

УДК 533.27:519.63

**Ю.А. СКОБ***Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина*

## **ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗРЫВОВ ГАЗО-ВОЗДУШНЫХ СМЕСЕЙ В АТМОСФЕРЕ**

Представлены постановка задачи и алгоритм численного моделирования процессов движения газо-воздушной смеси в атмосфере, ее взрыва с учетом химического взаимодействия и дальнейшего распространения продуктов сгорания в открытом пространстве со сложным рельефом местности. Рассмотрен ряд тестовых расчетов, моделирующих взрывы пропана и водорода.

**моделирование, смешение газов, взрыв, химическое взаимодействие, атмосфера**

### **Введение**

Современные производственные циклы на предприятиях авиационно-космической промышленности используют такие взрывоопасные газы, как водород, ацетилен, пропан и др. Различные неисправности в оборудовании, разрушение емкостей хранения этих веществ приводят к выбросу их в атмосферу, формированию взрывоопасных смесей с воздухом. В результате этого возникает реальная угроза воспламенения газовых смесей, сопровождаемого химическим взаимодействием их компонент, детонационных взрывов, и, как следствие, значительного материального ущерба и человеческих жертв.

Физический эксперимент, моделирующий вышеперечисленные газодинамические явления, является дорогостоящим мероприятием, трудно переносимым на реальные условия в производственных цехах и испытательных стендах предприятий авиационно-космической промышленности. Как правило, для прогнозирования нагрузок на конструкции, возникающих при взрыве, определяют избыточное давление и импульс ударной волны с использованием полупирических уравнений регрессии [1 – 3]. Однако, экспериментальные данные были получены в открытом пространстве без учета сложного рельефа местности. Существующие в настоящее время методы численного моделирования перехода горения в

детонацию, например [4], разработаны для модельных задач. Поэтому проблема создания математической модели, адекватно описывающей нестационарные процессы формирования взрывоопасных газо-воздушных смесей в трехмерном пространстве, их взрыва, с учетом химического взаимодействия компонент смесей, и дальнейшего рассеяния продуктов сгорания в атмосфере является актуальной. Компьютерная система, которая реализует данную математическую модель, позволит анализировать и прогнозировать трехмерные поля концентрации взрывоопасной примеси, термодинамические параметры смеси во времени (до и после взрыва) и пространстве, оценивать возможные разрушения от взрывов.

### **Математическая модель**

Адекватное описание физических процессов смешения нереагирующих газов с воздухом и дальнейшего распространения смеси при истечении струи в открытое пространство или замкнутое помещение с принудительной (или естественной) вентиляцией возможно только с использованием системы нестационарных уравнений Навье-Стокса для сжимаемого газа. Ограниченные возможности нынешних компьютеров не позволяют эффективно осуществлять прямое численное решение этих уравнений. В настоящее время, численное моделирова-

ние турбулентных течений осуществляют путем решения осредненных по Рейнольдсу-Фавру уравнений Навье-Стокса, дополненных моделью турбулентности [5, 6]. Однако большинство моделей турбулентности не описывают с одинаковой степенью адекватности различные типы течений. Особенно это касается течений с интенсивными отрывами потока и/или большими градиентами давления температуры. Поэтому существует необходимость построения новых моделей и расчетных схем для численного моделирования такого рода течений.

Целью данной работы является разработка упрощенной математической модели, адекватно описывающей нестационарные процессы формирования взрывоопасных газоздушных смесей в трехмерном пространстве, их взрыва (с учетом химического взаимодействия компонент смесей) и дальнейшего рассеяния продуктов сгорания в атмосфере, а также алгоритма численного моделирования этих процессов.

В результате структурного анализа такого течения и декомпозиции полной математической модели газодинамического процесса принято в качестве предположения допущение о том, что основное влияние на процесс оказывает конвективный обмен массой, импульсом и энергией. Таким образом, для описания процессов смешения двухкомпонентного газа в рассматриваемом случае достаточно использовать усеченные уравнения Навье-Стокса, полученные путем отбрасывания вязких членов (приближение Эйлера с использованием источниковых членов).

Расчетной областью  $\Omega$  является параллелепипед с прямолинейными образующими (рис. 1), расположенный в правой декартовой системе координат (X, Y, Z) с основанием в плоскости XOZ (ось Y ориентирована в направлении, противоположном действию сил тяжести Земли). Расчетная область разбивается на пространственные ячейки, причем размеры граней подбираются в соответствии с характерным

размером особенностей расчетной области (шероховатости обтекаемой поверхности, размерностью обтекаемых объектов).

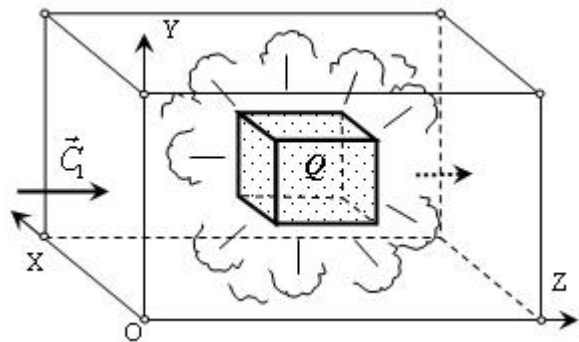


Рис. 1. Расчетная схема взрыва газового облака

Полная система уравнений, описывающая нестационарное трехмерное течение двухкомпонентной смеси газов в данной постановке имеет вид [7, 8]:

$$\frac{\partial \vec{a}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{b}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{c}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{d}}{\partial z} = \rho \vec{f}, \quad (1)$$

где  $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{d}, \vec{f}$  – вектор-столбцы вида:

$$\vec{a} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, E]^T, \quad (2)$$

$$\vec{b} = [\rho u, P + \rho u^2, \rho uv, \rho uw, (E + P)u]^T, \quad (3)$$

$$\vec{c} = [\rho v, \rho vu, P + \rho v^2, \rho vw, (E + P)v]^T, \quad (4)$$

$$\vec{d} = [\rho w, \rho wu, \rho wv, P + \rho w^2, (E + P)w]^T, \quad (5)$$

$$\vec{f} = [0, 0, -g, 0, -gv]^T; \quad (6)$$

$t$  – время;  $u, v, w$  – составляющие вектора скорости  $\vec{q}$ ;  $P, \rho$  – давление и плотность;  $E$  – полная энергия единицы объема смеси газов

$$E = \rho(e + \frac{1}{2}(u^2 + v^2 + w^2)); \quad (7)$$

$e$  – внутренняя энергия единицы массы газа; компоненты вектора  $\vec{f}$  – суть проекции распределенных объемных источников;  $g$  – ускорение свободного падения.

Закон переноса компоненты смеси (горючий газ, продукты сгорания) с учетом скорости диффузии имеет вид [9]:

$$\frac{\partial(\rho Q)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Q)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v Q)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w Q)}{\partial z} = \rho Q, \quad (8)$$

где  $Q$  – относительная массовая плотность примеси (отношение плотности газообразного вещества примеси к плотности смеси),  $\rho Q$  – интенсивность изменения плотности примеси вследствие турбулентной диффузии в соответствии с законом Фика  $\rho Q_t = \text{div}(\rho \vartheta_D \text{grad} Q)$  (коэффициент турбулентной диффузии  $\vartheta_D$  определялся по методике, предложенной М.Е. Берляндом [10]).

Система уравнений (1 – 8) является незамкнутой. Дополним ее уравнениями, определяющими теплофизические свойства компонент смеси [9]. Для идеального политропного газа величина  $e$  связана с  $P$  и  $\rho$  смеси зависимостью:  $e = \frac{P}{(k-1)\rho}$ .

При постановке граничных условий полагается, что расходная составляющая скорости не превосходит скорость звука. Граничные условия на входе будем задавать на поверхностях тех граней, примыкающих к границам расчетной области, через которые в расчетную область поступает атмосферный воздух. Набегающий поток на входе определяется величинами:

– полной энтальпии

$$I_{00} = \frac{k}{k-1} \frac{P}{\rho} + \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2}; \quad (9)$$

– функции энтропии

$$S_0 = \frac{P}{\rho^k}; \quad (10)$$

– направлением вектора скорости потока (углами  $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ );

– относительной массовой плотностью примеси  $Q$  ( $Q \leq 1$ , если поступает газообразное вещество примеси, например, угарный газ CO).

Параметры потока на входе определяются из равенств (3, 4) с учетом заданных  $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$  с привлечением соотношения для “левого” инварианта

Римана [8, 11]. На непроницаемых участках, ограничивающих расчетную область поверхностей, выполняются условия «непротекания»:  $q_n = 0$ , где  $\vec{n}$  – вектор нормали к рассматриваемой границе. Граничные условия на выходе будем задавать на поверхностях тех граней конечно-разностных ячеек, которые примыкают к границам расчетной области и через которые предполагается вытекание или втекание смеси. В выходных областях, кроме атмосферного давления  $P_A$ , задаваемого либо взятого из эксперимента, использовались соотношения для “правого” инварианта Римана [8, 11].

В начальный момент времени во всех «газообразных» ячейках расчетной области принимаются параметры окружающей среды. В ячейках, занимаемых облаком газообразной примеси, которое образовалось в результате мгновенного выброса, относительная массовая концентрация примеси принимается равной  $Q = 1$  (100%). В ячейках с испарением или истечением газа задается закон изменения расхода примеси.

### Модель взрыва смеси газов

Масса горючего, участвующего в горении, определяется для расчетных ячеек с концентрацией примеси, попадающей в диапазон между минимальным и максимальным концентрационными пределами воспламеняемости  $Q_{\min} \leq Q \leq Q_{\max}$ :

$$m'' = \sum(\rho Q \Delta V). \quad (11)$$

Масса горючего, не участвующего в горении, определяется для расчетных ячеек с концентрацией примеси  $Q > Q_{\max}$ :

$$m'_0 = \sum(\rho Q \Delta V). \quad (12)$$

Общая масса смеси в объеме, где произойдет горение, определяется для расчетных ячеек с концентрацией примеси  $Q > Q_{\min}$ :

$$m = \sum(\rho \Delta V). \quad (13)$$

С другой стороны, общая масса смеси  $m$  включает массы окислителя  $m'$ , горючего, участвующего  $m''$  и не участвующего  $m_0''$  в горении:

$$m = m' + m'' + m_0'' \quad (14)$$

Отсюда масса окислителя в смеси равна:

$$m' = m - m'' - m_0'' \quad (15)$$

Массовые концентрации компонент смеси, осредненные по объему расчетной области, определяются:

$$Q'' = \frac{m''}{m}; \quad (16)$$

$$Q_0'' = \frac{m_0''}{m}; \quad (17)$$

$$Q' = \frac{m'}{m} = 1 - Q'' - Q_0'' \quad (18)$$

Коэффициент избытка воздуха  $\alpha$  в смеси равен

$$\alpha = \frac{m'}{\vartheta_0 m''} = \frac{1 - Q'' - Q_0''}{\vartheta_0 Q''}, \quad (19)$$

где  $\vartheta_0 = \frac{m'_{th}}{m''}$  – стехиометрическое число;  $m'_{th}$  – масса воздуха, теоретически необходимая для полного сгорания 1 кг топлива.

Задаем нижнюю теплоту сгорания горючей смеси  $H_u$  из таблиц теплофизических свойств веществ. Молярная масса  $\mu_{np}$  и коэффициент адиабаты  $k_{np}$  продуктов сгорания определяются на основе гипотезы обратимости реализующихся химических реакций.

В случае, когда  $\alpha \geq 1$ , теплофизические свойства газовой смеси после взрыва определяются по формулам:

$$\mu = \frac{1}{\frac{1 - (\vartheta_0 + 1)Q'' - Q_0''}{\mu'} + \frac{(\vartheta_0 + 1)Q'' + Q_0''}{\mu_{np}} + \frac{Q_0''}{\mu''}}; \quad (20)$$

$$C_p = [1 - (\vartheta_0 + 1)Q'' - Q_0'']C'_p + (\vartheta_0 + 1)Q''C_p^{np} + Q_0''C_p''; \quad (21)$$

$$C_v = [1 - (\vartheta_0 + 1)Q'' - Q_0'']C'_v + (\vartheta_0 + 1)Q''C_v^{np} + Q_0''C_v''; \quad (22)$$

$$k = \frac{C_p}{C_v}. \quad (23)$$

В случае, когда  $\alpha < 1$ , теплофизические свойства газовой смеси после взрыва определяются по формулам:

$$\mu = \frac{\vartheta_0}{\frac{(1 + \vartheta_0)Q'}{\mu_{np}} + \frac{\vartheta_0 - (1 + \vartheta_0)Q'}{\mu''}}; \quad (24)$$

$$C_p = (1 - Q_{np})C_p'' + Q_{np}C_p^{np}; \quad (25)$$

$$C_v = (1 - Q_{np})C_v'' + Q_{np}C_v^{np}; \quad (26)$$

$$k = \frac{C_p}{C_v}. \quad (26)$$

В обоих случаях газодинамические параметры смеси (давление, температура, плотность) равны:

$$P = \frac{H_u m'_{th} (k - 1)}{V} + P_a = \frac{H_u (1 - Q'' - Q_0'') m'' (k - 1)}{\vartheta_0 Q'' V} + P_a; \quad (27)$$

$$T = \frac{PV\mu}{mR_{yH}}; \quad (28)$$

$$\rho = \frac{m}{V}. \quad (29)$$

В дальнейшем предполагается, что взрыв происходит мгновенно, горение происходит в постоянном объеме, занимаемом взрывоопасной смесью с концентрацией горючего в пределах воспламеняемости. После взрыва в локализованном объеме газодинамические параметры двухкомпонентной смеси (воздух и горючее) изменялись на газодинамические параметры трехкомпонентной смеси (воздух, продукты сгорания и остаток горючего).

### Алгоритм численного решения

Векторное уравнение (1) является следствием законов сохранения массы, импульса и энергии, которые могут быть представлены в интегральной форме для каждой расчетной ячейки:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V adV + \iint_{\bar{\sigma}} \hat{A}d\sigma = \iiint_V \rho f dV, \quad (30)$$

где  $V$  – объем элементарной расчетной ячейки;  $\bar{\sigma}$  – ограничивающая поверхность данной ячейки, кото-

рая имеет внешнюю нормаль  $\vec{n}$  ( $\vec{\sigma} = \sigma\vec{n}$ );  $\hat{A}$  – тензор плотности потока консервативных переменных  $a$ , столбцами которого являются векторы  $\vec{b}, \vec{c}, \vec{d}$ , соответственно.

Закон переноса каждой компоненты смеси (8) может быть также представлен в интегральной форме для каждой расчетной ячейки:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho Q dV + \iint_{\sigma} \rho Q q d\sigma = \iiint_V \rho Q dV. \quad (31)$$

Численное решение основных уравнений основывается на использовании схемы распада произвольного разрыва. Уравнения (30, 31) допускают возникновение и существование поверхностей разрыва двух видов: ударных волн и тангенциальных разрывов. Функции, удовлетворяющие уравнениям (30, 31), можно рассматривать в качестве обобщенных решений уравнений газовой динамики. Использование интегральных законов сохранения массы, импульса, энергии и концентрации газообразной примеси в качестве исходных для построения разрывных уравнений обеспечивает построение разрывных решений без выделения разрывов.

Совокупность газодинамических параметров во всех ячейках в момент времени  $t^n$  представляет собой известное решение на временном слое с индексом  $n$ . Параметры в момент времени  $t^{n+1} = t^n + \tau$  (на слое  $n+1$ ) рассчитывались посредством применения явных разностных аппроксимаций для соотношений (5) в рамках интегроинтерполяционного метода С.К. Годунова [11]. На первом этапе непрерывное распределение параметров заменяется кусочно-постоянными среднеинтегральными значениями в каждой расчетной ячейке. При этом границы ячейки представляют собой неустойчивые поверхности произвольного разрыва, которые распадаются на устойчивые волновые элементы: ударную волну, контактную поверхность и волну разрежения. Для каждого такого разрыва определяются потоки массы, импульса и

энергии через грани газовых ячеек. В момент взрыва в объеме расчетной области, занимаемом взрывоопасной смесью с концентрацией примеси в диапазоне между минимальным и максимальным концентрационными пределами воспламеняемости  $Q_{\min} \leq Q \leq Q_{\max}$ , газодинамические параметры двухкомпонентной смеси (воздух и горючее) мгновенно изменялись на газодинамические параметры трехкомпонентной смеси (воздух, продукты сгорания и остаток горючего). Параметры смеси после взрыва определялись по формулам (11 – 29). Устойчивость конечно-разностной схемы обеспечивается за счет выбора величины шага по времени  $\tau$ .

На основе математической модели создана компьютерная система инженерного анализа газодинамических процессов формирования взрывоопасной смеси, ее взрыва и рассеяния продуктов сгорания в атмосфере, которая использована в исследовательском программном комплексе «Fire». Программа позволяет прогнозировать изменение концентрации примеси, избыточного давления и температуры во времени и пространстве с использованием персональных компьютеров в практически приемлемое время.

### **Верификация математической модели взрыва газовой смеси**

Выбросы горючих газообразных химических веществ в атмосферу и их сгорание приводит к распространению в атмосфере ударных волн, поражению персонала и разрушению жизненно важных объектов. Обычно для прогнозирования нагрузок на конструкции производственных строений, генерируемых взрывом, используется избыточное давление во фронте ударной волны.

Для верификации математической модели газодинамического процесса взрыва газовых облаков в атмосфере проводилось сравнение результатов численного моделирования с экспериментальными данными [2]. Моделировался взрыв облака стехиомет-

рической пропано-воздушной смеси при параметрах эксперимента: объем облака горючей смеси – 1495 м<sup>3</sup>; энергия взрыва – 4640 МДж.

В работе [2] на основе экспериментов при взрыве облаков ацетилена, пропана и метана с воздухом и пропана и метана с кислородом была получена регрессионная зависимость давления во фронте ударной волны от расстояния от эпицентра для заданной энергии взрыва:

$$\Delta P_{\phi} = \frac{0,6 \cdot 10^{-1}}{R_0} + \frac{1,4 \cdot 10^{-2}}{R_0^2} + \frac{2,5 \cdot 10^{-3}}{R_0^3}$$

при  $R_0 \geq 0,3$ ;

$$\Delta P_{\phi} = \frac{0,052}{R_0^{1,7}} \text{ при } 0,08 \leq R_0 < 0,3,$$

где  $R_0 = \frac{R}{E^{1/3}}$  – динамический радиус;  $R$  – расстояние от эпицентра взрыва;  $E$  – энергия взрыва.

На рис. 2 приведены результаты расчетов параметров среды после взрыва облака пропана, которые достаточно с приемлемой точностью согласуются с экспериментальными данными и с регрессионной зависимостью [2].

### Расчет взрыва облака водорода

Моделировался взрыв водородо-воздушной смеси на станции заправки транспортных средств водородным топливом как наиболее опасный аварийный сценарий с точки зрения потенциальных катастрофических последствий, угрожающих оборудованию станции, персоналу и населению близлежащих жилых построек [12].

Раздаточная станция имеет большую цистерну с жидким водородом (5,7 м<sup>3</sup>).

Криогенная цистерна питает три пакета по 12 баллонов высокого давления общим объемом 799,2 м<sup>3</sup>, в которых хранится газообразный водород при температуре окружающей среды.

Взрывоопасная смесь формируется в результате мгновенного выброса всего объема сжатого газооб-

разного водорода из баллонов раздачи и дальнейшего его рассеяния в потоке набегающего со скоростью 1 м/с воздуха.

Масса водорода в облаке в момент взрыва была равна 63 кг.

Как и следовало ожидать, в пространстве между зданиями происходит увеличение давления.

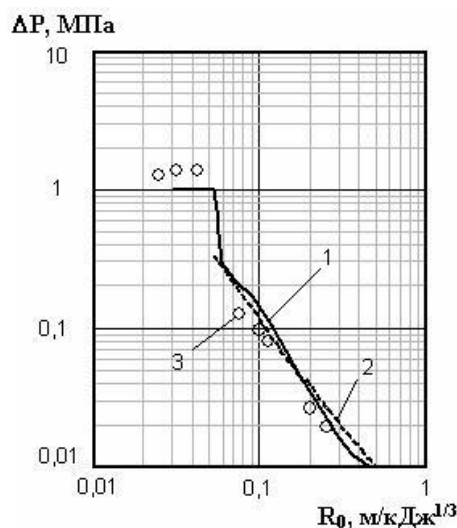


Рис. 2. Распределение избыточного давления во фронте ударной волны:  
1 – результаты расчета;  
2 – регрессионная зависимость;  
3 – экспериментальные данные

Расчетное избыточное давление среды на стенках жилых зданий, расположенных в правой части расчетной области (рис. 3, а) составило 28 кПа, что позволяет предположить возможность серьезных разрушений зданий жилого массива.



Рис. 3. Поле давлений при взрыве водорода:  
а – вид сверху у поверхности земли (плоскость XOZ); б – вид сбоку (плоскость YOZ)

### Заключение

Разработана математическая модель газодинамических процессов формирования двухкомпонентной взрывоопасной газовой смеси, ее взрыва и рассеяния продуктов сгорания в атмосфере. Конечно-разностная схема развита для случая трехмерной системы уравнений движения газовой динамики, дополненной законами сохранения массы газовой примеси и продуктов сгорания. Разработан алгоритм расчета теплофизических параметров смеси газов, образующихся в результате мгновенного взрыва. Рассмотрен алгоритм численного решения полученной разностной схемы на основе метода С.К. Годунова. Разработана компьютерная система, моделирующая взрывы обогащенных и обедненных взрывоопасных газовых смесей в атмосфере. Верификация математической модели показала приемлемую ее точность в сравнении с известными экспериментальными данными.

Выполнено численное моделирование взрыва облака газообразного водорода. Полученные результаты расчетов качественно отвечают ожидаемой физической картине и количественно могут быть использованы для прогноза возможных разрушений близлежащих строений.

### Литература

1. Взрывные явления. Оценки и последствия: В 2-х кн. / Бейкер У. и др.; Под ред. Я.Б. Зельдовича, Б.Е. Гельфанда. – М.: Мир, 1986. – 319 с.
2. Когарко С.М., Адушкин В.В., Лямин А.Г. Исследование сферической детонации газовых смесей // Научно-технические проблемы горения. – 1965. – №2. – С. 22-34.
3. Борисов А.А., Гельфанд Б.Е., Цыганов С.А. О моделировании волн давления, образующихся при детонации и горении газовых смесей // Физика горения и взрыва. – 1985. – №2. – С. 163-165.
4. Парр-Сантос М.Т., Кастро-Руис Ф., Мендес-Буено Ц. Численное моделирование перехода горения в детонацию // Физика горения и взрыва. – 2005. – Т. 41, № 2. – С. 108-115.
5. Шенг Дж. С. Обзор численных методов решения уравнений Навье-Стокса для течений сжимаемого газа // Аэрокосмическая техника. – 1986. – № 2. – С. 65-92.
6. Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен: В 2-х т. – М.: Мир, 1990. – 726 с.
7. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит.-ры, 1970. – 904 с.
8. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учебн. пос. В 10 т. – Т.6. Гидродинамика. – М.: Наука, 1986. – 736 с.
9. Митасов Ю.Д., Редько А.Ф., Скоб Ю.А., Угрюмов М.Л. Численное моделирование процесса распространения продуктов горения при пожаре в зданиях с атриумами // Науковий вісник будівництва. – 2001. – Вип. 14. – С. 258-262.
10. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Л.: Гидрометеоздат, 1975. – 448 с.
11. Численное решение многомерных задач газовой динамики / С.К. Годунов, А.В. Забродин, М.Я. Иванов, А.Н. Крайко, Г.П. Прокопов. – М.: Наука, гл. ред. физ.-мат. лит.-ры, 1976. – 400 с.
12. 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.

*Поступила в редакцию 24.04.2007*

**Рецензент:** д-р физ.-мат. наук, проф. А.В. Бастеев, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков.