яким чином для розв'язання поставленої інженерної задачі в практично прийнятні терміни. Одним із засобів зменшення витрат часу на обчислювальний експеримент є організація паралельних обчислень. У цій роботі було розроблено ефективний алгоритм паралельного розрахунку нестационарних задач газової динаміки й реалізовано його щодо математичної моделі процесу розсіювання домішкових газів в атмосфері.

3.3.1. Аналіз технологій розпаралелення розрахунку

Вибір технології паралельного розрахунку багато в чому визначається наявними апаратними засобами (локальний багатопроцесорний комп'ютер, локальний комп'ютер із багатоядерним процесором, локальна комп'ютерна мережа одноядерних комп'ютерів та ін.). Тепер здебільшого для розв'язання задач великої розмірності, що потребують істотних часових ресурсів, використовують локальні комп'ютерні мережі із застосуванням процедурної блокувальної синхронної технології розподілених обчислень RPC (Remote Procedure Call) [27], згідно з якою виклик віддалених програм є подібним до викликів функцій мовою C, а пересилання даних здійснюється на основі транспортних протоколів TCP (Transmission Control Protocol) або UDP (User Datagram Protocol) єдиним форматом обміну XDR (XML-Data Reduced) [297].

Однак розподіл обчислювального навантаження на окремі комп'ютери мережі потребує додаткових зусиль з синхронізації виконуваних розрахунків у клієнтській частині програми й неминуче пов'язаний з проблемами передавання великих обсягів інформації між серверами й клієнтами під час поділу загальних даних. Цих недоліків не мають підходи, пов'язані з використанням багатопроцесорних комп'ютерів [298], оскільки загальні дані розташовуються в єдиній оперативній пам'яті і немає передавання мережею. Але такого роду високопродуктивна обчислювальна техніка (мультикомп'ютери Silicon Graphics, Cray T3D, Cray T3E, IBM SP2 тощо) усе ще є надзвичайно дорогою й не має широкого застосування в інженерній практиці більшості науково-технічних організацій і навчальних закладів [14, 27].

Найбільш популярними зараз є системи паралельного програмування на основі передавання повідомлень MPI [299], ідея яких передбачає презентацію паралельної програми у вигляді множини процесів (програми процесів зазвичай запрограмовані з використанням послідовних мов С або Фортран), які паралельно виконуються й взаємодіють між собою під час виконання за допомогою комунікаційних процедур, що й становлять бібліотеку MPI. Однак такого роду бібліотеки не належать до ядра мов програмування і є програмним продуктом сторонніх розробників, що ускладнює створення паралельних програм. Крім того, сама реалізація бібліотек MPI є досить складною й потребує мистецтва для досягнення високої продуктивності програм.

Після випуску .NET 4.0 у розпорядженні розробника з'явився цілий набір інструментів паралельного програмування (клас Parallel, паралельні конструкції задач, паралельні колекції), який називають PFX (Parallel Framework) [300]. Клас Parallel і паралельні конструкції являють собою бібліотеку TPL (Task Parallel Library), яка належить до ядра мови програмування Visual C# (версії 4.0 і пізніше). Загальна схема будовання паралельного додатка полягає в такому (рис. 3.8):

- розбиття обчислювального навантаження на частини;
- виконання цих частин паралельно за допомогою потоків;
- об'єднання результатів після того, як вони стають доступними, з урахуванням безпеки потоків.

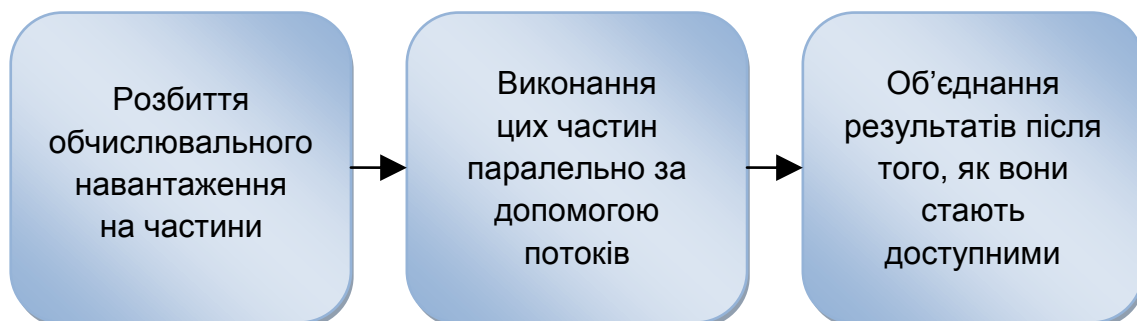


Рис. 3.8. Загальна схема побудови паралельного додатка

З огляду на вимоги тривимірного розрахунку задачі газової динаміки, а також урахування таких переваг багатопотокового програмування з використанням інфраструктури PFX, як вбудованість основних інструментів у ядро мови програмування C#, полегшені можливості з синхронізації потоків і розподілу даних, можливість реалізувати цю технологію на персональних комп'ютерах із багатоядерними процесорами, які набувають все більшого поширення, зробили висновок про необхідність застосування багатозадачної технології із застосуванням засобів бібліотеки TPL як найбільш придатної для розв'язання поставленої прикладної задачі.

3.3.2. Особливості математичної моделі руху суміші газів щодо паралелізації розрахунку

Для порівняльного обчислювального експерименту, що дає змогу оцінити ефективність розробленої технології паралельного розрахунку, використовується математична модель формування й розсіювання газоповітряної суміші в приземному шарі атмосфери [33]. Передбачається, що основним фактором, який впливає на розглянуті фізичні процеси, є конвективне перенесення маси, імпульсу й енергії. Використовуються спрощені рівняння Нав'є – Стокса, отримані відкиданням в'язких членів у рівняннях руху газової суміші (ейлерів підхід з джерельними членами).

Розрахункова область є паралелепіпедом, який розташований у правій декартовій системі координат (рис. 3.9) і рівномірно подрібнений на просторові комірки, розміри яких визначаються масштабом характерних особливостей області. Розіб'ємо розрахункову область на декілька підобластей, а роботу з розрахунку течії домішки в окремих підобластях розподілимо між об'єктами задач [14, 20].

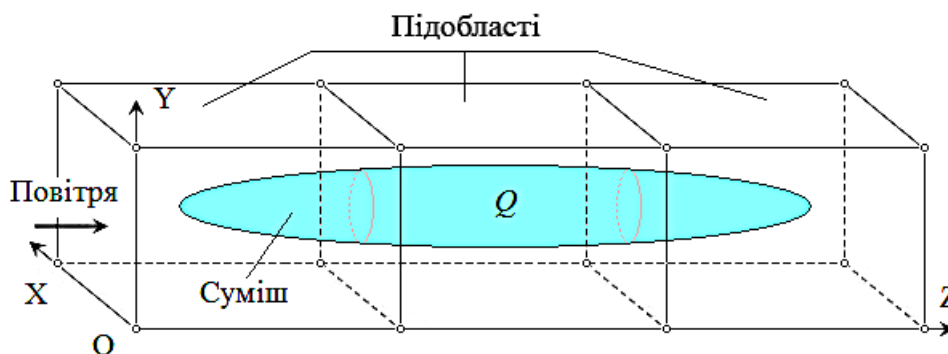


Рис. 3.9. Схема розподілу обчислювального простору на підобласті

Комп'ютерне розв'язання системи фундаментальних рівнянь газової динаміки для суміші, доповненої законами збереження маси домішок в інтегральній формі, отримується явним інтегрально-інтерполяційним обчислювальним методом наскрізного розрахунку [262]. Для апроксимації рівнянь Ейлера застосовується скінченно-об'ємна схема першого порядку. Центральні різниці другого порядку використовуються для дифузійних джерельних членів у рівняннях збереження домішок. Проста інтерполяція тиску застосовується у вертикальному напрямку. Модифікований метод Годунова характеризується робастним алгоритмом, стійким до великих збурень параметрів потоку (наприклад, тиску).

3.3.3. Алгоритм паралельного розрахунку

Потоки маси, імпульсу, енергії і концентрації домішки крізь спільні грані підобластей є розподіленими даними читання-запису, тому, щоб

уникнути проблем із синхронізацією, будемо обчислювати ці дані незалежно для кожної підобласті з урахуванням невеликої втрати ефективності алгоритму. У цьому випадку спільними даними читання є газодинамічні параметри в комітках, які прилягають до меж між підобластями, і синхронізація для доступу до них не потрібна.

Розподілений між підобластями є також глобальний крок за часом, що розраховується як мінімальний по всій області для забезпечення стійкості нестационарного розрахунку. Щоб уникнути можливих проблем із синхронізацією доступу читання-запису до кроку за часом, пропонується в кожній підобласті використовувати попередньо розрахований глобальний крок за часом, обчислювати локальні для підобластей мінімальні кроки за часом, найменший із яких визначається після об'єднання обчислювальних потоків на цьому часовому шарі.

З урахуванням припущень і спрощень загальний алгоритм нестационарного розрахунку руху газу в глобальній розрахунковій області можна подати у вигляді таких формальних блоків (див. дод. 5):

- розрахунок геометричних параметрів глобальної сітки, причому кількість коміток уздовж осі OZ має бути кратною кількості підобластей KML;

- ініціалізація газодинамічних параметрів глобальної сітки;

- створення масиву MinTimeSteps мінімальних кроків за часом для кожної з KML-підобластей (у початковий момент часу глобальний крок за часом dt дорівнює 0):

```
MinTimeSteps = new double[KML];
```

- запуск основного циклу за часом t до закінчення заданого часу розрахунку TimeStop:

```
while (t < TimeStop) {...};
```

- формування й запуск задач для паралельного розрахунку течії у поточний момент часу в кожній nm -й підобласті з наявних KML-підобластей за допомогою паралельного циклу Parallel.For з бібліотеки TPL. Тілом кожної задачі є виклик функції FlowSubDomain(), яка приймає додатково як параметри крок за часом dt , поточний час t , діапазон коміток L1-L2 поточної підобласті вздовж осі OZ:

```
Parallel.For(0, KML, nm => { MinTimeSteps[nm] = FlowSubDomain(dt, t, L1, L2, nm); });
```

- визначення нового мінімального глобального кроку за часом (kfl – заданий коефіцієнт Куранта (коефіцієнт запасу за часом), FindMinDT() – функція, що визначає глобальне мінімальне значення в масиві MinTimeSteps мінімальних кроків за часом для кожної з KML-підобластей):

```
dt = kfl * FindMinDT();
```

- перехід на новий часовий шар t у всій розрахунковій області:

```
t = t + dt;
```

- завершення основного циклу за часом t (заданий час закінчення розрахунку TimeStop мінув);
- виведення результатівних газодинамічних параметрів розрахунку.

3.3.4. Апробація розробленої технології паралельного розрахунку

Запропонований алгоритм реалізовано у вигляді програми розрахунку мовою C#. Тестування аплікації й аналіз ефективності паралельного алгоритму проводились з використанням чотириядерного процесора для прикладу розсіювання сферичної хмари водню радіусом 4 м з координатами центра $x = 5$ м, $y = 5$ м, $z = 10,5$ м у розрахунковій області з габаритами $10 \times 10 \times 180$ м і двома варіантами за кількістю обчислювальних комірок уздовж координатних осей $10 \times 10 \times 180$ і $10 \times 10 \times 300$. Час розсіювання дорівнював 10 с, а швидкість вітру на вході в розрахункову область становила 15 м/с. Глобальна розрахункова область розбивалася відповідно на 1–4 підобласті для кожного варіанта обчислювальної сітки.

Прискорення S_p , що отримується під час використання паралельного алгоритму для p процесорів (ядер процесора), порівняно із послідовним варіантом виконання обчислень визначається таким чином:

$$S_p = t_1/t_p, \quad (3.8)$$

де t_1 – час виконання завдання на ЕОМ з послідовним алгоритмом; t_p – час виконання паралельного алгоритму. Природно, що кількість процесорів (ядер) визначає максимальний ефект від розбиття глобальної розрахункової області на кілька підобластей.

Результати обчислювального експерименту зображено на рис. 3.10, 3.11.

Очевидно, що зі збільшенням кількості розбиття до чотирьох витрачений час процесора зменшується, але подальше розбиття не приводить до зниження часу. Це пояснюється використанням процесора з чотирма ядрами. Максимальний фізичний час процесора витрачається в разі відсутності розбиття глобальної області (див. рис. 3.10).

В обох варіантах розбивання області має місце вирівнювання залежностей зі збільшенням кількості підобластей – криві наближаються до асимптот. Таке поведіння можна пояснити збільшенням «накладних витрат», пов'язаних з додатковими витратами часу на утворення й видалення все більшої кількості робочих потоків на кожному часовому шарі й необхідною роботою з синхронізації їх функціонування. Розрахунок ефективності алгоритму дає ідентичні результати для обох варіантів обчислювальної сітки (див. рис. 3.11). Ефективність підвищується зі збільшенням кількості підобластей простору [27].

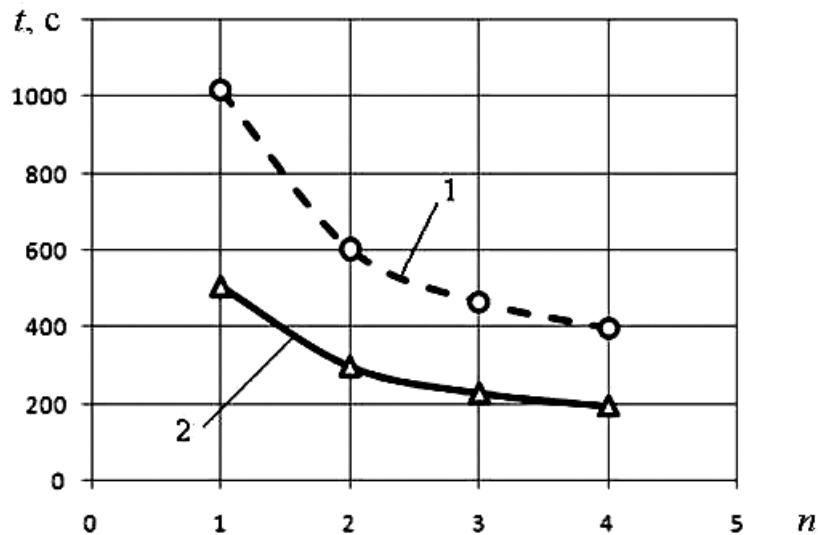


Рис. 3.10. Залежність часу розрахунку t від кількості ядер процесора n :
 1 – варіант сітки $10 \times 10 \times 300$; 2 – варіант сітки $10 \times 10 \times 180$

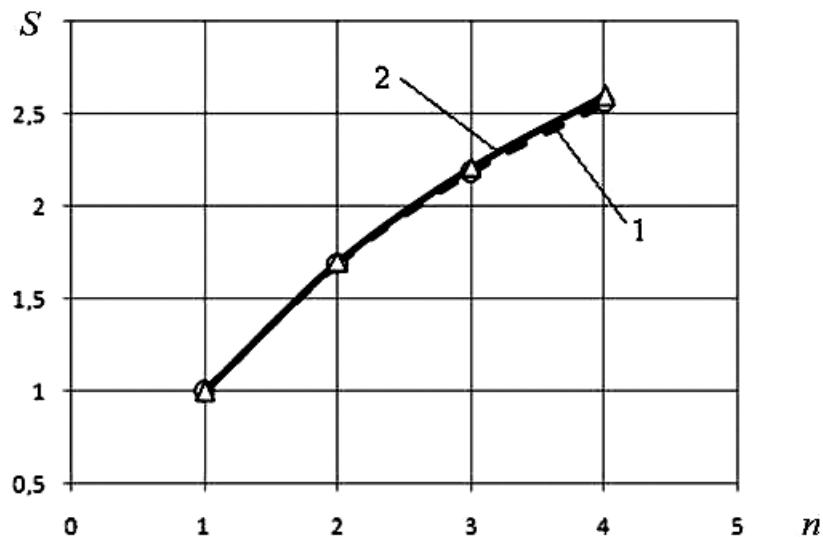


Рис. 3.11. Залежність прискорення S від кількості ядер процесора n :
 1 – варіант сітки $300 \times 10 \times 10$; 2 – варіант сітки $180 \times 10 \times 10$

Таким чином, розроблений алгоритм паралельного розрахунку нестационарної тривимірної задачі руху газової суміші в багатозв'язній області на основі інтегрованої в ядро мови програмування Visual C# технології паралельних потоків забезпечує можливість організувати паралельні обчислення в окремих підобластях, на які розбивається глобальна розрахункова область, та істотно зменшити час розрахунку на комп'ютерах із багатоядерними процесорами. Для реалізації алгоритму використовується концепція багатозадачності, що припускає розподіл усього розрахункового навантаження між окремими задачами, які є відповідальними за розрахунок у своїй підобласті. Синхронізація

розрахунків у підобластях забезпечується використанням паралельних циклів класу `Parallel` бібліотеки паралельних обчислювальних потоків TPL мови C# [27].

Висновки до розділу 3

1. На основі запропонованої математичної моделі створено програмний засіб комп'ютерної реалізації FIRE® інженерного аналізу й прогнозування газодинамічних процесів руху хімічно активних газів в атмосфері. Цей засіб забезпечує можливість прогнозувати змінення надлишкового тиску, температури, концентрацій домішки й продуктів горіння та інших термо- і газодинамічних параметрів компонент суміші в часі й просторі, а результати прогнозування використовувати для оцінювання зон максимального впливу збурення повітря техногенного об'єкта на конструкції виробничих приміщень та обслуговий персонал унаслідок аварійного навантаження (ударної хвилі, токсичної дози й високої температури продуктів горіння).

2. Досліджено стадії розроблення структури програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі інженерного аналізу процесів потрапляння в повітря й поширення в приземному шарі атмосфери газоподібних домішок. Описано основні етапи узагальненого алгоритму системного моделювання руху багатокомпонентної газової суміші з урахуванням хімічної реакції, обміну теплом і масою. Розглянуто формалізоване подання й призначення CAE-системи. Наведено структуру програмного засобу й основні складові технології розроблення CAE-системи. Спроектовано програмний засіб підтримки прийняття рішення із застосуванням IDEF-методології. Розроблено загальну контекстну діаграму IDEF0 основних функціональних процесів. Подальшу деталізацію процесів зроблено засобами IDEF3-методології для виявлення послідовності основних робіт системи. Потоки даних у системі проведено засобами DFD-методології.

3. Розроблено алгоритм паралельної організації розрахунку нестационарної тривимірної задачі руху газу в багатозв'язній області на основі засобів з бібліотеки паралельних потоків TPL (`Threading Parallel Library`), яка належить до ядра мови програмування Visual C#. Запропонований алгоритм забезпечує можливість організувати паралельні обчислення в окремих підобластях, на які розбивається глобальна розрахункова область. Використовується принцип багатозадачності, що припускає розподіл усього розрахункового навантаження між окремими задачами, які є відповідальними за обчислення в своїй підобласті. Синхронізація розрахунків забезпечується використанням циклів класу `Parallel`.

Розділ 4. АНАЛІЗ ОСОБЛИВОСТЕЙ ПРОЦЕСІВ ВИКИДУ Й ПОШИРЕННЯ ГАЗОПОДІБНИХ СУМІШЕЙ У ВІДКРИТОМУ ПРОСТОРИ ЗІ СКЛАДНИМ РЕЛЬЄФОМ МІСЦЕВОСТІ

У цьому розділі проаналізовано особливості процесів викиду й поширення газових домішок у відкритому просторі зі складним рельєфом місцевості [3]. Розглянуто основні особливості числового моделювання процесу струминного витікання різної інтенсивності газових домішок в атмосферу. Проведено аналіз числового моделювання процесу випаровування зрідженого газу з поверхні плями пролиття в повітрі приземного шару атмосфери. Описано моделювання миттєвого викиду стисненого хімічно неактивного газу («фізичного» вибуху) у приземний шар атмосфери [6]. Проаналізовано числове моделювання миттєвого вибуху газоповітряної суміші з урахуванням хімічної взаємодії. Наведено особливості моделювання дефлаграційного горіння газоповітряної суміші в повітрі приземного шару атмосфери. Зроблено аналіз числового моделювання процесу переходу дефлаграційного горіння газокисневої суміші в детонацію [8], а також особливостей числового моделювання впливу водяної завіси на процес вибуху метаноповітряної суміші при наявності вугільного пилу.

4.1. Верифікація й валідація математичної моделі тепломасоперенесення під час руху багатокомпонентної суміші

З метою оцінювання якості запропонованих моделей та їх продуктивності в інженерній практиці, для опису діяльності, спрямованої на демонстрацію адекватності числових моделей, довіри до результатів їх використання проведено їх верифікацію й валідацію.

4.1.1. Методи верифікації і валідації математичних моделей

Перевірка коректності адекватності розробленої розрахункової моделі проводилася за процедурою верифікації і валідації моделі [318], запропонованою міжнародною асоціацією спеціалістів з інженерного моделювання, аналізу й симуляції NAFEMS та американською спілкою інженерів-механіків ASME. Відповідно до цієї процедури послідовно утворюється розрахункова схема й два різновиди моделей – математична (математичне уособлення реального об'єкта) і числова (комп'ютерна реалізація об'єкта в наближеному до алгоритмічного опису вигляді, який долучає набір даних (класів), що характеризують властивості й поведження об'єкта) [318].

Використовувалися верифікація (установлення рівня відповідності числової і математичної моделей в області математики) і валідація

(процес визначення відповідності розрахункової моделі реальному об'єкту в межах її використання). Згідно з процедурою верифікації [318], алгоритмічну схему якої подано в дод. 6, проводилися верифікація комп'ютерного коду з метою перевірки коректності роботи математичної моделі й алгоритму числового розв'язання відповідних систем рівнянь і верифікація обчислень з метою перевірки коректності дискретизації розрахункового простору й відповідності дискретного розв'язку необхідній точності математичної моделі.

4.1.2. Статистичні показники ефективності математичних моделей

У роботі [92] виокремлено десять основних кількісних статистичних показників ефективності, які є уособленням різних підходів і методів, що використовуються під час оцінювання якості моделей дисперсії газових домішок. У роботі [317], де описано методи оцінювання ефективності моделей аналізу якості атмосфери, розглядаються шість основних показників, їх визначення, ідеальні й допустимі значення (табл. 4.1).

Під час обчислення статистичних показників ефективності математичної моделі передбачається, що «набір даних» містить пари C_m і C_e (відповідно значення математичної моделі й експериментальне), які являють собою середні значення за час усереднення t_y .

4.1.3. Числове моделювання процесу дефлаграції газової домішки в атмосфері

Для валідації і верифікації математичної моделі проведено порівняння результатів розрахунку, отриманих з допомогою моделі, з експериментальними даними лабораторії Fraunhofer ICT і результатами використання інших моделей [288] процесу горіння стехіометричної хмари воднево-повітряної суміші у дефлаграційному режимі з урахуванням утворення продуктів горіння в приземному шарі атмосфери. Експерименти здійснювалися при таких початкових даних для півсферичної хмари: загальний об'єм 2094 м^3 , тиск $98,9 \text{ кПа}$, температура 283 К , радіус 2 м . Часове змінення надлишкового тиску, температури, масової концентрації пального й продуктів горіння на відстанях 5 м (точка В), 8 м (точка С) і 18 м (точка D) від епіцентру горіння (точка А) контролювалося під час розрахунків (рис. 4.1).

Розрахунковий простір мав такі розміри: довжина 200 м (уздовж осі OZ), ширина 100 м (уздовж осі OX) і висота 30 м (уздовж осі OY). Розміри сітки становили $200 \times 100 \times 30$ комірок. Характеристики комп'ютера були такими: 1 Intel® Celeron® CPU PCs ($2,4 \text{ ГГц}$), $0,75 \text{ Гб RAM}$, Windows XP. Час розрахунку становив 4 год (треба 45 год з використанням моделі Нав'є – Стокса [288]).

Статистичні показники якості моделей

Статистичний параметр	Формула	Ідеальне значення, допустимий діапазон
Fractional Bias – нормалізоване відхилення	$FB = 2 \left(\frac{\overline{C_e} - \overline{C_M}}{\overline{C_e} + \overline{C_M}} \right)$	0, граничний діапазон $-2 < FB < 2$; допустимий $-0,5 < FB < 0,5$
Geometric Mean Bias – надійність моделі	$MG = \exp(\ln \overline{C_e} - \ln \overline{C_M})$	1, $0,75 < MG < 1,25$
Normalized Mean Square Error – параметр, що підкреслює розкид у всьому наборі даних і відомий як нормалізована середньоквадратична помилка	$NMSE = \frac{(\overline{C_e} - \overline{C_M})^2}{\overline{C_e} \overline{C_M}}$	0, $NMSE \leq 0,5$
Geometric Mean Variance – надійність моделі	$VG = \exp \left[(\ln \overline{C_e} - \ln \overline{C_M})^2 \right]$	1, $0,75 < VG < 1,25$
Correlation Coefficient – параметр, що відображає лінійну залежність між двома змінними і є таким чином нечутливим до адитивного або мультиплікативного фактора	$r = \frac{(\overline{C_e} - \overline{C_e})(\overline{C_M} - \overline{C_M})}{\sqrt{(\overline{C_e^2} - \overline{C_e}^2)(\overline{C_M^2} - \overline{C_M}^2)}}$	1, допустимий якнайближче до 1
Factor of 2 – відсоток прогнозів, які задовольняють умову	$0,5 \leq \frac{C_M}{C_e} \leq 2,0$	1 (100 %), допустимий $Fa_2 \geq 0,8$

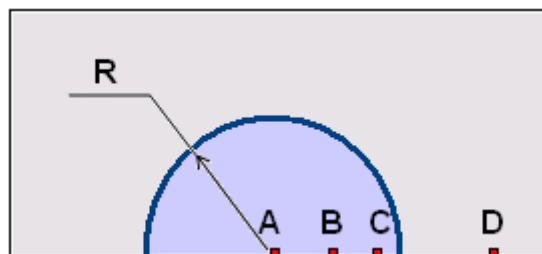


Рис. 4.1. Схема розрахункового простору й розташування контрольних точок

Динаміку надлишкового тиску в контрольних точках В, С і D зображено на рис. 4.2 порівняно з експериментальними даними й

результатами обчислювальних експериментів інших авторів [288]. Більш «гостру» форму розрахункової кривої можна пояснити специфічними рисами застосовуваної моделі горіння. Більш інтенсивне зниження надлишкового тиску на шляху вибухової ударної хвилі від контрольної точки С до контрольної точки D можна віднести до особливостей скінченно-різницевої схеми апроксимації рівнянь.

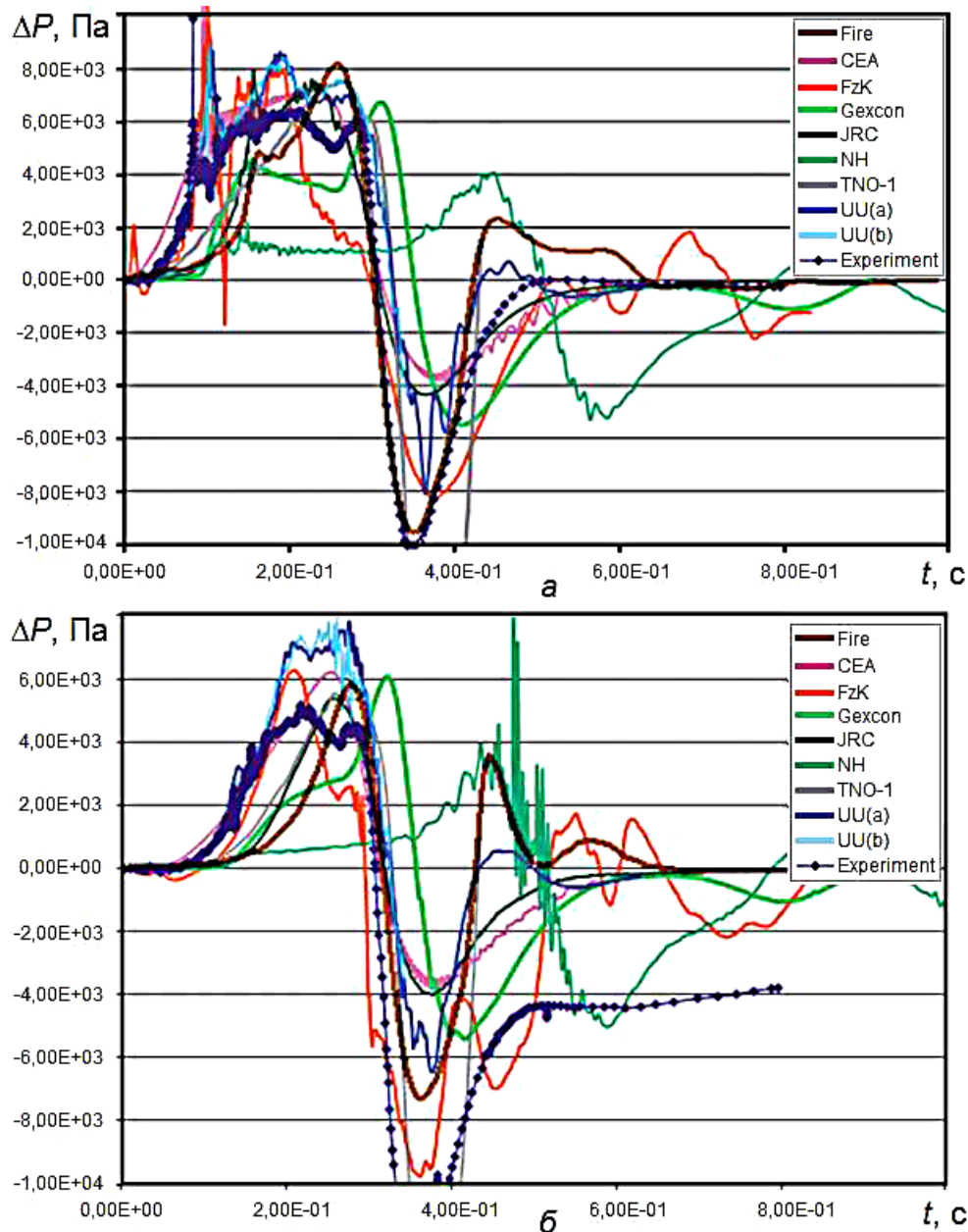


Рис. 4.2. Динаміка надлишкового тиску в точках: а – В; б – D

Розподіл температури в контрольних точках В і С показано на рис. 4.3, а динаміку змінення відносної масової концентрації водню й продуктів горіння в контрольній точці В – на рис. 4.4.

Валідація математичної моделі дефлаграції водню відносно експериментальних результатів вимірювання надлишкового тиску у фронті

вибухової хвилі проводилася шляхом оцінювання статистичних показників, рекомендованих у роботах [92, 317]. Досліджувалася тільки фаза стиснення фронту хвилі, тому що тільки її характеристики є наявними в співвідношеннях для ймовірнісного оцінювання негативного впливу хвилі на навколишнє середовище. Для хвилі в контрольній точці В було виявлено такі значення показників ефективності моделі: $FB = 0,23$; $VG = 1,88$; $MG = 1,56$; $NMSE = 0,29$; $Fa2 = 71 \%$; $r = 0,78$. У контрольній точці С ці показники мали такі значення: $FB = -0,18$; $VG = 2,97$; $MG = 1,07$; $NMSE = 1,51$; $Fa2 = 33 \%$; $r = 0,01$. І для точки С вони були такими: $FB = -0,43$; $VG = 4,00$; $MG = 2,39$; $NMSE = 0,57$; $Fa2 = 42 \%$; $r = 0,63$.

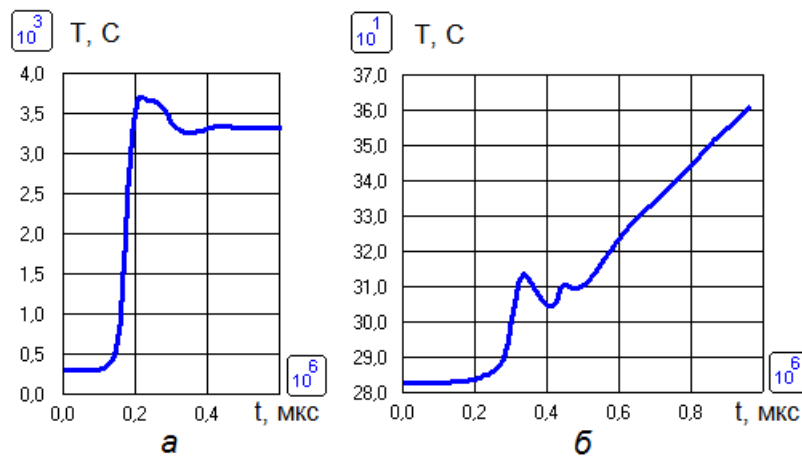


Рис. 4.3. Динаміка температури в контрольних точках: а – В; б – С

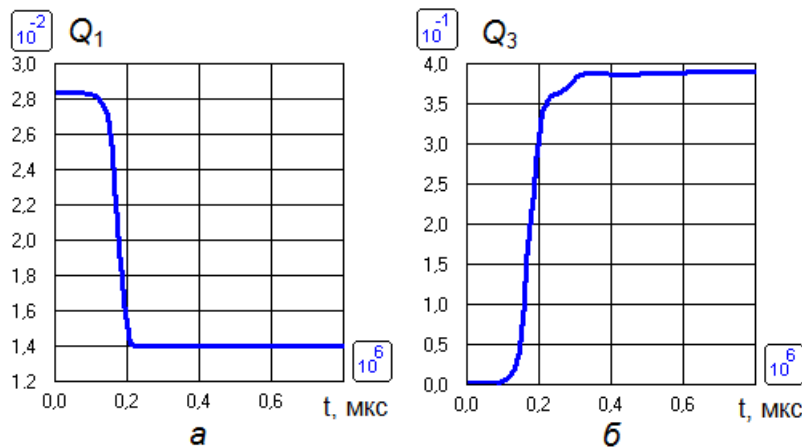


Рис. 4.4. Динаміка відносної масової концентрації в контрольній точці В: а – водню Q_1 ; б – продуктів горіння Q_3

Значення статистичних показників VG , MG і $Fa2$ для точки В, величин VG , $NMSE$ і $Fa2$ для точки С і величин VG , MG , $NMSE$ і $Fa2$ для точки D дещо виходять за рекомендовані в роботі [317] межі (див. табл. 4.1), що пояснюється деякою розсинхронізацією в часі проходження вибухової хвилі через контрольні точки порівняно з реальним процесом [6].

Але загальний якісний і кількісний аналіз фази стиснення вибухової хвилі в контрольних точках з огляду на параметри впливу хвилі на

навколишнє середовище дає значно кращі результати:

– для максимального надлишкового тиску маємо такі показники: $FB = -0,02$; $VG = 1,04$; $MG = 0,95$; $NMSE = 0,04$; $Fa2 = 100 \%$; $r = 0,72$;

– для імпульсу фази стиснення: $FB = 0,14$; $VG = 1,10$; $MG = 1,17$; $NMSE = 0,07$; $Fa2 = 100 \%$; $r = 0,73$.

Усі актуальні показники ефективності моделі знаходяться в рекомендованих межах. Тому можна вважати, що математична модель дефлаграційного горіння газоповітряної суміші може бути використана для цілей, які поставлено в дослідженні: для симуляції широкомасштабних вибухів газоповітряної суміші в приземному шарі атмосфери; для оцінювання й прогнозування можливих наслідків баричного й термічного впливів продуктів горіння домішки на людей і конструкції будівель у зоні епіцентру техногенної аварії.

4.1.4. Моделювання випаровування з поверхні пролиття зрідженого газу

Валідація математичної моделі розсіювання домішок в атмосфері проводилася на основі порівняння результатів розрахунку з експериментальними даними для випаровування зрідженого пропану [301] і водню [302]. Розглядалася задача про поширення газової домішки за результатами скипання охолодженого зрідженого газу, який пролито на поверхню води (землі) в умовах постійно діючого джерела викиду газової фази із заданою витратою в приземному (приводному) шарі атмосфери під впливом повітряних потоків.

4.1.4.1. Моделювання випаровування з поверхні пролиття зрідженого пропану

Моделювалося випаровування рідкого пропану з плями пролиття площею 256 м^2 і подальше розсіювання газоподібного пропану при таких атмосферних умовах: тиск 101325 Па , температура 291 К , швидкість вітру $5,4 \text{ м/с}$. Пропан після аварії проливався в рідкому стані на поверхню океану, формувалася плівка певної товщини й пропан починав випаровуватися з постійною витратою $27,16 \text{ кг/с}$ протягом 450 с . Хімічна речовина мала початкову температуру 260 К у газоподібному стані. Вихідні дані для розрахунку формувалися відповідно до експериментальних даних пролиття № 46 [301] (рис. 4.5).

Також моделювалося випаровування рідкого пропану з плями пролиття площею 900 м^2 при тих самих атмосферних умовах, за виключенням швидкості вітру, яка становила $2,53 \text{ м/с}$. У цьому експерименті пропан випаровувався із постійною витратою $22,31 \text{ кг/с}$ також протягом 450 с і мав температуру 260 К на початку газової фази. Вихідні дані для розрахунку формувалися відповідно до

експериментальних даних пролиття № 54 [301] (рис. 4.6).

Розрахунковий розподіл концентрації пропану на різних висотах від поверхні пролиття якісно й кількісно відповідає експериментальним даним.

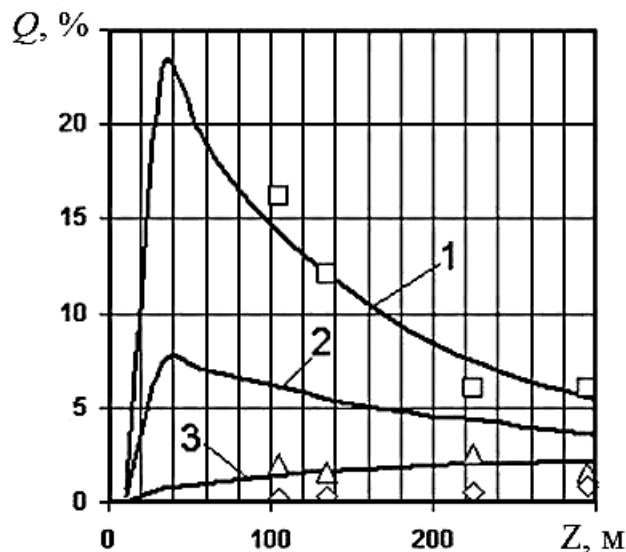


Рис. 4.5. Розподіл масової концентрації пропану для пролиття № 46:
1, 2 і 3 – результати розрахунків, □, △ і ◇ – експериментальні дані
на висотах 0,9, 1,4 і 2,3 м відповідно

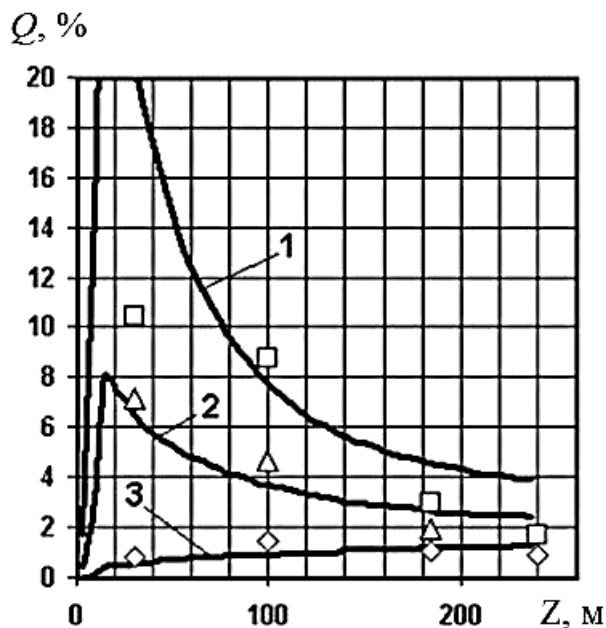


Рис. 4.6. Розподіл масової концентрації пропану для пролиття № 54:
1, 2 і 3 – результати розрахунків; □, △ і ◇ – експериментальні дані
на висотах 0,6, 1,4 і 2,3 м відповідно

Валідація математичної моделі випаровування з плями пролиття рідкого пропану й розсіювання домішки над поверхнею моря відносно експериментальних результатів вимірювання надлишкового тиску у фронті вибухової хвилі проводилася шляхом оцінювання статистичних показників,

рекомендованих у роботах [92, 317]. Моделювання експерименту № 46 виявило такі значення показників ефективності: $FB = -0,23$; $NMSE = 0,14$; $r = 0,97$. Моделювання експерименту № 54 дало такі результати: $FB = -0,24$; $VG = 1,18$; $MG = 0,86$; $NMSE = 0,50$; $Fa2 = 100\%$; $r = 0,89$.

Узагальнені за результатами обох експериментальних досліджень статистичні показники мають такі значення: $FB = -0,24$; $NMSE = 0,29$; $r = 0,88$. Ці статистичні показники якості моделі знаходяться в межах рекомендованих діапазонів [317], що дає змогу оцінити розроблену тривимірну математичну модель випаровування небезпечної хімічної речовини з плями аварійного пролиття такою, яка адекватно описує фізичні процеси випаровування зрідженого газу з плями пролиття й поширення газової домішки в приземному шарі атмосфери.

4.1.4.2. Моделювання випаровування з поверхні пролиття зрідженого водню

Розглядається аварійна ситуація на станції заправлення водневим паливом транспортних засобів. На станції є цистерна з рідким воднем ($5,7 \text{ м}^3$), 12 балонів загальним об'ємом $799,2 \text{ м}^3$ для зберігання газоподібного водню при температурі навколишнього середовища [272]. Моделювалося випаровування водню з плями пролиття площею 65 м^2 при таких атмосферних умовах: тиск 101325 Па , температура 288 К , швидкість вітру $2,2 \text{ м/с}$. Водень випаровувався з постійною витратою $11,56 \text{ кг/с}$ протягом 21 с і мав початкову температуру 180 К після переходу до газової фази. Вихідні дані для розрахунку формувалися відповідно до експериментальних даних пролиття № 6 [302] (рис. 4.7). Загальний час розрахунку з використанням розробленої математичної моделі становив 1 год, тоді як використання математичної моделі на основі рівнянь Нав'є – Стокса [302] потребує 11 год.

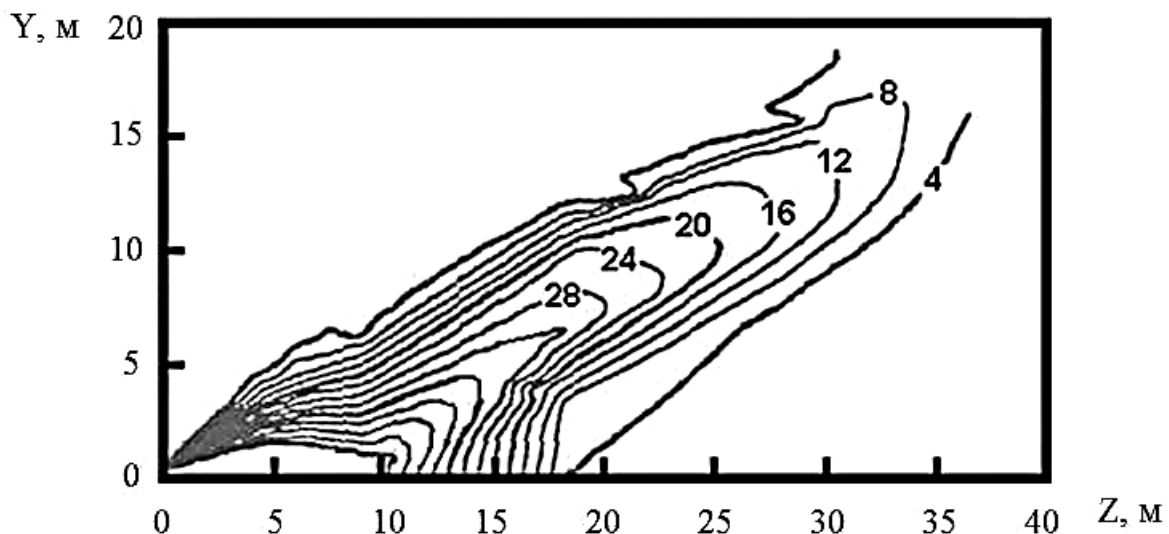


Рис. 4.7. Експериментальний розподіл об'ємної концентрації водню

Незважаючи на низьку початкову температуру газової фази, водень швидко перемішується з повітрям, втрачаючи концентрацію в суміші. Його висока плавучість приводить до підняття шлейфа з часом. Зі збільшенням швидкості вітру з висотою інтенсивність розсіювання, природно, підвищується також (рис. 4.8).

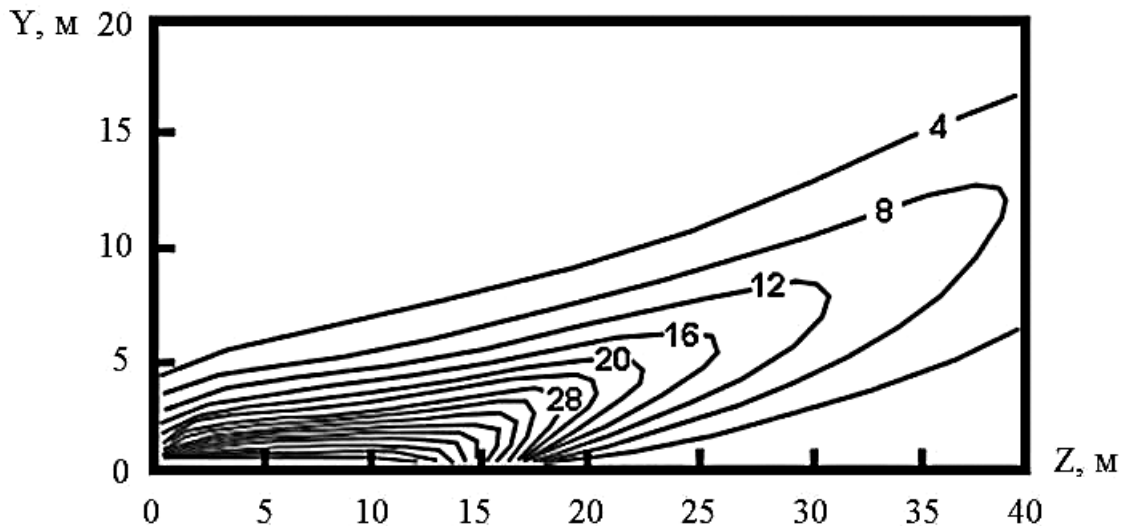


Рис. 4.8. Розрахунковий розподіл об'ємної концентрації водню

Порівняння просторового розподілу концентрації водню виявило загалом якісну й кількісну збіжність експериментальних і розрахункових даних для водню, що дає можливість використовувати побудовану модель для газів, густина яких відрізняється від густини повітря.

Для виявлення впливу швидкості вітру на поля густини домішки (водню) було проведено обчислювальний експеримент для вітру слабкої (1 м/с), середньої (3 м/с) і високої (10 м/с) швидкостей. Розподіли концентрації водню, отримані обчислювальним шляхом за допомогою розробленої математичної моделі, показано на рис. 4.9. Вони подібні до результатів натурного експерименту, які надано на фотографіях шлейфа водневої хмари, що виникає внаслідок випаровування з плями пролиття рідкого водню при різних вітрових умовах (рис. 4.10).

Розроблена математична модель адекватно відображає якісний характер фізичного процесу утворення й руху повітряно-водневої суміші: в умовах слабого вітру хмара практично вертикально підіймається над поверхнею землі, трохи відхиляючись за вітром, з посиленням вітру траєкторія середньої лінії шлейфа все більше наближається до землі, а в умовах сильного вітру хмара практично стелеться над поверхнею землі.

4.1.5. Верифікація математичної моделі випаровування з поверхні пролиття зрідженого токсичного газу

Поряд з валідацією математичної моделі відносно результатів фізичного експерименту її реалізацію у вигляді програмного коду піддають

верифікації, одним із інструментів якої є перевірка поведження математичної моделі на розрахункових сітках різної щільності. Модель має давати стійкий розв'язок, який наближається до «точного».

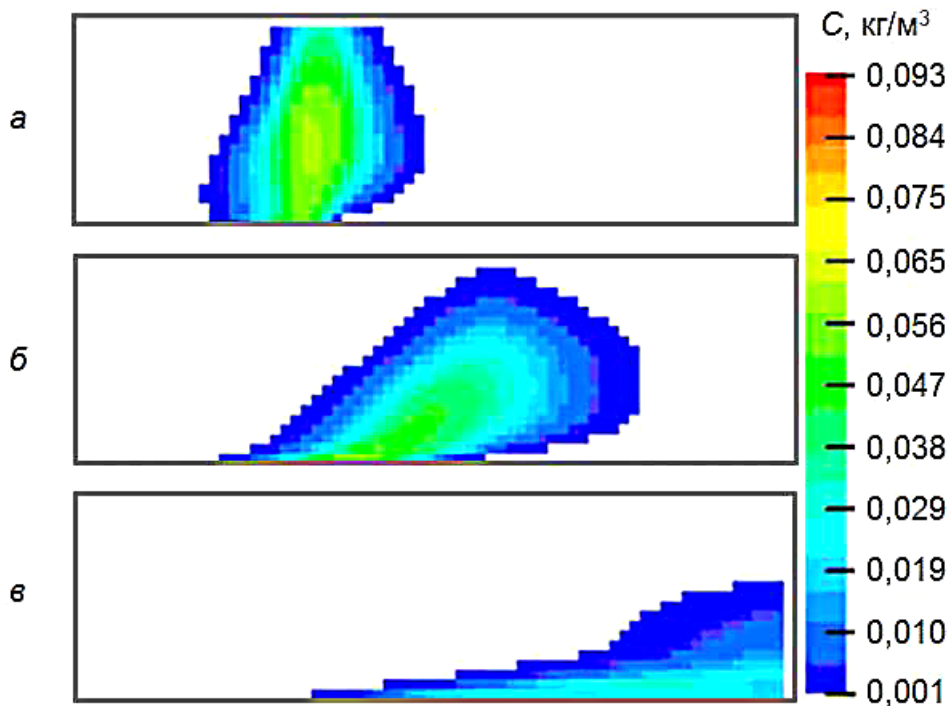


Рис. 4.9. Розрахункові поля густини водню при різних швидкостях вітру: а – 1 м/с, б – 3 м/с, в – 10 м/с

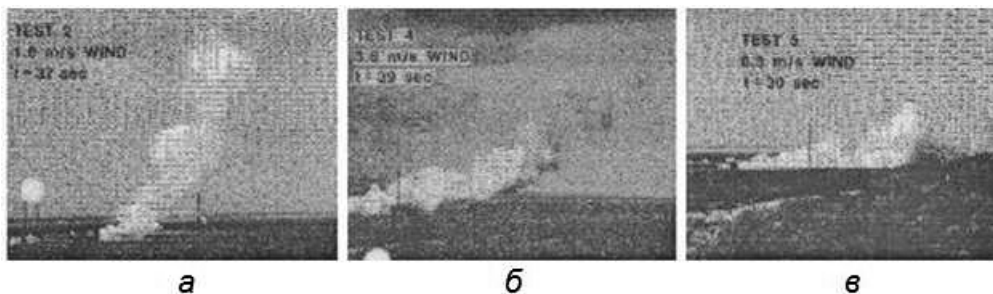


Рис. 4.10. Натурний експеримент: розсіювання водню, що випаровується з плями пролиття при різних швидкостях вітру: а – 1,6 м/с; б – 3,8 м/с; в – 6,3 м/с

Верифікаційний обчислювальний експеримент проводився для сценарію аварійного пролиття зрідженого ціаністого водню [64] з утворенням плями пролиття круглої форми з центром $S(18\text{ м}; 18\text{ м})$ відносно початку системи координат і радіусом 8 м на майданчику квадратного перерізу 60 x 60 м біля землі. Випаровування відбувається з поверхні плями з постійною інтенсивністю $1,19\text{ кг}/(\text{с}\cdot\text{м}^2)$, яка визначається для швидкості вітру 3 м/с для степеневого профілю із коефіцієнтом 0,4 і температурою повітря 293 К. Випаровування припиняється за 3 с. Вітер набігає під кутом 45° до поздовжньої осі. Параметри безпеки

контролювалися в точках P0(35 м; 35 м) і P1(55 м; 55 м).

Утворення токсичної хмари та її розсіювання моделювалося за допомогою комп'ютерної системи Fire [68]. Нестационарні поля масової концентрації домішки використовувалися для отримання розподілу ймовірності смертельного ураження людини (рис. 4.11).

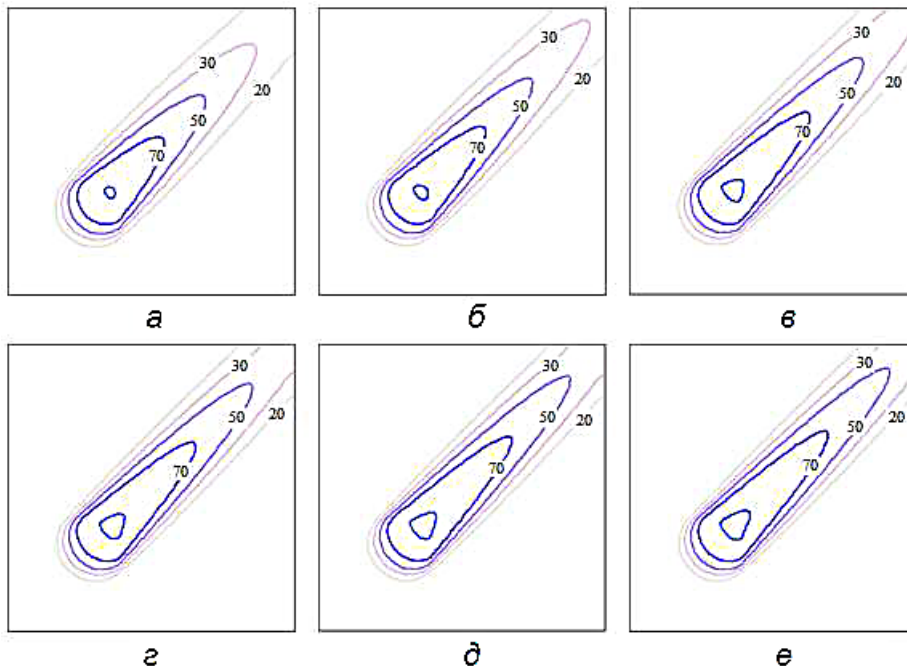


Рис. 4.11. Поля умовної ймовірності ураження: а–е – варіанти сітки V1–V6

Обчислювальна сітка послідовно ущільнювалася у варіантах від V1 до V8: 60, 90, 120, 150, 180, 210, 240 і 270 розрахункових комірок відповідно вздовж усіх напрямків системи координат. Змінення умовної ймовірності летального наслідку від ураження інгаляційною токсичною дозою в контрольній точці залежно від варіанта розбиття розрахункового простору зображено на рис. 4.12.

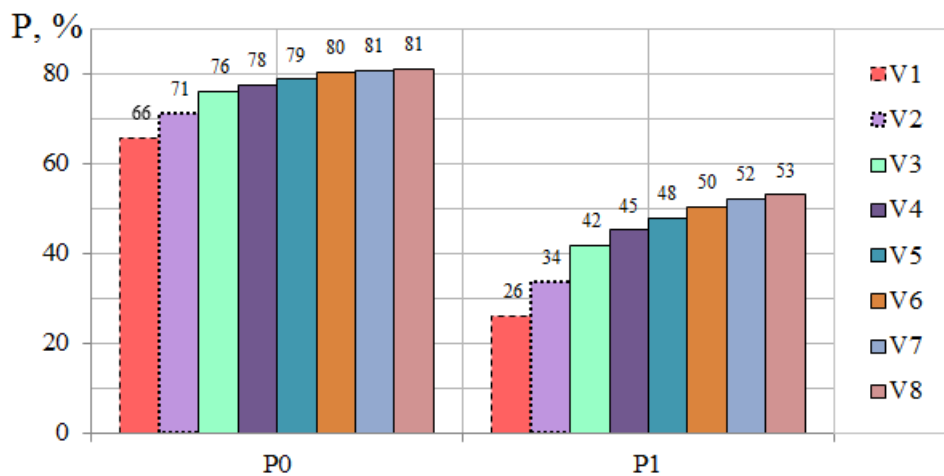


Рис. 4.12. Діаграма умовної ймовірності смертельного токсичного ураження людини в контрольних точках P0 і P1: V1–V8 – варіанти густини розрахункової сітки

Контролювалася також така характеристика стану безпеки техногенного об'єкта, як площа зони, де ймовірність смертельного наслідку для людини буде більшою за 50 % (рис. 4.13).

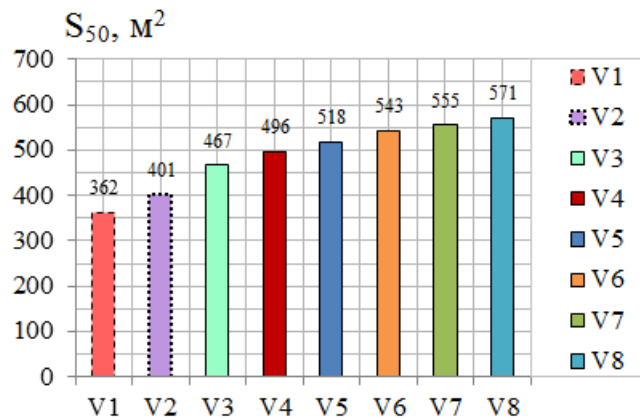


Рис. 4.13. Діаграма площі небезпечної зони S_{50} у контрольних точках P0 і P1: V1–V8 – варіанти щільності розрахункової сітки

Порівняння полів умовної ймовірності ураження, умовних ймовірностей у контрольних точках можливого розташування обслугового персоналу і площ небезпечних зон для сіток різної щільності забезпечує можливість зробити висновок про стійкість розробленої математичної моделі випаровування й розсіювання токсичної газоподібної хімічної речовини з плями аварійного пролиття й програмного коду її реалізації й очевидну поступову збіжність до єдиного розв'язку зі збільшенням щільності обчислювальної сітки. Бачимо, що дрібніша сітка точніше описує фізичний процес, а це дає змогу зробити висновок про адекватність розробленої математичної моделі.

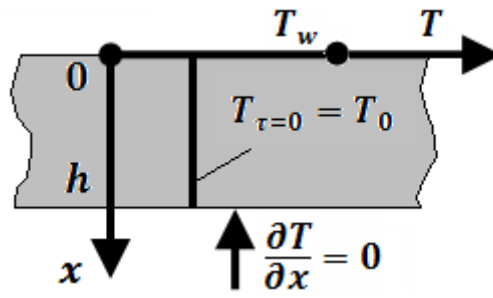
4.1.6. Моделювання теплообміну в суцільних «твердих» тілах

Верифікація розробленої математичної моделі теплообміну проводилася шляхом порівняння результатів числового моделювання з відомими аналітичними розв'язками одновимірних тестових задач для нескінченної пластини з різними початковими й граничними умовами і змінною інтенсивністю теплообміну з теплопровідним газоподібним навколишнім середовищем [303].

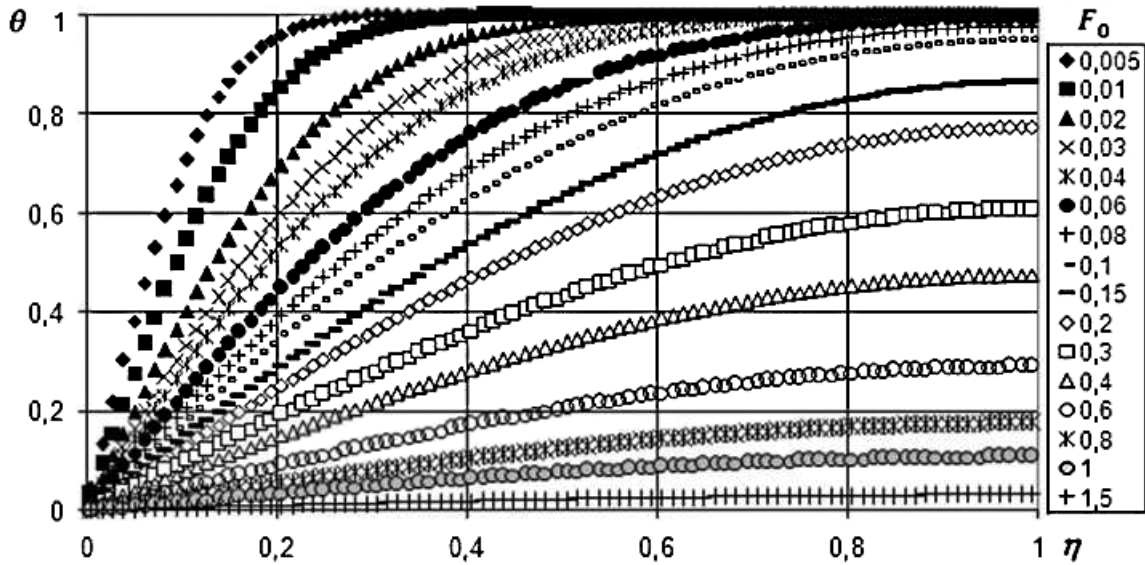
4.1.6.1. Тестова задача теплообміну за схемою 1

Розглядається нестационарний процес охолодження нескінченної суцільної твердої пластини при нескінченно великій інтенсивності теплообміну з навколишнім газоподібним середовищем (рис. 4.14, а):

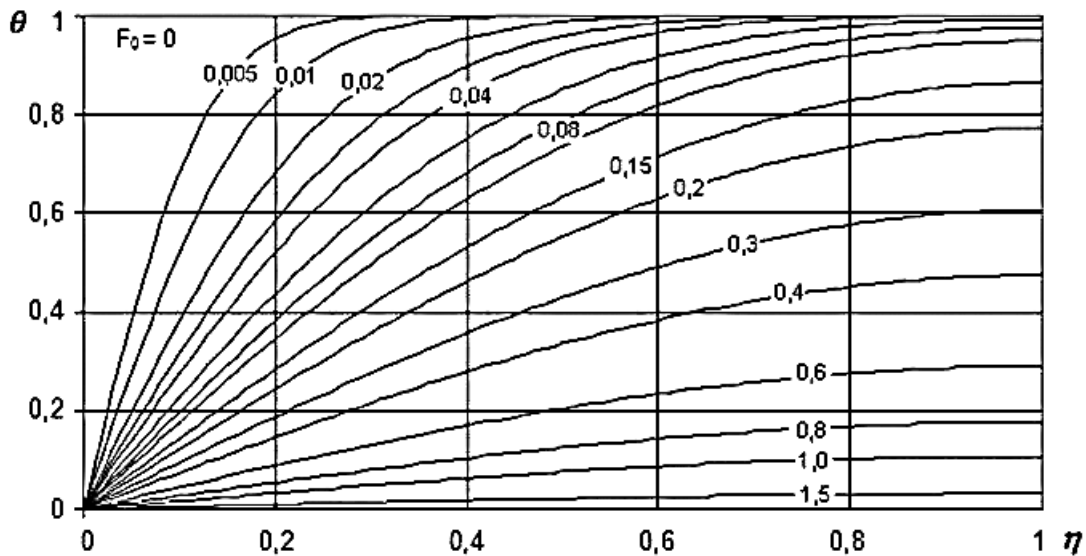
$$T|_{\tau=0} = T_0. \quad (4.1)$$



a



b



v

Рис. 4.14. Теплообмін у нескінченній пластині (схема 1):
 а – розрахункова схема; б – розрахунок; в – аналітичний метод [303]

На одному боці пластини виконується умова

$$T|_{x=0} = T_w. \quad (4.2)$$

У початковий момент часу температура в пластині є постійною. На іншому боці виконується така гранична умова:

$$\partial T / \partial x|_{x=h} = 0. \quad (4.3)$$

Аналітичний розв'язок для розподілу параметра температури можна подати таким нескінченним рядом:

$$\Theta = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos[\mu_n(1-\eta)] \exp(-\mu_n^2 F_0), \quad (4.4)$$

де коефіцієнти μ_n і A_n мають вигляд

$$\mu_n = (2n-1)\pi/2, \quad (4.5)$$

$$A_n = (-1)^{n+1} 2/\mu_n. \quad (4.6)$$

У розрахунках використовувалися безрозмірні аргументи часу $F_0 \equiv (a\tau)/h^2$ (число Фур'є) і поточної координати $\eta \equiv x/h$.

Результати порівняння числового й аналітичного розв'язків показано на рис. 4.14, б, в.

4.1.6.2. Тестова задача теплообміну за схемою 2

Розглядається нестационарний процес охолодження нескінченної суцільної твердої пластини з градієнтним розподілом початкової температури при нескінченно великій інтенсивності теплообміну з навколишнім середовищем (рис. 4.15, а).

У початковий момент часу температура поперек пластини змінюється згідно з градієнтним законом

$$T|_{\tau=0} = T_w + \Delta T x/h. \quad (4.7)$$

На обох боках пластини виконується умова

$$T|_{x=0} = T|_{x=h} = T_w. \quad (4.8)$$

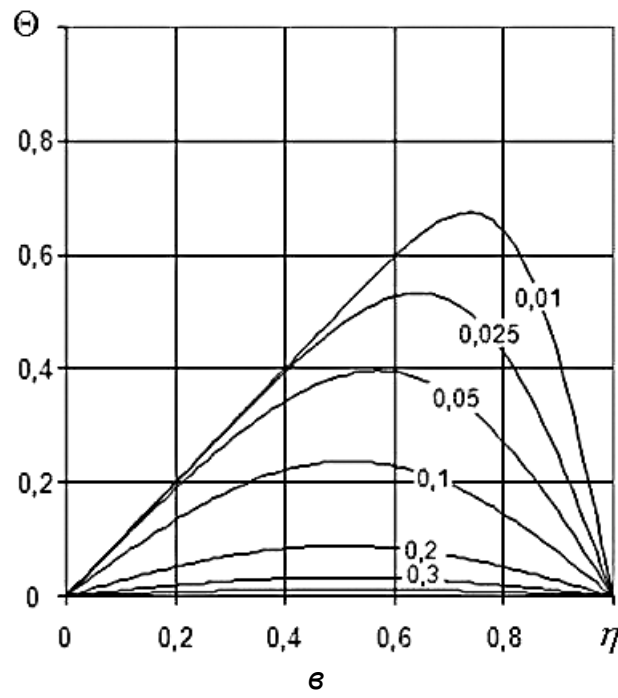
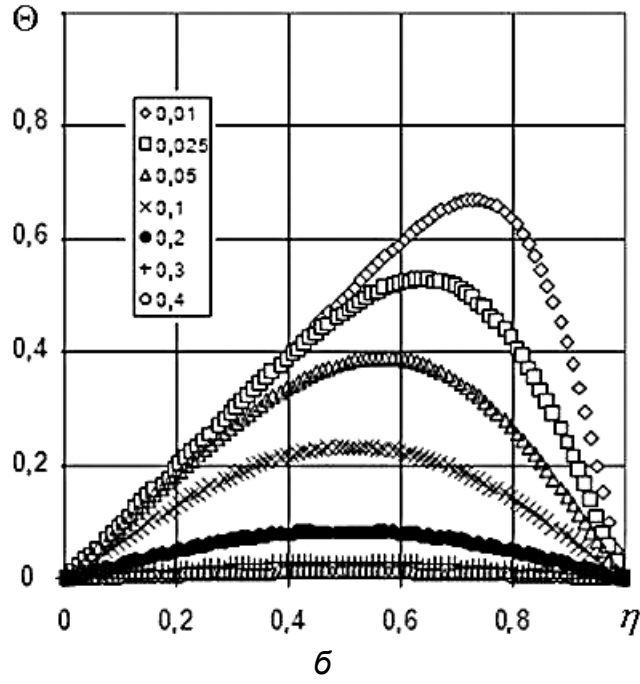
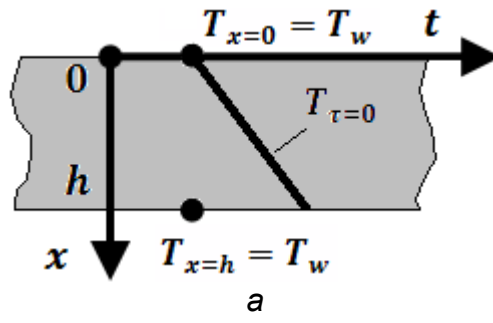


Рис. 4.15. Теплообмін у нескінченній пластині (схема 2):
 а – розрахункова схема; б – розрахунок; в – аналітичний метод [303]

Аналітичний розв'язок для розподілу параметра температури подано таким таким нескінченним рядом:

$$\Theta = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin[\mu_n \eta] \exp(-\mu_n^2 F_0), \quad (4.9)$$

де коефіцієнти μ_n і A_n мають вигляд

$$\mu_n = n\pi, \quad (4.10)$$

$$A_n = (-1)^{n+1} 2/\mu_n. \quad (4.11)$$

Результати порівняння числового й аналітичного розв'язків показано на рис. 4.15, б, в.

4.1.6.3. Тестова задача теплообміну за схемою 3

Розглядається процес теплообміну в нескінченній пластині з постійним поперечним розподілом початкової температури при скінченному коефіцієнті тепловіддачі α у навколишнє газове середовище з певною температурою T_e (рис. 4.16, а).

У початковий момент часу температура в пластині має постійне значення $T|_{\tau=0} = T_0$. На одному боці пластини виконуються такі граничні умови:

$$-\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=0} = \alpha (T_e - T_{x=0}), \quad (4.12)$$

де T_e – температура навколишнього середовища, $T_e = const$; λ – коефіцієнт теплопровідності для матеріалу пластини; α – коефіцієнт тепловіддачі для системи «газ – матеріал». На іншому боці пластини виконується гранична умова $\frac{\partial T}{\partial x} \Big|_{x=h} = 0$, а аналітичний розв'язок розподілу параметра температури подано нескінченним рядом

$$\Theta = 1 - \sum_{n=1}^{\infty} A_n \cos[\mu_n (1 - \eta)] \exp(-\mu_n^2 F_0), \quad (4.13)$$

де співвідношення для коефіцієнтів μ_n і A_n мають такий вигляд:

$$ctg \mu_n = 1/Bi, \quad (4.14)$$

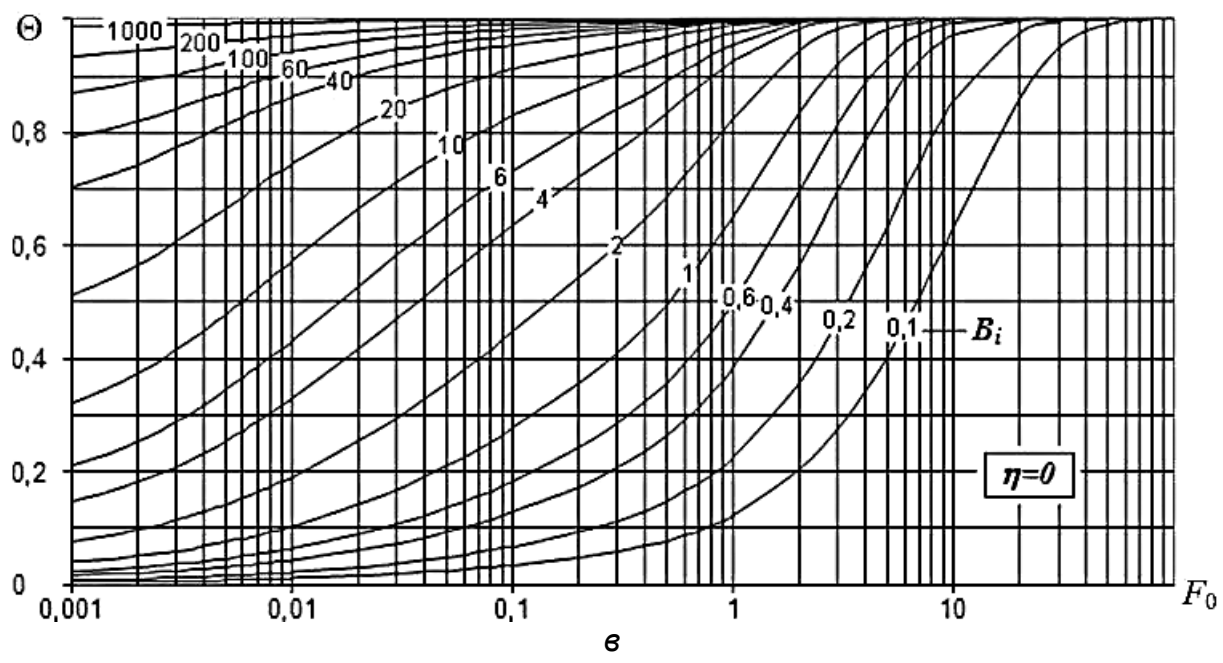
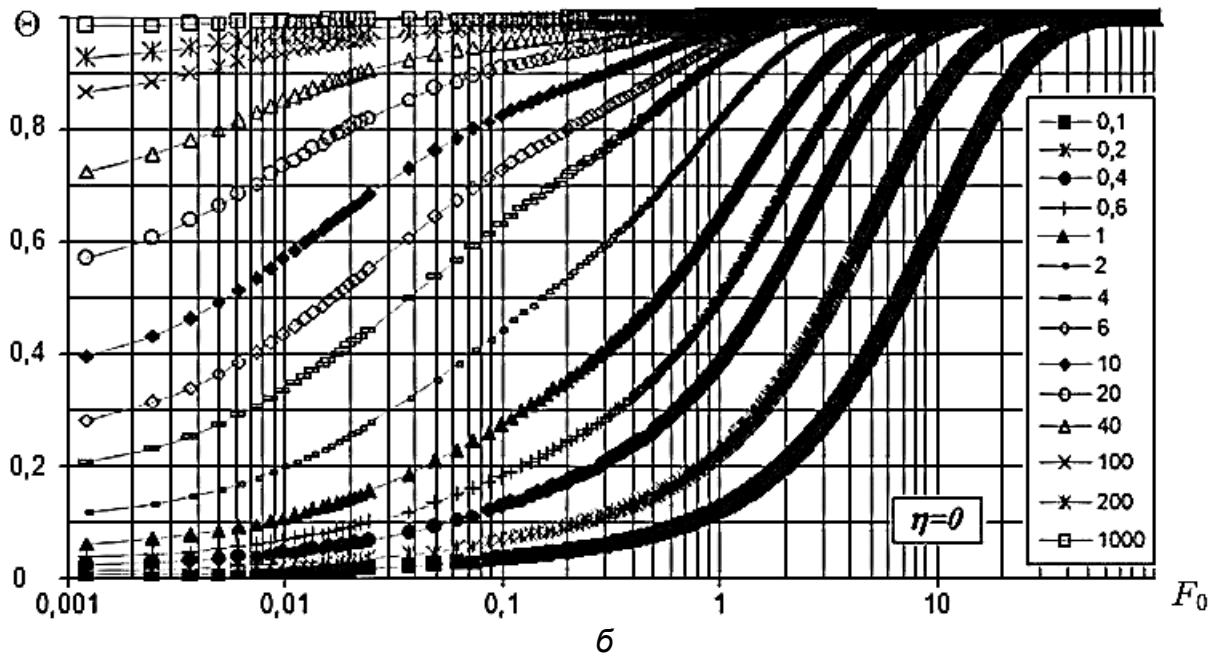
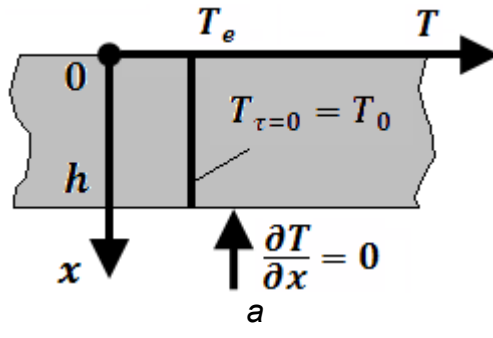


Рис. 4.16. Теплообмін у нескінченній пластині (схема 3, $\eta = 0$):
 а – розрахункова схема; б – розрахунок; в – аналітичний метод [303]

$$A_n = (-1)^{n+1} \left(2Bi \sqrt{\mu_n^2 + Bi^2} \right) / \left(\mu_n (\mu_n^2 + Bi^2 + Bi) \right). \quad (4.15)$$

Результати порівняння числового й аналітичного розв'язків при умові, що $\eta = 0$ і $\eta = 1$, зображено на рис. 4.16, б, в і 4.17 відповідно.

Результати числових розрахунків добре узгоджуються з аналітичними даними, що забезпечує можливість використовувати розроблену математичну модель для розв'язання поставленої задачі теплоперенесення під час руху газоповітряної суміші в приземному шарі атмосфери при наявності в актуальному просторі суцільних твердих тіл заданої теплопровідності.

4.1.7. Числове моделювання процесів теплообміну в твердих тілах складної геометричної форми

Перехідні режими роботи енергетичних і теплотехнічних установок, холодильників і камер високотемпературної обробки пов'язані з нестационарними процесами теплообміну й теплопровідності в їх різних складових деталях, що може призводити до недопустимого змінення технологічних зазорів у їх робочій частині через неоднакове розширення (охолодження) або до надмірних температурних напружень у деталях з матеріалів, що мають різні теплофізичні властивості.

Для оптимального керування такими режимами теплових установок необхідно мати нестационарні тривимірні температурні поля в елементах обладнання [12].

Прогнозування й аналіз теплових полів забезпечує можливість уникнути недопустимого змінення температури або виникнення критичних її перепадів.

Крім того, нестационарні задачі теплоперенесення часто виникають у різних процесах екології атмосфери, пов'язаних з пожежами, коли навколишні об'єкти піддаються значному тепловому навантаженню, під впливом якого вони нагріваються, тліють, виділяють в атмосферу шкідливі речовини й можуть зайнятися.

Моделювалася числовим шляхом динаміка тривимірних полів температури в однорідних багатозв'язних твердих тілах під час їх нагрівання (охолодження) у газоподібному теплопровідному середовищі. Аналітичні методи розв'язання таких задач є ефективними тільки для тіл простої форми [303, 304]. У цьому випадку розрахункові нестационарні залежності поля температур подаються у вигляді експоненціальних рядів, збіжність яких залежить від місця розташування контрольних точок усередині тіла й часу з моменту початку процесу. Числові методи на базі сучасної обчислювальної техніки дають змогу вирішити ці проблеми й розв'язувати поставлену задачу вже без застосування таких комплексних ієрархічних методів, як поетапне моделювання [305].

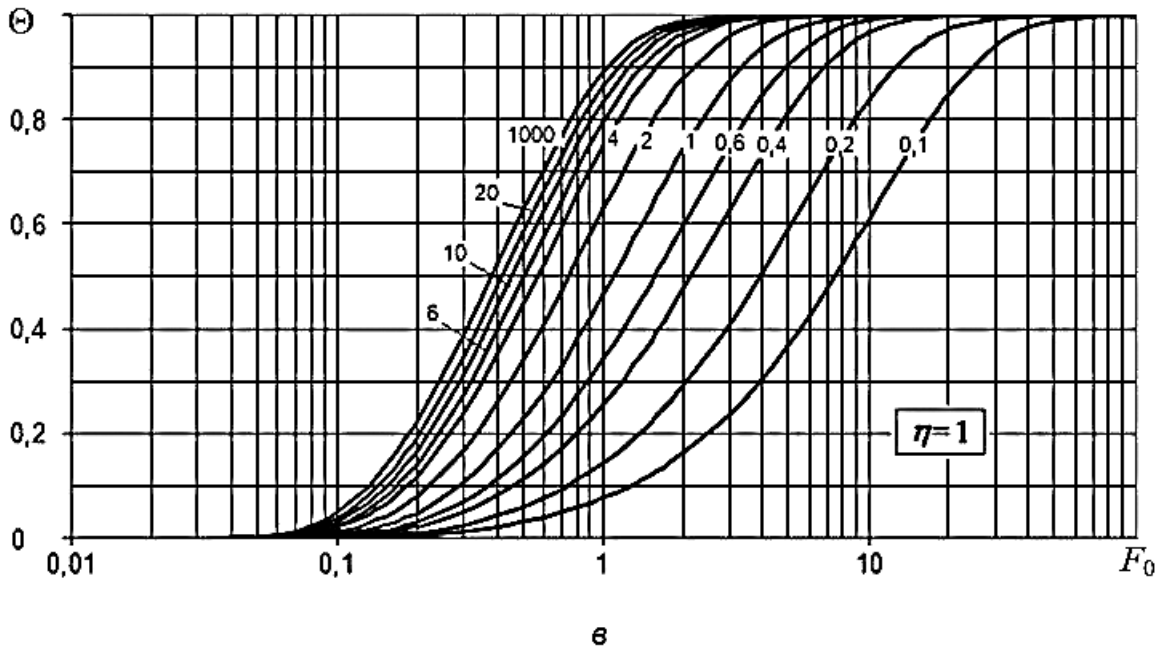
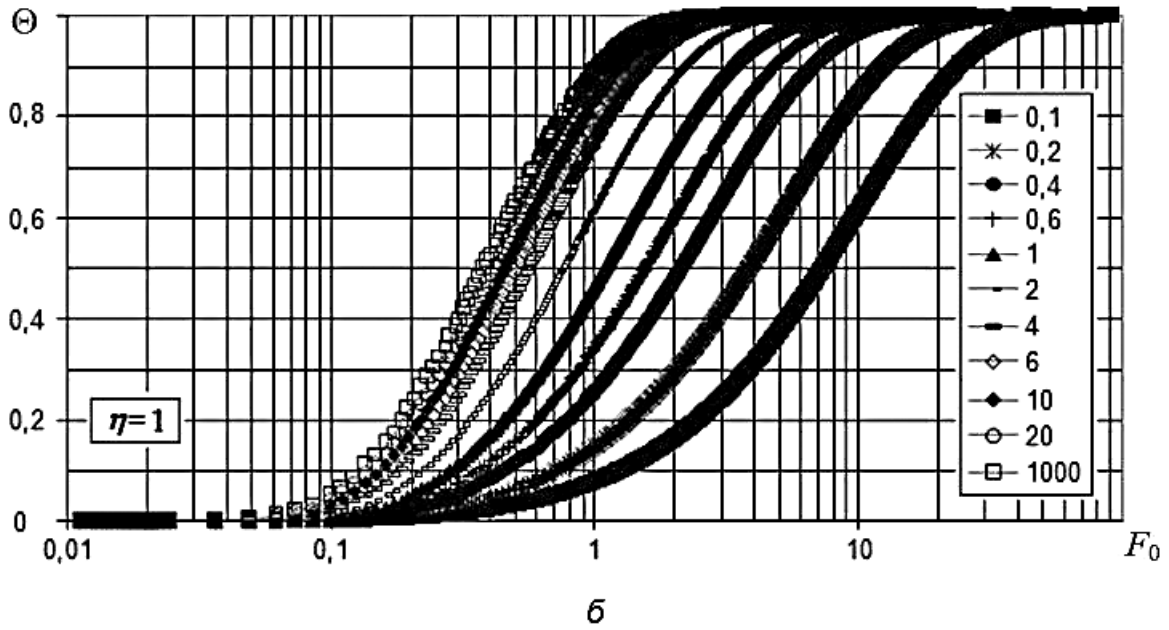
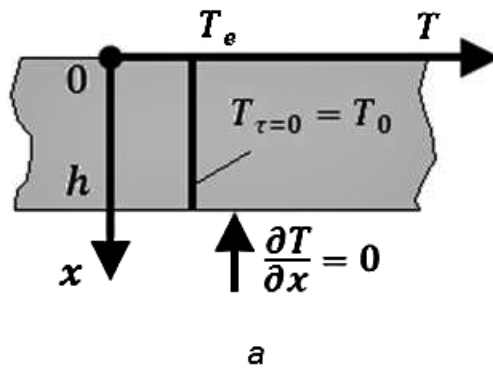


Рис. 4.17. Теплообмін у нескінченній пластині (схема 3, $\eta = 1$):
 а – розрахункова схема; б – розрахунок; в – аналітичний метод [303]

У багатьох роботах пропонується спосіб моделювання, що базується на застосуванні скінченно-різницевого методу й методу скінченних елементів [306], однак розрахунки проводяться без урахування багатовимірності процесу [307] або тільки для нескінченно великих інтенсивностей теплообміну твердих тіл із навколишнім середовищем [308]. Тому створення нової математичної моделі, яка адекватно описує перехідні теплові процеси в твердих тілах, побудова ефективного методу розв'язання поставленої задачі й розроблення моделі у вигляді сучасного програмного засобу комп'ютерної реалізації, який можна використовувати в інженерних цілях для аналізу й прогнозування, є актуальним завданням.

4.1.7.1. Розрахунок теплоперенесення в твердих об'єктах простих форм

Обчислено температурні поля в тривимірних твердих тілах примітивних геометричних форм: сфери, циліндра, паралелепіпеда, призми з основою правильного багатогранника й довільного полігона. Була можливість довільного розташування цих фігур у просторі відносно заданої системи координат.

Для спрощення розрахунків передбачалося, що навколишнє газове середовище є нерухомим, а інтенсивність тепловіддачі від газу до тіла є нескінченно великою величиною. Результати тривимірного нестационарного математичного моделювання температурних розподілів у перерізі суцільних твердих об'єктів простої геометричної форми показано на рис. 4.18 [12].

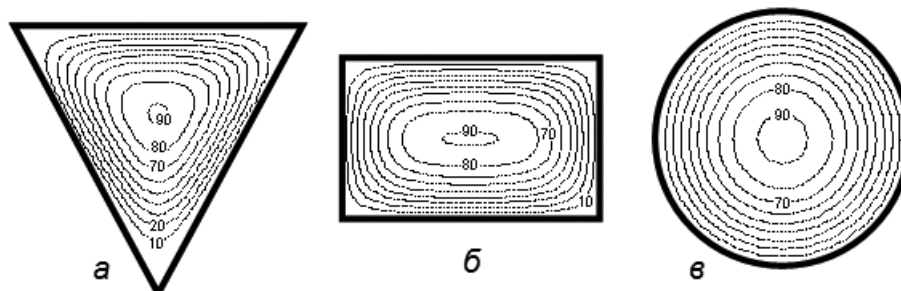


Рис. 4.18. Ізотерми в поперечному перерізі: а – тригранної призми; б – паралелепіпеда; в – циліндра

4.1.7.2. Розрахунок теплоперенесення в тілах з порожнинами

Крім суцільних твердих тіл розроблений програмний засіб комп'ютерної реалізації забезпечує можливість розглядати температурний стан твердих тіл із порожнинами, заповненими газовим середовищем. Перелічені раніше геометричні форми подано в програмному засобі комп'ютерної реалізації як система сімей класів, що дає змогу

використовувати їх для конструювання порожнин у твердих тілах. Результати охолодження циліндричного тіла з порожниною у формі паралелепіпеда зображено на рис. 4.19. Очевидно, що форма поперечного перерізу суцільних твердих тіл і наявність порожнин різних геометричних форм істотно впливають на характер полів температур і швидкість процесу охолодження [12].

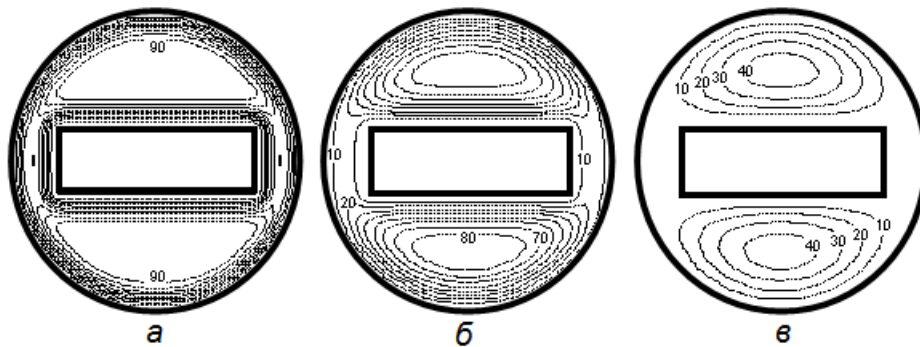


Рис. 4.19. Ізотерми в перерізі циліндра із порожниною в різні моменти часу охолодження: а – 0,5 с; б – 1,5 с; в – 2,5 с

4.1.7.3. Розрахунок теплоперенесення в тілах складних форм

У реальній інженерній практиці деталі приладів, що піддаються тепловому навантаженню, мають складну форму. Тому в програмному засобі комп'ютерної реалізації передбачено можливість обробляти тверді тіла, форма яких може бути комбінацією тіл розглянутих раніше примітивних форм. Температурне поле в поперечному перерізі тіла, яке є комбінацією призми з двома паралелепіпедами, у певний момент часу процесу охолодження зображено на рис. 4.20.

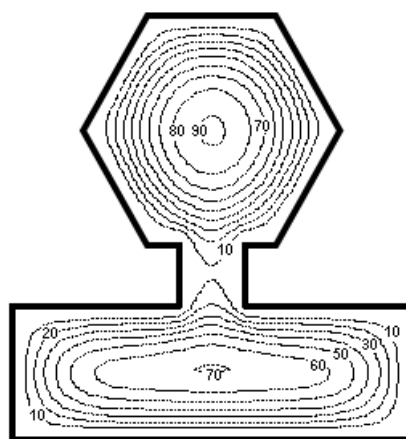


Рис. 4.20. Ізотерми в поперечному перерізі тіла складної форми в момент 1,49 с від початку охолодження

Часто теплонапружені деталі мають абсолютно довільну форму, яка

не може бути компіляцією фігур простих геометричних форм. Прикладом такого тіла може бути лопатка турбіни. Для такого роду тіл програмний засіб комп'ютерної реалізації пропонує використовувати тіла з основою довільного полігона. Координати плаского перерізу лопатки турбіни й формують такий полігон. Було проведено модельні розрахунки процесу охолодження типової лопатки турбіни, що є суцільною в перерізі (рис. 4.21, а) та з порожнинами охолодження (рис. 4.21, б) при нескінченно великій інтенсивності теплообміну. Очевидно, що наявність порожнин у суцільному твердому тілі прискорює теплообмін [12].

4.1.8. Охолодження твердих тіл потоком теплопровідного газу

Верифікація розробленої математичної моделі спряженого теплообміну проводилася на основі числового розв'язання тестової задачі охолодження нагрітого до температури 373 К твердого тіла кубічної форми потоком теплопровідного газу з температурою 273 К, що набігає під кутом 45° зі швидкістю 10 м/с. Для прискорення розрахунку передбачалося, що інтенсивність тепловіддачі, а також теплопровідність газового середовища й твердого тіла значно перевищують реальні значення фізичних величин.

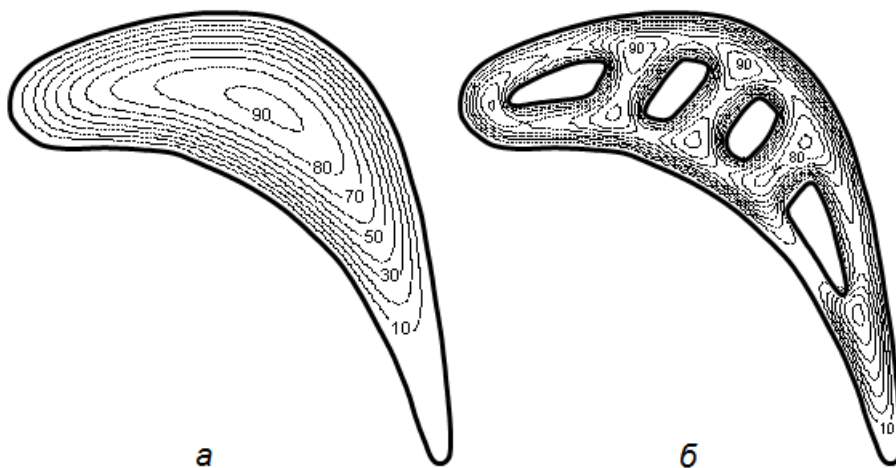


Рис. 4.21. Ізотерми в поперечному перерізі лопатки турбіни в різні моменти від початку охолодження: а – суцільної через 8,5 с; б – з порожнинами через 1,98 с

Процес охолодження кубічного твердого тіла в центральному перерізі камери термообробки зображено на рис. 4.22 [15].

Результати числових розрахунків із прийнятною точністю узгоджуються з очікуваною фізичною картиною. Необхідно зазначити нерівномірний характер отриманих температурних полів, що визначаються наявністю більш холодного газового середовища із боку потоку, що набігає на тіло, порівняно з полями, отриманими для тіл, оточених нетеплопровідним нерухомим газом [12]. Урахування теплового перенесення газом наближає модельну картину до фізичної, що

забезпечує можливість використовувати математичну модель для оцінювання ефективності функціонування камер термообробки твердих тіл у потоці суміші.

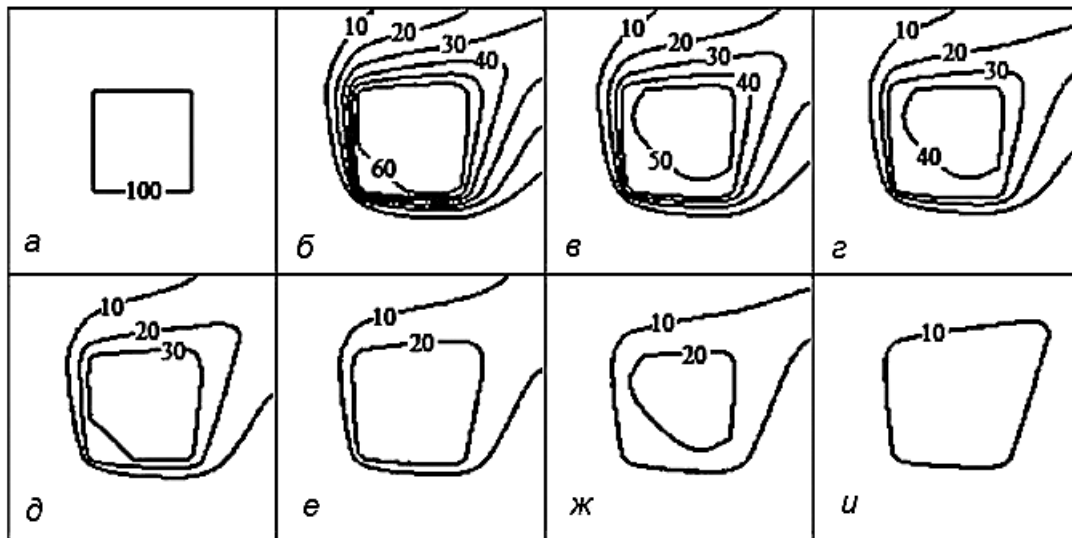


Рис. 4.22. Ізотерми в перерізі камери термообробки в різні моменти часу від початку охолодження: а – 0 с; б – 20 с; в – 30 с; г – 40 с; д – 50 с; е – 60 с; ж – 70 с; и – 80 с

4.2. Числове моделювання процесу струминного витікання газової домішки в атмосферу

Розглядалося формування струменя газової домішки з розвитком ударної хвилі під час виходу із детонаційної труби в необмежений простір [8], що отримується в режимі примусового імпульсного прискорення потоку за фронтом хвилі, з метою визначення умов, при яких забезпечується підтримання інтенсивності ударної хвилі зі сферичним фронтом на період проходження хвилею довжини детонаційної комірки [309]. Такий режим струминного витікання газу використовується, наприклад, з метою ініціювання детонації в необмеженому об'ємі прискорюваним струменем [8] як безпечної способу знешкодження полів, оснащених вибуховими пристроями натискної дії в зонах мілітарних конфліктів [309]. Особливість запропонованого способу вибухового розмінування полягає в застосуванні струменя відпрацьованих газів важкої техніки для отримання хмари паливоповітряної суміші й подальшого об'ємного вибуху з метою суцільного розмінування або гасіння пожежі [9]. Броньований транспортний об'єкт 1 (рис. 4.23), рухаючись мінно-вибуховим загородженням 2, розпорошує придатну до детонації рідину, формуючи протяжну паливоповітряну хмару 3. Упорскування палива здійснюється в струмись відпрацьованих газів 4 об'єкта для забезпечення підігрівання й поліпшення змішування парів палива й повітря і, тим самим, покращання

якості паливоповітряної суміші з більш рівномірним розподілом концентрації палива у сформованій хмарі. Треба зазначити, що робочий процес у дизельному двигуні об'єкта відбувається з надлишком повітря майже в 2 рази, тому струмінь відпрацьованих газів містить не менше 80 % повітря, кисень якого не реагував. Після розподілу суміші над небезпечною ділянкою в ній ініціюється детонація 5 [8]. Це приводить до виникнення імпульсу тиску над ділянкою і, отже, до вибухового розмінування. Для переміщення об'єктів 1 небезпечними ділянками використовуються ножові колійні трали 6, які витягають вибухові пристрої у бік від колії руху об'єкта. Основою технічного рішення було застосування детонаційної труби, що має пристрій імпульсного прискорення газового потоку за фронтом детонаційної хвилі в період виходу хвилі в необмежений простір.

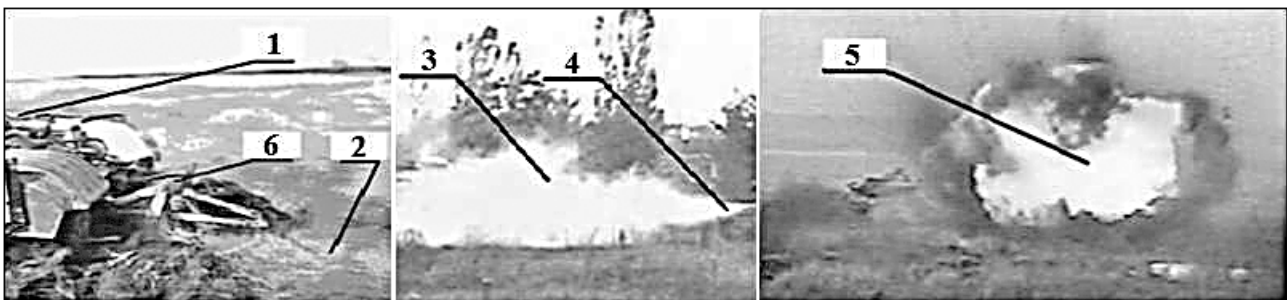


Рис. 4.23. Формування паливоповітряної суміші та її детонація

Умови переходу пласкої детонації у сферичну досліджувалися, наприклад, у роботі [309]. Умови струминного ініціювання детонації в необмеженому просторі досліджувалися в роботі [8]. Установлено, що інтенсифікація вихорів сприяє виникненню детонації. Відомо, що недорозширений струмінь у процесі свого витікання формує області «зворотної» течії, що призводить до великомасштабної турбулентності.

У роботі [33] на основі розробленої математичної моделі руху газової суміші моделювався розвиток ударної хвилі під час виходу із труби в необмежений простір на різних режимах примусового імпульсного прискорення потоку за хвилиною з метою визначення умов, у яких забезпечується підтримання інтенсивності ударної хвилі зі сферичним фронтом на період проходження хвилиною довжини детонаційної комірки.

За аналогією виникнення детонації в детонаційній трубі, де детонаційна хвиля виникає внаслідок збільшення інтенсивності пакета хвиль стиснення, у пристрої (рис. 4.24) під час виходу ударної хвилі з детонаційної труби 1 у потоці продуктів детонації утворюється плазмовий «поршень» 2, який електродинамічно прискорюється й підтискає продукти детонації до сферичного фронту хвилі. Зрозуміло, що швидкість руху поршня U_1 має перевищувати швидкість поширення ударної хвилі U_2 , унаслідок чого компенсується падіння тиску за фронтом хвилі під час її поширення.

Закон змінення швидкості на зрізі детонаційної труби задавався в такому вигляді:

$$U_1(t) = U_0(50 U_0 t + 1)^{3/5} \quad (4.16)$$

при умові, що $t \leq 40$ мкс;

$$U_1(t) = \text{const} \quad (4.17)$$

при умові, що $t > 40$ мкс, а $U_0 = 800$ м/с.

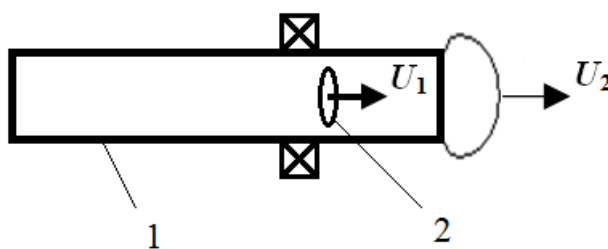


Рис. 4.24. Схема пристрою ініціації сферичної детонації струменем

При цьому вважалось, що густина газу на зрізі сопла, вихідний діаметр якого дорівнював 100 мм, є постійною.

Результати моделювання витікання струменя при витраті газу, що збільшується і зменшується, зображено на рис. 4.25–4.27.

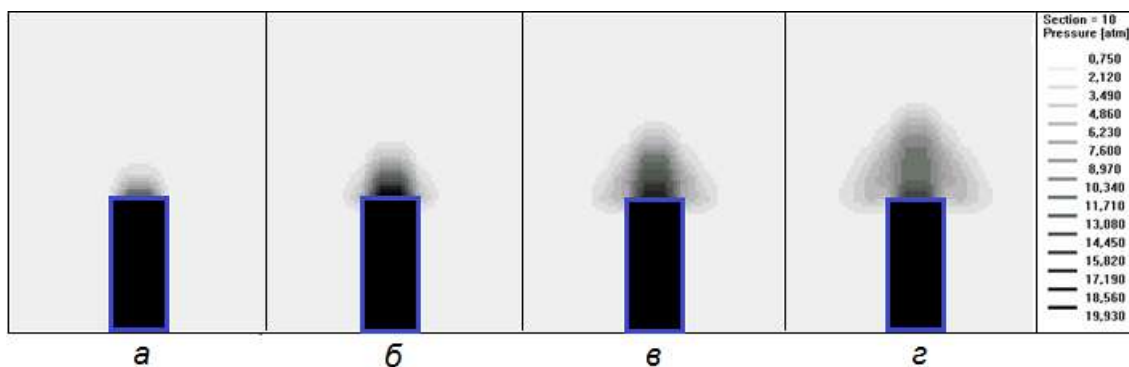


Рис. 4.25. Динаміка поля тиску при витіканні газу на зрізі сопла зі швидкістю $U_1(t)$ через період часу: а – 24 мкс; б – 48 мкс; в – 72 мкс; г – 96 мкс

Під час порівняння розрахункових та експериментальних параметрів газу, отриманих під час розвитку струменя, що прискорюється в необмеженому просторі, було встановлено, що форма поверхонь збурених областей газу в один і той же момент часу практично збігається. Інтенсивне імпульсне підтискання газу за переднім фронтом струменя забезпечує короткочасне «утримання» термодинамічних параметрів газу в умовах сферичного фронту поширення збурень. Швидкість розширення

області збурення в разі прискорення потоку зростає незначно. Це приводить до збільшення градієнтів термодинамічних параметрів газу в області за сферичним фронтом ударної хвилі.

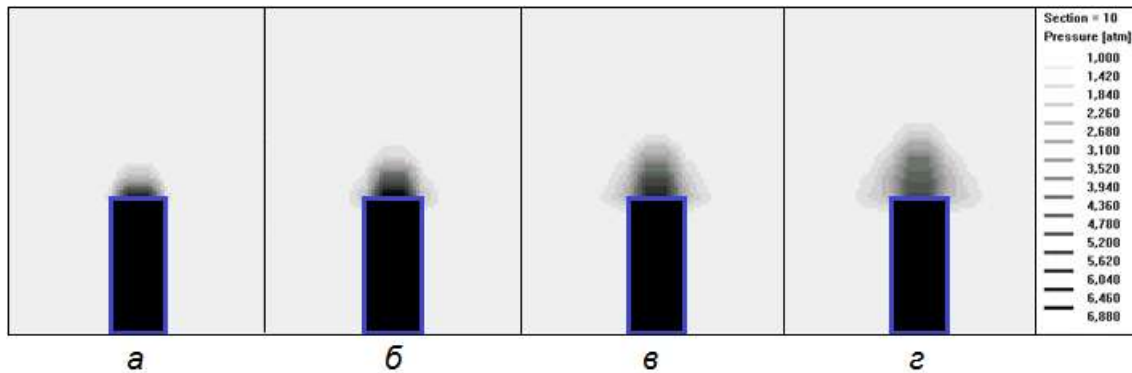


Рис. 4.26. Динаміка поля тиску при витіканні газу на зрізі сопла зі швидкістю $U_2(t)$ через період часу: а – 24 мкс; б – 48 мкс; в – 72 мкс; г – 96 мкс

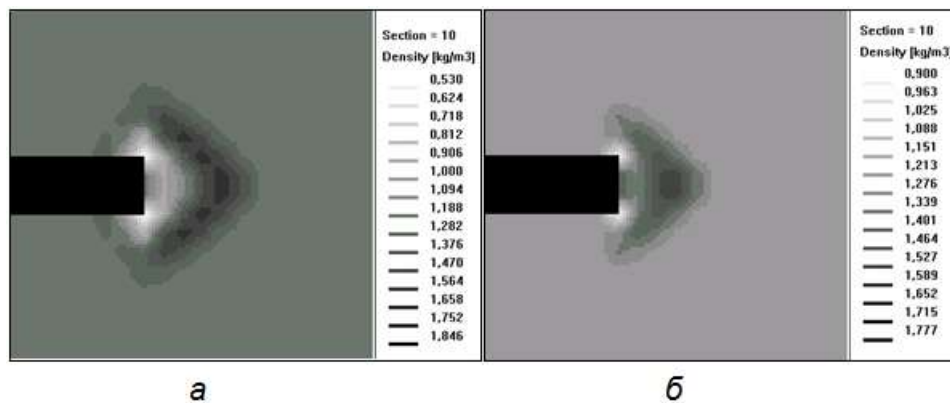


Рис. 4.27. Порівняння полів густини через 96 мкс після викиду при різній динаміці витікання струменя: а – $U_1(t)$; б – $U_2(t)$

Також моделювалося утворення придатної до детонації хмари шляхом змішування палива в струмені відпрацьованих газів силової установки бронеоб'єкта [8]. У розрахунковій області задавалося непроникне тіло з формою, що відповідає поперечному перерізу об'єкта. У цьому тілі формувалася щілина прямокутної форми з розмірами $250 \times 1500 \text{ мм}^2$, через яку витікав струмінь паливоповітряної суміші. Масова концентрація палива в суміші на виході зі щілини дорівнювала 10 % і не змінювалася з часом. Масова витрата суміші становила $5,7 \text{ кг/с}$. Швидкість набіжного повітряного потоку дорівнювала 3 м/с . Результати розрахункових розподілів відносної масової концентрації домішки у вертикальному й горизонтальному перерізах уздовж осі струменя на момент часу 15 с показано на рис. 4.28.

Результати моделювання також порівнювалися з результатами експериментальних досліджень динаміки витікання струменя з отвору сопла діаметром 2 мм [8]. Інтенсивне імпульсне прискорення потоку в

цьому випадку забезпечувалося розігріванням струменя газу імпульсною дугою. Густина газу в розрядній порожнині була більше густини газу в області витікання. Об'єм порожнини був підібраний таким чином, щоб за час витікання газу в період його імпульсного прискорення густина газу зменшилася не більше, ніж на 10%. Динаміку розвитку струменя зображено на рис. 4.29.

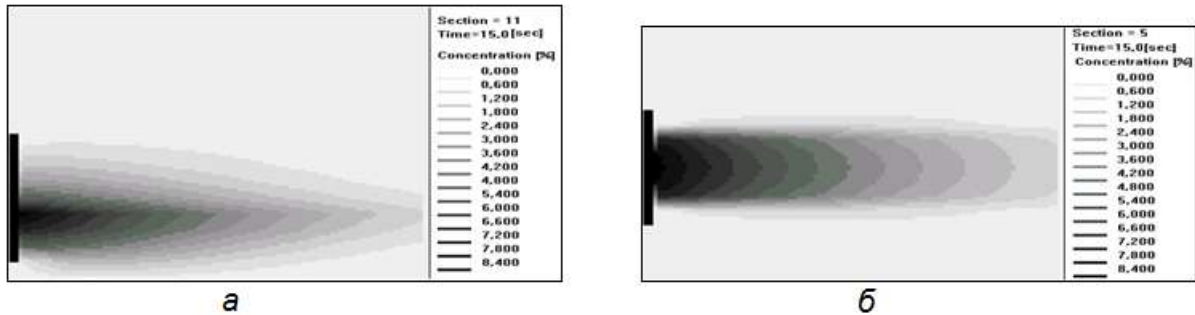


Рис. 4.28. Поля масової концентрації уздовж осі струменя через 15 с: а – у вертикальному перерізі; б – у горизонтальному перерізі

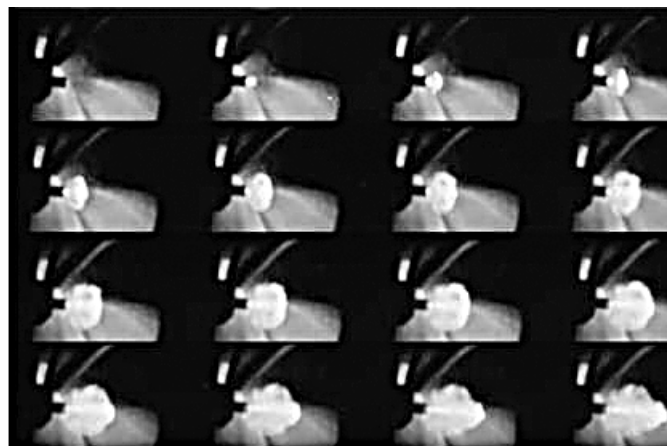


Рис. 4.29. Розвиток імпульсно прискорюваного плазмового струменя в атмосфері (час між кадрами фотозйомки – 8 мкс)

Результати експерименту якісно підтверджують припущення, що інтенсивне імпульсне підтискання потоку приводить до змінення форми струменя. Спостерігається практично півсферичне поширення області збурення.

Порівняння розрахункового поля густини газової суміші в струмені з експериментальними даними фотозйомки для одного з моментів часу показано на рис. 4.30.

Таким чином, результати математичного моделювання підтверджують можливість формування придатних до детонації сумішей у струмені відпрацьованих газів бронеоб'єкта розмінування. З допомогою розробленої математичної моделі можна виявити необхідний режим прискорення струменя залежно від діаметра детонаційної труби, при

якому забезпечується «утримання» інтенсивності сферичної ударної хвилі, яка формується, на період проходження хвилею довжини детонаційної комірки. Модель забезпечує також можливість урахувати вплив атмосферних умов на розмір детонувальної хмари.

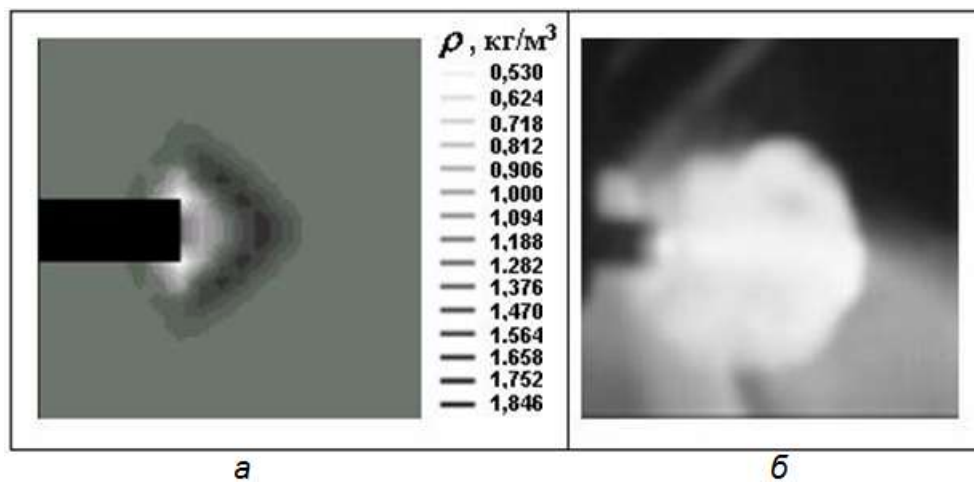


Рис. 4.30. Розподіл густини газоподібних продуктів горіння під час формування недорозширеного струменя через 96 мкс після викиду: а – результати розрахунку; б – кадр фотозйомки

4.3. Числове моделювання процесу миттєвого вибуху газоподібної домішки в атмосфері

Валідація й верифікація моделі миттєвого вибуху газоповітряної суміші проводилися шляхом порівняння результатів, отриманих під час експериментальних досліджень вибуху пропану, і результатів, отриманих методом оцінювання надлишкового тиску з використанням регресійної залежності [310–312]. Моделювався вибух хмари стехіометричної пропан-повітряної суміші при таких умовах експерименту: об'єм хмари горючої суміші – 1495 м³; енергія вибуху – 4640 МДж.

У роботі [311] на основі натурних експериментів з дослідження вибуху хмар різних сумішей повітря з ацетиленом, пропаном і метаном та сумішей пропану й метану з киснем було отримано регресійну залежність надлишкового тиску у фронті ударної хвилі від відстані від епіцентру вибуху для заданої вибухової енергії:

– якщо динамічний радіус хмари $R_0 \geq 0,3$, то

$$\Delta P_{\phi} = 0,6 \cdot 10^{-1} / R_0 + 1,4 \cdot 10^{-2} / R_0^2 + 2,5 \cdot 10^{-3} / R_0^3; \quad (4.18)$$

– якщо динамічний радіус хмари $0,08 \leq R_0 < 0,3$, то

$$\Delta P_{\phi} = 0,052 / R_0^{1,7}, \quad (4.19)$$

де $R_0 = R/E^{1/3}$ – динамічний радіус; R – відстань від епіцентру; E – енергія вибуху.

На рис. 4.31 показано результати валідації і верифікації математичної моделі вибуху газоподібного пропану.

Валідація математичної моделі вибуху газоповітряної суміші відносно експериментальних результатів вимірювання надлишкового тиску у фронті вибухової ударної хвилі проводилася шляхом оцінювання статистичних показників, рекомендованих у роботах [92, 317]. Усі обчислені значення знаходяться в межах прийнятності (див. табл. 4.1): $FB = 0,42$; $VG = 1,11$; $MG = 0,93$; $NMSE = 0,21$; $Fa2 = 100\%$; $r = 0,997$.

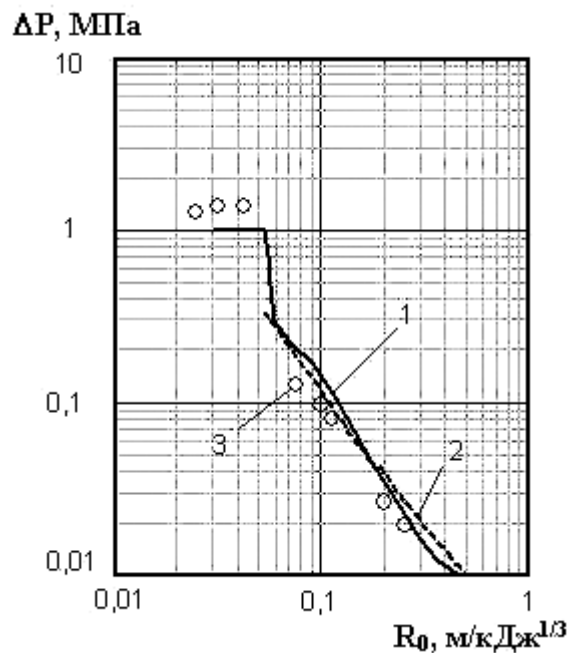


Рис. 4.31. Розподіл надлишкового тиску у фронті ударної хвилі:
 1 – результати розрахунку; 2 – регресійна залежність;
 3 – експериментальні дані

Порівняння результатів обчислення надлишкового тиску у фронті вибухової хвилі за допомогою моделі з експериментальними даними й результатами розрахунку за регресійною залежністю дає змогу зробити висновок про достатньо прийнятну точність розробленої моделі миттєвого вибуху газоповітряної суміші й придатність математичної моделі для її застосування для оцінювання наслідків впливу баричного збурення потоку газоповітряної суміші в приземному шарі атмосфери внаслідок її вибуху на навколишнє середовище.

4.4. Числове моделювання дефлаграційного горіння водню в гаражному приміщенні

Газодинамічний процес водневого дефлаграційного горіння на початковій стадії пожежі в приміщенні гаража моделювався з урахуванням

його фактичного розміру при стандартних атмосферних умовах навколишнього середовища. Уважалось, що всі вікна, двері й в'їзні ворота були зруйновані внаслідок миттєвого вибуху посудин високого тиску для зберігання водню (приміщення відкрите для надходження атмосферного повітря всередину і викиду продуктів горіння назовні).

4.4.1. *Визначальні геометричні параметри розрахункової області*

План приміщення показано на рис. 4.32. Несні конструкції будівлі – цегляні стіни завтовшки 0,25 м, висота приміщення 3 м. Приміщення складається з двох кімнат, розділених внутрішньою перегородкою завтовшки 0,25 м із прорізом площею $2 \times 0,25 \text{ м}^2$. Товщина перекриття становить 0,25 м. Приміщення має чотири віконні прорізи площею $1 \times 1,5 \text{ м}^2$ кожен. На вході в кожну кімнату розташовано дверні прорізи площею $4 \times 2,5 \text{ м}^2$.

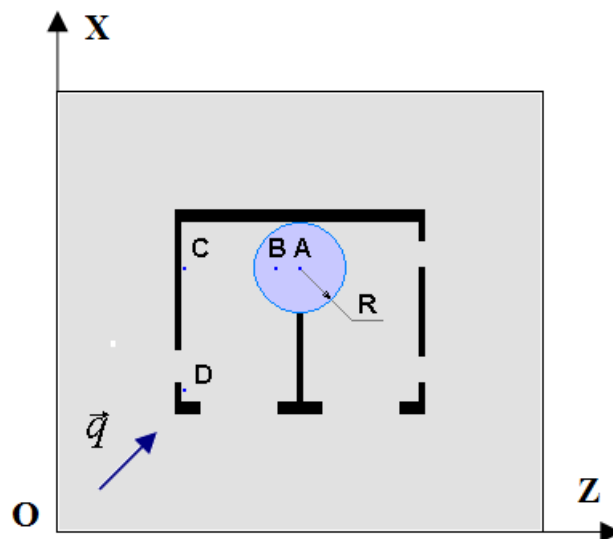


Рис. 4.32. Схема розрахункового простору й розташування контрольних точок

Під час застосування математичної моделі в розрахунковій області використовувався елементарний контрольний об'єм розміром $0,25 \times 0,25 \times 0,25 \text{ м}^3$. Центр горючої хмари радіусом $R = 2 \text{ м}$ і точка займання А, контрольні точки В, С і D розташовувалися на висоті 1,125 м.

4.4.2. *Сценарії розвитку водневої пожежі*

На умови розвитку пожежі у виробничому приміщенні можуть впливати такі фактори, як місце виникнення пожежі, розташування всередині вікон і дверних отворів (відкриті чи закриті), а також об'єм і параметри джерела викиду пального. З метою визначення впливу зазначених факторів на параметри пожежі було досліджено кілька

можливих сценаріїв розвитку пожежі при різних параметрах хмари викиду пального. Вхідні отвори й вікна виробничого приміщення під час розвитку пожежі передбачалися відкритими. Було розглянуто два сценарії. У першому випадку передбачалося, що після витікання водню з балона, де він знаходився під тиском, утворилася хмара радіусом $R = 2$ м воднево-повітряної стехіометричної суміші з параметрами відповідних атмосферних умов (сценарій 1). У другому випадку передбачалося, що внаслідок руйнування балонів, у яких знаходився стиснений водень, утворювалася хмара радіусом $R = 2$ м з тиском 134213 Па й масовою концентрацією водню $Q_1 = 0,111$, температура якої відповідала атмосферним умовам (сценарій 2). Початкові умови для сценарію 2 відповідали миттєвому вибуху 12 балонів об'ємом $0,51$ м³ кожний. Передбачалося, що для обох сценаріїв центр хмари А розташовувався в отворі між кімнатами (див. рис. 4.32).

4.4.3. Результати моделювання водневої пожежі в приміщенні

Після реалізації обох сценаріїв розвитку пожежі було отримано такі дані:

- розподіли відносної масової концентрації водню й продуктів горіння в різні моменти часу в площині, паралельній до підлоги, на висоті 1,125 м (рис. 4.33);
- часові змінення надлишкового тиску, температури, концентрації пального й продуктів горіння в контрольних точках В, С і D.

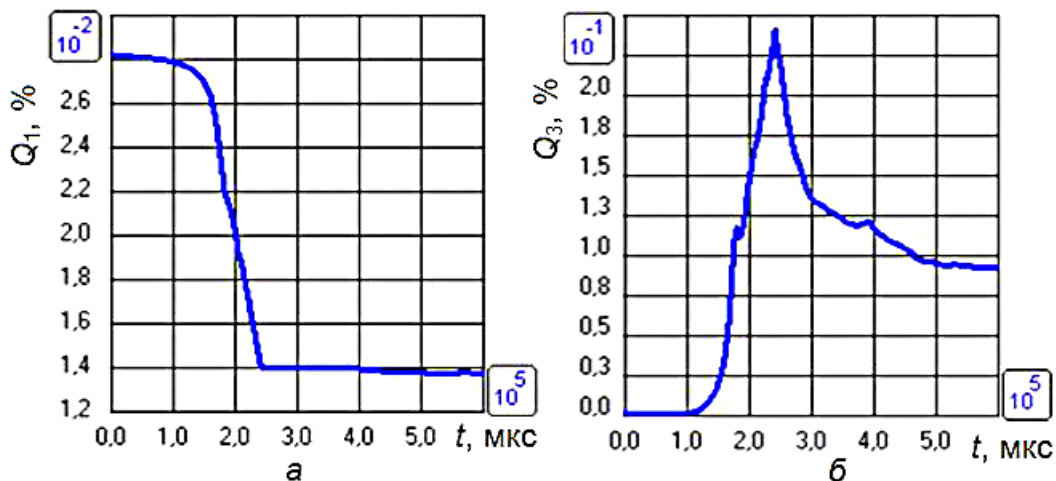


Рис. 4.33. Концентрація водню (а) і продуктів горіння (б) у контрольній точці В (сценарій 1)

Динаміку змінення концентрації водню та його продуктів горіння в точці В, надлишкового тиску й температури в точках В, С і D для сценарію 1 зображено на рис. 4.34–4.36.

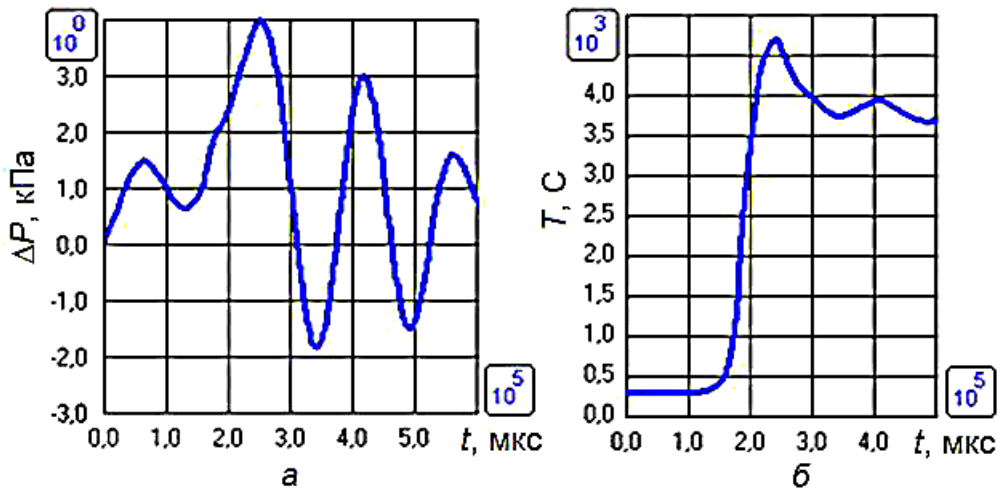


Рис. 4.34. Надлишковий тиск (а) і температура (б) у точці В (сценарій 1)

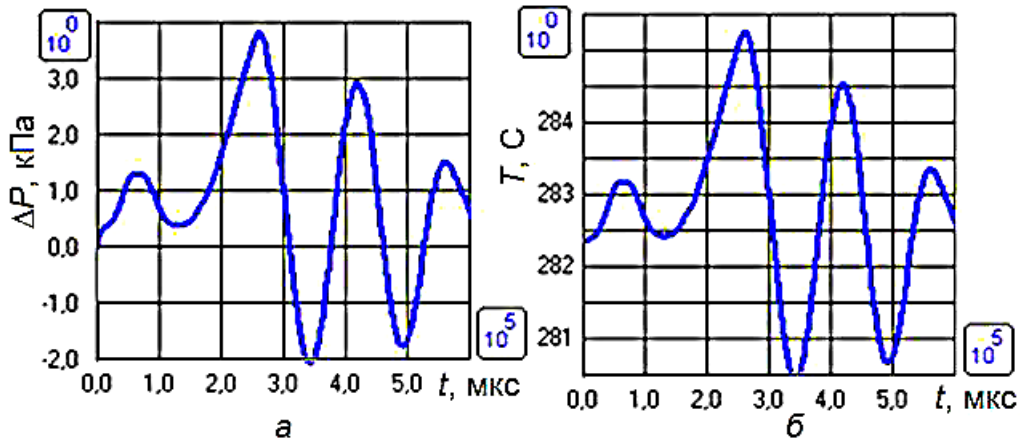


Рис. 4.35. Надлишковий тиск (а) і температура (б) у точці С (сценарій 1)

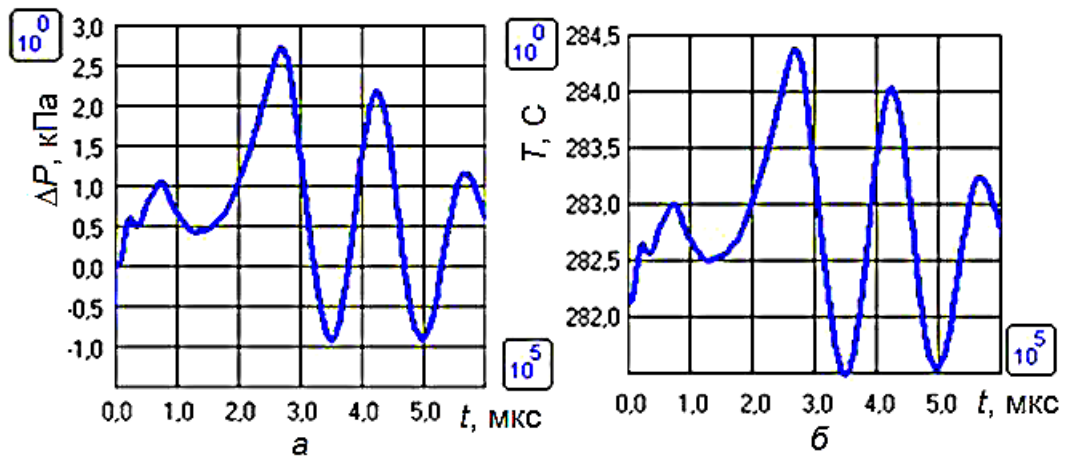


Рис. 4.36. Надлишковий тиск (а) і температура (б) у точці D (сценарій 1)

Поля концентрації водню й продуктів горіння для сценарію 1 при різних значеннях часу від моменту займання показано на рис. 4.37.

Часові зміни масової концентрації водню й продуктів горіння в контрольній точці В, надлишкового тиску й температури в контрольних точках В, С і D для аварійного сценарію 2 зображено на рис. 4.38–4.41.

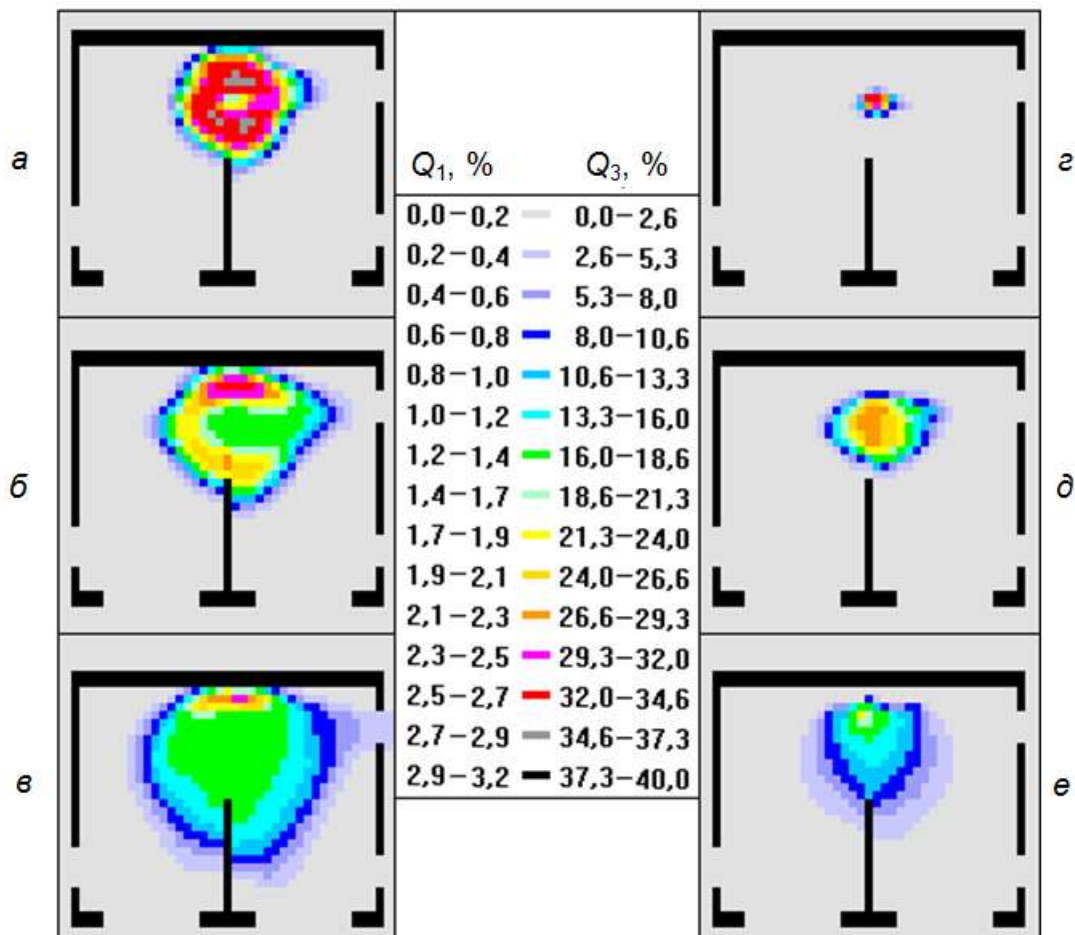


Рис. 4.37. Динаміка концентрації водню (а–в) і продуктів горіння (з–е) при значеннях часу 0,15, 0,25 і 0,35 с від моменту займання (сценарій 1)

Поля відносної масової концентрації водню й продуктів горіння для аварійного сценарію 2 при різних значеннях часу від моменту займання газоповітряної суміші зображено на рис. 4.42.

Аналіз результатів обчислення, показаних на рис. 4.33–4.42, свідчить про те, що параметри середовища всередині приміщення (сценарії 1 і 2) відрізняються від параметрів середовища при горінні водню у відкритому просторі.

Зокрема, максимальна відносна масова концентрація продуктів горіння в приміщенні гаражного боксу нижче (поз. б на рис. 4.33 і 4.38), ніж у відкритому просторі. Максимальний надлишковий тиск у фронті вибухової хвилі в приміщенні гаража нижче (поз. а на рис. 4.34–4.36 і

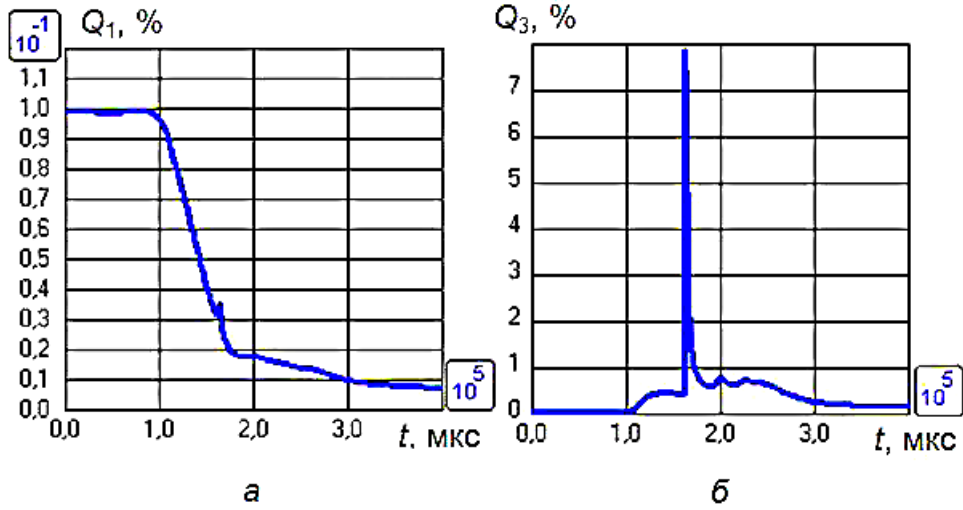


Рис. 4.38. Концентрація водню (а) і продуктів горіння (б) у контрольній точці В (сценарій 2)

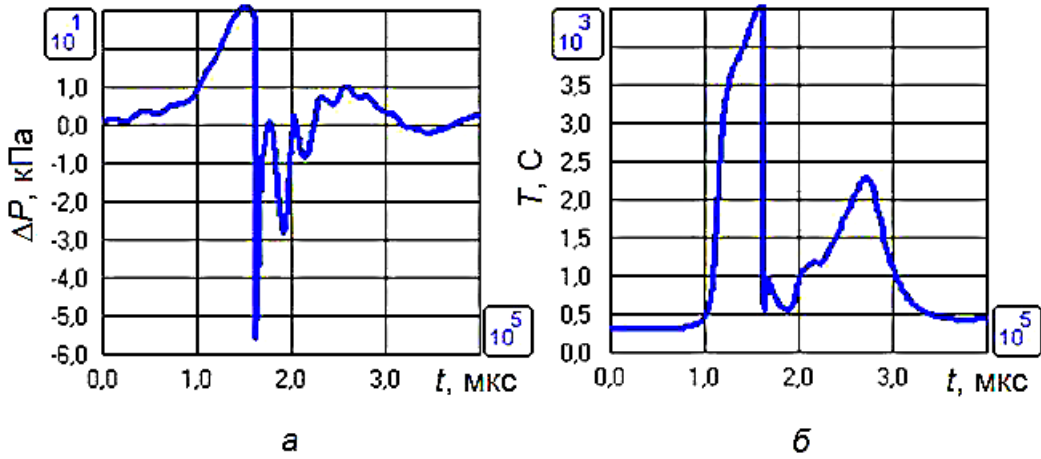


Рис. 4.39. Надлишковий тиск (а) і температура (б) у контрольній точці В (сценарій 2)

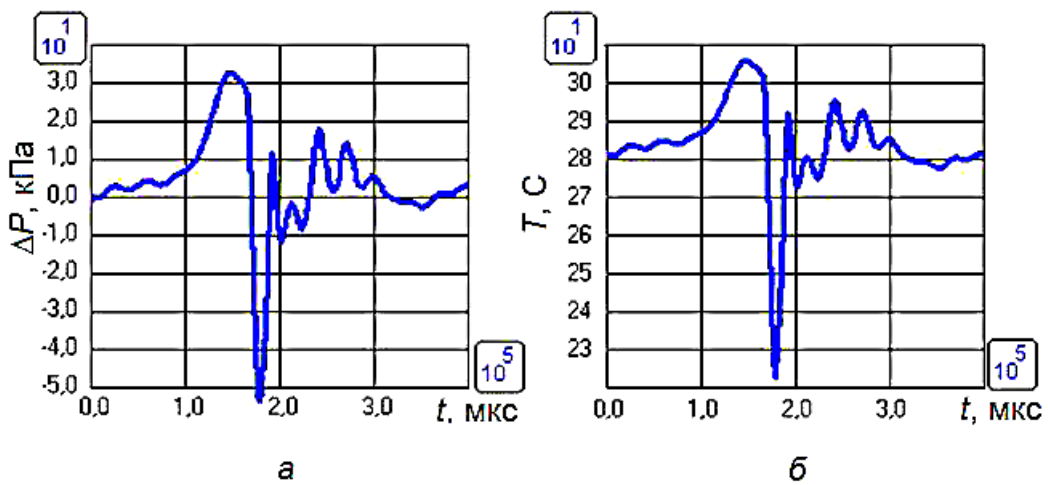


Рис. 4.40. Надлишковий тиск (а) і температура (б) у контрольній точці С (сценарій 2)

4.39–4.41), ніж у відкритому просторі. Спостерігається виникнення відбитих хвиль тиску, пов'язаних з наявністю суцільних стінок будівлі. Максимальна температура газоповітряної суміші в гаражному приміщенні вище (поз. б на рис. 4.34–4.36 і 4.39–4.41), ніж у відкритому просторі. Виявлені особливості обумовлені конструкцією виробничого приміщення боксу й наявністю інтенсивного тепло- і масообміну газоповітряної суміші з навколишнім середовищем.

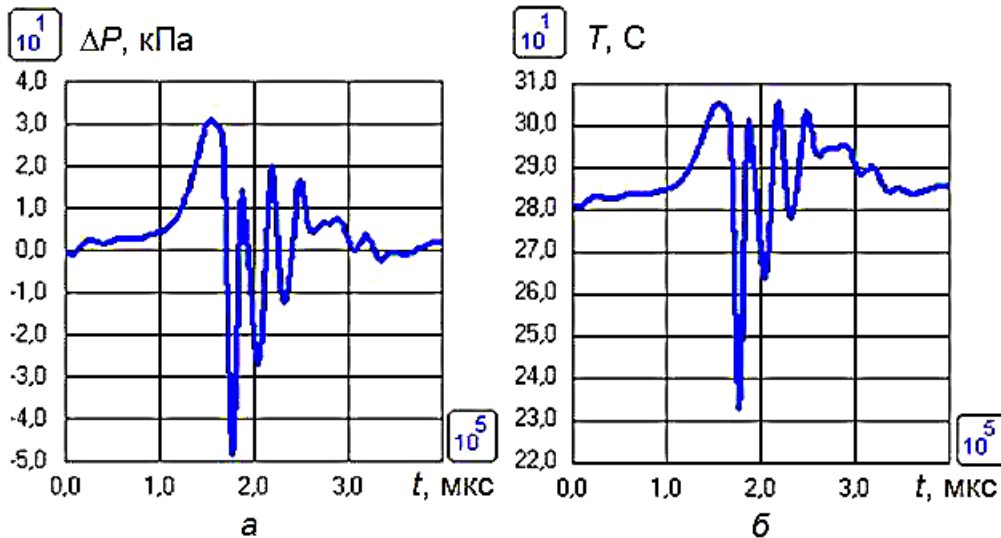


Рис. 4.41. Надлишковий тиск (а) і температура (б) у точці D (сценарій 2)

Аналіз результатів обчислення, зображених на рис. 4.38–4.42, свідчить про те, що параметри середовища всередині приміщення за сценарієм 2 відрізняються від параметрів середовища за сценарієм 1. Зокрема, максимальна концентрація продуктів горіння за сценарієм 2 вище (див. рис. 4.38, б), ніж за сценарієм 1 (див. рис. 4.33, б). Максимальний надлишковий тиск за сценарієм 2 нижче (див. поз. а на рис. 4.39–4.41), ніж за сценарієм 1 (див. поз. а на рис. 4.34–4.36). Максимальна температура за сценарієм 2 вище (див. поз. б на рис. 4.39–4.41), ніж за сценарієм 1 (див. поз. б на рис. 4.34–4.36). Ці відмінності спричинені більшою масою пального, що бере участь у горінні, а також більш інтенсивним розсіюванням суміші за сценарієм 2, ніж за сценарієм 1.

У разі виникнення водневої пожежі у виробничому приміщенні можна рекомендувати кілька заходів щодо впливу на інтенсивність горіння (якщо спрацювали датчики, що реєструють підвищену концентрацію пального):

- розпилення води (приводить до зниження температури суміші і, як наслідок, до зменшення швидкості горіння);
- подведення в приміщення нейтрального газу (наприклад, діоксиду вуглецю) або введення хімічно активних домішок (приводить до підвищення мінімальної концентраційної межі займистості і, як наслідок, до зниження температури суміші).

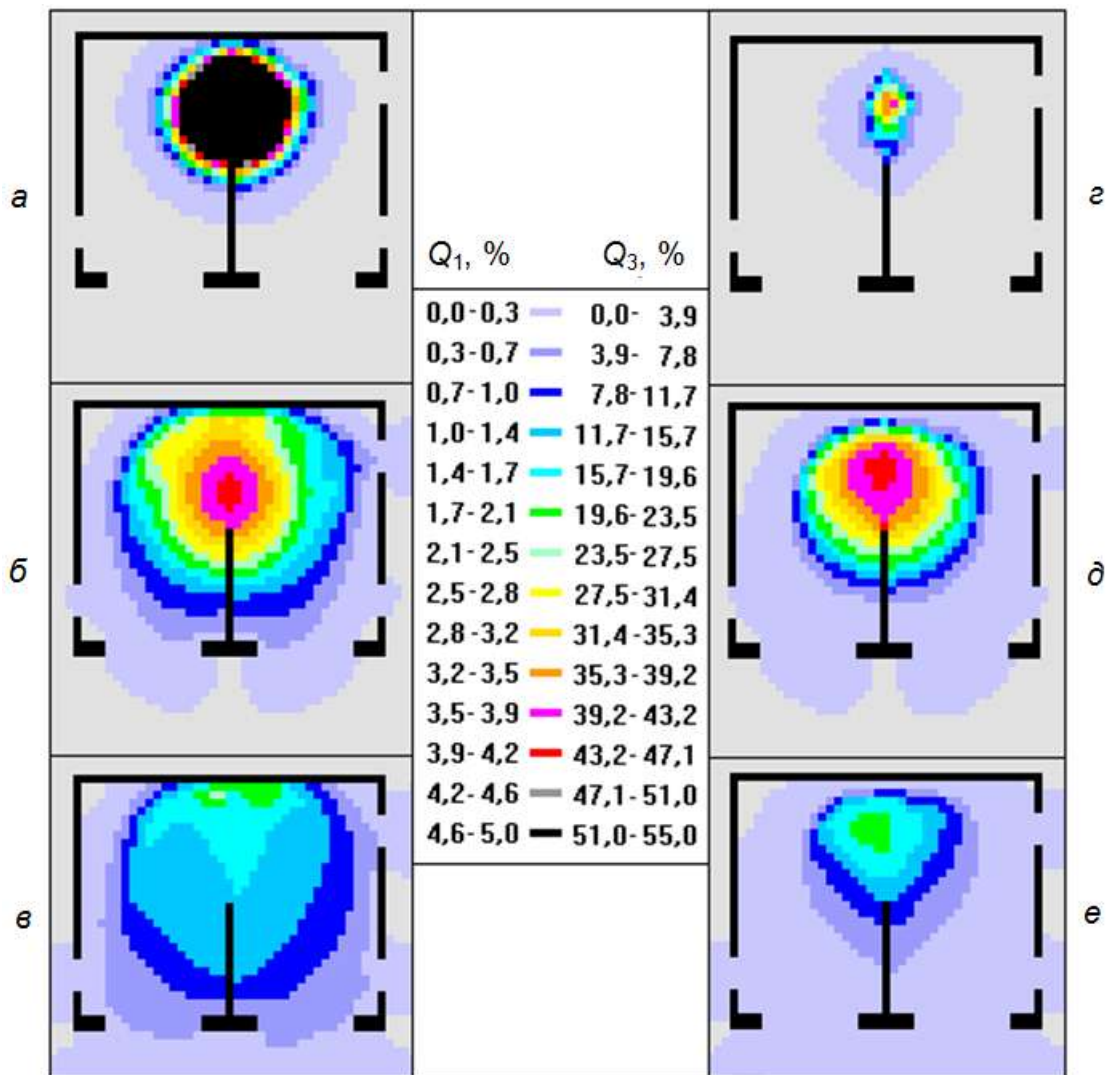


Рис. 4.42. Концентрація водню (а–в) і продуктів горіння (z–e) при значеннях часу 0,1 с, 0,15 с і 0,2 с від моменту займання (сценарій 2)

4.5. Числове моделювання процесу переходу дефлаграційного горіння газоподібної домішки в детонацію

Виконано математичне моделювання нестационарного горіння хімічно активних газоподібних домішок у детонаційному режимі. Числовий розв'язок отримано на основі інтегрально-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку. Верифікацію математичної моделі проведено шляхом порівняння результатів розрахунку з відомими аналітичними розв'язками тестових задач вибуху при постійному об'ємі та детонаційних умовах Чепмена – Жуге (ЧЖ) у трубі. Отримано розподіли тиску, температури, концентрацій хімічно активної газоподібної домішки й продуктів горіння вздовж розрахункового простору для метану й водню. Детонаційні величини параметрів потоку

можуть бути використані для оцінювання впливу ефектів детонаційних вибухів на навколишнє середовище.

4.5.1. Актуальність проблеми переходу дефлаграції в детонацію

Займання вибухонебезпечних хмар призводить до пожеж, руйнування інфраструктури підприємств і людських втрат. Часто після займання хвиля горіння, яка рухається газоповітряною горючою сумішшю, переходить із дозвукового режиму поширення полум'я (дефлаграції) у надзвуковий режим (детонацію), який сам себе підтримує. Газове середовище продуктів горіння з детонаційними параметрами має великий руйнівний потенціал, тому їх числове оцінювання на основі математичного моделювання руху хімічно активних газів є надзвичайно актуальною проблемою.

Злиття хвиль стиснення біля фронту полум'я генерує ударну хвилю, яка підтримує займання під час стиснення. Перехід дефлаграційного горіння в детонацію реалізується на певній відстані й залежить від кількох умов: початкової температури й тиску суміші, хімічної активності, відносної масової концентрації та геометрії області. Основними характеристиками детонаційної хвилі є середня швидкість поширення, детонаційні тиск і температура, ширина зони реакції [250]. Детонаційні режими горіння більшості хімічно активних газів є схожими, тоді як параметри детонації (швидкість і тиск) можуть істотно різнитися, що забезпечує можливість використання класичних теорій детонації ЧЖ і Зельдовича для аналізу процесу детонації газів [251].

Відомі результати числових досліджень процесу газової детонації в одновимірній [252, 253] і двовимірній [254] постановках задачі. Дослідження з теорії і практики числового моделювання руху хімічно активних газів взагалі і газофазної детонації зокрема розглянуто у роботах [255, 256]. Процеси горіння попередньо підготовлених газових сумішей у закритому просторі, ініційовані температурними неоднорідностями, взаємодію згенерованих хвиль тиску описано в роботах [257, 258]. Числове моделювання переходу горіння в детонацію у стехіометричних сумішах кисню з метаном і воднем розглянуто в роботі [259]. Ефект згасання метаноповітряного полум'я за моделлю, побудованою при спрощеній схемі хімічної реакції, досліджено в роботі [260]. Питанням зменшення негативних ефектів, спричинених поширенням детонаційної хвилі, за допомогою водяної дисперсії приділено увагу в дослідженні [261].

Розроблені математичні моделі й ефективний числовий метод можуть бути застосовані для опису нестационарних процесів руху суміші хімічно активних газів у детонаційній трубі. Числове моделювання було виконано для вивчення характеристик полум'я заздалегідь підготовлених воднево-кисневої та метанокисневої сумішей у напівобмеженій області.

4.5.2. Загальна постановка задачі горіння суміші в детонаційній трубі

Розглядаються процеси горіння стехіометричної суміші «горючий газ – кисень» у детонаційній трубі (рис. 4.43). Відомими є початкові параметри суміші (температура $T_2 = 300$ К, тиск $P_2 = 0,1$ МПа, стехіометрична масова концентрація горючої домішки Q_2), температура ініціювання займання суміші з боку закритого торця $T_i = 1800$ К. Розрахунковою областю є одновимірний простір завдовжки 1 м у напрямку OZ , який розбивається на 1000 розрахункових комірок.

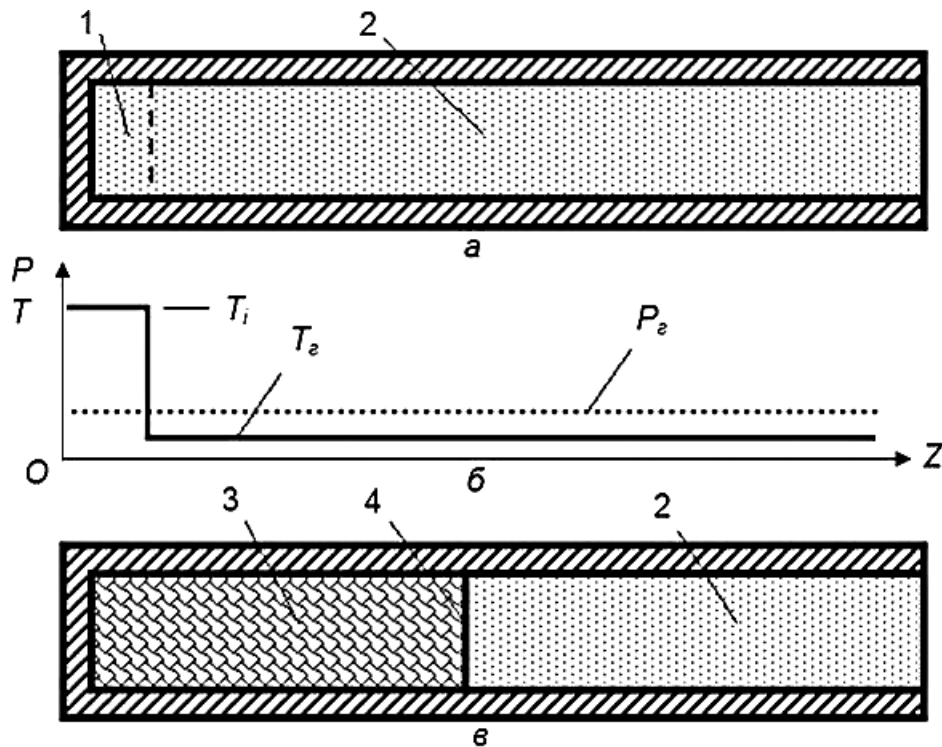


Рис. 4.43. Розрахункова схема горіння в трубі (1 – високотемпературна зона, 2 – горюча суміш, 3 – продукти горіння, 4 – фронт полум'я):
а – стан перед займанням; б – початковий розподіл тиску й температури вздовж труби; в – рух фронту полум'я

Високотемпературна зона утворюється енергетичним «накачуванням» комірки біля закритого торця детонаційної труби до моменту займання газової суміші (досягнення температури ініціювання). Далі виникає нестационарний процес горіння, під час якого енергія, що виділилася в області суміші-реагенту, генерує в напрямку фронту полум'я хвилі тиску з амплітудою, що зростає. Градієнт тиску, що зростає, поблизу фронту полум'я прискорює сам фронт і приводить до сталого ударного займання.

Основними ознаками формування детонації є генерація хвиль стиснення, їх злиття з трансформацією в ударну хвилю, перехід від ламінарного полум'я до турбулентного, виникнення поперечних хвиль і

взаємодія ударної хвилі з примежовим шаром [259]. Із цього випливає, що повна модель має бути просторовою. Але для моделювання надзвукових течій-реагентів часто використовуються одновимірні нестационарні моделі, у яких не розглядаються молекулярні явища, але відтворюються основні ефекти моделі Зельдовича і спостерігається невелике відхилення від ідеальної швидкості детонації ЧЖ [252].

4.5.3. Математична модель горіння суміші в трубі

Припущення про переважний вплив конвективного обміну масою, імпульсом та енергією дає змогу описувати рух трикомпонентного газу (пальне, окиснювач і продукти горіння) з урахуванням хімічної взаємодії компонент суміші й використовувати рівняння Ейлера з джерельними членами [39]. Система рівнянь описує закони перенесення компонент суміші з урахуванням швидкості турбулентної дифузії за законом Фіка, коефіцієнт якої визначався за методикою Берлянда [241], і замикається рівняннями, що визначають теплофізичні властивості компонент газоповітряної суміші [10].

4.5.4. Метод числового розв'язання

Числове розв'язання основних рівнянь ґрунтується на використанні схеми розпаду довільного розриву. Параметри потоку розраховувалися із застосуванням явних апроксимацій законів збереження згідно з інтегрально-інтерполяційним обчислювальним методом наскрізного розрахунку [262]. Передбачалося, що горіння відбувається в розрахунковій області, яку займає горюча суміш з концентрацією пального в діапазоні між мінімальною й максимальною концентраційними межами займистості, що задавалися на основі узагальнення експериментальних даних [264]. Розподіли концентрації домішки та інших газодинамічних параметрів суміші в часі й просторі прогнозувалися за допомогою програмного засобу комп'ютерної реалізації FIRE [68].

4.5.5. Результати моделювання газофазної детонації в трубі

За результатами моделювання процесу газофазної детонації було отримано розподіли таких параметрів потоку вздовж детонаційної труби, що фіксувалися в різні моменти часу після займання [18]:

- тиск (рис. 4.44, а, 4.45, а);
- температура (рис. 4.44, б, 4.45, б);
- масова концентрація пального (рис. 4.44, в, 4.45, в);
- масова концентрація продуктів горіння (рис. 4.44, г, 4.45, г).

Ударний фронт, за яким знаходяться зони індукції й хімічної реакції, являє собою типову структуру детонаційної хвилі тиску.

Генерація теплової енергії внаслідок хімічної реакції взаємодії компонент газоповітряної суміші приводить до зростання температури й зменшення тиску в зоні реакції. Ця зона закінчується в точці ЧЖ, у якій досягається хімічна рівновага й швидкість потоку дорівнює звуковій. Критерієм того, що детонаційний режим настав, є набуття цією точкою стаціонарного стану, що визначається теоретичними значеннями тиску й температури ЧЖ. Навіть якщо хімічний пік (точка Зельдовича – Неймана – Дерінга) продовжує зростати, значення параметрів у точці ЧЖ під час детонації є постійними [18].

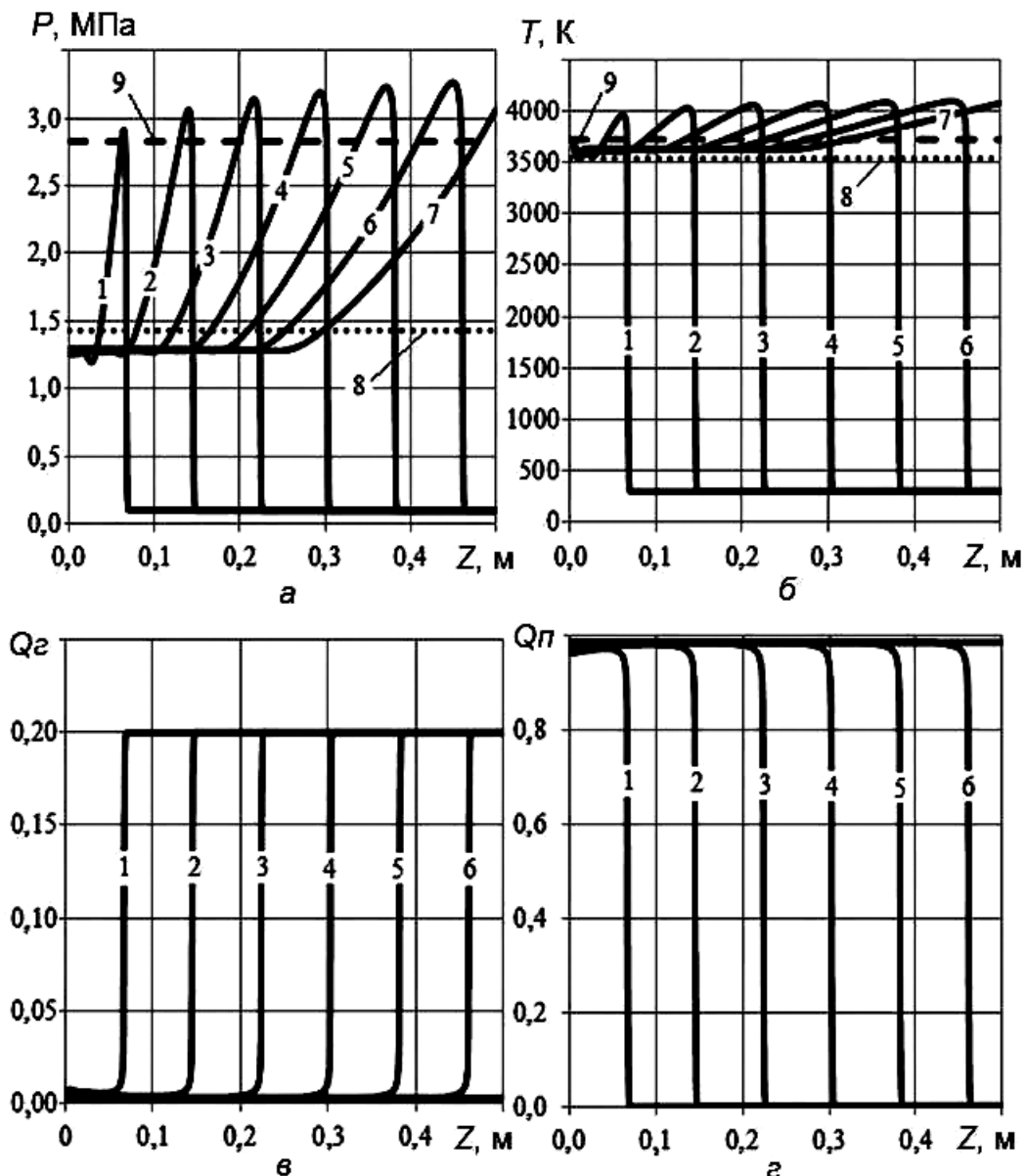


Рис. 4.44. Динаміка тиску (а), температури (б), концентрацій метану (в) і продуктів горіння (г) у трубі: 1–7 – моменти часу 30, 60, 90, 120, 150, 180 та 210 мкс; 8 – параметри вибуху при постійному об'ємі; 9 – детонаційні параметри ЧЖ

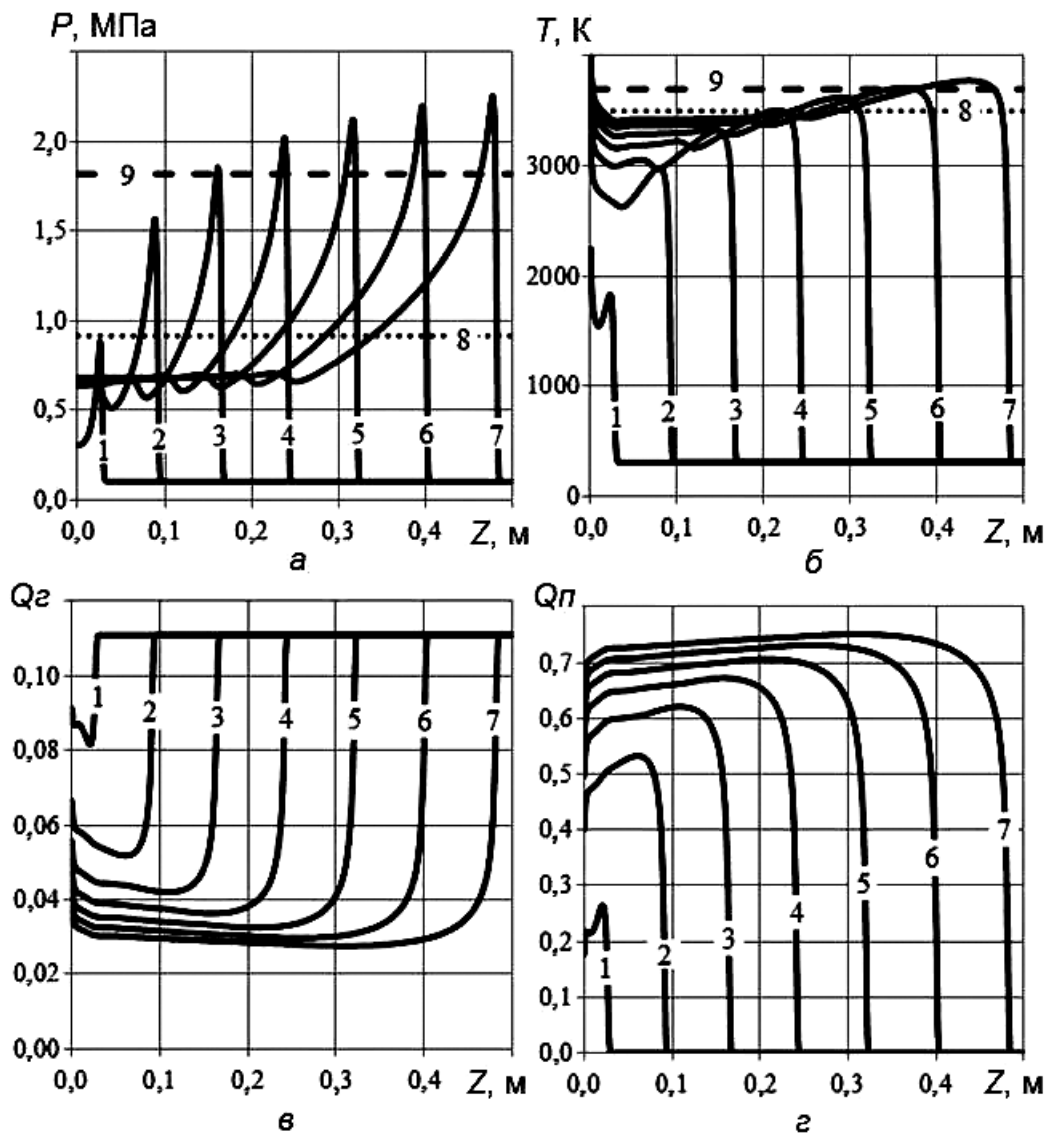


Рис. 4.45. Динаміка тиску (а), температури (б), концентрацій водню (в) і продуктів горіння (г) у детонаційній трубі: 1–7 – моменти часу 30, 60, 90, 120, 150, 180 і 210 мкс; 8 – параметри вибуху при постійному об'ємі; 9 – детонаційні параметри ЧЖ

Тиск і температуру вибуху при постійному об'ємі і для стану ЧЖ стехіометричних метанокисневих і воднево-кисневих сумішей при $P_e = 0,1$ МПа і $T_e = 300$ К було отримано в роботі [259], де докладно описано механізм часової еволюції переходу горіння в детонацію. Полум'я рухається крізь незгорілий газ, генеруючи хвилі стиснення низької інтенсивності.

Цей режим горіння локально схожий на вибух у постійному об'ємі. Однак існує локальна швидкість потоку, обумовлена конвективним перенесенням, який залежить від градієнта тиску. З плином часу тиск за фронтом полум'я зростає, що приводить до прискорення потоку в зоні реакції, зменшення довжини зони індукції і збільшення швидкості

поширення фронту полум'я. Починає формуватися пік тиску, а хвилі стиснення об'єднуються, утворюючи ударний фронт. Після того, як хвиля горіння наздоганяє ударну хвилю, відбувається перехід до детонації й обидві хвилі рухаються спільно. У момент виникнення детонаційної хвилі формується інша хвиля (ретонаційна), яка рухається в зворотному напрямку, спалюючи залишок горючої компоненти за ударним фронтом (див. рис. 4.45).

Розрахункові параметри горіння в стані ЧЖ і при постійному об'ємі зображено горизонтальними лініями (див. рис. 4.44, 4.45). У початковій стадії область займання характеризується ізобаричним поведінням й більш низьким градієнтом температури, що дає змогу подавати область горіння на цій стадії як вибух при постійному об'ємі. Параметри потоку в детонаційній хвилі близькі до параметрів у точці ЧЖ.

Оскільки використовується модель хімічної реакції «брутто», хімічну структуру полум'я можна простежити за зміненням розподілу масової концентрації горючого газу й продуктів горіння вздовж каналу (див. рис. 4.44, в, 4.44, г і 4.45, в, 4.45, г). Відомо, що під час горіння велику роль відіграє хімічна структура полум'я, що забезпечує його сталий розвиток, оскільки хімічна кінетика сильно залежить від складу й температури [260]. Однак в умовах детонації більш важливим є генерований тепловий потік, який зберігає надзвукові умови [261].

4.6. Числове моделювання впливу водяної завіси на вибух суміші метану й вугільного пилу в шахті

Вибухи газу й вугільного пилу належать до аварій з найбільш тяжкими наслідками. Хімічна реакція в газоповітряній суміші при наявності горючого пилу, яка супроводжується формуванням й поширенням мережею гірничих виробітків ударних хвиль, є дуже небезпечним видом підземної аварії. Загрожуючи життю й здоров'ю гірників, вибух завжди призводить до руйнування виробітків і пошкодження розташованого в них гірничого устаткування. Пом'якшити наслідки вибуху або навіть запобігти початку хімічної реакції можна шляхом впливу на вугільний пил водяної дисперсії. Гасіння пилу в повітрі забою може здійснюватися попереднім нагнітанням води в пласт для його зволоження, зрошенням забою водою з подаванням її безпосередньо в місця відбивання вугілля, а також шляхом утворення загороджувальних завіс. Таким чином, актуальною є технічна проблема підвищення ефективності засобів гасіння вугільного пилу шляхом зниження енергетичних витрат на утворення загороджувальних завіс у мережі гірничих виробітків [16].

Комп'ютерне моделювання процесу хімічної взаємодії метану з повітрям гірничого підприємства при наявності пилу вугілля й числове оцінювання впливу водяної завіси як захисного заходу проводилися з використанням програмного комплексу FIRE [68], який забезпечує

можливість обчислювати просторово-часові розподіли всіх параметрів газоповітряної суміші в актуальній області [31].

Як додаткові дані, необхідні для врахування впливу фазового переходу під час кипіння крапель води (хімічної реакції горіння частинок вугільного пилу) на параметри руху газової суміші, використовувалися такі характеристики:

- розподіл дисперсних крапель води за розмірами – $d \in [10, 150] \cdot 10^{-6}$ м, $d_+ = 75 \cdot 10^{-6}$ м;
 - розподіл частинок вугільного пилу за розмірами – $d \in [10, 750] \cdot 10^{-6}$ м, $d_+ = 75 \cdot 10^{-6}$ м;
 - густина вугілля $\rho_C = 1,5 \cdot 10^3$ кг/м³;
 - найнижча теплота згоряння кам'яного вугілля $H_{uC} = 27 \cdot 10^6$ дж/кг і антрациту $H_{uC} = 28 \cdot 10^6$ дж/кг;
 - температура займання дрібнодисперсного вугільного пилу (антрациту) $T = 500$ °С;
 - концентрація вугільного пилу в завислому стані $\rho_{C+} \leq 0,4$ кг/м³.
- Розрахункову область зображено на рис. 4.46 [16].

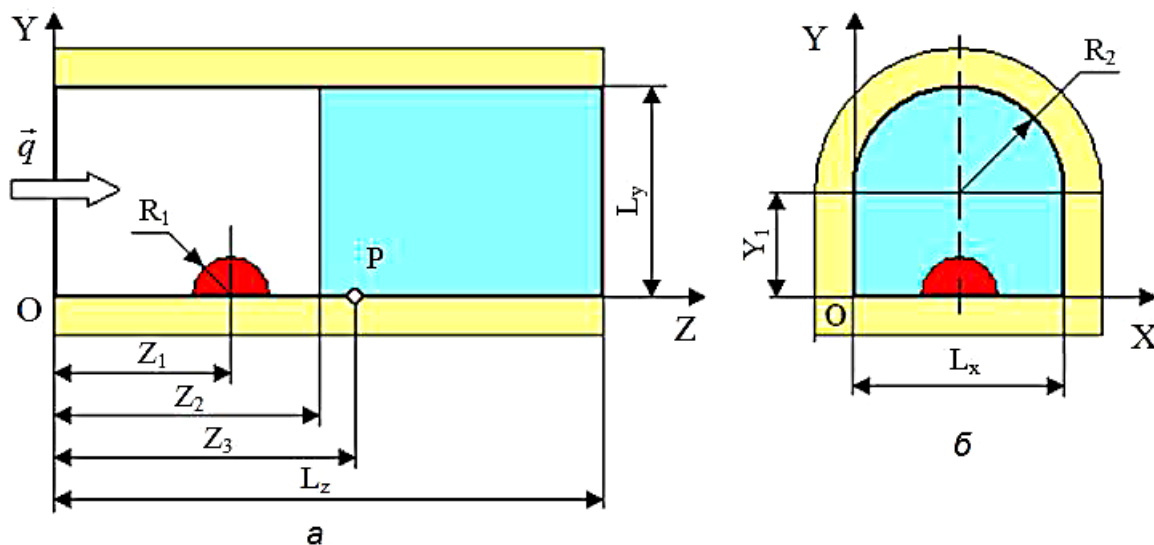


Рис. 4.46. Схема розрахункового простору тунелю в розрізі: а – YOZ; б – YOX

Обчислювальний експеримент проводився при таких умовах: довжина штреку $L_z = 31,2$ м, висота штреку $L_y = 2,2$ м; швидкість вітру на вході дорівнювала $q = 6$ м/с; область газоповітряної суміші було локалізовано на відстані $Z_1 = 10,1$ м від входу; радіус хмари становив $R_1 = 1,6$ м (рис. 4.46, а). На відстані $Z_2 = 13$ м розташовувалася зона, заповнена дрібнодисперсною фазою – частинками вугільного пилу або краплями води (залежно від розглядуваного сценарію розрахунку). Припускалося, що наявність в актуальній області дисперсних крапель рідини приводить до повного пригнічення пилу горючих твердих частинок.

На відстані $Z_3 = 14,9$ м розташовувалася контрольна точка Р, у якій здійснювався контроль змінення надлишкового тиску, температури газової суміші. Форму поперечного перерізу штреку показано на рис. 4.46, б, де $L_x = 3,2$ м, $Y_1 = 0,6$ м, $R_2 = 1,6$ м [29].

У початковий момент часу після вибуху формувалася хмара продуктів горіння, які поширювалися за вітром в умовах переважно конвективного перенесення й турбулентного розсіювання. Згідно з першим сценарієм моделювалося поширення продуктів горіння при наявності горючих твердих частинок у повітрі, другий сценарій відбувався без дисперсних фаз і третій сценарій моделював наявність дрібнодисперсних крапель водяної рідини (рис. 4.47) [29].

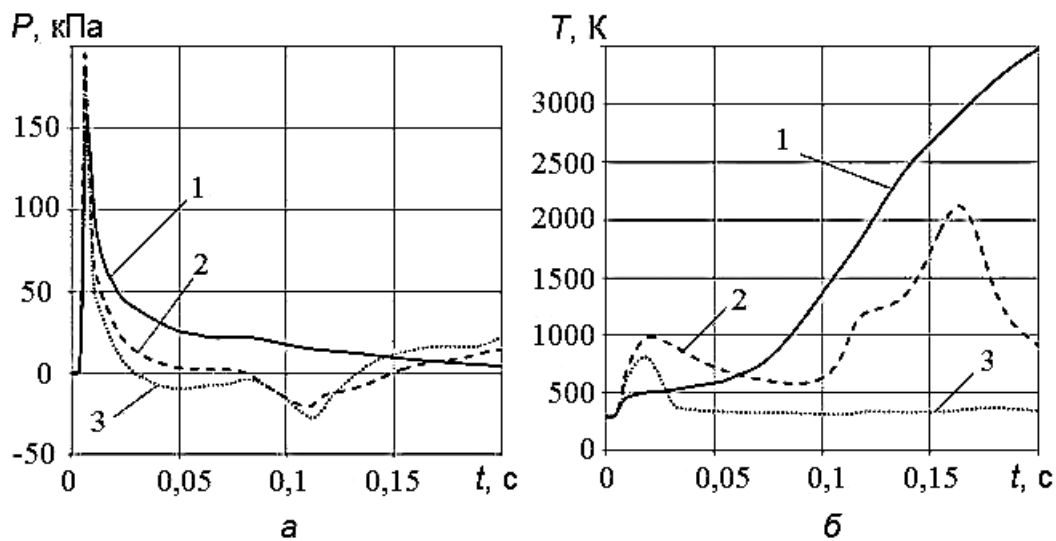


Рис. 4.47. Змінення надлишкового тиску (а) і температури (б) у контрольній точці:
 1 – при наявності пилу в повітрі; 2 – при відсутності дисперсних фаз;
 3 – при наявності водяної завіси в повітрі

Наявність у повітряному середовищі штреку твердих вугільних частинок спричиняє суттєве збільшення НТ і температури в зоні аварійного вибуху, що пояснюється додатковим загорянням вугільного пилу. Водяна завіса не тільки приводить до повного пригнічення твердих частинок, але й знижує НТ і температуру внаслідок випаровування крапель води в середовищі продуктів горіння газоповітряної суміші [16, 29].

Висновки до розділу 4

У розд. 4 з використанням уперше розробленого нового класу ефективних тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними граничними умовами, які різняться розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення й руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери зі складним рельєфом і в системах промислової аеродинаміки,

описано валідацію й верифікацію результатів моделювання відносно наявних результатів експериментальних досліджень і розрахунків на базі інших відомих моделей.

1. На основі розроблених моделей розподілу тиску газоповітряної суміші, у яких, на відміну від наявних, використовуються нелокальні початкові умови, що забезпечує можливість моделювати такі сценарії баричного збурення повітря, як «фізичний» вибух (вивільнення стисненого газу) і «хімічний» вибух (миттєва хімічна реакція «брутто» в області займистості) для оцінювання наслідків впливу хвилі тиску на навколишнє середовище й ефективність засобів захисту від її дії, було проведено валідацію моделі з наявними результатами експериментальних і модельних досліджень щодо вибуху пропану й водню. Отримано прийнятну точність розробленої моделі й доведено придатність математичної моделі для її використання з метою оцінювання наслідків впливу баричного збурення потоку багатоконпонентної газової суміші внаслідок її вибуху на навколишнє середовище.

2. На основі розробленої нестационарної математичної моделі руху суміші хімічно активних газів зі складними граничними умовами, у якій, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовується розрахункова схема «брутто»-взаємодії пального й кисню повітря, було отримано розподіли хімічно-складового, баричного й термічного збурення повітря під час дефлаграційного горіння півсферичної стехіометричної хмари й підтверджено адекватність розробленої тривимірної математичної моделі горіння газоповітряної суміші в приземному шарі атмосфери та її роботоздатність для усунення небезпечних факторів вибухової ударної хвилі (максимального надлишкового тиску й імпульсу фази стиснення у фронті хвилі) з метою подальшого оцінювання впливу ударної хвилі на людину й інфраструктуру в епіцентрі вибуху.

3. На основі розробленої математичної моделі руху суміші хімічно активних газів досліджено в одновимірній постановці процес горіння, що виникає від гарячої точки в напівобмеженій області. Розглянуто результати розв'язання задачі горіння стехіометричних метанокисневих і воднево-кисневих сумішей порівняно з рівноважними параметрами вибуху в постійному об'ємі і в точці ЧЖ. Досліджено динаміку змінення тиску, температури, концентрації горючого газу й продуктів горіння вздовж труби. З аналізу результатів випливає, що структура детонаційної хвилі містить первинну область займання, яка поводить себе як вибух у постійному об'ємі, і пік, який відповідає точці ЧЖ.

4. На основі моделі руху хімічно активної газової суміші досліджено динаміку розвитку водневої пожежі в приміщенні з природною вентиляцією. Отримано числові розв'язки для різних сценаріїв викиду й горіння воднево-повітряної суміші в разі руйнування посудини для зберігання стисненого водню. Виявлено особливості розсіювання й горіння

газоподібного водню в повітрі, що рухається під впливом вентиляції.

5. На основі моделі руху хімічно активної газової суміші зі складними граничними умовами, у якій, на відміну від наявних, урахується наявність частинок пилу й дисперсних крапель рідини в формі додаткових джерельних членів у правих частинах рівнянь руху й енергії суміші, проведено аналіз заходів захисту підземних гірничих виробітків від руйнівного впливу вибухів шляхом утворення водяних завіс з метою зниження концентрації вугільного пилу в повітрі. Розрахунковим шляхом підтверджено вибухолокалізуювальну дію водяних завіс, яка полягає у створенні середовища гасіння на шляху поширення фронту полум'я метаноповітряної суміші гірничим виробітком. Визначено, що ефективність водяних завіс знижується під час гасіння горіння метаноповітряної суміші при відсутності вугільного пилу.

6. На основі розробленої нестационарної математичної моделі потрапляння (відбору) газової домішки в актуальну область, у якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми, отримано розподіли хімічно-складового збурення повітря навколо залізничної станції внаслідок випаровування з поверхні плями пролиття зрідженого водню й пропану, які якісно й кількісно відповідають експериментальним даним для різних швидкостей вітру.

7. На основі розробленого обчислювального методу моделювання спряженого теплообміну газової суміші й твердих тіл, у якій, на відміну від наявних, застосовується розв'язання зв'язної задачі теплообміну з умовами спряження у вигляді граничних умов III роду, було отримано просторово-часові розподіли температури в перерізах твердих тіл різної геометричної форми, які якісно й кількісно відповідають очікуваним температурним полям. Проведено верифікацію результатів моделювання на основі порівняння з даними аналітичних моделей охолодження сталевих нескінченних пластин при різних початково-крайових умовах. Отримано практично абсолютну збіжність розподілів температури газового середовища.

Розділ 5. АНАЛІЗ І ПРОГНОЗУВАННЯ ФІЗИЧНИХ ПОЛІВ ПАРАМЕТРІВ ПОТОКУ В ПРОЦЕСІ ВЕНТИЛЯЦІЇ ПРИМІЩЕНЬ

У цьому розділі проведено аналіз і прогнозування фізичних полів параметрів потоку газоповітряної суміші в процесі вентиляції приміщень. Розглянуто особливості застосування обчислювальної технології видалення газової суміші з приміщення або подавання свіжого повітря в приміщення для моделювання механічної та природної вентиляції. Зроблено аналіз результатів моделювання розсіювання водню в приміщенні, яке вентилується.

5.1. Аналіз розподілу концентрації домішки під час вентиляції боксу

Розглянемо розсіювання стехіометричної сферичної хмари водню радіусом 1 м з координатами центра $x = 1,8$ м, $y = 1,4$ м, $z = 2,2$ м у розрахунковій області боксу з габаритами $3,6 \times 2,8 \times 4,5$ м і кількістю комірок уздовж координатних осей $36 \times 28 \times 45$. Вентиляційний отвір для подавання свіжого повітря до приміщення природним способом розміщувався в центрі передньої стінки боксу біля землі і мав габарити $0,4 \times 0,4$ м. Витяжний вентиляційний отвір із такими ж габаритами знаходився в центрі задньої стінки боксу біля стелі (рис. 5.1) [20].

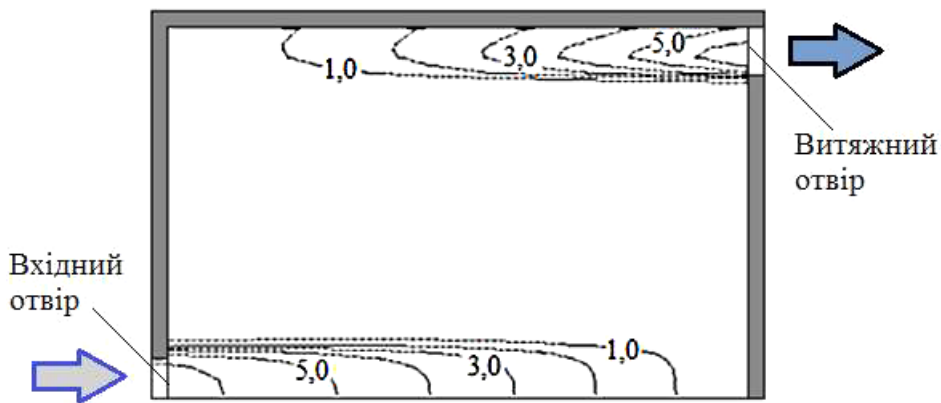


Рис. 5.1. Розподіл осьової швидкості в площині вентиляції

Сумарна витрата газу G_{Σ} , яка забезпечувалася вентиляційною системою, становила $0,9369888$ кг/с. Розрахунок проводився до повного видалення водню із приміщення з допомогою витяжної вентиляції.

Стационарну картину розподілу осьової (уздовж осі OZ) складової швидкості зображено на рис. 5.1. Видно, що у вхідному отворі природної вентиляції виробляється течія, яка подібною до згенерованої біля отвору витяжки.

Аналіз змінення розподілу масової концентрації водню проводився в центральній відносно осі OX площині (рис. 5.2). У процесі розсіювання форма й розміри хмари істотно змінюються відповідно до течії газової суміші, яка виробляється, виходячи з вибраної схеми примусової вентиляції [57].

Якщо розглядати вибух як потенційну небезпеку, то показником рівня пожежовибухобезпеки виробничого приміщення може бути маса вибухонебезпечної домішки водню (рис. 5.3), що визначається як сума мас домішки в тих елементарних розрахункових комірках, масова концентрація водню в яких потрапляла до концентраційного діапазону займистості $0,014 < Q < 0,929$ для газоподібного водню [271].

Аналіз часової залежності сумарної маси водневої домішки в повітрі актуальної розрахункової області, який імовірно може зайняти і

вибухнути [57], свідчить про поступове зменшення її величини в процесі вентиляції і, отже, про зниження ризиків матеріальних збитків і людських втрат, можливих у разі пожежі в цьому технологічному боксі [20].

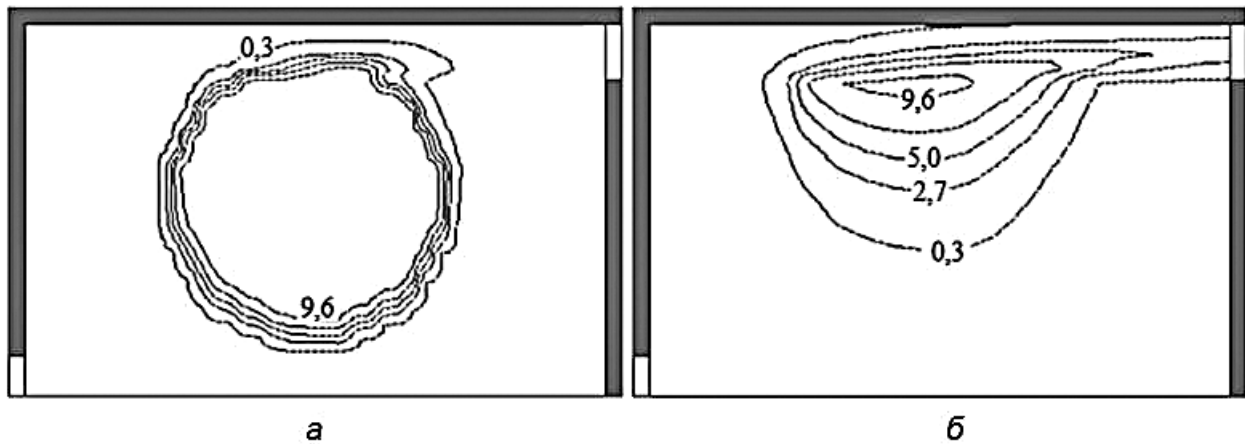


Рис. 5.2. Поля масової концентрації водню в різні моменти часу t від початку вентиляції: а – $t = 0,2$ с; б – $t = 3,0$ с

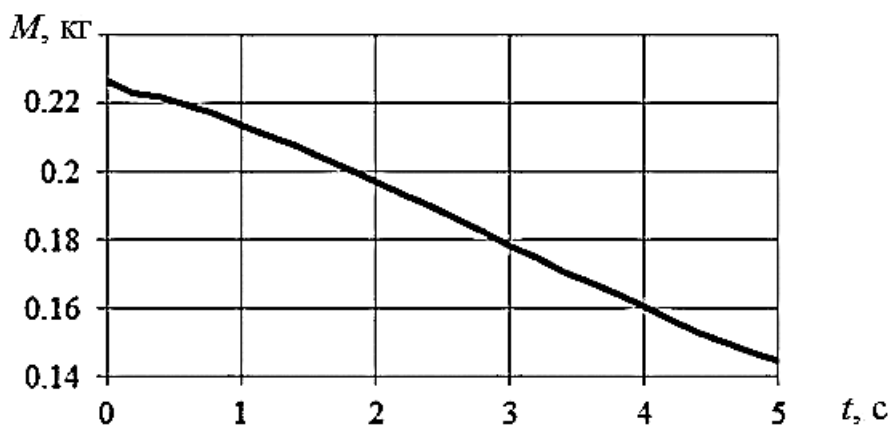


Рис. 5.3. Часовий розподіл сумарної маси водню в приміщенні

5.2. Дослідження ефективності вентилятора під час вентиляції

Вентиляційна система є сукупністю різних за призначенням вентиляційних установок, здатних обслуговувати окреме приміщення. Залежно від способу переміщення повітря в приміщеннях розглядають вентиляцію штучну (механічну), природну й комбіновану. У разі природної вентиляції обмін повітря здійснюється двома способами: неорганізовано – за допомогою провітрювання крізь вікна, двері й інфільтрації крізь щілини у вікнах і дверних отворах; організовано – за допомогою аерації та дефлекторів [268].

У системах механічної вентиляції повітря рухається під дією вентиляторів. За місцем розташування механічна вентиляція буває загальнообмінною (зміна повітря в усьому приміщенні), місцевою або

локальною (обмін повітря в місцях утворення викидів) і комбінованою. За способом подавання повітря механічна вентиляція підрозділяється на припливну, витяжну й припливно-витяжну [269].

Використовуючи розроблену модель руху багатокомпонентного газу [28], виконаємо оцінювання ефективності роботи осьового вентилятора з огляду на забезпечення необхідного рівня пожежовибухобезпеки технологічного боксу, у якому стався аварійний викид водню.

5.2.1. Характеристики мережі і вентилятора

Усю систему, крізь яку проходить повітря, що переміщується під дією вентилятора, називають мережею. Втрати тиску, пов'язані з цим переміщенням, являють собою опір мережі (втрати на тертя, вихороутворення, удар під час раптового розширення тощо). Для створення й підтримки певної витрати повітря в мережі (усталена течія) необхідно, щоб вентилятор забезпечував підвищення тиску P_v , що дорівнює опору мережі при заданій продуктивності Q . Аеродинамічна характеристика вентилятора є залежністю тиску P_v , потужності на валу робочого колеса N і коефіцієнта корисної дії $\eta = P_v Q / N$ від продуктивності Q . Тип вентилятора характеризується швидкодією $n = Q^{1/2} / P_v^{3/4}$. Клас осьових вентиляторів є досить широким.

Найбільш простою в експлуатації є схема вентилятора без вхідного напрямного й вихідного випрямного апаратів (рис. 5.4) [19]. Ця схема застосовується, коли необхідно отримати невеликі підвищення тиску, а швидкість закручування потоку в колесі є невеликою порівняно з коловою швидкістю вентилятора [67]. При цьому невеликими є і втрати тиску через втрати кінетичної енергії потоку, обумовлені швидкістю закручування.

На втулці робочого колеса рівномірно під одним кутом розташовані однакові лопатки вінця. Кількість лопаток у вінцях може становити від 2 до 30 залежно від типу осьового вентилятора та його конструктивних особливостей.



Рис. 5.4. Типовий осьовий вентилятор

5.2.2. Геометричні параметри решіток профілів

Вивчення обтікання лопаткових вінців осьового вентилятора часто зводиться до розгляду течії в плоских решітках, які характеризуються певним набором геометричних параметрів [346]: відносною товщиною профілю $\bar{c} = c/b$, де c – товщина профілю, b – його хорда; відносною увігнутістю профілю $\bar{f} = f/b$, де f – стріла прогину; розташуванням максимальної товщини щодо хорди $\bar{x}_c = x_c/b$, де x_c – максимальна товщина; розташуванням максимальної стріли прогину вздовж хорди $\bar{x}_f = x_f/b$; щільністю решітки $\tau = b/t$, де t – крок решітки; кутом установлення (кутом нахилу профілю між хордою профілю й фронтом решітки) θ_e .

Для вентиляторів характерними є такі значення параметрів решітки й профілю: $\bar{c} = 0,03 \dots 0,15$, $\bar{f} = 0 \dots 0,15$, $\bar{x}_c = 0,25 \dots 0,4$, $\bar{x}_f = 0,4 \dots 0,6$, $\tau = 0,08 \dots 2,0$, $\theta_e = 10^\circ \dots 80^\circ$. Конфігурація профілю задається координатами, що визначають симетричний профіль, наприклад узагальнений аналітичний профіль Чаплигіна, який «надягається» на середню лінію.

Разом із профільними лопатками в практиці широко використовуються лопатки листової конструкції постійної товщини.

5.2.3. Газодинамічні параметри потоку в осьовому вентиляторі

Потік між лопатками осьового вентилятора є суттєво тривимірним і характеризується величиною й напрямком вектора швидкості, тиском і густиною газу в різних перерізах. Основні закономірності течії описуються рівняннями руху й нерозривності. Реальна структура потоку у вентиляторі відрізняється від теоретичної схеми через в'язкість газу, а також через наявність радіальних зазорів. Сили тертя, що виникають на обтічних поверхнях лопаток, корпусу і втулки, приводять до виникнення примежових шарів і вторинних течій, що, своєю чергою, викривлює ідеалізовану структуру потоку, генерує його радіальну й колову нерівномірність.

Для врахування істотно тривимірного характеру течії було побудовано математичну модель і розв'язано задачу обтікання вінців турбомашин просторовим потоком з урахуванням ефектів в'язкості [28, 67]. На основі автоматизованого комп'ютерного комплексу програм для розрахунку в'язких течій у міжлопаткових каналах турбомашин «Експерт» [274] і розробленої методики просторового профілювання дозвукових вінців осьових компресорів в області сполучення пера лопаток із торцевою поверхнею було здійснено оптимізацію профілів вінців і проведено імітаційне моделювання керування відривом потоку в міжлопаткових каналах турбомашин [1].

5.2.4. Аналіз ефективності роботи осьового вентилятора

Аналіз ефективності роботи вентилятора з використанням розробленої моделі й програмних засобів [68] проведено на прикладі розсіювання стехіометричної сферичної водневої хмари в технологічному боксі, який обладнано витяжною вентиляцією. Геометричні й газодинамічні початкові параметри розрахунку наведено в підрозд. 5.1. Для механічної витяжки газів із приміщення використовувався осьовий вентилятор ВО 06-300 № 2,5 Донецького вентиляторного заводу [275], характеристику якого під час роботи на повітрі зображено на рис. 5.5.

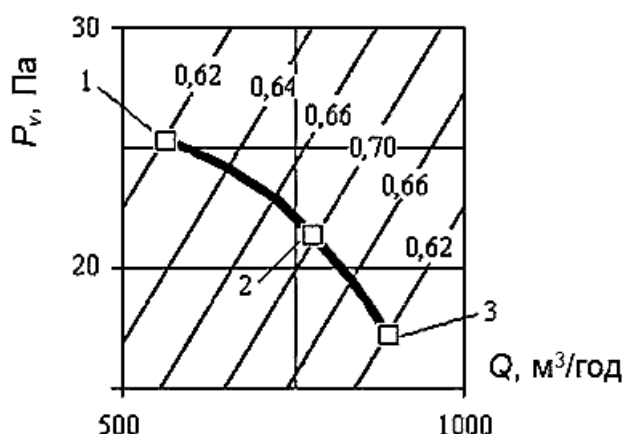


Рис. 5.5. Характеристика вентилятора ВО 06-300 № 2,5 (1340 об/хв, 0,12 кВт): 1 – мінімальний режим; 2 – номінальний; 3 – максимальний

Діаметр робочого колеса вентилятора становить 250 мм, продуктивність – 550...850 м³/ч, надлишковий тиск – 19...26 Па. Цей вентилятор є вентилятором загальнопромислового призначення й використовується для роботи з неагресивними газами [19].

Сумарна витрата газу G_{Σ} , що забезпечується вентилятором на мінімальному (550 м³/год), номінальному (750 м³/год) і максимальному (850 м³/год) режимах витяжки газової суміші, підтримувалася при припущенні, що крізь вхідний отвір у приміщення надходить повітря, яке відповідає нормальним умовам. Комп'ютерні розрахунки проводилися до повного видалення водневої домішки з приміщення з допомогою витяжної механічної вентиляції.

Осьовий вентилятор забезпечує примусове витікання газової суміші з витратою G_{Σ} із приміщення крізь вихідний вентиляційний отвір (див. рис. 5.1). При цьому у вхідному отворі природної вентиляції виникає припливна течія, подібна до згенерованого потоку в отворі витяжки. Аналіз динаміки поля масової концентрації водню для роботи осьового вентилятора на всіх режимах проводився в центральній відносно осі ОХ площині. На рис. 5.6 зображено часову динаміку області, яку займає

частина хмари, у якій концентрація водню знаходиться в концентраційних межах займання. У процесі вентиляції форма й розміри хмари істотно змінюються відповідно до картини течії газової суміші, яка виробляється виходячи з вибраної схеми примусової вентиляції [19].

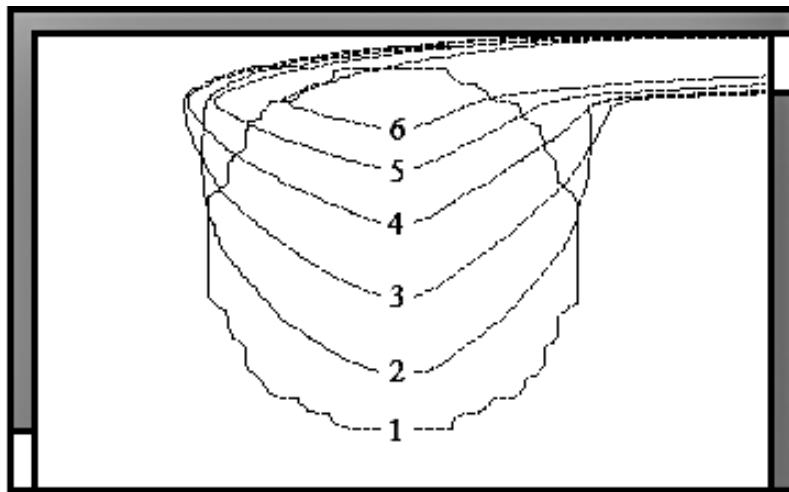


Рис. 5.6. Динаміка змінення області займання в процесі вентиляції:
1–6 – область у моменти 0, 3, ..., 15 с від початку вентиляції

Як показник рівня вибухобезпеки вентиляованого приміщення може бути сумарна маса вибухонебезпечної домішки водню (рис. 5.7), яка визначається як сума маси домішки в усіх елементарних контрольних об'ємах, де відносна масова концентрація водню знаходиться в концентраційних межах займистості ($0,014 < Q < 0,929$) [314], тобто там, де можливим є аварійний вибух [57].

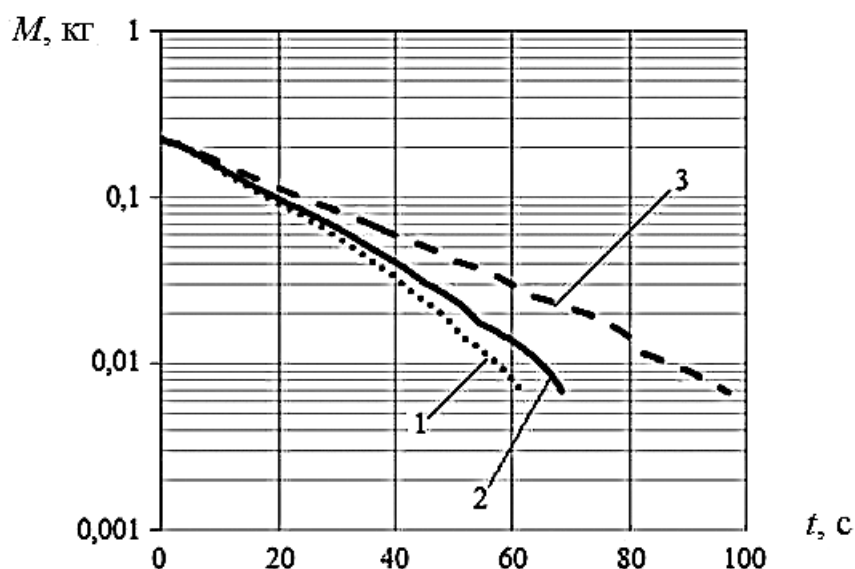


Рис. 5.7. Часова динаміка маси домішки в межах займання в приміщенні: 1 – максимальний режим роботи вентилятора; 2 – номінальний; 3 – мінімальний

Розрахунок припинявся, коли поточна сумарна маса вибухонебезпечної домішки водню в межах приміщення, віднесена до її початкового значення в момент викиду хмари під час аварії, ставала менше 1 %.

Аналіз сумарної маси водню, який може зайнятися й вибухнути, свідчить про зменшення її величини в процесі вентиляції і, отже, про зниження ризиків матеріальних збитків і людських жертв, можливих у разі пожежі в цьому технологічному боксі. Як і слід було очікувати, час до повного витягнення домішки з приміщення на максимальному режимі роботи вентилятора становить мінімальну величину порівняно з іншими режимами роботи вентиляційної системи. Найгірший рівень пожежовибухобезпеки забезпечує мінімальний режим, коли час витягнення збільшується більш ніж у 1,5 рази. Номінальний режим можна рекомендувати як основний, тому що час витягнення збільшується не значно порівняно з максимальним режимом, а ККД вентилятора при цьому відповідає максимальним значенням.

5.3. Аналіз ефективності схеми розміщення вентиляційної витяжки в гаражі

Водень останнім часом стає все більш популярним паливом для транспортних засобів. Розроблення рекомендацій і законодавчих інструкцій, що стосуються завдань дослідження умов зберігання водневих систем усередині приміщень, є однією з цілей європейського проєкту HYSAFE (Safety of Hydrogen as an Energy Carrier).

Розглядається рух воднево-повітряної газової суміші, яка виникла внаслідок витікання водню з інтенсивністю 7200 л/год із автомобіля, що знаходиться в гаражному приміщенні (рис. 5.8), обладнаному отворами природної (на вході) і примусової витяжної (на виході) вентиляції. Під впливом роботи вентиляційної системи у витяжний отвір буде надходити газова суміш із приміщення з сумарною витратою G_{Σ} . Подавання свіжого повітря зі швидкістю C_1 буде здійснюватися крізь вхідний вентиляційний отвір приміщення. Для симуляції різних варіантів вентиляції застосовувався CFD-код FIRE [68]. Отриманий розподіл концентрації водню використовувався для аналізу потенціалу ймовірного вибуху газового хмари.

Геометрію гаражного приміщення зображено на рис. 5.8 [17], а габаритні характеристики й розташування окремих дискретних блоків розрахункової схеми наведено в табл. 5.1. Для спрощення апроксимації автомобіль розбивається на кілька суцільних блоків: шасі, кабіна, багажник (клин 1), капот (клин 2) і колеса у вигляді паралелепіпедів. Виходячи із заданої геометрії споруди й розташування плями витікання водню й вентиляційного отвору, передбачається наявність площини симетрії, яка є паралельною до YOZ. Тому з метою економії ресурсів комп'ютера

розглядалася половина розрахункової області в ширину. Щоб уникнути невизначеності в задаванні граничних умов на виході, розрахункову область було подовжено за межі гаража в напрямку OZ, і габарити її становили 10 м у довжину, 2,8 м у ширину, 1,9 м у висоту. Обчислювальні комірки мали форму паралелепіпедів із розмірами 0,1 м у всіх напрямках.

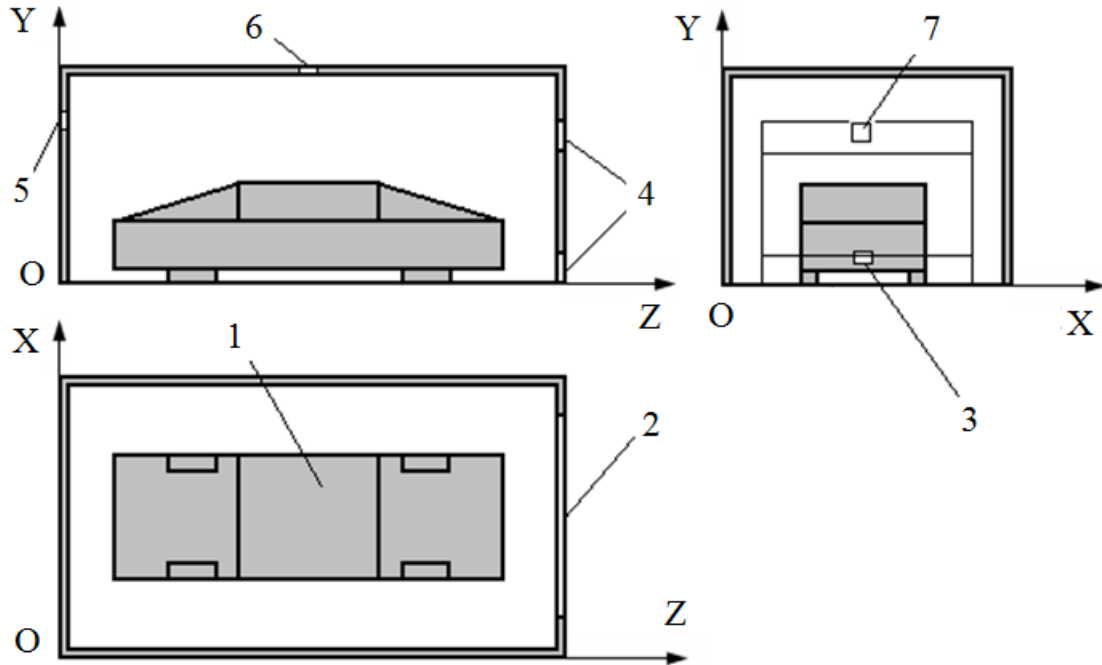


Рис. 5.8. Схема розташування геометричних об'єктів:
1 – автомобіль; 2 – ворота; 3 – витік; 4 – отвори природної вентиляції; 5–7 – отвори витяжки

Таблиця 5.1

Геометричні характеристики об'єктів

Об'єкт	Розташування			Габарити		
	Z, м	X, м	Y, м	Z, м	X, м	Y, м
Координати	Z, м	X, м	Y, м	Z, м	X, м	Y, м
Гараж	0,0000	0,0000	0,0000	6,4203	3,7084	2,3067
Шасі	0,7112	1,0414	0,2032	4,9784	1,6256	0,6000
Клин 1	0,7112	1,0414	0,8032	1,6000	1,6256	0,5430
Клин 2	4,0896	1,0414	0,8032	1,6000	1,6256	0,5430
Кабіна	2,3112	1,0414	0,8032	1,7784	1,6256	0,5430
Колесо 1	1,3500	1,0414	0,0000	0,6096	0,2032	0,2032
Колесо 2	4,4000	1,0414	0,0000	0,6096	0,2032	0,2032
Колесо 3	1,3500	2,4638	0,0000	0,6096	0,2032	0,2032
Колесо 4	4,4000	2,4638	0,0000	0,6096	0,2032	0,2032
Ворота	6,4003	0,4826	0,0000	0,0200	2,7432	2,1336
Отвір 1	6,4003	0,4826	1,9558	0,0200	2,7432	0,5000
Отвір 2	6,4003	0,4826	0,0000	0,0200	2,7432	0,5000
Витік	0,7112	1,7000	0,2032	0,0000	0,2000	0,1000
Витяжка 1	0,0000	1,7000	1,9000	0,0000	0,2000	0,2000
Витяжка 2	3,1000	1,7000	2,3000	0,2000	0,2000	0,0000
Витяжка 3	6,4000	1,7000	1,9000	0,0000	0,2000	0,2000

На всіх твердих поверхнях виконувалися умови непротікання. Витік водню моделювався постановкою граничних умов струминного витікання газової домішки з відносною масовою концентрацією 100 %, температурою 293,15 K і постійною витратою $G_z = 0,000178$ кг/с. Моделювання механічної вентиляційної витяжки здійснювалося постановкою додаткових нелокальних граничних умов витікання газової суміші з постійною витратою $G_z = 0,1171236$ кг/с.

Розрахунки різних варіантів розташування примусової вентиляції гаражного приміщення проводилися до виходу на стаціонарний режим за розподілом масової концентрації всередині гаража. Розрахунок варіанта з природною вентиляцією (рис. 5.9, а) був зупинений раніше для економії комп'ютерних ресурсів. Для оцінювання рівня пожежовибухобезпеки приміщення аналізувалися просторовий розподіл масової концентрації водню Q , сумарна маса водню M , концентрація якого була в межах займистості ($1,4 < Q < 92,9$), та об'єм приміщення V , який займає газоповітряна суміш з такою відносною масовою концентрацією водню (табл. 5.2).

Таблиця 5.2
Розрахункові показники вибухобезпеки

Схема вентиляції	Параметри	
	M , кг	V , м ³
Природна вентиляція	0,237764	5,918525
Витяжка праворуч	0,027786	0,971292
Витяжка зверху	0,043324	1,597871
Витяжка ліворуч	0,018796	0,643162

Унаслідок фізичних властивостей водень піднімається, розсіюючись, до стелі й накопичується у верхній частині приміщення. До досягнення стаціонарного стану, коли газова домішка почне витікати з верхнього вентиляційного каналу природної вентиляції, маса M і об'єм V небезпечної зони продовжують збільшуватися.

Обладнання гаража витяжним каналом примусової вентиляції на стелі замість верхнього отвору природної вентиляції біля гаражних воріт приводить до істотної перебудови просторової картини.

Після увімкнення витяжки (одночасно з початком витікання водню) формується вертикальний потік газу заданої витрати (рис. 5.9, б), який захоплює із собою й домішку, яка викидається з автомобіля.

Розрахунок значно раніше виходить на стаціонарний режим. Сумарна маса M і об'єм V вибухонебезпечного водню істотно знижуються, зменшуючи ризик виникнення пожежі.

Установлення витяжки праворуч ще більше перебудовує потік. Виникає потужна горизонтальна течія (рис. 5.9, в), яка перешкоджає накопиченню водню, що витікає, під стелею, тому домішка, не досягаючи верхньої частини приміщення, залишає гараж (рис. 5.10, в).

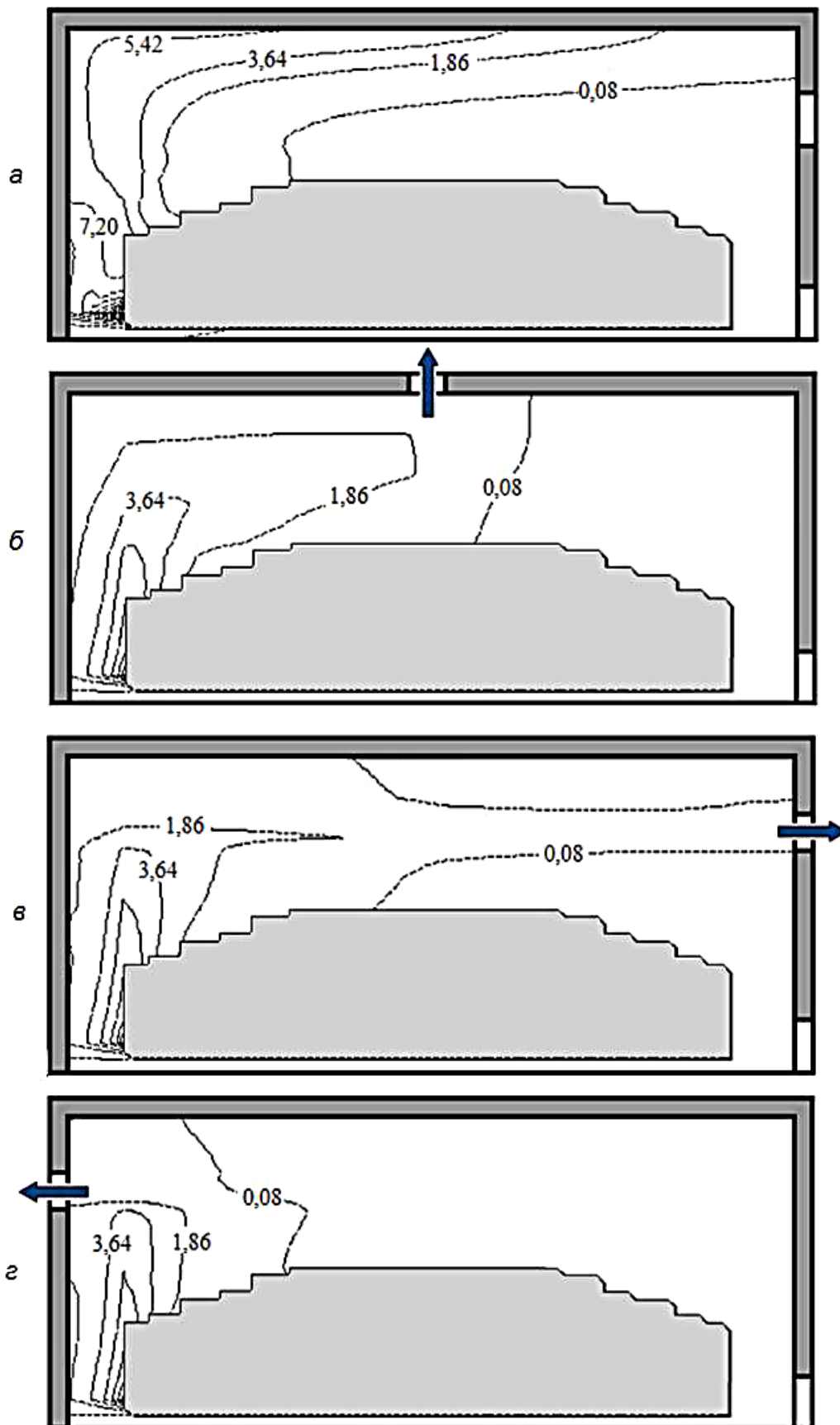


Рис. 5.9. Розподіл масової концентрації водню: природна вентиляція (а); витяжка зверху (б); витяжка праворуч (в); витяжка ліворуч (г)

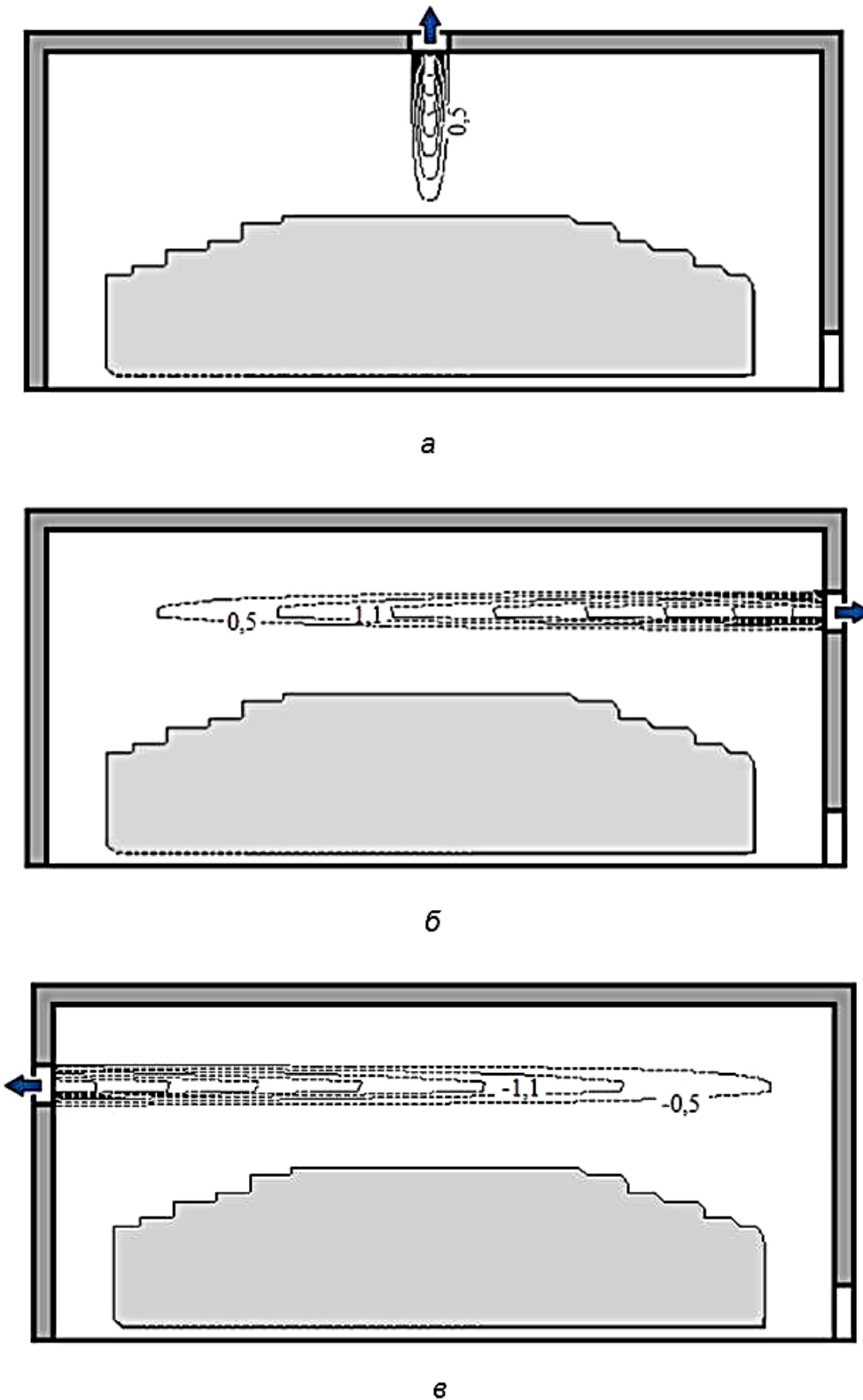


Рис. 5.10. Розподіл швидкості потоку під час механічної вентиляції:
 а – вертикальної складової (витяжка зверху); б – поздовжньої
 складової (витяжка праворуч); в – поздовжньої складової
 швидкості (витяжка ліворуч)

Така схема вентиляції сприятливо впливає на сумарні показники вибухобезпеки (див. табл. 5.2) порівняно з розглянутими схемами.

До ще більш кардинальних змін у картині течії приводить установлення витяжного вентилятора ліворуч (рис. 5.9, з).

У цьому випадку формується горизонтальний поздовжній потік зворотного напрямку відповідно до заданого режиму роботи вентилятора. Витяжка не тільки перешкоджає витіканню водню й накопиченню його під стелею, а й розташовується ближче всього до джерела газової домішки, що й пояснює ефективність вентиляції (рис. 5.10, в).

Сумарна маса вибухонебезпечного водню M зменшується ще більше. Об'єм області V , у якій може зайнятися суміш, також зменшується (див. табл. 5.2). Ці параметри є визначальними під час детермінованого оцінювання потужності потенційного вибуху, інтенсивності вибухової хвилі та рівня термічного навантаження на конструкції, що знаходяться в приміщенні гаража.

5.4. Детермінований аналіз схем множинної вентиляції в гаражі

Розглянемо аварійний викид і розсіювання в гаражному приміщенні в умовах витяжки стехіометричної сферичної хмари суміші водню з повітрям (рис. 5.11) [57, 60, 61]. Хмара газоповітряної суміші має такі початкові параметри: статична температура 273 К, тиск 101325 Па, молярна маса газової домішки 0,002 кг/моль, радіус 0,5 м з координатами центра $x = 1,8$ м, $y = 1,6$ м, $z = 2,3$ м у розрахунковій області з габаритами $3,6 \times 2,8 \times 4,6$ м і кількістю обчислювальних комірок уздовж координатних осей $36 \times 28 \times 46$.

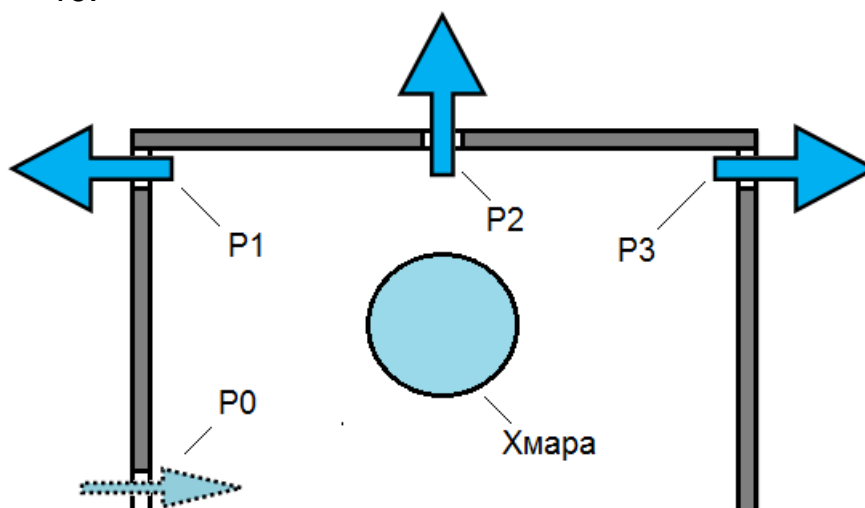


Рис. 5.11. Схема вентиляції приміщення: P0 – отвір природної вентиляції; P1–P3 – місця витяжних отворів механічної вентиляції

Витяжні вентиляційні отвори в місцях P1–P3 і природний вхідний вентиляційний отвір P0 мали габарити $0,4 \times 0,4$ м і розміщувалися згідно з

розрахунковою картою об'єктів на рис. 5.11. Максимальна сумарна витрата газу G_{Σ} , яку забезпечувала механічна вентиляційна система, становила 0,284443 кг/с [61].

Варіанти V1–V7 різних схем механічної вентиляції являли собою різні поєднання наявності (+) або відсутності (-) витяжки в місцях можливого розташування P1–P3 вентиляторів (табл. 5.3) [61].

Таблиця 5.3

Варіанти схем вентиляції

Місця отворів	V1	V2	V3	V4	V5	V6	V7
P1	+	-	-	+	-	+	+
P2	-	+	-	+	+	-	+
P3	-	-	+	-	+	+	+

За розробленою методологією оцінювання ефективності різних схем механічної вентиляції як небезпечний параметр будемо розглядати сумарну масу водню в приміщенні в межах займистості М. З часом унаслідок вентиляції ця величина буде зменшуватися. У якийсь момент часу маса М набуде значення 1 % від початкової маси водню, тому порівняння різних схем вентиляції проведемо за цим критерієм (рис. 5.12, 5.13).

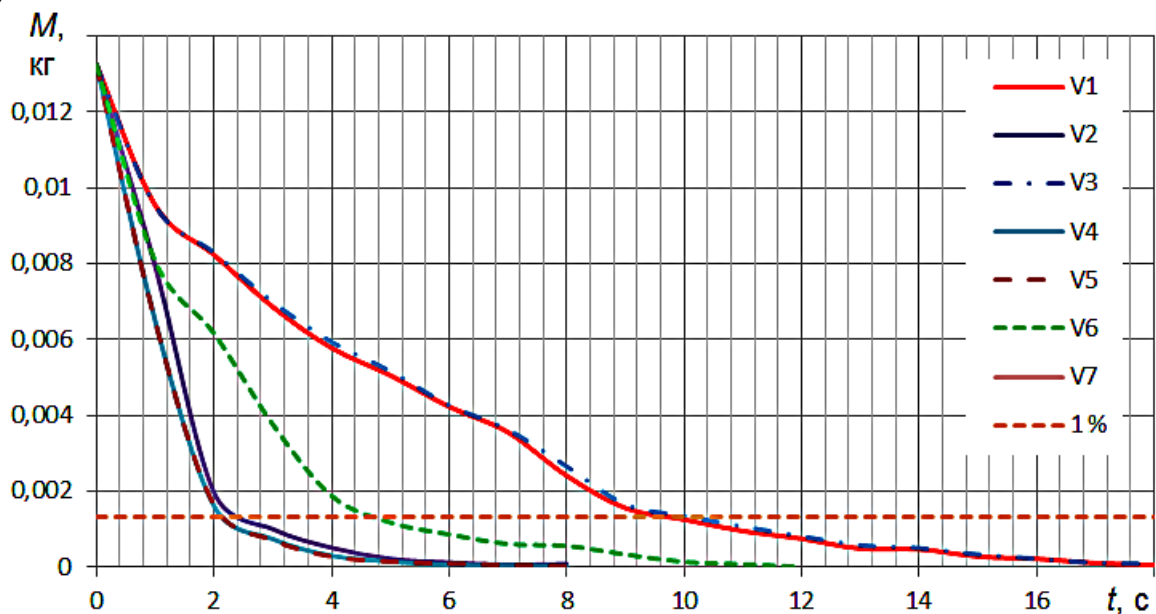


Рис. 5.12. Динаміка змінення маси водню в межах займистості для варіантів V1–V7 схем механічної вентиляції

Виявлено, що найбільш ефективними схемами витяжки водню є варіанти V2, V4, V5, V7, де є витяжка P2, а найменш ефективними – варіанти V1, V3 з однією витяжкою. Проміжне місце зайняла схема V6 з двома бічними витяжками. Кращою є схема V2 як одна з найбільш ефективних і найменш енергозатратних.

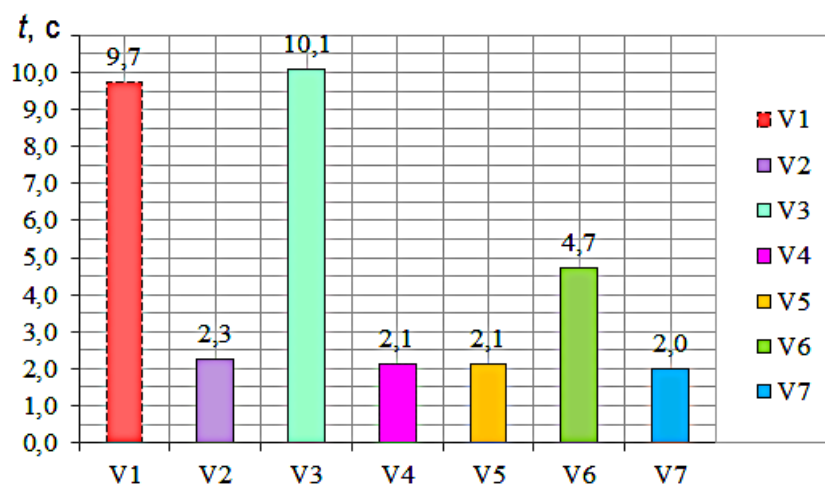


Рис. 5.13. Час витяжки 99 % маси водню в межах займистості для варіантів V1–V7 схеми вентиляції

Висновки до розділу 5

У розд. 5 з використанням уперше розробленого нового класу ефективних тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними граничними умовами, які різняться розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення й руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери зі складним рельєфом і в системах промислової аеродинаміки, наведено результати моделювання процесів вентиляції приміщень. На основі моделі потрапляння (відбирання) газової домішки в актуальну область, у якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми:

- розглянуто можливості використання розроблених математичних моделей, обчислювальних методів і програмного засобу їх комп'ютерної реалізації для аналізу впливу роботи механічної й природної вентиляції на просторову картину потоку газової суміші в приміщеннях промислового й побутового призначення;

- розглянуто геометричні й аеродинамічні характеристики осьових вентиляторів, що застосовуються для забезпечення вентиляції у виробничих приміщеннях, де під час технологічних процесів можуть утворюватися вибухонебезпечні газові суміші;

- виконано числове моделювання течії воднево-повітряної газової суміші в технологічному боксі в умовах механічної вентиляції при мінімальному, номінальному й максимальному режимах роботи вентилятора. Аналіз сумарної маси горючого газу, що знаходиться в межах займистості, забезпечує можливість рекомендувати номінальний режим вентилятора як оптимальний з огляду на рівень вибухобезпеки приміщення й мінімальні витрати енергії для забезпечення вентиляції;

- проведено аналіз найбільш ефективного розташування витяжної примусової вентиляції в гаражному приміщенні з автомобілем, у якому сталося аварійне витікання паливного водню;
- за допомогою детермінованого підходу визначено зони найбільш небезпечного накопичення водневої домішки в повітрі гаража;
- запропоновано найбільш ефективні схеми множинної вентиляції гаражного боксу.

Розділ 6. АНАЛІЗ І ПРОГНОЗУВАННЯ ПОЛІВ ФІЗИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ПОТОКУ В КАМЕРАХ ТЕРМООБРОБКИ

У цьому розділі на основі розробленої математичної моделі [3, 15, 23] виконано числовий аналіз і прогнозування розподілів фізичних параметрів у камерах термообробки.

Робота обладнання швидкісного кріогенного охолодження базується на проточній схемі організації процесу, у якій передбачається одноразове використання робочого тіла. Робочим тілом може бути будь-який хімічно нейтральний до охолоджуваного продукту зріджений газ (кисень, вуглекислота, азот тощо). Найбільш перспективним і широко використовуваним холодоагентом є рідкий азот, який кипить при атмосферному тиску й температурі $-196\text{ }^{\circ}\text{C}$ [4].

Для швидкого і якісного заморожування харчових продуктів ефективною є тризонна проточна система охолодження [4], яка дає можливість використовувати пари кріоагенту після його випаровування в секції заморожування (зона I) для попереднього охолодження продукту (зона II) і вирівнювання його температури (зона III). При цьому доцільним є порівняно повільне охолодження продукту в зоні I для рівномірного досягнення кріоскопічної температури по всій його товщині. Заморожування продукту в зоні II, навпаки, бажано проводити досить інтенсивно з метою реалізації дрібнокристалічної структури й швидкого проходження інтервалу температур між кріоскопічною і $-10\text{ }^{\circ}\text{C}$, при якому відбуваються негативні змінення якості продуктів.

Вибір режимів заморожування визначається насамперед динамікою кріогенного середовища, числове моделювання руху якого під час роботи обладнання швидкого охолодження здійснювалося на основі розробленої тривимірної математичної моделі руху газової суміші в замкненому просторі з вентиляцією, яка подається струменями (див. розд. 2) [5]. Після отримання тривимірних температурних полів середовища охолодження можна розв'язувати задачу спряженого теплообміну й теплопровідності всередині об'єкта охолодження [4].

Швидкоморозильний тунель (рис. 6.1) складається з трьох послідовно розташованих секцій (попереднього охолодження, заморожування й вирівнювання температури) і має такі внутрішні розміри: довжина 2,31 м, ширина 0,66 м, висота в секції заморожування 0,4 м, в

інших секціях – 0,16 м.

Подавання азоту здійснювалося у верхній частині секції заморожування через блок форсунок (по чотири форсунки в кожному із двох рядів). Під час експерименту рідкий холодоагент подавався з витратою 0,01 кг/с.

У нижній частині тунелю розташовувався роликівий транспортер, на якому може розміститися від 4 до 6 лотків з продуктом заморожування. Для інтенсифікації теплообміну в секції попереднього охолодження передбачено вентилятор. З метою контролю стану продукту й охолоджувального середовища над продуктом система вимірювання містила нерухомі датчики температури в секціях тунелю й термопари, що рухалися разом із лотком.

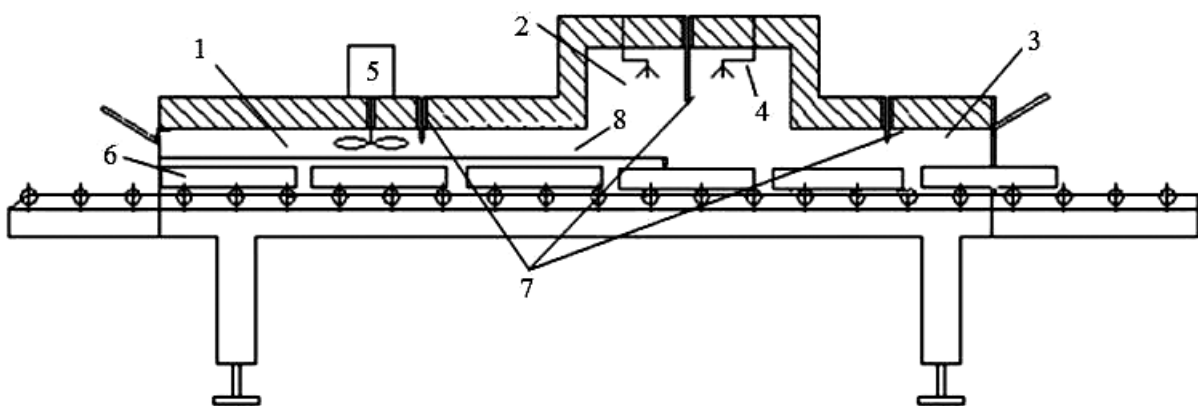


Рис. 6.1. Швидкозаморозильний тунельний апарат:
1 – секція попереднього охолодження; 2 – секція заморожування;
3 – секція вирівнювання температури; 4 – блок форсунок для подавання холодоагенту; 5 – вентилятор; 6 – лотки з продуктом заморожування;
7 – нерухомі термопари; 8 – рухомі термопари в лотку з продуктом

Результати розрахунку поля температури суміші в поздовжньому (у площині симетрії) і поперечному (у секції заморожування) перерізах тунелю показано на рис. 6.2.

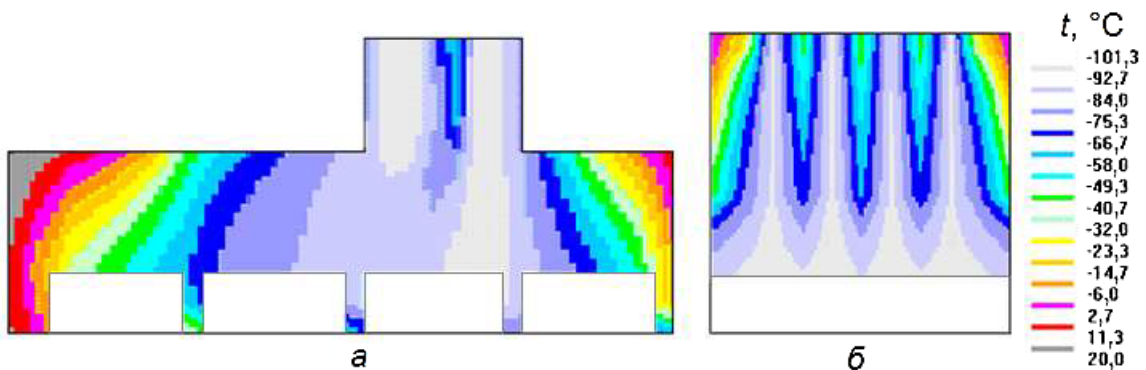


Рис. 6.2. Поле температури в поздовжньому (а) і поперечному (б) перерізах у секції заморожування швидкозаморозильного тунелю

Ці результати порівнювалися з результатами вимірювань температури нерухомими термопарами в натурних експериментах під час заморожування чорної смородини (рис. 6.3) [12].

Валідація математичної моделі теплоперенесення під час струминного витікання холодоагенту в швидкоморозильній камері відносно експериментальних результатів вимірювання температури охолоджувального газового середовища проводилася шляхом обчислення статистичних показників ефективності моделі, які було рекомендовано в роботах [92, 317]. Формули показників і рекомендовані діапазони їх прийнятних значень наведено в табл. 4.1.

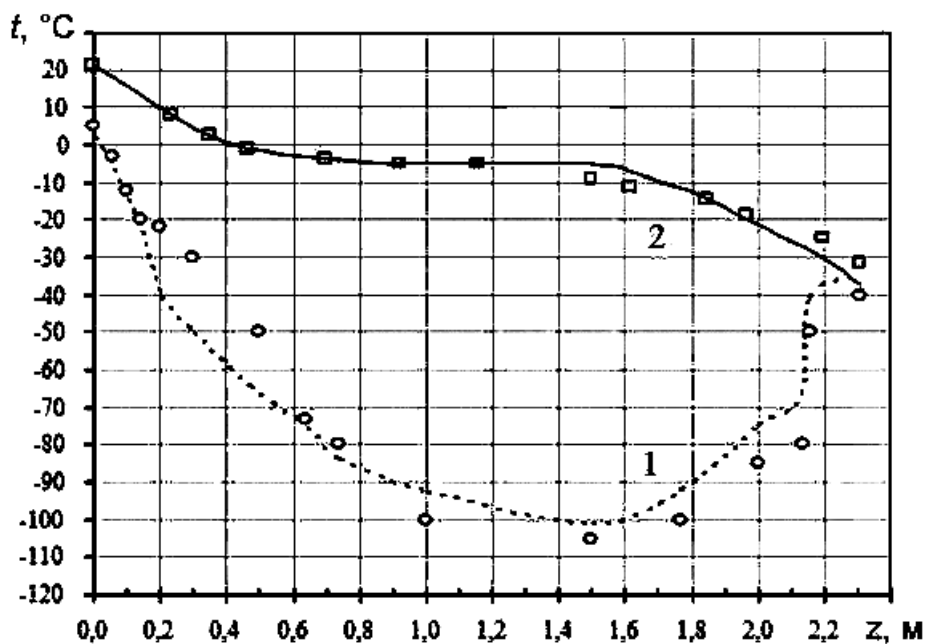


Рис. 6.3. Розподіл температури холодоагенту (1) і чорної смородини (2) під час її заморожування в тунелі (лінії – розрахунок, маркери – експеримент)

За результатами статистичного оброблення експериментальних і модельних температур (див. рис. 6.3) було виявлено такі значення показників ефективності моделі: $FB = -0,002$; $VG = 1,00$; $MG = 0,99$; $NMSE = 0,002$; $Fa2 = 100\%$; $r = 0,97$. Значення показників свідчать про якісну і кількісну збіжність розрахункових та експериментальних даних, тому розроблена математична модель руху газової суміші та програмний засіб її комп'ютерної реалізації можуть застосовуватися для вибору оптимальної (при вибраній швидкості роликового транспортера) витрати холодоагенту в камерах заморожування [4].

Висновки до розділу 6

У розд. 6 з використанням розробленого нового класу ефективних тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-

крайових задач зі складними граничними умовами, які різняться розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення й руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери зі складним рельєфом і в системах промислової аеродинаміки, виконано валідацію результатів моделювання відносно наявних результатів експериментальних досліджень.

На основі розробленої нестационарної математичної моделі потрапляння (струминного витікання) газової домішки в актуальну область, у якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми:

– отримано результати математичного моделювання процесів багатоструминного витікання заданої інтенсивності кріоагенту (азоту), утворення азотно-повітряної суміші та її руху в швидкоморозильному тунелі з метою заморожування харчових продуктів;

– проведено валідацію математичної моделі відносно даних натурального експерименту на прикладі заморожування смородини. Якісна і кількісна збіжність розрахункових та експериментальних даних дає можливість використовувати математичну модель і програмний засіб її комп'ютерної реалізації як інженерний інструмент під час аналізу й прогнозування тривимірних температурних полів у камерах термообробки з метою підвищення ефективності роботи термообладнання.

Розділ 7. АНАЛІЗ І ПРОГНОЗУВАННЯ БЕЗПЕКИ ПІД ЧАС ТЕХНОГЕННИХ АВАРІЙ

У цьому розділі здійснено числовий аналіз і прогнозування безпекового стану на промислових об'єктах підвищеної небезпеки під час техногенних аварій. Застосовано методи ймовірнісного й детермінованого оцінювання безпекового стану людини й конструкцій будівель у навколишньому середовищі, які зазнають впливів негативних факторів, що виникають під час аварійного викиду й поширення газових домішок у приземному шарі атмосфери [53].

7.1. Аналіз імовірності ураження персоналу отруйними хімічними речовинами

Одним із найбільш небезпечних сценаріїв техногенних аварій є викид у повітря приземного шару атмосфери токсичних газоподібних домішок унаслідок часткового або повного руйнування посудин для їх зберігання або транспортування.

Розроблена математична модель процесу випаровування токсичної домішки з поверхні плями аварійного пролиття зрідженого токсичного газу, формування хмари ОХР з повітрям та її подальшого поширення в

приземному шарі атмосфери з урахуванням захаращення простору дає змогу отримати просторово-часові поля фактора ураження (інгаляційної токсичної дози) і визначити розподіл імовірності негативних наслідків для людини на основі апарату пробіт-аналізу [52]. Запропоновані алгоритм і метод урахування змінної інтенсивності випаровування зрідженого токсичного газу з поверхні плями аварійного пролиття в процесі викиду газової домішки в приземний шар атмосфери було реалізовано у вигляді підсистеми дослідного програмного комплексу «Toxic Spill Safety» [72]. Комплекс забезпечує можливість проводити тривимірний аналіз розсіювання токсичних газових домішок у часі й просторі в практично прийнятні терміни часу й прогнозувати ризики летального ураження людини внаслідок інгаляції випарами токсичного газу.

7.1.1. Математичне моделювання наслідків випаровування аварійного пролиття токсичних речовин на залізничному транспорті

Одним із засобів транспортування токсичних речовин на великі відстані є його переміщення у зрідженому стані в залізничних цистернах. Відмова функціонування системи герметизації, часткове пошкодження або повне руйнування цистерни призводять до аварійного пролиття зрідженого газу на землю з утворенням плями, з поверхні якої випаровується рідина, газова фаза потрапляє до чистого повітря атмосфери й утворюється токсична хмара. Особливо небезпечною є така аварія поблизу населених пунктів, наприклад на території залізничних станцій.

7.1.1.1. Вплив загромадження простору на наслідки випаровування аварійного пролиття токсичних речовин

Розглянемо випаровування 6925 кг зрідженого ціанистого водню (токсичної вибухонебезпечної речовини з густиною 689 кг/м^3 , молярною масою $0,027 \text{ кг/моль}$, температурою кипіння $298,6 \text{ К}$, теплотою випаровування 933 кДж/кг) з плями пролиття у формі круга радіусом R , яка утворилася внаслідок руйнування цистерни на майданчику стоянки залізничної станції в межах населеного пункту з великими будинками (коефіцієнт степеневої залежності для апроксимації швидкості в атмосферному шарі над поверхнею землі $k = 0,4$) (рис. 7.1) [24].

Центр плями пролиття розташовувався на відстані $X_c = 16 \text{ м}$, $Z_c = 16 \text{ м}$ від початку координат у розрахунковій області з габаритами $L_x \times L_y \times L_z = 85 \times 10 \times 85 \text{ м}$ і варіантом за кількістю комірок уздовж координатних осей $85 \times 10 \times 85$ відповідно [55].

На відстані $X_a = 30 \text{ м}$ і $Z_a = 28 \text{ м}$ від початку координат знаходилася будівля станції з габаритами $D_x \times D_y \times D_z = 15 \times 5 \times 25 \text{ м}$.

Вітер набігає зі швидкістю 3 м/с під кутом 45° до осі OZ на висоті

0,5 м. У цьому випадку початкова ефективна швидкість вторинної хмари, що утворюється на стадії випаровування з плями пролиття, становить 1,19 м/с.

Якщо знехтувати масою газової фракції первинної хмари, що утворилася внаслідок аварійного руйнування цистерни, і врахувати, що температура кипіння речовини вище температури навколишнього середовища (тобто маса небезпечної речовини, що переходить в аерозоль до первинної хмари, дорівнює нулю), то за формулою (2.82) можна визначити площу плями пролиття 201 м^2 і її радіус $R = 8 \text{ м}$. Тоді згідно з формулою (2.83) інтенсивність випаровування зрідженого токсичного ціанистого водню з плями аварійного пролиття становитиме $0,00106 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$.

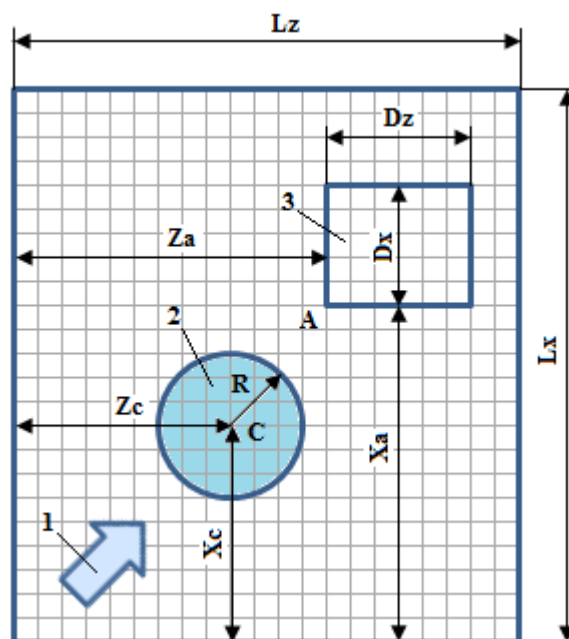


Рис. 7.1. Карта об'єктів біля землі: 1 – вектор швидкості вітру; 2 – пляма пролиття; 3 – будівля

Уважалось, що випаровування починалося з моменту часу $t_1 = 0 \text{ с}$ і примусово припинялося після $t_2 = 5 \text{ с}$, наприклад, шляхом заливання плями пролиття спеціальною піною. Час закінчення розрахунків було взято таким, щоб токсична хмара вийшла за межі розрахункової області.

Було виконано два варіанти розрахунку: без урахування наявності будівлі залізничної станції; з урахуванням загромождження області розрахунку будівлею. Аналіз змінення полів масової концентрації ціанистого водню проводився в площині XOZ у шарі обчислювальних комірок біля землі. Розвиток процесу поширення домішки до моменту завершення випаровування для варіанта без будівлі зображено на рис. 7.2. Хмара продовжує підживлюватися домішкою (рис. 7.2, а), яка продовжує випаровуватися з плями пролиття, рухаючись за вітром і

захоплюючи все більший простір біля землі (рис. 7.2, б). У момент припинення випаровування підживлення домішкою завершується, і хмара поступово виходить за межі майданчика (рис. 7.3, а).

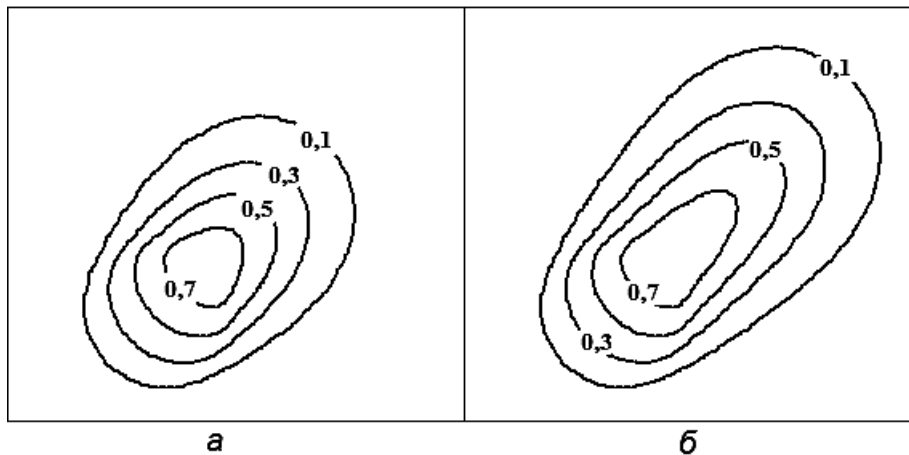


Рис. 7.2. Поля масової концентрації домішки в різні моменти часу t від початку випаровування (варіант без будівлі): а – $t = 2$ с; б – $t = 3$ с

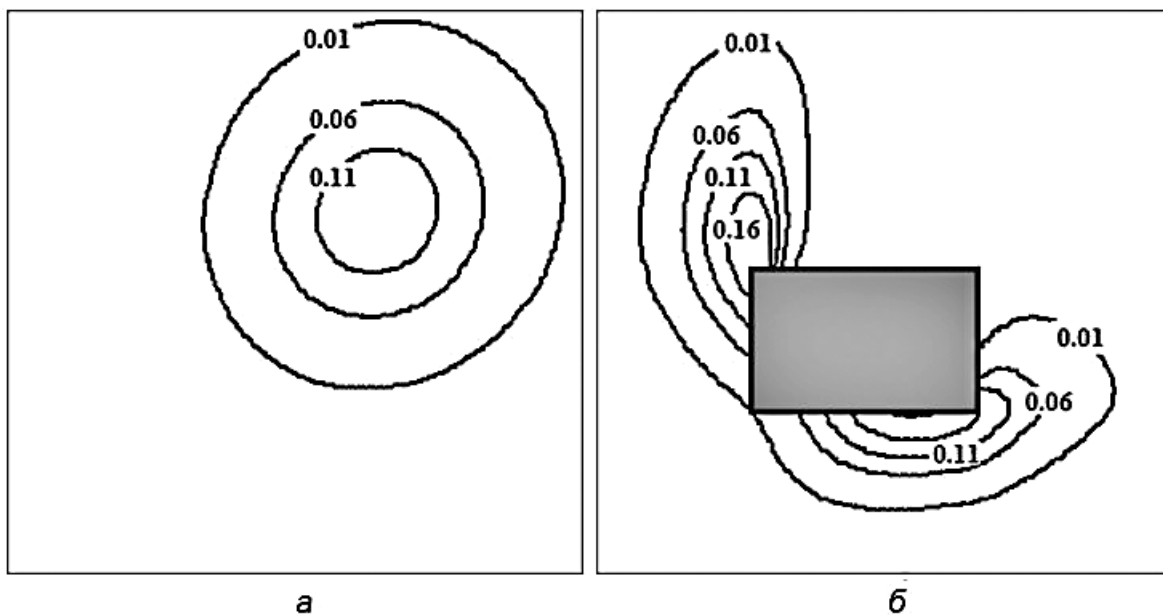


Рис. 7.3. Поля відносної масової концентрації токсичної домішки в момент часу $t = 20$ с від початку випаровування: а – без будівлі; б – з будівлею

Загромадження простору будівлею буде суттєво впливати на картину розподілу домішки в просторі. Якщо будівлі немає, то бачимо, що хмара випаровування безперешкодно виходить за межі розрахункової області, поступово втрачаючи густину токсичної домішки (див. рис. 7.3, а).

У разі наявності об'єкта загромадження розрахункової області на шляху руху хмари отруйної хімічної речовини виникає перешкода (рис. 7.3, б). Форма й розміри хмари змінюються відповідно до течії газової суміші, яка формується в процесі обтікання будівлі. Наявність перешкоди збільшує не тільки максимальні значення масової концентрації токсичної

речовини, але й час проходження хмари по розрахунковій області, а отже, і час експозиції обслугового персоналу шкідливому впливу.

Нестаціонарні поля масової концентрації ціанистого водню можна розглядати як просторово-часовий розподіл небезпечного параметра фізичного процесу, що розглядається. Ці дані використовуються для розрахунку інгаляційної токсичної дози як фактора ураження, пробіт-функції для ціанистого водню і, отже, умовної ймовірності летального наслідку для людини під час інгаляції цієї токсичною речовиною (рис. 7.4) [22].

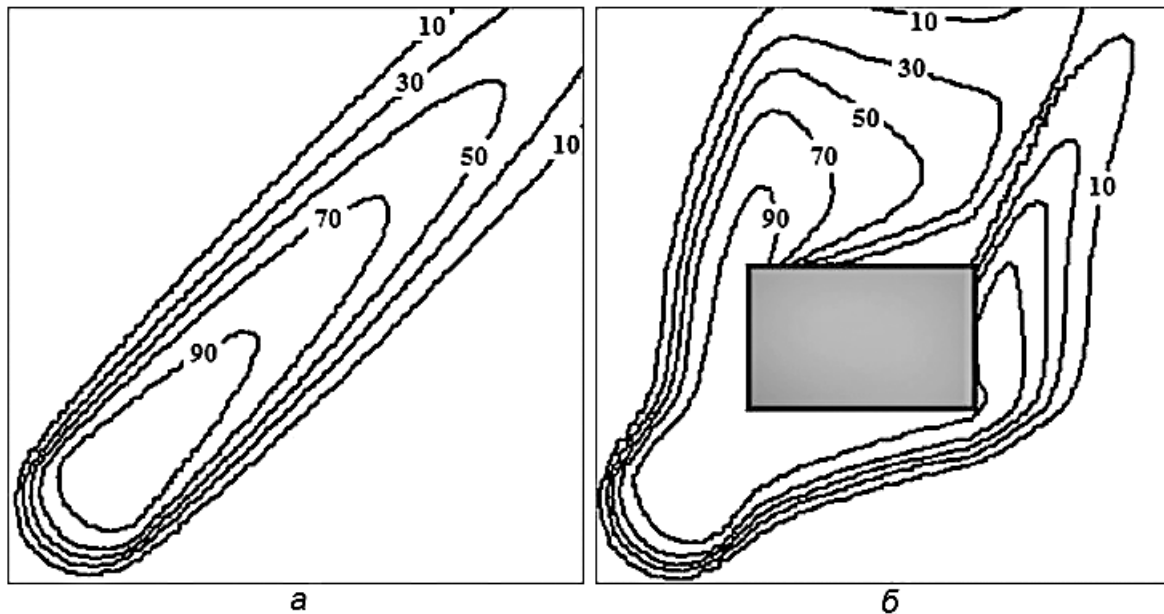


Рис. 7.4. Поле умовної ймовірності летального ураження людини біля землі (%): а – без будівлі; б – з будівлею

Використаємо характерну площу S_x розрахункової області біля землі, яку займає зона з умовною ймовірністю летального ураження 50 % і більше, для порівняння розглянутих варіантів обчислювального експерименту.

У випадку врахування загромождження будівлею (рис. 7.4, б) характерна площа небезпечної зони становила 1290 м², що істотно більше (на 29 %), ніж у варіанті розрахунку без будівлі (рис. 7.4, а) – 1001 м².

Якісний і кількісний аналіз полів умовної ймовірності летального результату внаслідок ураження людини інгаляційною токсичною дозою забезпечує можливість зробити висновок про суттєвий вплив загромождження простору будівлею на розташування й форму небезпечної для обслугового персоналу зони, що обґрунтовує необхідність урахування цього фактора під час аналізу й прогнозування розвитку техногенної аварії розглянутого типу на підприємствах підвищеної небезпеки з метою розроблення рекомендацій щодо зниження потенційних ризиків летальних наслідків для обслугового персоналу й населення.

7.1.1.2. Вплив форми плями аварійного пролиття токсичних речовин на наслідки випаровування в повітря

Проливання рідкої фази небезпечної хімічної речовини після аварійного руйнування посудини для зберігання призводить до утворення плями, форма якої може бути різною. Розглянемо вплив еліптичної плями, форма якої змінюється залежно від коефіцієнта стиснення (еліптичності) [56]. Маємо майданчик таких самих форми й розмірів, дискретизований таким же чином, як і в підрозд. 7.1.1.1.

Розглядається еліптична пляма пролиття ціанистого водню з півосями a і b (табл. 7.1) і центром C , який знаходиться на відстані $X_C = 16$ м і $Z_C = 16$ м від початку координат O (рис. 7.5) [30, 48].

Форма плями характеризується коефіцієнтом стиснення (розтягнення) уздовж напрямку вітру (співвідношення малої b і великої a півосей еліпса) $\omega = b/a$. Цей параметр називається коефіцієнтом стиснення еліпса або еліптичністю. Розглядаються еліпси трьох типів з різною еліптичністю ω , але з однаковою площею S (рис. 7.6, а). Уздовж осі симетрії зони дисперсійної домішки розташовуються три контрольні точки з такими координатами: P_0 (34,5; 34,5), P_1 (54,5; 54,5) і P_2 (74,5; 74,5).

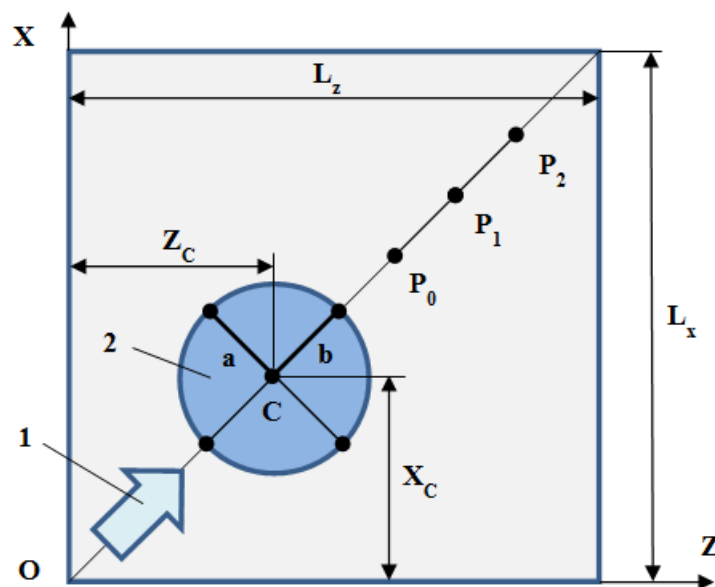


Рис. 7.5. Карта об'єктів: 1– вектор швидкості вітру; 2 – пляма пролиття; P_0 – P_2 – контрольні точки

Таблиця 7.1

Параметри еліптичної плями пролиття

Варіант	Піввісь a , м	Піввісь b , м	Площа еліпса S , м ²	Еліптичність ω
V0	16,0	4,0	201,1	0,25
V1	8,0	8,0	201,1	1,0
V2	4,0	16,0	201,1	4,0

Вітер набігає зі швидкістю 3 м/с під кутом 45° до осі OZ на висоті 0,5 м. У цьому випадку початкова ефективна швидкість вторинної хмари, що утворюється на стадії випаровування, дорівнює 1,19 м/с.

Дискретизацію плями пролиття здійснюють з допомогою скінченно-різницевої сітки за принципом: якщо центр обчислювальної комірки знаходиться всередині контуру плями, то на цій грані комірки встановлюються граничні умови «випаровування», якщо поза контуром – граничні умови «потік – земля» (тобто «непротікання»). Результати такої дискретизації плями пролиття для варіанта 1 (з еліптичністю $\omega = 1,0$) зображено на рис. 7.6, б.

Як було зазначено в підрозд. 7.1.1.1, площа плями пролиття становила 201 м^2 , а інтенсивність випаровування ціанистого водню – $0,00106 \text{ кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$.

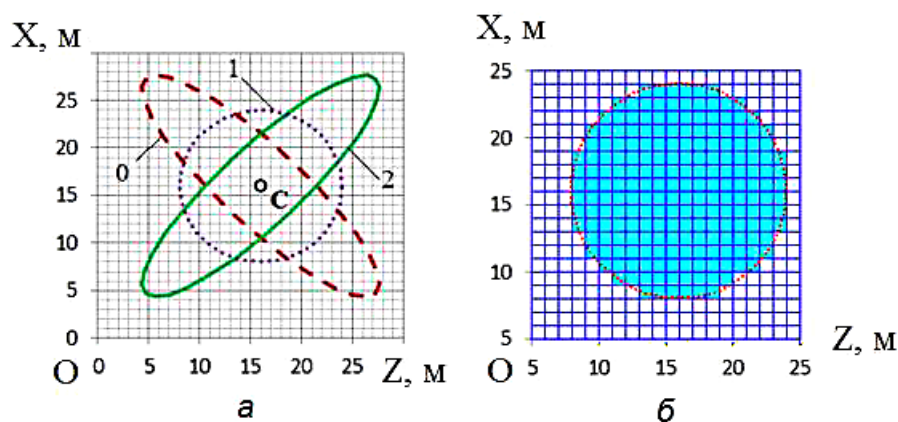


Рис. 7.6. Еліптичні плями пролиття: а – форми еліптичності (варіант V0 – $\omega = 0,25$; варіант V1 – $\omega = 1,0$; варіант V2 – $\omega = 0,25$); б – дискретизація плями варіанта 1

Процес випаровування починався одразу з початком розрахунку $t_1 = 0$ с і припинявся в момент часу $t_2 = 5$ с. Розрахунок завершувався після того, як хмара виходила за межі актуального простору (приблизно через 20 с).

Було виконано три варіанти розрахунку, кожен з яких характеризується коефіцієнтом еліптичності ω : V0 – варіант з найменш розтягнутим уздовж напрямку вітру еліпсом, $\omega = 0,25$; V1 – варіант з круглою плямою, $\omega = 1,0$; V2 – варіант з найбільш розтягнутим еліпсом, $\omega = 4$. Аналіз змінення полів масової концентрації ціанистого водню проводився в площині XOZ у шарі обчислювальних комірок біля землі. На рис. 7.7 показано типову картину розподілу токсичної речовини для різних варіантів плями пролиття.

Динаміку змінення масової концентрації домішки в контрольних точках для різної форми плями пролиття зображено на рис. 7.8.

Нестаціонарні поля масової концентрації ціанистого водню розглядалися як просторово-часові розподіли небезпечного параметра

фізичного процесу розсіювання токсичної домішки. Ці дані використовувалися для обчислення інгаляційної токсичної дози як фактора ураження, пробіт-функції для ціанистого водню й умовної ймовірності летального впливу для людини (рис. 7.9).

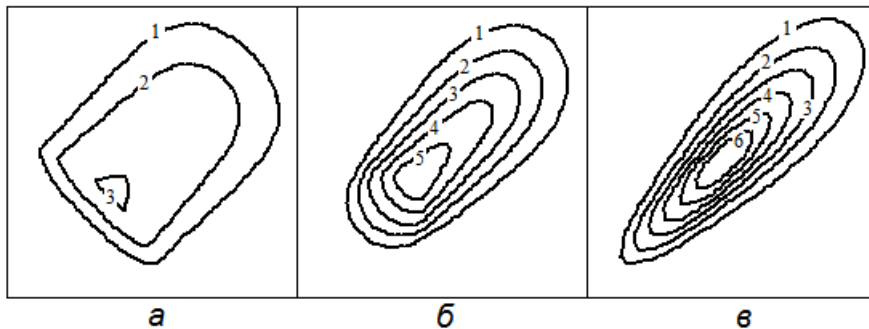


Рис. 7.7. Поля масової концентрації домішки в момент часу 5 с від початку випаровування: а, б, в – варіанти V0, V1, V2 (рівні 1–6 відповідають концентраціям 0,05; 0,1; 0,15; 0,2; 0,25; 0,3 %)

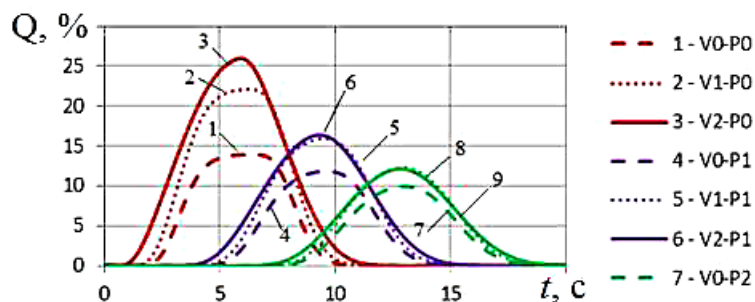


Рис. 7.8. Історія масової концентрації для різних форм плями пролиття: 1–3 – у контрольній точці P₀; 4–6 – у контрольній точці P₁; 7–9 – у контрольній точці P₂

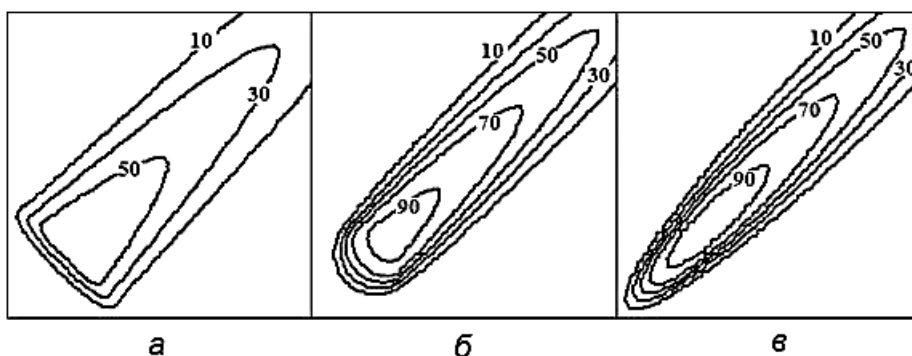


Рис. 7.9. Поля летальної умовної ймовірності (%): а, б, в – варіанти V0, V1, V2

Для аналізу безпекового стану в контрольних точках порівняльну діаграму залежності летальної умовної ймовірності від форми плями пролиття зображено на рис. 7.10, а. Ще однією порівняльною

характеристикою небезпеки розглянутого процесу поширення токсичної домішки є площа S_{50} , яку займає зона з летальною умовною ймовірністю 50 % і більше (рис. 7.10, б) [42].

Просторовий аналіз полів масової концентрації ціанистого водню поблизу землі для еліптичної плями пролиття з різною еліптичністю (див. рис. 7.7) забезпечує можливість побачити типову картину розподілу газоподібної домішки з максимальною концентрацією в ядрі над плямою пролиття, розсіювання хмари в напрямку вітру з поступовим зменшенням значень концентрації, що обумовлено турбулентним змішуванням домішок з чистим повітрям. Після припинення випаровування рідкої хімічної речовини токсична хмара вільно виходить за межі актуального розрахункового простору, а небезпечна домішка поступово розсіюється в приземному шарі атмосферного повітря.

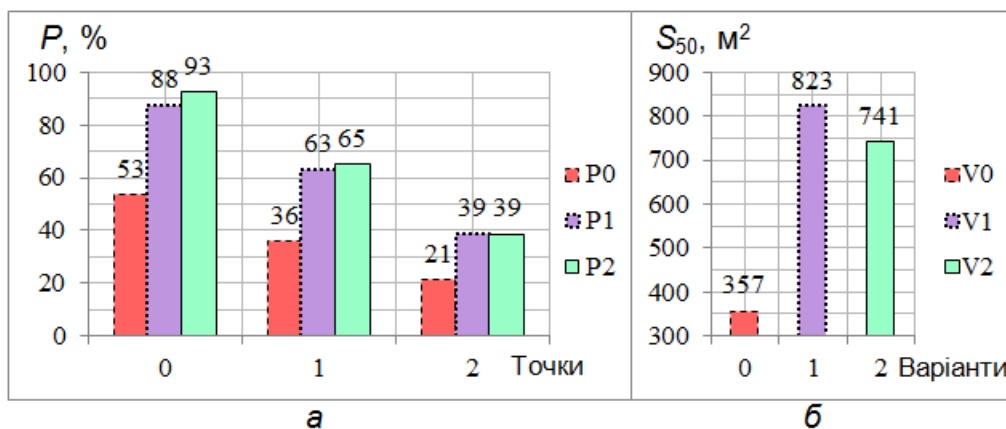


Рис. 7.10. Летальна умовна ймовірність для різних контрольних точок (а) і небезпечна зона для різних форм плями пролиття (б)

Ця точка зору підтверджується часовою динамікою змінення масової концентрації домішки в контрольних точках, яку показано на рис. 7.8 для різних форм плями пролиття. Кожний варіант дає типову картину поступового зменшення максимальної величини масової концентрації, коли хмара віддаляється від епіцентру випаровування. Більше того, зі збільшенням еліптичності ω плями пролиття збільшується максимальна масова концентрація в контрольних точках. Ця різниця поступово нівелюється з віддаленням від центра плями. Якісний і кількісний аналіз полів умовної ймовірності летальних наслідків, показаний на рис. 7.9, дає змогу зробити висновок про значний вплив форми плями пролиття на місце розташування й форму небезпечної для людини зони. Чим менший коефіцієнт ω еліптичної плями, тим менші за значенням летальна умовна ймовірність в контрольних точках (див. рис. 7.10, а) і характерна площа S_{50} найнебезпечнішої зони, де умовна ймовірність летальних наслідків для людини становить понад 50 % (див. рис. 7.10, б). Зі збільшенням коефіцієнта ω відносно круглої плями тенденція до збільшення летальної умовної ймовірності в контрольних точках зберігається, але менш суттєво, а характеристична площа S_{50} навіть дещо зменшується, що можна

пояснити більш вузькою серединною зоною щільного ядра домішки у хмарі та більш інтенсивним змішуванням домішки з чистим повітрям.

Таким чином, виявлені особливості розсіювання токсичної домішки обґрунтовують необхідність урахувати фактор ω для еліптичної форми плями пролиття токсичної рідини під час аналізу й прогнозування розвитку техногенної аварії подібного типу з метою розроблення рекомендацій щодо зменшення ризиків летальних наслідків для людини.

7.1.1.3. Числове оцінювання впливу швидкості вітру на наслідки випаровування проливої токсичної речовини

Моделювався викид масою 6098 кг зрідженого ціанистого водню [56, 59, 62] (токсичної вибухонебезпечної речовини з густиною 689 кг/м^3 , молярної масою $0,027 \text{ кг/моль}$, температурою кипіння $298,6 \text{ К}$, теплотою випаровування 933 кДж/кг) з плями пролиття довільної форми площею $S = 177 \text{ м}^2$, що утворилася внаслідок швидкоплинного аварійного руйнування посудини для зберігання в районі морського порту (коефіцієнт степеневості залежності для апроксимації швидкості вітру в атмосферному шарі над землею $k = 0,4$) [37].

Вітрова обстановка в приземному шарі атмосфери впливає на інтенсивність випаровування аварійного пролиття зрідженої токсичної речовини й формування небезпечної зони токсичного ураження людини. Моделювалося випаровування з плями заданого контуру для різних варіантів V_1 – V_5 вітру: 3, 5, 7, 9, 11 м/с. Вітер набігав під кутом 45° до поздовжньої осі простору, який біля землі був майданчиком квадратної форми $60 \times 60 \text{ м}$. Уздовж діагоналі на відстанях 35, 55 і 75 м від початку координат розташовувалися контрольні точки P_0 , P_1 і P_2 [62].

Було розраховано профілі швидкості вітру для степеневого закону з коефіцієнтом $k = 0,4$ (табл. 7.2) з метою отримання ефективної швидкості вітру на висоті поверхні випаровування $0,05 \text{ м}$ (табл. 7.3). Профілі візуалізовано на рис. 7.11.

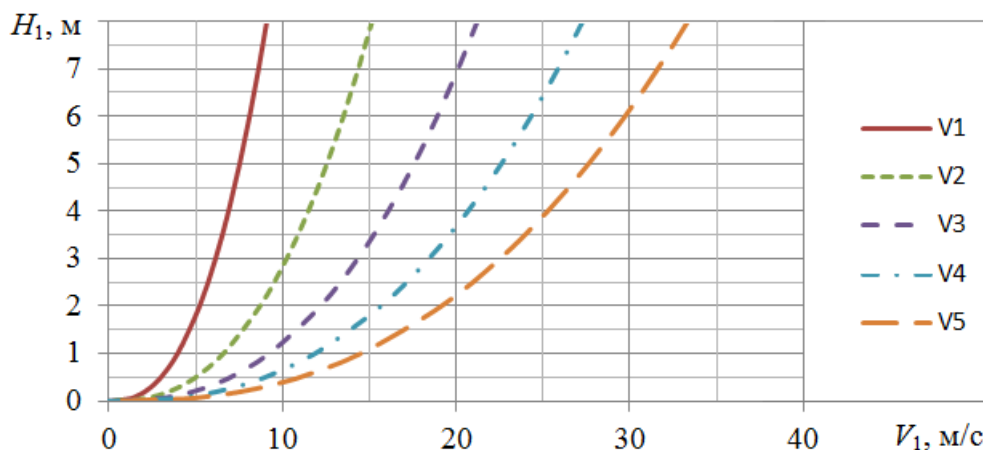


Рис. 7.11. Профілі швидкості повітря біля землі

Таблиця 7.2

Профілі швидкості вітру для варіантів V1–V5

Висота Н1, м	Варіант розрахунку				
	V1	V2	V3	V4	V5
10,00	9,94	16,57	23,20	29,83	36,46
9,00	9,53	15,89	22,24	28,60	34,95
8,00	9,09	15,16	21,22	27,28	33,35
7,00	8,62	14,37	20,12	25,86	31,61
6,00	8,11	13,51	18,91	24,32	29,72
5,00	7,54	12,56	17,58	22,61	27,63
4,00	6,89	11,49	16,08	20,68	25,27
3,00	6,14	10,24	14,33	18,43	22,52
2,00	5,22	8,71	12,19	15,67	19,15
1,00	3,96	6,60	9,24	11,88	14,51
0,50	3,00	5,00	7,00	9,00	11,00
0,45	2,88	4,79	6,71	8,63	10,55
0,40	2,74	4,57	6,40	8,23	10,06
0,35	2,60	4,34	6,07	7,80	9,54
0,30	2,45	4,08	5,71	7,34	8,97
0,25	2,27	3,79	5,31	6,82	8,34
0,20	2,08	3,47	4,85	6,24	7,62
0,15	1,85	3,09	4,32	5,56	6,80
0,10	1,58	2,63	3,68	4,73	5,78
0,05	1,19	1,99	2,79	3,58	4,38
0,00	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00

Таблиця 7.3

Параметри випаровування пролиття

Параметр	Варіант розрахунку				
	V1	V2	V3	V4	V5
V_1 , м/с	3,0	5,0	7,0	9,0	11,0
u_{0ef}^e , м/с	1,19	1,99	2,79	3,58	4,38
Інтенсивність випаровування, кг/(м ² ·с)	0,00106	0,00139	0,00173	0,00206	0,00240
S_{50} , м ²	861	408	140	34	0

Під час кожного обчислювального експерименту для різних швидкостей вітру контролювалися нестационарні просторові розподіли відносної масової концентрації токсичної газоподібної речовини (варіант розрахунку для швидкості вітру $V_1 = 3$ м/с показано на рис. 7.12). На початку актуального процесу (рис. 7.12, а) концентрація домішки є максимальною, тому що випаровування ще не закінчилося, і до атмосфери надходять нові порції ціанистого водню.

Після завершення процесу випаровування (наприклад, аварійну пляму вдалося залити шаром протиаварійної піни) хмара газоповітряної суміші рухається за вітром і поступово втрачає свою інтенсивність унаслідок турбулентного перемішування й додавання до неї чистого повітря (рис. 7.12, б–д).

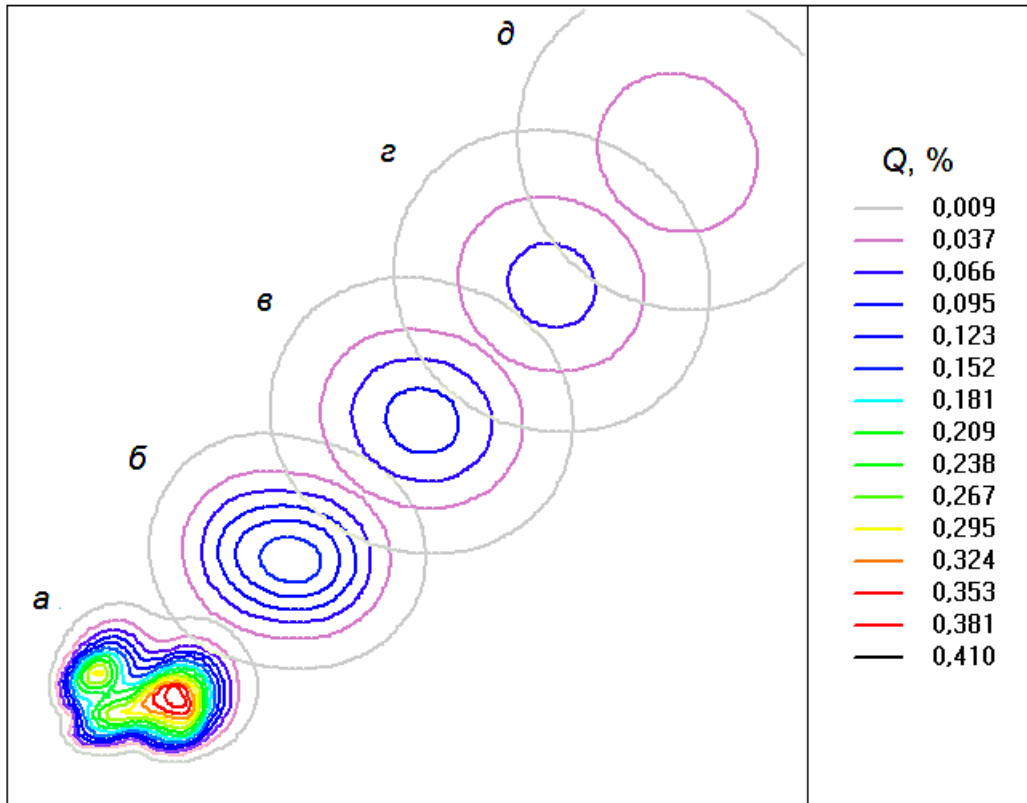


Рис. 7.12. Поля масової концентрації домішки біля землі для варіанта V1:
а–д – моменти часу 3, 13, 23, 33, 43 с

Також проаналізовано нестационарне змінення масової концентрації домішки в контрольних точках P0–P2 (рис. 7.13). Очевидно, що зі збільшенням швидкості вітру в контрольних точках значення максимальної масової концентрації зменшується, що пояснюється підвищеною інтенсивністю розсіювання. Таким же чином поводить ся й токсична доза, що є інтегральним значенням. Для порівняння поведінки максимальної масової концентрації і токсичної дози для одного режиму вітрової обстановки на рис. 7.14 і 7.15 зображено їх змінення з часом і в різних контрольних точках P0–P2 розрахункового простору.

Поля масової концентрації домішки за розробленою методологією використовуються для розрахунку просторового розподілу токсичної дози отруйної хімічної речовини, пробіт-функції й умовної ймовірності летального ураження людини, що знаходиться в небезпечній зоні аварійного викиду в повітря (рис. 7.16).

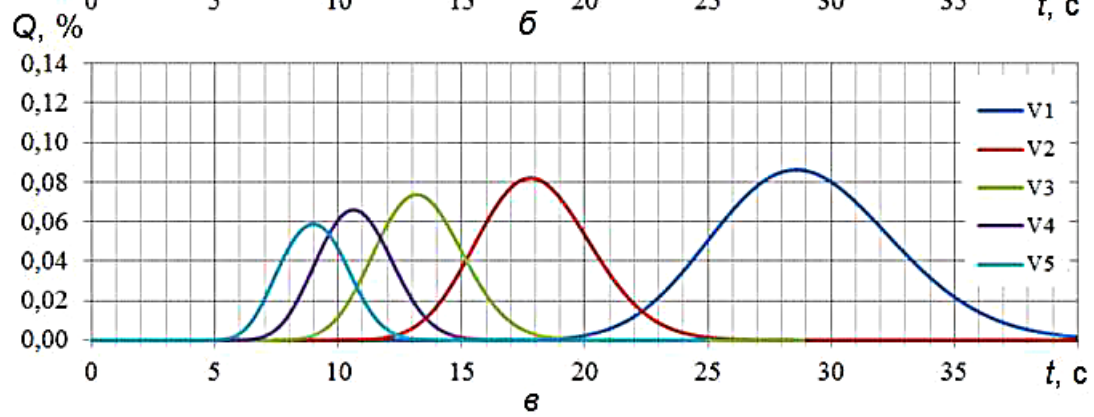
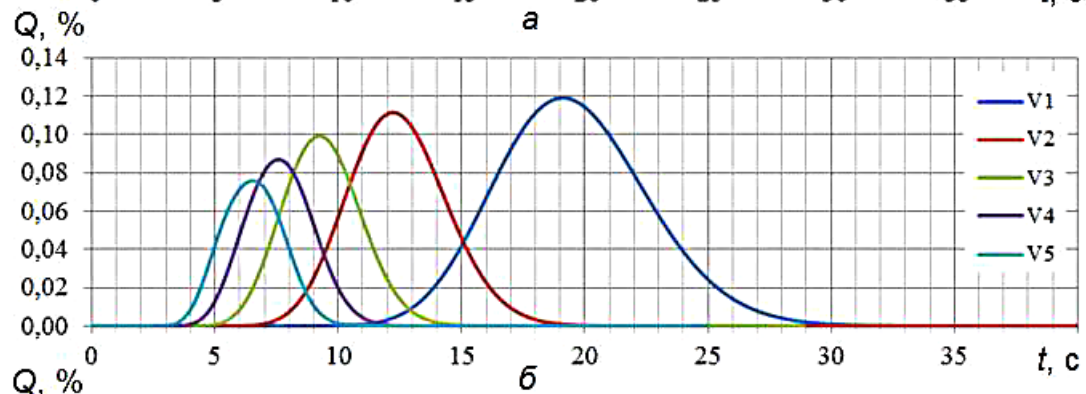
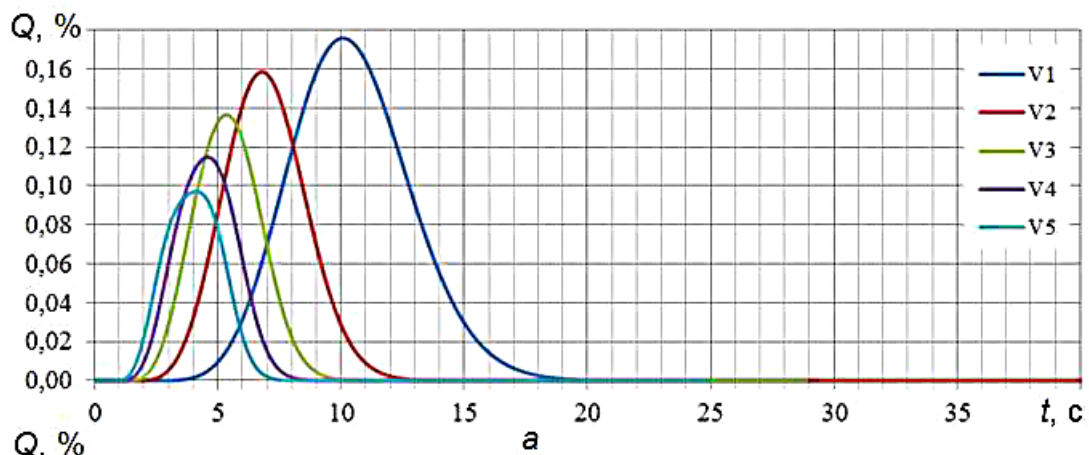


Рис. 7.13. Змінення масової концентрації домішки в часі:
а-в – контрольні точки P0–P2

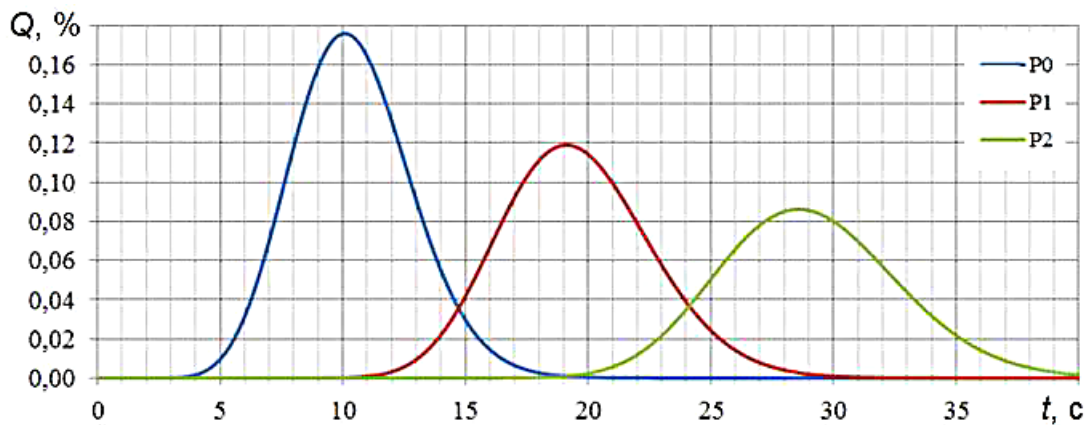


Рис. 7.14. Змінення масової концентрації домішки в часі
для контрольних точок P0–P2 (варіант вітру V1)

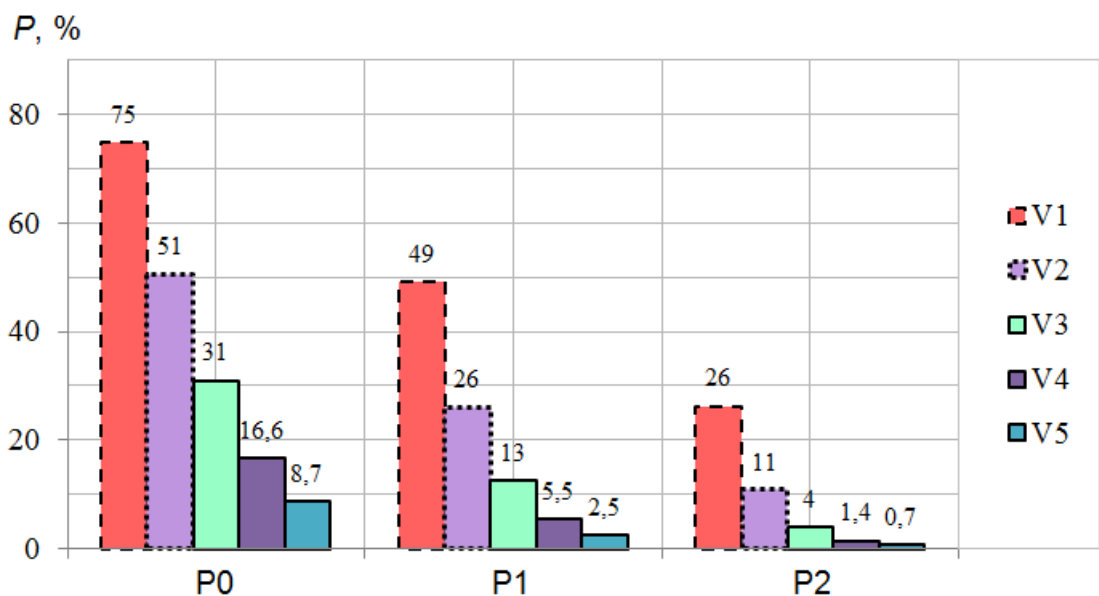


Рис. 7.15. Імовірність ураження в точках P0–P2 для варіантів V1–V5

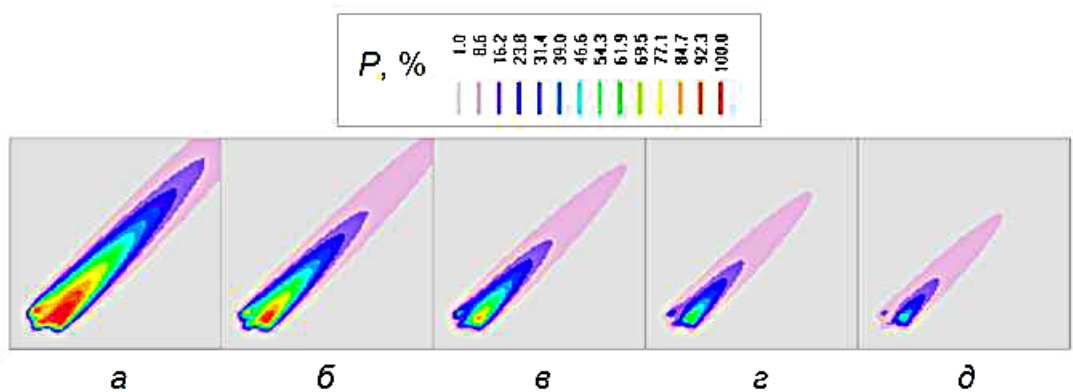


Рис. 7.16. Поле умовної ймовірності смертельного ураження біля землі:
а–д – для варіантів V1–V5

Оцінювалася також площа небезпечної зони S_{50} , де ймовірність ураження перевищувала 50 % (рис. 7.17), на основі чого було побудовано залежність масштабу ймовірного смертельного ураження людини (площі небезпечної зони) унаслідок інгаляції токсичною речовиною залежно від швидкості вітру (рис. 7.18). Очевидно, що максимальну небезпеку являє собою варіант з мінімальною швидкістю вітру, а зі збільшенням швидкості вітру площа небезпечної зони значно зменшується, набуваючи практично нульового значення для максимальної швидкості вітру.

Таким чином, розроблена методологія є корисним інструментом фахівців з безпеки, які оцінюють стан техногенного об'єкта для рози вітрів у зоні розташування об'єкта.

Користуючись залежністю, показаною на рис. 7.18, можна отримати ймовірний масштаб аварії (площу небезпечної зони) для будь-якої швидкості вітру. Наприклад, для вітру зі швидкістю 6 м/с площа зони дорівнюватиме приблизно 250 м².

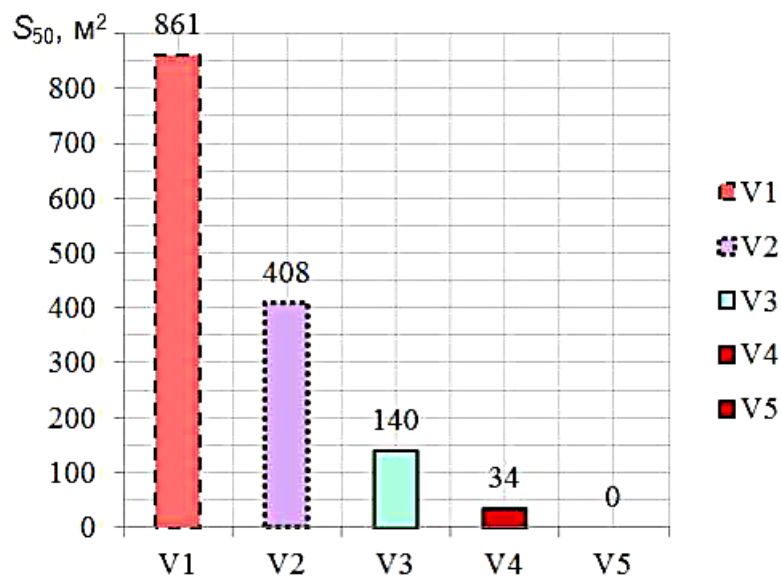


Рис. 7.17. Діаграма площі небезпечної зони біля землі для варіантів V1–V5

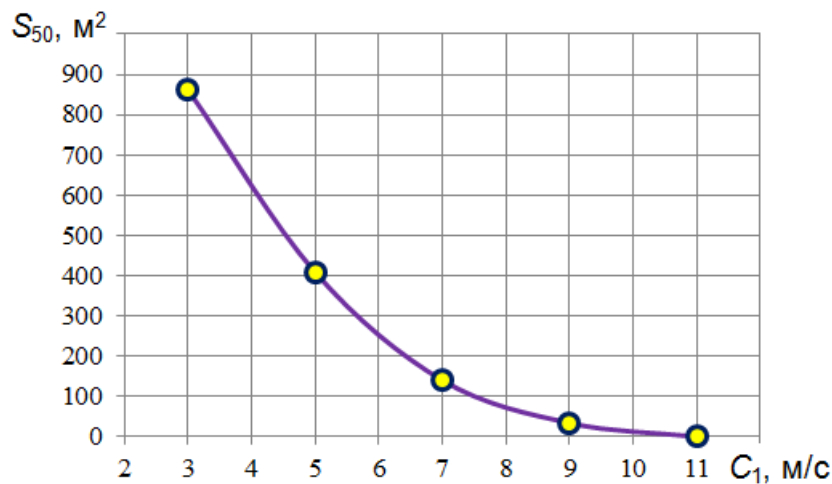


Рис. 7.18. Залежність площі небезпечної зони біля землі від швидкості вітру

7.1.2. Числове моделювання струминного витікання в атмосферу газоповітряної суміші з різною концентрацією домішок

Часто має місце аварійний або контрольований викид не чистої газоподібної речовини, а її суміші з повітрям, у якій відносна масова концентрація домішки Q може бути фіксованою в межах 0...100 %.

Проводилося моделювання витікання в атмосферу хлору (токсичного важкого газу) з круглого отвору радіусом 0,5 м з координатами центра $x = 16$ м, $z = 16$ м в області з габаритами $19 \times 5 \times 50$ м і варіантом за кількістю обчислювальних комірок уздовж координатних осей $19 \times 5 \times 50$. Вітер набігає зі швидкістю 10 м/с під кутом 0° до осі OZ. Питома інтенсивність витікання суміші дорівнювала $7,415 \text{ г}/(\text{с} \cdot \text{м}^2)$.

Уважалося, що витікання починалося з моменту часу $t_1 = 0$ с і

припинялося в момент $t_2 = 5$ с.

Температура суміші відповідає даним закипання хлору 259 К, молярна маса домішки становила 0,035 кг/моль.

Пляма витікання після сканування карти об'єктів апроксимується колекцією просторових обчислювальних комірок, на нижній грані яких буде виставлено граничні умови «витікання» токсичної домішки заданої концентрації.

Аналіз змінення полів масової концентрації хлору проводився в площині XOZ у шарі обчислювальних комірок біля землі (рис. 7.19).

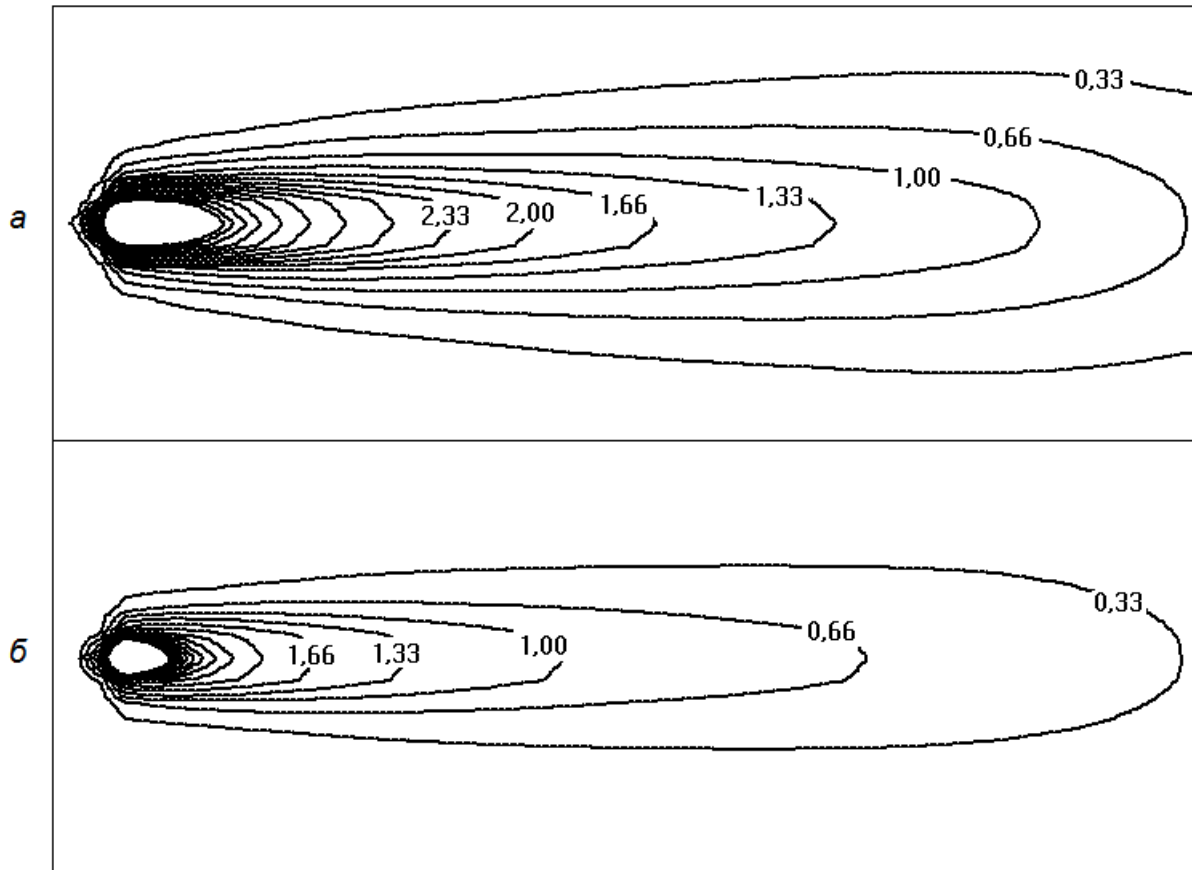


Рис. 7.19. Поля масової концентрації домішки в момент часу $t = 5$ с для різної концентрації Q : а – $Q = 100$ %; б – $Q = 50$ %

Зону, максимальну за площею й найбільш щільну за концентрацією домішки, газоповітряна хмара займає у випадку вихідної концентрації домішки в струмені, що викидається, $Q = 100$ % (рис. 7.19, а). Зі зменшенням початкової концентрації до $Q = 50$ % (рис. 7.19, б) площа небезпечної зони зменшується з помітним зниженням густини домішки в хмарі, що в кінцевому підсумку, має позначитися й на картині токсичної безпеки на промисловому майданчику.

Поля відносної масової концентрації хлору можна розглядати як просторово-часовий розподіл небезпечного параметра токсичного газу.

Концентрація домішки є однією з величин вихідних даних, що

використовується для розрахунку токсичної дози як фактора інгаляційного ураження людини в зоні викиду, подальшого обчислення пробіт-функції для інтоксикації хлором і, отже, умовної ймовірності летального ураження людини, яка зазнала токсичного впливу (рис. 7.20).

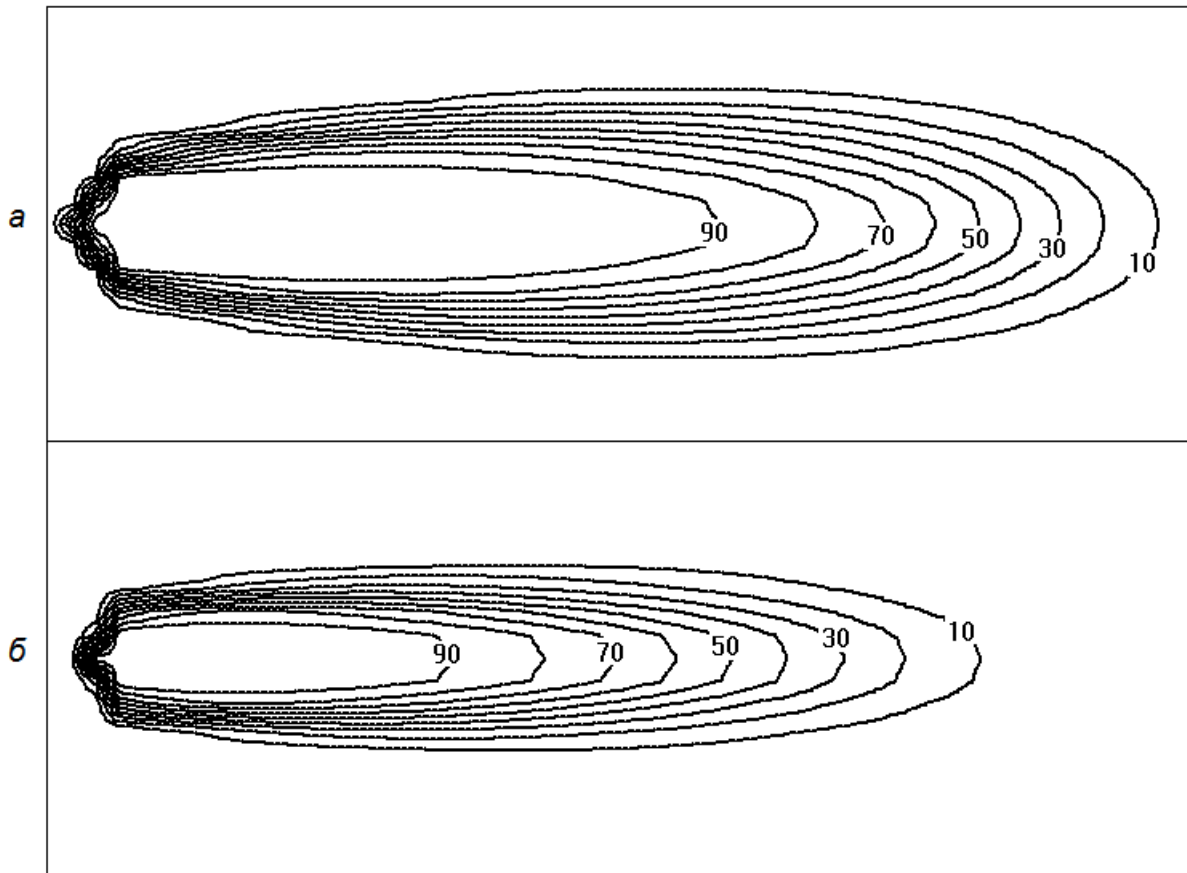


Рис. 7.20. Поля умовної ймовірності ураження людини в момент часу $t = 5$ с для різної концентрації Q : а – $Q = 100$ %; б – $Q = 50$ %

Як і слід було очікувати, найбільш небезпечним є варіант викиду чистої домішки $Q = 100$ % (рис. 7.20, а). Зі зменшенням концентрації до $Q = 50$ % (рис. 7.20, б) площа зони з небезпечними значеннями умовної ймовірності ураження персоналу токсичним газом зменшується, що приводить, у кінцевому підсумку, до зниження сумарного ризику й позитивно позначається на стані безпеки промислового підприємства.

7.2. Числове оцінювання впливу вибуху водню на споруди навколишньої забудови

Водень стає все більш популярним паливом для транспортних засобів [57]. Однак під час роботи заправних станцій можливими є аварійні ситуації, спричинені витіканням газоподібного водню різної інтенсивності з несправного обладнання, витіканням рідкого водню з цистерни, викидом газоподібного водню внаслідок руйнування балонів високого тиску. Усі ці

аварії призводять до формування вибухонебезпечної хмари воднево-повітряної суміші та її розсіювання в атмосфері під впливом вітру. Одним з найбільш небезпечних сценаріїв з огляду на потенційні катастрофічні наслідки, які загрожують обладнанню станції, обслуговому персоналу й населенню прилеглих житлових будинків [39], є детонаційний вибух воднево-повітряної суміші внаслідок викиду в атмосферу всього стисненого газоподібного водню з балонів високого тиску. Математичне моделювання техногенних аварій такого типу є актуальною науково-прикладною проблемою, розв'язання якої може суттєво підвищити рівень безпеки техногенних об'єктів [45, 46, 47].

7.2.1. Постановка задачі вибуху водню на заправній станції

Розглянемо типову станцію заправлення транспортних засобів водневим паливом. Роздавальна станція має криогенну цистерну з рідким воднем ($5,7 \text{ м}^3$). Цистерна живить три блоки балонів (по 12 балонів у кожному блоці) високого тиску загальним об'ємом $18,4 \text{ м}^3$, у яких зберігається газоподібний водень при температурі навколишнього середовища [272].

Під час моделювання вибуху воднево-повітряної суміші на заправній станції передбачалося, що хмара вибухонебезпечної суміші сформувалася внаслідок викиду всього об'єму стисненого газоподібного водню з балонів роздавання й подальшого його розсіювання в потоці повітря, яке набігає зі швидкістю 10 м/с . Як вихідні умови було взято такі параметри хмари: об'єм 798 м^3 , маса водню в хмарі $687,4 \text{ кг}$, масова концентрація водню 100% , тиск $1031371,3 \text{ Па}$, температура 288 К . Передбачалося, що розсіювання хмари відбувалося протягом $0,06 \text{ с}$ після миттєвого руйнування балонів («фізичний» вибух). Після цього під зовнішнім впливом відбувався детонаційний вибух воднево-повітряної суміші («хімічний» вибух). «Хімічний» вибух зазвичай супроводжується появою продуктів горіння й ударної хвилі, яка впливає на господарські й житлові будівлі навколо. План місцевості із забудовою зображено на рис. 7.21. Висота будівель становила $5 \dots 12 \text{ м}$. Місцезнаходження заправної станції (позиції А і В на рис. 7.21), а також засобів захисту будівель (обвалування – загромадження земляними валами, відбивна стіна) від руйнівного впливу ударної вибухової хвилі варіювалося щодо забудови. Змінення тиску в часі контролювалося в епіцентрі вибуху та в характерній точці на стіні будівлі біля землі (позиції А, В і С на рис. 7.21 відповідно) [39].

7.2.2. Вибух хмари водню на заправній станції

Розглядався випадок (V1) розташування заправної станції в безпосередній близькості від споруд забудови (позиція В на рис. 7.21).

Жодних засобів захисту будівель від руйнівної дії ударної хвилі внаслідок вибуху хмари не застосовувалося. Розподіл об'ємної концентрації водню в суміші з повітрям зображено на рис. 7.22. Очевидно, що радіус півсферичної зони детонаційного горіння становить приблизно 25 м і є більшим за максимальну висоту забудови [7].

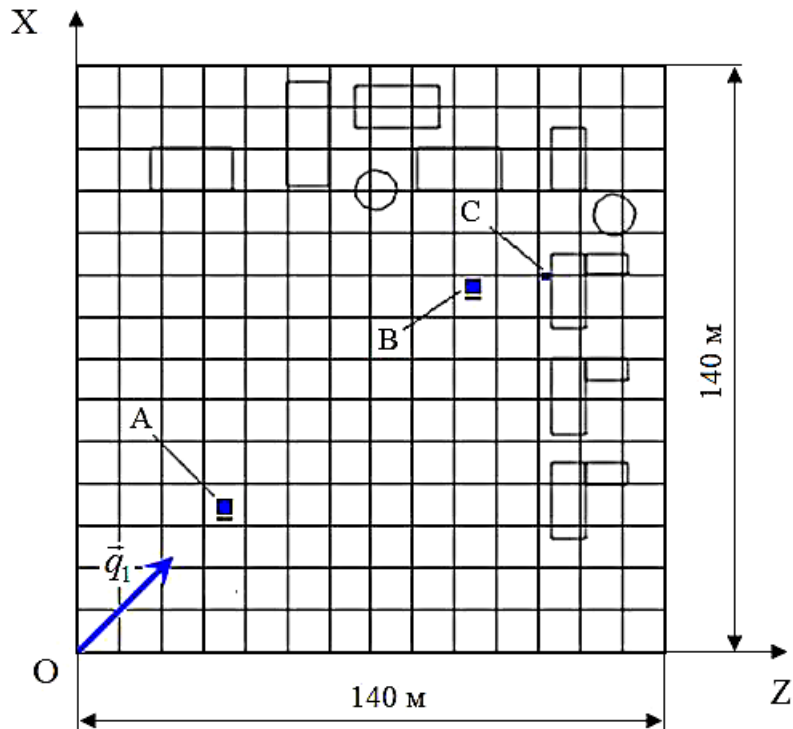


Рис. 7.21. План місцевості із забудовою (А, В – можливі місця розташування заправної станції; С – точка контролю тиску на будівлі)

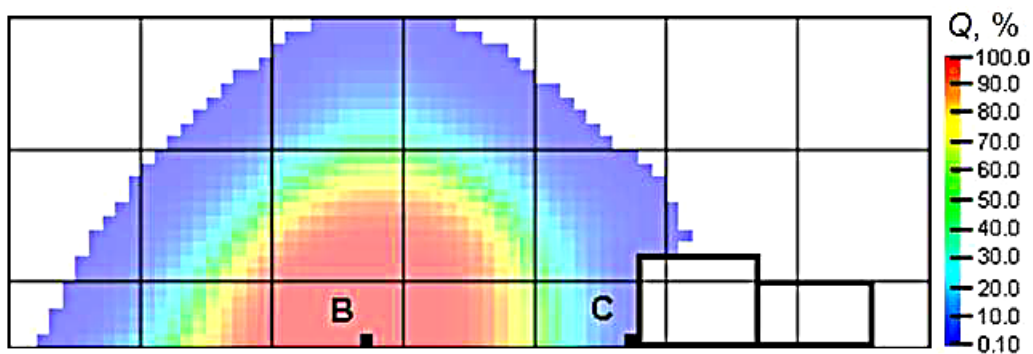


Рис. 7.22. Розподіл об'ємної концентрації водню в площині YOZ (V1) (В – епіцентр вибуху; С – точка контролю тиску на стіні будівлі)

Розподіл надлишкового тиску в площинах XOZ (біля поверхні землі) і YOZ (у вертикальному перерізі) у момент часу, коли тиск у контрольній точці С набуває максимального значення, показано на рис. 7.23. Аналіз просторового розподілу надлишкового тиску свідчить про те, що тиск у фронті вибухової ударної хвилі в кутових зонах біля фундаменту будівель приблизно в два рази є вищим, ніж у відкритому просторі [40].

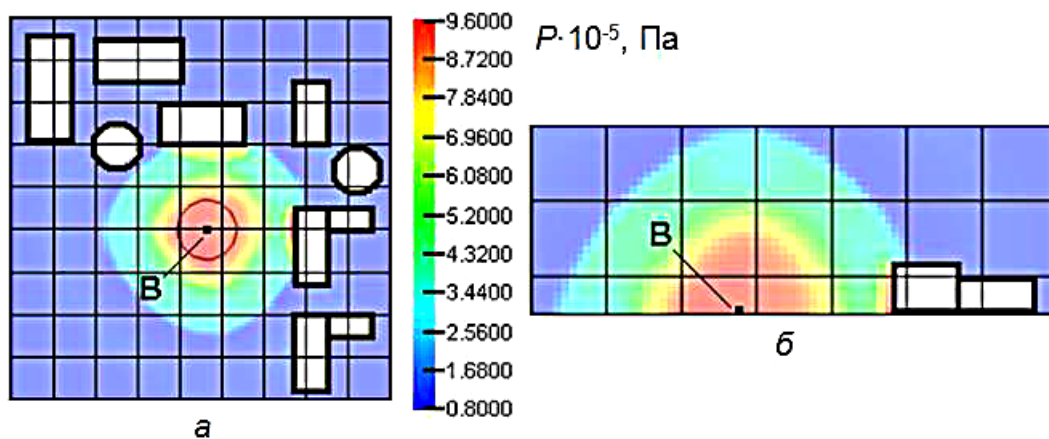


Рис. 7.23. Розподіл тиску в площинах (V1): а – XOZ біля землі; б – YOZ

Змінення тиску з часом у контрольній точці С зображено на рис. 7.24. Пік тиску відповідає моменту часу проходження фронту ударної хвилі – результату «хімічного» вибуху. З часом амплітуда ударної хвилі швидко згасає (рис. 7.24).

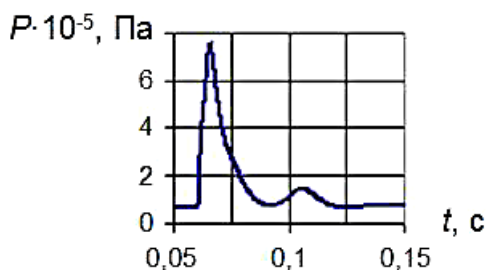


Рис. 7.24. Динаміка тиску в точці С (V1)

Інший випадок (V2) стосувався розташування заправної станції на відстані від споруд забудови (позиція А на рис. 7.21). Відстань від заправної станції до найближчих будівель вибирали згідно з рекомендаціями [272]. Жодних засобів захисту забудови від руйнівного впливу ударної хвилі не застосовувалося. Аналіз розподілу об'ємної концентрації водню в суміші з повітрям показав, що розмір і форма зони детонаційного горіння аналогічні випадку з ближньою забудовою (див. рис. 7.22).

Розподіл тиску в площинах XOZ біля землі і YOZ у момент часу, коли тиск у контрольній точці С набув максимального значення, показано на рис. 7.25.

Нестаціонарне змінення тиску (типовий профіль ударної хвилі) у контрольній точці С зображено на рис. 7.26.

Форма кривої відповідає класичному зменшенню тиску під час проходження ударної хвилі, яка виникає внаслідок вибуху газової суміші. Слід зазначити, що більш віддалене від забудови розташування епіцентру вибуху приводить до істотного зниження тиску (приблизно в 5 разів) на стіни будівель (див. рис. 7.24, 7.26).

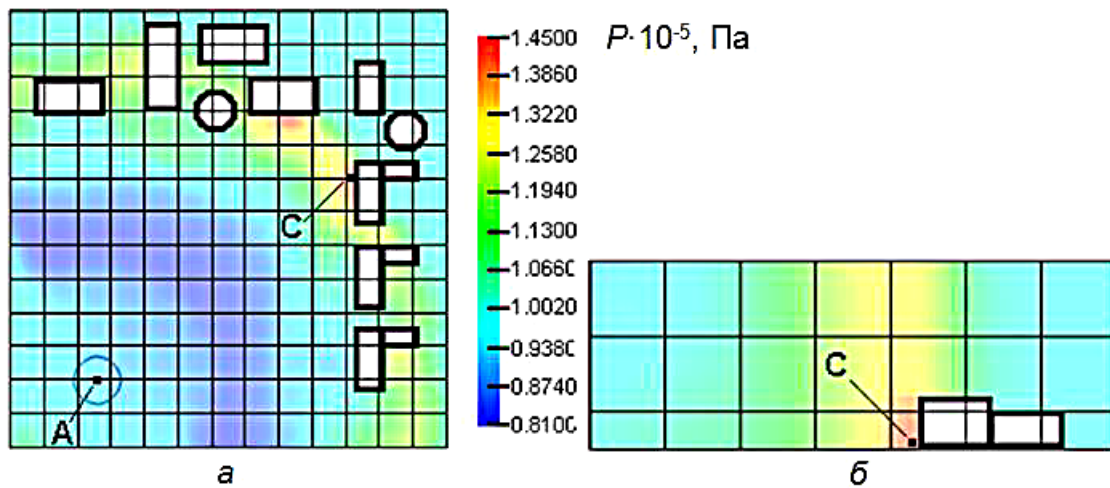


Рис. 7.25. Розподіл тиску в площинах (V2): а – XOZ біля землі; б – YOZ

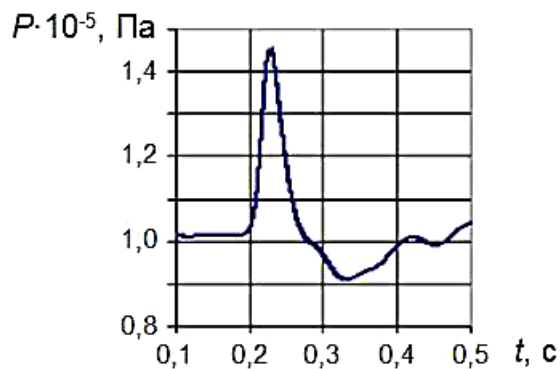


Рис. 7.26. Динаміка тиску в точці С (V2)

Розглядався аналогічний до варіанта V2 випадок (V3) віддаленого розташування заправної водневої станції від навколишньої забудови (позиція А на рис. 7.21). Але цього разу для захисту промислових будівель від руйнівного впливу вибухової ударної хвилі застосовувалося обвалування епіцентру вибуху заввишки 7 м (рис. 7.27, 7.28, а). Аналіз розподілу об'ємної концентрації водню в суміші з повітрям свідчить про те, що розміри й форма зони детонаційного горіння змінилися внаслідок складного рельєфу обвалування (рис. 7.27).

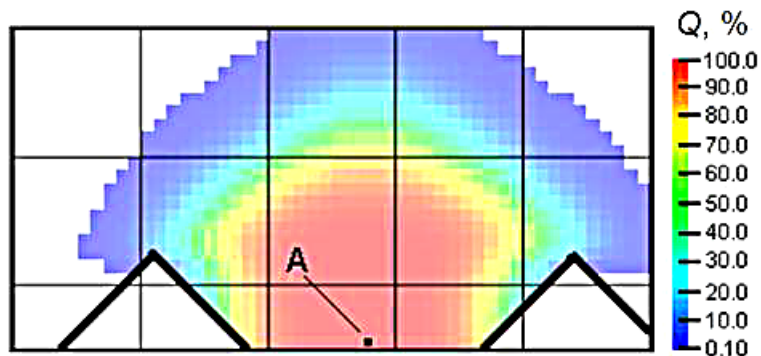


Рис. 7.27. Концентрація водню (V3) в епіцентрі вибуху в площині YOZ

Поле тиску в площинах XOZ біля землі і YOZ у момент часу, коли тиск у контрольній точці С набув максимального значення, показано на рис. 7.28. Розподіл тиску в розрахунковій області змінився несуттєво порівняно з результатами розрахунків, описаних для варіанта V2 (випадку віддаленого вибуху без обвалування).

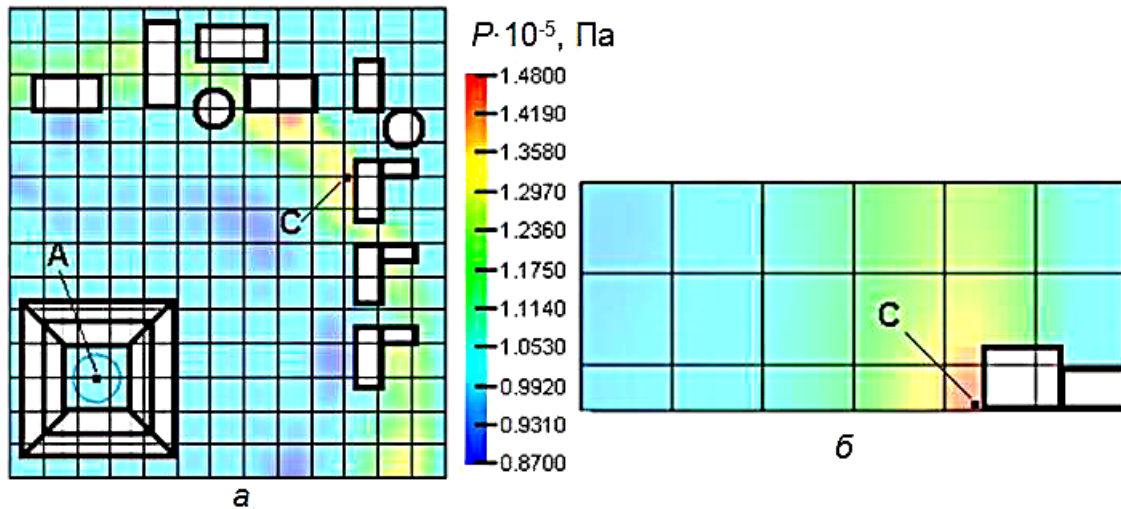


Рис. 7.28. Розподіл тиску в площинах (V3): а – XOZ біля землі; б – YOZ

Розглядався аналогічний до варіанта V3 випадок (V4) віддаленого розташування станції від забудови (позиція А на рис. 7.21). Але для захисту будівель від руйнівного впливу ударної хвилі внаслідок вибуху хмари застосовувалося часткове північно-східне обвалування епіцентру вибуху заввишки 7 м (рис. 7.29, 7.30, а). Аналіз розподілу об'ємної концентрації водню в суміші показав, що розміри й форма зони детонаційного горіння дещо змінилися відповідно до форми обвалування (див. рис. 7.29).

Розподіл тиску в площинах XOZ біля землі і YOZ у момент часу, коли тиск у контрольній точці С набув максимального значення, зображено на рис. 7.30. Аналіз даних показує, що часткове обвалування (порівняно з повним обвалуванням) практично не змінило характеру розподілу тиску на місцевості поблизу техногенної аварії.

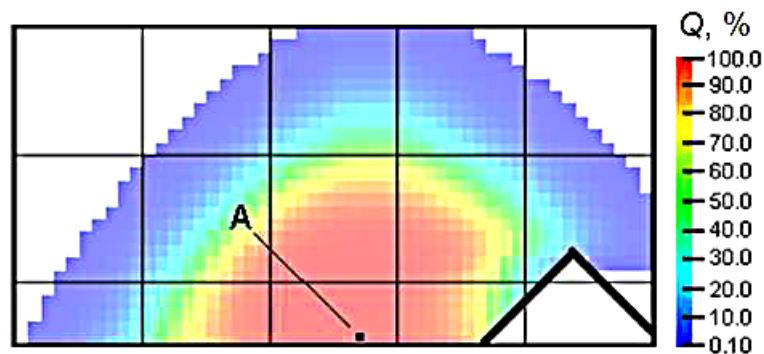


Рис. 7.29. Розподіл об'ємної концентрації водню (V4)

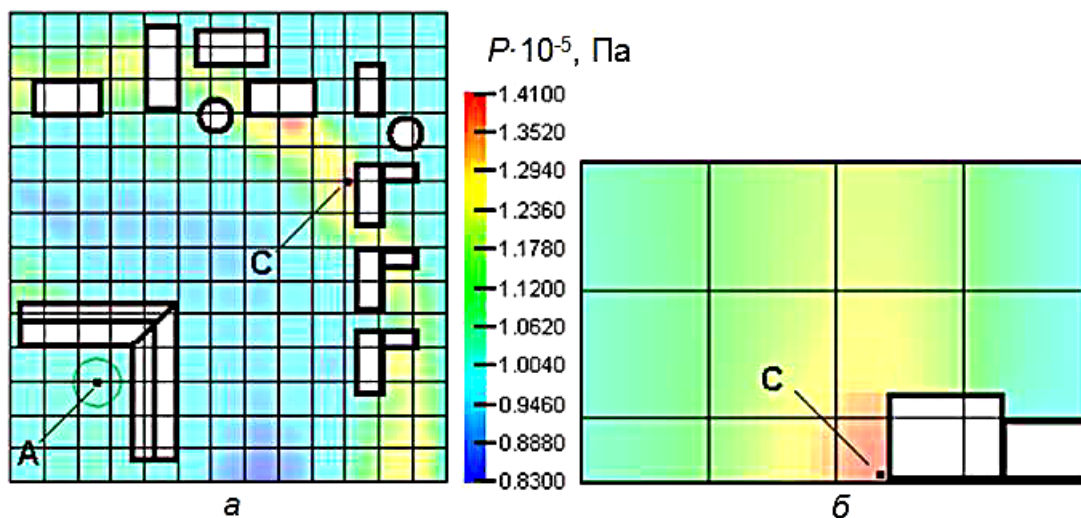


Рис. 7.30. Розподіл тиску в площинах (V4): а – XOZ біля землі; б – YOZ

Розглядався аналогічний до варіанта V4 випадок (V5) віддаленого розташування станції від забудови (позиція А на рис. 7.21). Для захисту будівлі від руйнівного впливу ударної хвилі внаслідок вибуху хмари застосовувалося часткове північно-східне обвалування епіцентру вибуху з більшою висотою – 13 м (рис. 7.31, 7.32, а), яке розташовувалося на 12 м далі від епіцентру вибуху, ніж у разі варіанта V4. Аналіз розподілу об'ємної концентрації водню в суміші з повітрям показав, що розміри й форма зони детонаційного горіння близькі до випадку без обвалування (див. рис. 7.31).

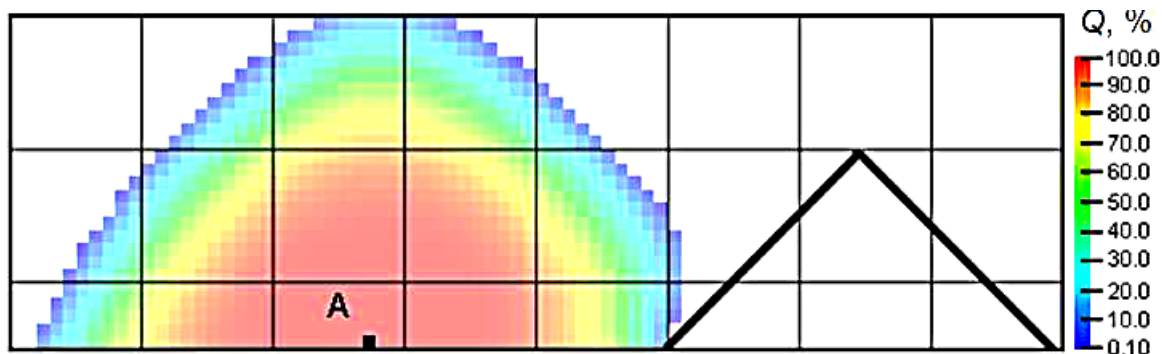


Рис. 7.31. Розподіл об'ємної концентрації водню (V5)

Розподіл тиску в площинах XOZ біля землі і YOZ у момент часу, коли тиск у контрольній точці С набув максимального значення, зображено на рис. 7.32. Аналіз даних свідчить про те, що збільшення висоти обвалування розглянутої форми забезпечує можливість незначно знизити ударно-імпульсне навантаження вибухової хвилі на стіни будівель (рис. 7.32, б).

Розглядався випадок (варіант V6) віддаленого розташування станції від забудови із захистом забудови від руйнівного впливу вибухової ударної хвилі у вигляді відбивної стіни заввишки 8 м і завтовшки 3 м у безпосередній близькості від будівель (рис. 7.33, а).

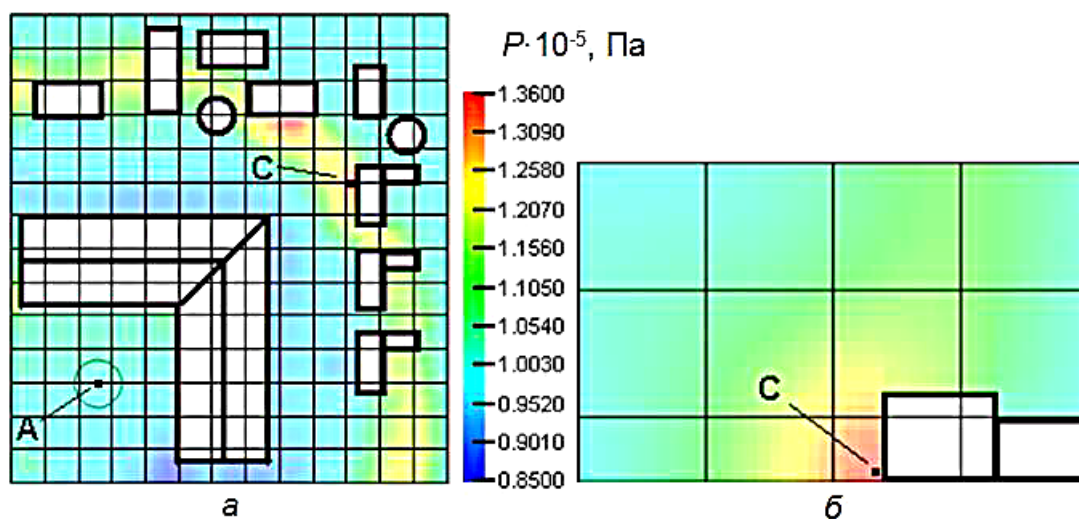


Рис. 7.32. Розподіл тиску в площинах (V5): а – XOZ біля землі; б – YOZ

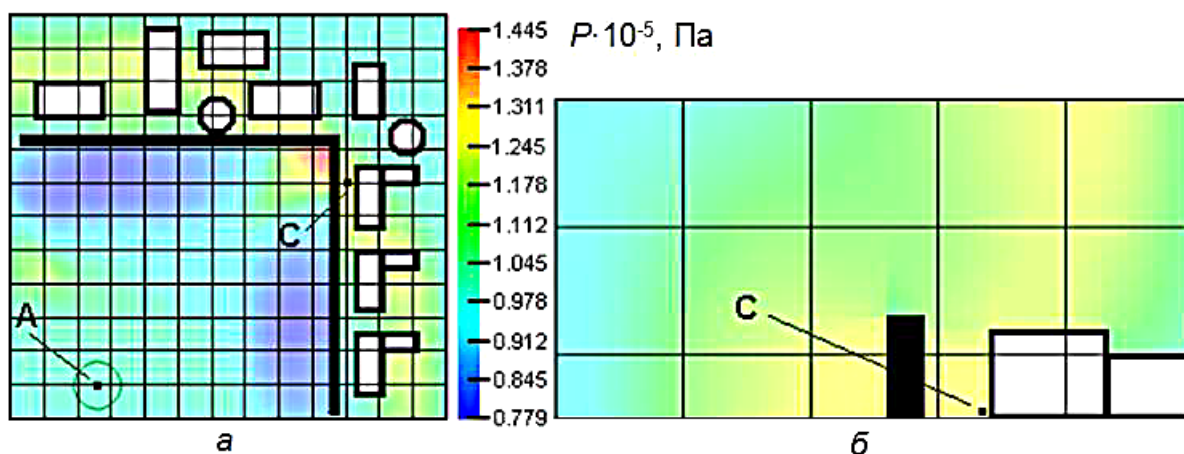


Рис. 7.33. Розподіл тиску в площинах (V6): а – XOZ біля землі; б – YOZ

Розподіл тиску в площинах XOZ біля землі і YOZ у момент часу, коли тиск у контрольній точці С набув максимального значення, показано на рис. 7.33. Аналіз даних показує, що встановлення відбивної стіни приводить до зниження тиску в контрольній точці приблизно на 10 % порівняно з випадком без захисту (див. рис. 7.26, 7.34).

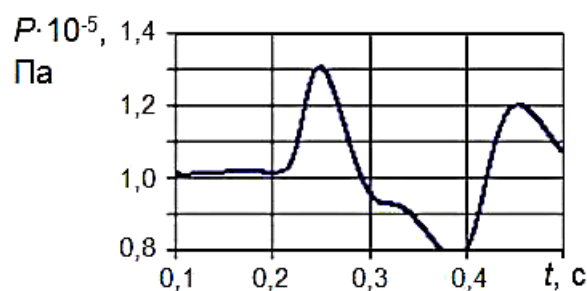


Рис. 7.34. Динаміка тиску в точці С (V6)

Слід зазначити, що всі розглянуті види захисних споруд не дають змоги знизити максимальний надлишковий тиск у контрольній точці на стіні будівлі до безпечного рівня.

Таким чином, виконано числове моделювання вибуху хмари газоподібного водню, що утворилася після руйнування балонів високого тиску на заправній станції. Проведено аналіз різних способів захисту будівель навколишньої забудови від руйнівного впливу ударної вибухової хвилі [49]. Показано, що розглянуті види захисних споруд (часткове або повне обвалування епіцентру вибуху, відбивна стіна біля будівель) впливають на розподіл тиску в розрахунковій області, але не дають змоги знизити тиск на стінах будівель до безпечного рівня. Як найбільш ефективні способи захисту будівель від впливу вибухової хвилі можна рекомендувати застосування відбивних стін у безпосередній близькості до будівель і віднесення вибухонебезпечних об'єктів далі від них. Під час вибору розмірів зон відчуження слід мати на увазі тривимірність ударної хвилі з урахуванням істотного збільшення амплітуди тиску поблизу будівель.

7.3. Детерміноване числове оцінювання ефективності захисних споруд для зниження надлишкового тиску під час вибуху водню

Розглядається типова станція для заправки воднем транспортних засобів [272] (рис. 7.35). Станція має криогенну посудину для зберігання рідкого водню ($5,7 \text{ м}^3$), циліндри високого тиску ($6500 \text{ psi} = 44,8 \text{ МПа}$) для зберігання стисненого газоподібного водню, призначеного для заправки. Об'єм кожного циліндра становить $0,51 \text{ м}^3$ [43].

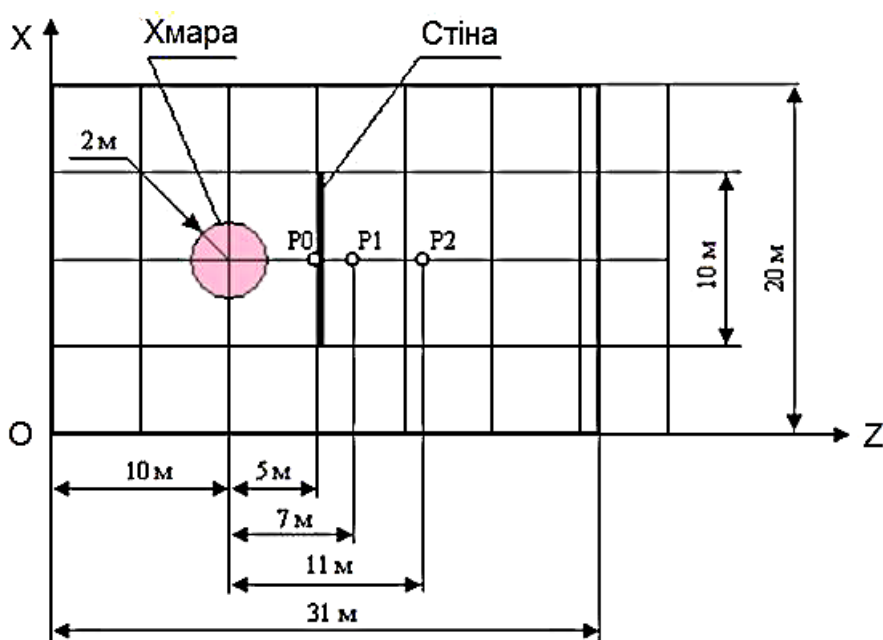


Рис. 7.35. Схема розташування хмари, захисної споруди і контрольних точок

Припустимо, що один з роздавальних циліндрів високого тиску миттєво руйнується, що призводить до викиду стисненого водню, розширення його до атмосферного тиску 101325 Па з підмішуванням чистого повітря до утворення півсферичної стехіометричної хмари радіусом 2 м біля землі з температурою навколишнього середовища 293 К (див. рис. 7.35). Розглянемо миттєвий вибух сформованої хмари водню з утворенням у контрольному об'ємі продуктів горіння з такими параметрами: температура 3450 К, тиск 901325 Па, молярна маса 0,02441 кг/моль і коефіцієнт адіабати 1,24 [13].

Передбачається, що деякі захисні засоби від дії баричного збурення повітря мають окремі елементи нижче поверхні землі, тому частину розрахункового простору буде займати шар землі (рис. 7.36) завтовшки 2 м.

Для аналізу ефективності захисних заходів надлишковий тиск контролювався (за аналогією з роботами [288–296]) у декількох критичних точках біля землі: P0 – у безпосередній близькості до захисної споруди, P1 і P2 – на деякому віддаленні від неї (див. рис. 7.35, 7.36). Крім того, аналізувався максимальний надлишковий тиск на поверхні захисної споруди з боку вибуху для оцінювання максимального навантаження.

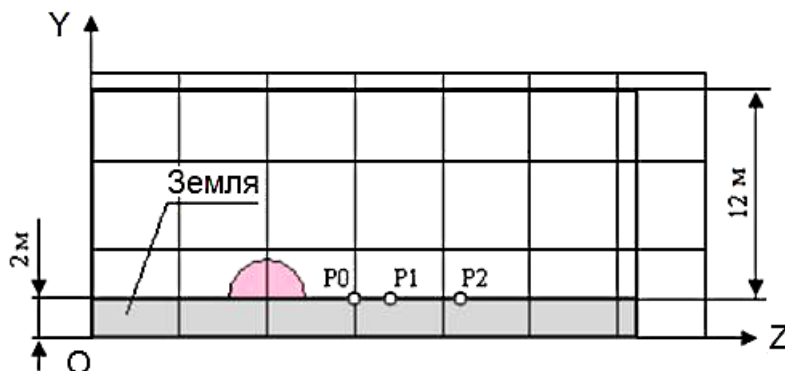


Рис. 7.36. Карта об'єктів у вертикальній площині в розрахунковій області

Розглядалися варіанти V0–V10 використання захисних засобів від дії вибухової ударної хвилі на персонал техногенного об'єкта.

Варіант відсутності захисних споруд (випадок V0) відповідає найбільш песимістичним сценаріям (див. рис. 7.35), коли контрольні точки є максимально відкритими для впливу ударної вибухової хвилі порівняно з будь-якими іншими варіантами захисту, що зображено на рис. 7.37–7.39.

Природно, що надлишковий тиск у випадку V0 є меншим, ніж в інших варіантах у контрольній точці P0, оскільки перешкоди немає, але більшим – у контрольних точках P1 і P2 через відсутність захисних засобів.

Установлення суцільної відбивної стіни (випадок V1) завширшки 10 м, завтовшки 0,2 м і заввишки 2 м (див. рис. 7.35, 7.36) приводить до істотної перебудови результативного потоку (рис. 7.40).

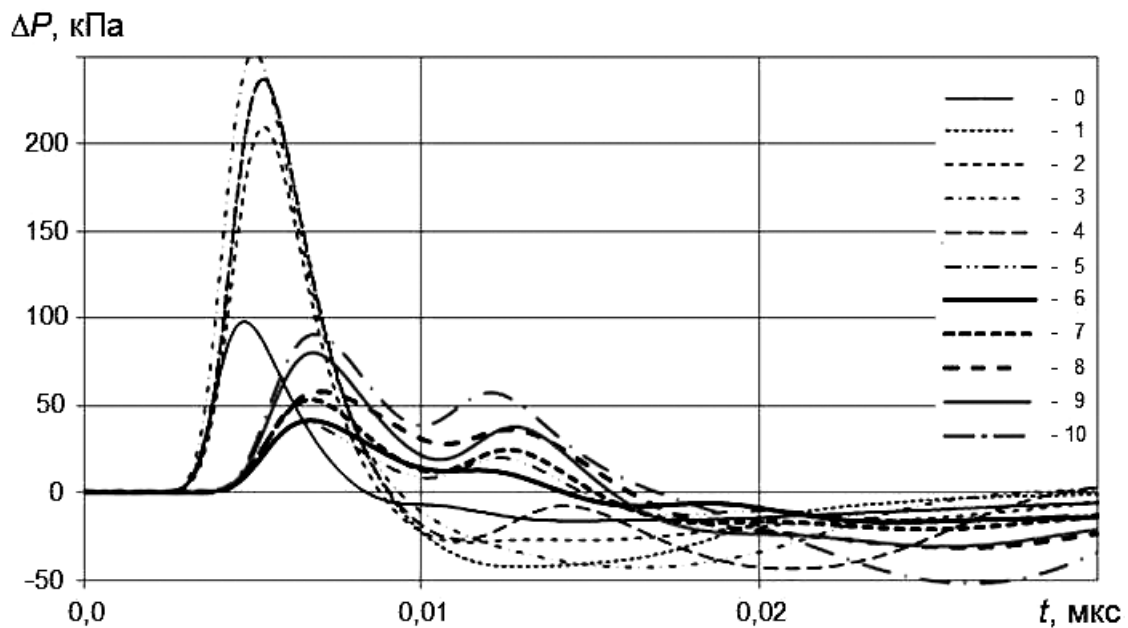


Рис. 7.37. Надлишковий тиск у контрольній точці P0 (1–10 – варіанти V1–V10)

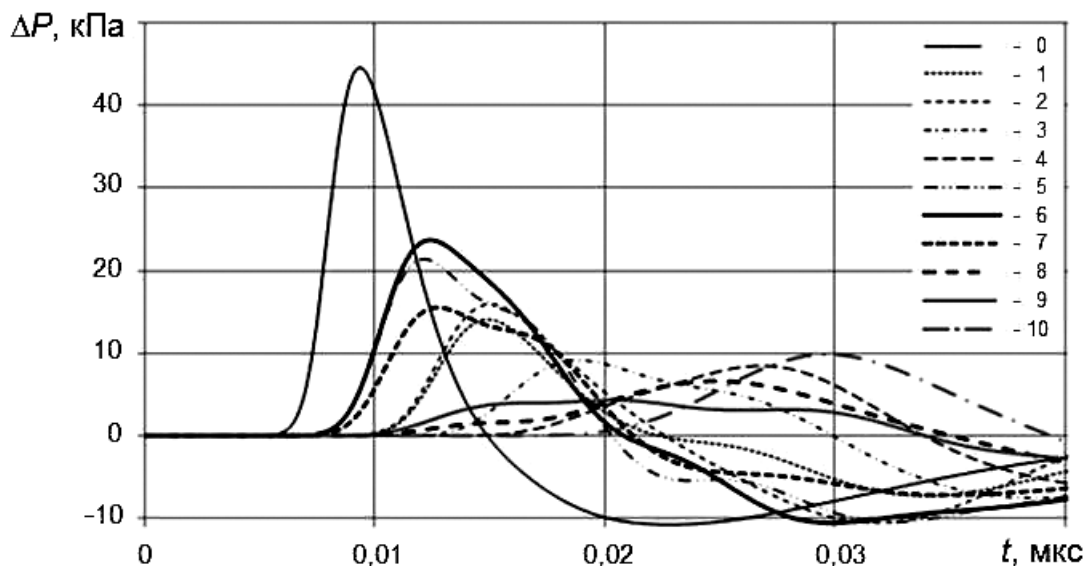


Рис. 7.38. Надлишковий тиск у контрольній точці P1 (1–10 – варіанти V1–V10)

Природно, що істотно збільшується надлишковий тиск перед стіною в точці P0, але при цьому спостерігається його зниження в точках P1 і P2 – місцях можливого розташування персоналу (див. рис. 7.37–7.39). Розподіл тиску на поверхні стіни свідчить про навантаження, які можуть спричинити утворення тріщин [289] і руйнування захисної стіни (рис. 7.41).

Для зниження навантаження на захисну споруду необхідно передбачити конструктивні змінення, деякі з яких розглядаються в цій роботі (випадки V2, V7– V9).

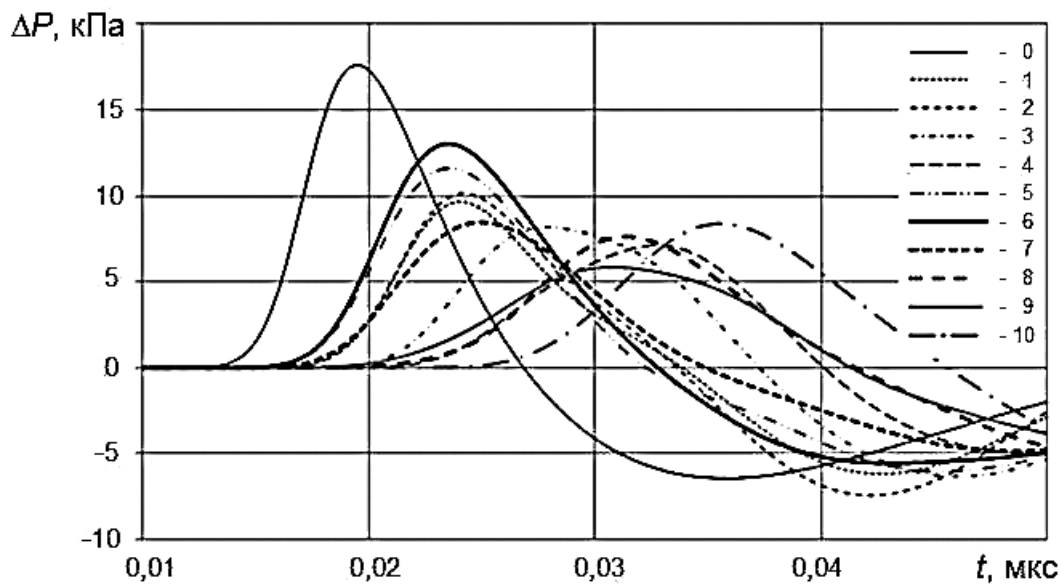


Рис. 7.39. Надлишковий тиск у контрольній точці P2 (1–10 – варіанти V1–V10)

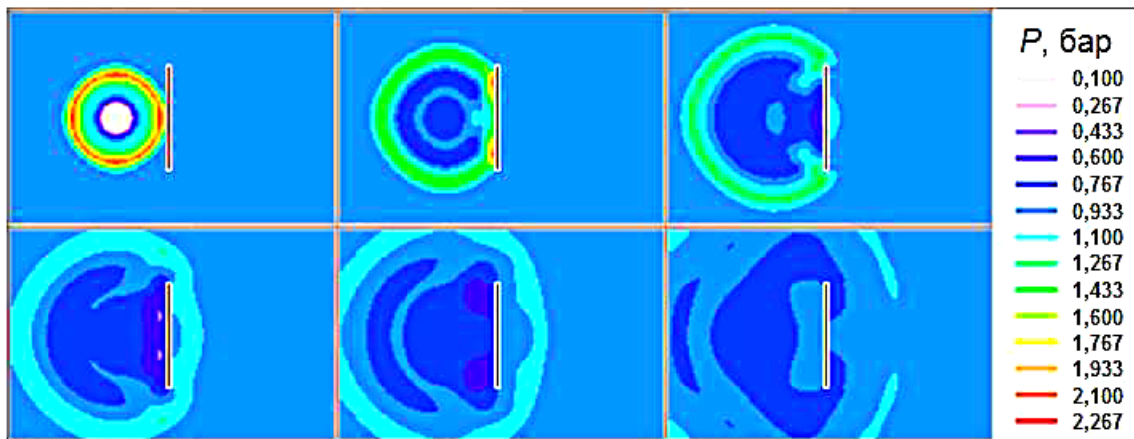


Рис. 7.40. Змінення тиску в розрахунковій області біля землі (випадок V1) у моменти часу: 0,004 мкс; 0,008 мкс; 0,012 мкс; 0,016 мкс; 0,020 мкс; 0,028 мкс

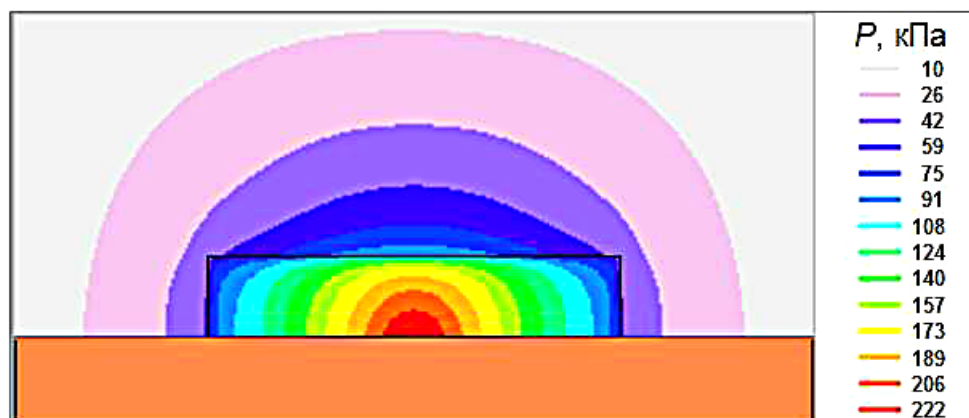


Рис. 7.41. Розподіл максимального надлишкового тиску в площині біля поверхні стіни (V1)

Одним із заходів (випадок V2), що забезпечують можливість зменшити максимальний надлишковий тиск на стіні, є застосування перепускного каналу завширшки 0,6 м на глибині 1,2 м під стіною. У цьому випадку спостерігається зменшення пікового навантаження на стіні (рис. 7.42) при незначному впливі на надлишковий тиск у контрольних точках P1 і P2 (див. рис. 7.38, 7.39).

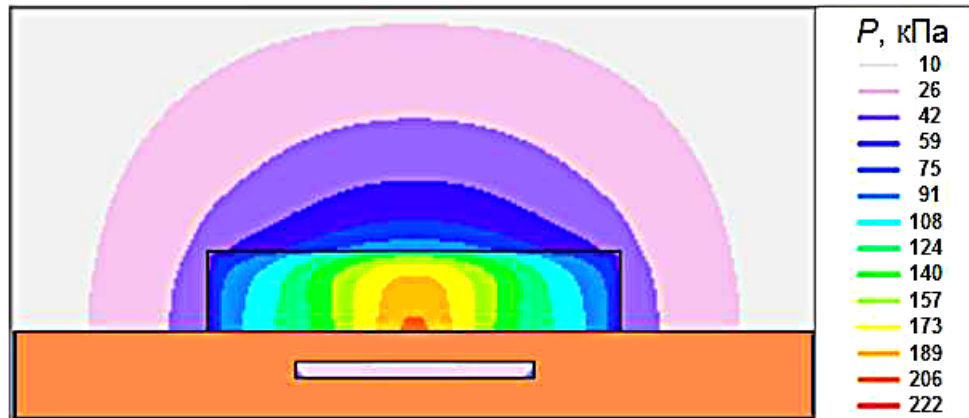


Рис. 7.42. Розподіл максимального надлишкового тиску в площині біля поверхні стіни з перепуском (V2)

Перепускний канал сполучає простір із підвищеним тиском перед стіною з простором за стіною, газ перетікає під стіною і якоюсь мірою знижує пікове навантаження на стіну.

Одним з визначальних факторів, що впливають на розподіл тиску в контрольних точках P1 і P2, є висота стіни. Природно, що збільшення висоти стіни (випадок V3) до 3 м приводить до зниження пікових надлишкових тисків за стіною на відміну від випадку V1 (див. рис. 7.38, 7.39), тому цю висоту було вибрано для інших захисних засобів (випадки V7–V10).

Ефективність захисного засобу V3 можна підвищити, виконавши зверху T-подібний козирок (випадок V4), який виступає на 1 м по обидва боки від стіни (рис. 7.43).

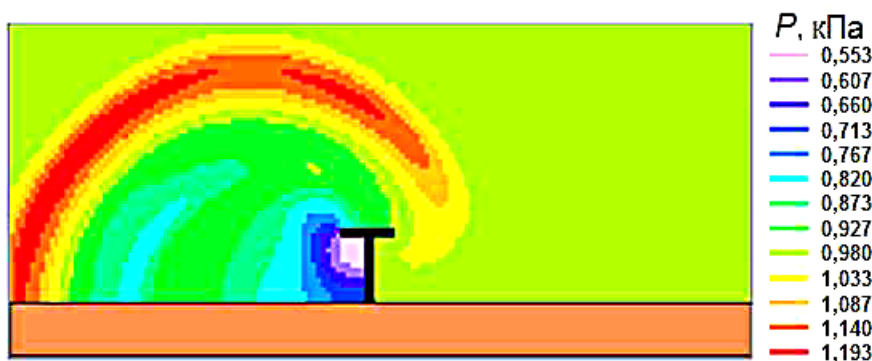


Рис. 7.43. Розподіл тиску в момент часу 0,0168 мкс після вибуху (V4)

За експериментальними даними роботи [291] це приводить до дворазового розширення потоку на кромках козирка, що позитивно позначається на показниках надлишкового тиску в контрольних точках Р1 і Р2 (див. рис. 7.38, 7.39).

Ще одним пом'якшувальним захисним заходом щодо зниження тиску в контрольних точках є заглиблення підпростору з хмарою водню відносно поверхні землі (випадок V5). Розташуємо хмару в ямі квадратної форми 3x3 м завглибшки 2 м (рис. 7.44).



Рис. 7.44. Розподіл тиску в момент часу 0,0157 мкс після вибуху (V5)

Під час вибуху кромки ями відіграють роль козирка на стінці, та й саме заглиблення виконує кумулятивну функцію, розвантажуючи надлишковий тиск у вертикальному напрямку, що позитивно позначається на поведженні тиску в контрольних точках (див. рис. 7.38, 7.39).

Вибух у заглибленні (випадок V5) спричиняє збільшення надлишкового тиску на стінках ями, особливо в кутах внизу. Знизити пікові навантаження в цих областях можна за допомогою розвантажувальних порожнин уздовж периметра ями (рис. 7.45) – випадок V6.

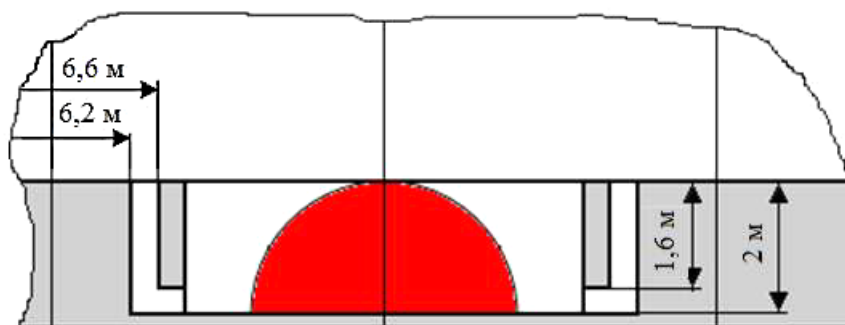


Рис. 7.45. Характерні розміри розвантажувальних порожнин (V6)

Така конструкція заглиблення приводить до деякої перебудови потоку повітря під час вибуху (рис. 7.46), хоча не суттєво впливає на надлишок тиску (див. рис. 7.38, 7.39).



Рис. 7.46. Розподіл тиску в момент часу 0,0158 мкс після вибуху (V6)

Заслугує на увагу застосування не тільки окремих заходів, а і їх комбінація (випадок V7). Доповнимо заглиблення області вибуху (випадок V5) набором з чотирьох рядів стовпчиків квадратного перерізу (0,2 x 0,2 м) заввишки 3 м. Ряди стовпчиків шаблона 1 на відстані 0,2 м один від одного (рис. 7.47) розташовуються за контрольною точкою P0 (замість суцільної стіни).

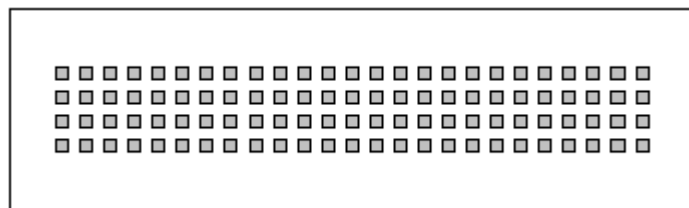


Рис. 7.47. Шаблон 1 розташування стовпчиків (V7)

Така конструкція приводить до часткової втрати інтенсивності ударної хвилі внаслідок багаторазового відбиття від стовпчиків (рис. 7.48) і забезпечує можливість знизити навантаження на захисну перешкоду.

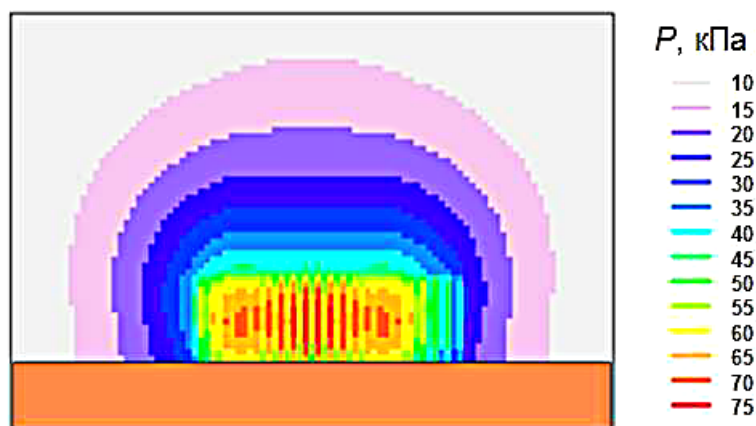


Рис. 7.48. Розподіл максимального тиску на поверхні перешкоди (V7)

Конструкцію захисного засобу для випадку V7 змінимо, розташували стовпчики за шаблоном 2 (рис. 7.49) – випадок V8.

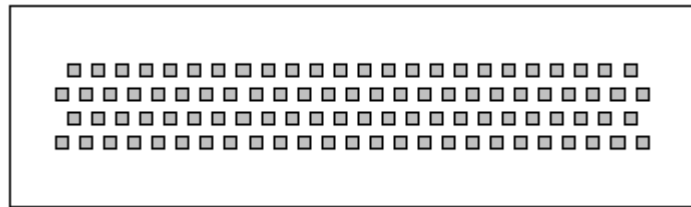


Рис. 7.49. Шаблон 2 розташування стовпчиків (V8)

Тепер конструкція приводить до більшого розсіювання ударної хвилі під час проходження між стовпчиками й забезпечує можливість знизити навантаження на захисну конструкцію (рис. 7.50).



Рис. 7.50. Розподіл тиску в момент часу 0,0158 мкс після вибуху (V8)

Суцільна стіна випадку V3 дає хороший захист, але приводить до надмірного навантаження на поверхню перешкоди. Несуцільна конструкція знижує ступінь навантаження. Виконаємо перешкоду з двох бетонних стін (як у випадку V3) на відстані 0,4 м одна від одної, перфорованих рядами отворів квадратного перерізу 0,2 x 0,2 м (випадок V9), причому отворам на одній стіні відповідають суцільні ділянки іншої стіни (рис. 7.51). Тепер конструкція дає комбінований ефект: частково розвантажує перешкоду внаслідок розсіювання ударної хвилі під час її проходження крізь отвори на стінах і дає змогу ефективно припинити рух ударної хвилі до контрольних точок за перешкодою (див. рис. 7.37–7.39).

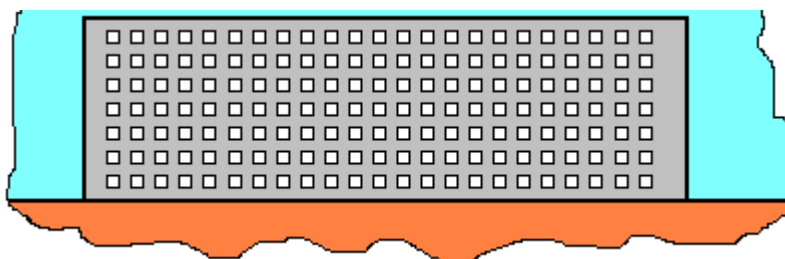


Рис. 7.51. Шаблон перфорації стіни (випадок V9)

T-подібна суцільна стіна (випадок 4) і заглиблення зони вибуху (випадок 5) найкраще захищають від впливу надлишкового тиску при

проходженні вибухової ударної хвилі крізь контрольні точки P1 і P2, тому використання комбінації цих споруд (випадок V10) теж має давати ефективний захист. Наявність обох ефектів радикально впливає на ударну хвилю й приводить до перебудови потоку повітря (рис. 7.52).



Рис. 7.52. Розподіл тиску в момент часу 0,023 мкс після вибуху (V10)

7.4. Аналіз впливу розташування захисної стіни відносно епіцентру вибуху

Розглядається випадок аварійного швидкоплинного руйнування декількох дозувальних водневих балонів високого тиску на станції заправлення транспортних засобів [50, 272]. Припустимо, що це призводить до викиду стисненого водню в атмосферу біля землі, його розширення до атмосферного тиску й утворення півсферичної стехіометричної воднево-повітряної хмари радіусом 1,5 м при температурі навколишнього середовища 293 К. Розглянемо миттєвий вибух цієї водневої хмари, який спричиняє утворення продуктів горіння з такими параметрами: температура 3450 К, тиск 901 кПа, молярна маса 0,02441 кг/моль, коефіцієнт адіабати 1,24 [66].

Обчислювальний простір був (рис. 7.53) завдовжки $L_z = 31$ м, завширшки $L_x = 20$ м і заввишки $L_y = 14$ м. Усі сторони обчислювальних комірок мали однаковий розмір 0,2 м, отже, обчислювальна сітка мала $155 \times 100 \times 70$ комірок відповідно. Крок часу обчислювався таким чином, щоб зберігалася стійкість явного методу Годунова [262].

Захисна стіна мала такі розміри: ширина $X_w = 10,0$ м, товщина $Z_w = 0,2$ м, висота $Y_w = 2,2$ м (див. рис. 7.53).

Для кожного варіанта експериментів стіна встановлювалася на деякій відстані Z_w від епіцентру вибуху (табл. 7.4).

Для аналізу ефективності захисної споруди надлишковий тиск контролювався в декількох точках P_i (P_0 – P_4) біля землі на відстані Z_p від епіцентру вибуху (4, 5, 6, 7 і 8 м відповідно), за винятком точки P_0 , одна з решти контрольних точок у кожному варіанті розташовувалася перед стіною (з боку вибуху) для оцінювання навантаження на поверхню стіни під

дією надлишкового тиску. Наприклад, для варіанта V2 розташування стіни (див. табл. 7.4) контрольні точки P0, P1 і P2 знаходяться між епіцентром вибуху і стіною, точка P2 – біля стіни, а контрольні точки P3 і P4 – за стіною й захищені від основного впливу надлишкового тиску.

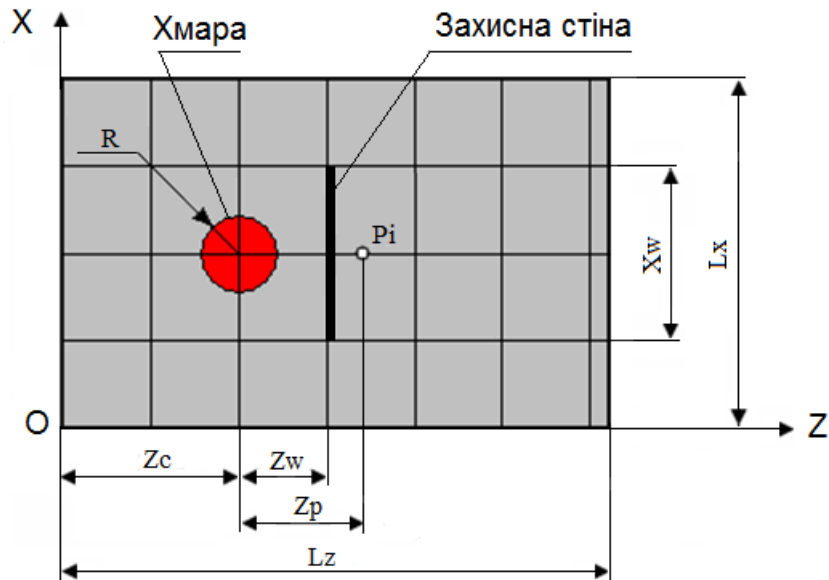


Рис. 7.53. Схема розташування водневої хмари, захисної стіни й контрольних точок Pi поблизу землі

Таблиця 7.4

Варіанти розташування захисної стіни

Відстань від епіцентру вибуху, м	Варіант				
	V0	V1	V2	V3	V4
Zw	–	5,0	6,0	7,0	8,0

Відмінність між варіантами експерименту полягає в різній відстані Zw між стіною й епіцентром вибуху. Варіант V0 узагалі не містить захисної споруди.

Під час усіх експериментів збиралася історія надлишкового тиску в усіх контрольних точках (рис. 7.54) і розподіл тиску в усіх площинах може бути отриманий для аналізу впливу стіни на трансформацію поля тиску (рис. 7.55).

Модель забезпечує можливість знайти просторовий розподіл тиску (див. рис. 7.55).

Динаміка змінення надлишкового тиску в кожній контрольній точці дає інформацію для визначення максимального надлишкового тиску ΔP_+ та імпульсу I_+ (рис. 7.56) для кожного сценарію розташування стіни з метою аналізу ймовірного ураження персоналу (рис. 7.57) і розподілу максимального надлишкового тиску на поверхні стіни під впливом

вибухової хвилі (рис. 7.58). Це дає змогу оцінити навантаження на стіну від надлишкового тиску й вибрати відповідну міцність матеріалу, з якого треба виготовити стіну [35].

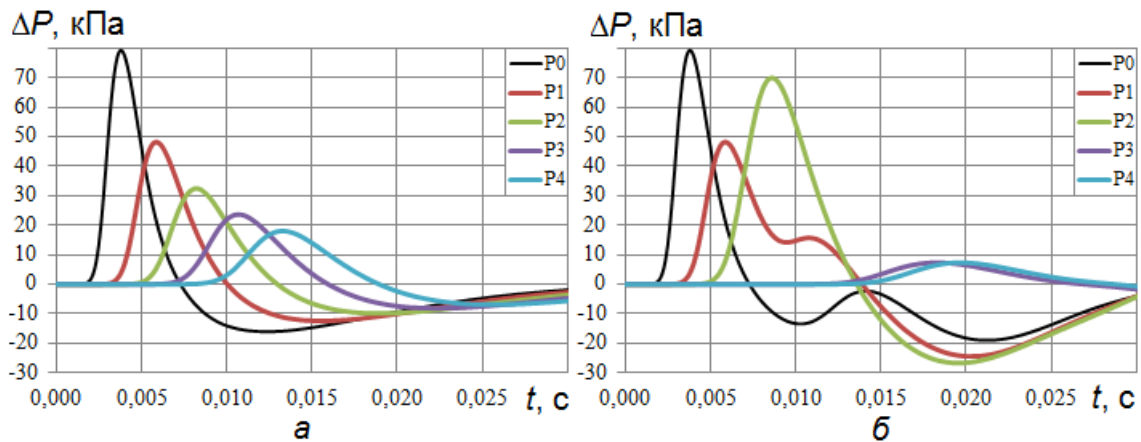


Рис. 7.54. Історія надлишкового тиску в контрольних точках P0–P4: а – без захисту (варіант V0); б – із захистом (варіант V2 розташування стіни)

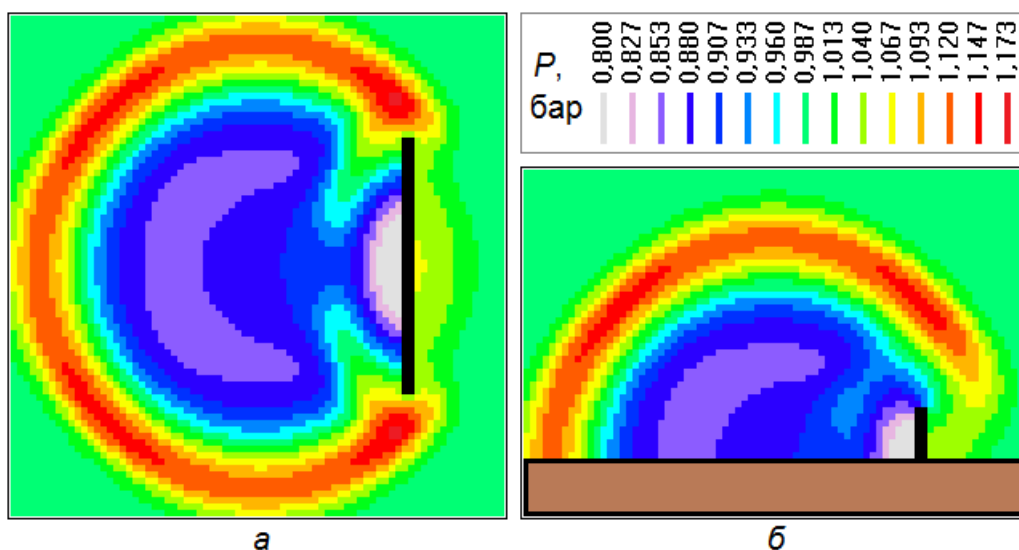


Рис. 7.55. Розподіл тиску в момент часу 0,0107 с після вибуху для варіанта захисту V2: а – площина XOZ (біля землі); б – площина YOZ

У сценарії V0 (стіни немає) хвиля тиску поширюється вздовж обчислювальної області (рис. 7.54, а), плавно втрачаючи інтенсивність ударного (рис. 7.56, а) та імпульсного (рис. 7.56, б) навантаження разом із відстанню від епіцентру вибуху. Ця хвиля тиску не створює летальної небезпеки (рис. 7.57, а) і веде до більш імовірного розриву барабанних перетинок у людини в точках P0 і P1 (рис. 7.57, б).

Установлення захисної стіни різко змінює стан безпеки (див. рис. 7.57). Хвиля тиску здебільшого відбивається від стіни, посилюючи фазу тиску перед стіною (рис. 7.54, б) і зменшуючи її за стіною (див. рис. 7.55).

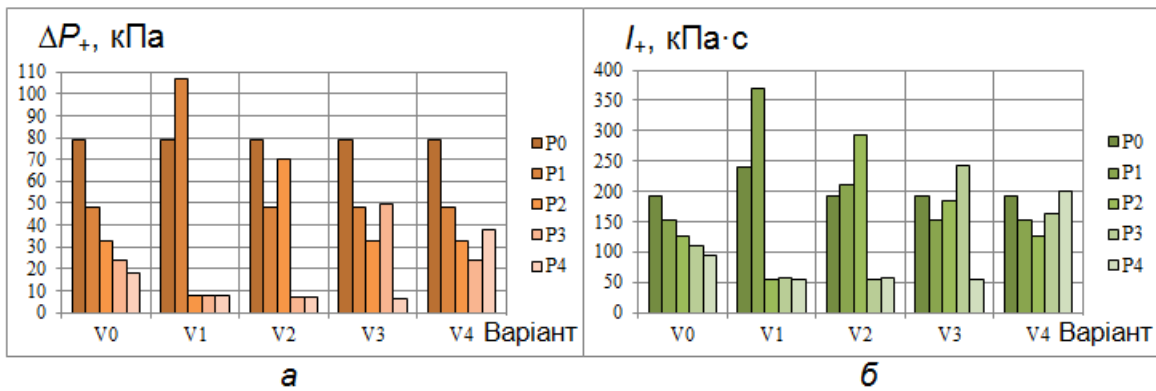


Рис. 7.56. Ударно-імпульсне навантаження в точках P0–P5 для варіантів стіни V0–V5: а – максимальний надлишковий тиск; б – імпульс

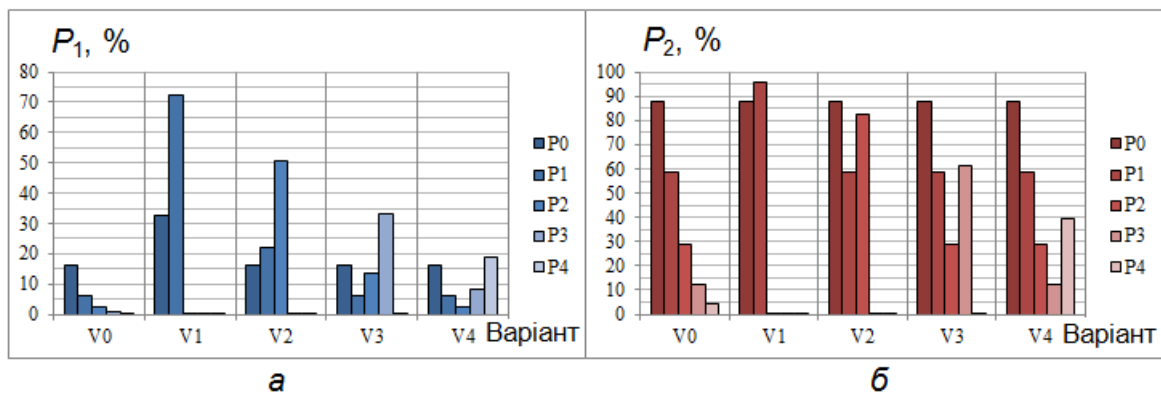


Рис. 7.57. Умовна ймовірність ураження в точках P0–P4 для варіантів розташування стіни V0–V4: а – летальна травма; б – розрив барабанної перетинки

Відбита хвиля тиску може спричинити високий летальний ризик у варіантах V1 і V2 (рис. 7.57, а) і ризик розриву барабанних перетинок у всіх варіантах, крім V4 (рис. 7.57, б). Ситуацію за стіною можна вважати повністю безпечною (див. рис. 7.57). З іншого боку, поверхня стіни піддається значному навантаженню надлишковим тиском, що може спричинити руйнування захисної споруди (див. рис. 7.58). Використовуючи порогові значення надлишкового тиску руйнування для різних стінових матеріалів (табл. 7.5), можна вирішити, що для всіх сценаріїв усі матеріали, крім антисейсмічного бетону, не можуть бути використані для виготовлення захисної стіни через загальний ризик її руйнування (див. рис. 7.58).

Таблиця 7.5

Ступінь руйнування стіни залежно від діапазону надлишкового тиску

Номер типу	Стіновий матеріал	Ступінь руйнування залежно від надлишкового тиску, кПа			
		слабкий	середній	сильний	повний
1	Антисейсмічний бетон	25...35	80...120	150...200	200
2	Секційний залізобетон	10...20	20...30	–	30...60
3	Цегла	8...15	15...25	25...35	35...45
4	Деревина	6...8	8...12	12...20	20...30

7.5. Імовірнісний аналіз впливу вибухової ударної хвилі на навколишнє середовище

Розроблена методологія оцінювання безпекового стану техногенного об'єкта в зоні вибуху газоповітряної суміші є корисним інструментом порівняння різних варіантів розміщення захисних споруд, рельєфу місцевості, де розташовується персонал і має місце епіцентр вибуху.

7.5.1. Числове дослідження впливу рельєфу місцевості на наслідки впливу вибухової хвилі

Розглядався миттєвий вибух [65] воднево-повітряної суміші з утворенням півсферичної хмари продуктів горіння радіусом 2,88 м із тиском 9 бар і 3400 К. На відстані 7 м від епіцентру вибуху розташовувалася контрольна точка заміру навантаження людини дією ударної хвилі. Розглядалися варіанти V1–V5 взаємного розміщення рівнів горизонталі ландшафту, де знаходиться людина (+4, +2, 0, -2, -4 м), і горизонталі епіцентру аварійного вибуху.

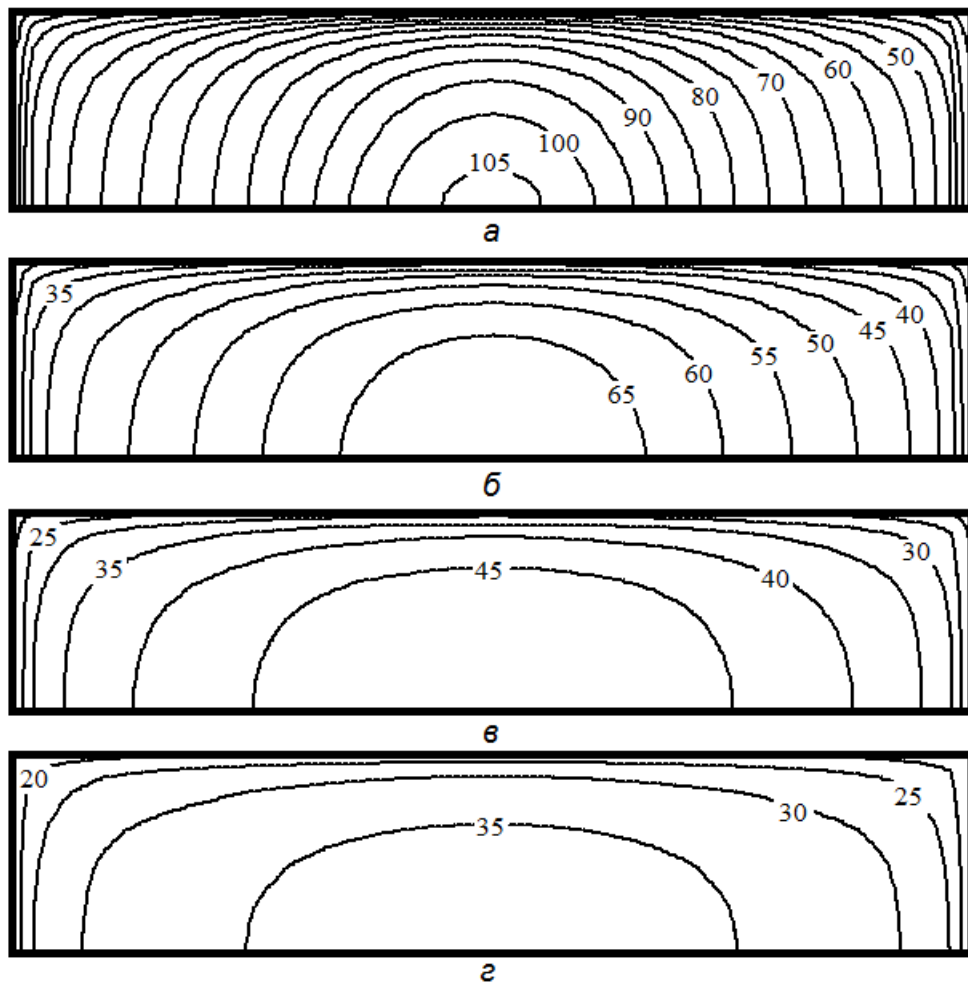


Рис. 7.58. Поля максимального надлишкового тиску (кПа) на поверхні стіни: а–г – для варіантів V1–V4 розташування стіни відповідно

На рис. 7.59, а–в показано інформацію, яка є необхідною для ймовірнісного оцінювання впливу варіанта ландшафту місцевості на ступінь наслідків від вибуху. Варіант V3 однорівневого розташування є найбільш небезпечним для людини, оскільки місцевість є максимально відкритою для впливу вибухової хвилі. Первинна фаза стиснення хвилі тиску у фронті (див. рис. 7.59, а) є джерелом складових апарату пробіт-аналізу ймовірних наслідків вибуху. Максимальне заглиблення робочого місця є найбільш прийнятним засобом з огляду на захищеність обслугового персоналу від негативного впливу вибухової хвилі в контрольній точці (див. рис. 7.59, в).

Таким чином, можна зробити висновок, що будь-яке змінення рівнів горизонту контрольних точок та епіцентру вибуху (заглиблення або підйом) приводить до зниження ймовірності негативних наслідків впливу вибухової хвилі на організм людини – як летального ураження, так і розриву барабанних перетинок. Ударна хвиля втрачає свою інтенсивність зі збільшенням довжини шляху від епіцентру вибуху, а варіанти ландшафту з різними рівнями (V1, V2, V4, V5) мають довший шлях порівняно з варіантом V3 (однорівневе розташування).

Крім того, вибухова хвиля втрачає інтенсивність під час проходження кута між різними рівнями ландшафту місцевості, де має місце додаткове розширення.

7.5.2. Числове оцінювання габаритів захисної споруди під час вибуху

Розглядалася проблема визначення габаритів (висоти й ширини) захисної стіни [63], яку встановлюють між епіцентром вибуху й місцем можливого розташування людини в контрольній точці з метою зниження ймовірності ураження людини до заданого значення (наприклад, 30 %) на типовій станції для заправлення воднем транспортних засобів [272]. На станції є криогенна посудина для зберігання рідкого водню ($5,7 \text{ м}^3$), яка живить циліндри високого тиску (44,8 МПа) для зберігання стисненого газоподібного водню, призначеного для заправлення. Об'єм циліндра становить $0,51 \text{ м}^3$. Припустимо, що три циліндри високого тиску миттєво руйнуються, що призводить до викиду стисненого водню, розширення його до атмосферного тиску 101325 Па з підмішуванням чистого повітря до утворення півсферичної стехіометричної хмари радіусом $2,88 \text{ м}$ біля землі з температурою навколишнього середовища 293 К (див. рис. 7.53). Використовувалася модель миттєвого вибуху з урахуванням хімічної взаємодії. Розглянемо миттєвий вибух хмари водню з утворенням у контрольному об'ємі продуктів горіння з такими параметрами: температура 3450 К , тиск 901325 Па , молекулярна маса $0,02441 \text{ кг/моль}$, коефіцієнт адіабати $1,24$.

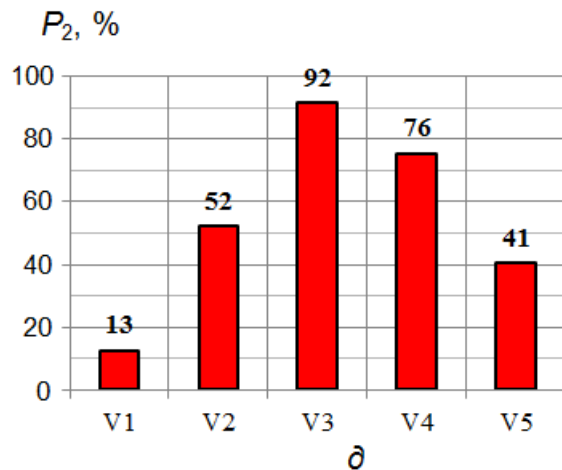
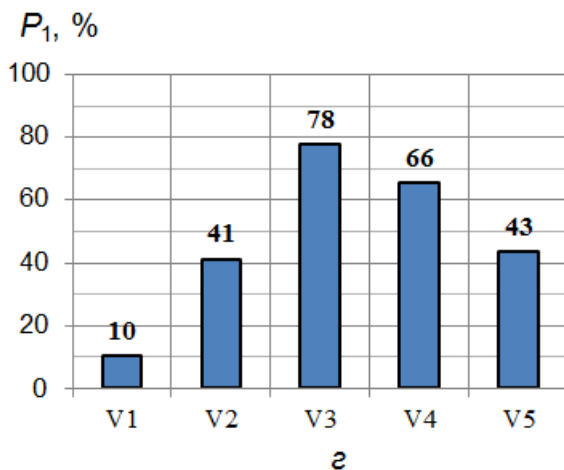
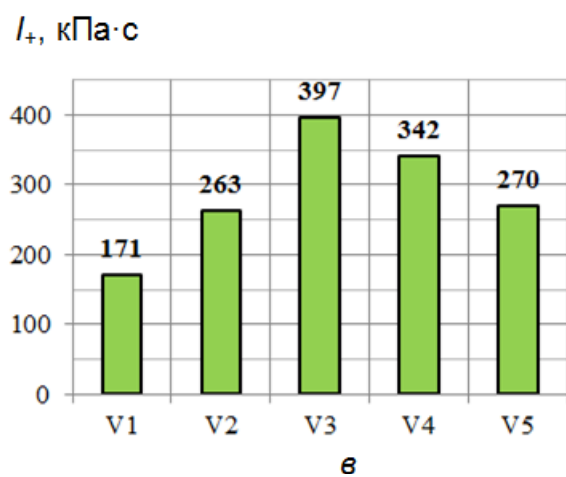
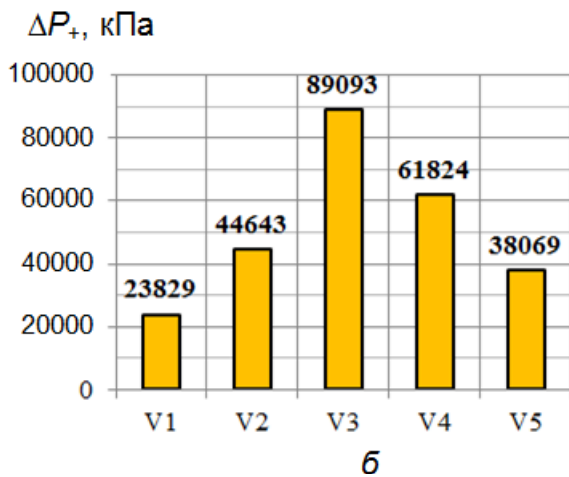
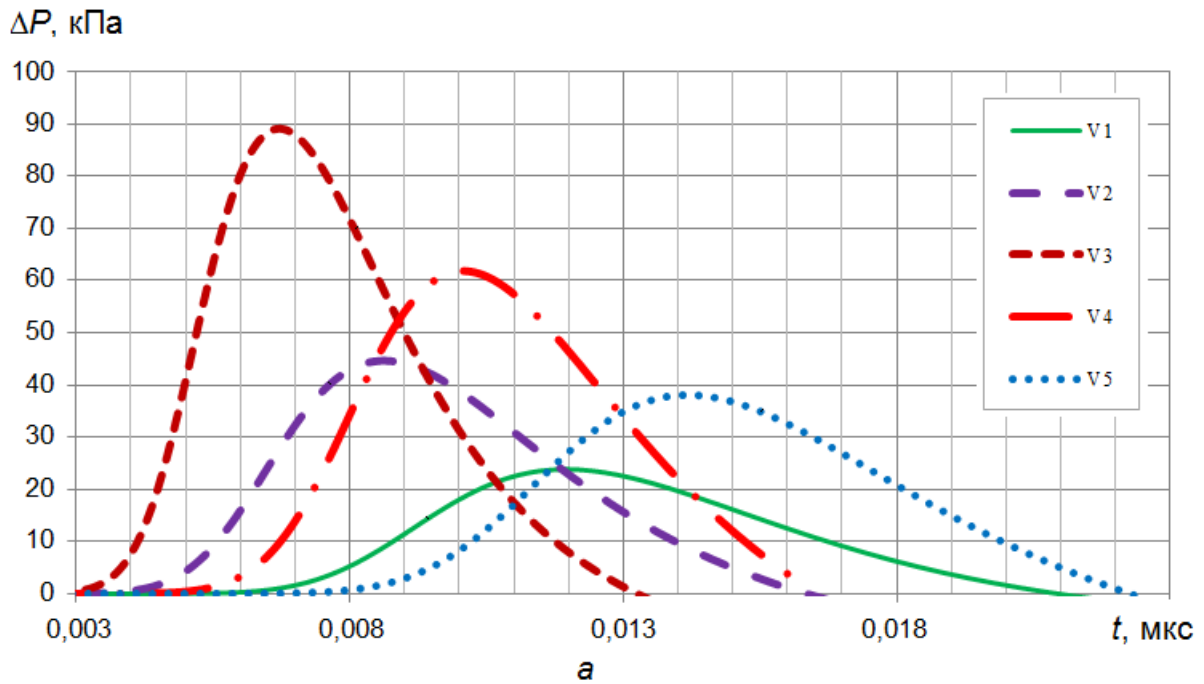


Рис. 7.59. Вплив рельєфу на наслідки вибуху в контрольній точці для варіантів V1–V5 ландшафту: а – динаміка надлишкового тиску; б – ударне навантаження; в – імпульсне навантаження; г – імовірність летального наслідку; д – імовірність розриву барабанних перетинок

7.5.2.1. Розроблення карти об'єктів промислового майданчика

Обчислювальний простір має такі розміри: довжина 31 м, ширина 20 м, висота 14 м (включаючи землю завглибшки 2 м). Усі сторони обчислювальних комірок мають однаковий розмір – 0,2 м, тому обчислювальна сітка має 155 x 100 x 70 комірок відповідно. Часовий крок розраховується таким, щоб зберігалася стійкість методу Годунова.

Було проведено серію з трьох експериментів з метою визначення оптимального співвідношення габаритів для отримання заданого замовником відсотка максимального ураження людини, яка знаходиться за захисною спорудою. Математичне моделювання процесу вибуху дає можливість отримати просторові розподіли тиску в будь-який момент часу для подальшого аналізу наслідків впливу вибухової хвилі на людину. Кожного разу контролювалося змінення надлишкового тиску залежно від часу і похідних параметрів безпеки людини в контрольній точці.

7.5.2.2. Визначення впливу ширини стіни на стан безпеки

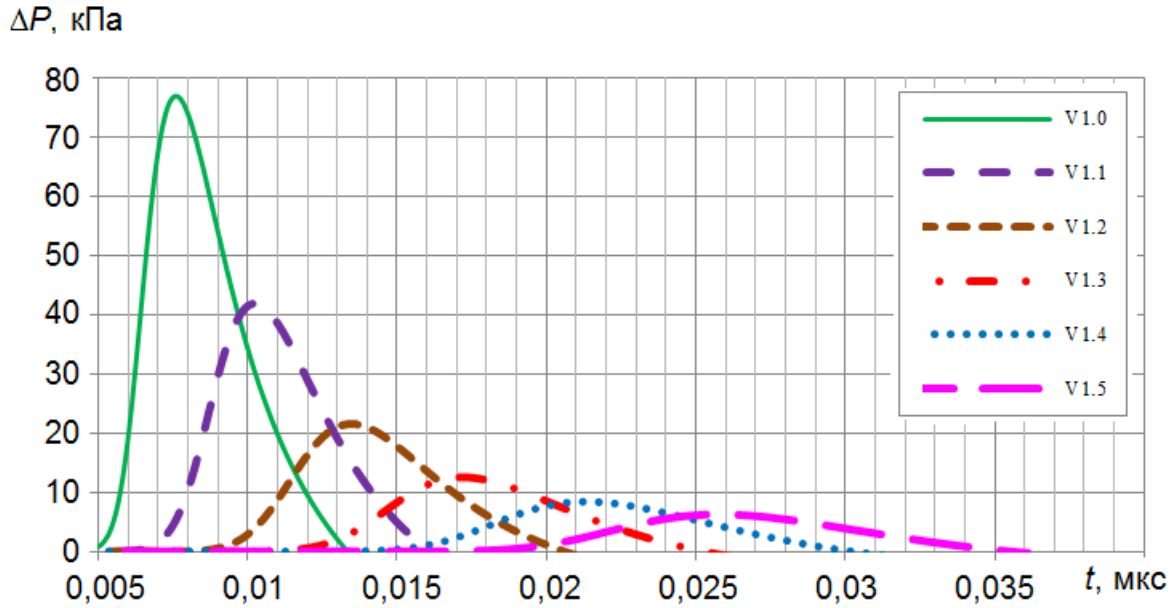
У першій серії розрахунків (варіант V1.x) розглядалася захисна стіна з «нескінченною» висотою й регульованою шириною W_x , щоб визначити вплив цієї ширини на ймовірність ураження в місці розташування обслуговуваного персоналу (без впливу висоти) (рис. 7.60).

Для кожного значення ширини стіни (варіант V1.x) було отримано:

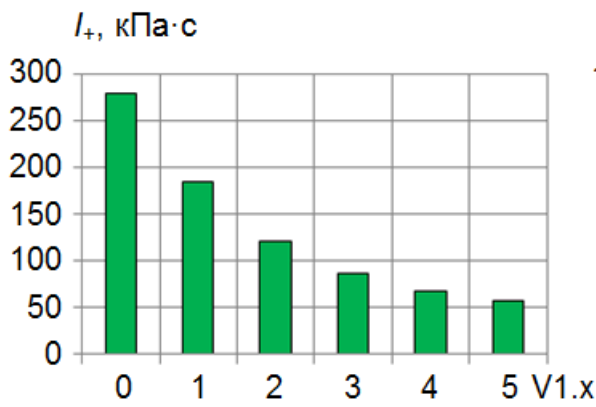
- змінення надлишкового тиску в контрольній точці (рис. 7.60, а);
- значення максимального надлишкового тиску та імпульсу фази стиснення у фронті вибухової хвилі (рис. 7.60, б, в);
- пробіт-функції й умовні ймовірності летального ураження й розриву барабанних перетинок людини (рис. 7.60, г, д).

Усі характеристики безпеки людини залежно від ширини захисної стіни було зведено в табл. 7.6.

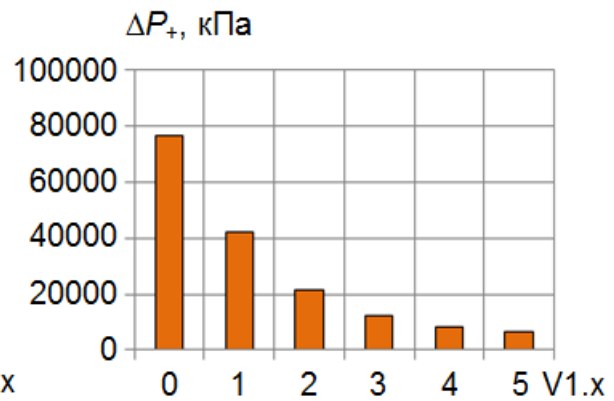
Аналіз динаміки надлишкового тиску в контрольній точці розташування персоналу аварійного техногенного об'єкта (див. рис. 7.60, а) дає змогу побачити поступове зниження максимального тиску та зменшення імпульсу фази стиснення у фронті ударної хвилі зі збільшенням ширини стіни. Очевидно, що відсутність захисної суцільної стіни (коли ширина стіни є нескінченно малою) між епіцентром вибуху й робочим місцем персоналу (варіант V1.0) дає максимальне ударне й імпульсне навантаження на людину під час проходження фронту хвилі. Стіна будь-якої ширини суттєво знижує це навантаження, але, починаючи з варіанта V1.3, цей вплив стає незначним, тобто подальше збільшення ширини не дає бажаного ефекту, що й відображається на розподілі ймовірностей летального наслідку (див. рис. 7.60, г) і розриву барабанних перетинок (див. рис. 7.60, д) людини в контрольній точці.



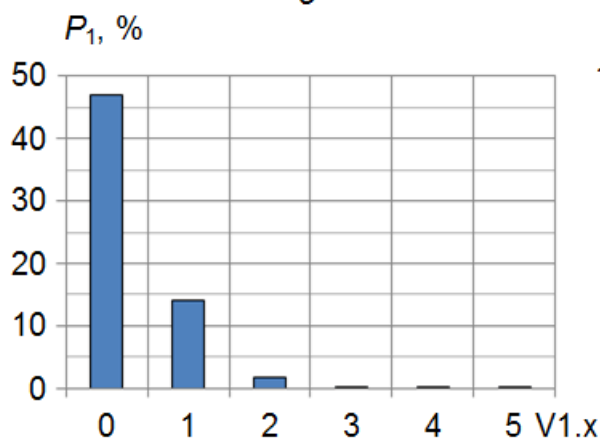
a



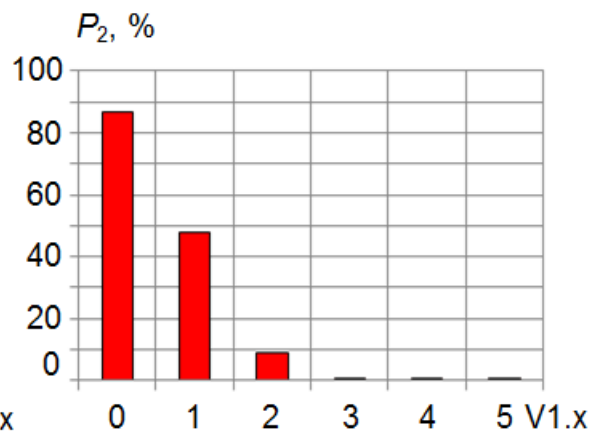
б



в



г



д

Рис. 7.60. Числовий експеримент V1.x: а – змінення надлишкового тиску; б – імпульс фази стиснення; в – максимальний надлишковий тиск; г – імовірність летального ураження; д – імовірність розриву барабаних перетінок

З огляду на графічну (див. рис. 7.60) і табличну (див. табл. 7.6) інформацію про стан безпеки на робочому місці можна зробити висновки, що найбільший вплив на умовну ймовірність ураження людини здійснюється під час використання захисної стіни, ширина якої відповідає варіантам V1.0–V1.2, тоді як подальше збільшення ширини стіни у варіантах V1.3–V1.5 уже не дає ефекту. Очевидно, що таблична залежність ймовірності ураження від ширини стіни в діапазоні максимального змінення є близькою до прямої лінії, тому дискретну функцію було замінено лінійним трендом (рис. 7.61), який буде використано в подальшому для визначення оптимальних габаритів стіни.

Таблиця 7.6
Розрахункові параметри безпеки для експерименту V1.x

Параметр	Варіант					
	V1.0	V1.1	V1.2	V1.3	V1.4	V1.5
Ширина стіни W_x , м	0,0	2,2	4,2	6,2	8,2	10,2
Надлишковий тиск ΔP_{\max} , кПа	76860	41915	21565	12550	8416	6263
Імпульс I_+ , кПа·с	280,9	185,9	121,9	86,1	67,8	57,6
Пробіт-функція Pr_1	4,92	3,92	2,90	2,06	1,49	1,09
Пробіт-функція Pr_2	6,11	4,94	3,66	2,61	1,84	1,27
Ймовірність летального ураження P_1 , %	47,1	14,1	1,8	0,2	0,0	0,0
Ймовірність розриву барабанних перетинок P_2 , %	86,6	47,7	9,0	0,9	0,1	0,0

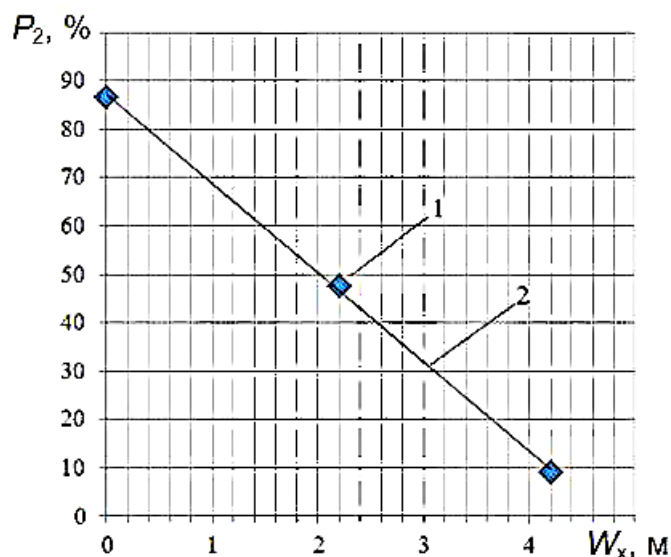


Рис. 7.61. Залежність умовної ймовірності розриву барабанних перетинок від ширини «нескінченно» високої стіни для експерименту V1.x:

1 – розрахунок; 2 – лінійний тренд

7.5.2.3. Визначення впливу висоти стіни на стан безпеки

У другому експерименті V2.x розглядалася захисна стіна з «нескінченною» шириною й регульованою висотою для визначення впливу цієї висоти на розподіл імовірності ураження в місці розташування обслуговуваного персоналу (без впливу ширини стіни).

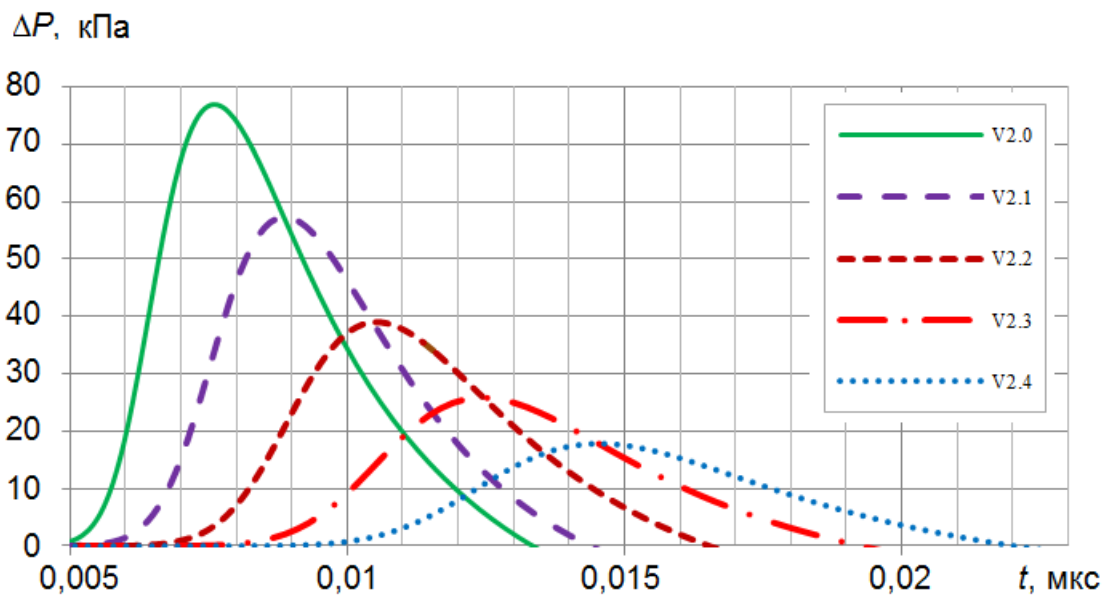
Аналіз динаміки надлишкового тиску в контрольній точці (рис. 7.62, а) свідчить про поступове зниження максимального тиску та зменшення імпульсу фази стиснення у фронті ударної хвилі зі збільшенням висоти стіни. Відсутність стіни (варіант V2.0) призводить до максимального ударного навантаження на людину під час проходження фронту вибухової хвилі. Стіна будь-якої висоти суттєво знижує це навантаження і, починаючи з варіанту V2.3 цей вплив стає незначним, тобто подальше збільшення висоти вже не дає ніякого ефекту.

У табл. 7.7 наведено всі необхідні параметри для обчислення умовної ймовірності негативного впливу ударно-імпульсного навантаження від вибухової ударної хвилі на організм людини, яка знаходиться в зоні техногенної аварії, пов'язаної з викидом горючого газу з обладнання, змішуванням його з повітрям з утворенням газоповітряної суміші, займанням і вибуховим згорянням, що супроводжується баричним збуренням навколишнього атмосферного середовища.

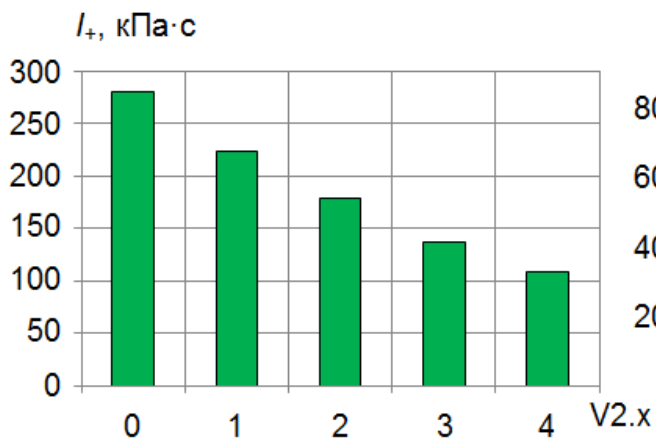
Таблиця 7.7
Розрахункові параметри безпеки для експерименту V2.x

Параметр	Варіант				
	V2.0	V2.1	V2.2	V2.3	V2.4
Висота стіни W_y , м	0,0	0,6	1,2	1,8	2,4
Надлишковий тиск ΔP_{\max} , кПа	76860	57302	39018	25832	17850
Імпульс I_+ , кПа·с	280,9	224,2	178,3	137,7	108,4
Пробіт-функція Pr_1	4,92	4,38	3,82	3,20	2,62
Пробіт-функція Pr_2	6,11	5,55	4,80	4,01	3,29
Імовірність летального ураження P_1 , %	47,1	26,6	12,1	3,6	0,9
Імовірність розриву барабанних перетинок P_2 , %	86,6	70,8	42,2	16,0	4,3

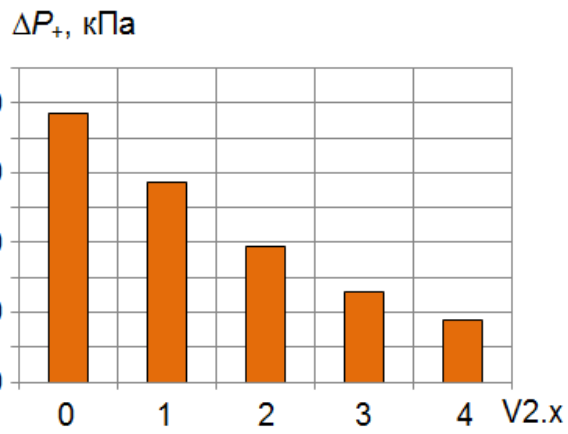
Як і в першій серії експериментів, отримано фактори ураження людини вибуховою хвилею, діаграми яких для варіантів захисної стіни різної висоти зображено на рис. 7.62, б, в. Діаграми ймовірності летального наслідку й розриву барабанних перетинок у людини показано на рис. 7.62, г, д. Аналіз діаграм свідчить про те, що весь сегмент варіантів V2.0–V2.4 можна використати для побудови лінійного тренду поведінки ймовірності ураження від висоти (рис. 7.63), який буде використано в подальшому для визначення необхідних габаритів стіни.



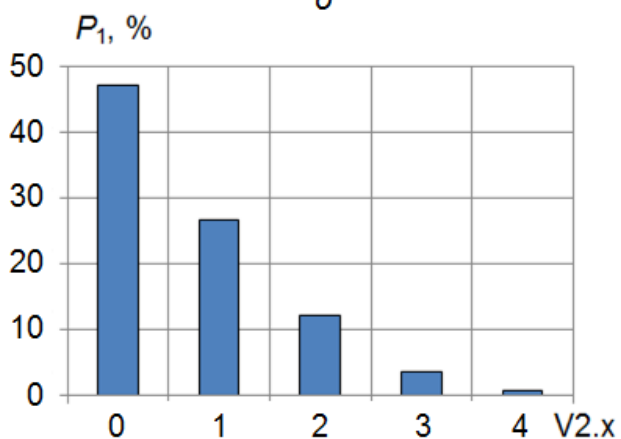
a



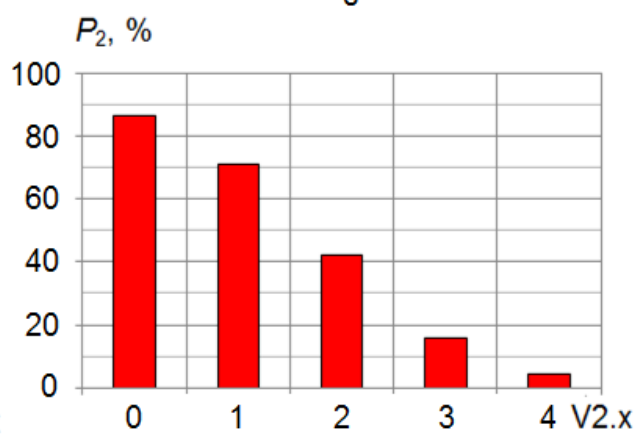
б



в



г



д

Рис. 7.62. Експеримент V2.x: а – змінення надлишкового тиску; б – імпульс фази стиснення; в – максимальний надлишковий тиск; г – імовірність летального ураження; д – імовірність розриву барабаних перетинки

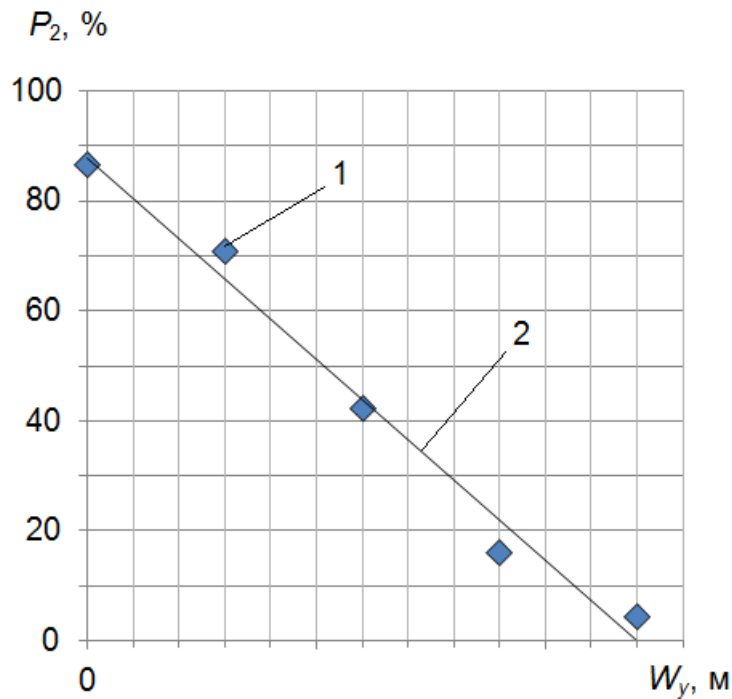


Рис. 7.63. Залежність умовної ймовірності розриву барабанних перетинок від ширини «нескінченно» високої стіни для експерименту V2.x: 1 – розрахунок; 2 – лінійний тренд

7.5.2.4. Визначення співвідношення потрібних габаритів стіни

Попередні серії обчислювальних експериментів V1.x і V2.x дають змогу отримати таке співвідношення висоти й ширини захисної стіни, яке можна вважати оптимальним з огляду на стан безпеки в контрольній точці (табл. 7.8). З рис. 7.61 і 7.63 можна визначити габарити стіни для однакової ймовірності ураження P_2 , користуючись лінійними трендами. За табл. 7.8 отримуємо коефіцієнт k відношення висоти W_y до ширини W_x стіни, який дорівнює приблизно 0,52. Базуючись на цьому співвідношенні габаритів захисної споруди, проведемо серію експериментів V3.x зі скінченними значеннями висоти й ширини стіни (табл. 7.9).

Таблиця 7.8

Визначення раціональних габаритів стіни

P_2 , %	W_y , м	W_x , м	$k = W_y / W_x$, м
80	0,2	0,4	0,50
60	0,8	1,5	0,53
40	1,3	2,5	0,52
20	1,9	3,6	0,53
10	2,1	4,2	0,50

Таблиця 7.9

Габарити стіни для експерименту V3.x

Варіант	W_y , м	W_x , м	$k = W_y / W_x$, м
V3.1	1,2	2,2	0,54
V3.2	2,2	4,2	0,52
V3.3	3,0	5,8	0,52
V3.4	4,0	7,8	0,51

7.5.2.5. Визначення впливу стіни з раціональними габаритами на стан безпеки

У третьому (перевірному) експерименті V3.x розглядалася захисна стіна з оптимальними шириною й висотою, співвідношення яких розраховано в табл. 7.9 для визначення впливу стіни на розподіл імовірності ураження в місці розташування обслугового персоналу (з урахуванням впливу конкретних значень ширини й висоти).

Аналіз динаміки надлишкового тиску в контрольній точці (рис. 7.64) свідчить про поступове зниження максимального тиску та зменшення імпульсу фази стиснення у фронті ударної хвилі зі збільшенням висоти (а отже, і ширини) стіни. Очевидно, що відсутність стіни (варіант V3.0) спричиняє максимальне ударне навантаження на людину під час проходження фронту хвилі, а наявність стіни будь-яких габаритів (варіанти V3.1– V3.4) суттєво знижує це навантаження.

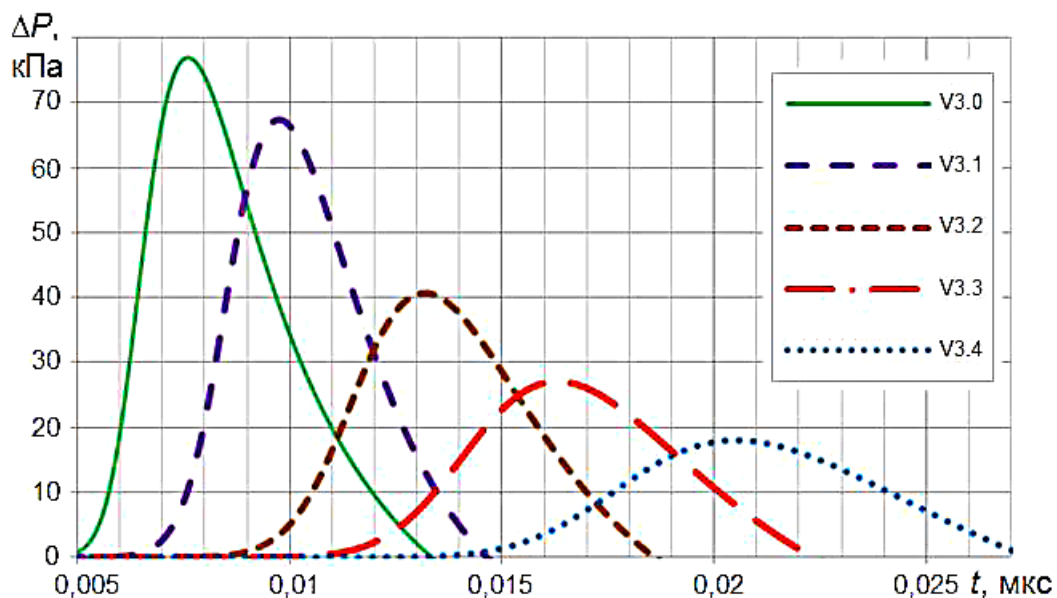


Рис. 7.64. Змінення надлишкового тиску для експерименту V3.x

У табл. 7.10 наведено всі необхідні газодинамічні параметри для обчислення умовної ймовірності негативного впливу ударно-імпульсного навантаження вибухової хвилі на організм людини, яка знаходиться в зоні

техногенної аварії, пов'язаної з викидом горючого газу з обладнання, змішуванням його з повітрям з утворенням газоповітряної суміші, займанням і вибуховим згорянням, що супроводжується баричним збуренням навколишнього атмосферного середовища. Ударна хвиля, як і в першій і другій серіях експериментів, характеризується двома факторами ураження: максимальним надлишковим тиском у фронті вибухової ударної хвилі й імпульсом її первинної фази стиснення.

Таблиця 7.10
Розрахункові параметри безпеки для експерименту V3.x

Параметр	Варіант				
	V3.0	V3.1	V3.2	V3.3	V3.4
Ширина стіни W_x , м	0,0	2,2	4,2	5,8	7,8
Надлишковий тиск ΔP_{\max} , кПа	76860	67397	40668	27094	18010
Імпульс I_+ , кПа·с	280,9	248,9	192,9	156,2	127,8
Пробіт-функція Pr_1	4,92	4,63	4,01	3,50	3,02
Пробіт-функція Pr_2	6,11	5,86	4,88	4,10	3,31
Імовірність летального ураження P_1 , %	47,1	35,7	16,0	6,7	2,4
Імовірність розриву барабанних перетинок P_2 , %	86,6	80,5	45,4	18,5	4,5

Після аналізу табл. 7.10 можна зробити висновок, що весь сегмент діаграми для варіантів виготовлення захисної стіни V3.1–V3.4 дає можливість побудувати лінійний тренд, який можуть використовувати експерти з безпеки для визначення «оптимальних» габаритів стіни для заданого рівня ймовірності ураження людини (рис. 7.65).

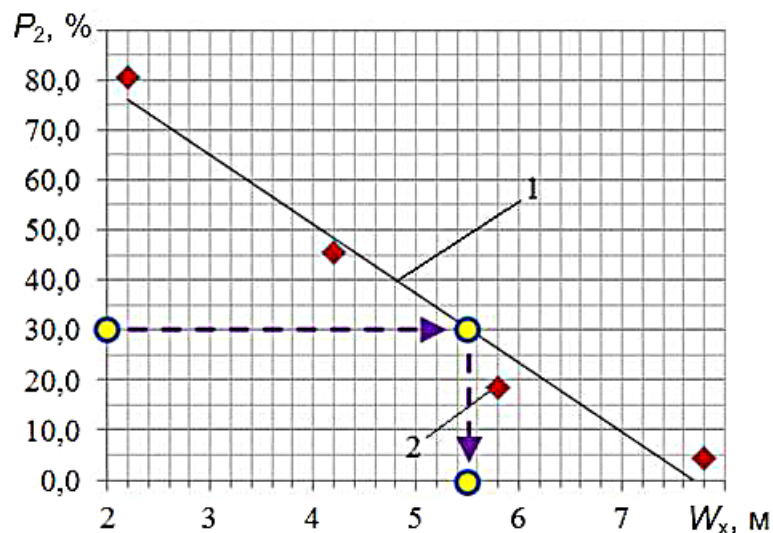


Рис. 7.65. Залежність умовної ймовірності розриву барабанних перетинок від ширини «оптимальної» стіни для експерименту V3.x: 1 – лінійний тренд; 2 – розрахунок

Наприклад, замовник зазначає, що потрібно побудувати стіну, що забезпечує ймовірність ураження 30 % у контрольній точці розташування персоналу техногенного об'єкта. Користуючись трендом (див. рис. 7.65), визначаємо, що ширина стіни має бути 5,5 м. Маючи на увазі, що коефіцієнт співвідношення ширини й висоти захисної стіни дорівнює приблизно 0,52, отримуємо, що висота стіни має бути 2,86 м. Час модельних розрахунків становить 8 год, при старій методиці з долученням візуальної експертизи це потребувало б додатково 80 год. Отже, упровадження нової методології дало змогу загалом пришвидшити пошук раціональної захисної конструкції в 11 разів, тобто більш ніж на порядок.

7.5.2.6. Числове оцінювання згинальної міцності захисної стіни під час аварійного вибуху водню

Суцільна тверда стіна, яку встановлено на водневій заправній станції з метою захисту обслугового персоналу від наслідків аварійного вибуху водню, потребує не тільки газодинамічного розрахунку для отримання просторових полів ймовірності ураження людини вибуховою хвилею, необхідно також здійснити оцінювання напруженого стану матеріалу, з якого її виготовлено, наприклад, для визначення згинальних напружень біля основи стіни. Захисна стіна може бути по-різному встановлена на промисловому майданчику (на різних відстанях від епіцентру вибуху), тому вона піддається дії різних за значенням сил тиску хвилі вибуху, і дуже відповідальним є вибір конструкційного матеріалу для її виготовлення та її мінімальної товщини, щоб виконувалася умова міцності на згин (рис. 7.66).

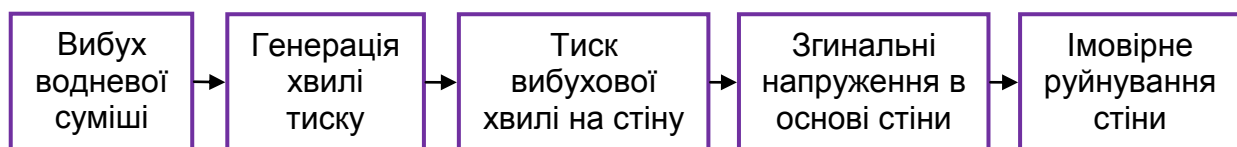


Рис. 7.66 Схема розвитку взаємодії «стіна – вибухова хвиля»

Для визначення розподілу максимального надлишкового тиску на поверхні стіни використано тривимірну математичну модель вибуху воднево-повітряної суміші. Під час числового оцінювання напруженого стану на згин біля основи стіни використано розрахункову схему консольної балки. Щоб оцінити найгірший можливий сценарій напруження матеріалу, уважали, що поверхневе силове поле максимального надлишкового тиску впливає на стіну миттєво й одночасно. Власне, запропоновано комп'ютерний метод розв'язання спряженої проблеми динаміки вибухового газу й міцності захисної стіни. Ця технологія дає змогу оцінити конструктивну товщину стіни, що захищає персонал об'єкта від негативних наслідків впливу вибухової хвилі без її руйнування.

Унаслідок випадкового вибуху водню на заправній станції утворюється й поширюється хвиля вибуху, намагаючись зігнути стіну в нижній частині (рис. 7.67).

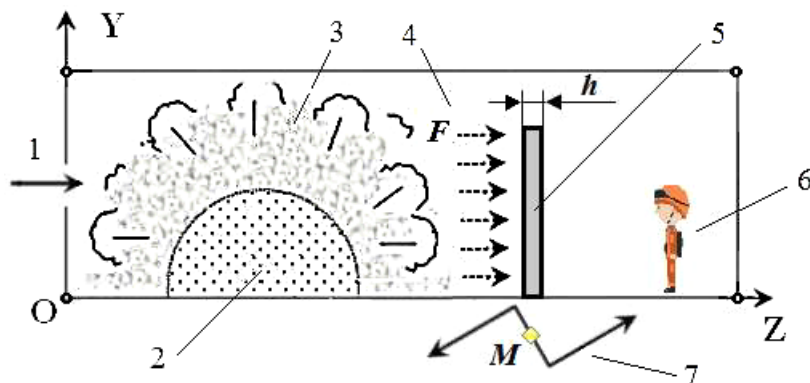


Рис. 7.67. Схема оцінювання напружень при згині стіни:
 1 – повітря; 2 – воднево-повітряна суміш; 3 – продукти горіння;
 4 – сили надлишкового тиску; 5 – стіна; 6 – персонал;
 7 – імпульс згинальних напружень

Поле максимального надлишкового тиску на поверхні стіни, що розраховується на основі математичної моделі, дає змогу оцінити розподіл дискретних сил надлишкового тиску F і загальне зусилля імпульсу M , яке згинає стіну біля її основи. Для розрахунку міцності захисної стіни розглядається схема затисненої консольної балки. З теорії напруженого стану матеріалів відомо, що мінімальний необхідний проектний момент опору згину стіни можна знайти за формулою

$$W = \frac{bh^2}{6} \geq \frac{M}{[\sigma]}, \quad (7.1)$$

де b – ширина стіни; h – товщина стіни, $[\sigma]$ – допустимі згинальні напруження для певного конструкційного матеріалу стіни (табл. 7.11).

Таблиця 7.11

Допустимі згинальні напруження для різних матеріалів

Позначення матеріалу	Матеріал стіни	Допустимі згинальні напруження, МПа
M1	Сірий чавун GG 15 (DIN)	35
M2	Нейлон	40
M3	Скловолокно	48
M4	Текстоліт	65
M5	Бронза	100
M6	Дюралюміній	130
M7	Сталь 28Mn6 (DIN)	160
M8	Легована сталь 5145 (ASME)	290

З формули (7.1) випливає, що товщина стіни h має бути більшою за це мінімальне значення, щоб задовольнялася умова міцності на згин:

$$h \geq \sqrt{\frac{6W}{b}}. \quad (7.2)$$

Захисна стіна, розташована в різних місцях відносно епіцентру аварійного вибуху, зазнає дії різних зусиль імпульсу згину й може бути конструктивно виготовлена різної товщини h .

Для оцінювання ефективності захисної стіни від наслідків дії надлишкового тиску на навколишнє середовище використовується математична модель миттєвого вибуху воднево-повітряної суміші [31]. Передбачається, що основним фактором, що впливає на актуальні фізичні процеси, є конвективне перенесення маси, імпульсу й енергії газоповітряної суміші, що дає можливість замість повної системи диференціальних рівнянь Нав'є – Стокса розглядати скорочену систему рівнянь Ейлера з додатковими джерельними членами.

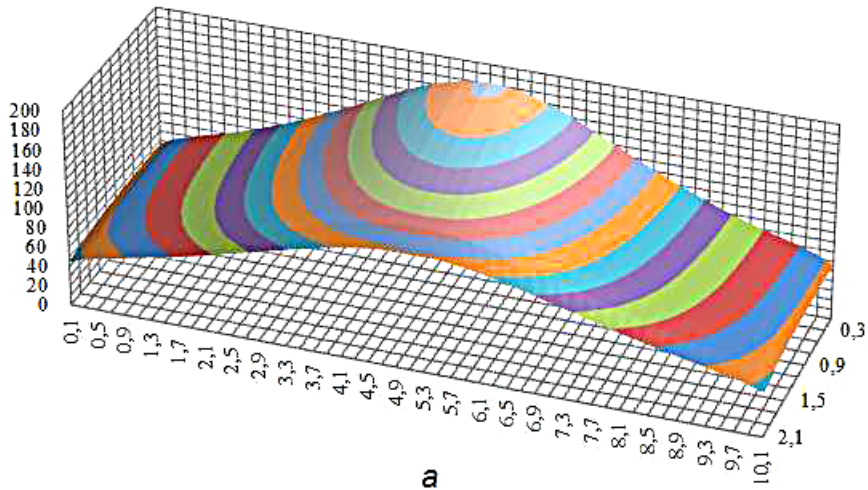
Для розв'язання поставленої задачі розглядається вибух півсферичної стехіометричної воднево-повітряної хмари радіусом 1,5 м при температурі навколишнього середовища 293 К [66]. Варіанти розташування захисної стіни на різних відстанях Z_w від епіцентру аварійного вибуху наведено в табл. 7.12.

Таблиця 7.12
Варіанти розташування стіни

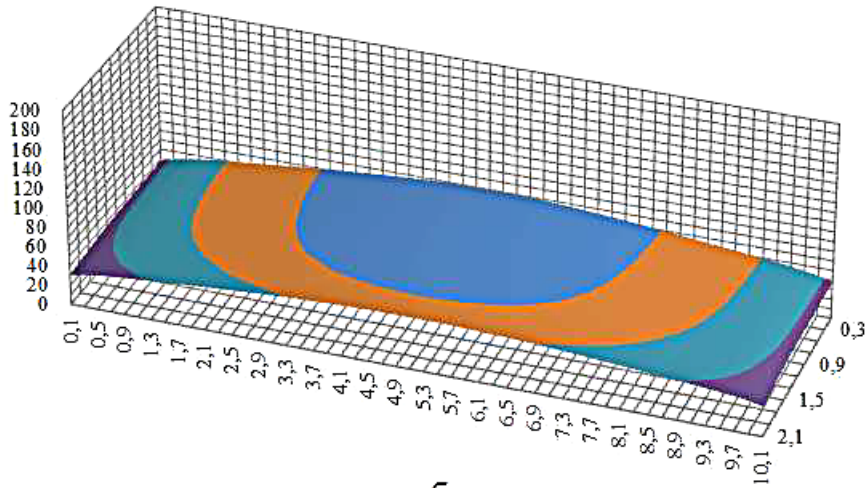
Відстань від епіцентру, м	Варіант				
	V1	V2	V3	V4	V5
Z_w	4,0	5,0	6,0	7,0	8,0

Продукти горіння з температурою 3450 К, тиском 901 кПа, молярною масою 0,02441 кг/моль і коефіцієнтом адіабати 1,24 утворюють вибухову хвилю тиску, яка генерує поле максимального надлишкового тиску на поверхні захисної стіни з такими габаритами: ширина 10,0 м, товщина 0,2 м і висота 2,2 м (див. рис. 7.67). Тут передбачається, що хвиля вибуху впливає одночасно й миттєво, що відповідає найгіршому сценарію аварійного ударно-імпульсного навантаження.

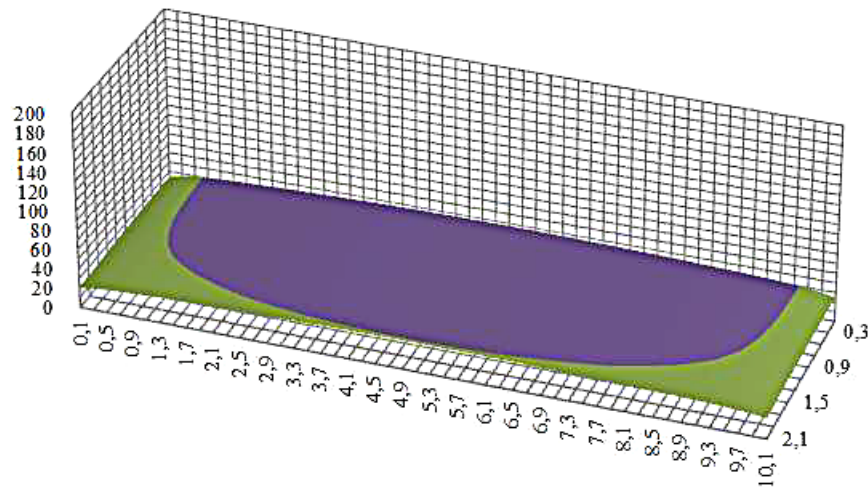
На віддаленішу від аварії стіну вплив вибуху є слабкішим, а надлишковий тиск газів на стіну є менш потужним (рис. 7.68). Цьому відповідає менш інтенсивний розподіл сил надлишкового тиску (рис. 7.69) і дискретне поле згинального імпульсу (рис. 7.70). Отже, з віддаленням від епіцентру вибуху сумарний згинальний імпульс зменшується, що позначається на значеннях мінімально необхідного моменту опору (7.1) найбільш напруженої опорної ділянки стіни і, нарешті, на значеннях мінімальної безпечної товщини стіни (7.2).



а

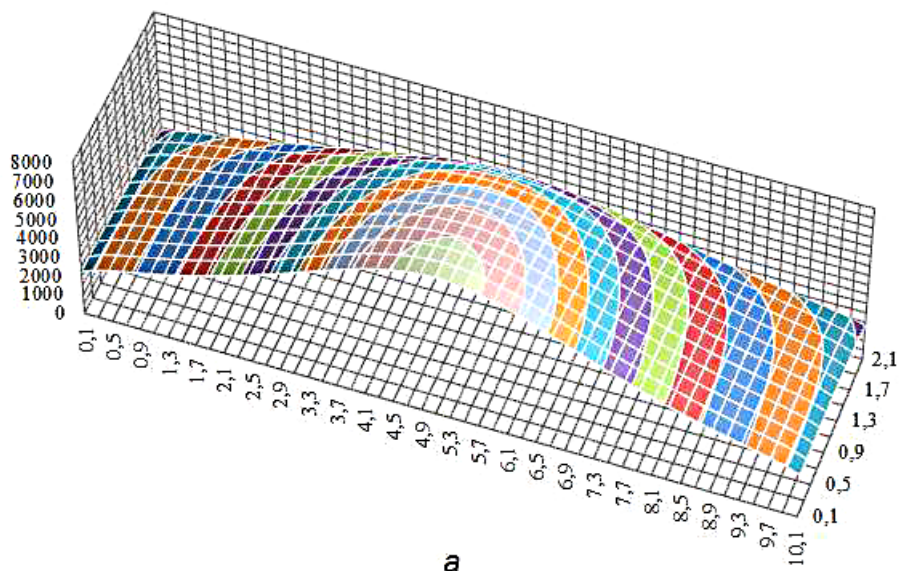


б

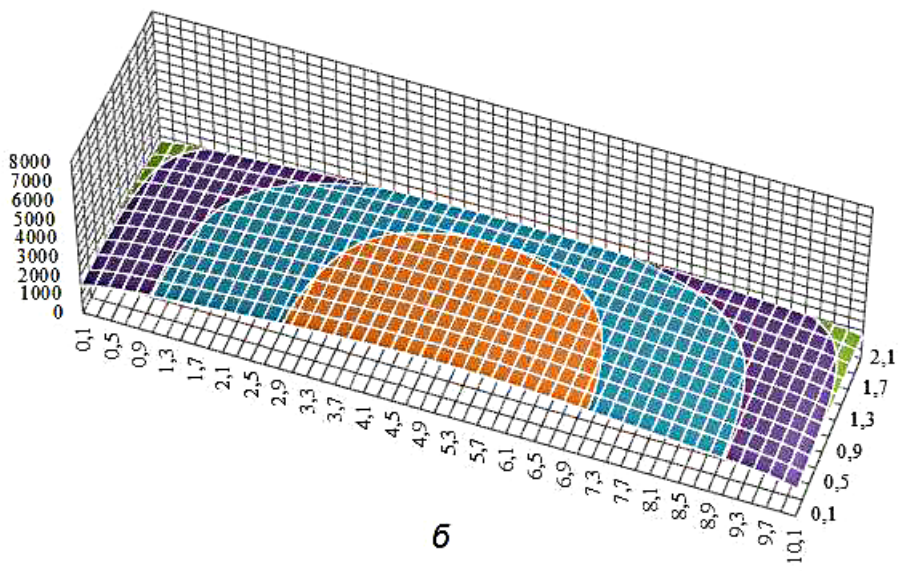


в

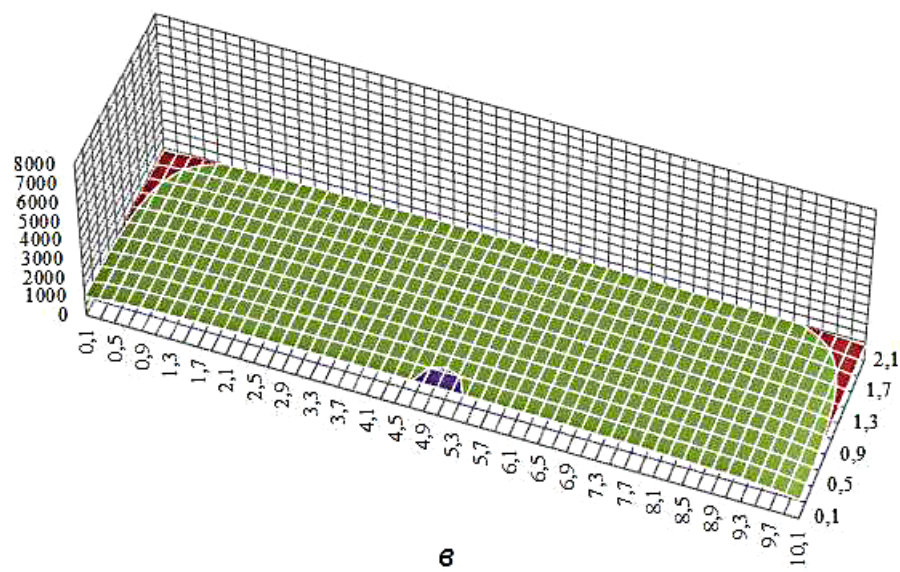
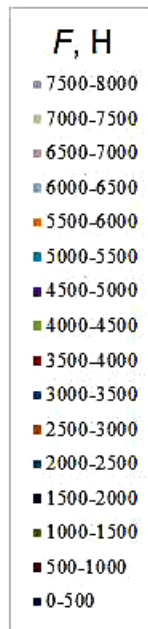
Рис. 7.68. Розподіл надлишкового тиску на поверхні стіни:
а – опція V1; б – опція V3; в – опція V5



а



б



в

Рис. 7.69. Поля сил надлишкового тиску: а – опція V1; б – опція V3; в – опція V5

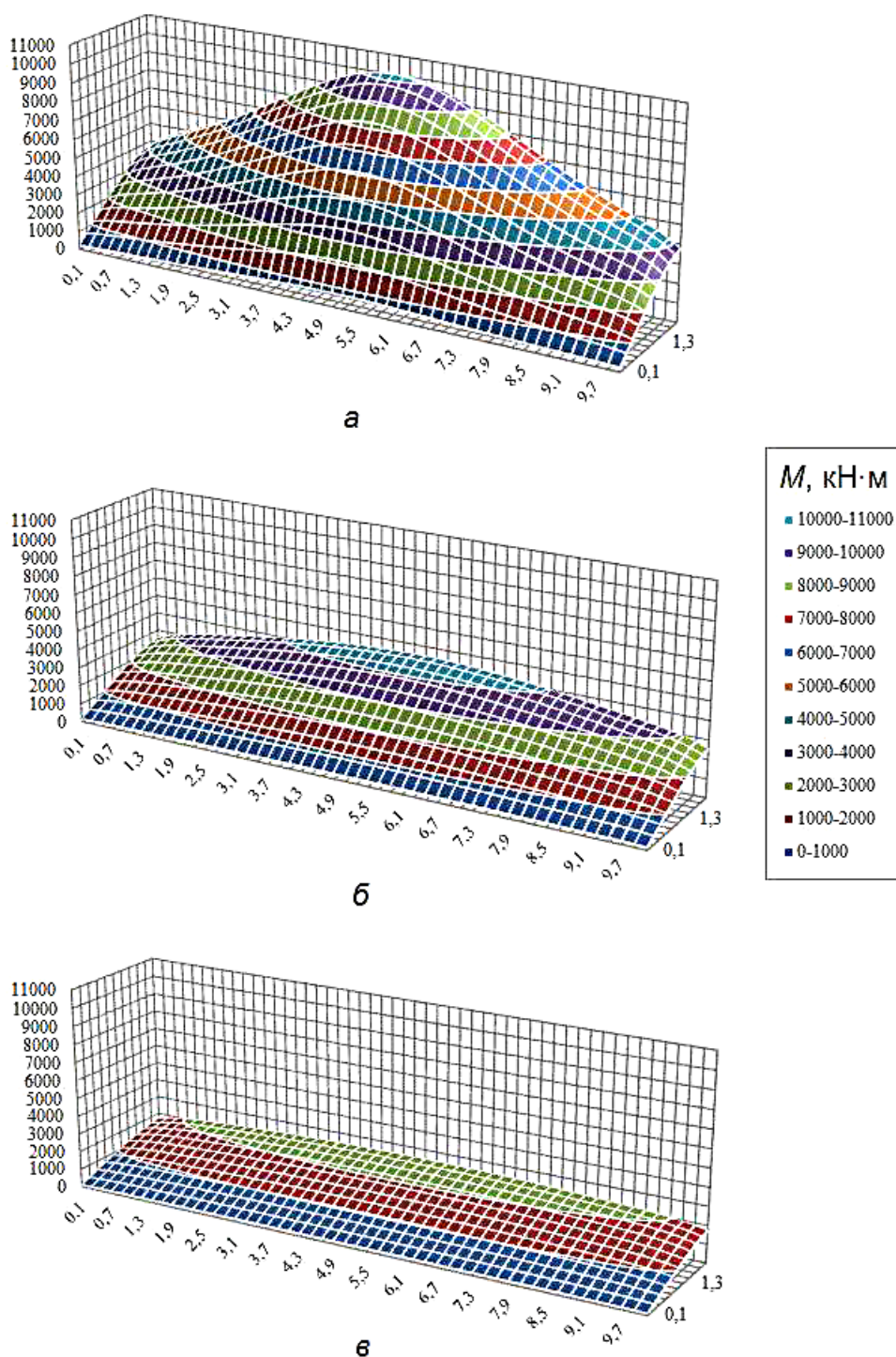


Рис. 7.70. Розподіл згинального імпульсу на поверхні стіни:
 а – опція V1; б – опція V3; в – опція V5

Дискретні сили надлишкового тиску згинають стіну в поперечному перерізі, утворюючи розподілений згинальний імпульс на поверхні стіни (див. рис. 7.70). Розподіл по висоті усередненого за шириною стіни максимального надлишкового тиску (рис. 7.71) і газових згинальних сил

(рис. 7.72) для всіх опцій розташування стіни дають наочну картину її навантаження під час вибуху.

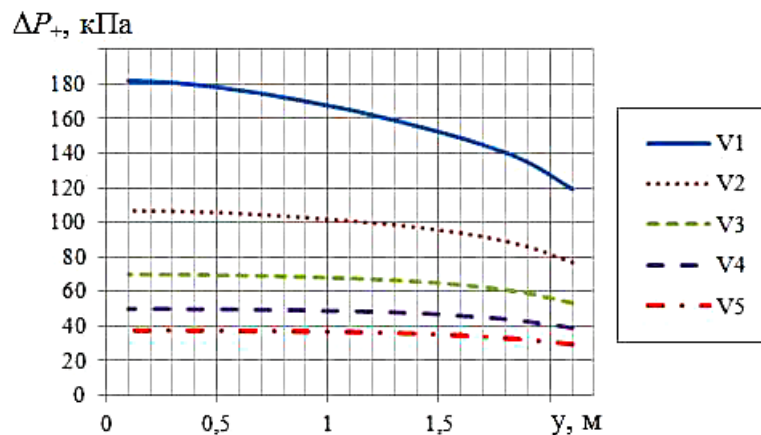


Рис. 7.71. Розподіл по висоті усередненого за шириною стіни максимального надлишкового тиску для всіх варіантів її розташування

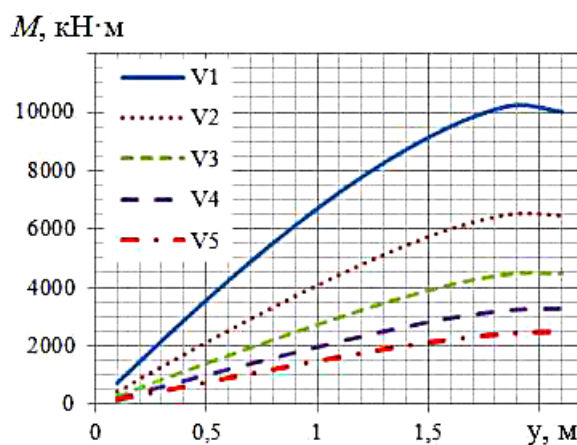


Рис. 7.72. Розподіл по висоті усередненого за шириною стіни згинального імпульсу для всіх варіантів її розташування

Сума всіх дискретних згинальних імпульсів на поверхні стіни дає змогу обчислити інтегральне значення сумарного згинального імпульсу на поверхні стіни для кожного варіанта її розташування відносно епіцентру водневого вибуху (рис. 7.73).

Використовуючи формулу (7.1) і довідкові значення мінімального допустимого згинального напруження для різних конструкційних матеріалів виготовлення стіни М1–М8 (див. табл. 7.11), можна розрахувати мінімальні необхідні моменти опору основи стіни для різних опцій її розташування відносно епіцентру аварійного вибуху (рис. 7.74).

Нарешті, використовуючи формулу (7.2), можна оцінити мінімальну безпечну товщину стіни, яку виготовлено з різних матеріалів М1–М8, для різних варіантів її розташування V1–V5 (рис. 7.75).

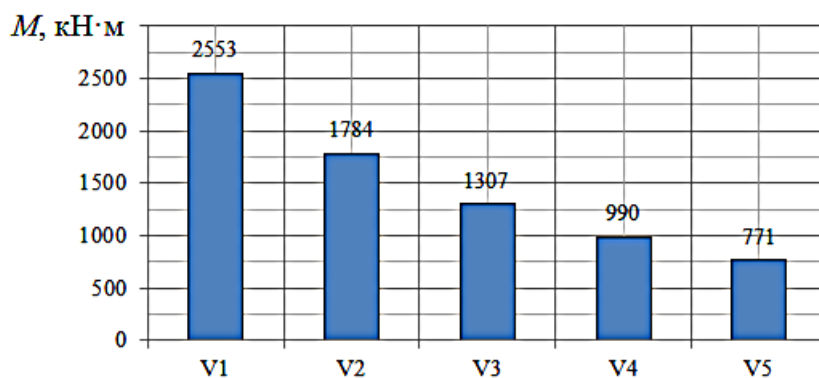


Рис. 7.73. Сумарний згинальний імпульс для варіантів розташування стіни V1–V5

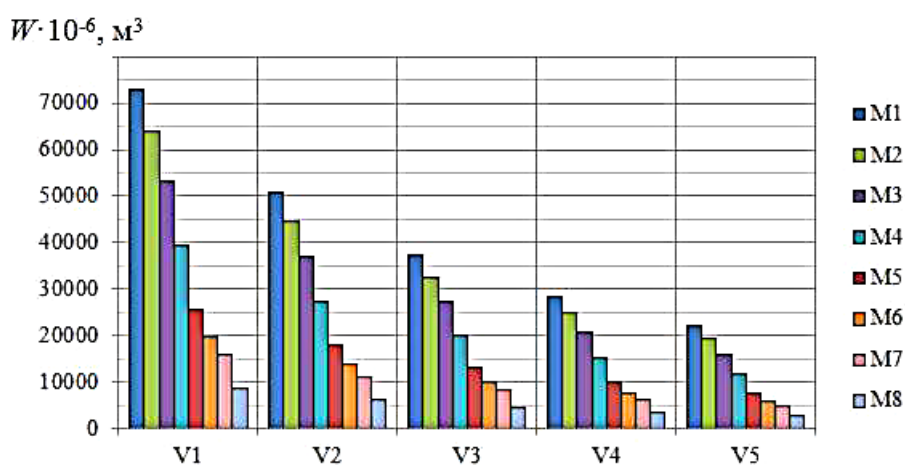


Рис. 7.74. Мінімальний необхідний момент опору основи стіни з матеріалів M1–M8 для варіантів її розташування V1–V5

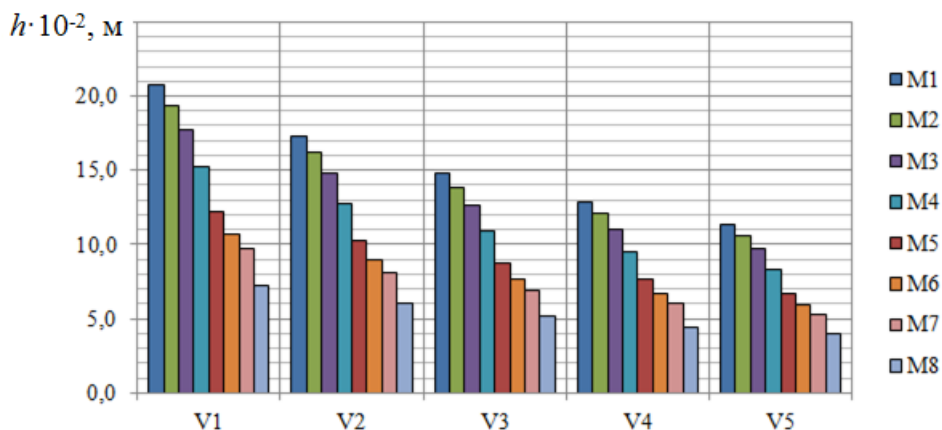


Рис. 7.75. Мінімальна безпечна товщина стіни з матеріалів M1–M8 для варіантів її розташування V1–V5

Розроблений метод розв'язання спряженої задачі газової динаміки під час вибуху газоповітряної суміші на промисловому майданчику, де розташовано суцільну стіну для захисту обслугового персоналу від дії

вибухової хвилі, і напруженого стану стіни під згинальним впливом газових сил можна використовувати експертам з безпеки з метою вибору матеріалу для виготовлення стіни й оцінювання її мінімальної товщини, що забезпечить достатню стійкість споруди до руйнування.

7.5.3. Числовий аналіз наслідків водневого вибуху в тунелі видобувної шахти

Водень, як і метан, є одним з найбільш вибухонебезпечних газів, наявних у шарах гірської породи, що видобувається у вугільній промисловості [79], тому видобуток вугілля має високий рівень ризику вибухових аварій, що призводять до тяжких соціальних та економічних наслідків [335]. Порушення техніки безпеки, несправність обладнання, фактори природного походження часто є причиною викидів водню в гірничих виробітках, змішування горючого газу з повітрям з утворенням вибухонебезпечної газової суміші, вибух якої супроводжується утворенням й поширенням ударних хвиль (рис. 7.76) [336, 337], що негативно впливають на навколишнє середовище.

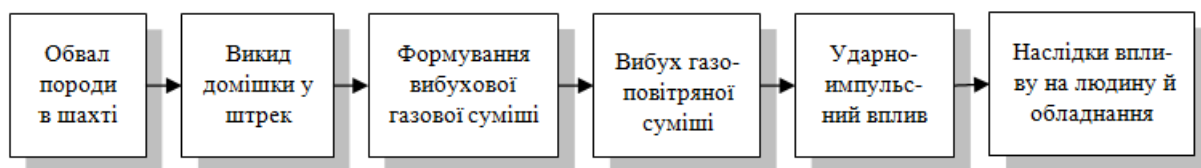


Рис. 7.76. Розвиток техногенної аварії

Ударні хвилі чинять ударно-імпульсне навантаження на навколишнє середовище, загрожуючи життю та здоров'ю шахтарів, руйнуючи шахти й пошкоджуючи розташоване в них гірниче обладнання. Унаслідок таких аварій соціальні, матеріальні й фінансові втрати можуть набути катастрофічних величин.

Для створення безпечних умов праці на шахтах необхідно розробляти й застосовувати захисне обладнання, яке може запобігти можливим наслідкам, спричиненим вибухом газоповітряної суміші, або зменшити їх до прийняттого рівня. Ефективність методів захисту можна перевірити експериментально [338], однак повномасштабний фізичний експеримент важко здійснювати, оскільки він є громіздким і занадто дорогим, тому останнім часом все частіше використовується обчислювальний експеримент, у якому імітуються певні сценарії надзвичайних ситуацій (рис. 7.77) з допомогою комп'ютерних систем [288].

Комп'ютерне моделювання процесу вибуху стехіометричної хмари воднево-повітряної суміші, яка виникла внаслідок аварійного викиду з тріщини в підшві штреку вугільної шахти. Розрахункову область зображено на рис. 7.78 [58].

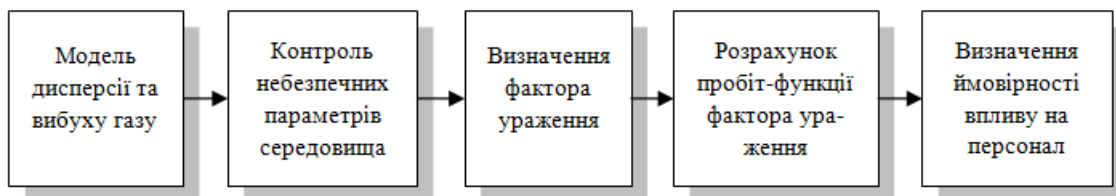


Рис. 7.77. Схема ймовірнісного оцінювання наслідків аварії

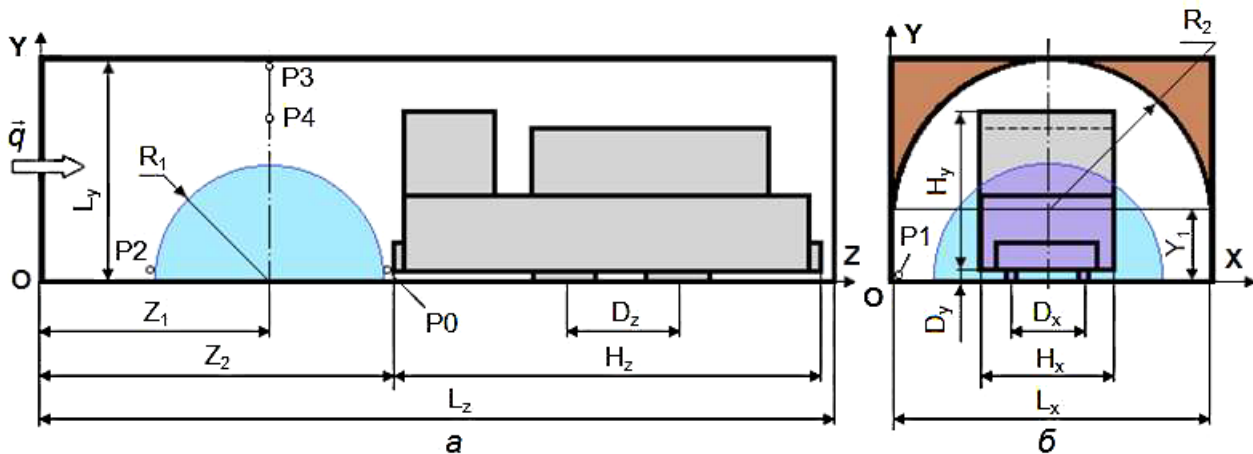


Рис. 7.78. Карта об'єктів уздовж (а) і поперек (б) розрахункової області

Обчислювальний експеримент проводився при швидкості руху повітря на вході в область $q = 0,5$ м/с, температурі 293 К, тиску 101325 Па. Габарити розрахункової області становили: довжина $L_z = 11,0$ м, висота $L_y = 2,33$ м, ширина $L_x = 3,37$ м, радіус кола стелі $R_2 = 1,65$ м, центр якого був на висоті $Y_1 = 0,65$ м [31].

Хмара стехіометричної суміші розташовувалася на відстані $Z_1 = 5,03$ м від входу до розрахункової області, радіус хмари становив $R_1 = 0,8$ м (рис. 7.78, а). На відстані $Z_2 = 6,33$ м розташовувався акумуляторний електровоз, основні розміри якого відповідали моделі АРП8С ($H_x = 1,4$ м, $H_z = 4,5$ м, $H_y = 1,67$ м, $D_x = 0,76$ м, $D_y = 0,1$ м, $D_z = 1,17$ м). У характерних місцях аварійної зони розташовувалися контрольні точки Р0–Р4, у яких здійснювався контроль змінення в часі надлишкового тиску (точка Р4 була на висоті 1,82 м).

Для оцінювання впливу закритого характеру потоку в штреку й загромождження простору електровозом на результативні поля надлишкового тиску та ймовірності ураження розглядалися шість варіантів розрахункової схеми (табл. 7.13):

- відкритий простір без електровоза (V1);
- відкритий простір з електровозом (V2);
- штрек зі сферичною стелею без електровоза (V3);
- штрек зі сферичною стелею з електровозом (V4);
- штрек з прямокутною стелею без електровоза (V5);
- штрек з прямокутною стелею з електровозом (V6).

Варіанти схеми розрахунку

Варіант	Схема	Варіант	Схема	Варіант	Схема
V1		V3		V5	
V2		V4		V6	

У початковий момент часу після вибуху газової суміші формувалася хмара продуктів горіння з високими тиском і температурою. Далі реалізовувався процес руху продуктів горіння, що супроводжувався конвективним перенесенням і турбулентним розсіюванням продуктів горіння вздовж штреку й поширенням ударної хвилі від епіцентру вибуху. Під час розрахунку отримувалися поля тиску в будь-який момент часу в усіх трьох площинах області розрахунку (рис. 7.79), збиралася вся необхідна інформація для обчислення полів умовної ймовірності ураження персоналу та збору колекцій надлишкового тиску в характерних контрольних точках тунелю.

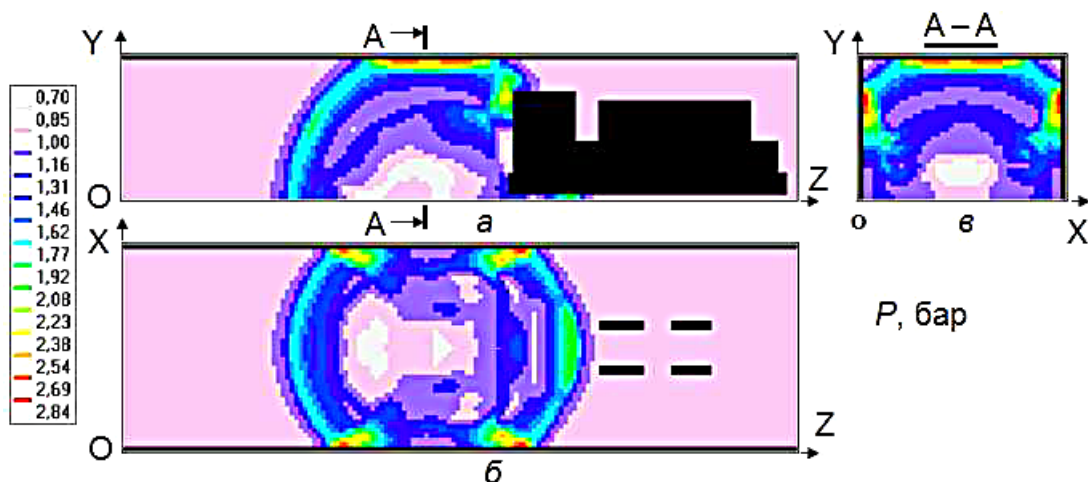


Рис. 7.79. Розподіл тиску для опції V6 у момент $t = 0,003$ с:
 а – площина YOZ; б – площина XOZ; в – площина XOY

Динаміку надлишкового тиску в контрольних точках P0–P4 для різних варіантів розрахунку V1–V6 показано на рис. 7.80, 7.81.

Очевидно, що наявність закритого простору тунелю (V3–V6) призводить до значного збільшення максимального надлишкового тиску в точках P1 і P3 порівняно з варіантами відкритого простору (V1, V2) унаслідок ефекту відбитої від стінок тунелю ударної хвилі. У решті контрольних точок вплив стінок тунелю є незначним. З іншого боку, у точці

P0 загрознення простору локомотивом (V2, V4, V6) суттєво впливає на надлишковий тиск. З огляду на імпульсне навантаження (рис. 7.82, б) спостерігається подібне до ударної складової поведінки, за винятком точок P2, P4, у яких ефект тунельних стінок помітно збільшується через вторинні піки відбитої хвилі тиску.

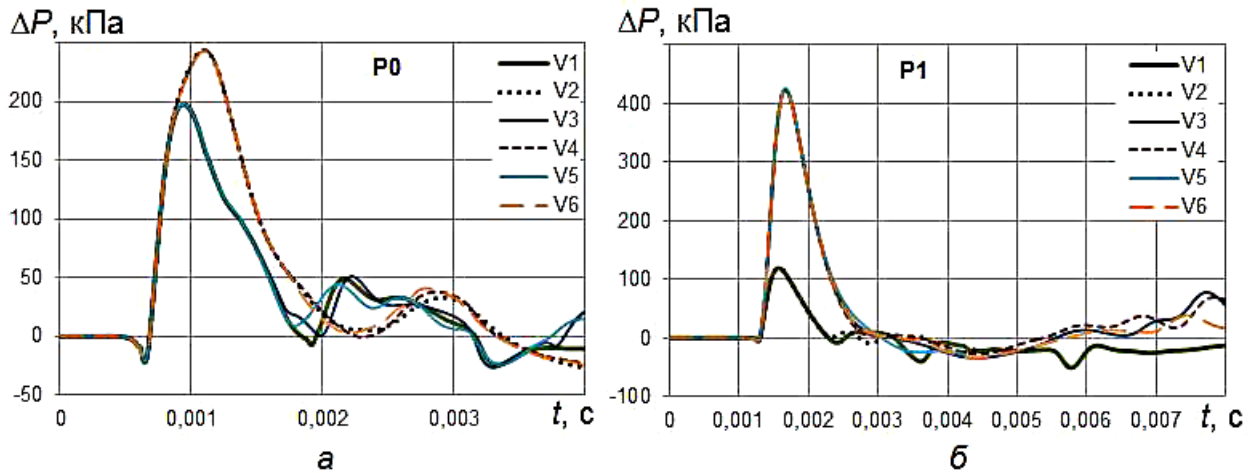


Рис. 7.80. Динаміка надлишкового тиску в контрольних точках P0 (а) і P1 (б)

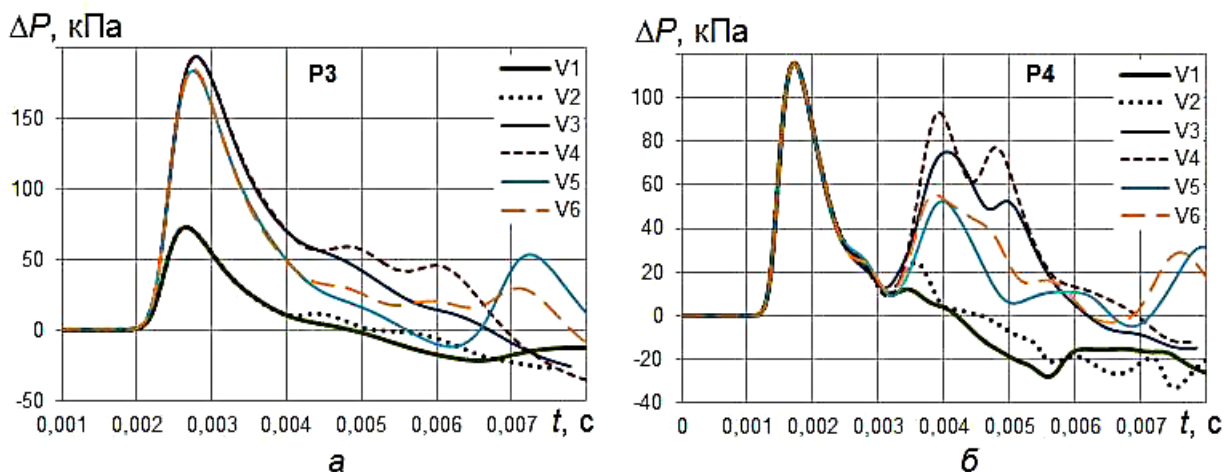


Рис. 7.81. Динаміка надлишкового тиску в контрольних точках P3 (а) і P4 (б)

Зібрані колекції даних дають можливість обчислити фактори ураження ударною хвилею (максимальний надлишковий тиск та імпульс фази стиснення) (рис. 7.82) та отримати значення умовної ймовірності летального наслідку (рис. 7.83, а) і розриву барабанних перетинок (рис. 7.83, б) у контрольних точках.

Умовна ймовірність розриву барабанних перетинок (див. рис. 7.83, б) поводить у контрольних точках подібно до поведінки максимального надлишкового тиску (рис. 7.82, а), що є логічним, оскільки у формулі (2.103) наявним є лише ударний компонент. Видно, що максимальні ймовірності відповідають точкам P1 і P3 для варіантів із тунелем і точці P0

через наявність локомотива. Значення, менше за 50 %, імовірність має тільки в точці P3 у відкритому просторі. Поводження ймовірності летального наслідку є більш складним (див. рис. 7.83, а) через наявність у формулі (2.102) імпульсної складової навантаження від ударної хвилі. Для контрольних точок P1–P4 наявність стінок тунелю є визначальним для генерацій високих значень імовірності летального ураження, тоді як у відкритому просторі величини ймовірності – незначущі. Для точки P0 імовірність летального ураження збільшується від 40 до 60 % через наявність електровоза, який є перешкодою для поширення вибухової хвилі.

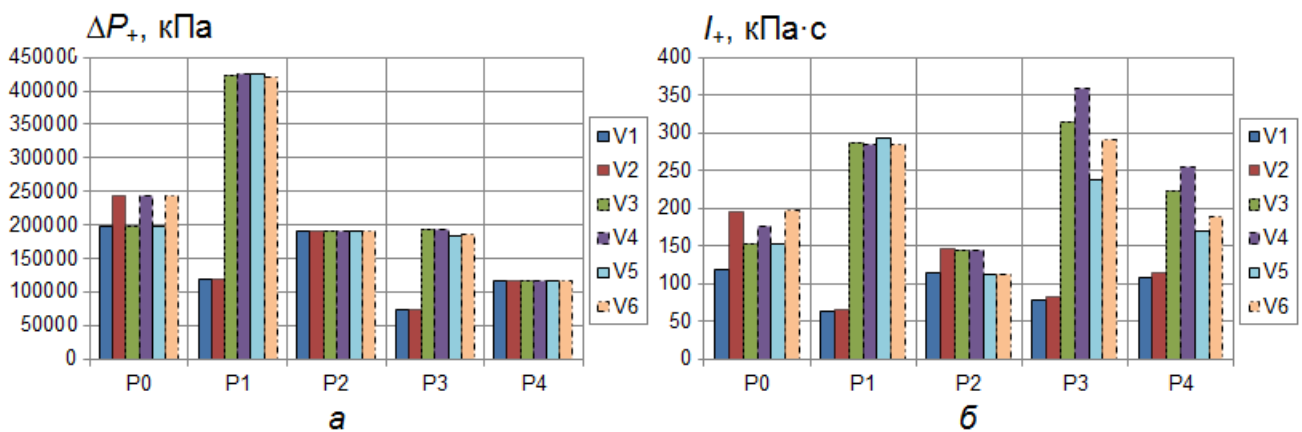


Рис. 7.82. Небезпечні параметри в контрольних точках P0–P4 для варіантів V1–V6: а – надлишковий тиск; б – імпульс

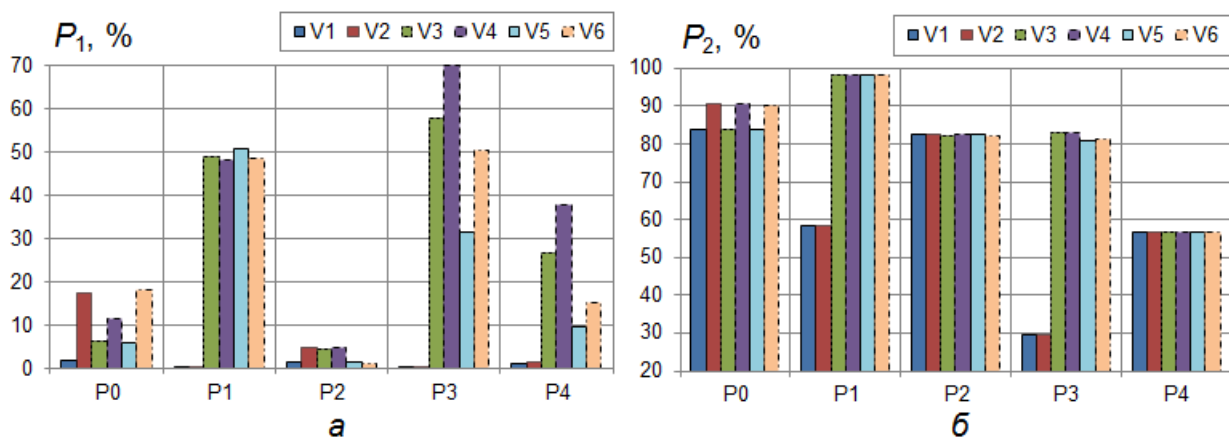


Рис. 7.83. Імовірність летального ураження (а) і розриву барабанних перетинок (б) у контрольних точках P0–P4 для варіантів V1–V6

Аналіз просторового розподілу умовної ймовірності ураження в обчислювальній області (рис. 7.84–7.86) дає змогу візуально спостерігати ускладнення картини течії, спричинене наявністю стінок тунелю (рис. 7.84, б, д; 7.85, б, д; 7.86, б), порівняно з відкритим простором (рис. 7.84, а, г; 7.85, а, е).

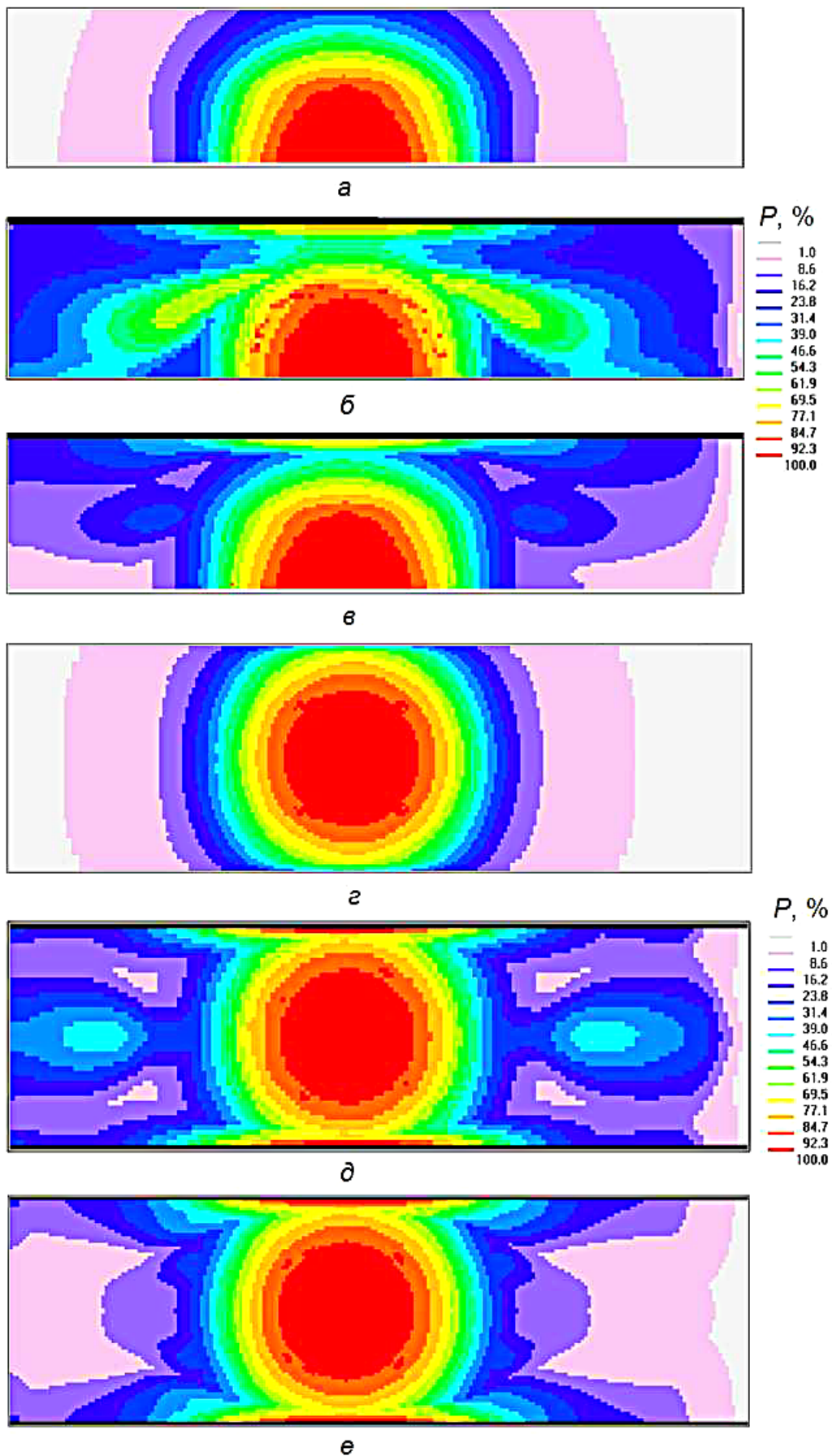


Рис. 7.84. Імовірність розриву барабаних перетинків у площинах YOZ для варіантів V1 (а), V3 (б) і V5 (в) і XOZ для варіантів V1 (г), V3 (д) і V5 (е)

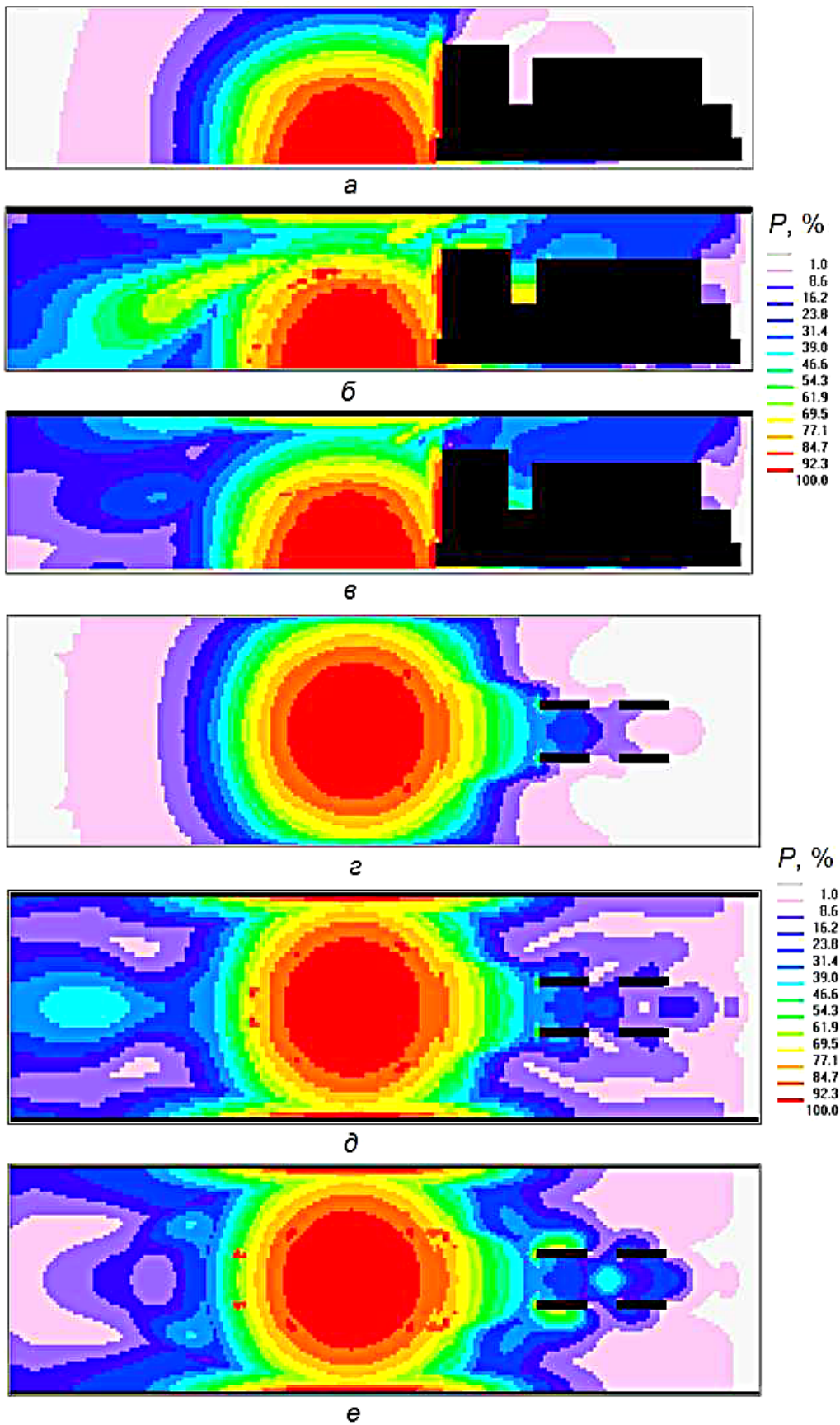


Рис. 7.85. Імовірність розриву барабаних перетинок у площинах YOZ для варіантів V2 (а), V4 (б) і V6 (в) і XOZ для варіантів V2 (г), V4 (д) і V6 (е)

Загромадження робочої зони електровозом призводить до додаткового збурення тиску внаслідок відбиття ударної хвилі від стінок локомотива в площинах YOZ і XOZ (див. рис. 7.85). Такий вплив у площині XOY є незначним (див. рис. 7.86). Тунель з прямокутною стелею зазнає меншого ударно-імпульсного навантаження у випадках шахти без локомотива та з локомотивом порівняно з тунелем з круглим варіантом стелі без локомотива та з локомотивом, що можна пояснити більшим розвантаженням у верхній частині тунелю.

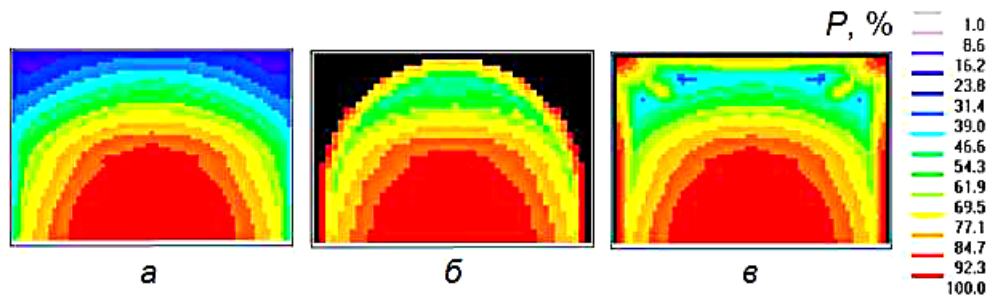


Рис. 7.86. Імовірність ураження в площині XOY для варіантів: а – V1; б – V3; в – V5

Наявність стінок збільшує площу S_{50} , де ймовірність ураження набирає небезпечних значень (понад 50 %) (рис. 7.87), особливо для тунелю з круглою стелею. Наявність електровоза несуттєво змінює значення цього параметра, що може свідчити про перерозподіл цієї небезпечної зони вздовж тунелю.

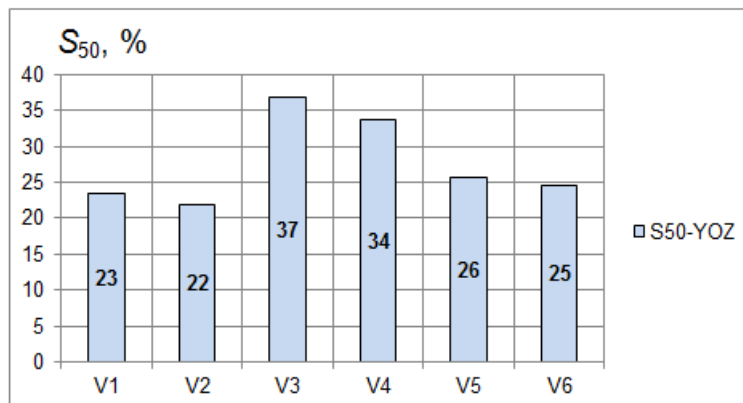


Рис. 7.87. Відносна площа S_{50} небезпечної зони в площині YOZ для варіантів V1–V6

Для здійснення порівняльного аналізу різних варіантів організації видобутку копалин у шахті було використано методологію ймовірнісного оцінювання ураження персоналу в зоні аварійного викиду хмари вибухової газоподібної хімічної речовини (водню). Під час аналізу розглядалися умови відкритого або закритого (тунельного) типу актуального простору, а також наявність (відсутність) загромадження простору акумуляторним

електровозом. Виявлено зони найбільш небезпечного знаходження людини в зоні аварії. Для визначення факторів негативного впливу на людину використано розроблену тривимірну математичну модель вибуху хмари воднево-повітряної газової суміші, що утворилася внаслідок випадкового викиду водню з тріщини в підніжжі шахтного штреку. Отримані результати можуть використовувати експерти з безпеки для розроблення заходів щодо зменшення ризику таких аварій на шахті та для аналізу ефективності їх використання.

7.6. Математичне моделювання наслідків впливу вибуху об'ємного шлангового заряду на рослинний покрив

Одним із засобів локалізації лісових пожеж [11] є створення мінералізованих смуг за допомогою зарядів об'ємного вибуху [285].

Цей спосіб є відносно простим у застосуванні, має низьку ціну й високу ефективність, особливо за відсутності поблизу засобів гасіння. З огляду на те, що зі збільшенням ширини мінералізованої смуги підвищується її ефективність, потрібно розв'язувати задачу про оптимальний розподіл зарядів для створення суцільних широких смуг. Збільшенню ширини мінералізованої смуги сприяє збільшення діаметра оболонки шлангового заряду, але при цьому збільшуються матеріальні витрати на паливо й матеріал оболонки заряду, знижується продуктивність інженерної техніки через обмежену швидкість наповнення оболонки шлангового заряду. Звідси постає актуальна проблема визначення габаритів заряду, розв'язання якої проведемо на основі розробленої моделі миттєвого вибуху (підрозд. 2.1.1). Щоб урахувати наявність у просторі рослин під час руху вибухової ударної хвилі, застосуємо підхід Гришина [285]. Ураховувався вплив сили тяжіння. Повна система рівнянь (2.1)–(2.8) зазнає змін: у правій частині диференціальних рівнянь, що відповідають законам збереження імпульсу, виникають члени, які враховують вплив фітоценозу: $-k\rho q_i \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$, де q_i – відповідна проекція вектора швидкості потоку на осі OX, OY, OZ (u, v, w), ρ – густина, k – коефіцієнт опору середовища, а теплофізичні властивості компонентів суміші розраховуються шляхом усереднення.

Під час моделювання вибуху об'ємного шлангового заряду в смузі лісу вісь заряду в розрахунковій області знаходилася на середині висоти лісу $H_{\text{лісу}} = 3$ м, тобто $H_{\text{зар}} = H_{\text{лісу}}/2$ (рис. 7.88).

Діаметр заряду був таким: $d = 0,9$ м. Габарити актуального простору мали такі значення: $H_x = 5$ м, $H_y = 9$ м, $H_z = 19$ м, що дискретизувалися 25, 45 і 95 січними площинами відповідно. Уважалось, що фітоценоз утворюється молодим сосновим лісом (заштрихована область на рис. 7.88), для якого коефіцієнт опору середовища $k = 0,7$ (поширення вибухової ударної хвилі простором відбувається при $k = 0$). Динаміка

розширення продуктів детонації розглядалася на основі моделі «фізичного» вибуху. Уважалось, що спочатку в оболонці продукти горіння мають такі детонаційні значення: тиск $P_d \approx 11 \cdot 10^5$ Па, температура $T_d = 2842$ К, коефіцієнт адіабати $\gamma_d = 1,278$, густина $\rho_d = 1,32$ кг/м³ і молярна маса $\mu = 28,36 \cdot 10^{-3}$ кг/моль, тоді як в інших газових комірках простору взято параметри повітря з температурою $T_c = 293$ К, тиском $P_c = 101325$ Па, коефіцієнтом адіабати $\gamma_c = 1,4$, швидкістю вітру $q = 3$ м/с.

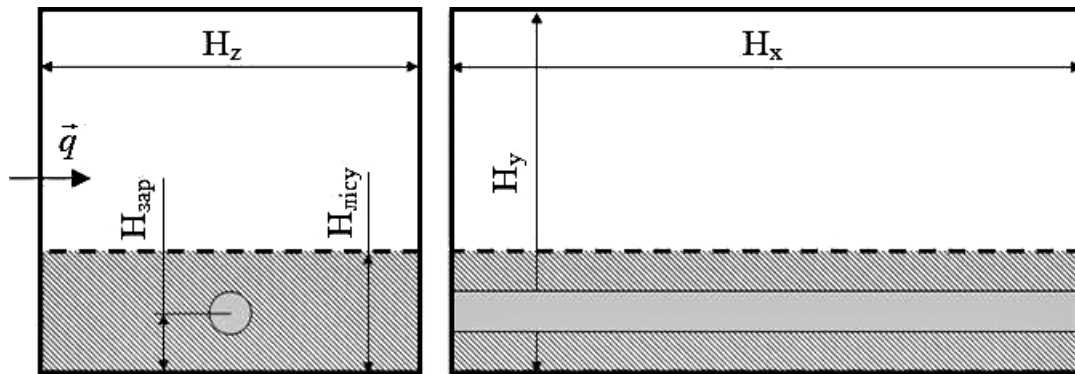


Рис. 7.88. Схема розташування об'ємного шлангового заряду в смузі лісового масиву

Моделювання показало, що далекобійність вибухової хвилі об'ємного шлангового заряду з габаритом 0,9 м дорівнює приблизно 2,5 м і 5 м для критичних перепадів тиску, які дорівнюють $1,2 \cdot 10^5$ Па і $0,4 \cdot 10^5$ Па відповідно (рис. 7.89). Під критичним перепадом тиску розуміють тиск, у разі перевищення якого забезпечується здування тонких хвоїнок і гілочок. Слід зазначити, що у фронті ударної хвилі стрибок тиску вдвічі перевищує розрахунковий. Отриманий результат показує, що при такому діаметрі заряду утворюється мінералізована смуга завширшки 5...10 м у молодому сосновому лісі заввишки 3 м.

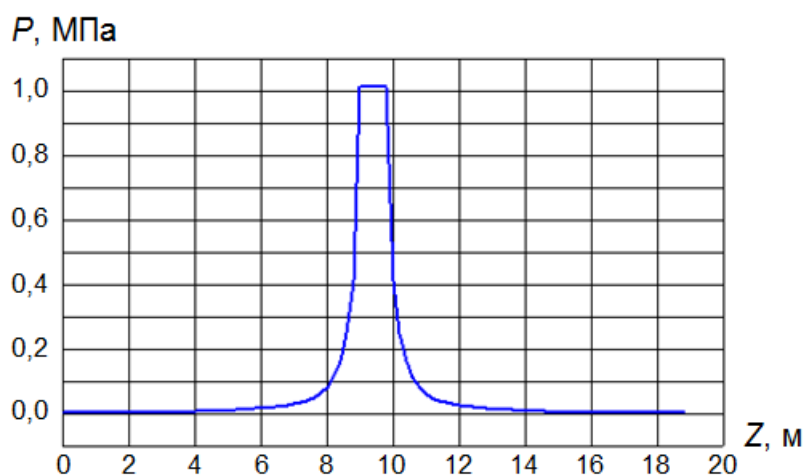


Рис. 7.89. Розподіл надлишкового тиску в поперечному перерізі під час вибуху шлангового заряду діаметром 0,9 м

Математичне моделювання ударного впливу на рослинний покрив проведено відповідно до схеми (рис. 7.90, а), де застосовувалося два паралельно розташованих шлангових заряди 1. Уважалося, що середня висота рослинного покриву $2 h = 0,15$ м. У розрахункових комірках, що моделюють опір цього шару, коефіцієнт опору взято таким: $k = 0,9$. У проведеній серії розрахунків змінювалися відстані між оболонками та їх діаметр d .

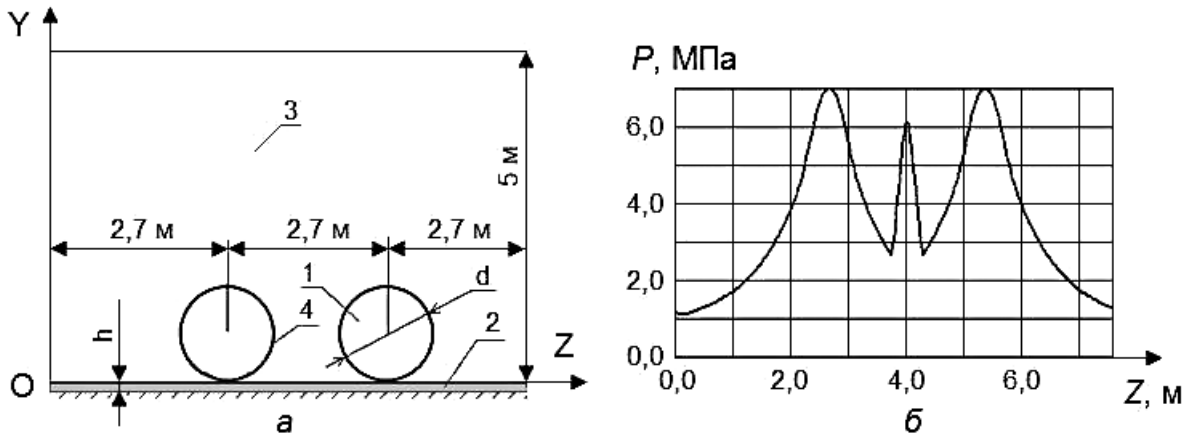


Рис. 7.90. Карта розташування об'ємних шлангових зарядів (а) і розподіл надлишкового тиску (б) у площині YOZ

Під час числового моделювання визначено, що на рослинний покрив заданих параметрів впливає ударна хвиля з надлишком тиску за її фронтом понад $1,2 \cdot 10^5$ Па на смузі завширшки 8 м.

Далекобійність вибухової ударної хвилі збільшується внаслідок її відбиття від землі і взаємодії вибухових ударних хвиль, які поширюються зустрічними курсами в напрямках від епіцентрів пари зарядів (рис. 7.91).

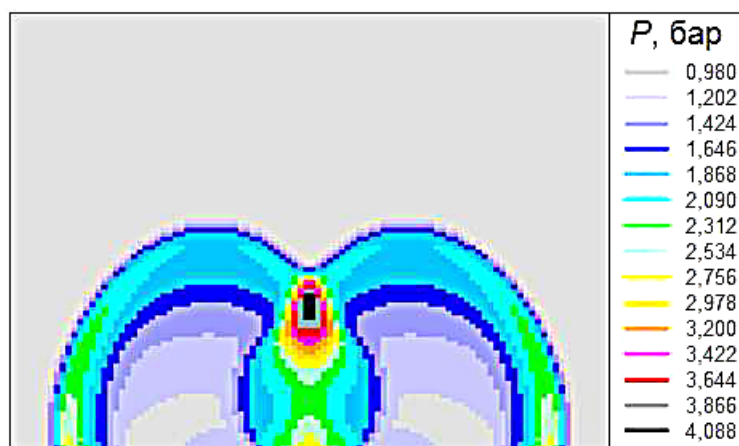


Рис. 7.91. Розподіл надлишкового тиску в площині YOZ через 0,0025 с після вибуху

Оскільки під час вибуху двох зарядів необхідно добитися не тільки зриву рослинного покриву, але й викиду його за межі області сформованої

мінералізованої смуги, відстань між зарядами має бути такою, щоб унаслідок взаємодії продуктів вибуху, що розлітаються, динаміка розльоту перебудувалася на таку, як при півсферичному однозарядному вибуху: при діаметрі обох шлангових зарядів $d = 0,9$ м ця умова виконується, якщо відстань між осями двох шлангових зарядів не перевищує 2,7 м.

Слід зазначити, що математична модель, яка застосовується, дає можливість розрахувати ударну дію виходячи з енергії вибуху шлангового заряду, а отже, оптимізувати діаметр зарядів і відстань між ними. Але може бути випадок, коли в розрахованому діаметрі об'ємного шлангового заряду не може поширюватися детонація, що самопідтримується. У цьому випадку критичний габарит визначає діаметр об'ємного шлангового заряду газоповітряної вибухонебезпечної суміші (табл. 7.14).

Таблиця 7.14

Критичний діаметр заряду стехіометричних газоповітряних сумішей

Паливо	Розмір детонаційної комірки λ , мм	Критичний діаметр $D_{кр}$, м
H ₂	15,9±2	0,32
CH ₄	500±80	10
C ₂ H ₂	13,6±1,6	0,27
C ₂ H ₄	39±6	0,78
C ₂ H ₆	88±14	1,76
C ₃ H ₈	72±12	1,44
C ₄ H ₁₀	85	1,7

Стійка верхова пожежа виникає внаслідок зародження низової пожежі [286]. Установлено, що під час поширення низової пожежі вгору схилом вона часто переходить у верхову. Виходячи з характеру поширення верхової пожежі, техніка гасіння з використанням вибухової ударної хвилі полягає в генерації в кронах дерев лісу простору без дрібного займистого матеріалу. Ці області у вигляді смуг необхідно чергувати із певним зміщенням із мінералізованими смугами (рис. 7.92), тобто один або кілька шлангових зарядів необхідно розташовувати на земній поверхні на підстилці лісу з метою утворення мінералізованої смуги для відсікання низової пожежі, а локалізацію верхової пожежі треба забезпечувати вибухом одного або декількох зарядів, розташованих поверх крон дерев.

7.7. Моделювання області обриву лісогорючих матеріалів, що формується під час вибуху паливоповітряних зарядів у лісовому фітоценозі

Проведемо числове оцінювання розмірів області обриву лісового горючого матеріалу, яка утворюється після вибуху паливоповітряних

шлангових зарядів різних діаметрів при їх розташуванні поверх крон дерев [11]. Таким чином, розрахунок дає змогу визначити область, де стрибок тиску в ударній хвилі під час поширення в лісовому фітоценозі перевищує критичне значення. Під критичним стрибком тиску розуміють експериментально встановлений надлишковий тиск, при якому ступінь обриву лісогорючих матеріалів є більшим за 75 %. За даними роботи [285], ця величина для соснових молодих лісів є такою: $\Delta P = 0,4 \cdot 10^5$ Па.

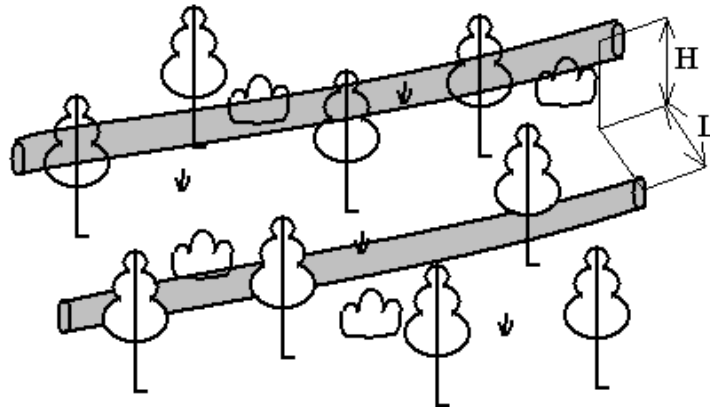


Рис. 7.92. Схема гасіння лісової пожежі, що має верхову й низову стадії:
L – дистанція між зарядами вздовж землі; H – висота розташування заряду для локалізації верхової пожежі

У разі довільного розміщення заряду поверх дерев одні ділянки шлангового заряду розташовуються над кронами дерев, а інші – між кронами. Усреднюючи розташування заряду в лісовому фітоценозі, візьмемо розрахункову схему, зображену на рис. 7.93. Заряд діаметром d є наполовину заглибленим у крони дерев відносно середньої їх висоти, різниця між висотами верхніх і нижніх лісових крон дорівнює h , а відстань між землею й нижніми кронами становить H . За результатами оцінювання далекобійності вибухової дії, при такому розташуванні заряду необхідно встановити область перевищення критичного тиску вздовж лінії нижньої кромки дерев. Зрозуміло, що ширина смуги обриву лісового горючого матеріалу по всій висоті кромки дерев буде визначатися не тільки діаметром заряду, а й середньою відстанню між верхніми й нижніми кронами h , а висота H впливатиме на щільність розподілу обірваного лісового горючого матеріалу на земній поверхні.

У роботі [271] встановлено, що під час циліндричного вибуху конденсованих вибухових речовин закон падіння тиску після стрибка тиску у фронті хвилі $\Delta P \approx 10^6$ Па має такий вигляд:

$$\Delta P \sim r^{-3/2}, \quad (7.3)$$

де r – радіус від епіцентру вибуху до ударної хвилі.

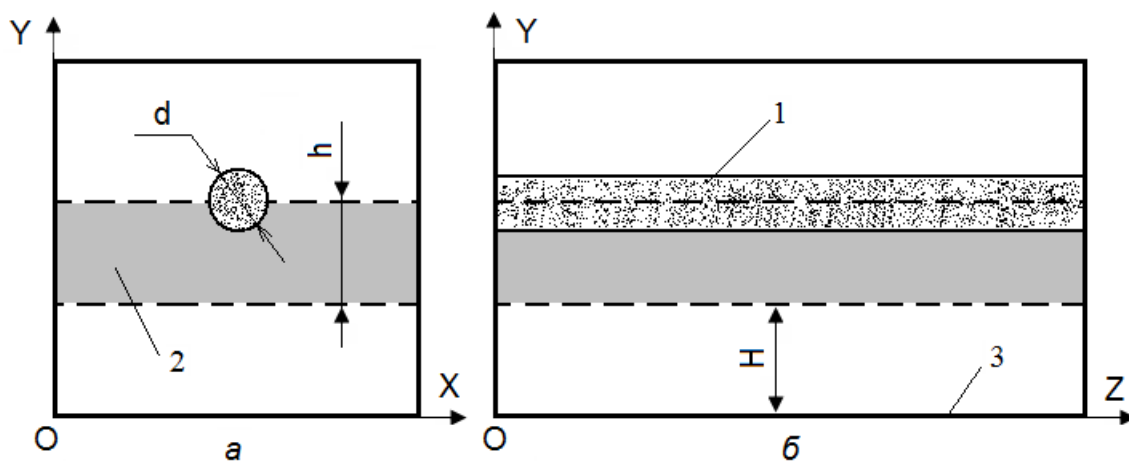


Рис. 7.93. Карта розташування об'єктів у поперечній (а) і поздовжній (б) площинах: 1 – паливоповітряний шланговий заряд; 2 – область крон дерев; 3 – земна поверхня

Формулу (7.3) не можна застосовувати для розрахунку області обриву лісового горючого матеріалу, тому що внаслідок детонації паливоповітряних сумішей середній тиск продуктів детонації становить близько 10^6 Па.

У роботі [287] доведено наявність закону подібності для параметрів вибухових ударних хвиль, породжених детонацією. На базі закону подібності можна отримати залежність НТ від відстані від епіцентру вибуху газоповітряної суміші [287]:

$$\bar{p} = 0,285 \exp\left(0,52(\ln(\bar{R}))^2\right) / \bar{R}, \quad (7.4)$$

де $\bar{p} = \Delta P / P_0$ – безрозмірний надлишковий тиск, P_0 – початковий тиск в атмосфері, $\bar{R} = R / R_0$ – безрозмірна відстань, R – відстань від епіцентру вибуху, $R_0 = (E_0 / P_0)^{1/3}$, $E_0 = mH_u$ – енергія вибухового перетворення, H_u – питома теплота вибуху паливоповітряної суміші, m – маса газової хмари.

Автори [287] указують, що несферична форма хмари й відмінності в складі суміші призводять до відхилення реального надлишкового тиску від розрахункового на 10...15 %.

Формулу (7.4) можна застосовувати для ударної хвилі, що поширюється в повітрі. З огляду на те, що лісовий фітоценоз є середовищем опору течії газового потоку, співвідношення (7.4) дає змогу приблизно оцінити максимальний розмір простору обриву лісового горючого матеріалу. Точніше його можна прогнозувати на основі CFD-моделювання [9] з використанням інтерактивного програмного засобу FIRE [68]. Початкові параметри детонаційних продуктів горіння в оболонці об'ємного шлангового заряду задавалися відповідно до моделі миттєвого «фізичного» вибуху і для газоповітряної суміші й були такими:

$P_{вуб} = 9,5 \cdot 10^5$ Па, $T_{вуб} = 2840$ К. У розрахунках задавали діаметр заряду $d = 1,3$ м, висоти $h = 3$ м і $H = 4$ м, швидкість вітру в поперечному до заряду напрямку 5 м/с, коефіцієнт опору приземного шару атмосфери $k = 0,7$.

Просторовий розподіл відносної масової концентрації продуктів горіння після 0,3 с від моменту вибуху зображено на рис. 7.94. Видно, що бічний вітер спричиняє асиметрію в розподілі концентрації продуктів реакції, але його вплив на формування поля надлишкового тиску є надзвичайно малим.

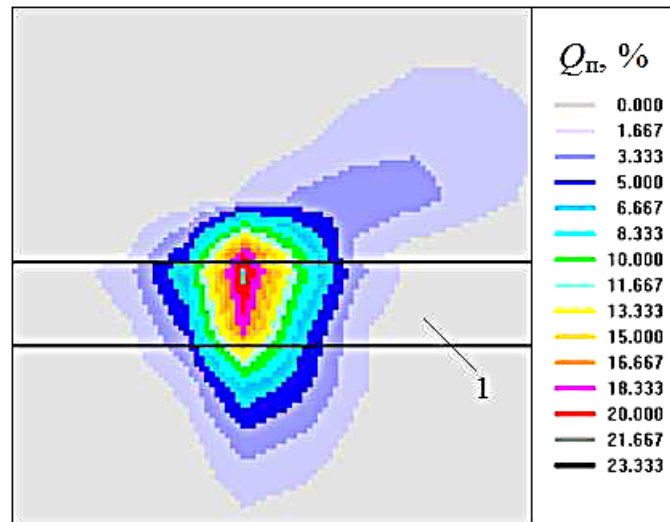


Рис. 7.94. Поле концентрації продуктів детонації (1 – область крон дерев)

Розподіл максимального тиску вздовж нижньої смуги, що моделює нижню кромку дерев, показано на рис. 7.95.

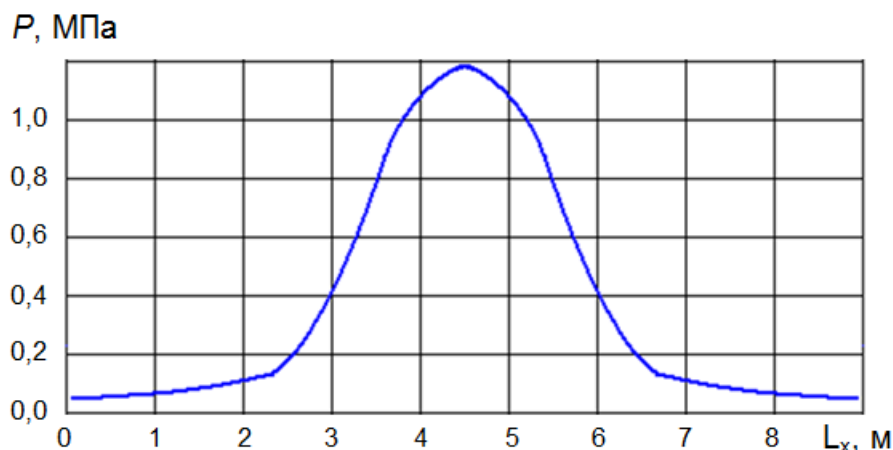


Рис. 7.95. Розподіл максимального надлишкового тиску вздовж нижньої кромки крон дерев

Використавши величину критичного тиску й результати розрахунків, визначили, що ширина смуги обриву лісового горючого матеріалу в цьому випадку становить близько 3 м. Слід зазначити, що за аналітичною

формулою (7.4) ширина смуги становить 5,5 м від епіцентру вибуху, що є завищеним приблизно на 1,2 м значенням порівняно з результатами більш точного CFD-моделювання. Таким чином, використання аналітичної залежності призводить до суттєвих похибок в оцінюванні області обриву лісового горючого матеріалу через неврахування зростання опору середовища.

7.8. Числовий аналіз ураження персоналу тепловим випромінюванням

Одним із найбільш небезпечних видів техногенної аварії є неконтрольоване горіння газоповітряної суміші з утворенням високотемпературних продуктів горіння [335], які є джерелом теплового випромінювання в навколишнє середовище (рис. 7.96).

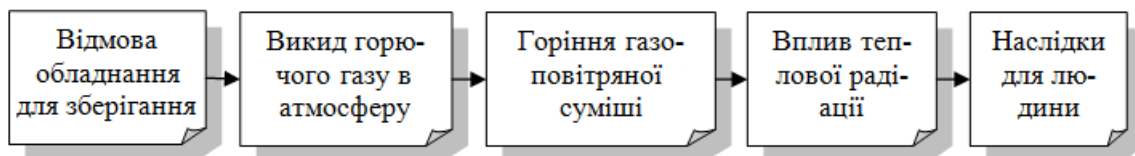


Рис. 7.96. Схема утворення теплового випромінювання

Таким чином, надлишок високої температури порівняно зі звичайною температурою навколишнього середовища характеризує відхилення від нормального стану повітря і є небезпечним параметром [246]. Експозиція обслугового персоналу промислового об'єкта потоку теплового випромінювання певної густини формує фактор негативного впливу – дозу теплового випромінювання (рис. 7.97). Перевищення граничних значень дози призводить до соціальних наслідків – опіків різного ступеня тяжкості і навіть до летального результату.

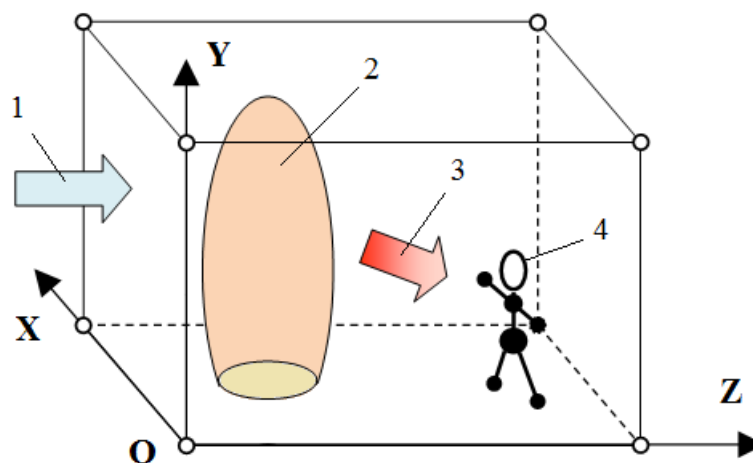


Рис. 7.97. Схема моделі теплового впливу на людину: 1 – потік повітря; 2 – джерело теплового випромінювання; 3 – тепловий потік; 4 – людина

Під час аналізу й прогнозування наслідків техногенної аварії визначається умовна ймовірність ураження персоналу, який може зазнати впливу теплової радіації, на основі математичного моделювання розсіювання високотемпературних продуктів горіння домішки в атмосфері [22, 33]. Отримані за результатами моделювання просторово-часові поля небезпечного параметра – температури газової суміші продуктів горіння з повітрям – забезпечують можливість визначити основні фактори ураження – густину потоку теплового випромінювання від джерела до приймача, теплову дозу й умовну ймовірність ураження P обслуговуваного персоналу (рис. 7.98) [51, 54].

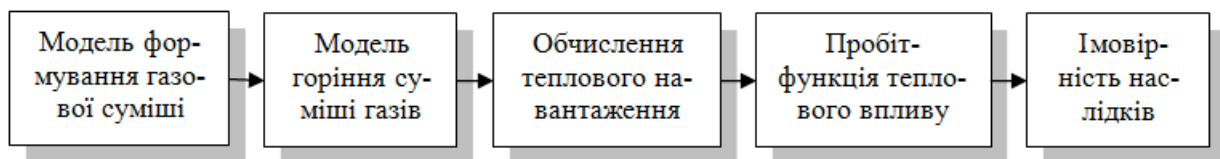


Рис. 7.98. Структурна схема пробіт-аналізу теплового впливу

Для розв'язання системи фундаментальних рівнянь газової динаміки для суміші, доповненої законами збереження маси домішок в інтегральній формі, використовується явний скінченно-різницевий метод Годунова [262]. Математичну модель реалізовано у вигляді підсистеми дослідних програмних комплексів Fire [68] і Thermal Radiation Safety [73].

З метою визначення умовної ймовірності ураження персоналу, що перебуває під впливом уражального фактора, із урахуванням обчисленого значення пробіт-функції можна застосувати узагальнений кусково-кубічний ермітовий сплайн [248] (безперервне подання таблиці значень ймовірності залежно від пробіт-функції [118, 313]), який було реалізовано у вигляді комп'ютерної підсистеми ProbitSafety [70] для автоматизації обчислювального процесу.

Розглянемо струминне витікання високотемпературних (3450 K) продуктів горіння водню із отвору, який виник унаслідок часткового руйнування обладнання (рис. 7.99).

Пляма витікання в атмосферу високотемпературного газу з отвору мала форму круга радіусом $R = 0,5$ м з координатами центра $X_c = 7,5$ м, $Z_c = 2,5$ м у розрахунковому просторі з габаритами $15,0 \times 9,0 \times 15,0$ м і варіантом за кількістю комірок уздовж координатних осей $15 \times 9 \times 15$. Швидкість вітру дорівнювала 0 м/с.

Високотемпературні продукти горіння водню із заданою інтенсивністю викидаються з отвору в атмосферу, змішуються з повітрям і стають джерелом теплового потоку, який впливає на навколишнє середовище. Уважається, що викид гарячого газу починається з моменту часу $t_1 = 0$ с і примусово припиняється після $t_2 = 5$ с.

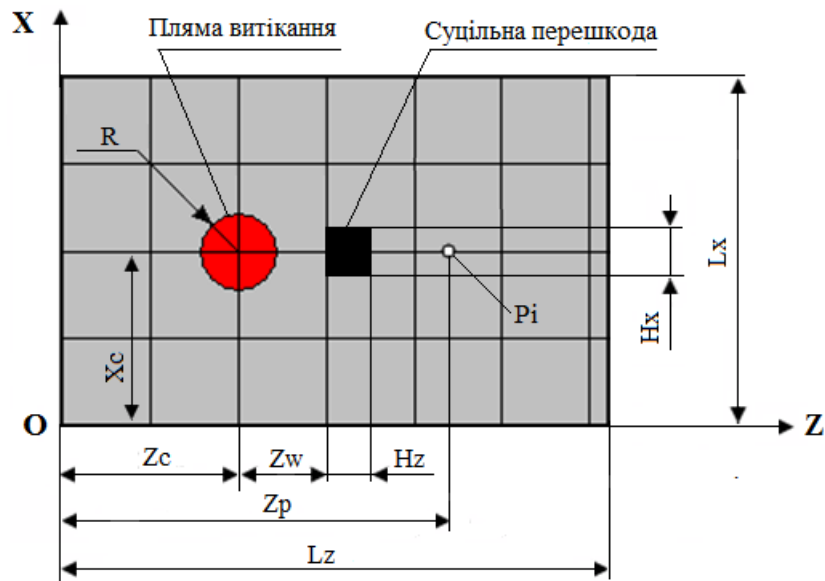


Рис. 7.99. Карта розташування об'єктів

Під час руху газової суміші форма й розміри високотемпературної хмари істотно змінюються. Зона максимальних температур має місце в момент часу $t_2 = 5$ с (рис. 7.100), після якого викид припиняється (у відповідних комірках отвору виставляються граничні умови «непротікання») і хмара, втрачаючи максимальну концентрацію через розсіювання, починає поступово зникати. Розподіли умовної ймовірності летального ураження людини внаслідок впливу теплового випромінювання в контрольних точках P_i (табл. 7.15) зображено на рис. 7.101. Очевидно, що з віддаленням від епіцентру теплового випромінювання максимальна умовна ймовірність летального наслідку для людини в контрольній точці поступово зменшується.

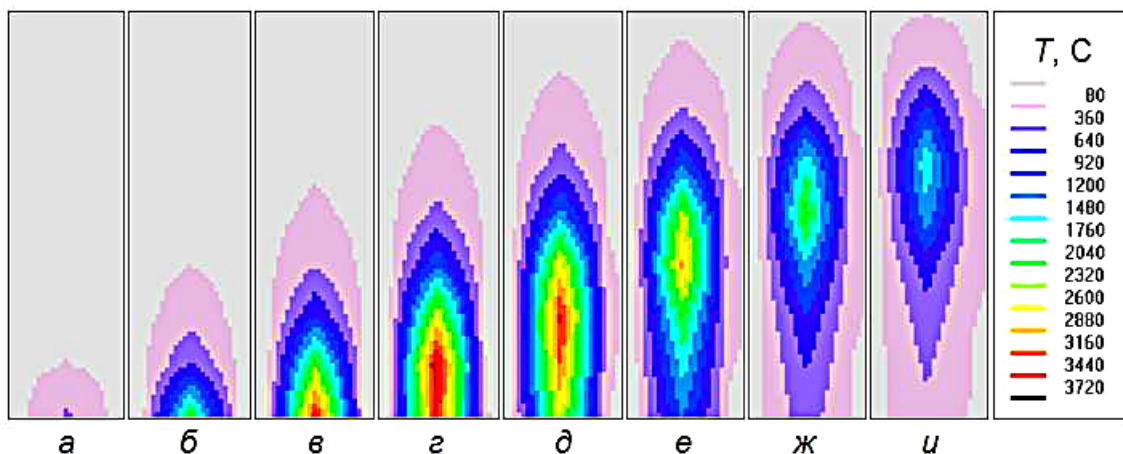


Рис. 7.100. Поля температури газової суміші в площині YOZ: а–и – у моменти часу 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15 с відповідно

Таблиця 7.15

Розташування контрольних точок

Відстань, м	Контрольні точки				
	P1	P2	P3	P4	P5
Zp	5,0	6,0	7,0	8,0	9,0

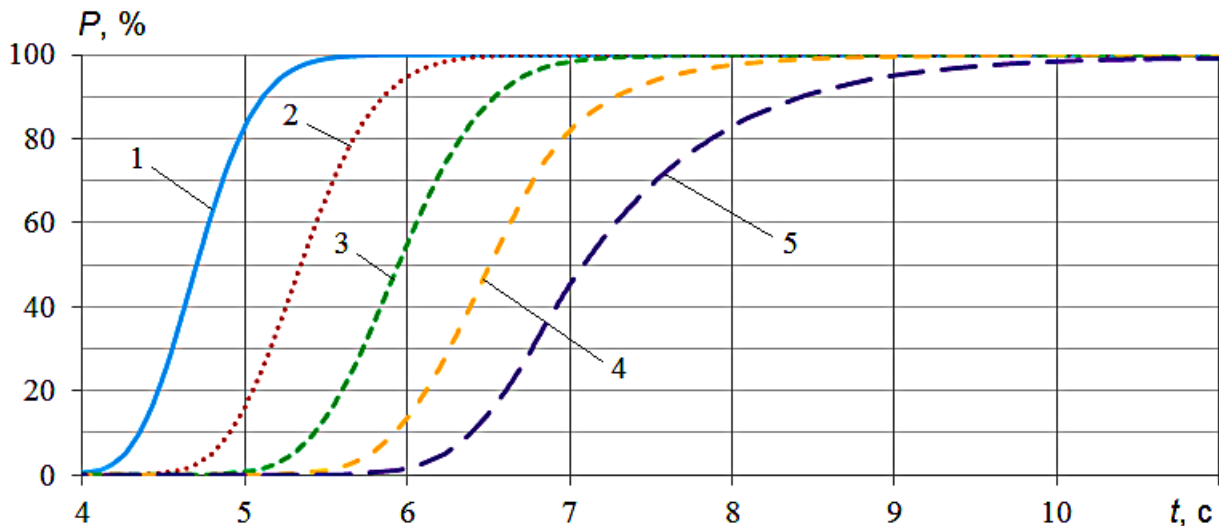


Рис. 7.101. Змінення ймовірності ураження тепловим потоком без перешкоди в контрольних точках: 1–5 – точки P1–P5 відповідно

На відстані $Z_w = 0$ м від центра отвору витікання струменя високотемпературного газу було розташовано суцільну, непроникну для теплових і газових потоків перешкоду кубічної форми з габаритами $1,0 \times 1,0 \times 1,0$ м (див. рис. 7.99). Для кожної контрольної точки під час розрахунку складалася колекція комірок, які є «невидимими» з відповідної контрольної точки (рис. 7.102). Ці комірки виключалися під час інтегрування по простору сумарного теплового потоку від комірок-джерел до комірки-приймача у відповідній контрольній точці.

У варіанті без суцільної перешкоди ймовірність летального ураження людини зі збільшенням відстані від епіцентру випромінювання поступово зменшується (див. рис. 7.101). Установлення перешкоди кардинально змінює безпековий стан у контрольних точках (рис. 7.103). Точка P1, найнебезпечніша у варіанті без перешкоди, стає навпаки найбільш безпечною внаслідок максимальної захищеності від теплових потоків завдяки перешкоді. Зі збільшенням відстані від перешкоди її корисна дія зменшується, оскільки відкривається доступ для більшої кількості джерел теплового випромінювання, але й інтенсивність випромінювання знижується, як і в першому варіанті без перешкоди (див. рис. 7.101, 7.103).

Отриманий розподіл ймовірності ураження в контрольних точках свідчить про необхідність урахувувати вплив непроникних для теплових потоків перешкод під час оцінювання безпекового стану на об'єкті, де має місце викид високотемпературних газів.

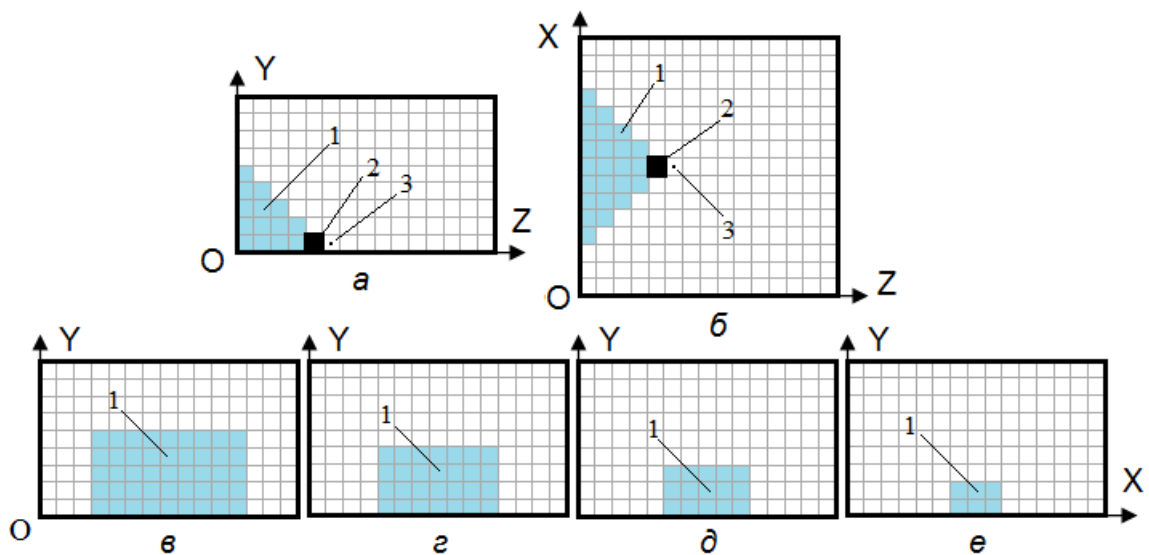


Рис. 7.102. Локалізація «невидимих» комірок: 1 – «невидима зона»; 2 – перешкода; 3 – контрольна точка P1, а – у площині YOZ, б – у площині XOZ біля землі, в–е – у площині YOX на відстані Z = 0, 1, 2, 3 м відповідно

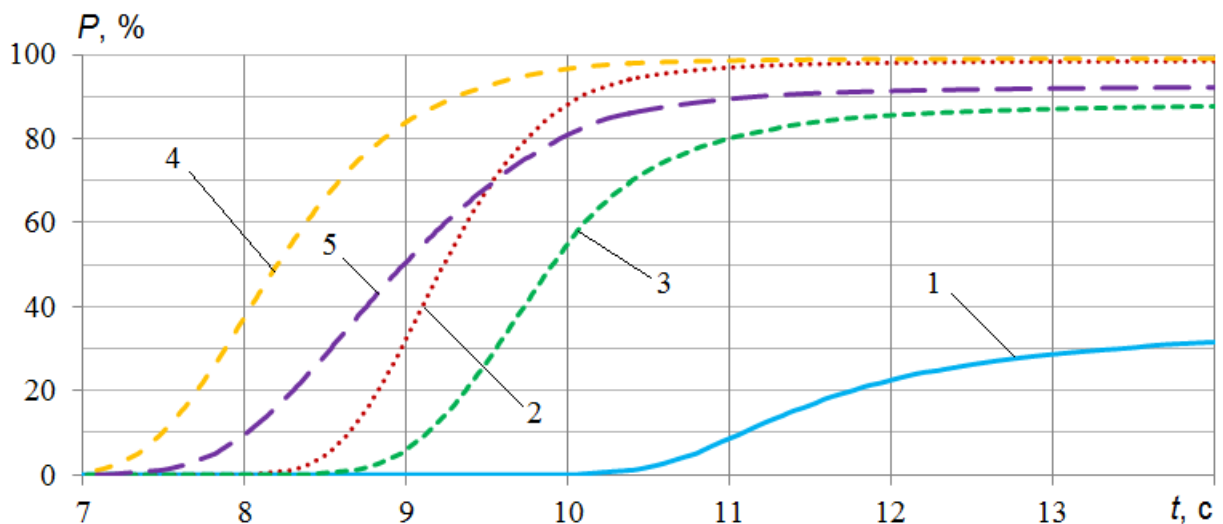


Рис. 7.103. Змінення ймовірності ураження тепловим потоком з перешкодою в контрольних точках (1–5 – точки P1–P5 відповідно)

Висновки до розділу 7

У розд. 7 з використанням розробленого класу ефективних тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними граничними умовами, що різняться розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення й руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери зі складним рельєфом і в системах промислової аеродинаміки, виконано аналіз стану збуреного повітря техногенного об'єкта й прогнозування наслідків впливу факторів ураження на навколишнє

середовище з метою пошуку раціональних засобів захисту.

А. На основі розроблених моделей розподілу тиску газоповітряної суміші, у яких, на відміну від наявних, використовуються нелокальні початкові умови, що дає змогу моделювати вибух газоповітряної суміші для оцінювання наслідків впливу хвилі тиску на навколишнє середовище та ефективність засобів захисту від її дії, було виконано таке:

1. Досліджено вивільнення стисненого водню з циліндра для його зберігання на станції заправлення воднем транспортних засобів з утворенням воднево-повітряної суміші. З використанням моделі «хімічного» вибуху отримано баричне й термічне збурення повітря в області займистості водневої хмари. Проведено детермінований аналіз надлишкових параметрів суміші в контрольних точках поблизу конструкцій навколишніх будівель залежно від дальності взаємного розташування заправної станції й будівель. Досліджено ефективність використання різних засобів захисту навколишнього середовища (обвалування різного типу епіцентру вибуху, суцільна стіна певної висоти поблизу будівель) від наслідків баричного впливу вибухової хвилі тиску. Виявлено, що найбільш ефективними засобами захисту споруд від впливу вибухової ударної хвилі є відбивні стіни в безпосередній близькості до забудови й віднесення вибухонебезпечних об'єктів далі від будівель.

2. Розглянуто вибух півсферичної хмари водню, що утворюється внаслідок миттєвого руйнування балона високого тиску на заправній станції. Проведено порівняльний аналіз ефективності засобів захисту від наслідків впливу надлишкового тиску ударної хвилі (суцільних стін різної конфігурації, пакета перфорованих стін, наборів стовпчиків двох шаблонів, заглиблень області вибуху, розвантажувальних порожнин під стіною і в заглибленій зоні вибуху). Виявлено, що найбільш ефективними засобами захисту є перешкоди у вигляді суцільної Т-подібної стіни, пакета із декількох рядів стовпчиків, пакета із двох перфорованих стін у комбінації із заглибленням зони вибуху. Для зниження навантаження на поверхні захисних перешкод рекомендовано розташовувати розвантажувальні канали під ними. Застосування таких захисних перешкод дає можливість підвищити рівень безпеки функціонування обслуговуваного персоналу й обладнання техногенного об'єкта, де використовується водень.

3. Виконано порівняльний аналіз ефективності захисної споруди (стіни), розташованої на різній відстані від епіцентру вибуху. Одночасно проведено аналіз розподілу максимального надлишкового тиску на поверхні захисної стіни з боку вибуху з метою визначення безпечного матеріалу для виготовлення стіни. Наведено рекомендації щодо найбільш ефективного розташування захисної стіни та вибору матеріалу, з якого її слід виготовляти, з урахуванням безпеки персоналу та здатності стіни витримати навантаження від надлишкового тиску без руйнування.

4. Проведено оцінювання стану безпеки персоналу, захищеного прямокутною суцільною стіною, на станції заправлення транспорту

воднем. Визначено тренди поводження умовної ймовірності ураження людини для серій захисних споруд різних габаритів з метою пошуку їх оптимального співвідношення. Визначено лінійний тренд імовірності ураження для серії цих споруд із певним оптимальним співвідношенням габаритів, який можуть застосовувати фахівці з безпеки на етапі проектування захисної стіни із заданим рівнем імовірності ураження.

5. Виконано числове моделювання вибуху випадково вивільненого водню на станції заправлення транспортних засобів з метою оцінювання безпечної товщини захисної стіни. Для отримання розподілу максимального надлишкового тиску на поверхні стіни, яку встановлювали на різних відстанях від епіцентру вибуху, використовувалася тривимірна математична модель миттєвого вибуху газової суміші на основі рівнянь Ейлера, розв'язаних методом Годунова. Здійснено вибір відповідного конструкційного матеріалу для виготовлення стіни й числове оцінювання мінімальної товщини споруди, що задовольняє умову її згинальної міцності під дією аеродинамічної сили вибухових газів. Для визначення найгіршого можливого аварійного сценарію напружений стан під час згинання біля основи стіни оцінювався за допомогою розрахункової схеми консольної балки при припущенні, що максимальне силове поле надлишкового тиску впливає на стіну миттєво й одночасно.

6. Проведено числовий аналіз впливу вибухової хвилі на промислому майданчику з різними варіантами ландшафтного розташування робочого місця персоналу відносно епіцентру вибуху. Виявлено, що заглиблення або підйом робочого місця відносно горизонту епіцентру вибуху приводить до зниження ймовірності негативних наслідків впливу вибухової хвилі на організм людини.

7. Здійснено числовий аналіз наслідків водневого вибуху в тунелі шахти. Отримано поля ураження людини вибуховою хвилею і вплив на них форми поперечного перерізу шахтного тунелю, відкритого або закритого характеру розрахункового простору та загромождження тунелю акумуляторним електровозом.

8. Розглянуто використання ударно-імпульсного впливу вибуху газоповітряної суміші як засобу припинення поширення пожежі в лісі. Визначено оптимальний діаметр шлангового заряду залежно від необхідної енергії на 1 пог. м заряду й умови поширення детонації.

9. Проведено дослідження впливу надлишкового тиску вибухової хвилі від паливоповітряного шлангового заряду в разі його розташування поверх крон дерев лісу. Здійснено числове оцінювання ефективності способу локалізації пожеж вибухом паливоповітряних зарядів у лісовому фітоценозі.

Б. На основі розробленої нестационарної математичної моделі потрапляння газової домішки в актуальну область, у якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми:

1. Отримано розподіли збурення хімічного складу повітря навколо залізничної станції внаслідок випаровування з поверхні плями аварійного пролиття зрідженого ціанистого водню після руйнування транспортної цистерни. Виявлено зони токсичного ураження персоналу станції, визначено вплив форми плями пролиття, швидкості вітру й загромождження простору будівлею станції на масштаби наслідків аварії.

2. Проведено оцінювання наслідків забруднення навколишнього середовища під час аварійного струминного витікання хлору з газопроводу. Виявлено, що зі збільшенням концентрації хлору в струмені збільшуються масштаби токсичного отруєння населення й персоналу об'єкта.

В. На основі розробленої нестационарної математичної моделі теплового випромінювання газової домішки в актуальній області отримано розподіли наслідків ураження людини тепловим потоком, який випромінюється струменем високотемпературних продуктів горіння водню, залежно від відстані від епіцентру випромінювання. Виявлено вплив захисного непроникного твердого об'єкта на перерозподіл полів ураження людини.

ВИСНОВКИ

Нові науково обґрунтовані результати, які отримано в монографії, розв'язують актуальну науково-прикладну проблему, яка полягає в розробленні математичних моделей, методології та програмних засобів комп'ютерної реалізації системної моделі аналізу руху багатокомпонентної газової суміші біля техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень повітря на навколишнє середовище і пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

Отримано нові наукові й практичні результати дослідження, що мають істотні переваги порівняно з наявними рішеннями, сформульовано висновки, які полягають у такому.

А. Проведено аналіз сучасного стану теорії та практики моделювання процесів збурення приземного шару атмосферного повітря техногенних об'єктів, яке відбувається в умовах аварійного (або контрольованого) викиду газових домішок, та його впливу на навколишнє середовище. На основі аналізу виявлено науково-прикладну проблему, мету й завдання дослідження, сформовано системну концепцію й підходи до виконання поставлених завдань, що дало змогу формалізувати процеси моделювання, аналізу й прогнозування стану повітря техногенних об'єктів в умовах впливу хімічно-складових, баричних і термічних збурень повітря та пошуку раціональних конструкцій захисних споруд для усунення або пом'якшення наслідків цих впливів.

Б. У роботі вперше розроблено новий клас ефективних тривимірних

математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними граничними умовами, що різняться розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення й руху багатокомпонентної газової суміші в приземному шарі атмосфери зі складним рельєфом і в системах промислової аеродинаміки і які, на відміну від наявних, базуються на запропонованому єдиному підході до моделювання актуальних процесів:

1. Уперше розроблено нестационарні математичні моделі розподілу тиску, у яких, на відміну від наявних, використовуються нелокальні початкові умови, що дає змогу моделювати такі сценарії баричного збурення повітря, як «фізичний» (вивільнення стисненого газу) і «хімічний» (миттєва хімічна реакція «брутто» в області займистості) вибух для оцінювання наслідків впливу хвилі тиску на навколишнє середовище та ефективність засобів захисту від її дії.

На основі програмних засобів комп'ютерної реалізації розробленої моделі було досліджено вивільнення стисненого водню з циліндра для його зберігання на станції заправлення воднем транспортних засобів з утворенням воднево-повітряної суміші. Після цього з використанням моделі «хімічного» вибуху отримано баричне й термічне збурення повітря в області займистості водневої хмари. Проведено детермінований аналіз надлишкових параметрів суміші в контрольних точках поблизу конструкцій навколишніх будівель залежно від дальності взаємного розташування заправної станції й будівель. Досліджено ефективність використання різних засобів захисту навколишнього середовища (обвалування різного типу епіцентру вибуху, суцільна стіна певної висоти поблизу будівель) від наслідків баричного впливу вибухової хвилі тиску. Також здійснено пошук раціональної конструкції споруди захисту персоналу заправної станції шляхом порівняльного аналізу ефективності споруд з огляду на пом'якшення ударно-імпульсного навантаження на людину в точці розміщення робочого місця. З використанням моделі здійснено також числовий аналіз наслідків водневого вибуху в тунелі шахти. Визначено поля ураження людини вибуховою хвилею і вплив на них форми поперечного перерізу шахтного тунелю, відкритого або закритого характеру розрахункового простору та загромождження тунелю акумуляторним електровозом.

2. Уперше розроблено нестационарну математичну модель руху хімічно активної газової суміші зі складними граничними умовами, у якій, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовується розрахункова схема «брутто»-взаємодії пального й кисню повітря.

На основі програмних засобів комп'ютерної реалізації розробленої математичної моделі отримано розподіли хімічно-складового, баричного й термічного збурення повітря під час дефлаграційного горіння воднево-повітряної суміші після викиду стисненого водню внаслідок руйнування

циліндра для його зберігання в гаражному приміщенні. Розроблено рекомендації щодо пом'якшення можливих наслідків впливів на людину й конструкції гаража. Також із застосуванням моделі виявлено основні умови переходу режиму горіння від дефлаграції до детонації воднево-кисневих і метанокисневих сумішей у детонаційній трубі.

3. Уперше розроблено нестационарну математичну модель руху хімічно активної газової суміші зі складними граничними умовами, у якій, на відміну від відомих, урахується наявність частинок пилу та дисперсних крапель рідини у формі додаткових джерельних членів у правих частинах рівнянь руху й енергії суміші.

На основі програмних засобів комп'ютерної реалізації розробленої моделі отримано розподіли тиску й температури після аварійного вибуху метаноповітряної суміші в шахтному тунелі. Виявлено значне зростання баричного й термічного збурення повітря при наявності вугільного пилу. Для пом'якшення наслідків впливу вибуху рекомендовано використовувати як захисний засіб завісу з дисперсних крапель води, випаровування й опір яких під час горіння, за результатами моделювання, знижує надлишкові параметри газоповітряної суміші в тунелі до безпечних значень.

4. Уперше розроблено нестационарну математичну модель потрапляння (відбору) газової домішки в актуальну область, у якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми.

На основі програмних засобів комп'ютерної реалізації розробленої математичної моделі отримано розподіли хімічно-складового збурення повітря навколо залізничної станції внаслідок випаровування з поверхні плями аварійного пролиття зрідженого ціанистого водню після руйнування транспортної цистерни. Виявлено зони токсичного ураження персоналу станції, вплив форми плями пролиття, швидкості вітру та загромождження простору будівлею станції на масштаби наслідків аварії. Також з використанням моделі досліджено процеси вентиляції гаражного приміщення з аварійним витоком водневого палива, рекомендовано найбільш ефективний режим роботи стандартного витяжного вентилятора й раціональну схему розміщення вентилятора з огляду на можливі наслідки баричного й термічного збурення повітря в гаражі внаслідок вибуху сформованої під час вентиляції воднево-повітряної суміші. На основі розробленої моделі проведено оцінювання наслідків забруднення навколишнього середовища під час аварійного струминного витікання хлору з газопроводу. Виявлено, що зі збільшенням концентрації хлору в струмені збільшуються масштаби токсичного отруєння населення й персоналу об'єкта. Також на базі моделі отримано розподіли термічного збурення повітря в робочому тунелі швидкоморозильної камери багатоструминним витіканням азоту. Розроблено рекомендації щодо режиму роботи форсунок і швидкості руху об'єктів впливу по тунелю для ефективного охолодження.

В. Удосконалено системну методологію оцінювання змінних стану повітря, у якій, на відміну від наявних, на основі отриманих під час моделювання нестационарних просторових розподілів таких факторів впливу, як інгаляційна токсична доза небезпечної хімічної речовини, ударно-імпульсне навантаження у фронті вибухової хвилі та густина потоку теплового випромінювання, оцінюються наслідки впливу, що дає змогу приймати рішення щодо ефективності засобів захисту навколишнього середовища.

Розроблену системну методологію оцінювання стану повітря в умовах хімічно-складового, баричного й термічного збурення, яка базується на використанні загального інтегрально-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для розв'язання системи інтегральних рівнянь нев'язкої течії багатокомпонентної газової суміші багатозв'язним розрахунковим простором, слід уважати високоефективною, оскільки її застосування для окремих сценаріїв збурення повітря або їх комбінації різної конфігурації забезпечує зниження обчислювальної складності не менш ніж на порядок без втрати точності розрахунку надлишкових параметрів порівняно з методологіями, орієнтованими на числове розв'язання усереднених за Рейнольдсом – Фавром рівнянь Нав'є – Стокса.

Г. Удосконалено обчислювальний метод розв'язання задачі розпаду довільного розриву параметрів газу Годунова, у якому, на відміну від оригінального, розглядається взаємодія двох газоповітряних сумішей з різною масовою концентрацією домішок і припускається адіабатичний процес з усередненим коефіцієнтом адіабати, що дає можливість використовувати оригінальні співвідношення на розриві для отримання потоків маси, імпульсу й енергії суміші внаслідок його розпаду, обчислювати інтегральні закони збереження на гранях розрахункових комірок для реалізації загального інтегрально-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для розв'язання системи інтегральних рівнянь руху суміші в розрахунковому просторі.

З використанням розробленого методу, який є базовою складовою інтегрально-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку без зростання часової складності, проведено аналіз параметрів стану не тільки потоку чистого повітря в просторі техногенних об'єктів, але й багатокомпонентних сумішей, які виникли внаслідок найбільш імовірних аварійних або контрольованих сценаріїв викиду газової фази в повітря. Це дало можливість реалізувати основні сценарії баричного й термічного збурення повітря внаслідок вибуху або теплового випромінювання.

Д. Удосконалено обчислювальний метод моделювання спряженого теплообміну газової суміші й твердих тіл, у якому, на відміну від наявних, використовується розв'язання зв'язної задачі теплообміну з умовами спряження у вигляді граничних умов III роду.

На основі розробленого методу отримано просторово-часові розподіли температури в робочій зоні камери термообробки при наявності в розрахунковому просторі твердого тіла (об'єкта нагрівання). Визначено залежність швидкості теплообміну від матеріалу й форми перерізу об'єкта термічного впливу.

Е. Удосконалено обчислювальний метод пробіт-аналізу наслідків впливу основних факторів (надлишкового тиску, імпульсу первинної фази стиснення вибухової хвилі, густини потоку теплового випромінювання) на навколишнє середовище, у якому, на відміну від наявних, табличну залежність умовної ймовірності ураження від пробіт-функції замінено кусково-кубічним сплайном.

З використанням розробленого методу ймовірнісного аналізу вдалося автоматизувати обчислення умовної ймовірності ураження, інтегрувати його в загальний обчислювальний метод наскрізного розрахунку й здійснити моніторинг просторово-часових розподілів імовірності впливів усіх основних різновидів збурення повітря під час дослідження кількох аварій без необхідності звертатися до відповідних діаграм і таблиць, що забезпечило зниження не менш ніж на порядок часової складності розробленого методу прогнозування наслідків впливу викидів техногенного об'єкта на навколишнє середовище та пошуку ефективних засобів його захисту.

Ж. Набула подальшого розвитку теорія побудови програмних засобів комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень на основі запропонованих математичних моделей, методів аналізу й прогнозування стану повітряного середовища техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень повітря на навколишнє середовище з використанням алгоритму паралельної організації обчислювального процесу.

Сформульовано принципи створення, складу, структури інтерактивного програмного засобу підтримки прийняття рішень FIRE під час пошуку раціональних конструкцій захисту навколишнього середовища від наслідків впливів, що формуються через збурення повітря техногенних об'єктів. Використання механізму робочих потоків і паралельних циклів для обчислення розсіювання домішки в підобластях розрахункового простору дало пришвидшення в 2,5 раза з використанням комп'ютера з 4-ядерним процесором порівняно з наявними додатками на основі послідовних обчислень. Розроблений інтерактивний програмний засіб використовувався для вирішення поставлених завдань і є орієнтованим на фахівців, що працюють над проблемами вдосконалення захисних споруд техногенних об'єктів.

И. Достовірність розроблених математичних моделей, обчислювальних методів, комп'ютерних систем їх реалізації підтверджено валідацією й верифікацією з використанням статистичних показників ефективності математичних моделей на основі порівняння з результатами

наявних експериментальних і розрахункових досліджень.

К. Наукові положення, висновки, пропозиції, рекомендації й результати обчислювальних експериментів застосовано в інженерній практиці аналізу й прогнозування полів надлишкових параметрів збуреного потоку повітря під час оцінювання безпекового стану й організації технологічних процесів підприємств України та проведення навчального процесу в Національному аерокосмічному університеті ім. М. Є. Жуковського «Харківський авіаційний інститут», що підтверджено актами впровадження.

Практичне використання побудованих математичних моделей і обчислювальних засобів їх комп'ютерної реалізації дає можливість суттєво скоротити матеріальні й часові витрати під час аналізу й прогнозування ризиків наслідків аварійних викидів у повітря вибухонебезпечних і токсичних газових домішок на техногенних об'єктах, де вони зберігаються або використовуються, і розробити рекомендації щодо їх усунення або пом'якшення.

Отже, було досягнуто мету дослідження, яка полягала в системному вдосконаленні й підвищенні ефективності математичних моделей, методології та програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень для аналізу руху багатоконпонентної газової суміші біля техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень повітря на навколишнє середовище та пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

Усе наведене підтверджує високу ефективність запропонованих рішень, які обґрунтовано теоретично й підтверджено практично.

БІБЛІОГРАФІЧНИЙ СПИСОК

1. Константинов, В. В. Автоматизированный комплекс программ для расчетов вязких пространственных течений в каналах турбомашин / В. В. Константинов, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов // Авіаційно-космічна техніка і технологія : зб. наук. пр. / М-во освіти України, Держ. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т». – Харків, 1998. – Вип. 5. – С. 130–134.

2. Численное моделирование процесса распространения продуктов горения при пожаре в зданиях с атриумами / Ю. Д. Митасов, А. Ф. Редько, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов // Науковий вісник будівництва : зб. наук. пр. / М-во освіти України, Держ. техн. ун-т будівництва та арх-ри. – Харків, 2001. – Вип. 14. – С. 258–262.

3. Скоб, Ю. А. Математическое моделирование выброса и рассеяния в атмосфере газообразных примесей / Ю. А. Скоб // Вісник Харк. нац. ун-та. Серія: Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління : зб. наук. пр. / М-во освіти

та науки України, Харк. нац. ун-т ім. В. Н. Каразіна. – Харків, 2007. – № 775. – Вип. 7. – С. 236–245.

4. Численное исследование параметров охлаждающей среды в скороморозильном туннеле / И. И. Петухов, М. Л. Угрюмов, Ю. А. Скоб, А. Ю. Лисица, В. Н. Сырый // *Авиационно-космическая техника и технология*. – 2007. – № 1 (37). – С. 25–28.

5. Скоб, Ю. А. Численное моделирование процессов смешения нереагирующих газов в атмосфере / Ю. А. Скоб // *Авиационно-космическая техника и технология*. – 2007. – № 2 (38). – С. 57–62.

6. Скоб, Ю. А. Численное моделирование взрывов газо-воздушных смесей в атмосфере / Ю. А. Скоб // *Авиационно-космическая техника и технология*. – 2007. – № 3 (39). – С. 72–78.

7. Численная оценка последствий взрыва водорода в атмосфере / К. П. Коробчинский, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов, В. В. Шенцов // *Авиационно-космическая техника и технология*. – 2008. – № 1 (48). – С. 79–88.

8. Способ инициирования детонации в неограниченном пространстве / О. В. Стаховский, К. В. Корытченко, М. Л. Угрюмов, Ю. А. Скоб // *Системы обробки інформації : зб. наук. пр. / М-во оборони України, Харк. ун-т повітр. сил ім. І. Кожедуба*. – Харків, 2008. – Вип. 2 (69). – С. 105–107.

9. Математическое моделирование воздействия взрыва объемного шлангового заряда на лесной фитоценоз и растительный покров / Ю. А. Скоб, К. В. Корытченко, М. Л. Угрюмов, С. А. Вамболь // *Проблемы пожарной безопасности : сб. науч. тр. / М-во Украины по вопр. чрезв. ситуаций и по делам защиты насел. от послед. черноб. кат-фы, Ун-т гражд. защиты Украины*. – Харьков, 2009. – Вып. 26. – С. 134–140.

10. Скоб, Ю. А. Математическое моделирование дефлаграционного горения газовых смесей в помещении / Ю. А. Скоб // *Вісник Харк. нац. ун-та. Серія: Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління : зб. наук. пр. / М-во освіти та науки України, Харк. нац. ун-т ім. В. Н. Каразіна*. – Харків, 2009. – № 863, Вип. 12. – С. 218–236.

11. Моделирование области обрыва ЛГМ, формируемой при взрыве топливовоздушных зарядов в лесном фитоценозе / К. В. Корытченко, С. А. Вамболь, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов, А. А. Назаренко // *Проблемы пожарной безопасности : сб. науч. тр. / М-во Украины по вопр. чрезв. ситуаций и по делам защиты насел. от послед. черноб. кат-фы, Нац. ун-т гражд. защиты Украины*. – Харьков, 2010. – Вып. 27. – С. 109–117.

12. Скоб, Ю. А. Численное моделирование процессов теплообмена в твердых телах сложной формы / Ю. А. Скоб // *Авиационно-космическая техника и технология*. – 2010. – № 4 (71). – С. 75–83.

13. Скоб, Ю. А. Численная оценка эффективности устройств

снижения избыточного давления при взрыве водорода / Ю. А. Скоб // *Авиационно-космическая техника и технология*. – 2011. – № 4 (81). – С. 70–79.

14. Скоб, Ю. А. Технология параллельного расчета нестационарных задач газовой динамики / Ю. А. Скоб // *Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии* : сб. науч. тр. / М-во образ., науки и спорта Украины, Нац. аэрокосм. ун-т им. Н. Е. Жуковского «Харьков. авиац. ин-т». – Харьков, 2011. – Вып. 50. – С. 61–67.

15. Скоб, Ю. А. Численное решение сопряженной задачи теплообмена в камерах термообработки / Ю. А. Скоб // *Авиационно-космическая техника и технология*. – 2012. – № 4 (91). – С. 79–83.

16. Вамболь, С. А. Математическое моделирование взрыва метановоздушной смеси и угольной пыли в подземных горных выработках угольных шахт / С. А. Вамболь, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов // *Проблемы надзвичайних ситуацій* : зб. наук. пр. / М-во надзв. ситуацій України, Нац. ун-т цивільн. захисту України. – Харків, 2012. – Вип. 15. – С. 31–40.

17. Моделирование рассеяния водорода в вентилируемом помещении / Ю. А. Скоб, С. А. Вамболь, М. Л. Угрюмов, Э. А. Грановский, В. А. Лыфарь // *Проблемы надзвичайних ситуацій* : зб. наук. пр. / М-во надзв. ситуацій України, Нац. ун-т цивільн. захисту України. – Харків, 2013. – Вип. 17. – С. 184–197.

18. Скоб, Ю. А. Численное моделирование детонации в газовых смесях / Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов // *Вісник Харк. нац. ун-та. Серія: Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління* : зб. наук. пр. / М-во освіти та науки України, Харк. нац. ун-т ім. В. Н. Каразіна. – Харків, 2013. – № 1058, Вип. 21. – С. 149–157.

19. Скоб, Ю. А. Исследование процесса вентиляции помещения с применением осевого вентилятора / Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов, А. О. Хорохордин // *Авиационно-космическая техника и технология*. – 2013. – № 3 (100). – С. 68–74.

20. Скоб, Ю. А. Вычислительная технология учета вентиляции при расчете движения газовой смеси в помещении / Ю. А. Скоб // *Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии* : сб. науч. тр. / М-во образ., науки и спорта Украины, Нац. аэрокосм. ун-т им. Н. Е. Жуковского «Харьков. авиац. ин-т». – Харьков, 2013. – Вып. 58. – С. 147–154.

21. Метод расчета тепловых нагрузок в пространстве от излучения пламени произвольной формы / Ю. А. Скоб, С. А. Вамболь, В. А. Лыфарь, М. Л. Угрюмов // *Проблемы пожарной безопасности* : сб. науч. тр. / Гос. служба Украины по чрезв. ситуациям, Нац. ун-т гражд. защиты Украины. – Харьков, 2014. – Вып. 35. – С. 194–200.

22. Скоб, Ю. А. Расчет вероятности поражения человека на основе моделирования рассеяния токсичного газа в атмосфере / Ю. А. Скоб // *Авиационно-космическая техника и технология*. – 2016. – № 4 (131). –

С. 79–88.

23. Скоб, Ю. А. Математическое моделирование струйного истечения газозоудшуй смеси с различной концентрацией примеси в атмосферу / Ю. А. Скоб // Авиационно-космическая техника и технология. – 2017. – № 4 (139). – С. 83–92.

24. Скоб, Ю. А. Математическое моделирование последствий испарения аварийного пролива токсичного вещества на железнодорожном транспорте / Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов // Наука та прогрес транспорту. Вісник Дніпровського нац. ун-ту залізн. транспорту ім. акад. Лазаряна. – 2018. – № 3 (75). – С. 52–66.

25. Numerical simulation of influence of the non-equilibrium excitation of molecules on direct detonation initiation by spark discharge / K. V. Korytcheko, A. N. Ozerov, D. V. Vinnikov, Yu. A. Skob, D. P. Dubinin, R. G. Meleshchenko // Problems of Atomic Science and Technology. – 2018. – Vol. 116, Issue 4. – P. 194–199.

26. Лыфарь, В. А. Метод и автоматизированная компьютерная система оценки пожарного риска зданий / В. А. Лыфарь, М. Л. Угрюмов, Ю. А. Скоб // Проблемы пожарной безопасности : сб. науч. тр. / М-во Украины по вопр. чрезв. ситуаций и по делам защиты насел. от послед. черноб. кат-фы, Ун-т гражд. защиты Украины. – Харьков, 2009. – Вып. 26. – С. 71–78.

27. Разработка алгоритма параллельных вычислений при решении задач газовой динамики / Ю. А. Скоб, К. П. Коробчинский, Д. С. Морозов, В. В. Шенцов // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии : сб. науч. тр. / М-во образ. и науки Украины, Нац. аэрокосм. ун-т им. Н. Е. Жуковского «Харьков. авиац. ин-т». – Харьков, 2009. – Вып. 41. – С. 109–115.

28. Men'shikov, V. A. Solution of the three-dimensional turbomachinery blade row flow field problem with allowance for viscosity effects / V. A. Men'shikov, Yu. A. Skob, M. L. Ugryumov // Fluid Dynamics. – 1991. – Vol. 26, Issue 6. – P. 889–896.

29. Моделирование системы управления экологической безопасностью с использованием многофазных дисперсных структур при взрыве метанозоудшуй смеси и угольной пыли в подземных горных выработках угольных шахт / С. А. Вамболь, Ю. А. Скоб, Н. В. Нечипорук, О. А. Трухмаев // Вестник Казанского технологического ун-та. – 2013. – № 24. – С. 168–174.

30. Skob, Y. Numerical Evaluation of Probability of Harmful Impact Caused by Toxic Spill Emergencies / Y. Skob, M. Ugryumov, E. Granovskiy // Environmental and Climate Technologies. – 2019. – Vol. 23, Issue 3. – P. 1–14.

31. Skob, Y. A. Numerical assessment of hydrogen explosion consequences in a mine tunnel / Y. A. Skob, M. L. Ugryumov, E. A. Granovskiy // International Journal of Hydrogen Energy. – 2021. – Vol. 46, Issue 23. –

P. 12361–12371.

32. Computational Modeling of the Emission and Distribution of Gaseous Toxic matters in the Atmosphere [Electronic resource] / A. V. Gaydachuk, Y. A. Skob, M. L. Ugryumov, E. A. Granovskiy, V. A. Lifar // 21st International Congress of Theoretical and Applied Mechanics : conf. proc., 15–21 Aug. 2004, Warszawa, Poland. – Warszawa, 2004. – P. 100. – Terms of access: <http://fluid.ippt.gov.pl/ictam04/text/pdf/i04abstracts.pdf>. – 30.01.2023.

33. Numerical Modeling of Hydrogen Release, Mixture and Dispersion in Atmosphere [Electronic resource] / E. A. Granovskiy, V. A. Lyfar, Yu. A. Skob, M. L. Ugryumov // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 10 p. Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/110021.pdf>. – 30.01.2023.

34. Численное моделирование и оценка рисков взрывов, пожаров и рассеяния вредных примесей в атмосфере / Э. А. Грановский, В. А. Лыфарь, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов // VII Всеукр. наук.-практ. конф. «Пожежна безпека та аварійно-рятувальна справа: стан, проблеми і перспективи» (Пожежна безпека – 2005) : зб. мат., 30 листоп. – 1 груд. 2005, Київ / УкрНДІПБ МНС України. – Київ, 2005. – С. 79–82.

35. Компьютерное моделирование последствий взрыва газовой смеси / Э. А. Грановский, В. А. Лыфарь, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов, К. П. Коробчинский // XXII Науч. конф. стран СНГ «Дисперсные системы» : тез. докл., 18–22 сент. 2006, Одесса / Одес. нац. ун-т им. И. И. Мечникова [и др.]. – Одесса, 2006. – С. 117–118.

36. Simulation of conditions for detonation initiation in unconfined space with use of accelerated jet stream [Electronic resource] / K. V. Korytchenko, Y. A. Skob, M. L. Ugryumov, A. V. Basteev, A. I. Kosoj // 21st International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems : conf. proc., 23–27 July 2007, Poitiers, France. – Poitiers, 2007. – 5 p. Terms of access: <http://www.icders.org/ICDERS2007/abstracts/ICDERS2007-0033.pdf>. – 30.01.2023.

37. Влияние скорости ветра и рельефа местности на загрязнение атмосферного воздуха при утилизации взрывчатых веществ / В. Н. Кобрин, Н. В. Нечипорук, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов, П. Г. Кириенко, К. П. Коробчинский // Екологічна безпека: проблеми та шляхи вирішення : зб. наук. ст. / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т». – Алушта – Харків, 2007. – Т. 2. – С. 233–237.

38. Скоб, Ю. А. Математическое моделирование выброса и рассеяния в атмосфере газообразных примесей / Ю. А. Скоб // Методи дискретних особливостей в задачах математичної фізики : зб. наук. пр. / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т». – Харків – Херсон, 2007. – С. 274–276.

39. Computational Modeling of Pressure Effects From Hydrogen Explosions [Electronic resource] / E. A. Granovskiy, V. A. Lyfar, Yu. A. Skob, M. L. Ugryumov // 2nd International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 11–13 Sept. 2007, San Sebastian, Spain. – San Sebastian, 2007. –

15 p. – Terms of access: http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user_upload/CD/PAPERS/13SEPT/1.3.52.pdf. – 30.01.2023.

40. Исследование средств снижения избыточных давлений на стенках зданий застройки местности, вызванных взрывом газообразных смесей в атмосфере / В. Н. Кобрин, Н. В. Нечипорук, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов, П. Г. Кириенко, К. П. Коробчинский // Екологічна безпека: проблеми та шляхи вирішення : зб. наук. ст. / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т». – Алушта – Харків, 2008. – Т. 2. – С. 298–303.

41. Numerical Modeling of Hydrogen Deflagration Dynamics in Enclosed Space [Electronic resource] / Y. A. Skob, M. L. Ugryumov, K. P. Korobchynskiy, V. V. Shentsov, E. A. Granovskiy, V. A. Lyfar // 3d International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 16–18 Sept. 2007, Ajaccio-Corsica, France. – Ajaccio, 2009. – 12 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2009/images/stories/papers/182.pdf>. – 30.01.2023.

42. Прогнозирование характерных зон заражения при проливе химически вредных веществ / В. Н. Кобрин, Н. В. Нечипорук, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов, П. Г. Кириенко, К. П. Коробчинский // Екологічна безпека: проблеми та шляхи вирішення : зб. наук. ст. / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т». – Алушта – Харків, 2009. – Т. 1. – С. 47–51.

43. Effectiveness evaluation of facilities protecting from hydrogen-air explosion overpressure [Electronic resource] / Yu. A. Skob, M. L. Ugryumov, E. A. Granovskiy, V. A. Lyfar // Enabling Progress and Opportunities : 4th International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 12–14 Sept. 2011, San Francisco, California-USA. – San Francisco, 2011. – 11 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2011/papers/179.pdf>. – 30.01.2023.

44. Определение геометрии пламени и алгоритм определения тепловой нагрузки в точке пространства / Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов, С. А. Вамболь, В. А. Лыфарь // Прикладні аспекти техногенно-екологічної безпеки : Всеукр. наук.-практ. конф. : зб. тез, 6 груд. 2013, Харків / Нац. ун-т цивільн. захисту України. – Харків, 2013. – С. 8–10.

45. Численная оценка безопасности при техногенной аварии / Ю. А. Скоб, Д. В. Евтушенко, Ю. В. Бондаренко, А. С. Тищенко [Электронный ресурс] // Інформатика та системні науки (ICH-2016) : VII Всеукр. наук.-практ. конф. за міжнар. участю : зб. мат., 11–12 бер. 2016, Полтава / Полт. ун-т екон. і торг. [та ін.]. – Полтава, 2016. – С. 275–277. – Умови доступу: <http://dspace.puet.edu.ua/handle/123456789/2967>. – 30.01.2023.

46. Скоб, Ю. А. Вероятностная оценка экологической безопасности при аварии на транспорте / Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов // Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті (MINTT-2016) : VIII Міжнар. наук.-практ. конф. : зб. мат., 24–26 трав. 2016, Херсон / Херс. держ. морс. академія [та ін.]. – Херсон, 2016. – С. 283–285.

47. Скоб, Ю. А. Оценка безопасности на основе математического

моделирования газодинамических процессов при техногенной аварии / Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов // Компьютерное моделирование в наукоемких технологиях : Междунар. науч.-техн. конф. : сб. тр., 26–31 мая 2016, Харьков / Харьк. нац. ун-т им. В. Н. Каразина [и др.]. – Харьков, 2016. – С. 303–306.

48. Скоб, Ю. А. Моделирование рассеивания токсичного вещества в атмосфере / Ю. А. Скоб, Д. В. Евтушенко, В. Н. Рудык // Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті (MINTT-2017) : IX Міжнар. наук.-практ. конф. : зб. мат., 23–25 трав. 2017, Херсон / Херс. держ. морс. академія [та ін.]. – Херсон, 2017. – С. 258–261.

49. Скоб, Ю. А. Численный анализ эффективности защитных сооружений при взрыве газа / Ю. А. Скоб, Ю. В. Бондаренко, И. С. Томина // Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті (MINTT-2017) : IX Міжнар. наук.-практ. конф. : зб. мат., 23–25 трав. 2017, Херсон / Херс. держ. морс. академія [та ін.]. – Херсон, 2017. – С. 254–257.

50. Skob, Yu. A. Evaluation of the protection effectiveness against overpressure from hydrogen-air explosion [Electronic resource] / Yu. A. Skob, E. A. Granovskiy, M. L. Ugryumov // 7th International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 11–13 Sept. 2017, Hamburg, Germany. – Hamburg, 2017. – 11 p. – Terms of access: <https://hysafe.info/uploads/papers/2017/159.pdf>. – 30.01.2023.

51. Скоб, Ю. А. Численное моделирование теплового излучения продуктов горения газа / Ю. А. Скоб, Е. А. Васильченко // Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті (MINTT-2018) : X Міжнар. наук.-практ. конф. : зб. мат., 22–25 трав. 2018, Херсон / Херс. держ. морс. академія [та ін.]. – Херсон, 2018. – С. 250–253.

52. Скоб, Ю. А. Моделирование последствий аварийного выброса в атмосферу токсичного вещества / Ю. А. Скоб, А. Ф. Шайтан // Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті (MINTT-2018) : X Міжнар. наук.-практ. конф. : зб. мат., 22–25 трав. 2018, Херсон / Херс. держ. морс. академія [та ін.]. – Херсон, 2018. – С. 254–256.

53. Скоб, Ю. А. Методология прогнозирования вероятности поражения персонала техногенного объекта при аварийном проливе токсичного вещества / Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов // Компьютерное моделирование в наукоемких технологиях : Междунар. науч.-техн. конф. : сб. тр., 22–25 мая 2018, Харьков / Харьк. нац. ун-т им. В. Н. Каразина [и др.]. – Харьков, 2018. – С. 274–277.

54. Васильченко, Е. А. Численная оценка тепловой нагрузки от продуктов горения газа / Е. А. Васильченко, Ю. А. Скоб // I міжнар. наук.-практ. конф. ІТ-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference» : зб. мат., 24–26 квіт. 2018, Харків / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т» [та ін.]. – Харків, 2018. – С. 51–52.

55. Шайтан, А. Ф. Численная оценка последствий загрязнения

атмосферы токсичным веществом / А. Ф. Шайтан, Ю. А. Скоб // I Міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference» : зб. мат., 24–26 квіт. 2018, Харків / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т» [та ін.]. – Харків, 2018. – С. 68–69.

56. Скоб, Ю. А. Моделирование последствий испарения токсичного вещества с пятна пролива произвольной формы / Ю. А. Скоб, А. В. Панов // Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті (MINTT-2019) : XI Міжнар. наук.-практ. конф. : зб. мат., 28–30 трав. 2019, Херсон / Херс. держ. морс. академія [та ін.]. – Херсон, 2019. – С. 283–286.

57. Скоб, Ю. А. Численный анализ влияния вентиляции помещения на последствия аварийного взрыва газа / Ю. А. Скоб, А. Д. Вольская // Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті (MINTT-2019) : XI Міжнар. наук.-практ. конф. : зб. мат., 28–30 трав. 2019, Херсон / Херс. держ. морс. академія [та ін.]. – Херсон, 2019. – С. 287–290.

58. Skob, Y. A. Numerical assessment of hydrogen explosion consequences in mine tunnel / Y. A. Skob, M. L. Ugryumov, E. A. Granovskiy // 8th International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 24–26 Sept. 2019, Adelaide, Australia. – Adelaide, 2019. – 12 p. – Terms of access: <https://hysafe.info/uploads/papers/2019/173.pdf>. – 30.01.2023.

59. Скоб, Ю. А. Конечно-разностное представление плоской фигуры, ограниченной замкнутым контуром / Ю. А. Скоб, А. В. Панов // II Міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference» : зб. мат., 26–28 бер. 2019, Харків / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т» [та ін.]. – Харків, 2019. – С. 51–52.

60. Скоб, Ю. А. Численное моделирование процесса вентиляции / Ю. А. Скоб, А. Д. Вольская // II Міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference» : зб. мат., 26–28 бер. 2019, Харків / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т» [та ін.]. – Харків, 2019. – С. 53–54.

61. Скоб, Ю. А. Численная оценка эффективности схемы вентиляции гаражного помещения при аварийной утечке водородного топлива / Ю. А. Скоб, А. Д. Вольская, В. А. Халтурин // III Міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference» : зб. мат., 8–10 груд. 2020, Харків / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т» [та ін.]. – Харків, 2020. – С. 71–72.

62. Скоб, Ю. А. Численная оценка влияния скорости ветра на последствия испарения пролива токсичного вещества / Ю. А. Скоб, А. В. Панов, В. А. Халтурин // III Міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference» : зб. мат., 8–10 груд. 2020, Харків / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т» [та ін.]. – Харків, 2020. –

С. 83–84.

63. Скоб, Ю. А. Численная оценка безопасных габаритов защитной стены при взрыве водорода / Ю. А. Скоб, А. К. Копейченко, В. А. Халтурин // III Міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference» : зб. мат., 8–10 груд. 2020, Харків / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т» [та ін.]. – Харків, 2020. – С. 76–77.

64. Скоб, Ю. А. Верификация математической модели испарения сжиженного токсичного газа / Ю. А. Скоб, С. И. Брисов, В. А. Халтурин // III Міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference» : зб. мат., 8–10 груд. 2020, Харків / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т» [та ін.]. – Харків, 2020. – С. 69–70.

65. Скоб, Ю. А. Численное исследование влияния рельефа местности на последствия воздействия взрывной волны / Ю. А. Скоб, Е. С. Емельяненко, В. А. Халтурин // III Міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference» : зб. мат., 8–10 груд. 2020, Харків / Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т» [та ін.]. – Харків, 2020. – С. 73–74.

66. Skob, Y. Numerical Modelling of Gas Explosion Overpressure Mitigation Effects / Y. Skob, M. Ugryumov, Y. Dreval // Materials Science Forum. – 2020. – Vol. 1006. – P. 117–122.

67. Меньшиков, В. А. Решение задачи обтекания венцов турбомашин пространственным потоком с учетом эффектов вязкости / В. А. Меньшиков, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. – 1991. – № 6. – С. 119–127.

68. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 30079 Україна. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна інтерактивна система інженерного аналізу та прогнозу руху хімічно реагуючих газоповітряних сумішей в задачах промислової аеродинаміки та екології атмосфери «FIRE» / Ю. О. Скоб, М. Л. Угрюмов, К. П. Коробчинський // Авторське право і суміжні права : офіційний бюлетень. – Київ : Держ. служба інтел. власності України, 2009. – № 19. – С. 488.

69. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 71860 Україна. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система інженерного аналізу та прогнозу «Explosion Safety» для оцінки безпеки під час аварійного вибуху газоповітряної суміші» / Ю. О. Скоб, М. Л. Угрюмов // Авторське право і суміжні права : офіційний бюлетень. – Київ : Міністерство економічного розвитку і торгівлі України, 2017. – № 45. – С. 236.

70. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 69555 Україна. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система підтримки прийняття рішень «ProbitSafety» для оцінки безпеки під час техногенної

аварії на промисловому підприємстві» / Ю. О. Скоб, Д. В. Євтушенко, Ю. В. Бондаренко, А. С. Тищенко // Авторське право і суміжні права : офіційний бюлетень. – Київ : Держ. служба інтел. власності України. – 2017. – № 44. – С. 21.

71. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 71733 Україна. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система «Piecewise Cubic Spline» сплайн-апроксимації таблично заданої функції з використанням узагальненого кусочно-кубічного сплайна» / Ю. О. Скоб, М. Л. Угрюмов, Ю. К. Чернишов // Авторське право і суміжні права : офіційний бюлетень. – Київ : Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. – 2017. – № 45. – С. 186–187.

72. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 71797 Україна. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна інтерактивна система інженерного аналізу та прогнозу «Toxic Spill Safety» для оцінки безпеки під час аварійного пролиття токсичного зрідженого газу» / Ю. О. Скоб, М. Л. Угрюмов // Авторське право і суміжні права : офіційний бюлетень. – Київ : Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. – 2017. – № 45. – С. 212.

73. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 71933 Україна. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система «Thermal Radiation Safety» інженерного аналізу та прогнозу ймовірності ураження персоналу тепловим випромінюванням під час аварійного горіння газоповітряної суміші для оцінки безпеки промислового підприємства» / Ю. О. Скоб, М. Л. Угрюмов // Авторське право і суміжні права : офіційний бюлетень. – Київ : Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. – 2017. – № 45. – С. 264.

74. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 86423 Україна. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система «Point Inside Region» визначення знаходження точки всередині замкненого контуру довільної форми на площині» («PIR») / Ю. О. Скоб, М. Л. Угрюмов // Авторське право і суміжні права : офіційний бюлетень. – Київ : Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. – 2019. – № 52. – С. 964–965.

75. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 86452 Україна. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система «Arbitrary Region Discretization» кінцево-різницевої дискретизації на площині однозв'язної області, яка є обмеженою замкненим довільним контуром» («ARD») / Ю. О. Скоб, М. Л. Угрюмов // Авторське право і суміжні права : офіційний бюлетень. – Київ : Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. – 2019. – № 52. – С. 976.

76. Свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 86493 Україна. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система «Tunnel Explosion Safety» для інженерного аналізу безпекових показників під час аварійного вибуху газоповітряної суміші у тунелі шахти» («TES») / Ю. О. Скоб,

М. Л. Угрюмов // Авторське право і суміжні права : офіційний бюлетень. – Київ : Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. – 2019. – № 52. – С. 993.

77. Шохин, В. Н. Гравитационные методы обогащения : монография / В. Н. Шохин, А. Г. Лопатин. – М. : Недра, 1993. – 313 с.

78. Абрамов, А. А. Переработка, обогащение и комплексное использование твердых полезных ископаемых. Т. I. Обогащительные процессы и аппараты : учеб. для вузов / А. А. Абрамов. – М. : Изд-во Моск. гос. горн. ун-та, 2001. – 472 с.

79. Pramod, T. Advanced Mine Ventilation: Respirable Coal Dust, Combustible Gas and Mine Fire Control : monograph / T. Pramod. – New York : Woodhead Publishing, 2018. – 528 p.

80. Физические аспекты пылеподавления и распылительные устройства для их реализации / А. М. Ляшенко, Н. В. Нечипорук, Н. В. Кобрина, С. А. Вамболь // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии : сб. науч. тр. / М-во образ. и науки Украины, Нац. аэрокосм. ун-т им. Н. Е. Жуковского «Харьков. авиац. ин-т». – Харьков, 2010. – Вып. 48. – С. 234–239.

81. Моделирование процесса пылеподавления при погрузке, разгрузке и транспортировке сыпучих материалов / Н. В. Кобрина, В. Е. Костюк, В. Н. Кобрин, С. А. Вамболь // Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии : сб. науч. тр. / М-во образ. и науки Украины, Нац. аэрокосм. ун-т им. Н. Е. Жуковского «Харьков. авиац. ин-т». – Харьков, 2010. – Вып. 48. – С. 248–252.

82. Britter, R. E. Atmospheric Dispersion of Dense Gases / R. E. Britter // Ann. Rev. Fluid. Mech. – 1989. – Vol. 21. – P. 317–344.

83. Sklavounos, S. Advanced multi-perspective computer simulation as a tool for reliable consequence analysis / S. Sklavounos, F. Rigas // Process Safety and Environmental Protection. – 2012. – No. 90 (2). – P. 129–140.

84. Чернишов, Ю. К. Методи обчислення статистичних параметрів в подієвому моделюванні : монографія / Ю. К. Чернишов. – Харків : Фактор, 2014. – 248 с.

85. Коган, М. Н. Динамика разреженного газа (кинетическая теория) : монография / М. Н. Коган. – М. : Наука, 1967. – 440 с.

86. Bird, G. A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows : monograph / G. A. Bird. – Oxford : Clarendon Press, 1994. – 484 p.

87. Sone, Yoshio. Molecular Gas Dynamics: Theory, Techniques, and Applications (Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology) : monograph / Yoshio Sone. – Boston : Birkhäuser, 2007. – 671 p.

88. Sharipov, F. Rarefied Gas Dynamics: Fundamentals for Research and Practice : monograph / F. Sharipov. – New York : Wiley-VCH, 2015. – 303 p.

89. Белоцерковский, О. М. Метод крупных частиц в газовой динамике : монография / О. М. Белоцерковский, Ю. М. Давыдов. – М. :

Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. – 392 с.

90. Хокни, Р. Численное моделирование методом частиц : монография / Р. Хокни, Дж. Иствуд. – М. : Мир, 1987. – 640 с.

91. Markiewicz, M. T. A review of mathematical models for the atmospheric dispersion of heavy gases. Part I / M. T. Markiewicz // *Ecological Chemistry and Engineering S.* – 2012. – № 19 (3). – P. 297–314.

92. Markiewicz, M. A review of models for the atmospheric dispersion of heavy gases. Part II: Model quality evaluation / M. Markiewicz // *Ecological Chemistry and Engineering S.* – 2013. – № 20 (4). – P. 763–782.

93. Біляєв, М. М. Математичне моделювання в задачах екологічної безпеки та моніторингу надзвичайних ситуацій : монографія / М. М. Біляєв, О. Ю. Гунько, П. Б. Машихіна. – Дніпро : Акцент ПП, 2013. – 159 с.

94. Пшінько, О. М. Моделювання забруднення атмосфери під час техногенних аварій : монографія / О. М. Пшінько, М. М. Біляєв, П. Б. Машихіна. – Дніпро : Нова ідеологія, 2011. – 168 с.

95. Numerical simulation of toxic chemical transport after accidental release at chemical plant / M. Biliaiev, V. Biliaieva, V. Kozachyna, O. Berlov, I. Kalashnikov // *Romanian Journal of Information Science and Technology.* – 2020. – Issue 23, No. S. – P. S3–S13.

96. Determination of areas of atmospheric air pollution by sulfur oxide emissions from mining and metallurgical and energy generating enterprises / M. M. Biliaiev, T. I. Rusakova, V. Ye. Kolesnik, A. V. Pavlichenko // *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu.* – 2017. – Issue 3. – P. 100–106.

97. The predicted level of atmospheric air pollution in the city area affected by highways / M. M. Biliaiev, T. I. Rusakova, V. Ye. Kolesnik, A. V. Pavlichenko // *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu.* – 2016. – Issue 1. – P. 90–97.

98. Numerical modeling of air pollution from dumps / M. M. Biliaiev, T. I. Rusakova, I. V. Kalashnikov, I. O. Bondarenko, E. Y. Gunko // *Наука та прогрес транспорту. Вісник Дніпропетровського національного університету залізничного транспорту.* – 2019. – № 4 (82). – С. 7–17.

99. Біляєв, М. М. Визначення меж поясу безпеки при терактах із використанням хімічних агентів / М. М. Біляєв, І. В. Калашніков, В. А. Козачина // *Наука та прогрес транспорту. Вісник Дніпропетровського національного університету залізничного транспорту.* – 2018. – № 4 (76). – С. 7–14.

100. Biliaiev, M. M. Territorial risk assesment after terrorist act: express model / M. M. Biliaiev, I. V. Kalashnikov, V. A. Kozachyna // *Nauka ta prohres transport – Science and Transport Progress.* – 2018. – № 1 (73). – P. 7–14.

101. Biliaiev, M. M. Numerical simulation of toxic chemical dispersion after accident at railway / M. M. Biliaiev, L. Ya. Muntian // *Nauka ta prohres transport – Science and Transport Progress.* – 2016. – № 2 (62). – P. 7–15.

102. Estimating the influence of the wind exposure on the motion of an extinguishing substance / Yu. Abramov, O. Basmanov, V. Krivtsova, A. Khyzhnyak // EUREKA. Physics and Engineering. – 2020. – 2020 (5). – P. 51–59.

103. Modeling of spilling and extinguishing of burning fuel on horizontal surface / Yu. O. Abramov, O. Ye. Basmanov, V. I. Krivtsova, J. Salamov // Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu. – 2019. – Issue 4. – P. 86–90.

104. Developing a model of tank cooling by water jets from hydraulic monitors under conditions of fire / Yu. Abramov, O. Basmanov, J. Salamov, A. Mikhayluk, O. Yashchenko // Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. – 2019. – Vol. 1, No. 10 (97). – P. 14–20.

105. Model of thermal effect of fire within a dike on the oil tank / Yu. A. Abramov, O. Ye. Basmanov, J. Salamov, A. A. Mikhayluk // Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu. – 2018. – Issue 2. – P. 95–100.

106. Kobil'skaya, E. B. Integral conditions in the inverse problems of heat conduction / E. B. Kobil'skaya, V. P. Lyashenko, T. A. Hryhorova // Mathematical Modeling and Computing. – 2020. – 7 (2). – P. 219–227.

107. Дем'янченко, О. Математична модель теплообміну у валковому калібрі / О. Дем'янченко, О. Кобильська, В. Ляшенко // Вісник Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна, серія «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління»: зб. наук. пр. / М-во освіти та науки України, Харк. нац. ун-т ім. В. Н. Каразіна. – Харків, 2019. – № 42. – 58–67.

108. Mathematical models of the temperature field in the filament-extruder system during 3D printing [Electronic resource] / M. Zagirnyak, E. Kobil'skaya, V. Lyashenko, A. Salenko // AIP : conf. proc., 2020. – Issue 1, Vol. 2302. – 100008. – 9 p. – Terms of access: <https://doi.org/10.1063/5.0033797>. – 30.01.2023.

109. The generalized mathematical model of heat conduction in a complex multi-layered area [Electronic resource] / A. Zaika, O. Hrytsiuk, E. Kobil'skaya, V. Lyashenko // AIP : conf. proc., 2017. – Vol. 1895. – 090004. – 9 p. – Terms of access: <https://doi.org/10.1063/1.5007404>. – 30.01.2023.

110. Ляшенко, В. П. Відновлення імпульсного джерела тепла в задачі теплопровідності / В. П. Ляшенко, О. Б. Кобильська // Вісник Кременчуцького нац. ун-ту ім. Михайла Остроградського. – 2016. – № 2 (1). – С. 27–32.

111. Налисько, М. М. Чисельне моделювання аварійних вибухів рудникової атмосфери / М. М. Налисько, Л. І. Барташевська // Фізико-технічні проблеми гірничого виробництва: зб. наук. пр. / НАН України, Інститут фізики гірничих процесів. – Дніпро, 2020. – Вип. 22. – С. 85–102.

112. Беликов, А. С. Оценка распространения ударных воздушных волн в протяженных сооружениях с учетом диссипации внутренней

энергии газового потока / А. С. Беликов, М. М. Налісько, Л. И. Барташевская // Вісник Придніпровської державної академії будівництва та архітектури. – 2019. – № 1. – С. 249–250.

113. Беликов, А. С. Повышение безопасности при возникновении аварийных газовых взрывов и распространении ударных воздушных волн в протяженных сооружениях / А. С. Беликов, М. М. Налісько // Строительство, материаловедение, машиностроение. Серия: Безопасность жизнедеятельности : сб. науч. тр. / Мин-во образ. и науки Украины [и др.], ГВУЗ «Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры» [и др.]. – Днепр, 2018. – Вып. 105. – С. 16–28.

114. Налісько, М. М. Параметры распространения ударных воздушных волн через сопряжения протяженных каналов / М. М. Налісько // Збірник наукових праць Національного гірничого університету / М-во освіти та науки України, Нац. гірничий ун-т. – Дніпро, 2018. – № 55. – С. 222–238.

115. Model Evaluation Group on Major Industrial Hazards. – Terms of access: <https://cordis.europa.eu/article/id/2540-model-evaluation-group-on-major-industrial-hazards>. – 30.01.2023.

116. Blackmore, D. R. Heavy gas dispersion models / D. R. Blackmore, M. N. Herman, J. L. Woodward // J. Hazard Mater. – 1982. – Vol. 6(1–2). – P. 107–128.

117. Koopman, R. P. A review of recent field tests and mathematical modelling of atmospheric dispersion of large spills of Denser-than-air gases / R. P. Koopman, D. L. Ermak, S. T. Chan // Atmospheric Environment. – 1989. – Vol. 23(4). – P. 731–745.

118. РД-03-26-2007. Методические указания по оценке последствий аварийных выбросов опасных веществ. – М. : НТЦ «Промышленная безопасность», 2008. – Сер. 27. – Вып. 6. – 122 с.

119. Clancey, V. J. The evaporation and dispersion of flammable liquid spillage's / V. J. Clancey // Chemical Process Hazards. – 1974. – Vol. 5. – P. 80–98.

120. Koopman, R. P. Lessons learned from LNG safety research / R. P. Koopman, D. L. Ermak // J. Hazard Mater. – 2007. – Vol. 140. – P. 412–428.

121. Development and test of an evaluation protocol for heavy gas dispersion models / N. J. Duijm, B. Duijm, A. Mercer, C. Bartholome, H. Giesbrecht // J. Hazard Mater. – 1997. – Vol. 56(3). – P. 273–285.

122. Comparison of heavy gas dispersion models for instantaneous releases / P. W. M. Brighton, A. J. Byrne, R. P. Cleaver, P. Cleaver, D. M. Webber // J. Hazard Mater. – 1994. – Vol. 36(3). – P. 193–208.

123. Technical and scientific guidelines in the VDI-Manual on air pollution prevention // Atmospheric Environment. – 1967. – Vol. 20. – P. 1651–1652.

124. Schatzmann, M. Atmospheric dispersion models for regulatory purposes in the Federal Republic of Germany. Part II: The current situation / M. Schatzmann // International Journal of Environment and Pollution. – 1995. – Vol. 5. – P. 431–440.

125. Short-range vertical dispersion from a ground level source in a turbulent boundary layer / R. E. Britter, S. R. Hanna, G. A. Briggs, A. Robins // Atmospheric Environment. – 2003. – Vol. 37. – P. 3885–3894.

126. Гринин, А. С. Экологическая безопасность. Защита территории и населения при чрезвычайных ситуациях : монография / А. С. Гринин, В. Н. Новков. – М. : ФАИР-ПРЕСС, 2000. – 336 с.

127. Емельянов, В. М. Защита населения и территорий в чрезвычайных ситуациях : монография / В. М. Емельянов, В. Н. Коханов, П. А. Некрасов. – М. : Академический проект «Трикта», 2005. – 480 с.

128. Ліквідація пожеж на залізничному транспорті : монографія / М. Д. Кацман, Г. Б. Кононов, І. В. Діденко, Н. В. Огороднічук. – Київ : Основа, 2006. – 216 с.

129. Методика прогнозування наслідків впливу (викиду) небезпечних хімічних речовин при аваріях на промислових об'єктах і транспорті / Мін-во України з питань надзв. ситуацій та у справах захисту населення від наслідків Чорнобильської кат-фи [та ін.]. – Київ, 2001. – 33 с.

130. Hydrogen non-premixed combustion in enclosure with one vent and sustained release : Numerical experiments [Electronic resource] / V. Molkov, V. Shentsov, S. Brennan, D. Makarov // 5th International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 9–11 Sept. 2013, Brussels, Belgium. – Brussels, 2013. – 16 p. Terms of access: <http://www.ichs2013.com/images/papers/153.pdf>. – 30.01.2023.

131. Risk assessment methodology for onboard hydrogen storage / M. Dadashzadeh, S. Kashkarov, D. Makarov, V. Molkov // International Journal of Hydrogen Energy. – 2018. – No. 43 (12). – P. 6462–64755.

132. Берлянд, М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы : монография / М. Е. Берлянд. – Л. : Гидрометеиздат, 1985. – 273 с.

133. Van Ulden, A. P. On the spreading of a heavy gas released near the ground / A. P. Van Ulden // Loss prevention and safety promotion in process industries : collective monograph / Bushmann C. H., editors. – Delft, The Netherlands : Elsevier, 1974. – P. 221–226.

134. Kaiser, G. D. Releases of anhydrous ammonia from pressurized containers – the importance of denser-than-air mixtures / G. D. Kaiser, B. C. Walker // Atmos. Environ. – 1978. – Vol. 12. – P. 2289–2300.

135. Improvement of the performance of a simple box model using CFD modeling to predict indoor air formaldehyde concentration / P. Mocho,

V. Desauziers, H. Plaisance, N. Sauvat // *Building and Environment*. – 2017. – Vol. 124. – P. 450–459.

136. Eidsvik, K. J. A model for heavy gas dispersion in the atmosphere / K. J. Eidsvik // *Atmos. Environ.* – 1980. – No. 14 (7). – P. 769–777.

137. Fay, J. A. Comparison of experiments on dense gas cloud dispersion / J. A. Fay, D. A. Ranck // *Atmos. Environ.* – 1983. – No. 17 (2). – P. 239–248.

138. Fay, J. A. Dispersion of initially compact dense gas clouds / J. A. Fay, S. G. Zemba // *Atmos. Environ.* – 1985. – No. 19 (8). – P. 1257–1261.

139. Van Ulden, A. P. The heavy gas mixing process in still air at Thorney Island and in the laboratory / A. P. Van Ulden // *J. Hazard Mater.* – 1987. – No. 16. – P. 411–425.

140. The calibration of a simple model for dense gas dispersion using the Thorney Island Phase I trials data / R. J. Carpenter, R. P. Cleaver, P. J. Waite, M. A. English // *J. Hazard Mater.* – 1987. – No. 16. – P. 293–314.

141. Crabol, B. Interpretation of the Thorney Island Phase I trials with the box model CIGALE2 / B. Crabol, A. Roux, V. Lhomme // *J. Hazard Mater.* – 1987. – No. 16. – P. 201–214.

142. Wheatley C. J. Translational cloud speeds in the Thorney Island trials: Mathematical modelling and data analysis / C. J. Wheatley, A. J. Prince // *J. Hazard Mater.* – 1987. – No. 16. – P. 185–199.

143. Puttock, J. S. Comparison of Thorney Island data with predictions of HEGABOX/HEGADAS / J. S. Puttock // *J. Hazard Mater.* – 1987. – No. 16. – P. 439–455.

144. GASTAR 3.2 user manual [Electronic resource]. – Cambridge, UK : Cambridge Environmental Consultants Ltd. – Cambridge, 2009. – Terms of access: https://www.cerc.co.uk/environmental-software/assets/data/doc_userguides/CERC_GASTAR3_User_Guide.pdf. – 30.01.2023.

145. Vergison, E. A Quality-Assurance guide for the evaluation of mathematical models used to calculate the consequences of Major Hazards / E. Vergison // *J. Hazard Mater.* – 1996. – No. 49 (2–3). – P. 281–297.

146. Webber, D. M. A model of the motion of a heavy gas cloud released on a uniform slope / D. M. Webber, S. J. Jones, D. Martin // *J. Hazard Mater.* – 1993. – No. 33 (1). – P. 101–122.

147. Kunsch, J. P. Unsteady heat-transfer effects on the spreading and dilution of dense cold clouds / J. P. Kunsch, T. K. Fannelop // *J. Hazard Mater.* – 1995. – No. 43. – P. 69–193.

148. Nielsen, M. Comment on 'A model of the motion of a heavy gas cloud released on a uniform slope' / M. Nielsen // *J. Hazard Mater.* – 1996. – No. 48. – P. 251–258.

149. Kunsch, J. P. Simple box model for dense-gas dispersion in a straight sloping channel / J. P. Kunsch, D. M. Webber // *J. Hazard Mater.* – 2000. – No. 75. – P. 29–46.

150. Kumar, A. Study of the spread of a cold instantaneous heavy gas release with surface heat transfer and variable entrainment / A. Kumar, A. Mahukart, A. Joshi // *J. Hazard Mater.* – 2003. – No. 101 (2). – P. 157–177.
151. The homogeneous equilibrium approximation in models of aerosol cloud dispersion / J. Kukkonen, M. Kulmala, J. Nikimo, T. Vesala, D. M. Webber, T. Wren // *Atmospheric Environment.* – 1994. – No. 28 (17). – P. 2763–2776.
152. Consequence analysis in LPG installation using an integrated computer package / S. Ditali, M. Colombi, G. Moreschini, S. J. Senni // *Hazard Mater.* – 2000. – No. 71. – P. 159–197.
153. A decision support system for the simulation of industrial accidents / N. Quaranta, A. DeMartini, R. Bellasio, R. Bianconi, M. Marioni // *Environ. Monit. Softw.* – 2002. – No. 17 (6). – P. 487–504.
154. Scenna, N. J. Road risk analysis due to the transportation of chlorine in Rosario city / N. J. Scenna, A. S. M. Santa Cruz // *Reliability Engineering & System Safety.* – 2005. – No. 90 (1). – P. 83–90.
155. Cleaver, R. P. Further development of a model for dense gas dispersion over real terrain / R. P. Cleaver, M. G. Cooper, A. R. Halford // *J. Hazard Mater.* – 1995. – No. 40. – P. 85–108.
156. Mohan, M. Development of dense gas dispersion model for emergency preparedness / M. Mohan, T. S. Panwar, P. Singh // *Atmospheric Environment.* – 1995. – No. 29. – P. 2075–2087.
157. Fay, J. A. Integral model of dense gas plume dispersion / J. A. Fay, S. G. Zemba // *Atmospheric Environment.* – 1986. – No. 20. – P. 1347–1354.
158. Computer Program CRUNCH. Dispersion Model for Continuous Dense Vapour Release in Atmosphere [Electronic resource]. – 1987. – Terms of access: <http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/detail/nea-1040/> – 30.01.2023.
159. Witlox, H. W. M. The HEGADAS model for ground-level heavy-gas dispersion – I. Steady-state model / H. W. M. Witlox // *Atmospheric Environment.* – 1994. – No. 28. – P. 2917–2932.
160. Toxic industrial chemical (TIC) source emissions modeling for pressurized liquefied gases / R. Britter, J. Weil, J. Leung, S. Hanna // *Atmospheric Environment.* – 2011. – No. 45. – P. 1–25.
161. Witlox, H. W. M. Interfacing dispersion models in the HGSYSTEM hazard-assessment package / H. W. M. Witlox, K. McFarlane // *Atmospheric Environment.* – 1994. – No. 28. – P. 2947–2962.
162. Witlox, H. W. M. The HEGADAS model for ground-level heavy-gas dispersion II. Time-dependent model / H. W. M. Witlox // *Atmospheric Environment.* – 1994. – No. 28. – P. 2933–2946.
163. Spicer, T. O. Modeling the Phase I Thorney Island experiments / T. O. Spicer, J. A. Havens // *J. Hazard Mater.* – 1984. – No. 11. – P. 237–260.

164. Puttock, J. S. Thorney island data and dispersion modelling / J. S. Puttock, G. W. Colenbrander // *J. Hazard Mater.* – 1985. – No. 11. – P. 381–397.
165. Puttock, J. S. Field experiments on dense gas dispersion / J. S. Puttock, D. R. Blackmore, G. W. Colenbrander // *J. Hazard Mater.* – 1982. – No. 6 (1–2). – P. 13–41.
166. Ooms, G. The plume path of vent gases heavier than air. In: Birschman C. H., editors. Loss prevention and safety promotion in the process industries : monograph / G. Ooms, A. P. Mahiue, F. Zelis. – Hague/Delft, The Netherlands : Elsevier Press, 1974. – P. 211–219.
167. Dispersion models and hydrogen fluoride predictions / J. S. Puttock, K. Prothero, A. McFarlane, F. J. Rees, D. N. Blewitt // *J. Loss Prevent. Proc. Ind.* – 1991. – No. 4. – P. 16–28.
168. Woodward, J. L. Dispersion modelling of an elevated high momentum release forming aerosols / J. L. Woodward // *J. Loss Prevent. Proc. Ind.* – 1989. – No. 2 (1). – P. 22–32.
169. Woodward, J. L. Modeling and validation of a dispersing aerosol jet / J. L. Woodward, J. Cook, A. Papadourakis // *J. Hazard Mater.* – 1995. – No. 44 (2–3). – P. 185–207.
170. Cleaver, R. P. Comparison of an integral model for predicting the dispersion of a turbulent jet in a crossflow with experimental data / R. P. Cleaver, P. D. Edwards // *J. Loss Prevent. Proc. Ind.* – 1990. – No. 3 (1). – P. 91–96.
171. Epstain, M. A model of the dilution of a forced two-phase chemical plume in a horizontal wind / M. Epstain, H. K. Fauske, G. H. Hauser // *J. Loss Prevent. Proc. Ind.* – 1990. – No. 3 (3). – P. 280–290.
172. Modelling flammable chemical major hazards using the DRIFT 3 dispersion model / Z. Chaplin, H. Cruse, G. Tickle, H. Tucker // *Institution of Chemical Engineers Symposium Series.* – 2017. – Vol. 162, No. 27. – P. 350–356.
173. Khan, F. I. Modelling and simulation of heavy gas dispersion on the basis of modifications in plume path theory / F. I. Khan, S. A. Abassi // *J. Hazard Mater.* – 2000. – No. 80. – P. 15–30.
174. Benerjee, S. CLOUD: A vapour-aerosol dispersion model accounting for plume 3D motion and heat and mass transfer between phases / S. Benerjee, R. Martini, M. J. Pattison // *J. Hazard Mater.* – 1996. – No. 46 (2–3). – P. 1–240.
175. Bricard, P. Two-phase jet dispersion / P. Bricard, L. Friedel // *J. Hazard Mater.* – 1998. – No. 59. – P. 287–310.
176. Crane, G. A model for dispersion from area sources in convective turbulence / G. Crane, H. A. Panofsky, O. Zeman // *Atmospheric Environment.* – 1977. – No. 11 (10). – P. 893–900.

177. Ooms, G. Dispersion of stack plume heavier than air / G. Ooms, N. J. Dijm // Atmospheric dispersion of heavy gases and small particles / G. Ooms, H. Tennekes, editors. – Berlin : Springer Verlag, 1984. – P. 1–21.

178. Буяцкий, Е. В. Теория атмосферной диффузии радиоактивных выбросов : монография / Е. В. Буяцкий. – Киев : Институт гидромеханики НАН Украины, 2000. – 443 с.

179. Павлихин, Г. П. Экологическая экспертиза. Программы ликвидации запасов химического оружия армии США / Г. П. Павлихин // Проблемы окружающей среды и природных ресурсов. – 1991. – № 8. – С. 1–16.

180. Zeman, O. The dynamics and modeling of heavier-than-air, cold gas releases / O. Zeman // Atmospheric Environment. – 1982. – No. 16. – P. 741–751.

181. Ermak, D. L. User's Manual For SLAB: An Atmospheric Dispersion Model For Denser-Than-Air Releases. UCRL-MA-105607 [Electronic resource] / D. L. Ermak. – Livermore, California : Lawrence Livermore National Laboratory, 1990. – Terms of access: <https://gaftp.epa.gov/Air/aqmg/SCRAM/models/nonepa/slab/SLAB.PDF>. – 30.01.2023.

182. Meroney, R. N. Transient characteristics of dense gas dispersion. Part I: A depth-averaged numerical model / R. N. Meroney // J. Hazard Mater. – 1984. – No. 9. – P. 139–157.

183. Meroney, R. N. Transient characteristics of dense gas dispersion. Part II: Numerical experiments on dense cloud physics / R. N. Meroney // J. Hazard Mater. – 1984. – No. 9. – P. 159–170.

184. A dense vapour dispersion code package for applications in the chemical and process industry / J. Wurtz, J. Bartzis, A. Venestanos, S. Andronopoulos, J. Statharas, R. Nijsing // J. Hazard Mater. – 1996. – No. 46. – P. 273–284.

185. Folch, A. Twodee-2: A shallow layer model for dense gas dispersion on complex topography / A. Folch, A. Costa, R. K. S. Hankin // Computers & Geosciences. – 2009. – No. 35. – P. 667–674.

186. Hankin, R. K. S Twodee: the Health and Safety Laboratory's shallow layer model for heavy gas dispersion. Part 1. Mathematical basis and physical assumptions / R. K. S. Hankin, R. E. Britter // J. Hazard Mater. – 1999. – No. 66. – P. 211–226.

187. Hankin, R. K. S. Twodee: The Health and Safety Laboratory's shallow layer model for heavy gas dispersion. Part 2: Outline and validation of the computational scheme / R. K. S. Hankin, R. E. Britter // J. Hazard Mater. – 1999. – No. 66. – P. 227–237.

188. Hankin, R. K. S. Major hazard risk assessment over non-flat terrain. Part I: continuous releases / R. K. S. Hankin // Atmospheric Environment. – 2004. – No. 38. – P. 695–705.

189. Hankin, R. K. S. Major hazard risk assessment over non-flat terrain. Part II: instantaneous releases / R. K. S. Hankin // *Atmospheric Environment*. – 2004. – No. 38. – P. 707–714.
190. Hankin, R. K. S. Heavy gas dispersion: integral models and shallow layer models / R. K. S. Hankin // *J. Hazard Mater.* – 2003. – No. 103. – P. 1–10.
191. DISPLAY-2: a two-dimensional shallow layer model for dense gas dispersion including complex features / A. G. Venestanos, J. G. Bartzis, J. Wurtz, D. D. Papailiou // *J. Hazard Mater.* – 2003. – No. A 99. – P. 111–144.
192. Schreurs, P. Development of a transport phenomena model for accidental (heavy gas) releases in an industrial environment / P. Schreurs, J. Mewis // *Atmos. Environ.* – 1987. – No. 21. – P. 765–776.
193. Gaffen, D. J. Numerical modeling of buoyancy dominated dispersal using a Lagrangian approach / D. J. Gaffen, C. Benocci, D. Olivari // *Atmos. Environ.* – 1967. – No. 21 (6). – P. 1285–1293.
194. Lange, R. ADPIC – A Three-Dimensional Particle-in-Cell Model for the Dispersal of Atmospheric Pollutants and its Comparison to Regional Tracer Studies / R. Lange // *Journal of Applied Meteorology*. – 1978. – No. 17 (3). – P. 320–329.
195. Gopalakrishnan, S. G. Lagrangian particle model for marginally heavy gas dispersion / S. G. Gopalakrishnan, M. A. Sharan // *Atmos. Environ.* – 1997. – No. 31 (20). – P. 3369–3382.
196. Mathematical modelling and computer simulation of toxic gas building infiltration / C. D. Argyropoulos, A. M. Ashraf, N. C. Markatos, K. E. Kakosimos // *Process Safety and Environmental Protection*. – 2017. – No. 111. – P. 687–700.
197. Lee, Ch. A new Lagrangian stochastic model for the gravity-slumping/spreading motion of a dense gas / Ch. Lee, B. G. Kim, S. Y. Ko // *Atmos. Environ.* – 2007. – No. 41. – P. 7874–7886.
198. A new Lagrangian particle model for the simulation of dense gas dispersion / D. Anfossi, G. Tinarelli, S. Trini Castelli, M. Nibart, C. Orly, J. Commanay // *Atmos. Environ.* – 2010. – No. 44. – P. 753–762.
199. Markiewicz, M. Methods of determining meteorological data used in air pollution dispersion models / M. Markiewicz // *Environ. Prot. Eng.* – 2007. – No. 33 (4). – P. 75–86.
200. Sykes, R. I. The representation of dynamic flow effects in a Lagrangian puff dispersion model / R. I. Sykes, C. P. Cerasoli, D. S. Henn // *J. Hazard Mater.* – 1999. – No. 64. – P. 223–247.
201. Havens, J. A. A description and computational assessment of the SIGMET LNG vapor dispersion model / J. A. Havens // *J. Hazard Mater.* – 1982. – No. 6 (1–2). – P. 181–195.
202. Deaves, D. M. Application of advanced turbulence models in determining the structure and dispersion of heavy gas clouds / D. M. Deaves //

Atmospheric dispersion of heavy gases and small particles / G. Ooms, H. Tennekes, editors. – Berlin : Springer Verlag, 1984. – P. 93–103.

203. Deaves, D. M. 3-dimensional model predictions for the upwind building trial of thorney island phase II / D. M. Deaves // *J. Hazard Mater.* – 1985. – No. 11. – P. 341–346.

204. Deaves, D. M. Development and application of heavy gas dispersion models of varying complexity / D. M. Deaves // *J. Hazard Mater.* – 1987. – No. 16. – P. 427–438.

205. A comparison of dense gas dispersion model simulations with burro series LNG spill test results / D. L. Ermak, S. T. Chan, D. L. Morgan, L. K. Morris // *J. Hazard Mater.* – 1982. – No. 6. – P. 129–160.

206. Chan, S. T. FEM3 model simulations of selected thorney island phase I trials / S. T. Chan, D. L. Ermak, L. K. Morris // *J. Hazard Mater.* – 1987. – No. 16. – P. 267–292.

207. Zhang, X. Computational fluid dynamics study on liquefied natural gas dispersion with phase change of water / X. Zhang, J. Li, J. Zhu, L. Qiu // *International Journal of Heat and Mass Transfer.* – 2015. – No. 91. – P. 347–354.

208. Taft, J. R. MARIAH a dispersion model for evaluating realistic heavy gas spills scenarios / J. R. Taft, M. S. Ryn, D. A. Weston // *American Gas Association Transmission Conference : conf. proc.*, 2 May 1983, Seattle, WA, USA. Seattle, 1983. – 12 p.

209. Riou, Y. J. Comparison between MERCURE-GL code calculations, wind tunnel measurements and Thorney Island field trials / Y. J. Riou // *Hazard Mater.* – 1987. – No. 16. – P. 247–266.

210. Betts, P. L. Finite element calculations of transient dense gas dispersion / P. L. Betts, V. Harountunian // *Stably stratified flows and dense gas dispersion : collective monograph* / J. S. Puttock, editors. – Oxford, England : Clarendon Press, 1988. – 349 p.

211. Venetsanos, A. G. The ADREA-HF CFD code for consequence assessment of hydrogen applications / A. G. Venetsanos, E. Papanikolaou, J. G. Bartzis // *International Journal of Hydrogen Energy.* – 2010. – No. 35. – P. 3908–3918.

212. Bellasio, R. MDGP: A new Eulerian 3D unsteady state model for heavy gas dispersion / R. Bellasio, M. Tamponi // *Atmos. Environ.* – 1994. – No. 28. – P. 1633–1643.

213. Pereira, J. C. F. Numerical calculations of unsteady heavy gas dispersion / J. C. F. Pereira, X. Q. Chen // *J. Hazard Mater.* – 1996. – No. 46. – P. 253–272.

214. Burman, J. An evaluation of topographical effects on neutral and heavy-gas dispersion with a CFD model / J. Burman // *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics* – 1998. – No. 74–76. – P. 315–325.

215. Efthimiou, G. C. Modelling concentration fluctuations and individual exposure in complex urban environments / G. C. Efthimiou, J. G. Bartzis, N. Koutsourakis // *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. – 2011. – No. 99. – P. 349–356.
216. Bayanow, I. M. Calculation of Heavy Gas Spreading Over the Earth Surface by a Three-Dimensional Model / I. M. Bayanow, M. Z. Gilmullin, V. Shagapov // *J Appl Mech Tech Phys*. – 2003. – No. 44 (6). – P. 858–865.
217. Validation of heavy and light gas dispersion models for the safety analysis of LNG tank / R. Ohba, A. Kouchi, T. Hara, V. Vieillard, D. Nedelka // *J Loss Prev Proc Ind*. – 2004. – No. 17 (5). – P. 325–337.
218. Heavy Gas Dispersion Modelling Over a Topographically Complex Mesoscale: A CFD Based Approach / F. Scargiali, E. Di Rienzo, M. Ciofalo, F. Grisafi, A. Brucato // *Process Safety and Environmental Protection*. – 2005. – No. 83 (3). – P. 242–256.
219. Luketa-Hanlin, A. On the application of computational fluid dynamics codes for liquefied natural gas dispersion / A. Luketa-Hanlin, R. P. Koopman, D. L. Ermak // *J. Hazard Mater*. – 2007. – No. 140. – P. 504–517.
220. Hanna, S. R. Use of the Kit Fox field data to analyze dense gas dispersion modeling issues / S. R. Hanna, J. C. Chang // *Atmos. Environ*. – 2001. – No. 35. – P. 2231–2242.
221. Hanna, S. R. FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations / S. R. Hanna, O. R. Hansen, S. Dharmavaran // *Atmos. Environ*. – 2004. – No. 38. – P. 4675–4687.
222. CFD model simulation of dispersion from chlorine railcar releases in industrial and urban areas / S. R. Hanna, O. Hansen, M. Ichard, D. Strimatis // *Atmos. Environ*. – 2009. – No. 43. – P. 262–270.
223. Sklavounos, S. Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles / S. Sklavounos, F. Rigas // *J. Hazard Mater*. – 2004. – No. 108 (1–2). – P. 9–20.
224. Sklavounos, S. Simulation of Coyote series trials – Part I : CFD estimation of non-isothermal LNG releases and comparison with box-model predictions / S. Sklavounos, F. Rigas // *Chem Eng Sci*. – 2006. – No. 61 (5). – P. 1434–1443.
225. Sklavounos, S. Simulation of Coyote series trials – Part II: A computational approach to ignition and combustion of flammable vapor clouds / S. Sklavounos, F. Rigas // *Chem Eng Sci*. – 2006. – No. 61. – P. 1444–1452.
226. Numerical simulations of LNG vapor dispersion in Brayton Fire Training Field tests with ANSYS CFX / R. Qi, D. Ng, B. J. Cormier, M. S. Mannan // *J. Hazard Mater*. – 2010. – No. 183. – P. 51–61.
227. Application of computational fluid dynamics for LNG vapor dispersion modeling: A study of key parameters / B. R. Cormier, R. Qi, G. Yun,

Y. Zhang, M. S. Mannan // J. Loss Prevent. Proc. Ind. – 2009. – No. 22. – P. 332–352.

228. Gavelli, F. Application of CFD (Fluent) to LNG spills into geometrically complex environments / F. Gavelli, E. Bullister, H. Kytömaa // J. Hazard Mater. – 2008. – No. 159. – P. 158–168.

229. Modeling of LNG spills into trenches / F. Gavelli, M. K. Chernovsky, E. Bullister, H. K. Kytömaa // J. Hazard Mater. – 2010. – No. 180. – P. 332–339.

230. Andersson, B. Computational Fluid Dynamics for Engineers / B. Andersson, R. Andersson, L. Hakansson. – New York : Cambridge University Press Publ., 2012. – 212 p.

231. Jayanti, S. Computational Fluid Dynamics for Engineers and Scientists / S. Jayanti. – Burlington : Springer, 2018. – 402 p.

232. Large-eddy simulation of dense gas dispersion over a simplified urban area / E. M. M. Wingstedt, A. N. Osnes, E. Åkervik, D. Eriksson, B. A. Pettersson Reif // Atmospheric Environment. – 2017. – No. 152. – P. 605–616.

233. Large Eddy Simulation study on the structure of turbulent flow in a complex city / I. C. Talias, N. Koutsourakis, D. Hertwig, G. C. Efthimiou, J. G. Bartzis // Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics. – 2018. – No. 177. – P. 101–116.

234. Smagorinsky, J. General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment / J. Smagorinsky // Monthly Weather Review. – 1963. – No. 91 (3). – P. 99–164.

235. Hattori, H. Direct numerical simulation of stable and unstable turbulent thermal boundary layers / H. Hattori, T. Houra, Y. Nagano // International Journal of Heat and Fluid Flow. – 2007. – No. 28 (6). – P. 1262–1271.

236. Luo, J. Simulation of Lagrangian dispersion using a Lagrangian stochastic model and DNS in a turbulent channel flow / J. Luo, Z. Lu, Y. Liu // Journal of Hydrodynamics. – Ser. B. – 2009. – No. 21 (6). – P. 767–773.

237. Modelling the dispersion of a toxic substance at a workplace / P. Kassomenos, A. Karayannis, I. Panagopoulos, S. Karakitsios, M. Petrakis // Environmental Modelling & Software. – 2008. – No. 23 (1). – P. 82–89.

238. A protocol for the evaluation of LNG vapour dispersion models / M. J. Ivings, C. J. Lea, D. M. Webber, S. F. Jagger, S. Coldrick // J. Loss Prevent. Proc. Ind. – 2013. – No. 26 (1). – P. 153–163.

239. Mouilleau, Y. CFD simulations of atmospheric gas dispersion using the Fire Dynamics Simulator (FDS) / Y. Mouilleau, A. Champassith // J. Loss Prevent. Proc. Ind. – 2009. – No. 22 (3). – P. 316–323.

240. Cocchi, G. Modeling instantaneous heavy gas releases with FDS5 / G. Cocchi // Fire Safety Journal. – 2014. – No. (6). – P. 89–98.

241. Берлянд, М. Е. Современные проблемы атмосферной

диффузии и загрязнения атмосферы: монография / М. Е. Берлянд. – Л. : Гидрометеиздат, 1975. – 448 с.

242. Методы расчета турбулентных течений : сб. науч. ст. / под ред. В. Колльмана. – М. : Мир, 1984. – 464 с.

243. Беляев, Н. Н. Компьютерное моделирование загрязнения окружающей среды при разливе аммиака / Н. Н. Беляев, О. В. Коптилая // *Екологія і природокористування* : зб. наук. пр. / ІППЕ НАН України. – Дніпро, 2002. – Вип. 2. – С. 158–162.

244. Мацак, В. Г. Гигиеническое значение скорости испарения и давления пара токсических веществ, применяемых в производстве : монография / В. Г. Мацак, Л. К. Хоцянов. – М. : Медгиз, 1959. – 231 с.

245. Hughes, Ph. Introduction to Health and Safety at Work: The Handbook for the NEBOSH National General Certificate : monograph / Ph. Hughes, E. Ferrett. – Kidlington, Oxford : Butterworth-Heinemann, 2011. – 608 p.

246. Assael, M. J. Fires, Explosions, and Toxic Gas Dispersions: Effects Calculation and Risk Analysis : monograph / M. J. Assael, K. E. Kakosimos. – New York : CRC Press, 2010. – 349 p.

247. Knott, G. D. Interpolating Cubic Splines : monograph / G. D. Knott. – Boston : Birkhäuser, 2012. – 254 p.

248. Чернышев, Ю. К. Выпуклые векторные сплайны в применении к профилированию лопаток ГТД / Ю. К. Чернышев // *Авіаційно-космічна техніка і технологія* : зб. наук. пр. / М-во освіти України, Держ. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т». – Харків, 2000. – Вип. 21. – С. 16–18.

249. Engeln-Müllges, G. Numerik-Algorithmen: Verfahren, Beispiele, Anwendungen : monographie / G. Engeln-Müllges, K. Niederdrenk, R. Wodicka. – Berlin : Xpert.press, 2010. – 756 p.

250. Schmitt, R. G. Detonation properties of gases at elevated initial pressures / R. G. Schmitt, P. B. Butler // *Combust. Sci. Technol.* – 1995. – Vol. 106. – P. 167–193.

251. Westbrook, C. K. Chemical kinetics of hydrocarbon oxidation in gaseous detonations / C. K. Westbrook // *Combust. Flame.* – 1982. – Vol. 46. – P. 191–210.

252. Bruls, H. K. On deriviations from ideal Chapman-Jouguet detonation velocity / H. K. Bruls, M. H. Lefebvre, J. Berghmans // *Twenty-Fifth Symp. (Intern.) on Combustion : conf. proc., 31 July – 5 Aug. 1994, Pittsburgh* : The combustion Inst. – Pittsburgh, 1994. – P. 37–44.

253. Smirnov, N. N. Deflagration to detonation transition in combustible gas mixtures / N. N. Smirnov, J. J. Panfilov // *Combust. Flame.* – 1995. – Vol. 101. – P. 91–100.

254. Determination of detonation cell size and the role of transverse waves in two-dimensional detonations / K. Kailasanath, E. S. Oran, J. P. Boris, T. R. Young // *Combust. Flame.* – 1985. – Vol. 61. – P. 199–209.
255. Oran, E. S. Numerical Simulation of reactive flow: monograph / E. S. Oran, J. P. Boris. – New York : Elsevier, 1987. – 1186 p.
256. Warnatz, J. Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation: monograph / J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble. – New York : Springer, 2006. – 390 p.
257. Weber, H. J. Combustion and pressure wave interaction in enclosed mixture initiated by temperature nonuniformities / H. J. Weber, A. Mack, P. Roth // *Combust. Flame.* – 1994. – Vol. 97. – P. 281–295.
258. Bielert, U. Numerical simulation of premixed combustion processes in closed tubes / U. Bielert, M. Sichel // *Combust. Flame.* – 1998. – Vol. 114 (3–4). – P. 397–419.
259. Парра-Сантос, М. Т. Численное моделирование перехода горения в детонацию / М. Т. Парра-Сантос, Ф. Кастро-Руис, Ц. Мендес-Буено // *Физика горения и взрыва.* – 2005. – Т. 41, № 2. – С. 108–115.
260. Bechtold, J. K. Extinction of premixed methane-air flames with reduced reaction mechanism / J. K. Bechtold, C. K. Law // *Combust. Sci. Technol.* – 1994. – Vol. 100 (1–6). – P. 371–378.
261. Thomas, G. O. Studies of detonation quenching by water sprays / G. O. Thomas, M. J. Edwards, D. H. Edwards // *Combustion Science and Technology.* – 1990. – Vol. 71 (4–6). – P. 233–245.
262. Численное решение многомерных задач газовой динамики : монография / С. К. Годунов, А. В. Забродин, М. Я. Иванов, А. Н. Крайко, Г. П. Прокопов. – М. : Наука, 1976. – 400 с.
263. Toro, E. F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction : monograph / E. F. Toro. – Berlin : Springer, 2009. – 724 p.
264. Станюкович, К. П. Физика взрыва : монография / К. П. Станюкович, Ф. А. Баум, Б. И. Шехтер. – М. : Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 2013. – 800 с.
265. Батулин, В. В. Основы промышленной вентиляции : монография / В. В. Батулин. – М. : Профиздат, 1990. – 450 с.
266. Макашев, В. А. Опасные ситуации техногенного характера и защита от них : учеб. пособие / В. А. Макашев, С. В. Петров. – М. : ЭНАС, 2008. – 191 с.
267. Brauer, R. L. Safety and Health for Engineers : monograph / R. L. Brauer. – New Jersey : Wiley, 2015. – 742 p.
268. Отопление и вентиляция : учеб. для вузов. В 2 ч. Ч. 2. Вентиляция / под ред. В. Н. Богословского. – М. : Стройиздат, 1976. – 439 с.

269. Волков, О. Д. Проектирование вентиляции промышленного здания : учеб. пособие / О. Д. Волков. – Харьков : Вища шк., Изд-во при ХГУ, 1989. – 240 с.

270. Papanikolaou, E. A. CFD modeling for helium releases in a private garage without forced ventilation [Electronic resource] / E. A. Papanikolaou, A. G. Venetsanos // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 11 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/320121.pdf> – 30.01.2023.

271. Баум, Ф. А. Физика взрыва : монография / Ф. А. Баум, К. П. Станюкович, Б. И. Шехтер. – М. : Гос. изд-во физ.-мат. лит-ры, 1959. – 800 с.

272. Safety and Security Analysis : Investigative Report by NASA on Proposed EPA Hydrogen-Powered Vehicle Fueling Station / Assessment and Standards Division Office of Transportation and Air Quality U.S. Environment Protection Agency, EPA420-R-04-016, October 2004. – 45 p.

273. Шенг, Дж. С. Обзор численных методов решения уравнений Навье – Стокса для течений сжимаемого газа / Дж. С. Шенг // Аэрокосмическая техника. – 1986. – № 2. – С. 65–92.

274. Свідоцтво про державну реєстрацію виключної правочинності особи на твір ВП № 666 Україна. Комп'ютерна інтерактивна система аеродинамічного аналізу і удосконалення вінців турбомашин «Експерт» / М. Л. Угрюмов, Ю. К. Чернишов, Ю. А. Скоб, С. А. Прокоф'єв ; заявник свід. Нац. аерокосм. ун-т ім. М. Є. Жуковського «Харків. авіац. ін-т» ; реєстр. 27.10.2000 ; видано 27.11.2000.

275. Вентилятор осевой ВО 06-300 №2,5 [Электронный ресурс] / Донецкий вентиляторный завод. – Режим доступа: <http://dwz.com.ua/product/23>. – 30.01.2023.

276. CFD simulation on diffusion of leaked hydrogen caused by vehicle accident in tunnels [Electronic resource] / S. Mukai, J. Suzuki, H. Mitsuishi, K. Oyakawa, S. Watanabe // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 10 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/320033.pdf>. – 30.01.2023.

277. Analysis of buoyancy-driven ventilation of hydrogen from buildings [Electronic resource] / C. D. Barley, K. Gawlik, J. Ohi, and R. Hewett // 2nd International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 11–13 Sept. 2007, San Sebastian, Spain. – San Sebastian, 2007. – 14 p. – Terms of access: http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user_upload/CD/PAPERS/11SEPT/3.1.68.pdf. – 30.01.2023.

278. Simulation of detonation after an accidental hydrogen release in enclosed environments [Electronic resource] / L. Bedard-Tremblay, L. Fang, L. Bauwens, P. H. E. Finstad, Z. Cheng, A. V. Tchouvelev // 2nd International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 11–13 Sept. 2007, San Sebastian, Spain. – San Sebastian, 2007. – 12 p. – Terms of access: <http://>

conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user_upload/CD/PAPERS/11SEPT/1.3.95.pdf. – 30.01.2023.

279. Numerical studies of dispersion and flammable volume of hydrogen in enclosures [Electronic resource] / J. Zhang, J. Hereid, M. Hagen, D. Bakirtzis, M. A. Delichatsios, A. G. Venetsanos // 2nd International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 11–13 Sept. 2007, San Sebastian, Spain. – San Sebastian, 2007. – 12 p. – Terms of access: http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user_upload/CD/PAPERS/13SEPT/6.1.00.pdf. – 30.01.2023.

280. Venetsanos, A. G. An inter-comparison exercise on the capabilities of CFD models to predict the short and long term distribution and mixing of hydrogen in a garage / A. G. Venetsanos, E. Papanikolaou, M. Delichatsios // International Journal of Hydrogen Energy. – 2009. – Vol. 34, Issue 14. – P. 5912–5923.

281. Gas build-up in a domestic property following releases of methane/hydrogen mixtures [Electronic resource] / B. J. Lowesmith, G. Hankinson, C. Spataru, M. Stobbart // 2nd International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 11–13 Sept. 2007, San Sebastian, Spain. – San Sebastian, 2007. – 13 p. – Terms of access: http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user_upload/CD/PAPERS/12SEPT/1.1.62.pdf. – 30.01.2023.

282. Study of hydrogen diffusion and deflagration in a closed system [Electronic resource] / Y. Ishimoto, E. Merilo, M. Groethe, S. Chiba, H. Iwabuchi, K. Sakata // 2nd International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 11–13 Sept. 2007, San Sebastian, Spain. – San Sebastian, 2007. – 10 p. – Terms of access: http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user_upload/CD/PAPERS/13SEPT/1.1.83.pdf. – 30.01.2023.

283. Hydrogen related risks within a private garage: concentration measurements in a realistic full scale experimental facility [Electronic resource] / S. Gupta, J. Brinster, E. Studer, I. Tkatschenko // 2nd International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 11–13 Sept. 2007, San Sebastian, Spain. – San Sebastian, 2007. – 12 p. – Terms of access: http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user_upload/CD/PAPERS/12SEPT/1.1.51.pdf. – 30.01.2023.

284. Papanikolaou, E. A. CFD simulations of hydrogen release and dispersion inside the storage room of a hydrogen refueling station using the ADREA-HF code [Electronic resource] / E. A. Papanikolaou, A. G. Venetsanos // 2nd International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 11–13 Sept. 2007, San Sebastian, Spain. – San Sebastian, 2007. – 12 p. – Terms of access: http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user_upload/CD/PAPERS/11SEPT/1.1.112.pdf. – 30.01.2023.

285. Гришин, А. М. Математическое моделирование лесных пожаров и новые способы борьбы с ними : монография / А. М. Гришин. – М. : Наука, 1992. – 408 с.

286. Брушлинский, Н. Н. Моделирование пожаров и взрывов : монография / Н. Н. Брушлинский, А. Я. Корольченко. – М. : Пожнаука, 2000. – 482 с.

287. Количественная оценка риска химических аварий : монография / В. М. Колодкин, А. В. Мурин, А. К. Петров, В. Г. Горский. – Ижевск : ИД «Удмуртский университет», 2001. – 228 с.

288. An Intercomparison Exercise on the Capabilities of CFD Models to Predict Deflagration of a Large-Scale H₂-Air Mixture in Open Atmosphere [Electronic resource] / E. Gallego, J. Garcia, E. Migoya, A. Crespo // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 10 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/120003.pdf>. – 30.01.2023.

289. Nozu, T. Numerical Simulation of Hydrogen Explosion Tests with a Barrier Wall for Blast Mitigation [Electronic resource] / T. Nozu // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 12 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/130028.pdf>. – 30.01.2023.

290. Schneider, H. Large Scale Experiments: Deflagration and Deflagration to Detonation within a partial Confinement similar to a lane [Electronic resource] / H. Schneider // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 7 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/120018.pdf>. – 30.01.2023.

291. Experimental study on hydrogen explosions in a full-scale hydrogen filling station model [Electronic resource] / T. Tanaka, T. Azuma, J. A. Evans, P. M. Cronin // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 12 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/120018.pdf>. – 30.01.2023.

292. Keßler, A. Hydrogen detection: visualization of hydrogen using noninvasive optical schlieren technique BOS [Electronic resource] / A. Keßler, W. Ehrhardt, G. Lang // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 6 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/110127.pdf>. – 30.01.2023.

293. Breitung, W. Analysis methodology for hydrogen behaviour in accident scenarios [Electronic resource] / W. Breitung // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 12 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/120009.pdf>. – 30.01.2023.

294. Phenomena of Dispersion and Explosion of High Pressurized Hydrogen [Electronic resource] / K. Takeno, K. Okabayashi, T. Ichinose, A. Kouchi // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 12 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/120009.pdf>. – 30.01.2023.

295. Dorofeev, S. B. Evaluation of safety distances related to unconfined hydrogen explosions [Electronic resource] / S. B. Dorofeev // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 12 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/100129.pdf>. – 30.01.2023.

296. Validation of FLACS-hydrogen CFD consequence prediction model against large scale H₂ explosion experiments in the flame facility [Electronic resource] / O. R. Hansen, J. Renoult, M. P. Sherman, S. R. Tieszen // 1st International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 8–10 Sept. 2005, Pisa, Italy. – Pisa, 2005. – 12 p. – Terms of access: <http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/120075.pdf>. – 30.01.2023.

297. Локальные вычислительные сети : справочник / под ред. С. В. Назарова. – М. : Финансы и статистика, 1994. – 250 с.

298. Гергель, В. П. Основы параллельных вычислений для многопроцессорных вычислительных систем : учеб. пособие / В. П. Гергель, Р. Г. Стронгин. – Нижний Новгород : Изд-во ННГУ им. Н. И. Лобачевского, 2003. – 184 с.

299. Корнеев, В. Д. Параллельное программирование в MPI / В. Д. Корнеев. – Новосибирск : Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2002. – 215 с.

300. Freeman, A. Pro .NET 4 Parallel Programming in C# : monograph / A. Freeman. – New York : Apress, 2010. – 311 p.

301. Puttock, G. S. Marlin Sands experiments 1980 : Dispersion results from continuous releases of refrigerated liquid propane / G. S. Puttock, G. W. Colenbrander, D. R. Blackmore // Heavy Gas and Risk Assessment. – 1980. – No. 11. – P. 147–161.

302. Witcofski, R. D. Experimental and Analytical Analyses of the Mechanisms Governing the Dispersion of Flammable Clods Formed by Liquid Hydrogen Spills / R. D. Witcofski, J. E. Chirivella // Int. J. Hydrogen Energy. – 1984. – Vol. 9. – No. 5. – P. 425–435.

303. Пехович, А. И. Расчеты теплового режима твердых тел : монография / А. И. Пехович, В. М. Жидких. – Л. : Энергия, 1976. – 352 с.

304. Карслоу, Г. Теплопроводность твердых тел : монография / Г. Карслоу, Д. Егер. – М. : Наука, 1964. – 302 с.

305. Дульнев, Г. Н. Методы расчета теплового режима приборов : монография / Г. Н. Дульнев, В. Г. Парфенов, А. В. Сигалов. – М. : Радио и связь, 1990. – 312 с.

306. Дульнев, Г. Н. Применение ЭВМ для решения задач теплообмена : монография / Г. Н. Дульнев, В. Г. Парфенов, А. В. Сигалов. – М. : Высш. шк., 1990. – 207 с.

307. Ярышев, Н. А. Приближенный анализ одномерных процессов теплопроводности / Н. А. Ярышев // Изв. вузов. Приборостроение. – 2000. – Т. 43, № 3. – С. 54–61.

308. Золотухин, Ю. А. Моделирование и расчет температурных полей в переходных процессах теплопроводности / Ю. А. Золотухин // Современные технологии : сб. науч. ст. / Санкт-Петербургский гос. ун-т инф. технологий, механики и оптики. – СПб., 2001. – № 1 (15). – С. 249–256.

309. Experimental study of large-scale unconfined fuel spray detonation / Alekseev V. I. et al. // Progress in astronautics and aeronautics. – 1993. – Vol. 154. – P. 95–104.

310. Взрывные явления. Оценки и последствия : пер. с англ. / У. Бейкер и др. – М. : Мир, 1986. – 319 с.

311. Когарко, С. М. Исследование сферической детонации газовых смесей / С. М. Когарко, В. В. Адушкин, А. Г. Лямин // Научно-технические проблемы горения. – 1965. – № 2. – С. 22–34.

312. Борисов, А. А. О моделировании волн давления, образующихся при детонации и горении газовых смесей / А. А. Борисов, Б. Е. Гельфанд, С. А. Цыганов // Физика горения и взрыва. – 1985. – № 2. – С. 163–165.

313. Методика оценки последствий аварийных выбросов опасных веществ. Методика «ТОКСИ». – М. : ФГУП НТЦ «Промышленная безопасность», 2005. – 67 с.

314. Методика оценки последствий аварийных взрывов топливно-воздушных смесей. Сер. 27 : руководство по безопасности. – М. : ЗАО «Научно-технический центр исследований проблем промышленной безопасности», 2015. – Вып. 15. – 44 с.

315. Буч, Г. Язык UML : руководство пользователя / Г. Буч, Д. Рамбо, А. Джекобсон. – М., СПб. : Пресс, Питер, 2004. – 432 с.

316. Шевченко, Р. Рейтинг языков программирования № 8 [Электронный ресурс] / Р. Шевченко. – Режим доступа: <https://dou.ua/lenta/articles/language-rating-jan-2017/>. – 30.01.2023.

317. Chang, J. C. Air quality model performance evaluation / J. C. Chang, S. R. Hanna // Meteorol Atmos Phys. – 2004. – No. 87. – P. 167–196.

318. Верификация и валидация моделей для инженерных расчетов [Электронный ресурс] – Режим доступа: <https://multiphysics.ru/stati/blog/verifikatciia-i-validatciia-modelei-dlia-inzhenernykh-raschetov.htm>. – 30.01.2023.

319. CASE-технологии в управлении проектами : монография / В. Я. Жихарев, В. М. Илюшко, Л. Г. Кравец, С. Ю. Мелешенко, А. Ю. Соколов, В. Н. Торчило. – Житомир : Волынь, 2005. – 534 с.

320. Самарский, А. А. Разностные методы решения задач газовой динамики : учеб. пособие / А. А. Самарский, Ю. П. Попов. – М. : Наука, 1992. – 424 с.

321. Волков, К. Н. Разностные схемы в задачах газовой динамики на неструктурированных сетках : монография / К. Н. Волков. – М. : Физматлит, 2015. – 416 с.

322. Ковеня, В. М. Методы конечных разностей и конечных объемов для решения задач математической физики : учеб. пособие / В. М. Ковеня, Д. В. Чирков. – Новосибирск : Новосиб. гос. ун-т, 2013. – 87 с.

323. Ильин, В. П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений : монография / В. П. Ильин. – Новосибирск : Изд-во Ин-та математики, 2000. – 345 с.

324. Рождественский, Б. Л. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике : монография / Б. Л. Рождественский, Н. Н. Яненко. – М. : Наука, 1978. – 687 с.

325. Шемарулин, В. Е. Дифференциально-геометрические свойства уравнений одномерной изэнтропической газовой динамики : монография / В. Е. Шемарулин. – Саров : РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2015. – 199 с.

326. Ковеня, В. М. Алгоритмы расщепления при решении многомерных задач аэрогидродинамики : монография / В. М. Ковеня. – Новосибирск : СО РАН, 2014. – 280 с.

327. Самарский, А. А. Теория разностных схем : учеб. пособие / А. А. Самарский. – М. : Наука, 1977. – 657 с.

328. Олдер, Б. Вычислительные методы в гидродинамике : монография / Б. Олдер, С. Фернбах, М. Ротенберг. – М. : Мир, 1967. – 385 с.

329. Флетчер, К. Вычислительные методы в динамике жидкостей : монография. В 2 т. Т. 1 / К. Флетчер. – М. : Мир, 1991. – 504 с.

330. Флетчер, К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. Методы расчета различных течений : монография. В 2 т. Т. 2. / К. Флетчер. – М. : Мир, 1991. – 552 с.

331. Годунов, С. К. Разностные схемы : учеб. пособие / С. К. Годунов, В. С. Рябенский. – М. : Наука, 1977. – 440 с.

332. Яненко, Н. Н. Математика. Механика : избранные труды / Н. Н. Яненко. – М. : Наука, 1991. – 418 с.

333. О методах расчета задач газовой динамики с большими деформациями [Электронный ресурс]. – 11 с. – Режим доступа: <http://www.prometeus.nsc.ru/math/yanenko/pdf/006.pdf>. – 30.01.2023.

334. Дьяченко, В. Ф. Основные понятия вычислительной математики : монография / В. Ф. Дьяченко. – М. : Наука, 1977. – 128 с.

335. Nolan, Dennis P. Handbook of Fire and Explosion Protection Engineering Principles: for Oil, Gas, Chemical and Related Facilities : monograph / Dennis P. Nolan. – Burlington : Gulf Professional Publishing, Elsevier, 2011. – 340 p.

336. Jianwei, Cheng. Explosions in Underground Coal Mines. Risk Assessment and Control : monograph / Cheng Jianwei. – Berlin : Springer International Publishing AG, 2018. – 208 p.

337. Fedorov, A. V. Exit of a heterogeneous detonation wave into a channel with linear expansion. Propagation regimes / A. V. Fedorov,

T. A. Khmel', S. A. Lavruk // Combustion, Explosion, and Shock Waves. – 2017. – Vol. 53, Issue 5. – P. 585–595.

338. An inter-comparison exercise on CFD model capabilities to simulate hydrogen deflagrations in a tunnel / D. Baraldi, A. Kotchourko, A. Lelyakin, J. Yanez, P. Middha, O. R. Hansen, A. Gavrikov, A. Efimenko, F. Verbecke, D. Makarov, V. Molkov // International Journal of Hydrogen Energy. – 2009. – Vol. 34. – P. 7862–7872.

339. Jallais, S. An Inter-Comparison Exercise on Engineering Models Capabilities to Simulate Hydrogen Vented Explosions [Electronic resource] / S. Jallais, S. Kudriakov // 5th International Conference on Hydrogen Safety : conf. proc., 9–11 Sept. 2013, Brussels, Belgium. – Brussels, 2013. – 13 p. – Terms of access: <http://www.ichs2013.com/images/papers/176.pdf>. – 30.01.2023.

340. Methods for the determination of possible damage to people and objects resulting from releases of hazardous materials (CPR-16E). Green book / Director-General of Labour. – 1992. – 337 p.

341. Pietersen, C. M. Consequences of accidental releases of hazardous material / C. M. Pietersen // J. Loss Prevent. Proc. Ind. – 1990. – No. 3 (1). – P. 136–141.

342. Физико-химические процессы в газовой динамике. Физико-химическая кинетика и термодинамика : компьютеризованный справочник. В 3-х т. Т. 2 / под ред. Г. Г. Черного и С. А. Лосева. – М. : Научно-издательский центр механики, 2002. – 368 с.

343. Пажи, Д. Г. Распылители жидкостей : монография / Д. Г. Пажи, В. С. Галустов. – М. : Химия, 1979. – 216 с.

344. Нигматулин, Р. И. Динамика многофазных сред : монография. Т. 1 / Р. И. Нигматулин. – М. : Наука, 1987. – 384 с.

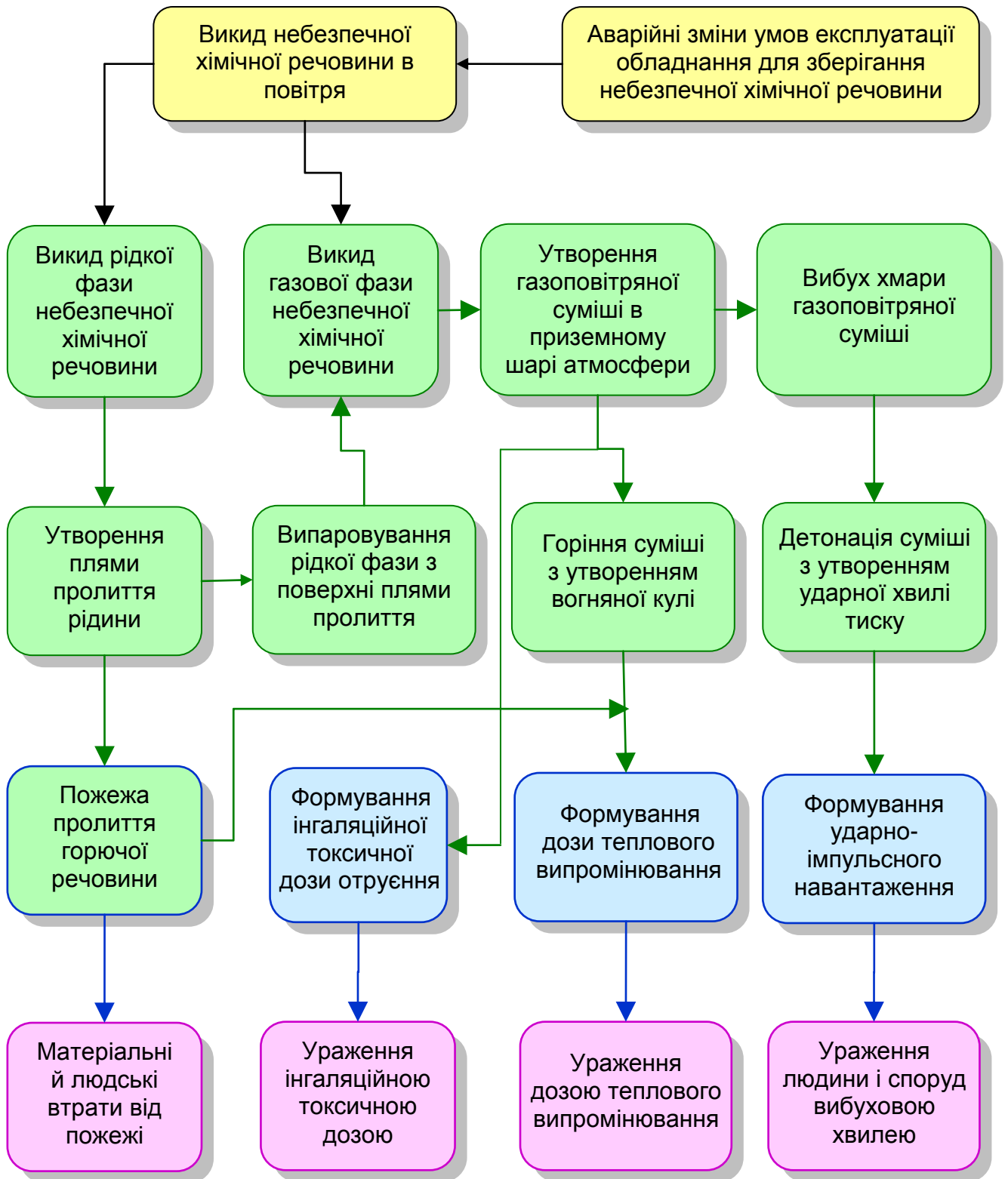
345. Ландау, Л. Д. Теоретическая физика : учеб. пособие. В 10 т. Т. 6. Гидродинамика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Наука, 1986. – 736 с.

346. Брусиловский, И. В. Аэродинамика осевых вентиляторов : монография / И. В. Брусиловский. – М. : Машиностроение, 1984. – 240 с.

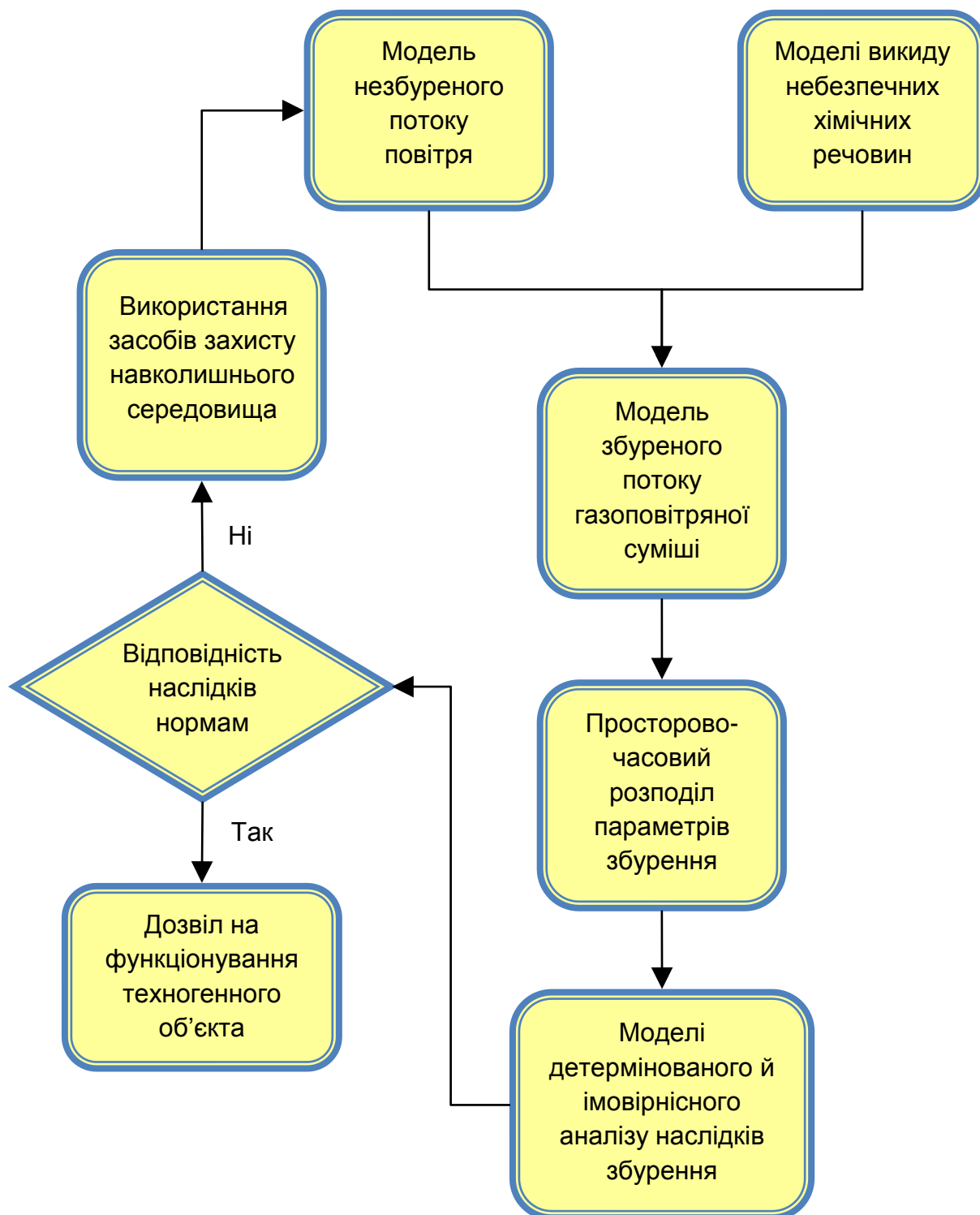
347. Нечипорук, Н. В. Математическое моделирование экологических процессов : учеб. пособ. по лаб. практ. / Н. В. Нечипорук, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов. – Харьков : ХАИ, 2007. – 89 с.

348. Кобрин, В. Н. Решение инженерных задач экологии средствами прикладных пакетов Excel, MathCad, Delphi, Visual C++ : учеб. пособ. по лаб. практ. / В. Н. Кобрин, Ю. А. Скоб, М. Л. Угрюмов. – Харьков : ХАИ, 2007. – 109 с.

СТРУКТУРНА СХЕМА ФІЗИЧНИХ ПРОЦЕСІВ ЗБУРЕННЯ ПОТОКУ ПОВІТРЯ ТЕХНОГЕННОГО ОБ'ЄКТА

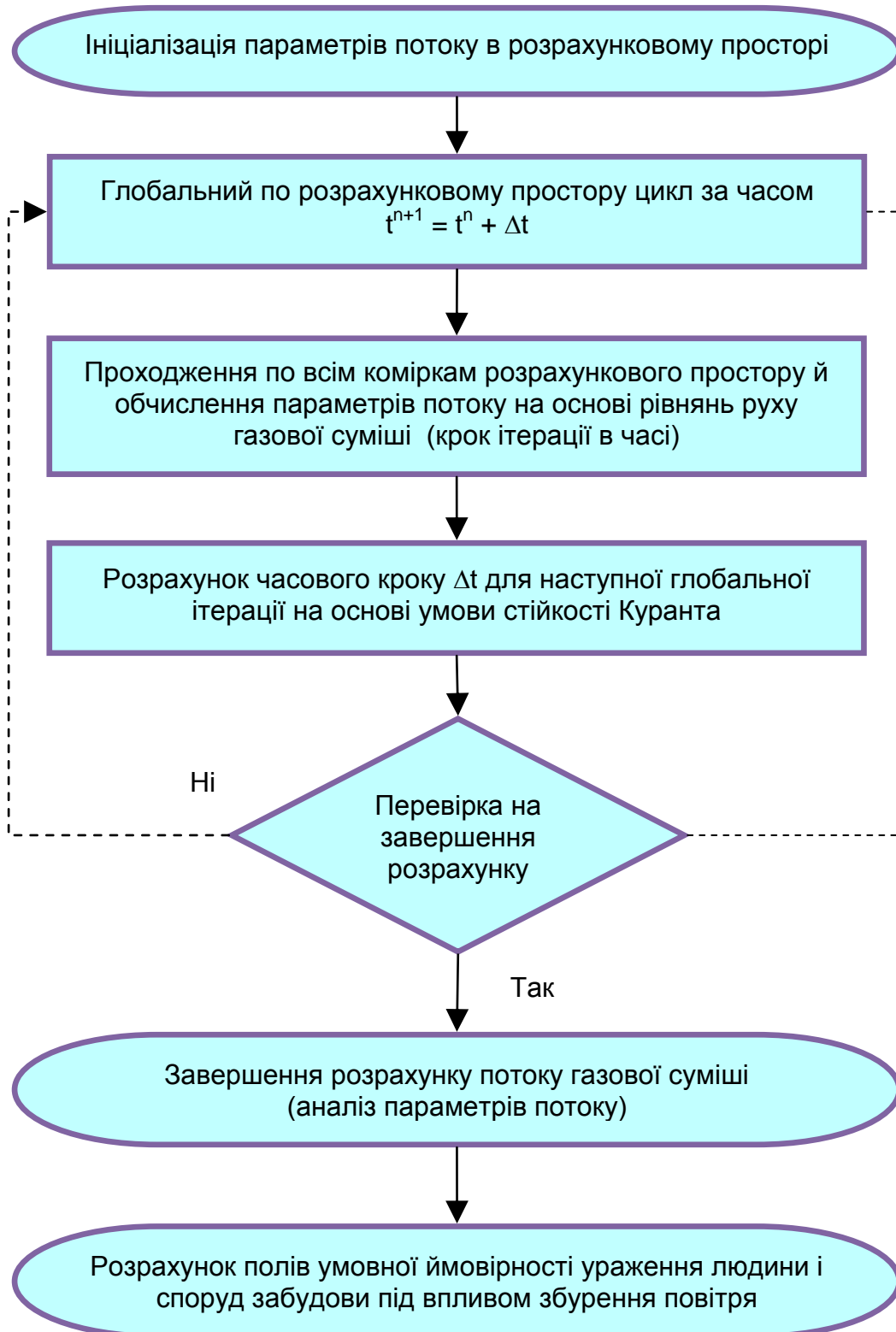


ЗАГАЛЬНА СХЕМА ОЦІНЮВАННЯ НАСЛІДКІВ ЗБУРЕННЯ ПОВІТРЯ



ТОКСИЧНІ ВЛАСТИВОСТІ ОТРУЙНИХ РЕЧОВИН

Речовина	Молярна маса μ	Густина газу $\rho_g, \text{кг/м}^3$	Густина рідини $\rho_r, \text{кг/м}^3$	Температура кипіння $T_{\text{кип}}, ^\circ\text{C}$	Теплоємність газу $C_p, \text{кДж/(кг}\cdot^\circ\text{C)}$	Коефіцієнт адиабати k	Коефіцієнти для пробіт-функції		
							A	B	n
Аміак	17,0	0,8	681	-33,4	2,1	1,34	-35,9	1,85	2
Фтористий водень	20,4	0,92	989	19,4	1,42	1,3	-35,87	3,354	1
Хлористий водень	36,5	1,64	1191	-85,1	0,8	1,41	-16,85	2	1
Бромистий водень	80,9	3,50	1490	-67,8	0,36	1,42	-18,32	2	1
Ціанистий водень	27,0	0,9	689	25,6	1,33	1,31	-9,56	1	2,4
Сірководень	34,1	1,5	964	-60,4	1,04	1,3	-31,42	3,008	1,43
Сірковуглець	76,1	6,0	1263	46,2	0,67	1,24	-46,62	4,2	1
Формальдегід	30	1,03	815	-19,3	1,32	1,3	-12,24	1,3	2
Фосген	98,9	3,48	1420	8,2	0,67	1,3	-19,27	3,686	1
Фтор	38,0	1,7	1512	-188,0	3,32	1,3	-10,34	1	2
Хлор	70,9	3,2	1553	-34,1	0,48	1,3	-8,29	0,92	2
Хлорціан	61,5	2,52	1258	12,6	0,73	1,3	-	-	-
Окис вуглецю	28	0,97	1000	-191,6	1,04	1,29	-37,98	3,7	1
Окис етилену	44	1,7	882	10,7	1,72	1,3	-6,21	1	1
Метан	16	0,68	161	-162	1,77	1,42	-	-	-
Пропан	44	1,86	509	-42	1,6	1,13	-	-	-
Бутан	58	2,46	584	-0,5	1,6	1,1	-	-	-
Водень	2	0,09	31,5	-254	14	1,41	-	-	-
Бензин	115	4,86	740	60	1	1,07	-	-	-
Бензол	78	3,5	883	80	1	1,12	-109,8	5,3	2
Диметиламін	45	1,95	661	7	1,5	1,14	-7,340	2	1
Акрилонітрил	53	2,24	813	77	1,2	1,15	-14,97	1,9	1
Акролеїн	56	2,37	844	53	1,1	1,16	-9,931	2,049	1

**ОБЧИСЛЮВАЛЬНИЙ МЕТОД НАСКРІЗНОГО
РОЗРАХУНКУ РУХУ СУМІШІ**

АЛГОРИТМ ПАРАЛЕЛЬНОГО ОБЧИСЛЕННЯ

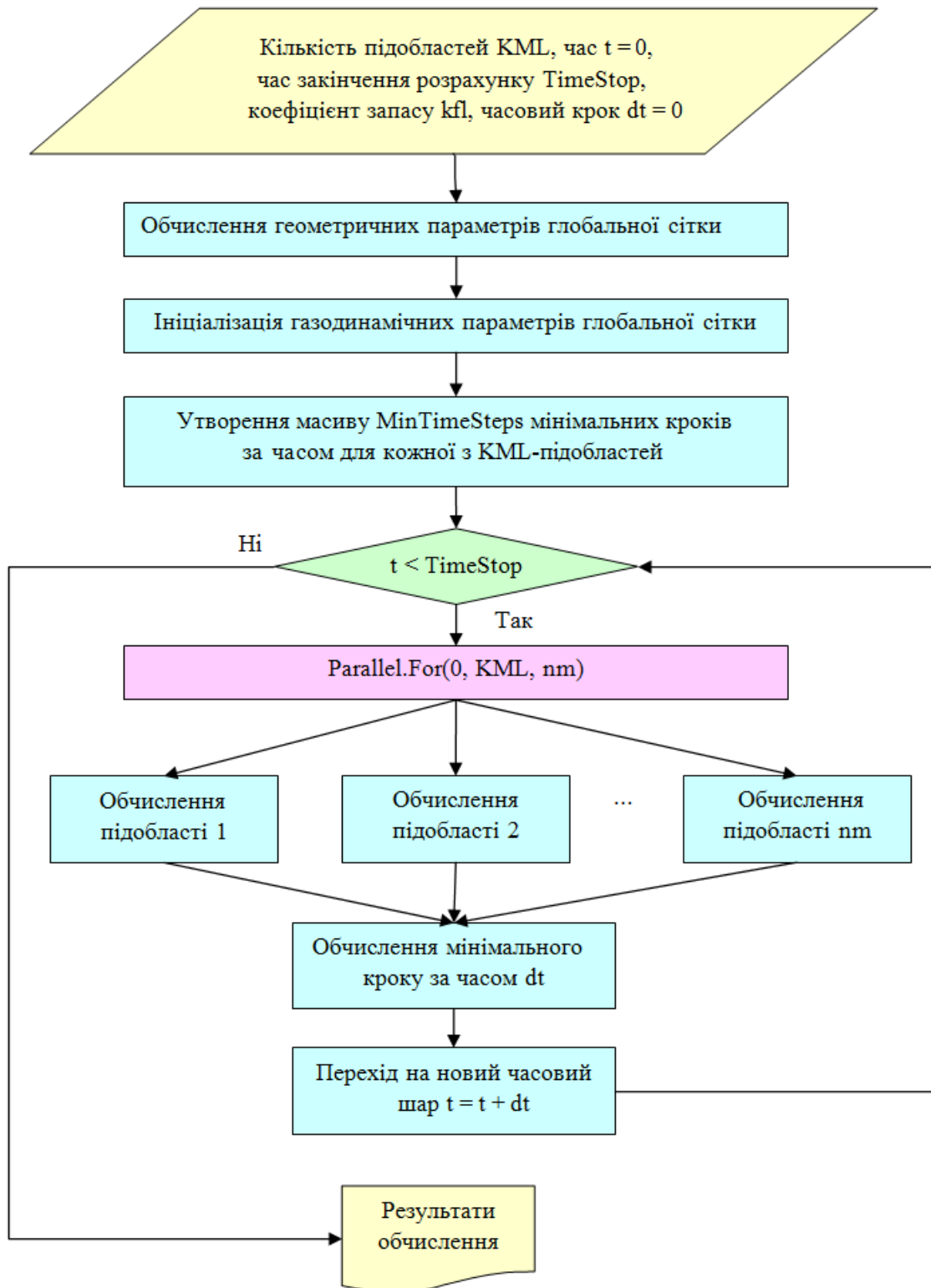
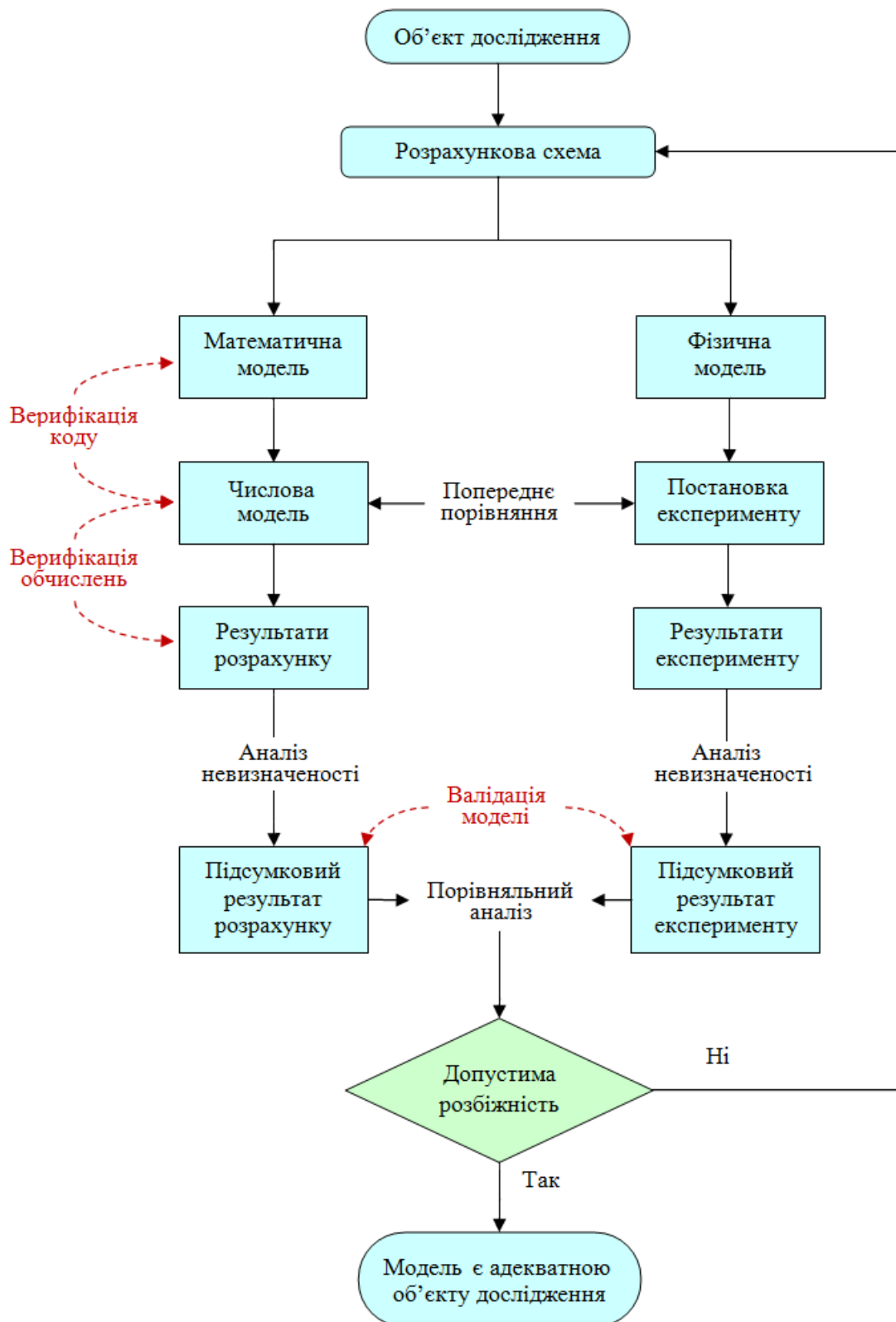


СХЕМА ВЕРИФІКАЦІЇ Й ВАЛІДАЦІЇ МОДЕЛІ



Наукове видання

**Скоб Юрій Олексійович
Нечипорук Микола Васильович
Угрюмов Михайло Леонідович**

**МОДЕЛЮВАННЯ ПРОЦЕСІВ ФОРМУВАННЯ І РУХУ ГАЗОВИХ
СУМІШЕЙ В АТМОСФЕРІ ПІД ЧАС ТЕХНОГЕННИХ АВАРІЙ
І В СИСТЕМАХ ПРОМИСЛОВОЇ АЕРОДИНАМІКИ**

Редактор Т. О. Іващенко

Зв. план, 2022

Підписано до друку 03.04.2023

Формат 60×84 1/16. Папір офс. Офс. друк

Ум. друк. арк. 16. Обл.-вид. арк. 18. Наклад 350 пр.

Замовлення 127. Ціна вільна

Видавець і виготовлювач

Національний аерокосмічний університет ім. М. Є. Жуковського

«Харківський авіаційний інститут»

61070, Харків-70, вул. Чкалова, 17

<http://www.khai.edu>

Видавничий центр «ХАІ»

61070, Харків-70, вул. Чкалова, 17

izdat@khai.edu

Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи
до Державного реєстру видавців, виготовлювачів і розповсюджувачів
видавничої продукції сер. ДК № 391 від 30.03.2001