

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ
ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ
ІМЕНІ В. Н. КАРАЗІНА

СКОБ ЮРІЙ ОЛЕКСІЙОВИЧ

УДК 519.6:681.518.2:533.27

**МАТЕМАТИЧНІ ТРИВИМІРНІ МОДЕЛІ ТА МЕТОДИ АНАЛІЗУ РУХУ
ГАЗОПОВІТРЯНИХ СУМІШЕЙ В ЗАДАЧАХ ПРОМИСЛОВОЇ
АЕРОДИНАМІКИ ТА ЕКОЛОГІЇ АТМОСФЕРИ**

01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи

АВТОРЕФЕРАТ

дисертації на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук

Харків – 2021

Дисертацією є кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Роботу виконано в Національному аерокосмічному університеті ім. М. Є. Жуковського «Харківський авіаційний інститут» Міністерства освіти і науки України.

Науковий консультант: доктор технічних наук, професор
Угрюмов Михайло Леонідович,
Харківський національний університет
імені В. Н. Каразіна,
професор кафедри теоретичної та прикладної системотехніки.

Офіційні опоненти: доктор технічних наук, професор
Біляєв Микола Миколайович,
завідувач кафедри гідравліки та водопостачання,
Дніпровський національний університет залізничного
транспорту імені академіка В. Лазаряна;

доктор технічних наук, професор
Ляшенко Віктор Павлович,
завідувач кафедри інформатики та вищої математики,
Кременчуцький національний університет
імені Михайла Остроградського;

доктор технічних наук, професор
Басманов Олексій Євгенович,
головний науковий співробітник наукового відділу з проблем
цивільного захисту та техногенно-екологічної безпеки,
Харківський національний університет цивільного захисту.

Захист відбудеться «29» вересня 2021 р. о 15:30 годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.051.09 Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна за адресою: 61022, м. Харків, майдан Свободи, 6, ауд. 3-18.

З дисертацією можна ознайомитись у Центральній науковій бібліотеці Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна за адресою: 61022, м. Харків, майдан Свободи, 4.

Автореферат розісланий «__» серпня 2021 р.

Учений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 64.051.09

Олена ТОЛСТОЛУЗЬКА

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Надійне і безпечне функціонування техногенних індустріальних 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. Кращому усвідомленню такого стану речей має сприяти критичний аналіз аварій на техногенних об'єктах, які супроводжуються руйнуванням інфраструктури і ураженням персоналу. Все це безумовно приводить і до неефективного функціонування аеродинамічних систем. Для усунення зазначених негативних явищ потрібно розробити комплекс заходів, зокрема попередній моніторинг стану повітря техногенних об'єктів під час найбільш песимістичних сценаріїв розвитку аварійних викидів, інтегрування процесів аналізу, накопичення інформації про фактори впливу хімічно-складових, баричних та теплових збурень на довкілля і прогнозу їх ймовірності ураження до єдиної системи моделювання з метою пошуку раціональних конструкцій захисних засобів, які усувають або пом'якшують наслідки цього негативного впливу. Проте у сучасній інженерній практиці використовуються розрізнені комп'ютерні засоби, які базуються на математичних моделях різної досконалості та пристосовані до аналізу окремих факторів впливу, деякі без урахування тривимірності і нестационарності актуальних фізичних процесів, складного характеру рельєфу місцевості, не інтегровані до загального процесу прогнозу наслідків із візуальним визначенням ймовірності ураження (руйнування). Тому технічна проблема зниження ризиків порушення безпечного функціонування техногенних об'єктів на основі аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у зоні аварійних або контрольованих викидів газових домішок і прогнозу стану повітря техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень на довкілля і пошуку засобів усунення негативних наслідків цього впливу є важливою і актуальною.

Математичному моделюванню зовнішніх і внутрішніх течій повітря і газоповітряних сумішей та розробці обчислювальних методів для аналізу полів параметрів сталого і збуреного потоків повітря у приземному шарі атмосфери і прогнозу наслідків впливу надлишкових параметрів збурення на довкілля 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. Налисько, О. Д. Волков, вчені 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, Ю. А. Золотухін, Н. А. Яришев, а також іноземні науковці: D. Nolan, R. Hankin, M. Assael, O. Hansen, V. Molkov, S. Dorofeev, K. Takeno, W. Breitung, H. Schneider, E. Gallego, E. Papanikolaou, A. Venetsanos, S. Hanna, J. Chang, R. Witcofski, G. Puttock, E. Oran, J. Boris, M. Markiewicz. Їхні наукові розробки стали базовою науково-дослідною основою подальших пошуків перспективних шляхів удосконалення методологічних засад аналізу і прогнозування наслідків впливу газоповітряних сумішей на довкілля.

Складність реальних проблем, які виникають під час руху просторового збуреного повітряного потоку в умовах складного рельєфу місцевості, хімічної

взаємодії, нестационарного впливу надлишкових факторів на довкілля, висувають нові вимоги до їх математичного моделювання. Наявні математичні моделі, методи та комп'ютерні системи, які їх реалізують, або швидкодіючі, але не дуже точні, або дуже складні і неефективні з точки зору отримання результату в інженерно прийнятні терміни, або не дають змогу отримати комплексну оцінку негативних наслідків техногенних аварій на основі обчислювального експерименту. Це свідчить про актуальність даної роботи та необхідність удосконалення існуючих та побудови нових математичних моделей руху багатокомпонентної газової суміші у приземному шарі атмосфери.

Характерною особливістю приземного шару атмосфери є його функціонування як складної динамічної системи, стійкий стан якої визначається локально незмінними у розглянутий проміжок часу кліматичними умовами і рельєфом місцевості, а поведінка – законами збереження маси, імпульсу і енергії газового середовища певного хімічного складу. Аварійний або контрольований викид в атмосферу і подальше розсіювання токсичної або горючої газової домішки можна розглядати як локальне збурення параметрів сталого стану динамічної системи, порушення її хімічного складу і, як наслідок, перехід до нестійкого стану. Найважливішим показником ступеня такого збурення є масова концентрація домішки – один із небезпечних параметрів багатокомпонентної суміші, який, у разі токсичного газу формує вражаючий людину фактор – інгаляційну токсичну дозу. У випадку хімічно активної домішки має місце вибух (детонація), який генерує такі негативні навантаження на довкілля, як ударно-імпульсне – від вибухової ударної хвилі, і термічне – під впливом теплового потоку випромінювання від полум'я. Розроблення методів оцінювання і прогнозування впливів означених небезпечних факторів та генерація експертних рекомендацій для пом'якшення або запобігання наслідків негативного впливу на навколишнє середовище ґрунтуються на двох головних напрямках: 1) експериментальних і теоретичних методах молекулярної фізики газових сумішей; 2) феноменологічному підході нестационарної газової динаміки на основі моделі суцільного середовища, неврівноваженої термодинаміки, хімічної кінетики і математичної фізики. Перший напрямок є більш органічним для фундаментальних досліджень та формування бази для оцінювання адекватності методів другого напрямку для ефективного використання під час розв'язання прикладних задач. У межах останнього напрямку методи можна поділити на аналітичні та числові.

Крім того, під час розв'язання екологічних проблем математична модель послуговує лише інструментом отримання додаткової інформації про збурений потік газової суміші для подальшої оцінки факторів впливу на довкілля. Традиційно в інженерній практиці використовують детермінований підхід, коли отримані розрахункові точкові значення факторів впливу (ударно-імпульсного, токсичного і термічного) «вручну» порівнюються з табличними нормативними діапазонами для окремих ступенів ураження, або експертом обраховуються локальні значення ймовірності ураження людини чи ступеня руйнування споруди на основі ймовірнісного підходу. Але сучасні ризико-орієнтовані документи законодавчого та регламентного рівня все більш нагально потребують для техногенних об'єктів

наявності просторових розподілів ймовірності ураження для різних сценаріїв аварій, що в умовах, коли теорія суттєво нелінійних динамічних систем хімічної природи все ще знаходяться у стані становлення, а обчислювальна техніка розвивається високими темпами, потребує нових комплексних нестационарних математичних моделей більш високої точності з вбудованими підмоделями ймовірнісної оцінки впливу на довкілля збуреного потоку багатокомпонентної газової суміші.

Із системного аналізу сучасних літературних джерел випливає, що задача аналізу особливостей розсіювання хімічно активної і/або токсичної газової домішки у повітрі приземного шару атмосфери з урахуванням складного рельєфу місцевості є окремим випадком аналізу потоку повітря, тимчасово збуреного випадковим або контрольованим викидом домішки. Задачу системного прогнозу впливу на довкілля виникаючих і зникаючих з часом факторів може бути зведена до задачі ймовірнісного пробіт-аналізу у кожній точці простору. Ці нестационарні, просторові задачі зазвичай потребують великої розмірності і дуже інформаційно-ресурсномісткі, а обчислювальні методи їх розв'язання можуть втрачати стійкість до збурення параметрів потоку у часі, що призводить до похибок обчислень.

Виходячи із зазначеного, можна констатувати існування стійкого **протиріччя**, яке полягає у невідповідності зростаючих вимог до ефективності функціонування промислових аеродинамічних систем та надійності захисної інфраструктури аварійних техногенних об'єктів в умовах поширеного використання обчислювального експерименту, *з одного боку*, і наявним рівнем розвитку методологічної бази, яка включає моделі, методи та програмні засоби комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень на основі чисельного аналізу змінних стану повітря техногенних об'єктів для забезпечення вимог безпеки, *– з іншого боку*.

Зважаючи на це, у дисертаційній роботі вирішується **актуальна науково-прикладна проблема** розроблення математичних моделей, методології та комп'ютерних засобів для аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у розташуванні техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень повітря на довкілля і пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Тематика дисертаційної роботи пов'язана з науковими дослідженнями, які проводилися протягом періоду з 1990 р. по 2021 р. у Національному аерокосмічному університеті ім. М. Є. Жуковського «Харківський авіаційний інститут» на кафедрі математичного моделювання та штучного інтелекту відповідно до державних науково-технічних програм і планів науково-дослідних робіт Міністерства освіти і науки України в рамках держбюджетних тем: Д305-35/00 «Теоретичні засади об'ємного комп'ютерного моделювання авіаційних агрегатів і систем», розділ 4 «Розрахункові і експериментальні дослідження обтікання лопаток вінців осьових компресорів з прямими і вигнутими кінцями тривимірним в'язким потоком» (№ДР 0100U003435); Д304-9/03 «Розробка науково обґрунтованих математичних моделей інформаційних технологій при формуванні просторового уявлення вузлів літальних апаратів», розділ 2 «Побудова математичних моделей газодинамічних полів і процесів в

екології і промисловій аеродинаміці» (№ДР 0103U004032); ДЗ04-8/06 «Розробка методів інформаційних технологій підтримки прийняття рішень для проектування елементів аерокосмічних систем», розділ 2 «Чисельна оцінка наслідків вибуху водню в атмосфері» (№ДР 0106U001036); ДЗ03-26/2009 «Енергоефективні та ресурсозберігаючі технології і засоби моделювання, вимірювання і перетворення процесів і енергоносіїв літальних апаратів і паливно-енергетичних комплексів», розділ 2 «Розробка ефективних моделі і методу розв'язання задачі діагностики технічного стану турбореактивного двоконтурного двигуна» (№ДР 0106U001053); ДЗ03-21/2011-ф «Методологія проектування елементів та інформаційно-вимірювальних систем контролю параметрів авіаційних двигунів і промислових паливно-енергетичних комплексів», розділ 2 «Розробка математичних моделей процесів тепломасопереносу і ефективних методів розв'язання задачі системної оцінки вибухобезпечного функціонування складних технічних систем» (№ДР 0111U001072); ДЗ03-15/2015-П «Методологія удосконалення промислових паливно-енергетичних комплексів і авіаційних двигунів з використанням інформаційно-вимірювальних систем моніторингу змінних станів в умовах невизначеності вхідних даних», розділ 3 «Удосконалення математичних моделей процесів дефлаграційного горіння сумішей газів у просторі складної конфігурації на основі рівнянь газової динаміки у тривимірній постановці» (№ДР 0115U000838). У рамках виконаних робіт як виконавця автором досліджено нові властивості складних систем з газовими сумішами, що рухаються, розроблено тривимірні математичні моделі і методи комп'ютерних засобів для системного аналізу руху багатокомпонентних токсичних і вибухонебезпечних сумішей з урахуванням хімічної взаємодії у просторі зі складним ландшафтом і прогнозу наслідків впливу надлишкових термогазодинамічних параметрів на техногенні об'єкти у зоні збурення.

Мета та завдання дослідження. Метою дисертаційної роботи є системне вдосконалення та підвищення ефективності математичних моделей, методології та програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень для аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у розташуванні техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень повітря на довкілля і пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити наступні **завдання**:

1) проаналізувати спеціальну наукову літературу з проблематики основних тенденцій розвитку концепцій, математичних моделей, методів та програмних засобів комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень для аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у розташуванні техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень повітря на довкілля і забезпечення ефективної роботи аеродинамічних промислових систем;

2) розробити концепцію, принципи, клас ефективних тривимірних математичних моделей, які відрізняються розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення і руху багатокомпонентної газової суміші у 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 швидкоплинне вивільнення стисненого газу та хімічна реакція в області займистості;

4) розробити нестационарні математичні моделі руху хімічно-реагуючої газової суміші зі складними граничними умовами для моделювання дефлаграційного горіння, детонації та урахування присутності часток вугільного пилу і дисперсних крапель води у 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 у вентиляційному отворі та струминне витікання змінної інтенсивності суміші певної концентрації;

6) розробити системну методологію оцінювання змінних стану повітря, яка на основі отриманих за результатами моделювання нестационарних просторових розподілів таких факторів впливу, як інгаляційна токсодоза небезпечної хімічної речовини, ударно-імпульсне навантаження у фронті вибухової хвилі та щільність теплового випромінювання, дає змогу визначити наслідки впливу на довкілля;

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

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

9) розробити метод пробіт-аналізу наслідків впливу збурення змінних стану повітря для автоматизації обчислення ймовірності ураження, інтегрування його у загальний метод і здійснювання моніторингу просторових розподілів ймовірності ураження;

10) побудувати програмний засіб комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень на основі запропонованих математичних моделей, методів аналізу і прогнозу стану повітряного середовища техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень на довкілля на базі розробленого алгоритму паралельної організації обчислювального процесу.

Об'єктом дослідження є процеси аналізу і прогнозу стану повітряного середовища техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень на довкілля і пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

Предметом дослідження є тривимірні математичні моделі та обчислювальні методи аналізу процесів формування і руху багатокомпонентної газової суміші у

повітряному середовищі техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень на довкілля.

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

Наукова новизна одержаних результатів.

На основі проведених теоретичних і експериментальних досліджень отримано нове рішення важливої науково-прикладної проблеми, сформовано та розвинуто новий науковий напрямок – розроблення, узагальнення та розвиток теоретичних основ математичного і комп'ютерного моделювання руху небезпечних газоповітряних сумішей у розрахунковому просторі техногенного об'єкта, що відрізняється від існуючих рішень більш повним відображенням процесів тепломасопереносу, розробкою 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 підставі сформованих принципів підвищення ефективності процесу визначення безпекового стану техногенного об'єкту за умов збурення його повітря на основі розроблених математичних моделей та побудови методів розв'язку задач отримано наступні наукові результати.

Уперше розроблено новий клас ефективних нестационарних тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними граничними умовами, які відрізняються розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення і руху багатокомпонентної газової суміші у 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:

- математичні моделі розподілу тиску, які, на відміну від наявних використовують нелокальні початкові умови, що забезпечує можливість моделювати такі сценарії баричного збурення повітря, як вивільнення стисненого газу і миттєва хімічна реакція бруто в області займистості, для оцінювання наслідків впливу хвилі тиску на довкілля та ефективності засобів захисту від її дії;

- математичні моделі руху хімічно-реагуючої газової суміші зі складними граничними умовами, які, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовують розрахункову схему бруто-взаємодії пального та кисню повітря, що дає змогу моделювати дефлаграційне горіння та детонацію з метою оцінювання наслідків впливу баричного та теплового збурення на довкілля та ефективності засобів захисту від їх дії;

- нестационарні математичні моделі руху хімічно-реагуючої газової суміші зі складними граничними умовами, які, на відміну від наявних ураховують присутність часток вугільного пилу та дисперсних крапель води у формі додаткових джерельних членів у правих частинах рівнянь руху і енергії суміші, що забезпечує можливість оцінювати вплив згоряння часток пилу та випаровування і супротиву

крапель на просторові розподіли тиску і температури під час аварійних вибухів з метою пошуку ефективних засобів захисту довкілля;

- 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 та струминне витікання змінної інтенсивності суміші певної концентрації.

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 токсодоза небезпечної хімічної речовини, ударно-імпульсне навантаження у фронті вибухової хвилі та щільність теплового випромінювання, дає змогу оцінити наслідки впливу та прийняти рішення щодо ефективності засобів захисту довкілля:

- метод розв'язання задачі розпаду довільного розриву параметрів газу С. К. Годунова, яка, на відміну від оригінальної схеми, розглядає взаємодію двох газоповітряних сумішей різної масової концентрації домішок і припускає адіабатичний процес з усередненим коефіцієнтом адіабати, що забезпечує можливість використовувати оригінальні співвідношення на розриві для отримання потоків маси, імпульсу і енергії суміші, внаслідок його розпаду, обчислювати інтегральні закони зберігання на гранях розрахункових комірок для реалізації загального інтегро-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для розв'язання системи інтегральних рівнянь руху суміші розрахунковим простором;

- метод моделювання спряженого теплообміну газової суміші і твердих тіл у розрахунковому просторі, який використовує розв'язання зв'язаної задачі теплообміну з умовами сполучення у вигляді граничних умов III роду, на основі загального інтегро-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для отримання часово-просторових розподілів температури у 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 ймовірності ураження, інтегрувати його у загальний метод і здійснювати моніторинг просторових розподілів ймовірності ураження, що підвищило ефективність діагностики стану техногенного об'єкту та пошуку ефективних засобів захисту довкілля.

Дістав подальшого розвитку метод побудови програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень на основі запропонованих математичних моделей, методів аналізу і прогнозу стану повітряного середовища техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень на довкілля на базі розробленого алгоритму паралельної організації обчислювального процесу, що забезпечує підвищення ефективності пошуку раціональних конструкцій захисних засобів довкілля.

Практичне значення одержаних результатів полягає у тому, що запропоновані моделі та методологія є науково-методичною основою для розробки методів, методик та програмного засобу для аналізу і прогнозу стану повітряного середовища техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень на довкілля і пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу. Усі розроблені математичні моделі, методи та програмний засіб їх комп'ютерної реалізації доведено до рівня інженерних методик, високу ефективність яких обґрунтовано теоретично і підтверджено практично. Наукові принципи, основні умовиводи, рекомендації та обчислювальні результати, які було здобуто, обґрунтовано і запропоновано автором у дисертаційному дослідженні, були підтверджені впровадженням у діяльності низки підприємств і навчальному процесі.

На підприємстві ТОВ «Науковий центр вивчення ризиків «РІЗІКОН» математичні моделі руху хімічно реагуючих газових сумішей в атмосфері застосовано у створеній у центрі комп'ютерній системі підтримки прийняття рішень «РізЕкс-2», яка призначена для оцінки ризиків функціонування і розробки декларацій промислової безпеки промислових підприємств підвищеної небезпеки, що дозволило значно скоротити час на процес оцінки ризиків техногенних аварій та прийняття рішень щодо зниження рівня небезпеки підприємства до нормативного (акт впровадження від 20.02.20).

На підприємстві ПАТ «Грета» (завод газової апаратури) застосування запропонованих математичних моделей, обчислювальних методів та програмного застосунку дозволило під час проектної стадії автоматизувати обчислювальний процес попередньої оцінки індивідуального ризику об'єктів, які зберігають, використовують у технологічному процесі або транспортують вибухонебезпечні речовини, і оптимізувати структуру необхідних захисних споруд щодо відповідності безпекового стану техногенного об'єкта, який проектується, до прийнятного значення (акт впровадження від 24.02.20).

Результати дисертаційного дослідження використано у навчальному процесі НАКУ «ХАІ» під час викладання курсів «Математичне моделювання фізичних процесів», «Обчислювальні методи математичної фізики», «Моделювання та аналіз складних систем» та дипломного проектування на кафедрі математичного моделювання та штучного інтелекту для спеціальностей «Прикладна математика» і «Комп'ютерні науки». Результати дисертації увійшли до навчальних посібників «Математичне моделювання екологічних процесів» і «Розв'язання інженерних задач екології засобами прикладних пакетів Excel, MathCad, Delphi, Visual C++», розроблених у співавторстві (акт впровадження від 03.02.2020).

Публікації. Основні результати дисертації опубліковані у 69 наукових працях, серед яких: 27 статей у наукових виданнях України [1-27] (з них 25 у наукових фахових виданнях України [1-25], з яких 1 стаття проіндексована у наукометричній базі Scopus [25]); 4 наукових праць у наукових періодичних виданнях інших держав, що входять до міжнародних наукометричних баз [28-31] (з них 3 статті внесені до наукометричної бази Scopus [28, 30, 31]); 35 наукових праць, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації [32-66] (з них 1 внесена до наукометричної бази

Scopus [66]); 3 публікації, що додатково відображають наукові результати дисертації [67–69] (з них 1 стаття проіндексована у наукометричній базі Scopus [67]) і 2 наукові праці є свідоцтвами про реєстрацію авторського права на твір (комп'ютерну програму) [68, 69].

Особистий внесок здобувача. Усі результати, які викладено у дисертації, отримано автором самостійно. Роботи [3, 5, 6, 10, 12, 13, 14, 15, 20, 22, 23] опубліковано без співавторів. У статтях у фахових виданнях, які було виконано у співавторстві, автору належать наступні результати: сформульовано математичну модель внутрішнього руху газу, структуровану на адіабатичне ідеальне ядро і шар в'язкості, яка враховується введенням додаткових джерельних членів у рівняння збереження маси, імпульсу і енергії [28, 67]; моделювання викиду газової домішки у повітря приміщення і розсіювання її під впливом природньої [1] і механічної вентиляції [17, 19]; моделювання керованого багатоструминного витоку криогенного газу у швидкоморозильній камері [3]; моделювання вибуху водню в атмосфері і детермінований аналіз його наслідків на відкритому майданчику [7, 66] та у лісовому масиві [9, 11]; розробка алгоритму паралельної організації обчислень моделі руху газової суміші методом наскрізного розрахунку [27]; моделювання ініціації детонації газу у необмеженому просторі [8, 25] та переходу дефлаграції у детонацію у трубі для киснево-газових сумішей [18]; моделювання формування газової суміші з повітрям у приміщенні під час пожежі для оцінки ризику будівлі [10]; дискретизація простору шахтного приміщення і моделювання вибуху метану у присутності вугільного пилу [16] і дисперсної рідкої фази [29]; обчислення теплового навантаження у просторі від теплової радіації полум'я [21]; математичне моделювання процесу випарування хімічно неактивної токсичної речовини з плями аварійного проливання заданої форми [24] і чисельний аналіз впливу форми плями на масштаби зони токсичного ураження [30]; числовий аналіз наслідків вибуху газоповітряної суміші на захисну споруду у залежності від матеріалу її виготовлення [66]; моделювання вибуху водню у шахтному тунелі з метою аналізу впливу на наслідки дії вибухової хвилі на персонал форми тунелю і загромождження простору електровозом [31].

Апробація результатів дисертації. Основні положення й висновки доповідалися на 34 наукових конференціях: 21st International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (Warszawa, Poland, 2004); VII всеукраїнській науково-практичній конференції «Пожежна безпека та аварійно-рятувальна справа: стан, проблеми і перспективи» (Київ, Україна, 2005); XXII міжнародній науковій конференції країн СНД «Дисперсні системи» (Одеса, Україна, 2006); 21st International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems (Poitiers, France, 2007); III-V міжнародних науково-практичних конференціях «Екологічна безпека: проблеми та шляхи вирішення» (Алушта, АРК, Україна, 2007-2009); 1st-4th, 7th, 8th International Conferences on Hydrogen Safety (Pisa, Italy, 2005; San Sebastian, Spain, 2007; Ajaccio-Corsica, France, 2009; San Francisco-California, USA, 2011; Hamburg, Germany, 2017; Adelaide, Australia, 2019); всеукраїнській науково-практичній конференції «Прикладні аспекти техногенно-екологічної безпеки» (м. Харків, 2013); VII всеукраїнській науково-практичній конференції за міжнародною

участю «Інформатика та системні науки» (м. Полтава, 2016); VIII-XI міжнародних науково-практичних конференціях «Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті» (м. Херсон, 2016-2019); міжнародних науково-технічних конференціях «Комп'ютерне моделювання в наукоємних технологіях» (м. Харків, 2016, 2018); I і II міжнародних науково-практичних конференціях ІТ-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference» (м. Харків, 2018, 2019, 2020); International Scientific Conference of Environmental and Climate Technologies (Riga, Latvia, 2019); міжнародній науково-практичній конференції «Problems of Emergency Situations» (м. Харків, 2020).

Результати дисертаційних досліджень обговорювалися на наукових семінарах кафедри інформатики Національного аерокосмічного університету ім. М. Є. Жуковського «Харківський авіаційний інститут» (2000–2020 рр.). У повному обсязі робота доповідалася на міжнародній науково-технічній конференції «Комп'ютерне моделювання в наукоємних технологіях» (Харків, 22–25 травня 2018 р.).

Структура та обсяг роботи. Дисертаційна робота складається зі вступу, семи розділів, висновків, списку використаних джерел та додатків. Обсяг загального тексту дисертації складає 387 сторінок, з них основного тексту 282 сторінки. Робота містить 190 рисунків та 19 таблиць, список використаних джерел з 348 найменувань на 39 сторінках, чотири додатки на 19 сторінках.

ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано і вмотивовано актуальність обраної теми дисертаційного дослідження, виявлено сутність і окреслено сучасний стан шляхів розв'язання технічної проблеми, сформульовано мету та основні задачі дисертаційної роботи, обрано методи дослідження і описано наукову новизну і практичну цінність одержаних результатів, зазначено області впровадження результатів роботи в інженерну практику підприємств та використання у навчальному процесі, наведено відомості про публікації основних результатів дослідження, апробацію матеріалів дисертації, інформацію про особистий внесок здобувача та зв'язок роботи з науковими програмами.

У **першому розділі** на основі системного аналізу фізичних процесів у приземному шарі атмосфери, які виникають внаслідок промислової діяльності людини, відокремлено основні шляхи керованого і аварійного (некерованого) потрапляння у повітря і розповсюдження токсичних і вибухонебезпечних газоподібних домішок і головні параметри збуреної газової суміші, котрі формують негативні для людини та довкілля токсичне, ударно-імпульсне і теплове навантаження і наслідки цього впливу.

Проведено аналітичний огляд, критичний аналіз і зроблено класифікацію існуючих підходів розв'язання проблеми математичного моделювання утворення і руху багатокомпонентних газових сумішей з урахуванням хімічної взаємодії компонентів, турбулентної дифузії і складної форми розрахункового простору. Розглянуто обчислювальні методи газової динаміки для розв'язання виникаючих задач тепломасообміну. Класифіковано основні підходи числової оцінки наслідків

впливу виникаючих факторів впливу збуреного газового середовища на людину і довкілля у зоні навколо епіцентру збурення. Здійснено постановку задачі дослідження.

Наведено основні положення удосконаленої системної методології оцінювання змінних стану збуреного повітря техногенного об'єкту (рис. 1), яка на основі отриманих за результатами моделювання нестационарних просторових розподілів таких факторів впливу, як інгалаційна токсодоза токсичної хімічної речовини, ударно-імпульсне навантаження у фронті вибухової хвилі та щільність теплового випромінювання забезпечує можливість оцінити наслідки впливу та прийняти рішення щодо ефективності засобів захисту довкілля.

Вирішення виявленої наукової проблеми потребує розв'язання низки трудомістких, взаємно пов'язаних задач у таких наукових областях, як кількісний і якісний аналіз, семантичний аналіз інформації про складну систему, прийняття рішень, інформаційне забезпечення досліджень складної системи. Тому під час розв'язання основної наукової проблеми було прийнято за основу концепцію *структурованості*, згідно з якою процес аналізу параметрів стану повітря техногенного об'єкту, збуреного викидами газоподібних хімічних речовин, і прогнозу наслідків впливу збурень на довкілля з метою пошуку раціональної конструкції захисних засобів, представляється множиною паралельних або послідовних операцій, виконання яких пов'язані з матеріальними і часовими витратами.

З метою вирішення основної наукової проблеми у цілому було використано системний підхід. Згідно прийнятій концепції й обраному підходу сформульовано низку загальних наукових принципів у вигляді тверджень, узгоджене використання яких буде сприяти підвищенню ефективності процесів аналізу і прогнозу стану повітря техногенного об'єкту у цілому:

а) у царині якісного аналізу – *принцип цілеспрямованих модельних досліджень*. Ефективне розв'язання задач якісного аналізу досягається шляхом планування цілеспрямованих чисельних експериментів на моделях, для яких з використанням спеціально підбраного різновиду систем вимірювання отримано розподіли параметрів хімічно-складових, баричних і теплових збурень повітря;

б) в області кількісного аналізу – *принципи: узгодженості методів, оптимального керування процесом обчислень відносно похибки*. Ефективне розв'язання задач кількісного аналізу можна досягнути (за умов відомої точності експерименту), якщо вибирати 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;

в) в області семантичного аналізу інформації про стан повітря техногенного об'єкту – *принцип системної структуризації уподобань*, сутність якого є в тому, що ефективне виконання семантичного аналізу може бути досягнуто шляхом вибору системи вподобань спеціаліста-експерта, структуруючи її у вигляді набору правил формування керуючих змінних під час синтезу альтернатив на основі системних технічних вимог і обмежень;

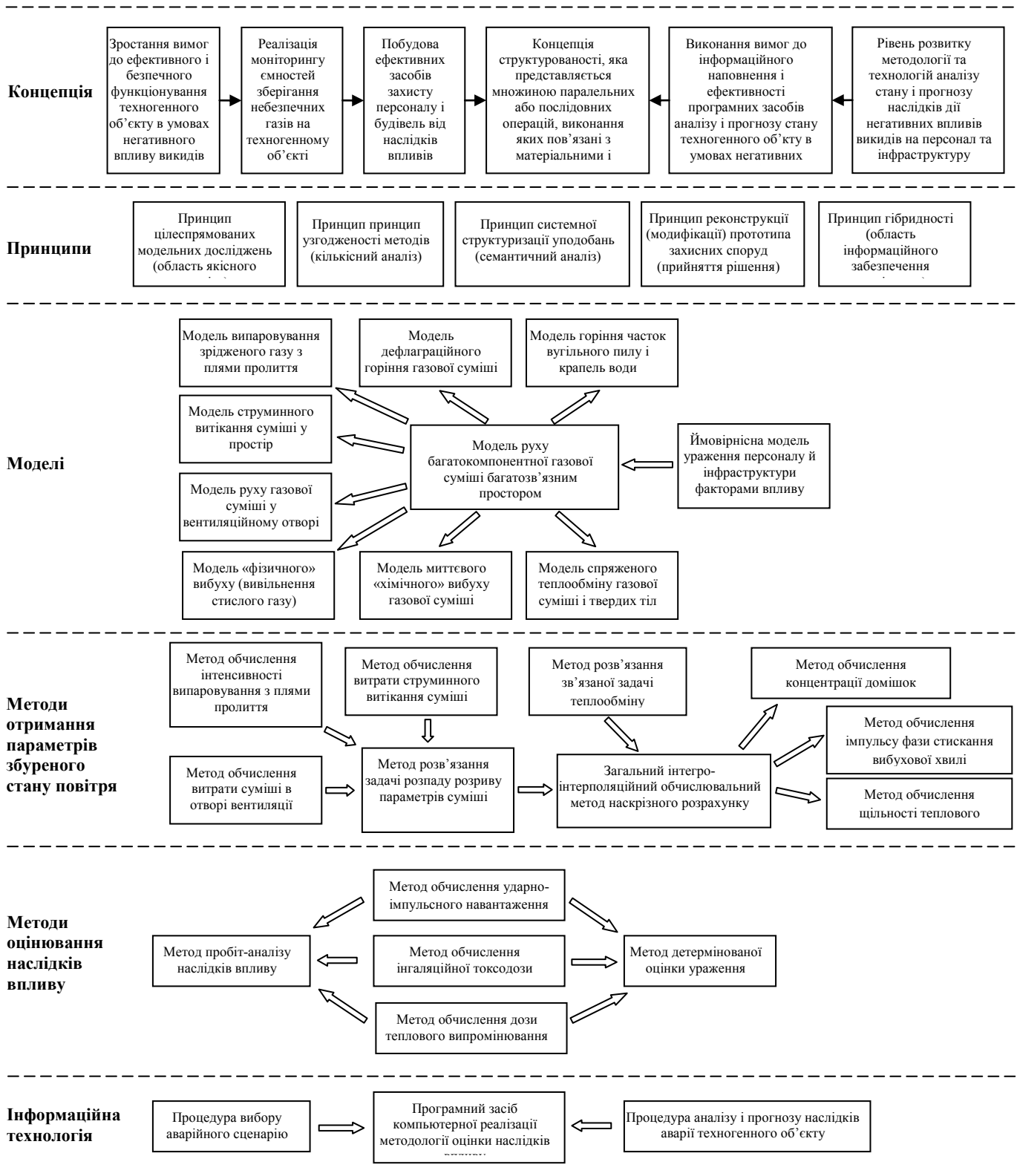


Рис. 1 Системна методологія оцінювання змінних стану повітря техногенного об'єкту в умовах впливів збурень

г) в області раціоналізації і прийняття рішення – *принцип реконструкції (модифікації) прототипу* захисних споруд, сутність якого полягає у тому, що ефективний розв'язок задачі пошуку раціональної конструкції захисного засобу від

впливу фактору збурень і прийняття рішення може бути досягнуто наступним 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'єкту, який відповідає заданому рівню умовної ймовірності наслідків впливу у контрольній точці.

д) у царині інформаційного забезпечення досліджень складної системи – *принцип гібридності*, сутність якого полягає в тому, що ефективні програмні засоби комп'ютерної реалізації можуть бути створені, якщо під час синтезу їх структури виходити з пріоритету моделей і підпорядкування цьому усіх форм представлення знань, інформації та засобів їх обробки.

Для розв'язання виявленої проблеми на основі сформульованих принципів запропоновано *підхід*, який полягає в отриманні розподілів надлишкових параметрів збуреного повітря техногенного об'єкту, користуючись системною моделлю руху багатокомпонентної газової суміші, обчисленні розподілів ймовірності наслідків впливів збурення на персонал і інфраструктуру об'єкту і пошук раціональних конструкцій захисних споруд для пом'якшення дії цих впливів на довкілля. Запропонований підхід базується на таких припущеннях:

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

- для опису процесів хімічної кінетики використовується модель бруто-взаємодії пального та окиснювача (кисню повітря). Результатом такої реакції є поява третьої компоненти продуктів згоряння.

Згідно обраної концепції, сформульованих принципів і підходу у якості базової було обрано загальну модель суцільного середовища для опису руху багатокомпонентної газової суміші простором техногенного об'єкту. Синтез загальної моделі з підмоделями формування газоповітряних сумішей, генерації хвиль тиску і теплового випромінювання за результатами хімічної взаємодії утворює новий клас моделей руху повітря, яке знаходиться під впливом тимчасових хімічно-складового, баричного і термічного збурень.

Основні результати розділу опубліковано у роботах [3, 5, 6, 7, 10, 12, 15, 16, 17, 18, 21, 22, 23, 24, 28, 31].

Другий розділ присвячено розробці нового класу тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними граничними умовами, які відрізняються розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення і руху газової суміші у приземному шарі атмосфери зі складним рельєфом і в системах промислової аеродинаміки (рис. 2), та базуються на єдиному підході до моделювання актуальних фізичних процесів.

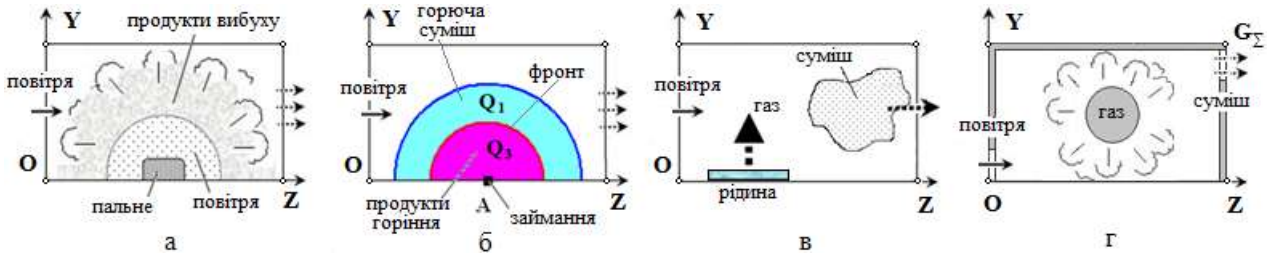


Рис. 2 Схеми розрахунку: а) «хімічного» вибуху; б) дефлаграційного горіння; в) випаровування; в) вентиляції

На шляху створення узагальненої тривимірної нестационарної математичної моделі руху багатокомпонентної газової суміші у багатозв'язному просторі з урахуванням хімічної взаємодії і розпилення крапель рідини (або часток твердих фракцій) розглядається повна система диференціальних рівнянь з частинними похідними змішаного типу з початково-крайовими умовами для потоку газової суміші, які відповідають законам зберігання маси, імпульсу і енергії

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

де $\vec{a}$, $\vec{b}$, $\vec{c}$, $\vec{d}$, $\vec{f}$ – вектор-стовпці такого вигляду

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

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

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

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

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

де t – час, u, v, w – складові вектора швидкості суміші $\vec{q}$, P, ρ – тиск і щільність суміші, E – повна енергія одиниці об'єму суміші газів такого вигляду

$$E = \rho(e + (u^2 + v^2 + w^2)/2), \quad (7)$$

де e – внутрішня енергія одиниці маси суміші, $\vec{f}$ – суть проекції розподілених об'ємних джерел, g – прискорення вільного падіння, e_s – інтенсивність тепловиділення в одиниці об'єму газу внаслідок хімічної реакції.

Перенесення компонент суміші з урахуванням швидкості дифузії описується законом зберігання маси компонент газоповітряної суміші

$$-\partial(\rho Q_i) / \partial t + \partial(\rho u Q_i) / \partial x + \partial(\rho v Q_i) / \partial y + \partial(\rho w Q_i) / \partial z = \rho_{Q_{it}} + \rho_{Q_{is}}, \quad (8)$$

де Q_i – відносна масова щільність i -тої компоненти суміші, яка є щільнісною часткою домішки у суміші (індекс i має значення: 1 – домішка, 2 – повітря, 3 – продукти згорання (відношення щільності газоподібної речовини домішки до щільності суміші), $\rho_{Q_{it}}$ – інтенсивність зміни щільності домішки внаслідок дифузії відповідно до закону Фіка $\rho_{Q_{it}} = \text{div}(\rho \mathcal{D}_D \text{grad} Q_i)$ (коефіцієнт дифузії $\mathcal{D}_D$ визначався за методикою, запропонованою М. О. Берляндом), $\rho_{Q_{is}} = \mu_i v_i w_i$ – інтенсивність зміни

щільності компоненти суміші внаслідок хімічної реакції, де μ_i, ν_i, w_i – молярна маса, коефіцієнт повноти згоряння і швидкість мольної зміни компоненти суміші.

Система (1-8) замикається рівнянням стану ідеального політропного газу

$$e = P / ((k-1)\rho). \quad (9)$$

Виставлялися такі граничні умови:

– на вході в область: повна ентальпія $I_{00} = k / (k-1) P / \rho + (u^2 + v^2 + w^2) / 2$, функція ентропії $S_0 = P / \rho^k$, кути напрямку вектора швидкості вітру $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$, концентрація домішки Q , якщо повітря надходить забруднене газоподібною речовиною домішки ($0 \leq Q \leq 1$). Параметри потоку на вході визначаються із залученням співвідношення для «лівого» інваріанта Рімана;

– на виході з області атмосферний тиск P_a із залученням співвідношення для «правого» інваріанта Рімана;

– на поверхнях твердих тіл умови «непротікання» $q_n = 0$, де $\vec{n}$ – вектор нормалі до поверхні кінцево-об'ємної комірки, що розглядається;

– на поверхнях випаровування і струминного витікання – нелокальні граничні умови (закон масової витрати домішки $G_{Q\Sigma} = f(t)$);

– на поверхнях механічної вентиляції – нелокальні граничні умови (закон масової витрати суміші $G_\Sigma = f(t)$ відповідно характеристик вентилятора).

Для відносної масової щільності компонент суміші на всіх поверхнях, що обмежують розрахункову область задавалися «м'які» граничні умови.

Задавалися такі початкові умови:

– у всіх «повітряних» обчислювальних кінцево-об'ємних комірках розрахункової області – параметри навколишнього середовища;

– для сценарію «фізичного» вибуху – нелокальні початкові умови у вигляді сукупності параметрів стисненої суміші у локації хмари з відносною масовою концентрацією домішки $Q_1 \leq 1$;

– для сценарію «хімічного» миттєвого вибуху – нелокальні початкові умови (параметри продуктів згоряння суміші у підобласті займистості);

– для дефлаграційного горіння – нелокальні початкові умови у вигляді температури вищої енергії активації полум'я у епіцентрі займання.

Передбачалося, що горіння відбувається в об'ємі розрахункової області, де горюча суміш має концентрацію пального Q_1 у діапазоні між мінімальною $Q_{1\min}$ і максимальною $Q_{1\max}$ концентраційними межами займистості $Q_{1\min} \leq Q_1 \leq Q_{1\max}$, величини яких задавалися на основі узагальнення експериментальних даних.

Розглядаються аспекти застосування загальної моделі для моделювання баричного збурення потоку за рахунок миттєвого викиду (вивільнення) хімічно пасивної стисненої газової домішки у незбурене повітря («фізичний» вибух) з метою дослідження розповсюдження хвилі тиску у розрахунковому просторі.

У випадку хімічно активної газової домішки, яка потрапляє у приземний шар атмосфери з утворенням газоповітряної суміші і подальшим вибухом розглядається математична модель миттєвого вибуху з урахуванням хімічної реакції домішок з киснем повітря («хімічний» вибух) (рис. 2, а) в області займистості з утворенням

високотемпературних продуктів згоряння високого тиску із генерацією вибухової хвилі тиску.

Маса пального, яке бере участь у горінні m'' (у зоні, де $Q_{\min} \leq Q \leq Q_{\max}$)

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

Маса пального, яка не бере участі у горінні ($Q < Q_{\min}$, і $Q > Q_{\max}$)

$$m_0'' = \sum (\rho Q \Delta V). \quad (12)$$

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

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

Загальна маса суміші m містить маси окиснювача m' , пального m'' , які бере участь у горінні, і пального m_0'' , яке не бере участь у хімічній реакції

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

Зі співвідношення (14) маса окиснювача у суміші дорівнює

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

Масові концентрації компонент суміші Q'' , Q'' і Q' , усереднені за обсягом розрахункової області, де відбудеться горіння, визначаються

$$Q'' = m''/m, \quad (16)$$

$$Q_0'' = m_0''/m, \quad (17)$$

$$Q' = m'/m = 1 - Q'' - Q_0''. \quad (18)$$

Коефіцієнт надлишку повітря у суміші α дорівнює

$$\alpha = m' / (\mathcal{G}_0 m'') = (1 - Q'' - Q_0'') / (\mathcal{G}_0 Q''), \quad (19)$$

де $\mathcal{G}_0 = m'_{th} / m''$ – стехіометричне число, m'_{th} – маса повітря, теоретично необхідна для повного згоряння 1 кг палива.

Нижню теплоту згоряння горючої домішки H_u задаємо з таблиць теплофізичних властивостей речовин. Молярна маса μ_{np} і коефіцієнт адіабати k_{np} продуктів згоряння визначаються за гіпотезою зворотності хімічних реакцій, що реалізуються.

У разі надлишку повітря ($\alpha > 1$), теплофізичні властивості газової суміші (μ – молярна маса, C_p – теплоємність за постійного тиску, C_v – теплоємність за постійного об'єму) після вибуху визначаються за наступними аналітичними формулами

$$\mu = 1 / \left((1 - (\mathcal{G}_0 + 1)Q'' - Q_0'') / \mu' + ((\mathcal{G}_0 + 1)Q'') / \mu_{np} + Q_0'' / \mu'' \right), \quad (20)$$

$$C_p = [1 - (\mathcal{G}_0 + 1)Q'' - Q_0''] C'_p + (\mathcal{G}_0 + 1)Q'' C_p^{np} + Q_0'' C_p'', \quad (21)$$

$$C_v = [1 - (\mathcal{G}_0 + 1)Q'' - Q_0''] C'_v + (\mathcal{G}_0 + 1)Q'' C_v^{np} + Q_0'' C_v'', \quad (22)$$

де C'_p , C_p^{np} , C_p'' – теплоємність при постійному тиску окиснювача, продуктів згоряння і пального у суміші, відповідно, C'_v , C_v^{np} , C_v'' – теплоємність при постійному об'ємі окиснювача, продуктів згоряння і пального у суміші, відповідно.

Якщо повітря бракує для горіння ($\alpha < 1$), теплофізичні властивості газової суміші після вибуху визначаються за наступними формулами

$$\mu = \vartheta_0 / \left[(1 + \vartheta_0) Q' / \mu_{np} + (\vartheta_0 - (1 + \vartheta_0) Q') / \mu'' \right], \quad (23)$$

$$C_p = (1 - Q_{np}) C_p'' + Q_{np} C_p^{np}, \quad (24)$$

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

В обох випадках після вибуху тиск P суміші визначається за формулою

$$P = H_u m_{th}'' (k - 1) / V + P_a = H_u (1 - Q'' - Q_0'') m'' (k - 1) / (\vartheta_0 Q'' V) + P_a, \quad (26)$$

де P_a – атмосферний тиск (температуру T знайдемо з рівняння стану)

Для більш детального часового аналізу хімічної взаємодії розглядається математична модель дефлаграційного горіння газоподібних домішок у повітрі атмосфери на основі моделі «брутто» хімічної реакції із визначеною швидкістю горіння (рис. 2, б).

Систему рівнянь (1-9) замкнемо співвідношеннями, які визначають теплофізичні властивості компонент суміші

$$\mu = 1 / \sum_{i=1}^3 (Q_i / \mu_i), C_p = \sum_{i=1}^3 Q_i (C_p)_i, C_v = \sum_{i=1}^3 Q_i (C_v)_i, \sum_{i=1}^3 Q_i = 1, k = C_p / C_v \quad (27)$$

Інтенсивність зміни щільності пального $\rho_{Q_{1s}}$ внаслідок хімічної реакції визначалася як добуток молекулярної маси пального μ_1 на швидкість його мольної зміни w_1 . Розглядалася хімічна реакція-«брутто»

$$\sum_{i=1}^2 \nu_i \chi_i \rightarrow \nu_3 \chi_3, \quad (28)$$

де ν_i – стехіометричні коефіцієнти, χ_i – хімічні речовини. Швидкість мольної зміни w_1 визначалася за формулою

$$w_1 = -\nu_1 A_1 T^{\beta_1} \exp[-E_1 / (R_{ун} T)] \prod_{i=1}^2 [\chi_i]^{\nu'_i}, \quad (29)$$

де $A_1, \beta_1, E_1, \nu'_1, \nu'_2$ – параметри, отримані узагальненням експериментальних даних [10], $[\chi_i]$ – мольна концентрація i -тої компоненти суміші: $[\chi_i] = \rho Q_i / (\mu_i \nu_i)$.

Інтенсивність зміни щільності продуктів згорання $\rho_{Q_{3s}}$ визначалася на основі закону рухомих мас

$$\rho_{Q_{1s}} / (\mu_1 \nu_1) = \rho_{Q_{2s}} / (\mu_2 \nu_2) = -\rho_{Q_{3s}} / (\mu_3 \nu_3). \quad (30)$$

Інтенсивність тепловиділення у одиниці об'єму газу внаслідок хімічної реакції e_s визначалася за формулою

$$e_s = -\xi H_{u1} \rho_{Q_{1s}}, \quad (31)$$

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

Передбачалося, що горіння відбувається в об'ємі розрахункової області, у якому розташована горюча суміш з концентрацією пального у 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} задавалися на основі узагальнення експериментальних даних.

Для розв'язку системи диференціальних рівнянь з частинними похідними змішаного типу з початково-крайовими умовами руху суміші використовувався обчислювальний інтегро-інтерполяційний метод наскрізного розрахунку

С. К. Годунова.

Модель руху суміші дає змогу ураховувати вплив аеродинамічного опору крапель рідини (часток пилу твердих фракцій) на параметри газової суміші. Сила опору, що діє на краплю (частку пилу) визначається за формулою

$$\vec{F}_{mp} = -C_d (\rho q^2 / 2) \sigma_k (\vec{q} / |\vec{q}|), \quad (32)$$

де $\sigma_k = \pi d^2 / 4$ – площа поверхні, C_d – коефіцієнт аеродинамічного опору, q – швидкість потоку. Якщо крапля зберігає сферичну форму, то для визначення C_d можна рекомендувати співвідношення

$$C_d = 24 / \text{Re} + 4,4 / \sqrt{\text{Re}} + 0,35, \quad (33)$$

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

$$\vec{F}_{mp} = N_k \sum_{i=1}^I \rho(d_i) \vec{F}_{mp}(d_i), \quad (34)$$

де $N_k = G_{H_2O} \tau / (m \rho_{H_2O} \sum_{i=1}^I \rho(d_i) V_{ki})$ – кількість крапель у контрольному об'ємі, G_{H_2O} – загальна витрата води, τ – крок за часом, m – кількість контрольних об'ємів в області з джерелами (крапель, часток пилу), $V_{ki} = (\pi / 6) d_i^3$ – об'єм краплі.

Кількість твердих часток у контрольному об'ємі визначається за формулою

$$N_k = \rho_{C+} \Delta V / (\rho_C \sum_{i=1}^I \rho(d_i) V_{ki}), \quad (35)$$

де ρ_{C+} – концентрація пилу у підвішеному стані, ΔV – контрольний об'єм, ρ_C – щільність речовини твердої фракції.

Урахування впливу аеродинамічного опору часток на параметри руху суміші здійснювався уведенням у рівняння руху усередненої об'ємної сили опору

$$\vec{f}_{mp} = \vec{F}_{mp} / \Delta V / \rho. \quad (36)$$

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

Для урахування впливу тепловиділення внаслідок фазового переходу під час кипіння крапель рідини (хімічної реакції горіння частинок пилу твердих фракцій) на параметри руху газової суміші визначимо інтенсивність зміни щільності домішки внаслідок фазового переходу під час кипіння крапель води за формулою

$$\rho_{H_2Os} = G_{H_2O} / (m \Delta V), \quad (37)$$

а інтенсивність зміни щільності домішки внаслідок хімічної реакції горіння пилу за такою формулою

$$\rho_{Cs} = G_C / (m \Delta V), \quad (38)$$

де G_C – загальна зміна за одиницю часу маси частинок пилу твердих фракцій внаслідок хімічної реакції горіння.

Будемо виходити з того, що закон, згідно з яким час горіння однієї частинки залежить від початкової маси цієї частки, має такий вигляд

$$t_i = k d_i^2 = k (6 M_{oi} / (\pi \rho_C))^{2/3}, \quad (39)$$

де $k = 6,14 \cdot 10^6$, $M_{0i} = \rho_C V_{ki}$. Тоді згідно відомих з математичного аналізу і теорії звичайних диференціальних рівнянь перетворень може бути отриманий закон визначення маси частки у довільний момент часу хімічної реакції горіння

$$M_i = \left[M_{0i}^{2/3} - 1,06 \cdot 10^{-7} \rho_C^{2/3} t \right]^{3/2}, \quad (40)$$

а також залежність зміни в одиницю часу маси частинок пилу твердих фракцій внаслідок хімічної реакції горіння

$$G_{Ci} = 1,6 \cdot 10^{-7} \rho_C^{2/3} \left(M_{0i}^{2/3} - 1,06 \cdot 10^{-7} \rho_C^{2/3} t \right)^{1/2}, \quad (41)$$

де t – поточний час.

Загальна зміна в одиницю часу маси частинок пилу твердих фракцій внаслідок хімічної реакції горіння може бути визначено за формулою

$$G_C = m N_k \sum_{i=1}^I \rho(d_i) G_{Ci}. \quad (42)$$

Урахування впливу фазового переходу під час кипіння крапель води (хімічної реакції горіння частинок пилу твердих фракцій) на параметри руху газової суміші здійснювалося за допомогою введення у рівняння енергії інтенсивностей тепловиділення у контрольному об'ємі

$$e_{H_2O_s} = -r(P) \rho_{H_2O_s}, \quad e_{Cs} = \xi H_{uc} \rho_{Cs}, \quad (43)$$

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

Розроблено математичну модель випаровування з поверхні плями пролиття зрідженого газу довільної форми (рис. 2в). Здійснено постановку задачі потрапляння газової домішки у повітря за рахунок випаровування.

Розроблено метод дискретизації плями пролиття довільної форми, яка задана замкненим контуром. За припущенням рівномірності інтенсивності випаровування з плями пролиття, можна визначити індивідуальну задану витрату газу $G_i = G_\Sigma / k$ для кожної з комірок «випаровування», де k – кількість прилеглих до плями комірок. З метою моделювання потрапляння газової домішки із заданою витратою і концентрацією використано розроблений метод розв'язання задачі розпаду довільного розриву газових параметрів, який базується на схемі С. К. Годунова.

Розроблено ітераційний метод визначення витрати у часі, використовуючи заданий закон інтенсивності випаровування, який описується за допомогою кусково-кубічного сплайна.

Площа пролиття рідини F може бути визначеною за такою формулою

$$F = (M^p - M^e - M_a^p) / (0,05 \rho_p), \quad (44)$$

де ρ_p – щільність рідкої небезпечної речовини, кг/м^3 ; M^p – сумарна маса пролітої рідкої небезпечної речовини, кг/м^3 ; 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 і витрата небезпечної речовини у вторинній хмарі, яка утворюється на стадії випаровування з плями пролиття визначаємо за формулою

$$q^e = F\sqrt{\mu}10^{-6}(5,38 + 4,1u_{0ef}^e)P_n, \quad (45)$$

де μ – молярна маса небезпечної речовини, кг/моль; u_{0ef}^e – початкова ефективна швидкість вторинної хмари, що утворюється на стадії випаровування з пролиття, м/с; P_n – тиск насиченої пари небезпечної речовини відповідно до наявної температури повітря, мм рт. ст., який можна визначити за формулою

$$P_n = 760 \exp(\Delta H_{кин} \mu (1/T_{кин} - 1/T_{нов})/R), \quad (46)$$

де $T_{нов}$ – температура повітря, К; $T_{кин}$ – температура кипіння рідкої небезпечної речовини за тиску у навколишньому середовищі P_0 (за нормальних умов приймається рівним 101325 Па), К; $\Delta H_{кин}$ – теплота випаровування (кипіння) рідкої небезпечної речовини, Дж/кг.

Розроблено математичну модель витяжної (напірної) механічної вентиляції з поверхні вентиляційного отвору (рис. 2г). Здійснено загальну постановку задачі потрапляння повітря у приміщення внаслідок дії напірної вентиляції або відбір газової суміші із приміщення внаслідок дії витяжної вентиляції.

Розроблено метод дискретизації поверхонь отворів вентиляції.

З метою моделювання потрапляння свіжого повітря у вентиляційний отвір (або відбору газової суміші через отвір) із заданою витратою, використано розроблений уніфікований метод розв'язання задачі розпаду довільного розриву параметрів газових сумішей різної концентрації, який базується на схемі С. К. Годунова. Розроблено метод визначення витрати вентиляції у часі, який використовує заданий закон витрати у вигляді кусково-кубічного сплайна.

Розроблено математичну модель струминного витікання у розрахунковий простір газової суміші із заданою концентрацією домішки з поверхні отвору. Здійснено постановку задачі витікання струменя суміші. Розроблено метод дискретизації отвору витікання, який полягає у скануванні поверхні, локалізації комірок в області отворів і призначення їм відповідних граничних умов.

Розроблено модель спряженого теплообміну між газовим середовищем і суцільним твердим тілом (рис. 3а) з граничними умовами сполучення III роду.

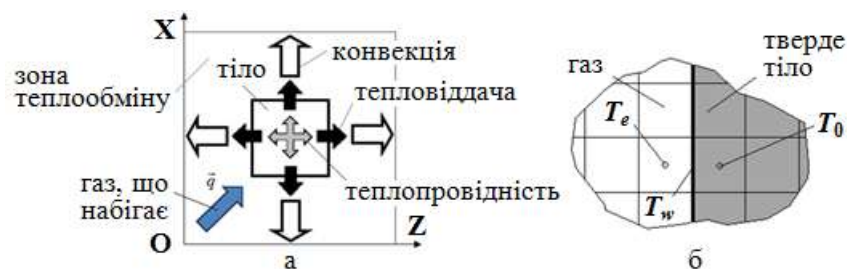


Рис. 3 Загальна (а) і різницева (б) схеми спряженого теплообміну

Закон збереження енергії для кожного елементарного «твердого» об'єму V (без джерел тепла усередині) може бути представлений в інтегральній формі

$$\iiint_V \rho \frac{d(C_v T)}{dt} dV = \iiint_V \operatorname{div} q dV, \quad (47)$$

де V – об'єм елементарного розрахункового об'єму; T – температура; C_v – теплоємність за постійним об'ємом матеріалу «твердого» тіла; t – час; q – векторне

поле теплового потоку, який визначається згідно із законом Фур'є

$$q = -\lambda \text{grad} T, \quad (48)$$

де λ – коефіцієнт теплопровідності.

Застосуємо теорему Остроградського-Гауса до правої частини рівняння (47)

$$\iiint_V \text{div}(-\lambda \text{grad} T) dV = \oiint_{\sigma} (-\lambda \text{grad} T, \vec{n}) d\sigma, \quad (49)$$

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

Тепловий потік на межі твердої кінцево-об'ємної комірки, спряженої з газовою коміркою (рис. 3, б) можна визначити згідно закону Ньютона

$$q_w = \alpha(T_w - T_e) = -\lambda \partial T / \partial n, \quad (50)$$

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

Припустивши однаковий розмір h комірок в усіх напрямках, рівняння (50) можна спростити таким чином

$$\alpha(T_w - T_e) \cong -\lambda(T_w - T_0)/h/2. \quad (51)$$

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

$$T_w = (h\alpha T_e + 2\lambda T_0)/(h\alpha + 2\lambda). \quad (52)$$

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

$$a = \lambda/(C_v \rho). \quad (53)$$

Уведемо безрозмірний параметр теплообміну Bi для комірки (число Біо)

$$\overline{Bi} = (\alpha h)/\lambda. \quad (54)$$

Тоді співвідношення (52) можна привести до вигляду, зручного для обчислень

$$T_w = (T_e \overline{Bi}/2 + T_0)/(\overline{Bi}/2 + 1). \quad (55)$$

Здійснено постановку граничних і початкових умов.

Розглянуто обчислювальні методи оцінки впливу на людину і споруди у зоні збурення (баричного, хімічно-складового, теплового) повітряного потоку. Відокремлено негативні фактори впливу на об'єкт в зоні ураження у залежності від параметру збурення.

Вибухова хвиля зазвичай є баричним збуренням атмосферного повітря, яке поширюється від епіцентру збурення, поступово втрачаючи свою інтенсивність. Найважливішою з точки зору визначення наслідків є первинна фаза хвилі тиску.

Вибухова хвиля має такі фактори впливу на довкілля, як максимальний надлишковий тиск ΔP_+ щодо атмосферного у фронті хвилі (ударна складова)

$$\Delta P_+ = P_1 - P_0, \quad (56)$$

де $P_1, P_0, \text{Па}$ – максимальний і атмосферний тиск,

та імпульс фази стиснення $I_+, \text{Па} \cdot \text{с}$ (інтегрально-імпульсна складова)

$$I_+ = \int_{\tau_a}^{\tau_a + \tau_+} \Delta P dt, \quad (57)$$

де $\tau_a, \tau_+, \text{с}$ – час прибуття фронту хвилі, тривалість фази стиснення. В інженерній

практиці прогноз наслідків аварійного вибуху полягає у визначенні розмірів зон можливих втрат, ступеня впливу ударно-імпульсного навантаження на людину і обладнання.

Фактором впливу отруйних хімічних речовин на організм людини є інгаляційна токсична доза (токсодоза), отримана під час експозиції отруйній хмарі

$$D = \int_{\tau_0}^{\tau_e} Q^n d\tau, \quad (58)$$

де τ_0 і τ_e – час початку і кінця експозиції токсичній речовині, с; Q – просторово-часове значення концентрації домішки, ppm; n – табличний коефіцієнт.

Фактором впливу теплового випромінювання є щільність теплового потоку, максимальне значення якого можна обчислити за формулою

$$q_{\max} = C_0 \left[(T_1/100)^4 - (T_2/100)^4 \right] (\Delta F_1 \bar{p}) / (\pi r^2), \quad (59)$$

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.

Умовна ймовірність B шкідливого впливу негативного фактору на об'єкт залежить від пробіт-функції Pr – верхньої межі певного інтеграла нормального закону розподілу з математичним сподіванням 5 та дисперсією 1

$$B = 1/\sqrt{2\pi} \int_{-\infty}^{Pr} e^{-(t-5)^2/2} dt, \quad (60)$$

де t є інтегральним ступенем впливу.

Наприклад, пробіт-функція для летального наслідку для людини, спричиненого вибуховою хвилею, є такою

$$Pr_1 = 5 - 0,26 \ln \left[(17500/\Delta P_+)^{8,4} + (290/I_+)^{9,3} \right], \quad (61)$$

пробіт-функція для розриву барабанних перетинок людини має такий вигляд

$$Pr_2 = -15,6 + 1,93 \ln \Delta P_+. \quad (62)$$

Пробіт-функція для смертельного ураження людини внаслідок впливу інгаляції токсодози D (58) отруйної речовини визначається за такою формулою

$$Pr_r = A + B \ln(D), \quad (63)$$

де A і B – табличні напівемпіричні коефіцієнти.

Пробіт-функція для летального результату для персоналу внаслідок теплового впливу у загальному випадку визначається за формулою

$$Pr_3 = -14 + 2,56 \ln(q^{1,33} \tau), \quad (63)$$

де τ – час експозиції тепловому потоку.

Розроблено метод пробіт-аналізу наслідків впливу, у якому, на відміну від наявного, табличну залежність умовної ймовірності ураження від пробіт-функції замінено кусково-кубічним сплайном (рис. 4), що забезпечує можливість автоматизувати обчислення ймовірності ураження, інтегрувати його у загальний метод і здійснювати моніторинг просторових розподілів ймовірності ураження, та підвищило ефективність діагностики стану техногенного об'єкту та пошуку ефективних засобів захисту довкілля.



Рис. 4 Інтерполяція табличної залежності «пробіт-функція – ймовірність»

Основні результати розділу опубліковано в роботах [1, 3, 6, 7, 10, 10, 12, 15, 16, 17, 19, 20, 21, 22, 23, 24, 29, 67].

У **третьому розділі** розроблено метод побудови програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень на основі запропонованих математичних моделей, методів аналізу і прогнозу стану повітряного середовища техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень на довкілля на базі розробленого алгоритму паралельної організації обчислювального процесу, що забезпечує підвищення ефективності пошуку раціональних конструкцій захисних засобів довкілля.

Досліджуються стадії розробки структури програмного засобу інженерного аналізу процесів потрапляння у повітря і розповсюдження у приземному шарі атмосфери газоподібних домішок.

Надаються основні етапи узагальненої методології системного моделювання руху багатокомпонентних газових сумішей з урахуванням тепломасообміну.

Розглянуто формалізоване уявлення і призначення програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень під час аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у розташуванні техногенних об'єктів інструментами IDEF методології. За результатами використання IDEF0 синтаксису побудована модель цієї системи у вигляді ієрархічно-впорядкованого комплексу діаграм, які зв'язані за допомогою перехресних посилань. До контекстного змісту першої діаграми долучено загальний опис мети моделювання, область (опис того, що буде розглядатися компонентом системи та зовнішнім впливом) і точка зору, з якої будується модель. Для більш детального опису контексту було застосовано функціональну декомпозицію системи на підсистеми.

Подальшу декомпозицію системи на нижчому рівні проведено у нотації IDEF3, яка є засобом опису процесів з використанням структурованого методу з метою репрезентувати стан речей у вигляді впорядкованої послідовності подій поряд з одночасним описом об'єктів, які мають безпосереднє відношення до процесу. Для документування потоків даних і обробки інформації в системі використано діаграму потоків даних DFD (Data Flow Diagrams). Об'єктно-орієнтовану ієрархію класів, діаграму варіантів використання, діаграми діяльності (послідовності подій і кооперативної взаємодії у системі), діаграми класів і станів побудовано з використанням UML.

Здійснено огляд можливостей сучасних мов програмування з метою побудови ефективного програмного засобу. Розглянувши переваги, обрано мову Visual C++.

Розглянуто застосування засобів організації паралельних обчислень для

прискорення розв'язання поставлених проблем дослідження. Розроблено і реалізовано алгоритм паралельної організації обчислення задачі розсіювання газової домішки у розрахунковому просторі великої довжини, з використанням засобів мови програмування у вигляді паралельних робочих потоків обчислення у кожній з підобластей, на які розбивається уся область (рис. 5).

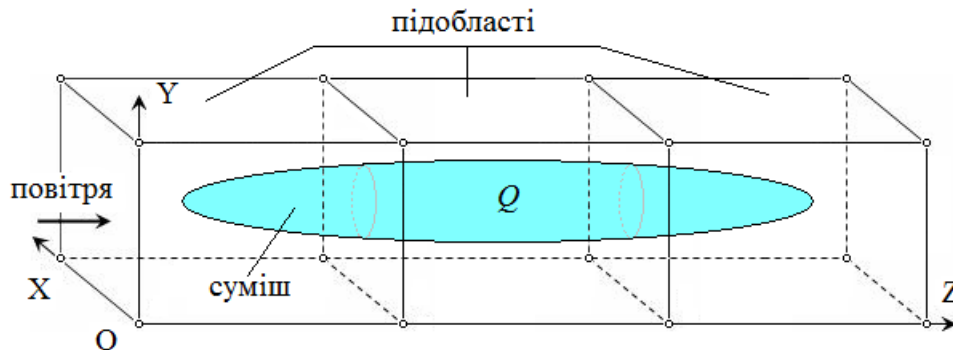


Рис. 5 Схема розподілу розрахункового простору на підобласті

Для синхронізації обчислення у підобластях використано паралельний цикл зі стандартної бібліотеки паралельних класів. Отримано скорочення часу розрахунку у залежності від кількості ядер процесора на комп'ютері.

Основні результати розділу опубліковано в роботах [1, 3, 10, 12, 14, 15, 20, 27].

У **четвертому розділі** зроблено аналіз особливостей процесів викиду і розповсюдження газоподібних домішок у просторі зі складним рельєфом.

Проведено верифікацію і валідацію математичної моделі і побудованого програмного засобу для обчислення тепломасопереносу під час руху багатокомпонентної суміші у приземному шарі атмосфери. Зроблено огляд статистичних показників оцінювання математичних моделей.

Проведено валідацію побудованої моделі відносно експериментальних даних з лабораторії Fraunhofer ICT і результатів використання інших моделей процесу горіння стехіометричної хмари воднево-повітряної суміші у дефлаграційному режимі з урахуванням утворення продуктів згоряння у приземному шарі атмосфери. Якісний і кількісний аналіз фази стискання вибухової хвилі у контрольних точках з точки зору параметрів впливу хвилі на довкілля дає такі статистичні показники:

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

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

Усі актуальні показники ефективності математичної моделі, що розглядається, знаходяться у рекомендованих межах.

Проведено валідацію математичної моделі розсіювання домішок в атмосфері на основі порівняння результатів розрахунку з експериментальними даними для випаровування зрідженого пропану і водню. Узагальнені для двох експериментів випаровування пропану статистичні показники $FB = -0,24$, $NMSE = 0,29$, $r = 0,88$ не виходять за межі рекомендованих діапазонів. Разом з візуальним порівнянням характерних розподілів концентрації водню, що випаровується за різної швидкості

вітру, можна зробити висновок, що побудована математична модель загалом адекватно описує фізичні процеси випаровування зрідженого газу з плями пролиття і поширення домішки у приземному шарі атмосфери.

Було проведено верифікацію реалізованої математичної моделі на прикладі обчислення випаровування пролиття зрідженого ціаністого водню з круглої плями радіусом 8 м на майданчику 60 x 60 м для сіток різної щільності $V = 60, 90, 120, 150, 180, 210, 240$ і 270 комірок, уздовж усіх напрямів системи координат. Розподіли умовної ймовірності летального наслідку від ураження людини інгаляційною токсодозой у приземному шарі атмосфери було отримано для усіх варіантів обчислювального експерименту. Аналіз результатів дає змогу зробити висновок про стійкість розробленої математичної моделі випаровування і розсіювання токсичної речовини з плями пролиття і програмного коду, який її реалізує, і очевидну поступову збіжність до єдиного розв'язку зі збільшенням щільності обчислювальної сітки. Видно, що більш дрібна сітка дає точніший опис фізичного процесу, що дає змогу зробити висновок про адекватність математичної моделі.

Верифікація розробленої моделі теплообміну проводилася на основі співставлення результатів чисельного моделювання з відомими аналітичними розв'язками одновимірних тестових задач (рис. 6) для нескінченної пластини з різними початковими, граничними умовами і змінною інтенсивністю теплообміну з теплопровідним газоподібним навколишнім середовищем.

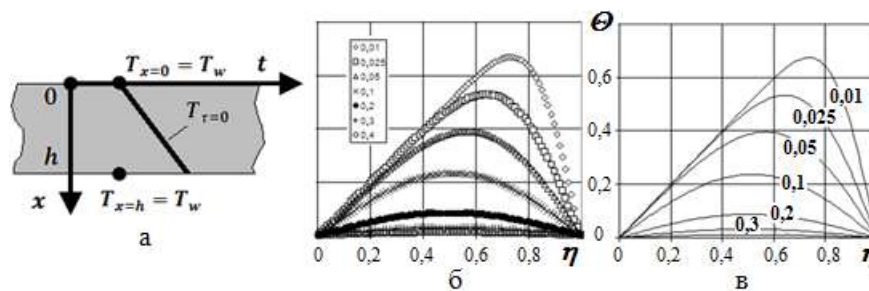


Рис. 6 Моделювання теплообміну у нескінченній пластині:
а – розрахункова схема; б – розрахунок; в – аналітичний метод

Результати охолодження твердих тіл форми різної складності з температурою 373 К нерухомим повітрям із температурою 273 К представлено на рис. 7.

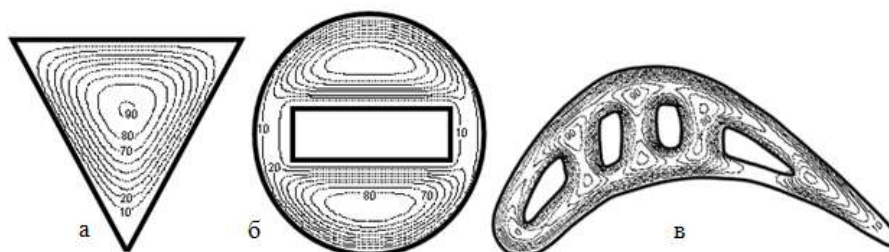


Рис. 7 Ізотерми: а – призми; б – циліндр; в – лопатка турбіни

Результати 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. представлено на рис. 8.

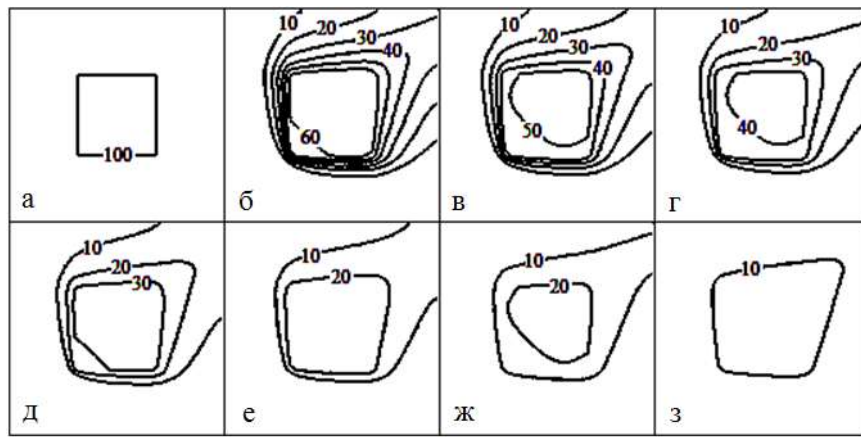


Рис. 8 Ізотерми у камері термообробки у різні моменти часу після початку охолодження (а–з: за 0, 20, 30, 40, 50, 60, 70 і 80 с, відповідно)

Проводилася візуальна валідація результатів моделювання струминного витікання домішки в атмосферу із соплового отвору розрядного пристрою.

Результати валідації моделі миттєвого вибуху пропану у співставленні з експериментальними дослідженнями і даними іншої моделі представлено на рис. 9а. Усі статистичні показники знаходяться у рекомендованих межах: $FB = 0,42$; $VG = 1,11$; $MG = 0,93$; $NMSE = 0,21$; $Fa2 = 100\%$; $r = 0,997$.

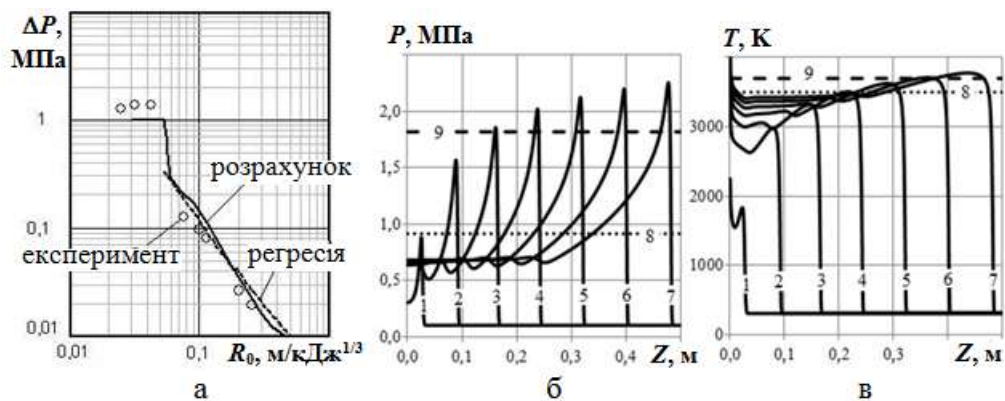


Рис. 9. Розподіл тиску у фронті ударної хвилі (а) та динаміка тиску (а) і температури (в) у детонаційній трубі (в): 1-7 – моменти часу 30, 60, 90, 120, 150, 180 і 210 мкс; 8 – вибух за постійного об'єму, 9 – параметри ЧЖ

Проведено чисельне моделювання процесу дефлаграції газоподібної домішки у гаражному приміщенні. Розглядалося два варіанта початкової хмари водню, що вивільняється з ємності високого тиску: зі стехіометричною концентрацією і 100 %. Контролювалися концентраційні, параметри, розподіли тиску і температури як у просторі, так і в контрольних точках для порівняння процесів горіння у приміщенні й у відкритому просторі. Розроблено рекомендації для зниження наслідків аварії.

Розроблену модель горіння було використано для моделювання горіння кисневих сумішей з воднем і метаном у детонаційній трубі. Результати моделювання газофазної детонації для водню представлено на рис. 9б, 9в.

У початковій стадії область займання характеризується ізобаричною поведінкою (рис. 9б) і більш низьким градієнтом температури, що дає змогу

представляти область горіння на цій стадії як вибух у постійному об'ємі. Навколо детонаційної хвилі параметри потоку близькі до параметрів у точці Чепмена-Жуге.

Було проведено чисельне моделювання впливу водяної завіси і вугільного пилу у шахтному тунелі на наслідки вибуху суміші повітря з метаном, який було аварійно викинуто у штрек. Присутність вугільного пилу призводить до зростання надлишкового тиску і температури у штреку, що є наслідком загоряння цієї фази. Краплі води забезпечують не тільки повне осадження вугільного пилу, а й додаткове зниження надлишкового тиску і температури за рахунок переходу рідкої фази у пароподібний стан під час проходження високотемпературної хмари продуктів згоряння метано-повітряної суміші вздовж штреку.

Основні результати розділу опубліковано в роботах [3, 6, 8, 9, 12, 15, 16, 18, 29, 31].

У **розділі 5** проведено аналіз і прогнозування фізичних полів параметрів потоку газоповітряної суміші у процесі вентиляції приміщень.

Розглянуто особливості застосування обчислювальної моделі вилучення газоповітряної суміші із приміщення або подачі свіжого повітря у приміщення для моделювання механічної і природної вентиляції. З часом, після початку функціонування вентиляційної системи, сумарна маса горючої домішки, що знаходиться у концентраційних межах займистості зменшується у залежності від режиму роботи вентилятора (мінімального, номінального або максимального).

Чисельно проаналізовано ефективність схем розміщення отворів вентиляції у гаражному приміщенні для транспортного засобу на водні (рис. 10). Виявлено найефективнішу схему за критерієм маси водню у межах займистості.

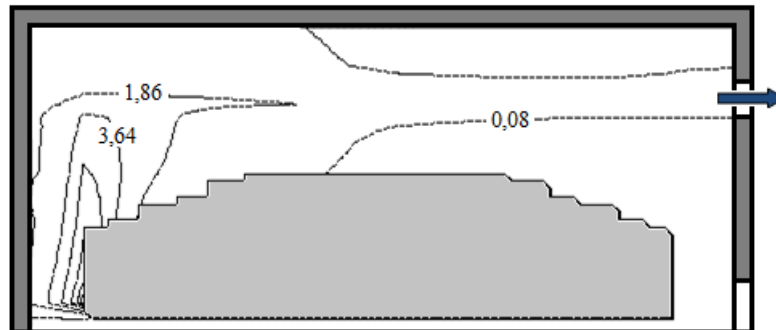


Рис. 10 Розподіл масової концентрації водню (витяжка «праворуч»)

Основні результати розділу опубліковано в роботах [17, 19, 20, 28, 57, 61].

У **шостому розділі** на основі розробленої математичної моделі зроблено чисельний аналіз і прогнозування фізичних розподілів параметрів у камерах термообробки. На прикладі швидкоморозильного тунелю отримано нестационарні розподіли температури газової суміші у робочій зоні (рис. 26).

За результатами статистичної обробки низки експериментальних і модельних температур (рис. 11) було виявлено такі значення показників ефективності моделі: $FB = -0,002$; $VG = 1,00$; $MG = 0,99$; $NMSE = 0,002$; $Fa2 = 100\%$; $r = 0,97$, що свідчить про адекватність і працездатність математичної моделі теплопереносу під час струминного витікання холодагенту.

Основні результати розділу опубліковано в роботах [3, 5, 12, 15, 23].

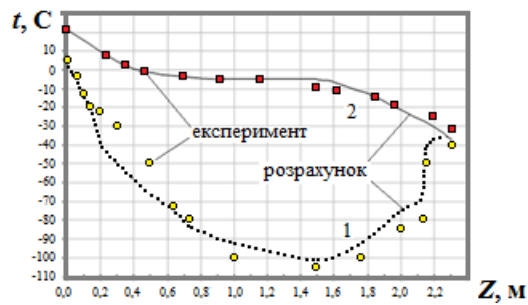


Рис. 11 Розподіл температури охолоджуючого середовища (1) і смородини (2) під час її заморожування у морозильному тунелі

У цьому розділі проведено чисельний аналіз і прогнозування безпечового стану під час техногенних аварій.

Описано метод ймовірнісної оцінки безпеки людини та конструкцій будівель у навколишньому середовищі внаслідок негативних впливів, які виникають під час техногенних аварій. Виконано чисельну оцінку впливу загромождження простору на наслідки випаровування аварійно пролітої токсичної речовини (рис. 12).

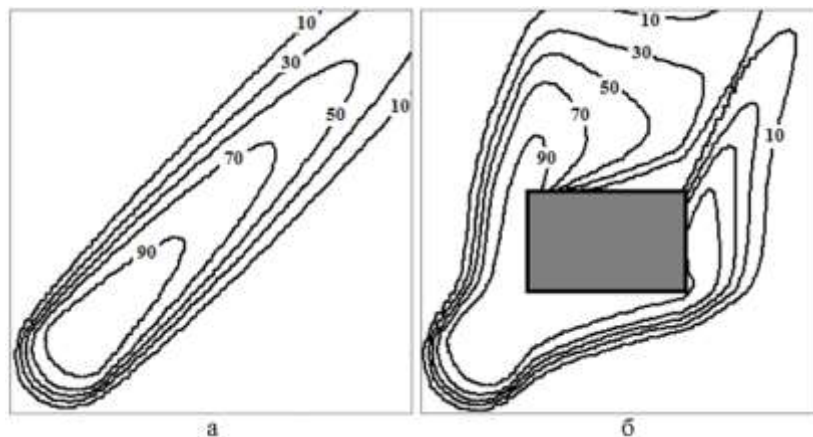


Рис. 12 Поле ймовірності токсичного ураження людини біля землі (%): а – без будівлі; б – з будівлею

Виконано оцінку впливу форми (варіанти різної еліптичності: 0 – 0,25; 1 – 1,0; 2 – 4,0) плями пролиття токсичної речовини на наслідки випаровування: ймовірність ураження (рис. 13, 14а) і площу S_{50} зони, де ймовірність ураження більше 50% (рис. 14б).

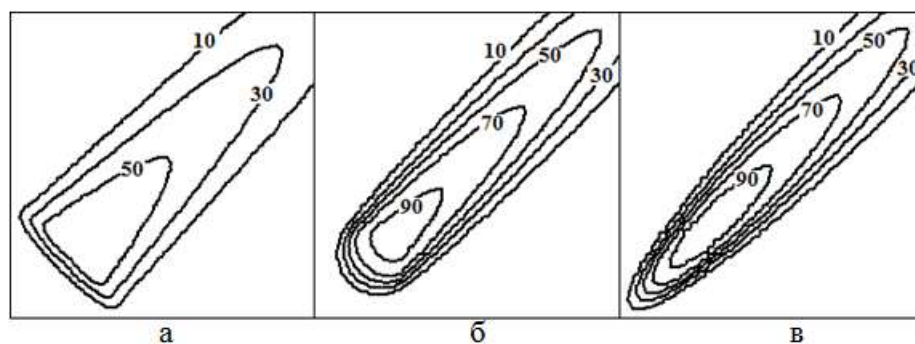


Рис. 13 Поля летальної умовної ймовірності (%): а, б, в – варіанти 0, 1, 2.

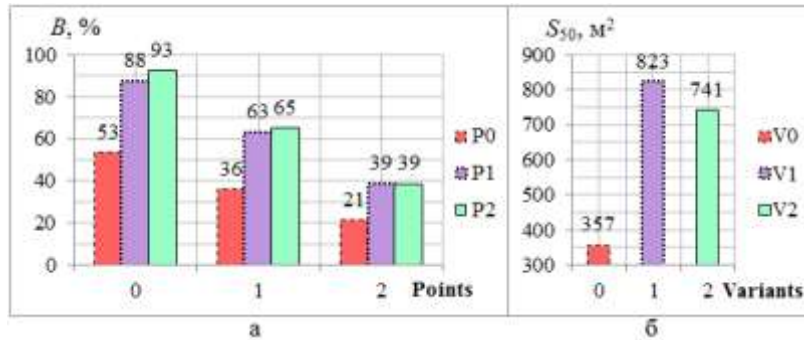


Рис. 14 Летальна ймовірність для різних контрольних точок (а) S_{50}, m^2 та небезпечна зона для різних форм плями пролиття (б).

Зроблено оцінку впливу швидкості вітру (V1-V5: 3, 5, 7, 9, 11 м/с) на наслідки випаровування токсичної речовини у контрольних точках P0, P1 і P2 (35, 55 і 75 м від центру координат). Отримано залежність площі S_{50} від швидкості вітру.

Виконано чисельне моделювання струминного витікання в атмосферу газоповітряної суміші з різною концентрацією Q домішок (рис. 15). Зі збільшенням Q небезпечна зона збільшується для однієї швидкості вітру.

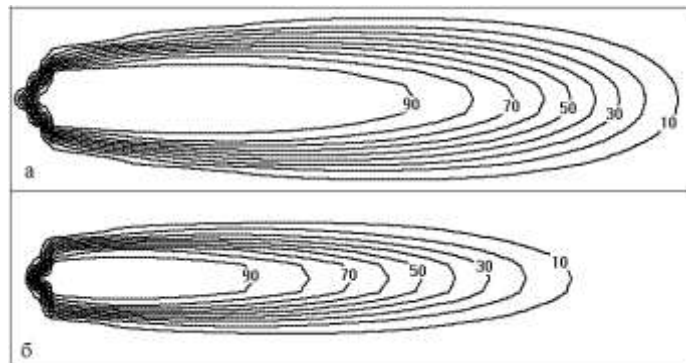


Рис. 15 Поля ймовірності ураження людини у момент часу $t = 5$ с для різної концентрації суміші Q : а) 100%; б) 50%

Здійснено чисельну оцінку місця розташування епіцентру вибуху водню на споруди довколишньої забудовлі, детермінований аналіз ефективності захисних споруд різної конструкції.

Виконано аналіз полів тиску (рис. 16) і ймовірнісний прогноз наслідків ураження ударно-імпульсним навантаженням для різних варіантів розташування захисної стіни (V0-V4) між епіцентром вибуху і контрольними точками P0-P4 ймовірного розташування обслуговуючого персоналу.

Виконано ймовірнісний аналіз варіантів впливу вибуху водню на людину, яка розташовується на різних рівнях ландшафту відносно рівня епіцентру вибуху. Отримано, що заглиблення або підвищення рівня контрольної точки призводить до зниження ймовірності ураження вибуховою хвилею.

На основі ймовірнісного аналізу отримано найкращі габарити стіни, яка захищає робоче місце від дії вибухової хвилі із наперед заданим рівнем ймовірності

ураження людини. Отримано лінійний тренд, який можна використовувати для фактично зворотної задачі безпеки персоналу під час аварійного вибуху.

Здійснено чисельний аналіз наслідків водневого вибуху у тунелі шахти з урахуванням форми поперекового перетину тунелю, відкритого або закритого простору, присутності загромадження тунелю електровозом. Отримано поля ураження людини вибуховою хвилею для різних варіантів розрахунку.

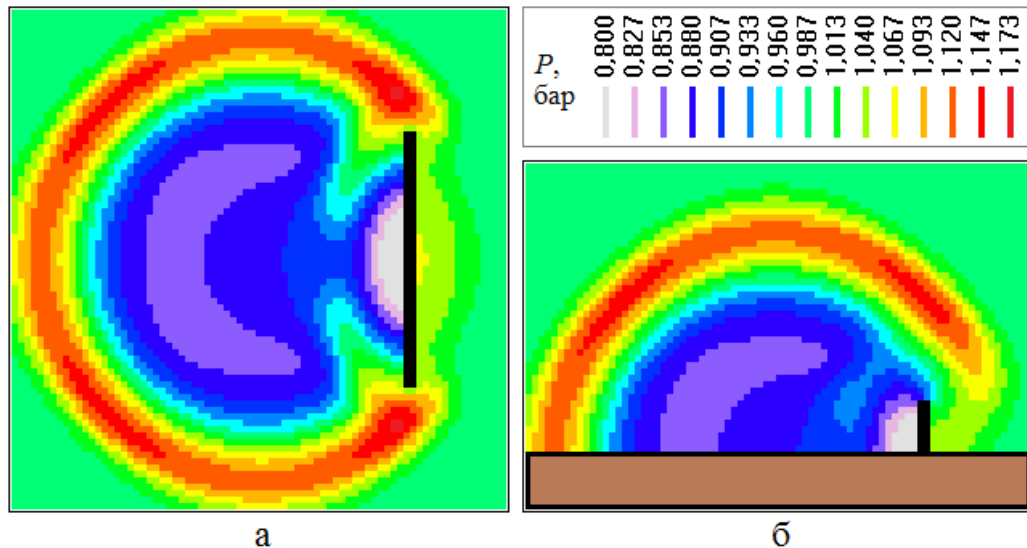


Рис. 16 Розподіл тиску [бар] у момент часу 0,0107 с після вибуху для варіанту захисту V2: а – площина XOZ (біля землі); б – площина YOZ

Проведено математичне моделювання впливу вибуху об'ємного шлангового заряду на лісовий фітоценоз і рослинний покрив.

Здійснено чисельний аналіз ймовірності ураження персоналу техногенного об'єкту тепловим випромінюванням від високотемпературної хмари продуктів горіння водню на основі моделі їх тимчасового струминного потрапляння у розрахунковий простір (рис. 17).

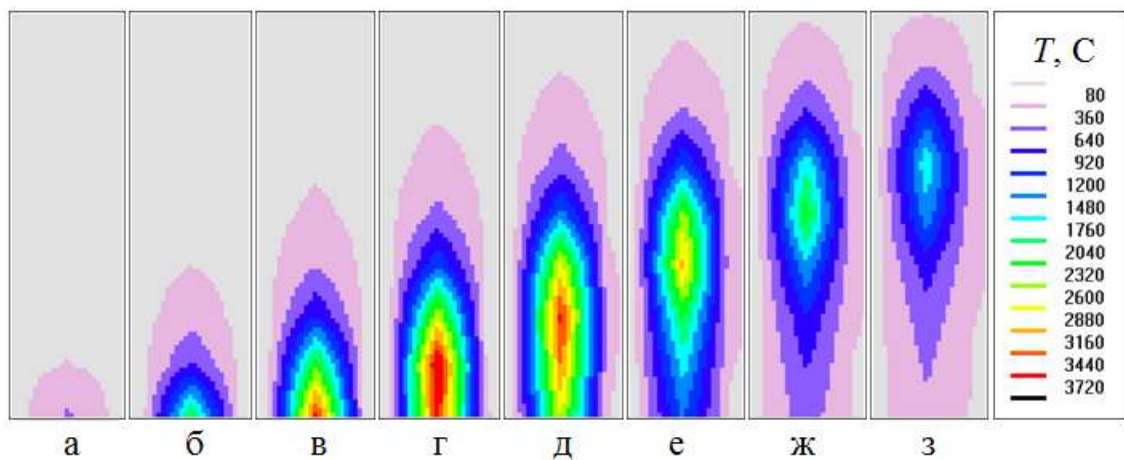


Рис. 17 Поля температури у площині YOZ: а-з – у моменти часу 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15 с, відповідно

Отримано часові розподіли ймовірності ураження людини тепловим потоком від відстані контрольних точок Р1-Р5 від епіцентру теплового збурення (рис. 18).

Обчислено аналогічні розподіли для варіанту розміщення непроникної для теплової радіації суцільного твердого об'єкта кубічної форми з габаритом 1 м. Безпекова картина зазнає кардинальної перебудови внаслідок появи зон, захищених перепорою.

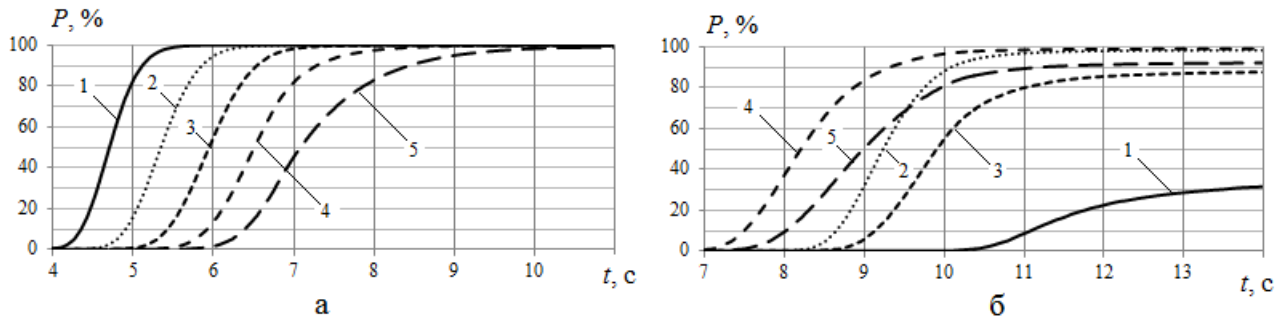


Рис. 18. Зміна ймовірності ураження тепловим потоком без перепони (а) і з перепорою (б): 1-5 – контрольні точки Р1-Р5, відповідно

Основні результати розділу опубліковано в роботах [7, 10, 11, 13, 22, 24, 30, 31, 35, 37, 39, 40, 42, 43, 45-58, 62, 66].

ВИСНОВКИ

Нові науково обґрунтовані результати, які отримано у дисертації розв'язують актуальну науково-прикладну проблему, яка полягає у розробленні математичних моделей, методології та програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у розташуванні техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень повітря на довкілля і пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

Отримано нові наукові і практичні результати дослідження, що мають істотні переваги у порівнянні з наявними рішеннями, сформульовані висновки, які полягають у наступному.

1. Проведено аналіз сучасного стану теорії і практики моделювання процесів збурення приземного шару атмосферного повітря техногенних об'єктів, яке відбувається за умов аварійного (або контрольованого) викиду газових домішок, і його впливу на довкілля. На його основі виявлено науково-прикладну проблему, мету і завдання дисертаційного дослідження, сформовано системну концепцію і підходи до розв'язання поставлених задач, що дало змогу формалізувати процеси моделювання, аналізу і прогнозу стану повітря техногенних об'єктів в умовах впливу хімічно-складових, баричних і теплових збурень та пошуку раціональних конструкцій захисних споруд для усунення або пом'якшення наслідків цих впливів.

2. У роботі вперше розроблено новий клас ефективних тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними граничними умовами, які відрізняються розрахунковими схемами для моделювання

характерних сценаріїв виникнення і руху багатокомпонентної газової суміші у 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, які, на відміну від наявних використовують нелокальні початкові умови, що забезпечує можливість моделювати такі сценарії баричного збурення повітря, як «фізичний» вибух (вивільнення стисненого газу) і «хімічний» вибух (миттєва хімічна реакція бруто в області займистості) для оцінювання наслідків впливу хвилі тиску на довкілля та ефективність засобів захисту від її дії.

На основі програмного засобу комп'ютерної реалізації розробленої моделі було досліджено вивільнення стисненого водню з циліндру зберігання високого тиску на станції заправки воднем транспортних засобів з утворенням воднево-повітряної суміші. Після цього з використанням моделі «хімічного» вибуху отримано баричне і термічне збурення повітря в області займистості водневої хмари. Проведено детермінований аналіз надлишкових параметрів суміші у контрольних точках поблизу конструкцій навколишніх будівель у залежності від дальності взаємного розташування заправної станції і будівель. Досліджено ефективність використання різних засобів захисту довкілля (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 точки зору пом'якшення ударно-імпульсного навантаження на людину у точці розміщення робочого місця. З використанням моделі здійснено також чисельний аналіз наслідків водневого вибуху у тунелі шахти. Отримано поля ураження людини вибуховою хвилею і вплив на них форми поперекового перетину шахтного тунелю, відкритого або закритого характеру розрахункового простору та загромождження тунелю акумуляторним електровозом;

- уперше розроблено нестационарну математичну модель руху хімічно-реагуючої газової суміші зі складними граничними умовами, яка, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовує розрахункову схему бруто-взаємодії пального та кисню повітря.

На основі програмного засобу комп'ютерної реалізації розробленої математичної моделі отримані розподіли хімічно-складового, баричного і температурного збурення повітря під час дефлаграційного горіння воднево-повітряної суміші після викиду водню внаслідок руйнування циліндру зберігання високого тиску у гаражному приміщенні. Вироблено рекомендації з пом'якшення можливих наслідків впливів на людину і конструкції гаража. Також із застосуванням моделі виявлено основні умови переходу режиму горіння від дефлаграції до детонації воднево-кисневих і метано-кисневих сумішей у детонаційній трубі;

- уперше розроблено нестационарну математичну модель руху хімічно-реагуючої газової суміші зі складними граничними умовами, яка, на відміну від наявних, ураховує присутність часток пилу та дисперсних крапель рідини у формі

додаткових джерельних членів у правих частинах рівнянь руху і енергії суміші.

З використанням програмного засобу комп'ютерної реалізації розробленої моделі отримано розподіли тиску і температури після аварійного вибуху метано-повітряної суміші у шахтному тунелі. Виявлено значне зростання баричного і термічного збурення повітря за присутності вугільного пилу. Рекомендовано для пом'якшення наслідків впливів вибуху використовувати у якості захисного засобу завісу з дисперсних крапель води, випаровування і супротив яких під час горіння за результатами моделювання знижує надлишкові параметри газоповітряної суміші у тунелі до безпечних значень;

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

На основі програмного засобу комп'ютерної реалізації розробленої математичної моделі отримано розподіли хімічно-складового збурення повітря навколо залізничної станції внаслідок випаровування з поверхні плями аварійного пролиття зрідженого ціаністого 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 витокм водневого палива, рекомендовано найбільш ефективний режим роботи стандартного витяжного вентилятора, і раціональну схему розміщення вентилятора з точки зору можливих наслідків баричного і температурного збурення повітря гаражу внаслідок вибуху сформованої під час вентиляції воднево-повітряної суміші. Також на основі розробленої моделі проведено оцінювання наслідків забруднення довкілля під час аварійного струминного витікання хлору з газопроводу. Виявлено зростаючий вплив концентрації хлору у струмені на зростання масштабів токсичного отруєння населення і персоналу об'єкту. Також на базі моделі отримано розподіли термічного збурення повітря робочого тунелю швидкоморозильної камери багатоструминним витіканням азоту. Вироблено рекомендації щодо режиму роботи форсунок та швидкості руху об'єктів впливу тунелем для ефективного охолодження.

3. Удосконалено системну методологію оцінювання змінних стану повітря, яка, на відміну від наявних, на основі отриманих в результаті моделювання нестационарних просторових розподілів таких факторів впливу, як інгаляційної токсодози небезпечної хімічної речовини, ударно-імпульсного навантаження у фронті вибухової хвилі та щільності теплового випромінювання, дає змогу оцінити наслідки впливу та прийняти рішення щодо ефективності засобів захисту довкілля.

Розроблену системну методологію оцінювання стану повітря в умовах хімічно-складового, баричного і теплового збурення, яка базується на використанні загального інтегро-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для розв'язання системи інтегральних рівнянь нев'язкої течії багатокомпонентної газової суміші багатозв'язним розрахунковим простором, слід вважати високоефективною, оскільки її застосування для окремих сценаріїв

збурення повітря, або їх комбінації різної конфігурації, забезпечують зниження обчислювальної складності не менше ніж на порядок без втрати точності розрахунку основних надлишкових параметрів у порівнянні з методологіями, які орієнтовані на числове розв'язання усереднених за Рейнольдсом-Фавром рівнянь Нав'є-Стокса.

4. Удосконалено обчислювальний метод розв'язання задачі розпаду довільного розриву параметрів газу С. К. Годунова, яка, на відміну від оригінальної схеми, розглядає взаємодію двох газоповітряних сумішей різної масової концентрації домішок і припускає адіабатичний процес з усередненим коефіцієнтом адіабати, що забезпечує можливість використовувати оригінальні співвідношення на розриві для отримання потоків маси, імпульсу і енергії суміші, внаслідок його розпаду, обчислювати інтегральні закони зберігання на гранях розрахункових комірок для реалізації загального інтегро-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для розв'язання системи інтегральних рівнянь руху суміші розрахунковим простором.

З використанням розробленого методу, який є базовою складовою інтегро-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку без зростання часової складності проведено аналіз параметрів стану не тільки потоку чистого повітря простором техногенних об'єктів, але і багатокомпонентних сумішей, які виникли внаслідок найбільш вірогідних аварійних або контрольованих сценаріїв викиду газової фази до повітря. Це забезпечило можливість реалізувати такі основні сценарії збурення, як баричне і термічне, внаслідок вибуху або теплового випромінювання.

5. Удосконалено обчислювальний метод моделювання спряженого теплообміну газової суміші і твердих тіл, який, на відміну від наявних, використовує розв'язання зв'язаної задачі теплообміну з умовами сполучення у вигляді граничних умов III роду.

На основі розробленого методу отримані просторово-часові розподіли температури у робочій зоні камери термообробки за наявності у розрахунковому просторі твердого тіла (об'єкту нагрівання). Виявлено залежність швидкості теплообміну від матеріалу і форми перетину об'єкту термічного впливу.

6. Удосконалено обчислювальний метод пробіт-аналізу наслідків впливу основних факторів (надлишкового тиску, імпульсу первинної фази стискання вибухової хвилі, щільності теплового випромінювання) на довкілля, у якому на відміну від існуючих, 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 у загальний обчислювальний метод наскрізного розрахунку і здійснити моніторинг просторово-часових розподілів ймовірності впливів усіх основних різновидів збурення повітря під час дослідження низки аварій без необхідності звертатися до відповідних діаграм і таблиць, що забезпечило зниження не менш ніж на порядок часової складності розробленого методу прогнозу наслідків впливу викидів техногенного об'єкту на довкілля та пошуку ефективних засобів його захисту.

7. Дістала подальшого розвитку теорія побудови програмного засобу

комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень на основі запропонованих математичних моделей, методів аналізу і прогнозу стану повітряного середовища техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень повітря на довкілля на базі розробленого алгоритму паралельної організації обчислювального процесу.

Сформульовано принципи створення, склад, структуру інтерактивного програмного засобу підтримки прийняття рішень "FIRE" під час пошуку раціональних конструкцій захисту довкілля від наслідків впливів, які формуються внаслідок збурень повітря техногенних об'єктів. Використання механізму робочих потоків і паралельних циклів для обчислення розсіювання домішки у підобластях розрахункового простору дало прискорення у 2,5 рази з використанням комп'ютера з 4-ядерним процесором у порівнянні з існуючими додатками на основі послідовних обчислень. Розроблений інтерактивний програмний засіб використовувався для вирішення поставлених завдань і орієнтований на фахівців, що працюють над проблемами вдосконалення захисних споруд техногенних об'єктів.

8. Достовірність розроблених математичних моделей, обчислювальних методів, комп'ютерних систем їх реалізації підтверджено валідацією і верифікацією з використанням статистичних показників ефективності математичних моделей на основі співставлення з результатами наявних експериментальних та розрахункових досліджень.

9. Наукові положення, висновки, пропозиції, рекомендації і результати обчислювальних експериментів застосовано у інженерній практиці аналізу і прогнозу полів надлишкових параметрів збуреного потоку повітря під час оцінки безпекового стану та організації технологічних процесів підприємств України і проведення навчального процесу у Національному аерокосмічному університеті ім. М. Є. Жуковського «Харківський авіаційний інститут», що підтверджено наявними актами впровадження.

Практичне використання побудованих математичних моделей та обчислювальних засобів їх комп'ютерної реалізації дає можливість суттєво скоротити матеріальні та часові витрати під час аналізу і прогнозу ризиків наслідків аварійних викидів у повітря вибухонебезпечних і токсичних газових домішок на техногенних об'єктах, де вони зберігаються або використовуються, та розробити рекомендації їх усунення або пом'якшення.

Отже, було досягнуто мету дослідження, яка полягала у системному вдосконаленні та підвищенні ефективності математичних моделей, методології та програмного засобу їх комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень для аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у розташуванні техногенних об'єктів в умовах формування факторів впливу збурень повітря на довкілля і пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

Усе наведене підтверджує високу ефективність запропонованих рішень, які обґрунтовано теоретично і підтверджено практично.

СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

Наукові праці, в яких опубліковано основні наукові результати дисертації:

1. Константинов В. В., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Автоматизированный комплекс программ для расчетов вязких пространственных течений в каналах турбомашин. *Авиационно-космическая техника и технология: сб. науч. тр.* 1998. Вып. 5. С. 130–134. (Особистий внесок: модель розподілу газодинамічних параметрів під час руху газу у внутрішньому каналі з урахуванням впливу в'язкості)
2. Митасов Ю. Д., Редько А. Ф., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Численное моделирование процесса распространения продуктов горения при пожаре в зданиях с атриумами. *Научный вестник строительства: сб. науч. пр.* 2001. Вып. 14. С. 258–262. (Особистий внесок: моделювання викиду газової домішки у повітря приміщення і розсіювання їх під впливом природної вентиляції)
3. Скоб Ю. А. Математическое моделирование выброса и рассеяния в атмосфере газообразных примесей. *Вестник Харк. нац. ун-та. Серия: Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління.* 2007. № 775. Вып. 7. С. 236–245.
4. Петухов И. И., Угрюмов М. Л., Скоб Ю. А., Лисица А. Ю., Сырый В. Н. Численное исследование параметров охлаждающей среды в скороморозильном туннеле. *Авиационно-космическая техника и технология.* 2007. № 1(37). С. 25–28. (Особистий внесок: модель струминного витікання неактивної газової домішки)
5. Скоб Ю. А. Численное моделирование процессов смешения нереагирующих газов в атмосфере. *Авиационно-космическая техника и технология.* 2007. № 2(38). С. 57–62.
6. Скоб Ю. А. Численное моделирование взрывов газо-воздушных смесей в атмосфере. *Авиационно-космическая техника и технология.* 2007. № 3(39). С. 72–78.
7. Коробчинский К. П., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л., Шенцов В. В. Численная оценка последствий взрыва водорода в атмосфере. *Авиационно-космическая техника и технология.* 2008. № 1(48). С. 79–88. (Особистий внесок: модель розподілу тиску внаслідок поширення вибухової хвилі)
8. Стаховский О. В., Корытченко К. В., Угрюмов М. Л., Скоб Ю. А. Способ инициирования детонации в неограниченном пространстве. *Системы обработки информации: сб. науч. пр. Харьк. ун-та повітряних сил імені Івана Кожедуба.* 2008. Вып. 2(69). С. 105–107. (Особистий внесок: модель розподілу тиску внаслідок детонаційного горіння)
9. Скоб Ю. А., Корытченко К. В., Угрюмов М. Л., Вамболь С. А. Математическое моделирование воздействия взрыва объемного шлангового заряда на лесной фитоценоз и растительный покров. *Проблемы пожарной безопасности: сб. научн. тр. НУГЗУ.* 2009. Вып. 26. С. 134–140. (Особистий внесок: модель вибуху газоповітряної суміші і поширення вибухової хвилі)
10. Скоб Ю. А. Математическое моделирование дефлаграционного горения газовых смесей в помещении. *Вестник Харк. нац. ун-та. Серия: Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління.* 2009. № 863. Вып. 12. С. 218–236.

11. Коротченко К. В., Вамболь С. А., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л., Назаренко А. А. Моделирование области обрыва ЛГМ, формируемой при взрыве топливовоздушных зарядов в лесном фитоценозе. *Проблемы пожарной безопасности: сб. научн. тр. НУГЗУ*. 2010. Вып. 27. С. 109–117. (Особистий внесок: модель розподілу надлишкового тиску під час вибуху газоповітряної суміші)
12. Скоб Ю. А. Численное моделирование процессов теплообмена в твердых телах сложной формы. *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. *Авиационно-космическая техника и технология*. 2011. № 4(81). С. 70–79.
14. Скоб Ю. А. Технология параллельного расчета нестационарных задач газовой динамики. *Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии: сб. научн. трудов*. 2011. Вып. 50. С. 61–67.
15. Скоб Ю. А. Численное решение сопряженной задачи теплообмена в камерах термообработки. *Авиационно-космическая техника и технология*. 2012. № 4(91). С. 79–83.
16. Вамболь С. А., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Математическое моделирование взрыва метановоздушной смеси и угольной пыли в подземных горных выработках угольных шахт. *Проблеми надзвичайних ситуацій: зб. наук. пр.* 2012. Вип. 15. С. 31–40. (Особистий внесок: модель вибуху газоповітряної суміші за присутності горючого пилу)
17. Скоб Ю. А., Вамболь С. А., Угрюмов М. Л., Грановский Э. А., Лыфарь В. А. Моделирование рассеяния водорода в вентилируемом помещении. *Проблеми надзвичайних ситуацій: зб. наук. пр.* 2013. Вип. 17. С. 184–197. (Особистий внесок: модель потрапляння (відбору) газоповітряної суміші у приміщення внаслідок вентиляції)
18. Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Численное моделирование детонации в газовых смесях. *Вісник Харк. нац. ун-та: сер. Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління*. 2013. № 1058. Вып. 21. С. 149–157. (Особистий внесок: модель баричного і термічного збурення повітря під час детонаційного горіння газоповітряної суміші)
19. Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л., Хорохордин А. О. Исследование процесса вентиляции помещения с применением осевого вентилятора. *Авиационно-космическая техника и технология*. 2013. № 3(100). С. 68–74. (Особистий внесок: модель витяжки газоповітряної суміші із приміщення внаслідок дії механічної вентиляції)
20. Скоб Ю. А. Вычислительная технология учета вентиляции при расчете движения газовой смеси в помещении. *Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии: сб. научн. трудов*. 2013. Вып. 58. С. 147–154.
21. Скоб Ю. А., Вамболь С. А., Лыфарь В. А., Угрюмов М. Л. Метод расчета тепловых нагрузок в пространстве от излучения пламени произвольной формы. *Проблемы пожарной безопасности: сб. научн. тр.* 2014. Вып. 35. С. 194–200.

(Особистий внесок: модель розподілу термічного фактору впливу внаслідок теплового випромінювання)

22. Скоб Ю. А. Расчет вероятности поражения человека на основе моделирования рассеяния токсичного газа в атмосфере. *Авиационно-космическая техника и технология*. 2016. № 4(131). С. 79–88.

23. Скоб Ю. А. Математическое моделирование струйного истечения газозооушной смеси с различной концентрацией примеси в атмосферу. *Авиационно-космическая техника и технология*. 2017. № 4(139). С. 83–92.

24. Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Математическое моделирование последствий испарения аварийного пролива токсичного вещества на железнодорожном транспорте. *Наука та прогрес транспорту. Вісник Дніпропетровського нац. ун-ту заліз. транспорту*. 2018. № 3(75). С. 52–66. DOI: <https://doi.org/10.15802/stp2018/133637> (PINC) (Особистий внесок: модель потрапляння газової домішки в атмосферу внаслідок випаровування зрідженого газу з плями полиття)

25. Korytcheko K. V., Ozerov A. N., Vinnikov D. V., Skob Y. A., Dubinin D. P., Meleshchenko R. G. Numerical simulation of influence of the non-equilibrium excitation of molecules on direct detonation initiation by spark discharge. *Problems of Atomic Science and Technology : National Science Center, Kharkov Institute of Physics and Technology*. 2018. Volume 116. Issue 4. P. 194–199. (Scopus) (Особистий внесок: модель розподілу надлишкового тиску під час детонаційного горіння газової суміші)

26. Лыфарь В. А., Угрюмов М. Л., Скоб Ю. А. Метод и автоматизированная компьютерная система оценки пожарного риска зданий. *Проблемы пожарной безопасности: сб. научн. тр. НУГЗУ*. 2009. Вып. 26. С. 71–78. (Особистий внесок: модель розподілу баричного і термічного факторів впливу під час пожежі)

27. Скоб Ю. А., Коробчинский К. П., Морозов Д. С., Шенцов В. В. Разработка алгоритма параллельных вычислений при решении задач газовой динамики. *Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии: сб. научн. трудов*. 2009. Вып. 41. С. 109–115. (Особистий внесок: алгоритм параллельної організації обчислення методу наскрізного розрахунку)

Статті у наукових періодичних виданнях інших держав, що входять до міжнародних наукометричних баз:

28. Men'shikov V. A., Skob Y. A., Ugryumov M. L. Solution of the three-dimensional turbomachinery blade row flow field problem with allowance for viscosity effects. *Fluid Dynamics*. 1991. Vol. 26. Issue 6. P. 889–896. DOI: <https://doi.org/10.1007/BF01056792> (Scopus) (Особистий внесок: модель руху газу у внутрішньому каналі і інтегро-інтерполяційний метод наскрізного розрахунку)

29. Вамболь С. А., Скоб Ю. А., Нечипорук Н. В., Трухмаев О. А. Моделирование системы управления экологической безопасностью с использованием многофазных дисперсных структур при взрыве метановоздушной смеси и угольной пыли в подземных горных выработках угольных шахт. *Вестник Казанского технологического ун-та*. 2013. № 24. С. 168–174. (PINC) (Особистий внесок: модель вибуху газоповітряної суміші за присутності дисперсних часток)

30. Skob Y., Ugryumov M. and Granovskiyy E. Numerical Evaluation of Probability of Harmful Impact Caused by Toxic Spill Emergencies. *Environmental and Climate*

Technologies. 2019. Vol. 23. Issue 3. P. 1–14. DOI: <https://doi.org/10.2478/rtuect-2019-0075> (**Scopus**) (Особистий внесок: ймовірнісний аналіз токсичного впливу випаровування небезпечної рідкої хімічної речовини)

31. Skob, Y.A., Ugryumov, M.L., Granovskiy, E.A. Numerical assessment of hydrogen explosion consequences in a mine tunnel. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2021. Vol. 46. Issue 23. P. 12361–12371. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijhydene.2020.09.067> (**Scopus**) (Особистий внесок: модель «хімічного» вибуху газоповітряної суміші, пробіт-аналіз стану довкілля за наявності загромождження простору)

Наукові праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

32. Gaydachuk A. V., Skob Y. A., Ugryumov M. L., Granovskiy E. A., Lifar V. A. Computational Modeling of the Emission and Distribution of Gaseous Toxic matters in the Atmosphere. *21st International Congress of Theoretical and Applied Mechanics : Abstracts and CD-ROM Proceeding*, 15-21 Aug. 2004, Warszawa, Poland. 2004. 2 p. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

33. Granovskiy E. A., Lyfar V. A., Skob Y. A., Ugryumov M. L. Numerical Modeling of Hydrogen Release, Mixture and Dispersion in Atmosphere : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 10 p. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

34. Грановский Э. А., Лыфарь В. А., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Численное моделирование и оценка рисков взрывов, пожаров и рассеяния вредных примесей в атмосфере. *Пожезна безпека та аварійно-рятувальна справа: стан, проблеми і перспективи* : Матеріали VII Всеукраїнської наук.-практ. конф., 30 лист.–1 груд. 2005 р., Київ, УкрНДІПБ МНС України, 2005. С. 79–82. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

35. Грановский Э. А., Лыфарь В. А., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л., Коробчинский К. П. Компьютерное моделирование последствий взрыва газозооушной смеси. *Дисперсные системы. Тезисы докладов XXII науч. конф. стран СНГ*, 18–22 сент. 2006 р., Одесса, 2006. С. 117–118. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

36. Korytchenko K. V., Skob Y. A., Ugryumov M. L., Basteev A. V., Kosoj A. I. Simulation of conditions for detonation initiation in unconfined space with use of accelerated jet stream. *21st International Colloquium on the Dynamics of Explosions and Reactive Systems*, July 23-27 2007, Poitiers, France. 2007. 5 p. URL : <http://www.icders.org/ICDERS2007/abstracts/ICDERS2007-0033.pdf> (дата звернення 05.07.2021) (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

37. Кобрин В. Н., Нечипорук Н. В., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л., Кириенко П. Г., Коробчинский К. П. Влияние скорости ветра и рельефа местности на загрязнение атмосферного воздуха при утилизации взрывчатых веществ. *Екологічна безпека: проблеми та шляхи вирішення* : зб. наук. ст. III Міжнар. наук.-практ. конф., 10–14 верес. 2007 р., Алушта-Харьків, 2007. Т. 2. С. 233–237. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

38. Скоб Ю. А. Математическое моделирование выброса и рассеяния в атмосфере газообразных примесей. *Методи дискретних особливостей в задачах математичної фізики. XIII Міжнар. симпозіум* : зб. наук. пр., 11–18 черв. 2007 р.,

Харків-Херсон, 2007. С. 274–276. (*Форма участі: очна, доповідь на конференції*)

39. Granovskiy E. A., Lyfar V. A., Skob Y. A., Ugryumov M. L. Computational Modeling of Pressure Effects From Hydrogen Explosions : *Proceedings of the 2nd International Conference on Hydrogen Safety*, september 11-13 2007, San Sebastian, Spain. 2007. 15 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user_upload/CD/PAPERS/13SEPT/1.3.52.pdf (дата звернення 05.07.2021) (*Форма участі: очна, доповідь на конференції*)

40. Кобрин В. Н., Нечипорук Н. В., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л., Кириенко П. Г., Коробчинский К. П. Исследование средств снижения избыточных давлений на стенках зданий застройки местности, вызванных взрывом газообразных смесей в атмосфере. *Екологічна безпека: проблеми та шляхи вирішення* : зб. наук. ст. IV Міжнар. наук.-практ. конф., 8–12 верес. 2008 р., Алушта-Харків, 2008. Т. 2. С. 298-303. (*Форма участі: очна, доповідь на конференції*)

41. Skob Y. A., Ugryumov M. L., Korobchynskiy K. P., Shentsov V. V., Granovskiy E. A., Lyfar V. A. Numerical Modeling of Hydrogen Deflagration Dynamics in Enclosed Space : *Proceedings of the 3d International Conference on Hydrogen Safety*, september 16-18 2009, Ajaccio-Corsica, France. 2009. 12 p. URL : <http://conference.ing.unipi.it/ichs2009/images/stories/papers/182.pdf> (дата звернення 05.07.2021) (*Форма участі: очна, доповідь на конференції*)

42. Кобрин В. Н., Нечипорук Н. В., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л., Кириенко П. Г., Коробчинский К. П. Прогнозирование характерных зон заражения при проливе химически вредных веществ. *Екологічна безпека: проблеми та шляхи вирішення* : зб. наук. ст. IV Міжнар. наук.-практ. конф., 7–11 верес. 2009 р., Алушта-Харків, 2009. Т. 1. С. 47–51. (*Форма участі: очна, доповідь на конференції*)

43. Skob Y. A., Ugryumov M. L., Granovskiy E. A., Lyfar V. A. Effectiveness evaluation of facilities protecting from hydrogen-air explosion overpressure : *Proceedings of the 4th International Conference on Hydrogen Safety “Enabling Progress and Opportunities”*, september 12-14 2011, San Francisco, California-USA. 2011. 11 p. URL : <http://conference.ing.unipi.it/ichs2011/papers/179.pdf> (дата звернення 05.07.2021) (*Форма участі: очна, доповідь на конференції*)

44. Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л., Вамболь С. А., Лыфарь В. А. Определение геометрии пламени и алгоритм определения тепловой нагрузки в точке пространства. *Прикладні аспекти техногенно-екологічної безпеки* : збірка тез Всеукраїнської наук.-практ. конф., 6 груд. 2013 р. Харків, 2013. С. 8–10. (*Форма участі: очна, доповідь на конференції*)

45. Скоб Ю. А., Евтушенко Д. В., Бондаренко Ю. В., Тищенко А. С. Численная оценка безопасности при техногенной аварии. *Інформатика та системні науки* : матеріали VII Всеукраїнської наук.-практ. конф. за міжнар. участю, 11–12 берез. 2016 р. Полтава, 2016. С. 275–277. (*Форма участі: очна, доповідь на конференції*)

46. Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Вероятностная оценка экологической безопасности при аварии на транспорте. *Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті* : збірка матеріалів VIII Міжнар. наук.-практ. конф., 24–26 травня 2016 р. Херсон, 2016. С. 283–285. (*Форма участі: очна, доповідь на конференції*)

47. Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Оценка безопасности на основе математического моделирования газодинамических процессов при техногенной аварии. *Компьютерное моделирование в наукоемких технологиях* : труды междунар. науч.-техн. конф., 26–31 травн. 2016 р. Харків, 2016. С. 303-306. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

48. Скоб Ю. А., Евтушенко Д. В., Рудык В. Н. Моделирование рассеивания токсичного вещества в атмосфере. *Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті* : збірка матеріалів IX Міжнар. наук.-практ. конф., 23–25 травня 2017 р. Херсон, 2017. С. 258–261. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

49. Скоб Ю. А., Бондаренко Ю. В., Томина И. С. Численный анализ эффективности защитных сооружений при взрыве газа. *Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті* : збірка матеріалів IX Міжнар. наук.-практ. конф., 23–25 травня 2017 р. Херсон, 2017. С. 254-257. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

50. Skob Y. A., Granovskiy E. A., Ugryumov M. L. Evaluation of the protection effectiveness against overpressure from hydrogen-air explosion : *Proceedings of the 7th International Conference on Hydrogen Safety*, september 11-13 2017, Hamburg, Germany. 2017. 11 р. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

51. Скоб Ю. А., Васильченко Е. А. Численное моделирование теплового излучения продуктов горения газа. *Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті* : збірка матеріалів X Міжнар. наук.-практ. конф., 22–25 травня 2018 р. Херсон, 2018. С. 250–253. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

52. Скоб Ю. А., Шайтан А. Ф. Моделирование последствий аварийного выброса в атмосферу токсичного вещества. *Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті* : збірка матеріалів X Міжнар. наук.-практ. конф., 22–25 травня 2018 р. Херсон, 2018. С. 254-256. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

53. Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Методология прогнозирования вероятности поражения персонала техногенного объекта при аварийном проливе токсичного вещества. *Компьютерное моделирование в наукоемких технологиях* : труды междунар. науч.-техн. конф., 22–25 травня 2018 р. Харків, 2018. С. 274–277. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

54. Васильченко Е. А., Скоб Ю. А. Численная оценка тепловой нагрузки от продуктов горения газа : *матеріали I міжнар. наук.-практ. конф. ІТ-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference»*, 24–26 квітня 2018 р., Харків, 2018. С. 51-52. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

55. Шайтан А. Ф., Скоб Ю. А. Численная оценка последствий загрязнения атмосферы токсичным веществом : *матеріали I міжнар. наук.-практ. конф. ІТ-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference»*, 24–26 квітня 2018 р., Харків, 2018. С. 68-69. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

56. Скоб Ю. А., Панов А. В. Моделирование последствий испарения токсичного вещества с пятна пролива произвольной формы. *Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті* : збірка матеріалів X Міжнар. наук.-практ. конф., 28–30 травня 2019 р. Херсон, 2019. С. 283-286. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

на конференції)

57. Скоб Ю. А., Вольская А. Д. Численный анализ влияния вентиляции помещения на последствия аварийного взрыва газа. *Сучасні інформаційні та інноваційні технології на транспорті* : збірка матеріалів Х Міжнар. наук.-практ. конф., 28–30 травня 2019 р. Херсон, 2019. С. 287-290. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

58. Skob Y. A., Ugryumov M. L., Granovskiy E. A. Numerical assessment of hydrogen explosion consequences in mine tunnel : *Proceedings of the 8th International Conference on Hydrogen Safety*, september 24-26 2019, Adelaide, Australia. 2019. 12 p. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

59. Скоб Ю. А., Панов А. В. Конечно-разностное представление плоской фигуры, ограниченной замкнутым контуром : *матеріали II міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference»*, 26–28 березня 2019 р., Харків, 2019. С. 51–52. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

60. Скоб Ю. А., Вольская А. Д. Численное моделирование процесса вентиляции : *матеріали II міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference»*, 26–28 березня 2019 р., Харків, 2019. С. 53–54. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

61. Скоб Ю. А., Вольская А. Д., Халтурин В. А. Численная оценка эффективности схемы вентиляции гаражного помещения при аварийной утечке водородного топлива : *матеріали III міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference»*, 8–10 грудня 2020 р., Харків, 2020. С. 71-72. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

62. Скоб Ю. А., Панов А. В., Халтурин В. А. Численная оценка влияния скорости ветра на последствия испарения пролива токсичного вещества : *матеріали III міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference»*, 8–10 грудня 2020 р., Харків, 2020. С. 83–84. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

63. Скоб Ю. А., Копейченко А. К., Халтурин В. А. Численная оценка безопасных габаритов защитной стены при взрыве водорода : *матеріали III міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference»*, 8–10 грудня 2020 р., Харків, 2020. С. 76–77. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

64. Скоб Ю. А., Брисов С. И., Халтурин В. А. Верификация математической модели испарения сжиженного токсичного газа : *матеріали III міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference»*, 8–10 грудня 2020 р., Харків, 2020. С. 69–70. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

65. Скоб Ю. А., Емельяненко Е. С., Халтурин В. А. Численное исследование влияния рельефа местности на последствия воздействия взрывной волны : *матеріали III міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference»*, 8–10 грудня 2020 р., Харків, 2020. С. 73–74. (Форма участі: очна, доповідь на конференції)

66. Skob Y., Ugryumov M., and Dreval Y. Numerical Modelling of Gas Explosion Overpressure Mitigation Effects. *Materials Science Forum : Proceedings of the International Conference "Problems of Emergency Situations"*, May 20 2020, Kharkiv, Ukraine, 2020. Vol. 1006. P. 117–122. (**WoS, Scopus**)

Наукові праці, які додатково відображають результати дисертації:

67. Меньшиков В. А., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Решение задачи обтекания венцов турбомашин пространственным потоком с учетом эффектов вязкости. *Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа*. 1991. № 6. С. 119–127. (**Scopus**) (Особистий внесок: модель руху газу у внутрішньому каналі, інтегро-інтерполяційний метод наскрізного розрахунку)

68. Скоб Ю. О., Угрюмов М. Л., Коробчинський К. П. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна інтерактивна система інженерного аналізу та прогнозу руху хімічно реагуючих газоповітряних сумішей в задачах промислової аеродинаміки та екології атмосфери «FIRE»»: свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 30079 (Україна). *Офіційний бюлетень. Авторське право і суміжні права*. Київ: Держ. служба інтел. власності України. 2009. № 19. С. 488. (Особистий внесок: модель руху газоповітряної суміші і програмний засіб її комп'ютерної реалізації)

69. Скоб Ю. О., Угрюмов М. Л. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система інженерного аналізу та прогнозу «Explosion Safety» для оцінки безпеки під час аварійного вибуху газоповітряної суміші»: свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 71860. *Офіційний бюлетень. Авторське право і суміжні права*. Київ: Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. 2017. № 45. С. 236. (Особистий внесок: програмний засіб комп'ютерної реалізації ймовірнісного аналізу впливу на довкілля барично збуреного повітря)

АНОТАЦІЯ

Скоб Ю. О. Математичні тривимірні моделі та методи аналізу руху газоповітряних сумішей в задачах екології атмосфери та промислової аеродинаміки. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук за спеціальністю 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи. – Національний аерокосмічний університет імені М. Є. Жуковського «Харківський авіаційний інститут» Міністерства освіти і науки України; Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна Міністерства освіти і науки України. – Харків, 2021.

Дисертацію присвячено удосконаленню методів і засобів математичного і комп'ютерного моделювання руху газових сумішей у приземному шарі атмосфери з урахуванням складного рельєфу, хімічної взаємодії та токсичного характеру домішок. Розроблено новий клас тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними граничними умовами, які відрізняються розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення і руху газових сумішей. Розв'язання поставлених задач проведено методом С. К. Годунова, який модифіковано для газових сумішей. Розроблено методологію визначення факторів впливу збуреного повітря на довкілля та прогнозу

наслідків із застосуванням модифікованого апарату пробіт-аналізу. Побудовано програмний засіб комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень для пошуку ефективних захисних споруд. Адекватність математичної моделі валідовано і верифіковано, а високу ефективність її комп'ютерної реалізації обґрунтовано теоретично і підтверджено практично. Основні результати дослідження знайшли застосування у промисловості на етапі експертної оцінки наслідків потрапляння в атмосферу вибухонебезпечних і токсичних газових домішок.

Ключові слова: диференційні рівняння змішаного типу з частинними похідними, методи наскрізного розрахунку, газові суміші, пробіт-аналіз, ймовірність ураження, пробіт-функція.

ABSTRACT

Skob Y. O. Mathematical three-dimensional models and methods of gas-air mixtures motion analysis in problems of atmosphere ecology and industrial aerodynamics. – Qualification scientific work is as a manuscript.

Thesis for a Doctor degree in Technical Science: Specialty 01.05.02 – Mathematical Modeling and Computational Methods. – National Aerospace University “Kharkiv Aviation Institute” of the Ministry of Education and Science of Ukraine; V. N. Karazin Kharkiv National University of the Ministry of Education and Science of Ukraine. – Kharkiv, 2021.

The dissertation is devoted to the improvement of methods and means of mathematical and computer modelling of the motion of multicomponent gas mixtures in the surface layer of the atmosphere, taking into account the complex terrain, chemical interaction of admixtures with air oxygen, and toxic nature of some gaseous impurities in order to find the means to eliminate or mitigate the consequences of such negative effects.

The object of the research is the processes of analysis and forecast of the air environment state parameters of technogenic industrial objects in the conditions of formation of factors of influence of air parameters disturbances on the surrounding environment.

The subject of the work contains three-dimensional mathematical models and computational methods of analysis of the actual physical processes during the movement of a multicomponent gas mixture in the accidentally disturbed atmosphere of the industrial enterprise.

On the basis of the conducted theoretical and experimental researches a new solution of an important scientific and applied problem is received, and a new scientific direction is formed and developed – a generalization and development of theoretical bases of mathematical and computer modeling of movement of dangerous gas-air mixtures in and around technogenic objects. It is different from existing solutions by a more complete reflection of heat and mass transfer processes, a development of effective computational methods designed to solve non-stationary initial-boundary and non-local problems, based on modern technical and information tools.

A new class of effective nonstationary three-dimensional mathematical models for the distribution of gas-air mixture parameters in the form of nonlinear initial-boundary

problems with complex boundary conditions has been developed. The models differ in their calculation schemes for modeling the characteristic scenarios of the origin and motion of a multicomponent gas mixture in the surface layer of the atmosphere with a complex relief and in industrial aerodynamics systems. Unlike the existing ones, these models are based on the proposed unified approach to modeling the actual processes of air perturbation of an industrial technogenic object.

Pressure distribution models that use nonlocal initial conditions have been developed. They make it possible to simulate such scenarios of baric air perturbation as ‘physical’ explosion (release of compressed gas) and ‘chemical’ explosion (instantaneous gross chemical reaction in flammability limits) to assess the effects of pressure waves on the environment and the effectiveness of protection devices against explosion negative effects.

A model of the motion of a chemically reactive gas mixture with complex boundary conditions has been developed. In contrast to the existing ones, the model uses the calculation scheme of the gross interaction of fuel and oxygen to describe the processes of chemical kinetics. It also takes into account the presence of dust particles and dispersed liquid droplets in the form of additional source terms in the right parts of the mixture equations.

A model of gas impurity entering the actual region has been developed. Nonlocal boundary conditions on the surfaces of holes of arbitrary shape are used. Using the model, the processes of evaporation, ventilation, and jet stream have been simulated.

A system methodology for estimating air state variables has been improved. It is based on the results of modeling of non-stationary spatial distributions of such impact factors as inhalation toxidosis of a dangerous chemical substance, shock-impulse load in the blast wave front and heat radiation density. The methodology allows to assess the consequences and decide on the effectiveness of environmental protection means.

A method for solving a break-up problem of arbitrary discontinuity of gas parameters based on Godunov scheme has been improved. The scheme considers an interaction of two gas-air mixtures with different mass concentrations of impurities. An adiabatic process with an average adiabatic coefficient is assumed. This makes it possible to use the original Godunov’s discontinuity dependencies to obtain fluxes of mass, momentum and energy of the mixture.

Computational algorithms based on a Godunov scheme, adapted to the case of interaction of gas mixtures with different concentrations, have been created to solve the problems of modelling of different scenarios of impurities releasing to the air. An information system has been designed, as well as software tool that implemented it has been built.

The adequacy of the system mathematical model has been validated and verified, and the high efficiency of its computer implementation is theoretically substantiated and confirmed in practice. The main results and conclusions of the study are useful in industry at the stage of expert assessment of the effects of perturbation of air flow near the ground caused by the release of explosive and toxic gaseous matters into the atmosphere in order to evaluate the effectiveness of the protective facilities.

Keywords: differential equations in partial derivatives, methods of end-to-end calculation, gas mixtures, probit analysis, impact probability, probit function.

Підписано до друку 30.06.2021 р. Формат 60×90 1/16. Папір офсетний.
Гарнітура Times New Roman. Віддруковано на різнографі.
Умовн. др. арк. 1,9. Тираж 100 прим. Заказ 017

Віддруковано ФОП Лисенко І.Б.
61070, Харків -70, вул. Чкалова 17, моторний корпус, к.147.
Свідоцтво про внесення суб'єкта видавничої справи до державного реєстру видавців,
виготівників і розповсюджувачів видавничих продукцій ДК №2607 від 11.09.06 р.