

УДК 622.812

<https://doi.org/10.37101/ftpgp22.01.007>

## ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ АВАРІЙНИХ ВИБУХІВ РУДНИКОВОЇ АТМОСФЕРИ

М.М. Налісько<sup>1\*</sup>, Л.І. Барташевська<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Державний вищий навчальний заклад «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», м. Дніпро, Україна

<sup>2</sup>Національний технічний університет «Дніпровська політехніка», м. Дніпро, Україна

\*Відповідальний автор: e-mail: 59568@i.ua

## NUMERICAL SIMULATION OF AN EMERGENCY EXPLOSIONS OF THE MINING ATMOSPHERE

M.M. Nalisko<sup>1\*</sup>, L.I. Bartashevska<sup>2</sup>

<sup>1</sup> State Higher Education Establishment «Pridneprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture», Dnipro, Ukraine

<sup>2</sup> Dnipro University of Technology, Dnipro, Ukraine

\*Corresponding author: e-mail: 59568@i.ua

### ABSTRACT

**Purpose.** Development of an effective scheme for numerical calculation of the joint solution of the problem of gas dynamics and chemical kinetics of combustion of a gas-air medium on the basis of the large-particle method.

**Methods.** Mathematical modeling, numerical experiment, analysis and generalization and results.

**Findings.** For joint solution of problems of gas dynamics and chemical kinetics of combustion gas environments proposed in the numerical scheme of the method of large particles concentration function, which allows to take into account the multicomponent composition of the gas medium. This function is determined at the stage of formation of the calculation area and in each cell of the calculation scheme it determines the mole fraction of each substance. The function is involved in the calculation of mass flows across the boundaries of the calculated cells, determining the mass of the overflow for each substance. The concentration function makes it possible to introduce into the numerical scheme the equations of chemical kinetics in the form of the Arrhenius equation and to distinguish the chemical reaction components and combustion products. In the problem of calculating detonation explosions, strong pressure gradients arise which, when the front of the shock wave reaches the free exit boundary, nonphysical fluctuations of the parameter are generated. To exclude their influence on the process under consideration, various types of approximation of parameters in the fictitious layer of the design scheme are analyzed. From the analysis of physical processes an effective

form of the boundary conditions is found for a free yield for the problem of propagation of a shock wave in a channel.

**Originality.** Modification of the numerical method of large particles due to the introduction of a concentration function allows the joint solution of the problem of gas dynamics and chemical kinetics of explosive combustion of a gas-air medium. For correct operation of the boundary conditions, a free exit into the conditions of discontinuous flows is developed for the scheme of approximation of the parameter in a fictitious layer on the basis of the shock adiabat of a particular gas.

**Practical implications.** The modification of the large-particle method makes it possible to conduct a numerical experiment on the calculation of safe distances in emergency gas explosions in coal mine conditions, and also on the basis of calculating the propagation of a shock air wave through a channel to determine the dynamic loads on explosion-proof structures.

**Keywords:** air-gas mixture, emergency explosion, numerical calculation, large particle method, concentration function, non-reflecting boundary

## 1. ВСТУП

Сучасний рівень проектування техніки і технологій неможливий без застосування математичного моделювання процесів і, зокрема, використання чисельних методів розв'язання диференціальних рівнянь. Цьому сприяє значний прогрес у збільшенні обчислювальних потужностей персональних комп'ютерів. Особливо це актуально для швидкоплинних аварійних процесів, наслідки яких необхідно з достатнім ступенем точності прогнозувати і враховувати в заходах щодо захисту персоналу і зменшення негативних наслідків надзвичайних ситуацій.

В умовах гірничих виробок вугільних шахт найбільш небезпечні, руйнівні з недостатньо прогнозованими наслідками види аварій є поземні пожежі та вибухи рудникової атмосфери. Причому, при підземних пожежах виникає небезпека неодноразових вибухів атмосфери яка збагачується продуктами піролізу вугільної речовини. Для захисту гірничорятувальників від ударних повітряних хвиль використовується захист відстанню та зведення вибухозахисних споруд. Прогнозування параметрів ударних повітряних хвиль в цих умовах є основним завданням для достовірного визначення безпечних відстаней при проведенні аварійних робіт і визначення динамічних навантажень для розрахунку стійкості вибухозахисних споруд.

## 2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧІ

Розрахунок параметрів ударних повітряних хвиль цікавив дослідників дуже давно. Спочатку для оцінки наслідків вибухів на промислових об'єктах та у військовій справі використовувалися емпіричні методи, які узагальнювали дані вибухів. Пізніше стали використовуватися експериментальні методи. Так при моделюванні вибухових процесів, на підставі закономірностей подібності, був сформульований принцип «кубічного кореня» Хопкінса-Кранца, який покладено в основу прогнозування наслідків зосереджених вибухів:

$$K = R/\sqrt[3]{E},$$

де  $R$  – відстань від центру заряду,  $E$  – повна енергія вибуху.

Цей принцип закладений у формулу А. Садовського, яка до теперішнього часу використовується у нормативних документах з розрахунку вибухових навантажень на інженерні споруди (атомні електростанції, укриття) від дії ударних повітряних хвиль:

$$\Delta P_{\phi} = 95 \frac{\sqrt[3]{G}}{R} + 390 \left( \frac{\sqrt[3]{G}}{R} \right)^2 + 1300 \frac{G}{R^3},$$

де  $\Delta P_{\phi}$  – надлишковий тиск у фронті УПХ,  $G$  – маса ВР у тротиловому еквіваленті,  $R$  – відстань від осередку вибуху.

В умовах гірничих виробок так само використовувалися експериментальні методи. Чинні нормативні методики з розрахунку параметрів ударних хвиль в гірничих виробках, засновані на даних натурних вимірювань, проведених А.М. Чеховських та В.І. Гудковим в штольні шахти «Карагайлінська» ВО «Кіселевсьвугілля» наприкінці 60-х років минулого століття.

### 3. МЕТОДИ ДОСЛІДЖЕННЯ

В останнє десятиліття для розрахунку параметрів ударних повітряних хвиль, застосовується чисельне моделювання розривних газодинамічних течій [1, 2]. Так в роботах [3, 4] використовується метод кінцевих різниць для розв'язання систем рівнянь газової динаміки, який дозволяє отримувати значення багатьох параметрів поширення ударних повітряних хвиль по мережі виробок. В роботі [5] показано застосування цього методу у програмному комплексі FIRE для розрахунку параметрів детонації. Як показано в роботах А.А. Самарського, складність застосування цього методу полягає в побудові однорідних різницевоїх схем для розрахунку розривних течій. Останні перемищаються по масі, а параметри течії по обидві сторони від розриву пов'язані умовою Гюгоніо, що викликає різкі коливання сіткової функції за фронтом ударної хвилі (рис. 1).

Для вирішення цього питання у чисельній схемі необхідно використовувати метод «розтягування» фронту за рахунок введення в систему різницевоїх рівнянь дисипативних членів (псевдов'язкості).

Більш стійким у розрахунках розривних течій є метод великих часток за рахунок наявності в різницевоїх схемах схемної в'язкості. В роботі [6] даний метод застосовується для розрахунку аварійних вибухів в умовах топків газових котлів. Однак, в розрахунку не враховується кінетика процесу вибухового горіння газових сумішей, яка обумовлює параметри ударної хвилі.

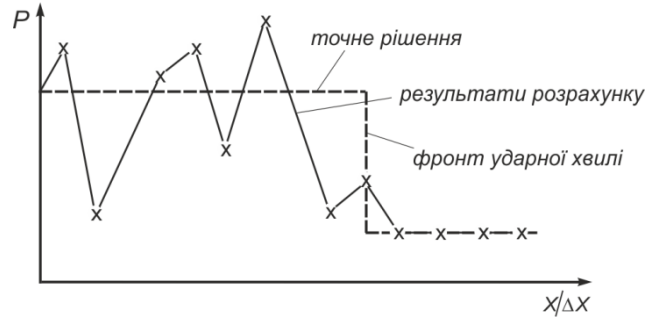


Рисунок 1. Розрахунок руху ударної хвилі

При розрахунку розривних течій як правило виникає проблема постановки коректних умов на штучних межах розрахункової області. У задачі розрахунку детонаційних вибухів виникають сильні градієнти тисків, які, при виході фронту ударної хвилі на кордон вільний вихід генерують нефізичні флуктуації параметра. Для виключення їх впливу на процес необхідно встановлювати межі на значних відстанях, що сильно збільшує обсяги обчислень.

#### 4. РЕЗУЛЬТАТИ ДОСЛІДЖЕННЯ

Для розрахунку процесу вибуху газоповітряних сумішей і поширення ударних повітряних хвиль в гірських виробках пропонується використовувати метод великих часток (метод Давидова) [7]. Основні положення цього методу в розглянутих умовах наступні.

Рух середовища в циліндричній системі координат описується рівняннями Ейлера (у дивергентному вигляді) нерозривності, руху, енергії:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{W}) &= 0 && \text{нерозривності,} \\ \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \bar{W}) + \frac{\partial P}{\partial z} &= 0 \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v \bar{W}) + \frac{\partial P}{\partial r} &= 0 \end{aligned} \right\} \text{руху,} \quad (1)$$

$$\frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E \bar{W}) + \operatorname{div}(P \bar{W}) = 0 \quad \text{енергії,}$$

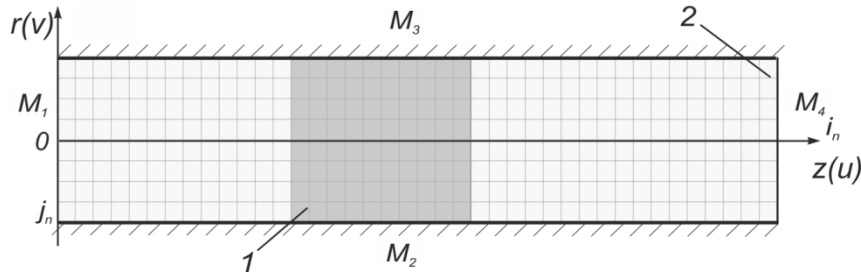
де  $\rho$  – щільність;  $P$  – тиск;  $\bar{W}$  – вектор швидкості;  $u, v$  – компоненти швидкості  $W$  по осі  $z$  та  $r$ ;  $z, r$  – циліндрические координаты;  $E = J + \frac{1}{2}(u^2 + v^2)$  – повна енергія;  $J$  – внутрішня енергія газу;  $\tau_{mp}$  – напруження поверхневих сил тертя газового потоку об стінку;  $q$  – щільність теплового потоку в стінку каналу;  $S, \Pi$  – поперечний переріз та периметр виробки;  $q_x$  – тепловий ефект хімічної реакції горіння вуглеводнів;  $\alpha$  – молярна частка вуглеводнів у шахтній атмосфері;  $t$  – час.

Для замикання цієї системи використовується рівняння стану ідеального газу:

$$P = (\gamma - 1) \rho \cdot J,$$

де  $\gamma$  – показник адиабати.

Задача вирішена в циліндричній системі координат, в якій розрахункова область представлена у вигляді циліндричного каналу. По суті, така схема є ударною трубою з ділянкою, що заповнена газоповітряної сумішшю. Швидке горіння суміші (дефлаграція або детонація) викликає формування і поширення ударних повітряних хвиль у циліндричному каналі (рис. 2).



**Рисунок 2.** Загальна структура розрахункової сітки в плоскому поданні:  $M_1$ ,  $M_4$  – тип границі розрахункової області «вільний вихід»,  $M_2$ ,  $M_3$  – тип границі розрахункової області «непротікання»;  $v$ ,  $u$  – компоненти вектора швидкості

Схема методу великих часток, питання його стійкості і порядку апроксимації досить докладно розглянуті в літературі [12]. Різницева схема рішення нестационарних системи диференціальних рівнянь (1) ґрунтується на ідеї розщепленні цієї системи за фізичними процесами. Завдання вирішується в три етапи: Ейлером, Лагранжа і заключний. На ейлеровому етапі, проміжні значення швидкості  $\tilde{u}$ ,  $\tilde{v}$  і енергії потоку  $\tilde{E}$  визначаються з умови «заморожування» поля щільності  $(\partial\rho/\partial t)=0$ , тому чисельна апроксимація рівнянь руху і енергії (1), в момент часу  $t_n$ , в циліндричній системі координат  $r$ ,  $z$  буде представлена наступними явними кінцево-різницеви алгебраїчними рівняннями першого порядку точності за часом і другого порядку за простором:

$$\begin{aligned} \tilde{u}_{i,j}^n &= u_{i,j}^n - \frac{P_{i+0,5,j}^n - P_{i-0,5,j}^n}{\Delta z} \frac{\Delta t}{\rho_{i,j}^n}, \\ \tilde{v}_{i,j}^n &= v_{i,j}^n - \frac{P_{i,j+0,5}^n - P_{i,j-0,5}^n}{\Delta r} \frac{\Delta t}{\rho_{i,j}^n}, \\ \tilde{E}_{i,j}^n &= E_{i,j}^n - \left[ \frac{jP_{i,j+0,5}^n v_{i,j-0,5}^n - (j-1)P_{i,j-0,5}^n v_{i,j-0,5}^n}{(j-0,5)\Delta r} + \frac{\Delta t}{\rho_{i,j}^n} \right. \\ &\quad \left. + \frac{P_{i+0,5,j}^n u_{i+0,5,j}^n - P_{i-0,5,j}^n u_{i-0,5,j}^n}{\Delta z} \right] \end{aligned} \quad (2)$$

де  $i, j$  – адреса комірки прямокутної розрахункової сітки.

На лагранжевому етапі обчислюємо перетоки речовини за час  $\Delta t$  між осередками за наступними алгебраїчним рівнянням, отриманим з чисельної апроксимації рівняння нерозривності (1).

Потоки мас по осі  $z$  (в залежності від напрямку):

$$\Delta M_{i+0,5,j}^n \begin{cases} (j-0,5)\Delta r^2 \rho_{i,j}^n \frac{\tilde{u}_{i,j}^n + \tilde{u}_{i+1,j}^n}{2} \Delta t, & \text{якщо } \tilde{u}_{i,j}^n + \tilde{u}_{i+1,j}^n > 0, \\ (j-0,5)\Delta r^2 \rho_{i+1,j}^n \frac{\tilde{u}_{i,j}^n + \tilde{u}_{i+1,j}^n}{2} \Delta t, & \text{якщо } \tilde{u}_{i,j}^n + \tilde{u}_{i+1,j}^n < 0. \end{cases}$$

Потік мас по осі  $r$  (в залежності від напрямку):

$$\Delta M_{i,j+0,5}^n \begin{cases} (j-0,5)\Delta r \Delta z \rho_{i,j}^n \frac{\tilde{v}_{i,j+1}^n + \tilde{v}_{i,j}^n}{2} \Delta t, & \text{якщо } \tilde{v}_{i,j+1}^n + \tilde{v}_{i,j}^n > 0, \\ (j-0,5)\Delta r \Delta z \rho_{i,j+1}^n \frac{\tilde{v}_{i,j+1}^n + \tilde{v}_{i,j}^n}{2} \Delta t, & \text{якщо } \tilde{v}_{i,j+1}^n + \tilde{v}_{i,j}^n < 0. \end{cases}$$

На заключному етапі розраховуємо нові значення всіх параметрів потоку з урахуванням перетікання мас:

$$X_{i,j}^{n+1} (j-0,5)\Delta r^2 \Delta z \rho_{i,j}^{n+1} = \left\{ D_{i,j}^n (1) \tilde{X}_{i-1,j}^n \Delta M_{i-0,5,j}^n + D_{i,j}^n (2) \tilde{X}_{i,j}^n \Delta M_{i,j-0,5}^n + D_{i,j}^n (3) \tilde{X}_{i+1,j}^n \Delta M_{i+0,5,j}^n + D_{i,j}^n (4) \tilde{X}_{i,j+1}^n \Delta M_{i,j+0,5}^n + \tilde{X}_{i,j}^n \{ (j-0,5)\Delta r^2 \Delta z \rho_{i,j}^n - [1-D_{i,j}^n (1)] \Delta M_{i-0,5,j}^n - [1-D_{i,j}^n (2)] \Delta M_{i,j-0,5}^n - [1-D_{i,j}^n (3)] \Delta M_{i+0,5,j}^n - [1-D_{i,j}^n (4)] \Delta M_{i,j+0,5}^n \} \right\}.$$

де  $D_{i,j}^n$  – функція-ознака напрямку перетікання мас через кордон розрахункових осередків;  $X_{i,j}^{n+1}$ ,  $\tilde{X}_{i,j}^n$  – значення параметра на новому часовому шарі і проміжне його значення.

В результаті цих розрахунків нам стають відомими величини  $\rho^{n+1}$ ,  $u^{n+1}$ ,  $v^{n+1}$ ,  $E^{n+1}$  на новому часовому шарі.

Знаючи ці величини, можна визначити внутрішню енергію  $J = \frac{E-W^2}{2}$ , де  $W^2 = u^2 + v^2$ , а отже, визначити значення тиску за формулами рівнянь стану.

Спочатку, чисельна схема методу великих часток дозволяє розраховувати течії в однокомпонентних газових системах. В даному випадку необхідно враховувати горіння газоповітряних сумішей, причому горючих компонентом може бути кілька, тобто в розрахунковій осередку можуть бути присутніми відразу кілька речовин, тому для розрахунку тиску в ній необхідно знати концентрації цих речовин. Для цієї мети вводиться концентраційна функція  $C_{i,j}^n(k)$ , для якої, наприклад,  $k=1$  відповідає вуглеводню (метан),  $k=2$  – кисень,  $k=3$  – азот.

Перед тим як розрахувати потоки маси через поверхню розрахункової комірки (3), (4), необхідно знати масиви  $C_{i,j}^n(k)$ , тобто знати концентрації речовин. Це задається початковими умовами. При розрахунках потоків маси

через кордони рахункових осередків, після введення  $C_{i,j}^n(k)$ , враховується той факт, що загальний потік маси дорівнює сумі потоків мас окремих компонентів. Для цього спочатку розраховуються загальні потоки маси, потім потоки окремих компонентів (передбачається одношвидкісна модель). Для цього проводиться заміна  $\rho_{i,j} \rightarrow \rho_{i,j} C_{i,j}$ . Таким чином, визначаються  $\rho_{i,j}^n(\alpha)$ ,  $\alpha = 1 \dots 3$ .

Після цього визначаємо концентрації:

$$C_{i,j}^{n+1} = \frac{\rho_{i,j}^{n+1}(\alpha)}{\rho_{i,j}^{n+1}}.$$

Розрахунок тиску необхідно вести за формулою:

$$P_{i,j}^{n+1} = \sum_{\alpha=1}^4 P_{i,j}^{n+1}(\alpha) \cdot C_{i,j}^{n+1}(\alpha),$$

де  $P_{i,j}^{n+1}(\alpha)$  – парціальний тиск визначається за рівняннями стану для кожної компоненти газового середовища.

Застосування концентраційної функції дозволяє вирішити кінетичні рівняння хімічної реакції. Хімічна реакція представляється у вигляді однієї брунто-стадії: «вихідні речовини  $\rightarrow$  продукти», а швидкість реакції представляється в формі Арреніуса:

$$-\frac{dc_i}{dt} = Z \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) P c_i^{v_i}, \quad (3)$$

де  $Z$ ,  $E_a$ ,  $v_i$  – ефективні предекспоненціальний множник, енергія активації і порядок реакції по  $i$ -му компоненту.

У нашому випадку протікають бімолекулярні реакції, тому рівняння (3) по компоненту «метан» має вигляд:

$$-\frac{dc_1}{dt} = Z \cdot \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) c_1^{v_1} \cdot c_2^{v_2}. \quad (4)$$

З макрокінетичного рівняння горіння метану слід, що швидкість витрачання кисню в 2 рази більше швидкості витрачання метану:

$$-\frac{dc_1}{dt} = -\frac{1}{2} \cdot \frac{dc_2}{dt}. \quad (5)$$

Проінтегрувавши за часом рівняння (5), отримаємо  $c_2 = 2c_1 + A$ , де  $A$  – постійна інтегрування, яку можна визначити з початкових умов:

$$A = c_{2H} - 2c_{1H}.$$

Індекс "H" вказує на початкові значення концентрацій.

В результаті отримаємо:

$$c_2 = 2(c_1 - c_{1H}) + c_{2H} \Rightarrow c_2 = c_{2H} + 2(c_1 - c_{1H}). \quad (6)$$

Таким чином, знаючи залежність зміни концентрації від часу  $c_1(t)$ , визначимо за формулою (6) функцію  $c_2(t)$ .

Нехай в початковий момент часу  $c_1=c_{1H}$ , тому  $c_2=c_{2H}$ . При повному вигоранні метану  $c_1 = 0$ , концентрація кисню буде дорівнює:  $c_2 = c_{2H} - 2c_{1H}$ .

При стехіометричному складі  $c_{2H} = 2c_{1H}$ . Тому метан і кисень повністю вигорають одночасно  $c_1 = 0$ ,  $c_2 = 0$ . Якщо,  $c_{2H} > c_{1H}$ , то  $c_2 > 0$ , тобто спостерігається залишок  $O_2$ . При  $2c_{2H} < c_{1H}$  кисень вигорає раніше, а залишок метану дорівнює  $c_1 = c_{1H} - \frac{c_{2H}}{2}$ .

Для опису реакції горіння метан-кисень слід особливо відзначити, що в рівнянні (4) в якості концентрації «с», використовується кількість речовини (в молях), що припадає на одиницю об'єму в  $\text{см}^3$ , тобто розмірність  $[c] = \frac{\text{моль}}{\text{см}^3}$ .

У рівняння газовой динаміки входить щільність речовини. Хімічна реакція не змінює цю величину, так як вихідні речовини просто замінюються продуктами реакції. Тому, гомогенні щільності речовин, що входять до складу атмосфери нам знадобляться тільки для завдання початкових умов.

Чисельне рішення рівняння хімічної кінетики спільно з рівняннями газовой динаміки і рівняннями стану виглядає наступним чином. Різницевий аналог рівняння (4) представляється у вигляді:

$$\frac{[c_1]_{i,j}^{n+1} - [c_1]_{i,j}^n}{\Delta t} = k \cdot ([c_1]_{i,j}^n)^{\nu_1} \cdot ([c_2]_{i,j}^n)^{\nu_2},$$

де  $k = Z \cdot \exp(-E_a/RT)$  – константа швидкості хімічної реакції горіння;  $i, j$  – цілочисельні координати розрахункової осередки (великої частки);  $n$  – номер тимчасового шару.

З рівнянь (3), (5) впливає:

$$\begin{aligned} [c_1]_{i,j}^{n+1} &= [c_1]_{i,j}^n - \Delta t \cdot k \cdot ([c_1]_{i,j}^n)^{\nu_1} \cdot ([c_2]_{i,j}^n)^{\nu_2}, \\ [c_2]_{i,j}^{n+1} &= [c_2]_{i,j}^n + 2([c_1]_{i,j}^{n+1} - [c_1]_{i,j}^n). \end{aligned}$$

При розрахунку рівняння збереження енергії в праву частину додається доданок:

$$\Delta t \cdot Q \cdot Z \cdot \exp(-E_a/RT) \cdot ([c_1]_{i,j}^n)^{\nu_1} \cdot ([c_2]_{i,j}^n)^{\nu_2},$$

де  $Q$  – теплотворна здатність горіння метану в повітрі при стехіометричному складі метан-кисень,  $\text{Дж/м}^3$ .

На границях розрахункової області  $j = jm$ ,  $i = im$  необхідно ставити умови, які не перевертають параметри у розрахунковій області. Для цього вводять



фіктивні розрахункові осередки, в яких значення параметрів визначаються екстраполяцією (рис. 3а). Відповідно до алгоритму МКЧ на невідбиваючих границях можна використовувати екстраполяції нульового, першого і другого порядку. Для границі  $M_2, M_3$  використовуються умова непротікання: вводиться нульовий фіктивний осередок, у якому  $v_i, 0 = -v_i, 1$ , тому

$$v_{i+0,5,j}^n = \frac{v_{i,j}^n + v_{i+1,j}^n}{2}.$$

Вибір порядку екстраполяції для невідбиваючих границях  $M_1, M_4$  виконаний на основі дослідження тестового завдання – вибух газової хмари у необмеженому просторі (рис. 3б).

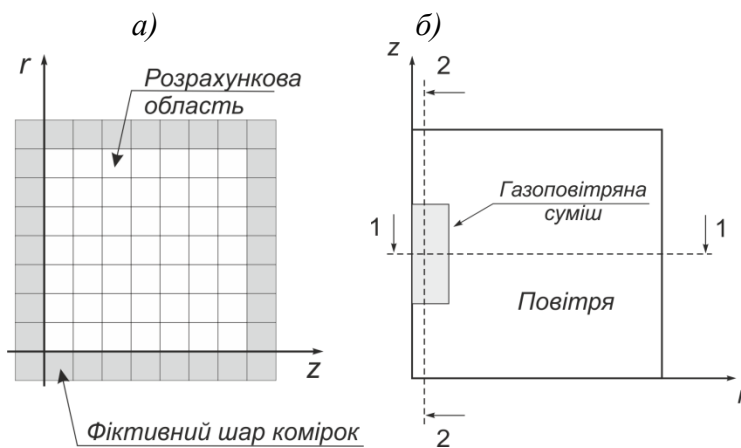


Рисунок 3. Структура розрахункової сітки (фіктивні осередки заштриховані) – а, і схема тестового завдання вибору порядку екстраполяції – б

Нулева екстраполяція  $y_{im+1,j} = y_{im,j}$ ,  $y_{i,jm+1} = y_{i,jm}$  дає «зрізані» значення параметра (рис. 4). Лінійна екстраполяція параметрів може бути отримана з наступних міркувань (рис. 5):

$$y_{im+1} = y_{im} + \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_{im} \cdot \Delta x = y_{im} + \frac{y_{im} - y_{im-1}}{\Delta x} \cdot \Delta x = 2y_{im} - y_{im-1},$$

$$y_0 = y_1 - \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_1 \cdot \Delta x = y_1 + \frac{y_2 - y_1}{\Delta x} \cdot \Delta x = 2y_1 - y_2.$$

Праві (або ліві) похідні лінійної екстраполяції дають завищені значення параметрів в фіктивній осередку. Найбільш прийнятні значення виходять при застосуванні центральної похідної, яка більшою мірою враховує градієнт графіка в околиці кордону розрахункової області (рис. 5):

$$y_{im+1} = y_{im} + \left(\frac{\partial y}{\partial x}\right)_{im} \cdot \Delta x = y_{im} + \frac{y_{im} - y_{im-2}}{2\Delta x} \cdot \Delta x = y_{im} + \frac{y_{im} - y_{im-2}}{2} = \frac{3}{2}y_{im} + \frac{1}{2}y_{im-2}.$$

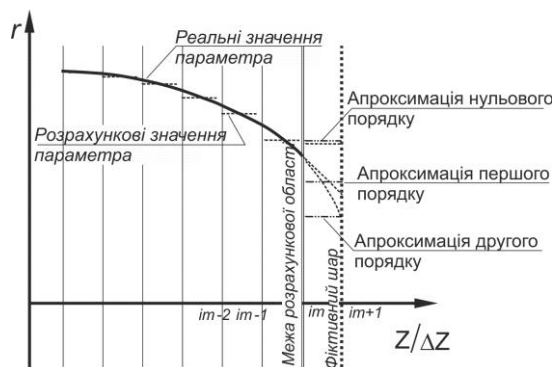


Рисунок 4. Апроксимація параметра у фіктивному шарі

Рівняння екстраполяції параметрів ударної хвилі в фіктивної осередку 2-го порядку:

$$y_{im+1} = y_{im} + \frac{1}{1!} \left( \frac{\partial y}{\partial x} \right) \Delta x + \frac{1}{2!} \left( \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \right) \Delta x^2,$$

де

$$\left( \frac{\partial y}{\partial x} \right) = \frac{y_i - y_{i-1}}{\Delta x}, \quad \left( \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} \right) = \frac{\left( \frac{\partial y}{\partial x} \right)_{im} - \left( \frac{\partial y}{\partial x} \right)_{im-1}}{\Delta x}.$$

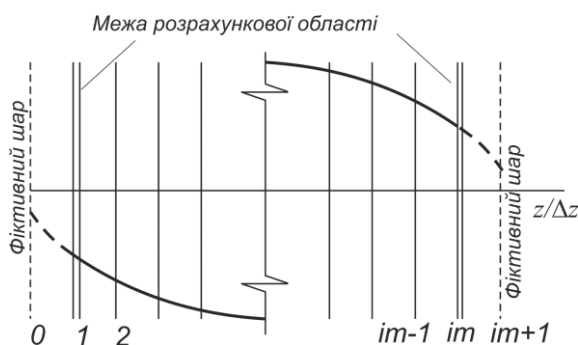


Рисунок 5. Вихід ударної хвилі на межі розрахункової області при лінійній екстраполяції

Після підстановки отримаємо:

$$y_{im+1} = 2y_{im} - y_{im-1} + \frac{1}{2}(y_{im} - 2y_{im-1} + y_{im-2}).$$

Аналіз результатів розрахунку значень параметрів, визначених за формулою (4), показав, що вони є досить завищеними (рис. 5). Таким чином, найбільш прийнятним є використання лінійної екстраполяції параметрів.

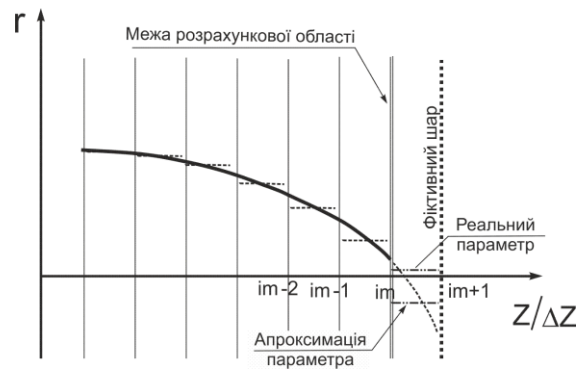


Рисунок 6. Апроксимація параметра в негативну область

Однак такий вид екстраполяції можливий при малих градієнтах функції. При розривних характеристиках, тобто у фронті ударної хвилі, лінійна апроксимація призводить до виникнення протилежних за знаком значень параметра, що суперечить фізичному змісту задачі (рис. 6). У розрахунку це проявляється виникненням генерації коливань тисків після проходження піку ударної хвилі через границю (рис. 7). Подібний ефект спостерігається і при нульовій апроксимації: у момент виходу ударної хвилі на границю розрахункової області, у фіктивному шарі, виникає тиск, рівні амплітуді в ударній хвилі. Утворюється ефект гальмування потоку на границі «вільний вихід».

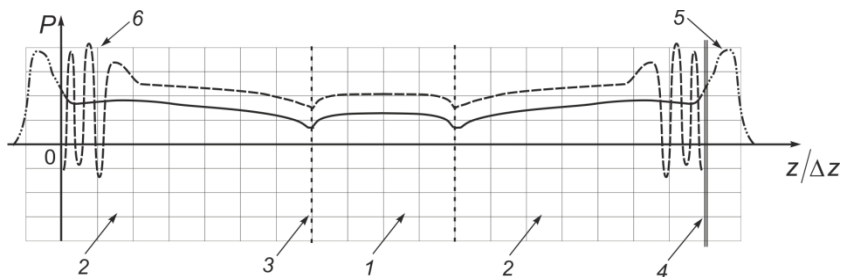


Рисунок 7. Генерація нефізичних флуктуацій при апроксимації параметра у від'ємну область: 1 – газоповітряна суміш; 2 – повітря; 3 – границя розділу середовищ; 4 – границя розрахункової області; 5 – фактичне положення фронту ударної хвилі; 6 – відбивання від границі розрахункової області

Завдання знаходження коректного рішення виконується проведенням спільного дослідження граничних умов і фізичних процесів. Так в роботі [8] екстраполяція нульового порядку для швидкості потоку визначається співвідношенням, отриманим з умов Гюгоніо на стрибку ущільнень:

$$v = \frac{1}{\alpha_{\infty}} \sqrt{\frac{(p - p_{\infty})(\rho - \rho_{\infty})}{\rho \cdot \rho_{\infty}}},$$

де  $\alpha_{\infty}$ ,  $\rho_{\infty}$ ,  $p_{\infty}$  – швидкість звуку, щільність і тиск у незбуреному потоці газу.

У розглянутій задачі ударна хвиля поширюється по суміші газів і значення її амплітуди в наступний момент часу залежить від термодинамічних властивостей цієї суміші. Тиск в газі має теплове походження, воно пов'язане з перенесенням імпульсу частинками, які беруть участь в тепловому русі і завжди визначається видом ударної адиабати, тобто пропорційно обсягу і температурі, а в ударній повітряній хвилі і швидкості руху потоку [11]. Тому для визначення надлишкового тиску в фіктивній осередку можна отримати рівняння ударної адиабати в системі  $P-U$ . Згідно робіт Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер (1966) залежність між швидкістю фронту УВВ і швидкістю речовини за фронтом хвилі, в широкому діапазоні амплітуд, є лінійної:

$$D = A + Bu, \quad (7)$$

де  $A, B$  – коефіцієнти.

Так само відома швидкість руху фронту УПХ:

$$D = \sqrt{\Delta P \left( \frac{1}{\rho_a} - \frac{1}{\rho} \right)}, \quad (8)$$

де  $\rho_a, \rho$  – щільність газу, атмосферна і в ударній хвилі.

Вирішуючи спільно рівняння (5), (6) отримуємо умову «м'якої» стінки:

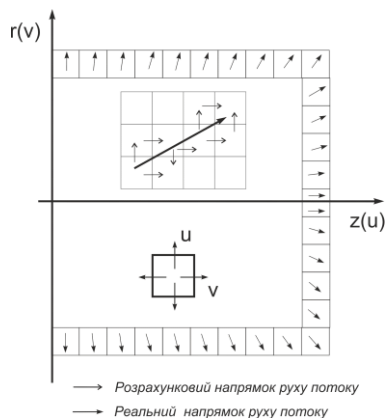
$$\Delta P_{im+1} = \frac{(A_{im} + B_{im} \cdot u_{im+1})^2}{V_{a,im} - V_{im}},$$

де  $u_{im+1}$  – швидкість речовини в фіктивній осередку;  $V_a, V$  – питома щільність газу.

У формулі (5) значення  $A$  близько до швидкості звуку в речовині і задається таблично. Значення коефіцієнта  $B$  визначаємо по граничній комірці, вирішуючи рівняння (7), (8) щодо  $B$ :

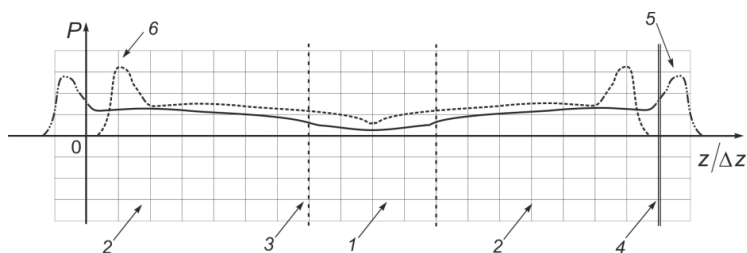
$$B_{im} = \frac{\sqrt{\Delta P_{im}(V_{a,im} - V_{im})} - A_{im}}{u_{im}}, \quad (9)$$

Використання залежності (9) також має свою особливість. Величину швидкості речовини в ній для граничної осередки логічно визначати як повну швидкість:  $\bar{U}_{jm} = \sqrt{u_{jm}^2 + v_{jm}^2}$ . Однак це не дає правильних результатів обчислення тисків в фіктивних осередках з двох причин. Перше: при розрахунку  $\bar{U}_{jm}$  на нижній межі відбувається втрата знака в напрямку швидкості, так як швидкість має від'ємне значення при русі речовини вниз (рис. 8).



**Рисунок 8.** Напрямок руху речовини в фіктивних комірках і розрахунковий напрямок потоку

Друге: розрахунок перетікання речовини згідно МКЧ визначається через кордони осередки, тобто строго по вертикалі або по горизонталі. Реальна швидкість речовини в осередках на периферії від осей симетрії буде спрямована під кутом до них (максимально  $45^\circ$ ). Тому тиск в крайніх фіктивних осередках буде визначено невірно. Для виключення таких явищ у вираженні (7) у якості швидкості повинна використовуватися відповідна компонента швидкості потоку. У розрахунку це реалізується встановленням окремих умов для лівої, правої, верхньої та нижньої меж розрахункової області.

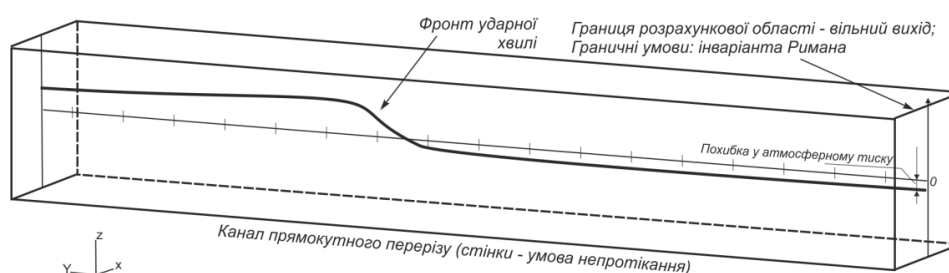


**Рисунок 9.** Перехід фронту УПХ через штучну межу «вільний вихід» за умови «м'яка» стінка: 1 – газоповітряна суміш; 2 – повітря; 3 – лінія розділу середовищ; 4 – межа розрахункової області; 5 – фронт УПХ після переходу межі «вільний вихід»; 6 – фронт УПХ перед границею «вільний вихід»

МКЧ передбачає виконання трьох етапів розрахунків. Відповідно і граничні умови виконуються в кінці кожного етапу. Для стійкості рахунку необхідною і достатньою умовою є застосування умови «м'якої» границі в заключній частині лагранжевого етапу для розрахунку тисків, а граничні умови в ейлеровому етапі повинні визначатися за нульовою апроксимації через проміжного характеру результатів. В результаті, розрахункова схема дозволяє коректно виконати перехід фронту ударної хвилі через кордон розрахункової області (рис. 9).

## 5. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Проблеми коректної роботи невідбиваючих граничних умов (НГУ) існують в практично у всіх численних схемах при розрахунку розривних течій [8]. Для забезпечення НГУ на відкритій границі, користуються різними прийомами: приєднують буферні обсяги з розрахунковими комірками, застосовують евристичні залежності тиску від часу релаксаційного процесу або використовують одномірні характеристичні НГУ. Такі прийоми орієнтовані на вирішення конкретні задачі [9, 10]. Загальний підхід до постановки НГУ, на сьогоднішній день, відсутній. Приклад похибки НГУ можна продемонструвати в системі FlowVision. У моделі повністю стискаемого середовища, граничні умови по типу інваріанта Рімана, призначених для розрахунку транс- і надзвукових течій, дають падіння тиску в незбуреному потоці (рис. 10).



**Рисунок 10. Похибка роботи граничних умов вільний вихід за типом інваріанта Рімана**

Отримане рішення крайових умов для розривних функцій (ударної хвилі) підвищує стійкість явної чисельної схеми методу великих часток, при цьому похибка

## 6. ВИСНОВКИ

Модифікація методу великих часток дозволяє розширити область його застосування на спільне вирішення задачі газової динаміки і хімічної кінетики горіння газоповітряних сумішей. Умова «м'якої» стінки дозволяє не перекручувати параметри розривних течій при переході границі розрахункової області і, таким чином, дає можливість зменшити обсяги обчислень за рахунок зменшення розмірів розрахункової області.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ

1. Бабкин, А.В., Колпаков, В.И., Охитин, В.Н. & Селиванов, В.В. (2006). *Прикладная механика сплошных сред. Т.3 Численные методы в задачах физики быстротекучих процессов*. Москва: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 520 с.
2. Кукуджанов, В.Н. *Численные методы в механике сплошных сред*. (2006). Москва: «МАТИ»-РГТУ, 158 с.

3. Васенин, И.М., Шрагер, Э.Р., Крайнов, А.Ю. & Палеев Д.Ю. (2011). Математическое моделирование нестационарных процессов вентиляции сети выработок угольной шахты. *Компьютерные исследования и моделирование*, (2), 155–163.
4. Агеев, В.Г., Греков, С.П., Зинченко, И.Н. & Салахутдинов Т.Г. (2013). Компьютерное моделирование развития, распространения и локализации взрывов метановоздушных смесей в горных выработках. *Вісник Харківського національного університету*, (1058), 5–12.
5. Скоб, Ю.А. & Угрюмов, М.Л. (2013). Численное моделирование детонации в газовых смесях. *Вісник Харківського національного університету*, (1058), 149–157.
6. Поляндов, Ю.Х. & Бабанков, В.А. (2014). Влияние места расположения источника воспламенения в помещении на развитие взрыва газа. *Пожаровзрывобезопасность*, (3), 68–74.
7. Егоров, М. Ю. Метод Давыдова – современный метод постановки вычислительного эксперимента в ракетном твердотопливном двигателестроении. (2014). *Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Серия: Аэрокосмическая техника*, (37), 6–70.
8. Ильгамов, М.А. & Гильманов, А.Н. (2003). *Неотражающие условия на границах расчетной области*. Москва: Физматлит, 240 с.
9. Лидский, Б.В., Посвянский В.С. & Фролов С.М. (2009). Неотражающие граничные условия на открытых границах для сжимаемых и несжимаемых многомерных течений. *Горение и взрыв*, (2), Москва: Торус Пресс, 31–35.
10. Поздеев, С.В., Некора, О.В., Демешок, В.В. & Медведь, Б.Ю. (2016). Исследование поведения деревянной плиты при пожаре с помощью метода конечных элементов. *Строительство, материаловедение, машиностроение: сб. научн. трудов*, (93), 25–31.
11. Чернай, А.В., Соболев, В.В., Илюшин, М.А. & Житник, Н.Е. (1994). О методе получения механических импульсов нагружения, основанном на лазерном подрыве покрытий из взрывчатых составов. *Физика горения и взрыва*, (2), 106–111.
12. Белоцерковский, О.М. & Давыдов, Ю.М. (1982). *Метод крупных частиц в газовой динамике*. Москва: Наука, 392 с.

## REFERENCES

1. Babkin, A.V., Kolpakov, V.I. Ohitin, V.N. and Selivanov, V.V. (2006), *Prikladnaya mehanika sploshnyih sred. T.3 Chislennyye metodyi v zadachah fiziki byistroprotekeyuschih protsessov* [Applied continuum mechanics. Vol. 3 Numerical methods in problems of physics of fast processes], MGTU im. N.E. Baumana, Moscow, Russia, 520 s
2. Kukudzhанov, V.N. (2006), *Chislennyye metodyi v mehanike sploshnyih sred* [Numerical methods in continuum mechanics], «МАТИ»-RGTU, Moscow, Russia, 158 s
3. Vasenin, I.M., Shragger, E.R., Kraynov, A.Y. and Paleev, D.Y. (2011), “The mathematical modelling of nonsteady ventilation processes of coal mine working net”, *Computer researches and modelling*, (2), 155–163.
4. Ageev, V.G., Grekov, S.P., Zinchenko, I.N. and Salahutdinov, T.G. (2013), “Computer simulation development, spread and localization of explosions of methane-air mixtures in mines”, *The Journal of V.N.Karazin Kharkiv National University*, (1058), 5–12.
5. Skob, Yu.A. (2013), “Numerical modeling of detonation in gas mixtures”, *The Journal of V.N.Karazin Kharkiv National University*, (1058), 149–157.
6. Polandov, Yu.H. and Babankov V.A. (2014), “The effect of the location of the source of ignition in the premises for the development of gas explosion”, *Fire and Explosion Safety*, (3), 68–74.

7. Egorov, M. Yu. (2014), "Davydov's method is a modern method of placing the computational experiment in solid propellant engine", *PNRPU Aerospace Engineering Bulletin*, (37), 6–70.

8. Ilgamov, M.A. and Gilmanov, A.N. (2003), *Neotrazhayuschie usloviya na granitsah raschetnoy oblasti* [Non-reflecting conditions on boundaries of computational domain], Fizmatlit, Moscow, Russia, 240 s

9. Lidskiy, B.V., Posvyanskiy, V.S. and Frolov S.M. (2009). Nonreflecting boundary conditions on open boundaries for compressible and incompressible multidimensional flows, *Combustion and explosion*, Editor-in-Chief and Chair of Editorial Council Professor S.M. Frolov, (2). 31–35.

10. Pozdeev, S.V., Nekora, O.V., Demeshok, V.V. and Medved, B.Yu. (2016). Investigation of the behavior in fire timber frame with finite element method, *Construction, Materials science, Mechanical Engineering: scientific works collection, Series: Life activity safety*, SHEE "Prindeprov'ska State Academy of Civil Engineering and Architecture", (93), 25–31.

11. Chernay, A.V., Sobolev, V.V., Ilyushin, M.A. and Zhitnik, N.E. (1994), The method of producing the mechanical pulse loading based on the laser-blasting explosive compositions of coatings, *Combustion, Explosion, and Shock Waves*, (2), 106–111.

12. Belotserkovskij O.M. and Davydov J M. (1982) *Metod krupnyih chastits v gazovoy dinamike* [The large particles method in the gas dynamics]. Moscow, Nauka Publ., 391 s

#### ABSTRACT (IN UKRAINIAN)

**Мета.** Розробка ефективної схеми чисельного розрахунку спільного розв'язку задачі газової динаміки й хімічної кінетики горіння газоповітряного середовища на основі методу великих часток.

**Методика.** Математичне моделювання, чисельний експеримент, аналіз і узагальнення й результатів.

**Результати.** Для спільного рішення задачі газової динаміки і хімічної кінетики горіння газоповітряної суміші пропонується ввести в чисельну схему методу великих часток концентраційну функцію, яка дозволяє враховувати багатоконпонентний склад газового середовища. Концентраційна функція дає можливість вводити в чисельну схему рівняння хімічної кінетики в вигляді рівняння Арреніуса і розрізняти компоненти хімічної реакції і продукти горіння. У задачі розрахунку детонаційних вибухів виникають сильні градієнти тисків, які, при виході фронту ударної хвилі на границю вільний вихід генерують нефізичні флуктуації параметра. Для виключення їх впливу проводиться аналіз різних видів апроксимації параметрів в фіктивний шар розрахункової схеми. З аналізу фізичних процесів знайдений ефективний вид граничних умов вільний вихід для задачі поширення ударної хвилі в каналі.

**Наукова новизна.** Модифікація чисельного методу великих часток за рахунок введення концентраційної функції дозволяє отримувати спільне рішення задачі газової динаміки і хімічної кінетики вибухового горіння газоповітряної суміші. Для коректної роботи граничних умов вільний вихід в умови розривних течій розроблена схема апроксимації параметра в фіктивний шар на основі ударної адіабати конкретного газу.



**Практична значимість.** Виконана модифікація методу великих часток дозволяє проводити чисельний експеримент з розрахунку безпечних відстаней при аварійних газових вибухах в умовах вугільних шахт, а також на основі розрахунку поширення ударної повітряної хвилі по каналу визначати динамічні навантаження на вибухозахисні споруди.

**Ключові слова:** газоповітряна суміш; аварійний вибух; чисельний розрахунок; метод великих часток; концентраційна функція; невідбиваюча границя

#### ABSTRACT (IN RUSSIAN)

**Цель.** Разработка эффективной схемы численного счета совместного решения задачи газовой динамики и химической кинетики горения газовой среды на основе метода крупных частиц.

**Методы.** Математическое моделирование, численный эксперимент, анализ и обобщение и результатов.

**Результаты.** Для совместного решения задачи газовой динамики и химической кинетики горения газовой среды предлагается ввести в численную схему метода крупных частиц концентрационную функцию, которая позволяет учитывать многокомпонентный состав газовой среды. Концентрационная функция дает возможность вводить в численную схему уравнения химической кинетики в виде уравнения Аррениуса и различать компоненты химической реакции и продукты горения. В задаче расчета детонационных взрывов возникают сильные градиенты давлений, которые, при выходе фронта ударной волны на границу «свободный выход» генерируют нефизические флуктуации параметра. Для исключения их влияния проводится анализ различных видов аппроксимации параметров в фиктивный слой расчетной схемы. Из анализа физических процессов найден эффективный вид граничных условий «свободный выход» для задачи распространения ударной волны в канале.

**Научная новизна.** Модификация численного метода крупных частиц за счет введения концентрационной функции позволяет производить совместное решение задачи газовой динамики и химической кинетики взрывного горения газовой среды. Для корректной работы граничных условий свободный выход в условия разрывных течений разработана схема аппроксимации параметра в фиктивный слой на основе ударной адиабаты конкретного газа.

**Практическая значимость.** Проведенная модификация метода крупных частиц позволяет проводить численный эксперимент по расчету безопасных расстояний при аварийных газовых взрывах в условиях угольных шахт, а также на основе расчета распространения ударной воздушной волны по каналу определять динамические нагрузки на взрывозащитные сооружения.

**Ключевые слова:** газозвдушная смесь; аварийный взрыв; численный расчет; метод крупных частиц; концентрационная функция; неотражающая граница

**ABOUT AUTHORS**

Nalisko Nikolay, Candidate of Technical Science, Associate Professor, Department of Life Safety, State Higher Education Establishment “Pridneprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture”, 24-A Chernishevskogo Str., Dnipro, Ukraine, 49600.

E-mail: 59568@i.ua.

Bartashevskaya Lyudmila, Candidate of physical and mathematical sciences, Associate Professor, Department of Physics, Dnipro University of Technology, 19 Dmytra Yavornytskoho Ave., Dnipro, Ukraine, 49005. E-mail: bartashevskaya.l.i@gmail.com