### НАЦІОНАЛЬНИЙ АЕРОКОСМІЧНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ М. Є. ЖУКОВСЬКОГО «ХАРКІВСЬКИЙ АВІАЦІЙНИЙ ІНСТИТУТ» МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ ХАРКІВСЬКИЙ НАЦІОНАЛЬНИЙ УНІВЕРСИТЕТ ІМЕНІ В. Н. КАРАЗІНА МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ УКРАЇНИ

Кваліфікаційна наукова

праця на правах рукопису

# СКОБ ЮРІЙ ОЛЕКСІЙОВИЧ

УДК 519.6:681.518.2:533.27

# **ДИСЕРТАЦІЯ**

# «МАТЕМАТИЧНІ ТРИВИМІРНІ МОДЕЛІ ТА МЕТОДИ АНАЛІЗУ РУХУ ГАЗОПОВІТРЯНИХ СУМІШЕЙ В ЗАДАЧАХ ПРОМИСЛОВОЇ АЕРОДИНАМІКИ ТА ЕКОЛОГІЇ АТМОСФЕРИ»

Спеціальність 01.05.02 – математичне моделювання та обчислювальні методи Галузь знань – технічні науки

Подається на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей,

результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

\_\_\_\_\_Ю. О. Скоб

Науковий консультант:

**Угрюмов Михайло Леонідович**, доктор технічних наук, професор

Харків – 2021

#### 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 (технічні науки). – 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.

Дисертаційна робота вирішує актуальну науково-прикладну проблему розроблення математичних моделей, методології та комп'ютерних засобів для аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у розташуванні техногенних об'єктів, які працюють в умовах формування факторів впливу збурень повітря на довкілля, і пошуку раціональних конструкцій захисних засобів для усунення або пом'якшення наслідків впливу.

Дисертація направлена на розв'язання існуючого 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*.

*Метою* 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.

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 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.

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 нестаціонарних початково-крайових і нелокальних задач, на основі сучасних технічних і 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 і практичні результати, що мають істотні переваги у порівнянні з наявними рішеннями, сформульовані висновки, які полягають у наступному. 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.

Уперше розроблено новий клас ефективних нестаціонарних тривимірних математичних моделей розподілу тиску, температури, складу газоповітряної суміші 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 збурення повітря техногенного об'єкту:

– моделі розподілу тиску, які 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 брутто в області займистості) для оцінювання наслідків впливу хвилі тиску на довкілля та ефективність засобів захисту від її дії. З використанням програмного засобу комп'ютерної реалізації моделей було досліджено вивільнення стисненого водню з циліндру зберігання високого тиску на станції заправки воднем транспортних засобів з утворенням воднево-повітряної суміші. На основі 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 від наслідків баричного впливу вибухової хвилі. 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 загромадження тунелю акумуляторним електровозом;

– модель руху хімічно-реагуючої газової суміші зі складними граничними умовами, яка, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовує розрахункову схему брутто-взаємодії пального та кисню повітря. Отримано 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 гаражі. Вироблено рекомендації з пом'якшення можливих наслідків для людини і конструкцій гаража. Виявлено основні умови переходу режиму горіння до детонації воднево-кисневих і метано-кисневих сумішей у детонаційний трубі;

– 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. 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;

– модель потрапляння (відбору) газової домішки в актуальну область, в якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми. Отримано розподіли хімічно-складового збурення повітря навколо залізничної станції внаслідок випаровування з поверхні плями аварійного пролиття зрідженого ціаністого водню після руйнування транспортної цистерни. Виявлено зони токсичного ураження персоналу станції, вплив форми плями пролиття, швидкості вітру та загромадження простору будівлею станції на масштаби наслідків аварії. Також з використанням моделі досліджено процеси вентиляції гаражного приміщення з аварійним витоком водневого палива, рекомендовано найбільш ефективний режим роботи стандартного витяжного вентилятора, 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 хлору з газопроводу. Виявлено зростаючий вплив струминного витікання 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.

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

інтегро-інтерполяційного обчислювального наскрізного загального методу розв'язання системи інтегральних розрахунку для рівнянь руху суміші розрахунковим простором. Проведено аналіз параметрів стану потоку повітря техногенних об'єктів, який було збурено внаслідок викиду газової фази. Це це дало змогу реалізувати такі сценарії збурення, як баричне і термічне, внаслідок вибуху або теплового випромінювання;

– 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 ІІІ роду, на основі загального інтегро-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для отримання часово-просторових розподілів температури у зоні термічного збурення. Отримано поля температури у камері термообробки за наявності у розрахунковому просторі твердого тіла. Виявлено залежність швидкості теплообміну від матеріалу і форми перетину об'єкту термічного впливу;

– 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. 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

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 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, обгрунтовано і запропоновано автором у дисертаційному дослідженні, були підтверджені впровадженням у діяльності низки підприємств і навчальному процесі.

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

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.

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

#### ABSTRACT

Skob Yu. 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 (Technical Sciences). – 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 solves the actual scientific and applied problem of development of mathematical models, methodology and computer means for the analysis of movement of multicomponent gas mixtures in an arrangement of technogenic objects working in the conditions of formation of factors of influence of air disturbances on environment, and search of rational designs of protective means for elimination or mitigation of the exposure effects.

The dissertation is aimed at solving the existing persistent contradiction, which is the inconsistency of the growing requirements for the efficiency of industrial aerodynamic systems and the reliability of the protective infrastructure facilities in the widespread use of computational experiment, on the one hand, and the current level of methodological development including models, methods and software tools for computer implementation of the system model of decision making support based on numerical analysis of air state variables of technogenic objects to ensure safety requirements, on the other hand.

The main purpose of the work is to systematically improve and increase the efficiency of mathematical models, methodology and software of computer implementation of the system model of decision making support for analysis of multicomponent gas mixture in the location of technogenic objects during the formation of factors of influence of air perturbations on the environment, and search the means to eliminate or mitigate the consequences of this effect.

The object of research is the processes of analysis and forecast of the air

environment state parameters of technogenic objects in the conditions of formation of factors of influence of disturbances on the 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.

The theoretical basis of the work includes methods of mathematical modeling, computational methods of mathematical physics, computational mathematics, problem analysis, theories of risk assessment and decision making. The principles of the theory of computer modeling systems were used to build a software tool for computer implementation of a system mathematical model.

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.

Within the limits of the offered direction and using the formulated principles of increase of the efficiency of process of definition of a safe work of technogenic object under conditions of disturbance of its air on the basis of the developed mathematical models and methods the following scientific and practical results are obtained, which have significant advantages in comparison with the available solutions, the conclusions are formulated, which are as follows.

An analysis of the current state of theory and practice of modeling the processes of perturbation of the surface layer of atmospheric air of man-made objects, which occurs under conditions of accidental (or controlled) release of gaseous impurities, and its impact on the environment, has been made. Based on it, the scientific-applied problem, purpose and tasks of the dissertation research are revealed, the system concept and approaches to the solution of the set tasks are formed, which allowed to formalize the processes of modeling, analysis and forecast of air condition of technogenic objects under the influence of chemical components. pressure and thermal disturbances and the search for rational structures of protective structures to eliminate or mitigate these negative effects.

For the first time, 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. The release of compressed hydrogen from the high-pressure storage cylinder at the hydrogen refueling station of vehicles with the formation of a hydrogen-air mixture is investigated using the software which is a computer implementation of the models. Based on the model of "chemical" explosion, baric and thermal perturbation of air in the region of flammability of the hydrogen cloud is obtained. A deterministic analysis of the excess parameters of the mixture at control points near the structures of the surrounding buildings depending on the distance of the mutual location of the gas station and buildings is provided. The effectiveness of the use of various means of environmental protection from the effects of the baric effects of the explosion wave has been studied. The search for a rational design of the protection facilities of the gas station personnel is also carried out by means of a comparative analysis of the efficiency of the structures from the point of view of mitigation of shock-impulse load on a person at the workplace location. A numerical analysis of the consequences of the hydrogen explosion in the mine tunnel is also

performed using the model. The fields of probability of human impact by the blast wave and the influence caused on them by the cross-section shape of the mine tunnel, the nature of the calculation space (open or closed) and the cluttering of the tunnel by the battery electric locomotive are obtained.

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. The distributions of chemical-component, pressure and temperature perturbation of air during deflagration combustion of hydrogen-air mixture after hydrogen release due to the destruction of the high-pressure storage cylinder in the garage are obtained. Guidelines have been developed to mitigate the potential effects on humans and garage structures. The main conditions for the transition of the combustion regime to the detonation of hydrogen-oxygen and methane-oxygen mixtures in the detonation tube are revealed.

A model of the motion of a chemically reactive gas mixture with complex boundary conditions has been developed, which, in contrast to the existing ones, 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. The pressure and temperature distributions after the emergency explosion of methane-air mixture in the mine tunnel are obtained. A significant increase in pressure and thermal perturbation of air in the presence of coal dust is revealed. It is recommended to use a curtain of dispersed drops of water as a protective mean to mitigate the effects of the explosion. Evaporation and resistance of droplets during combustion according to the simulation results reduces the excess parameters of the gas mixture in the tunnel to safe values.

A model of gas impurity entering the actual region has been developed, in which, in contrast to the known ones, nonlocal boundary conditions on the surfaces of holes of arbitrary shape are used. Distributions of chemical-component perturbation of air around the railway station due to evaporation from the surface of the spot of emergency spillage of liquefied hydrogen cyanide after the destruction of the transport tank. Areas of toxic damage to station personnel, the impact of the shape of the spill spot, wind speed and space clutter by the station building on the scale of the accident consequences. Using the model, the processes of ventilation of a garage with emergency leakage of hydrogen fuel are studied, the most efficient mode of operation of a standard exhaust fan is recommended, and a rational scheme of fan placement in terms of possible consequences of pressure and temperature disturbance of garage air due to hydrogen-air mixture explosion. Based on the developed model, the assessment of the consequences of environmental pollution during the emergency jet leakage of chlorine from the pipeline was carried out. The growing influence of chlorine concentration in the jet on the growth of toxic poisoning of the population and staff of the facility has been revealed. Based on the model, the distributions of thermal perturbation of the air of the working tunnel of the freezer with multi-jet nitrogen streams are obtained. Recommendations for the mode of operation of the injectors and the speed of affected objects movement in the tunnel for efficient cooling.

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. In contrast to the original, the scheme considers the interaction of two gas-air mixtures of different mass concentrations of impurities. An adiabatic process with an average adiabatic coefficient is assumed. This makes it possible to use the original discontinuity dependencies to obtain fluxes of mass, momentum and energy of the mixture, due to its break-up, to calculate the integral storage laws on the faces of the calculation cells to implement a general integral-interpolation equations of gas-air mixture movement through the computational space. An analysis of the parameters of the air flow state of technogenic objects which are disturbed due to the release of the gas phase admixtures. This made it possible to implement such disturbance scenarios as baric and thermal, due to explosion or thermal radiation.

The method of modeling of conjugate heat exchange of gas mixture and solids in the

calculation space is improved. The method uses the solution of the conjugate heat transfer problem with coupling conditions in the form of boundary conditions of the third kind, based on the general integral-interpolation computational method of end-to-end calculation to obtain time-spatial temperature distributions in the thermal perturbation zone. The temperature fields in the heat treatment chamber with a solid body in the calculated space are obtained. The dependence of the heat transfer rate from the material and the cross-sectional shape of the object of thermal influence is revealed.

The method of probit analysis of the consequences of the impact has been improved. In contrast to the existing one, in the method the tabular dependence of the conditional damage probability on the probit function is replaced by a piecewise cubic spline. This provides an opportunity to automate the calculation of the damage probability, to integrate it into the overall method and to monitor the spatial distributions of the damage probability. The use of the method provides a reduction of time complexity of the developed method for forecasting the effects of man-made emissions on the environment and finding effective means of its protection.

The method of building a software for computer implementation of a system model of decision making support based on the proposed mathematical models, methods of analysis and forecasting of the air environment of industrial objects in conditions of the formation of environmental impact factors on the basis of the developed algorithm of parallel organization of the computational process is provided. This increases the efficiency of the search for rational designs of environmental protection.

The practical significance of the obtained results is that the proposed models and methodology construct a scientific and methodological basis for the development of methods, techniques and software for analysis and forecasting of the air environment of industrial objects in the conditions of formation of environmental impact factors and search for rational protective structures which can eliminate or mitigate the negative effects. All developed models, methods and software for their computer implementation are brought to the level of engineering techniques, the high efficiency of which is justified theoretically and confirmed in practice. Scientific principles, basic inferences, recommendations and computational results, which are obtained, substantiated and proposed by the author in the dissertation research, have been confirmed by their introduction at some enterprises and in the educational process.

The reliability of the developed models, methods, computer means of their implementation are confirmed by validation and verification using statistical indicators of efficiency of mathematical models on the basis of comparison with the results of available experimental and computational researches.

The practical use of the constructed mathematical models and computational means of their computer implementation makes it possible to significantly reduce material and time costs when analyzing and forecasting the risks of accidental emissions of explosive and toxic gaseous impurities at technogenic facilities where they are stored or used, and develop recommendations which can help to eliminate or mitigate the negative consequences.

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

### СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА 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. Науковий вісник будівництва: Зб. наук. пр. 2001. Вип. 14. С. 258–262. (Особистий внесок: моделювання викиду газової домішки у повітря приміщення і розсіювання їх під впливом природньої вентиляції)

3. Скоб Ю. А. Математическое моделирование выброса и рассеяния в атмосфере газообразных примесей. Вісник Харк. нац. ун-та. Серія: Математичне моделювання. Інформаційні технологіі. 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. Системи обробки інформації: зб. наук. праць Харк. ун-ту повітряних сил імені Івана Кожедуба. 2008. Вип. 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. Вісник Харк. нац. ун-та. Серія: Математичне моделювання. Інформаційні технологіі. Автоматизовані системи управління. 2009. № 863. Вып. 12. С. 218–236.

11. Корытченко К. В., Вамболь С. А., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л., Назаренко А. А. Моделирование области обрыва ЛГМ, формируемой при взрыве фитоценозе. Проблемы топливовоздушных зарядов В лесном 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 технологіі. 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. *Авиационнокосмическая 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 газовоздушной 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 залізн. транспорту.* 2018. № 3(75). С. 52–66. DOI: https://doi.org/10.15802/ stp2018/133637 (*PIHЦ*) (Особистий внесок: модель потрапляння газової домішки в атмосферу внаслідок випаровування зрідженого газу з плями полиття)

25. Korytchehko 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 паралельної 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 threedimensional 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 внурішньому каналі і інтегро-інтерполяційний метод наскрізного розрахунку)

29. Вамболь C. A., Скоб Ю. А., Нечипорук H. B., Трухмаев O. A. безопасностью Моделирование системы управления экологической 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. (РІНЦ) (Особистий внесок: модель вибуху газоповітряної суміші за присутності дисперсних часток)

30. Skob Y., Ugryumov M. and Granovskiy 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 загромадження 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 р. (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. Пожежна 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)

Угрюмов 35. Грановский Э. А., Лыфарь B. A., Скоб Ю. А., М. Л., Коробчинский К. П. Компьютерное моделирование последствий взрыва газовоздушной 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-Харьків, 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-Харьків, 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 І 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 І міжнар. наук.-практ. конф. IT-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)

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 X 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 р. (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)

# **3MICT**

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ	. 35
ВСТУП	. 36
РОЗДІЛ 1 СИСТЕМНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОМИСЛОВИХ ГАЗОПОДІБНИХ	
ВИКИДІВ НА ОСНОВІ СУЧАСНИХ ПІДХОДІВ ІНФОРМАЦІЙНИХ	
ТЕХНОЛОГІЙ	. 51
1.1 Системний аналіз фізичних процесів у приземному шарі атмосфери, які є	
наслідком виробничої діяльності людини	. 52
1.2 Огляд наявних математичних моделей руху газових сумішей	. 57
1.3 Аналітичний огляд обчислювальних методів газової динаміки	. 72
1.4 Постановка завдання дослідження	. 73
1.5 Основні положення системної методології оцінювання стану повітря	
техногенного об'єкту в умовах збурення	. 76
Висновки до розділу 1	. 79
РОЗДІЛ 2 РОЗРОБКА СИСТЕМНОЇ МЕТОДОЛОГІЇ ІНЖЕНЕРНОГО АНАЛІЗУ	
ПРОЦЕСІВ ПРОМИСЛОВИХ ГАЗОПОДІБНИХ ВИКИДІВ	. 82
2.1 Тривимірна нестаціонарна математична модель руху суміші в багатозв'язаном	ſy
просторі з урахуванням хімічної взаємодії, розпилення крапель рідини (часток пи.	лу
твердих фракцій)	. 83
2.1.1 Тривимірна математична модель руху багатокомпонентної суміші	. 83
2.2 Тривимірна математична модель миттєвого вивільнення стисненої	
газоповітряної суміші (фізічний вибух)	. 87
2.2.1 Тривимірна математична модель миттєвого вибуху газоповітряної суміші	
(хімічний вибух)	. 88
2.2.2 Моделювання процесу дефлаграційного горіння газоподібної домішки у	
атмосфері	. 92
2.2.2.1 Загальна постановка задачі горіння суміші газів	. 92
2.2.2.2 Математична модель горіння суміші газів	. 93

2.2.3 Моделювання присутності крапель рідини (часток пилу) під час вибуху
газоповітряної суміші
2.2.3.1 Урахування розпилення крапель рідини (твердих часток пилу)
2.2.3.2 Урахування впливу аеродинамічного опору крапель рідини (часток
вугільного пилу) на течію газоповітряної суміші
2.2.3.3 Урахування впливу тепловиділення внаслідок кипіння (горіння) дисперсних
часток на течію газоповітряної суміші
2.3 Тривимірна математична випаровування з плями пролиття
2.3.1 Постановка задачі розсіювання токсичної речовини з плями пролиття 101
2.3.2 Моделювання випаровування з плями пролиття 102
2.3.3 Узагальнене розв'язання задачі розпаду розриву 104
2.3.4 Інтерполяція функції інтенсивності випаровування 110
2.4 Обчислювальна технологія врахування вентиляції під час розрахунку руху
газової суміші у приміщенні 112
2.4.1 Постановка задачі моделювання руху газу крізь вентиляційний отвір 115
2.4.2 Метод дискретизації поверхонь вентиляційних отворів 116
2.5 Математичне моделювання струминного витікання суміші із заданою
концентраціїю домішки 118
2.6 Тривимірна математична модель нестаціонарного процесу спряженого те
плообміну між газом і твердим тілом 119
2.7 Метод представлення розрахункової області 122
2.8 Постановка граничних і початкових умов 122
2.9 Методи оцінки наслідків впливів, спричинених факторами ураження
техногенних аварій 124
2.9.1 Негативні фактори впливу під час техногенних аварій 124
2.9.2 Детермінована оцінка наслідків впливу негативних факторів 127
2.9.3 Ймовірнісна оцінка впливу фактора негативного впливу 127
Висновки до розділу 2

РОЗДІЛ З РОЗРОБКА СТРУКТУРИ ПРОГРАМНОГО ЗАСОБУ КОМП'ЮТЕРНОЇ
РЕАЛІЗАЦІЇ МОДЕЛІ ІНЖЕНЕРНОГО АНАЛІЗУ ПРОЦЕСІВ ВИКИДУ,
РОЗСІЮВАННЯ І ВИБУХУ ГАЗОПОДІБНИХ ДОМІШОК В АТМОСФЕРІ 133
3.1 Узагальнений алгоритм системного моделювання руху сумішей, з урахуванням
тепломасообміну
3.2 Технологія розробки САЕ-системи
3.2.1 Проектування комп'ютерної системи засобами IDEF методології 138
3.2.2 Проектування комп'ютерної системи засобами «Rational Rose» 140
3.2.3 Побудова діаграми варіантів використання 143
3.2.4 Побудова діаграми діяльності 145
3.2.5 Побудова діаграми класів системи 145
3.2.6 Вибір мови програмування 149
3.3 Організація паралельних обчислень нестаціонарних задач газової динаміки 152
3.3.1 Аналіз технологій розпаралелення розрахунку 153
3.3.2 Особливості математичної моделі руху суміші газів стосовно паралелізації
розрахунку
3.3.3 Алгоритм паралельного розрахунку 156
3.3.4 Апробація розробленої технології паралельного розрахунку 158
Висновки до розділу 3 160
РОЗДІЛ 4 АНАЛІЗ ОСОБЛИВОСТЕЙ ПРОЦЕСІВ ВИКИДУ І ПОШИРЕННЮ
ГАЗОПОДІБНИХ СУМІШЕЙ У ВІДКРИТОМУ ПРОСТОРІ ЗІ СКЛАДНИМ
РЕЛЬЄФОМ МІСЦЕВОСТІ
4.1 Верифікація і валідація математичної моделі тепломасопереносу під час руху
багатокомпонентної суміші162
4.1.1 Методи верифікації і валідації математичних моделей 162
4.1.2 Статистичні показники ефективності математичних моделей 163
4.1.3 Чисельне моделювання процесу дефлаграції газової домішки в атмосфері 164
4.1.4 Моделювання випаровування з поверхні пролиття зрідженого газу 168
4.1.4.1 Моделювання випаровування пролиття зрідженого пропана 168

4 1 4 2 Моледювання видаровування продиття зрідженого водню 170
4.1.5 Donuchiroutig Notonotytuuloi Notoni puttonopytonulg thoututta opitykoulopo
4.1.5 Берифікація математичної моделі випаровування пролиття зрідженого
токсичного газу 1/3
4.1.6 Моделювання теплообміну у суцільних «твердих» тілах 176
4.1.6.1 Тестова задача теплообміну за схемою 1 176
4.1.6.2 Тестова задача теплообміну за схемою 2 178
4.1.6.3 Тестова задача теплообміну за схемою 3 180
4.1.7 Чисельне моделювання процесів теплообміну у твердих тілах складної
геометричної форми
4.1.7.1 Розрахунок теплопереносу у твердих об'єктах простих форм 184
4.1.7.2 Розрахунок теплопереносу у тілах з порожнинами 185
4.1.7.3 Розрахунок теплопереносу у тілах складних форм 186
4.1.8 Охолодження твердих тіл потоком теплопровідного газу 187
4.2 Чисельне моделювання процесу струминного витікання газової домішки в
атмосферу189
4.3 Чисельне моделювання процесу миттєвого вибуху газоподібної домішки в
атмосфері 195
4.4 Чисельне моделювання дефлаграційного горіння водню у гаражному приміщенні
4.4.1 Визначальні геометричні параметри розрахункової області 197
4.4.2 Сценарії розвитку водневої пожежі 198
4.4.3 Результати моделювання водневої пожежі у приміщенні 198
4.5 Чисельне моделювання процесу переходу дефлаграційного горіння газоподібної
домішки у детонацію
4.5.1 Актуальність проблеми переходу дефлаграції у детонацію 205
4.5.2 Загальна постановка задачі горіння суміші у детонаційній трубі 206
4.5.3 Математична модель горіння суміші у трубі 207
4.5.4 Метод чисельного розв'язання
4.5.5 Результати моделювання газофазной детонації у трубі

4.6 Чисельне моделювання впливу водяної завіси на вибух суміші метану і	
вугільного пилу в шахті	1
Висновки до розділу 4	4
РОЗДІЛ 5 АНАЛІЗ І ПРОГНОЗ ФІЗИЧНИХ ПОЛІВ ПАРАМЕТРІВ ПОТОКУ В	
ПРОЦЕСІ ВЕНТИЛЯЦІЇ ПРИМІЩЕНЬ	8
5.1 Аналіз розподілу концентрації домішки під час вентиляції боксу 21	8
5.2 Дослідження ефективності осьового вентилятора під час вентиляції приміщення	
	0
5.2.1 Характеристики мережі і вентилятора 22	1
5.2.2 Геометричні параметри решіток профілів 22	2
5.2.3 Газодинамічні параметри потоку в осьовому вентиляторі 22	2
5.2.4 Аналіз ефективності роботи осьового вентилятора 22	3
5.3 Аналіз ефективності схеми розміщення вентиляційної витяжки у гаражі 22	6
5.4 Детермінований аналіз схем множинної вентиляції у гаражі 23	2
Висновки до розділу 5	4
РОЗДІЛ 6 АНАЛІЗ І ПРОГНОЗУВАННЯ ПОЛІВ ФІЗИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ	
ПОТОКУ У КАМЕРАХ ТЕРМООБРОБКИ	6
6.1 Чисельне моделювання процесів теплової обробки в термокамерах	6
Висновки до розділу 6	9
РОЗДІЛ 7 АНАЛІЗ І ПРОГНОЗ БЕЗПЕКИ ПІД ЧАС ТЕХНОГЕННИХ АВАРІЙ 24	1
7.1 Чисельний аналіз ймовірності ураження персоналу отруйними хімічними	
речовинами	1
7.1.1 Математичне моделювання наслідків випаровування аварійного пролиття	
токсичних речовин на залізничному транспорті 24	2
7.1.1.1 Вплив загромадження простору на наслідки випаровування аварійного	
пролиття токсичних речовин	2
7.1.1.2 Вплив форми плями аварійного пролиття токсичних речовин на наслідки	
випаровування у повітря	6

7.1.1.3 Чисельна оцінка впливу швидкості вітру на наслідки випаровування пролитої
токсичної речовини
7.1.1 Чисельне моделювання струминного витікання в атмосферу газоповітряної
суміші різної концентрації домішок
7.2 Чисельна оцінка впливу вибуху водню на споруди довколишньої забудівлі 260
7.2.1 Постановка задачі вибуху водню на заправній станції
7.2.2 Вибух хмари водню на заправної станції
7.3 Детермінована чисельна оцінка ефективності пристроїв зниження надлишкового
тиску під час вибуху водню
7.4 Чисельний аналіз варіантів розташування захисної стіни від епіцентру вибуху
газової суміші
7.5 Ймовірнісний аналіз впливу вибухової ударної хвилі на довкілля
7.5.1 Чисельне дослідження впливу рельєфу місцевості на наслідки впливу
вибухової хвилі
7.5.2 Чисельна оцінка раціональних габаритів захисної споруди під час вибуху
водню
7.5.2.1 Розробка карти об'єктів промислового майданчика
7.5.2.2 Визначення впливу ширини стіни на стан безпеки
7.5.2.3 Визначення впливу висоти стіни на стан безпеки
7.5.2.4 Визначення співвідношення потрібних габаритів стіни
7.5.2.5 Визначення впливу стіни раціональних габаритів на стан безпеки
7.5.3 Чисельний аналіз наслідків водневого вибуху у тунелі шахти
7.6 Математичне моделювання наслідків вибуху об'ємного шлангового заряду на
рослинний покрив
7.7 Моделювання області обриву лісо-горючих материалов, що формується під час
вибуху паливо-повітряних зарядів у лісовому фітоценозі
7.8 Чисельний аналіз ймовірності ураження персоналу тепловим випромінюванням
Висновки до розділу 7

ВИСНОВКИ	
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	
ДОДАТОК А. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ Д	ИСЕРТАЦІЇ 369
ДОДАТОК Б. СХЕМА ВЕРИФІКАЦІЇ І ВАЛІДАЦІЇ МОДЕЛІ	
ДОДАТОК В. БЛОК-СХЕМА АЛГОРИТМУ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ОБ	<b>ЧИСЛЕННЯ</b>
ДОДАТОК Г. АКТИ ВПРОВАДЖЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАІ	ЦІЙНОГО
ДОСЛІДЖЕННЯ	

### ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ПША – приземний шар атмосфери;

- ФВЗ фактори впливу збурення;
- ХСЗ хімічно-складові збурення;
- БЗ баричні збурення;
- 33 захисні засоби;
- ММ математична модель;
- РМ рельєф місцевості;
- ТА техногенна аварія;
- ВМК відносна масова концентрація;
- ITД інгаляційна токсична доза;
- УІН ударно-імпульсне навантаження;
- ВУХ вибухова ударна хвиля;
- ТН термічне навантаження;
- ННВ наслідки негативного впливу;
- ПА пробіт-аналіз;
- РП розрахунковий простір;
- ВО вентиляційний отвір;
- ПГ продукти горіння;
- ПУ початкові умови;
- ГУ граничні умови;
- ГД газова домішка;
- ОШЗ об'ємний шланговий заряд;
- КТ контрольна точка;
- ШМ шлейфові моделі;
- ЩТВ щільність теплового
- випромінювання;

- ОМ обчислювальні методи;
- СТО спряжений теплообмін;
- ХРГС хімічно-реагуюча газова суміш;
- РК розрахункова комірка;
- ПФ пробіт-функція;
- ККС кусково-кубічний сплайн;
- ГПС газоповітряна суміш;
- СЗ ємності зберігання;
- ЗГ зріджений газ;
- ПП пляма пролиття;
- ОХР отруйна хімічна речовина;
- СС суцільне середовище;
- НС надзвичайні ситуації;
- ТО теплообмін;
- КМ коробкові моделі;
- IM інтегральні моделі;
- ШВ швидкість вітру;
- ДР диференційні рівняння;
- ТД турбулентна дифузія;
- IB інтенсивність випаровування;
- СВ струминне витікання;
- УХ ударна хвиля;
- ХР хвиля розрідження;
- ЛГМ лісовий горючий матеріал;

#### ВСТУП

Обґрунтування вибору дослідження. Надійне і безпечне функціонування індустріальних техногенних об'єктів (TO), 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 ТО, які супроводжуються руйнуванням інфраструктури і ураженням персоналу. Все це безумовно приводить і до неефективного функціонування аеродинамічних систем ТО. Для усунення зазначених негативних явищ потрібно розробити комплекс заходів, зокрема попередній моніторинг стану повітря ТО під час найбільш песимістичних сценаріїв розвитку аварійних викидів, інтегрування процесів аналізу, накопичення інформації про фактори впливу (ФВ) хімічно-складових, баричних та теплових збурень (ХСЗ, БЗ, ТЗ) на довкілля і прогнозу їх умовної ймовірності ураження до єдиної системи моделювання з метою пошуку раціональних конструкцій захисних засобів (33), 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 ФВ, деякі без урахування тривимірності і нестаціонарності актуальних фізичних процесів, складного характеру рельєфу місцевості РМ, не інтегровані до загального процесу прогнозу наслідків з візуальним визначенням умовної ймовірності ураження (руйнування). Тому технічна проблема зниження ризиків порушення безпечного функціонування ТО на основі аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у зоні аварійних або контрольованих викидів газових домішок і прогнозу стану повітря ТО в умовах формування ФВ 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 (ГПС) 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 збурення багатокомпонентної газової суміші на довкілля.

Складність реальних проблем, які виникають під час руху просторового збуреного повітряного потоку в умовах складного РМ, хімічної взаємодії, нестаціонарного впливу надлишкових факторів на довкілля, висувають нові вимоги до їх математичних моделей. 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 (ТА) 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 РМ, 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 і тимчасове збурення параметрів сталого стану динамічної системи, порушення її хімічного складу і, як наслідок, перехід до нестійкого стану. Найважливішим показником збурення відносна ступеня такого £ масова концентрація (ВМК) домішки – один із небезпечних параметрів багатокомпонентної газової суміші, який, у разі токсичного газу формує ФВ, що вражає людину – інгаляційну токсичну дозу (ІТД). У випадку хімічно активної домішки (ХАД) має місце вибух (детонація), який генерує такі негативні навантаження на довкілля, як ударно-імпульсне (УІН) – від вибухової ударної хвилі (ВУХ), і термічне (ТН) – під впливом теплового потоку випромінювання від полум'я. Розроблення методів оцінювання і прогнозування впливів означених небезпечних ФВ та генерація експертних рекомендацій для пом'якшення або запобігання наслідків негативного впливу (HHB) на навколишнє середовище ґрунтуються на двох головних напрямах: 1) експериментальних і теоретичних методах молекулярної фізики газових сумішей; 2) феноменологічному підході нестаціонарної газової динаміки на основі моделі суцільного середовища (СС), 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 ННВ негативних факторів на довкілля. Традиційно в інженерній практиці використовують детермінований підхід, коли отримані розрахункові точкові значення ФВ (ударно-імпульсного, токсичного і термічного) «вручну» порівнюються з табличними нормативними діапазонами для окремих ступенів ураження, або експертом обраховуються локальні значення умовної 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 ТО наявності просторових розподілів умовної 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 нестаціонарних математичних моделей більш високої точності з вбудованими підмоделями ймовірнісної оцінки впливу збуреного потоку багатокомпонентної газової суміші на довкілля.

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 РМ є окремим випадком 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 пробітаналізу (ПА) у кожній точці розрахункового простору (РП). Ці нестаціонарні, просторові задачі є, зазвичай, великої розмірності і дуже інформаційноресурсномісткі, а обчислювальні методи ОМ 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 ТО 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 ТО для забезпечення вимог безпеки, – *з іншого боку*.

Зважаючи на це, у дисертаційній роботі вирішується актуальна науковоприкладна проблема розроблення математичних моделей, методології та комп'ютерних засобів для аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у приземному шарі атмосфери і прогнозу стану повітряного середовища ТО в умовах формування ФВ збурень на довкілля і пошуку раціональних конструкцій ЗЗ для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу.

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

– основний вплив на перенесення компонентів домішок здійснюється завдяки конвективному масообміну, що забезпечує можливість для опису руху багатокомпонентної газової суміші використовувати модель нев'язкої течії – усічену систему рівнянь, так звану систему рівнянь 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 бруттовзаємодії пального та окиснювача (кисню повітря). Результатом такої реакції є поява третьої компоненти продуктів горіння (ПГ).

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Тематика дисертаційної роботи пов'язана з науковими дослідженнями, які проводилися протягом періоду з 1990 р. по 2020 р. в 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 тем: Д305-35/00 «Теоретичні держбюджетних засади об'ємного рамках 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); Д304-8/06 «Розробка методів інформаційних технологій підтримки прийняття рішень для проектування елементів аерокосмічних систем», розділ 2 «Чисельна оцінка наслідків вибуху водню в атмосфері» (№ДР 0106U001036); Д303-26/2009 «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); «Методологія Д303-21/2011-ф проектування елементів інформаційнота 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); Д303-15/2015-П «Методологія удосконалення промислових паливноенергетичних комплексів і авіаційних двигунів з використанням інформаційновимірювальних 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 i складним ландшафтом 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 програмних засобів комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень для аналізу руху багатокомпонентної газової суміші у приземному шарі атмосфери і прогнозу стану повітряного середовища ТО в умовах формування факторів впливу збурень 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 приземному шарі атмосфери і прогнозу стану повітряного середовища ТО в умовах формування ФП збурень на довкілля і забезпечення ефективної роботи аеродинамічних промислових систем;

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

 розробити нестаціонарні математичні моделі розподілу тиску з використанням нелокальних початкових умов (ПУ) для моделювання наступних сценаріїв БЗ повітря, як швидкоплинні процеси вивільнення стисненого газу та хімічної реакції в області займистості;

4) розробити нестаціонарні математичні моделі руху хімічно-реагуючої газової суміші (ХРГС) зі складними граничними умовами (ГУ) для моделювання дефлаграційного горіння, детонації та урахування присутності часток вугільного пилу і дисперсних крапель води у суміші;

5) розробити нестаціонарні математичні моделі потрапляння (відбору) газової домішки (ГД) в актуальну область крізь отвори довільної форми для моделювання таких сценаріїв ХСЗ повітря, як випаровування рідини з плями пролиття, потік суміші у вентиляційному отворі (ВО) та струминне витікання (СВ) змінної інтенсивності суміші певної ВМК;

6) розробити системну методологію оцінювання змінних стану повітря, яка на основі отриманих в результаті моделювання нестаціонарних просторових

розподілів таких факторів впливу, як ІТД небезпечної хімічної речовини, УІН у фронті ВУХ та щільність теплового випромінювання (ЩТВ);

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 суміші у РП;

8) розробити метод моделювання спряженого теплообміну (СТО) газової суміші і твердих тіл в РП 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 ПА наслідків впливу збурення змінних стану повітря для автоматизації обчислення умовної ймовірності ураження, інтегрування його у загальний метод і здійснювання моніторингу просторових розподілів умовної ймовірності ураження;

10) побудувати програмний засіб комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень на основі запропонованих математичних моделей, методів аналізу і прогнозу стану повітряного середовища ТО в умовах формування ФВЗ на довкілля з використанням технології паралельної організації обчислювального процесу.

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

**Предметом дослідження** є тривимірні математичні моделі та ОМ аналізу процесів формування і руху багатокомпонентної газової суміші у повітряному середовищі ТО в умовах формування ФВЗ на довкілля.

Методи дослідження. Теоретичною основою роботи є методи математичного

моделювання, ОМ математичної фізики, обчислювальної математики, ПА, теорій оцінки ризиків і прийняття рішень. Для побудови програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі підтримки прийняття рішень використовувалися принципи теорії комп'ютерних систем моделювання.

## Наукова новизна одержаних результатів.

На основі проведених теоретичних 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 ГПС у розрахунковому просторі ТО, що відрізняється від існуючих рішень більш повним відображенням процесів тепломасопереносу, розробкою ефективних ОМ, призначених для розв'язання нестаціонарних початково-крайових і нелокальних задач, на основі сучасних технічних і інформаційних засобів.

У межах запропонованого напрямку на підставі сформованих принципів підвищення ефективності процесу визначення безпекового стану ТО 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 тривимірних математичних моделей у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними ГУ, 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:

– нестаціонарні математичні моделі розподілу тиску, які, на відміну від наявних використовують нелокальні ПУ, що забезпечує можливість моделювати такі сценарії БЗ повітря, як «фізичний» вибух (вивільнення стисненого газу) і «хімічний» вибух (миттєва хімічна реакція брутто в області займистості) для оцінювання ННВ хвилі тиску на довкілля та ефективність ЗЗ від її дії;

– нестаціонарні математичні моделі руху ХРГС зі складними ГУ, які, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовують розрахункову схему брутто-взаємодії пального та кисню повітря, що дає змогу моделювати дефлаграційне горіння та детонацію з метою оцінювання ННВ баричного та теплового збурення на довкілля та ефективність 33 від їх дії;

– нестаціонарні математичні моделі руху ХРГС зі складними ГУ, які, на відміну від наявних ураховують присутності 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 33 довкілля;

– нестаціонарні математичні моделі потрапляння (відбору) ГД в актуальну область, в яких, на відміну від відомих, використовуються нелокальні ГУ на поверхнях отворів довільної форми, що дає змогу моделювати такі сценарії ХСЗ, як випаровування рідини з плями пролиття, потік суміші у ВО та СВ змінної інтенсивності суміші певної ВМК.

Удосконалено системну методологію оцінювання змінних стану повітря, яка, на відміну від наявних, на основі отриманих в результаті моделювання нестаціонарних просторових розподілів таких ФП, як ІТД небезпечної хімічної речовини, УІН у фронті ВУХ та ЩТВ, дає змогу оцінити ННВ та прийняти рішення щодо ефективності 33 довкілля:

– метод розв'язання задачі розпаду довільного розриву параметрів газу С. К. Годунова, яка, на відміну від оригінальної схеми, розглядає взаємодію двох ГПС різної ВМК 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 (РК) для реалізації загального інтегро-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку для розв'язання системи інтегральних рівнянь руху суміші розрахунковим простором;

- метод моделювання СТО газової суміші і твердих тіл у РП, який використовує розв'язання зв'язаної задачі теплообміну (ТО) з умовами сполучення у вигляді ΓУ III основі загального інтегро-інтерполяційного роду, на наскрізного обчислювального методу розрахунку для отримання часовопросторових розподілів температури у зоні термічного збурення;

– метод ПА наслідків впливу, у якому, на відміну від наявного, табличну залежність умовної ймовірності ураження від пробіт-функції (ПФ) замінено кусково-кубічним сплайном (ККС), що забезпечує можливість автоматизувати обчислення умовної ймовірності ураження, інтегрувати його у загальний метод і здійснювати моніторинг просторових розподілів умовної ймовірності ураження, що підвищило ефективність діагностики стану ТО та пошуку ефективних 33 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 ТО в умовах формування ФВЗ на довкілля з використанням технології паралельної організації обчислювального процесу, що забезпечує підвищення ефективності пошуку раціональних конструкцій 33 довкілля.

**Практичне значення одержаних результатів** полягає у тому, що запропоновані моделі та методологія є науково-методичною основою для розробки методів, методик та інструментальних засобів прикладної інформаційної технології аналізу і прогнозу стану повітряного середовища ТО в умовах формування ФВЗ на довкілля і пошуку раціональних конструкцій ЗЗ для усунення або пом'якшення наслідків цього впливу. Усі розроблені математичні моделі, методи та програмні засоби 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 (Додаток Г).

На підприємстві ТОВ «Науковий центр вивчення ризиків «РІЗІКОН» математичні моделі руху ХРГС 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 програмних застосунків дозволило під час проектної стадії автоматизувати обчислювальний процес попередньої оцінки індивідуального ризику для об'єктів, які зберігають, використовують у технологічному процесі або транспортують вибухонебезпечні речовини, і оптимізувати структуру необхідних захисних споруд щодо відповідності безпекового стану ТО, який проектується, до прийнятного значення (акт впровадження від 24.02.20).

Результати дисертаційних досліджень 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, з них: 27 статей у наукових виданнях України [1-27] (з них 25 у наукових фахових виданнях України [1-25], з яких 1 стаття проіндексована у міжнародній 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 проіндексовані у міжнародній науко-метричній базі 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 яких 1 стаття проіндексована у міжнародній науко-метричній 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 публікаціях, які було написано у співавторстві, автору належать наступні результати: сформульовано математичну модель внутрішнього руху газу, яку структуровано на основну модель адиабатичнеого ідеального ядра і підмодель в'язкості, яка враховується уведенням додаткових витокових членів у рівняння збереження маси, імпульса і енергії основного потоку [28, 67]; моделювання викиду ГД у повітря приміщення і розсіювання іх під впливом природньої [1] і механічної вентиляції [17, 19]; моделювання керованого витоку криогенного газу у швидкоморозильній камері [3]; багатоструминного моделювання вибуху водню в атмосфері й детермінований аналіз його наслідків на відкритому майданчику [7, 66] і у лісному 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]; моделювання випарування хімічно неактивної токсичної речовини з плями проливання заданої форми та оцінка наслідків отуєння

персоналу ТО [24] і параметричний 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 шахному тунелі з метою аналізу впливу на наслідки дії ВУХ на персонал, форми тунелю і загромадження простору електровозом [31].

Апробація результатів дисертації. Основні положення й висновки доповідалися 34 наукових конференціях, серед яких: 21<sup>st</sup> International Congress of Theoretical and Applied Mechanics (Warszawa, Poland, 2004); Тематичному семінарі «Об опыте декларирования промышленной безопасности. Оценка риска аварий на опасных производственных объектах» (Москва, РФ, 2005); 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); міжнародній науково-практичній конференції «Проблеми створення та забезпечення життєвого циклу авіаційної техніки» (м. Харків, 2007); 21<sup>st</sup> 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); 1<sup>st</sup>-4<sup>th</sup>, 7<sup>th</sup>, 8<sup>th</sup> Міжнародні конференції з безпеки водню ICHS (Pisa, Italy, 2005; San Sebastian, Spain, 2007; Ajaccio-Corsica, France, 2009; San Francisco-California, USA, 2011; Hamburg, Germany, 2017; Adelaide, Australia, 2019); І міжнародній науково-практичній конференції молодих вчених і фахівців «Інноваційні шляхи модернізації базових галузей промисловості, енерго- і ресурсозбереження, охорона навколишнього середовища» (м. Харків, 2012); 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 науковопрактичних 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); всеукраїнських науково-технічних конференціях «Інтегровані комп'ютерні технології в машинобудуванні» (м. Харків, 2016, 2018); І і ІІ міжнародних науковопрактичних конференціїях 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 науковопрактичній 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.

## РОЗДІЛ 1 СИСТЕМНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ПРОМИСЛОВИХ ГАЗОПОДІБНИХ ВИКИДІВ НА ОСНОВІ СУЧАСНИХ ПІДХОДІВ ІНФОРМАЦІЙНИХ ТЕХНОЛОГІЙ

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 ГД і основні параметри збуреної ГПС, котрі формують негативні для людини та інфраструктурних конструкцій токсичне, ударно-імпульсне і теплове навантаження і їх наслідки на довкілля.

Здійснено аналітичний огляд, критичний аналіз і класифікацію існуючих підходів розв'язання проблеми математичного моделювання утворення і руху багатокомпонентних газових сумішей з урахуванням хімічної взаємодії компонентів, ТД і складної форми актуального простору. Розглянуто обчислювальні методи газової динаміки для розв'язання виникаючих задач тепломасообміну. Класифіковано основні підходи числової оцінки наслідків впливу виникаючих факторів впливу параметрично збуреного газового середовища на людину і довкілля в зоні навколо епіцентру збурення. Розроблено постановку задачі дослідження.

Наведено удосконаленої основні положення системної методології оцінювання змінних стану збуреного повітря техногенного об'єкту, яка на основі отриманих за результатами моделювання нестаціонарних просторових розподілів таких факторів впливу, як інгаляційна 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. Сформульовано концепцію і обрано підхід, на основі яких розв'язується основна наукова проблема дослідження, та низку наукових принципів, узгоджене використання яких буде сприяти підвищенню ефективності процесів аналізу і прогнозу стану повітря техногенного об'єкту у цілому.

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

У дослідженні розглядається найнижчий шар тропосфери, який називається атмосферним граничним шаром, де сконцентровано основні негативні наслідки промислової діяльністі людини стосовно шкідливих викідів у атмосферу. Температура у цьому шарі зменшується зі зростанням висоти до інверсійного шару, у якому температура з висотою зростає. Частину атмосферного граничного шару до інверсійного шару називають шаром змішування, і саме він зазвичай є актуальним простором більшості математичних моделей транспортування і розсіювання домішок у повітрі.

Повітря є сталою сумішшю хімічно нейтральних один до одного газів, основу якої складають азот і кисень із незначною присутністю водяної пари, аргона, вуглекислого газу та водню. Тому до повітря під час математичного моделювання можна застосовувати брутто-підхід і розглядати газову суміш як єдиний газ з молярною масою 0,029, а суміш повітря з додатковою газовою домішкою – як двохкомпонентну суміш, хімічний склад якої визначається ВМК цієї домішки. У разі хімічної взаємодії домішки з киснем повітря речовини, які утворилися у результаті реакції на додаток із залишками повітря, кисень якого прореагував, можна також розглядати як ПГ – единий газ із сталою молярною масою. Таким чином, утворюється трикомпонентна суміш, яка складається з чистого повітря, ПГ та можливими залишками надлишкової домішки, які не прореагували.

Основний потік чистого повітря у приземному шарі атмосфери можна розглядати як ядро незбуреного хімічними викидами зазвичай суттєво дозвукового сталого потоку двохкомпонентної суміші з нульовою ВМК ГД, який супроводжується звичайними для повітря фізичними процесами тепло- і масопереносу. Під час турбулентного обтікання твердих непроникнених поверхонь землі, стінок приміщень, тунелів та інших суцільних об'єктів, які знаходяться у межах актуального розрахункового простору (РП), безпосередньо біля поверхонь утворюються так звані пограничні шари, де на формування профілю швидкості потоку мають суттєвий вплив ефекти в'язкісті, яка є основною причиною турбулентного перемішування шарів повітря [3, 5]. Товщина пограничного шару є незначною у порівнянні з масштабами зон утворення і руху ГПС у приземному шарі атмосфери, тому у подальшому під час моделювання об'єкту дослідження, в'язкістю потоку можна зневажити і розглядати потік як ідеальний [28]. Сталий стан течії повітря у РП ТО, як складної системи, визначається локально незмінними у розглянутий проміжок часу кліматичними умовами і РМ, а поведінка – законами збереження маси, імпульсу і енергії однокомпонентного газового середовища.

Аварійний або контрольований викид токсичної або горючої газової домішки в атмосферу і подальше її розсіювання можна розглядати як локальне і тимчасове збурювання динамічної системи, порушення її хімічного складу і, як наслідок, перехід до нестійкого стану (рис. 1.1). Основним вихідним показником ступеня такого збурення є ВМК домішки – один із параметрів багатокомпонентної газової суміші, який є витоком формування небезпечних впливів на навколишнє середовище. У разі отруйної ГД накопичується ІТД – фактор, який негативно впливає на організм людини у зоні викиду [22, 24]. У випадку хімічно активної домішки має місце вибух (детонація) ГПС [6, 7, 18], який генерує такі негативні навантаження на довкілля, як ударно-імпульсне – від ВУХ [31], і термічне – під впливом теплового потоку випромінювання від полум'я або ПГ [12, 15, 21].

За значенням щільністі хімічної речовини домішки, яка визначає її співвідношення до щільності повітря, викиди можна класифікувати трьома великими групами: легкої (ГД підіймається угору), важкої (ГД рухається вниз) і нейтральної (пасивної) пловучості. Так важкі ГД після викиду можуть накопичуватися до небезпечної кількості у нижній частині приміщень або у заглибленнях складного РМ, у той же час легкі ГД навпаки підіймаються до стелі приміщень з утворенням суміші з повітрям небезпечної концентрації угорі.



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

Викиди ГД у повітря зазвичай можна класифікувати за способом потрапляння у приземний шар атмосфери:

– залповий викид великого об'єму ГД, наприклад, під час швидкоплинного руйнування ємності зберігання (ЄЗ) високого тиску;

 випаровування зрідженого газу (ЗГ) у повітря з плями пролиття (ПП) після втрати герметичності ЄЗ, інтенсивність якого залежить від багатьох термодинамічних параметрів як рідини, так і повітря атмосфери, та поверхні під рідиною;

– струминне неконтрольоване витікання ГД у повітря різної інтенсивності після часткової втрати герметичності ЄЗ (ємності транспортування) [23] або контрольоване витікання заданої інтенсивності під час технологічного процесу (наприклад, у камері термообробки або під час вентиляції [17]).

Після потрапляння у приземний шар атмосфери ГД утворює із набігаючим повітрям ГПС, яка рухається (транспортується) за вітром. При цьому ГД продовжує весь час розсіюватися у просторі завдяки ТД та гравітаційному ефекту для важких і легких газів. З часом газова хмара полишає актуальний простір, приводячи приземний шар атмосфери у початковий сталий і незбурений стан.

Хімічна взаємодія активної ГД зазвичай має місце, коли ВМК її знаходиться у межах займистості і співвідношення кількості кисню повітря і домішки є достатнім для протікання хімічної реакції [10]. Для вибухонебезпечних газів швидкість такої реакції дуже велика, що призводить до вибуху ГПС. Зазвичай така реакція є екзотермічною з вивільненням великої кількості енергії у вигляді тепла під час формування продуктів згоряння з високим значенням тиску. ВУХ є утотожненням БЗ газового середовища. Вона характеризується надлишковим у порівнянні з нормальним тиском і тривалістю дії фази стискання у фронті хвилі, інтегральною характеристикою якої є імпульс. ВУХ швидко розповсюджується від епіцентру вибуху, одночасно втрачаючи інтенсивність фази стискання і, таким чином, ударно-імпульсне навантаження на довкілля. У залежності від значень надлишкового тиску і імпульса вибухової хвилі людина у зоні вибуху може зазнавати баричних травм, а

споруди – руйнування різного ступеня. ПГ у свою чергу випромінюють теплову енергію у навколишнє середовище, у залежності від ЩТВ якої об'єкти впливу можуть зазнавати термічних травм різного ступеня важкості.

З іншого боку, контрольований струминний викид ГД заданої інтенстивності, наприклад, у камерах заморожування забезпечує можливість здійснювати обтікання струменем криогенного газу об'єктів впливу і, за рахунок процесів ТО і теплопровідності, надавати об'єкту необхідну (згідно технологічного процесу) температуру. Аналогічним чином працюють високотемпературні камери обробки, у яких об'єкти впливу зазнають нагрівання.

Процеси ТО мають суттєву важливість також під час початкової стадії пожежі, коли високотемпературні газові потоки ПГ обтікають суцільні тверді об'єкти у зоні пожежі, здійснюючи ТН. Нагріваючись завдяки ТО і тепловому випроміюванню, ці тіла можуть займатися, доводячи пожежу до небезпечних масштабів, тліти, виділяючи в атмосферу токсичні забруднюючі речовини. Тому важливо мати температурні поля для аналізу, щоб оптимально управляти керованими тепловими потоками або мати можливість прогнозування виникнення критичних температурних перепадів, недопустимого перевищення температури за умов неконтрольованих теплових процесів під час техногенних аварій.

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

Як сама ГД, так і її ПГ в атмосфері, можуть бути токсичними для людини, яка знаходиться у зоні розповсюдження ГПС. Природньо, що незахищена людина дихає цим хімічно-складово збуреним, забрудненим повітрям і отримує якусь кількість токсичної речовини – ІТД до легень. У залежності від шкідливості отуйної хімічної

речовини (ОХР) людина може отримати інтоксикацію організму різного ступеня.

Тому експертам з безпеки виробництва важливо мати комп'ютерні інструменти чисельної оцінки просторового розподілу ВМК ОХР, яка потрапила у повітря ПЩА і прогнозу баричного, термічного і токсичного навантаження на довкілля у зоні викиду для запобігання можливих ННВ і генерації рекомендацій до застосування споруд певної конструкції для помякшення негативних ефектів.

## 1.2 Огляд наявних математичних моделей руху газових сумішей

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



Рис. 1.2 Класифікація математичних моделей руху ГПС

Під час моделювання можна брати до уваги, наприклад, щільність

забруднюючої домішки (легкі, важкі і нейтральні гази), різновиди форми джерела витоків (точкові, одновимірні або лінійні, пласкі і об'ємні), рухливість джерела викиду (стаціонарні і мобільні), часові терміни витоку (швидкоплинні й довготривалі), висоту розташування джерела від поверхні землі (поверхневі, навколоземні і висотні), складний рельєф місцевості, присутність у просторі непроникних об'єктів загромадження, наявність хімічної взаємодії під час руху ГПС та багато інших чинників. Зазвичай, спроможності та обмеження моделі визначають її ефективність та подальше застосування в інженерній практиці.

Одним з основних класифікаційних критеріїв можна розглядати ступінь складності моделі, який органічно пов'язаний з довершеністю математичного опису нею актуальних фізичних процесів. Як зазначається у роботі Чернишева Ю. К. [84], розробка методів аналізу і прогнозу впливів небезпечних факторів, які виникають під час руху ГПС, та генерація експертних рекомендацій для пом'якшення або запобігання ННВ на довкілля грунтується на двох головних напрямках: молекулярно-кінетичному і феноменологічному. Останній розглядає нестаціонарну газову динаміку на основі припущення про суцільність газового середовища, нерівноваженої термодинаміки, хімічної кінетики і математичної фізики. Перший розглядає ГПС як динамічну систему об'єктів (молекул газових компонентів суміші), динаміка розвитку якої визначається послідовністю взаємодій об'єктів [85-88] і подальшим обчисленням шляхом статистичного усереднення імпульсів та енергії окремих часток макроскопічних параметрів ГПС, наприклад сил тиску на стінки внутрішнього каналу або супротиву потоку з боку твердого тіла перепони, які легко підраховуються додаванням імпульсів окремих молекул [84]. Головним недоліком молекулярно-кінетичного підходу у розв'язанні практичних задач є надзвичайно велика кількість молекул в РП, які розглядаються у задачах руху ГПС у приземному шарі атмосфери, що не забезпечує можливість виконати обчислення з використанням наявних електронно-обчислювальних засобів. Заміщення реальних газових молекул «модельними частками» більших розмірів у методах «крупних часток у комірках» Білоцерківського О. М. і Давидова Ю. М. [89], «часток» Хокни

Р., Иствуда Дж. [90], «молекулярної динаміки» Bird G. A. [86] або Чернишева [84] забезпечує можливість лише частково просунутися у спробі зменшити потрібні обчислювальні ресурси наявної комп'ютерної техніки, але зовсім не усувають головного недоліку молекулярно-кінетичної моделі. Тому цей напрямок можна вважати більш органічним для фундаментальних досліджень та формування бази для оцінювання адекватності методів другого напрямку для ефективного використання під час розв'язання прикладних проблем динаміки розрідженого газу у невеликих об'ємах [85, 88].

Тому подальший огляд базується на класифікаціях моделей СС, які було побудовано у дослідженнях Markiewicz [91, 92], присвячених моделюванню розповсюдження важких газів у приземному шарі атмосфери, роботах наукової групи Гунько О. Ю., Машихіної П. Б. і Пшінько А. Н. під керівництвом професора Біляєва М. М. [93, 94], спрямованих на моделювання забруднення атмосфери під час техногенних аварій з метою оцінки екологічної безпеки. Особливу увагу у роботах [95-101] приділяється чисельній оцінці наслідків такого ХСЗ повітря приземного шару атмосфери і розробці засобів пом'якшення негативних наслідків. У науководослідницькій групі під керівництвом професора Абрамова Ю. О. за участі вчених Басманова О. Є., Кривцової В. І. протягом багатьох років вивчаються проблеми хімічної взаємодії у ГПС, моделюванню баричного та термічного збурення повітря у приземному шарі атмосфери [102-105]. Поглиблену увагу проблемам математичного моделювання руху теплових потоків у суцільних тілах, які знаходяться у зоні термічного впливу, приділяють у групі вчених під науковим керівництвом професора Ляшенко В. П. [106-110]. Чисельному аналізу процесів вибуху ГПС у спорудах великої протяжності на основі математичного моделювання присвячено у роботах групи вчених на чолі з професором Налисько М. М. [111-114]

Відповідно градації ознак складності і довершеності, моделі СС розповсюдження ГД у приземному шарі атмосфери можна розподілити на чотири головні групи: 1) нескладні (прості) емпіричні моделі; 2) проміжні за складністю (середньо складні) інтегральні моделі (ІМ); 3) просунуті за складністю моделі

Лагранжа; 4) складні CFD (Computational Fluid Dynamics) моделі. Така класифікація може розглядатися як узагальнення поділу моделей, запропонованому групою MEG (Model Evaluation Group) [115] для дослідження основних промислових небезпек у Європі і розвиненому Markiewicz [91, 92] для важких газів, на увесь спектр газових домішок з різною щільністю. Класифікація MEG розглядає три основні групи моделей: феноменологічні, проміжні й тривимірні. У оглядових роботах [93, 94] існуючі моделі прогноза якості атмосфери умовно розподілені на три основні групи: емпіричні, аналітичні і числові.

Треба зазначити, що представлена класифікація є ідеалізованою у тому сенсі, що деякі математичні моделі складно чітко віднести до якоїсь категорії. До речі, існує низка пакетів прикладних комп'ютерних програм, які мають модулі з реалізацію одразу декількох моделей розсіювання газів. Тому різні модулі можуть бути віднесені до різних категорій класифікації. Також важливо відзначити такі оглядові роботи [116, 117], у яких до класифікації важких газів долучають групу модифікованих моделей розсіювання для Гаусова шлейфу ГД. То були спроби використати конвенціональні Гаусові шлейфові моделі (ШМ) (наприклад, як у методиці [118]), розроблені для пасивних домішок нейтральної плавучості, шляхом модифікації значень параметрів розсіювання відносно вертикальної координати. Наприклад, у моделі Clancey [119] Гаусове рівняння дифузії має вертикальний дифузійний параметр С<sub>у</sub> удвічі менший, ніж відповідні параметри у горизонтальних (поперековому і поздовжному) напрямах C<sub>х</sub> = C<sub>z</sub>, що не завжди відповідає експериментальним даним.

Прості емпіричні моделі, які розглядають розсіювання хмар важких газів у приземному шарі атмосфери землі, являють собою серії номограм або простих алгебраїчних співвідношень між потрібним невідомим значенням і низкою параметрів-аргументів, які впливають на забруднення приземного шару атмосфери [120, 121] і були розроблені на основі польових вимірювань, обмежених пласким РМ з трав'яним покриттям за приблизно стабільних нейтральних атмосферних умов. Вимірювані ВМК домішок осереднювалися за часом. Для отримання базових

співвідношень впливом атмосферної стабільності, шорсткістю земної поверхні та усередненням часу було знехтувано. Розглядалися миттєві й безперервні викиди домішки. Одновимірний розподіл ВМК обчислювався за умов завдання таких параметрів, як швидкість вітру (ШВ), обсяг викиду або інтенсивність витоку ГД, відносна різниця щільності домішки і повітря, гравітаційна постійна, відстань за вітром. Типовими з цієї категорії є модель B&McQ [120], яку було інтегровано до пакету програм TSCREEN і модель VDI Guidelines [122, 123] у складі пакету STOER для аварійних викидів. Модель VDI Guidelines було розвинуто з точки зору можливості обраховувати неплаский ландшафт за наявності загромадження завдяки вимірюванням на вулицях різної конфігурації [124, 125].

За даними [93] емпіричні моделі широко використовуються у вітчизняній практиці прогнозу масштабів забруднення під час аварій [126-128] і є базовими у нормативній методиці оцінки наслідків надзвичайних ситуацій (НС) на транспорті та хімічно небезпечних об'єктах [129]. У дослідженні [128] наведено основні емпіричні моделі, які застосовуються для прогнозування наслідків ТА на залізниці: визначення габаритів зон хімічного забруднення, ушкодження людини тепловою радіацією від вогняної кулі та ін. Безумовними перевагами емпіричних моделей простоту ïΧ розрахункових співвідношень, використання можна вважати мінімальної кількості вихідних даних, яких потребує прогноз, і можливість обійтися «ручними» розрахунками з використанням незначних комп'ютерних ресурсів тільки для візуалізації результатів розрахунку. Ці моделі можуть бути використані виключно до базових сценаріїв експериментальних вимірювань та не дають габаритів хмари, необхідних для кількісної оцінки ризиків [130, 131]. Як зазначається в роботі [93] емпіричні моделі не враховують вплив складного РМ, присутності в актуальному просторі непротічних об'єктів, які загромаджують потік ГПС, на процес транспортування і розсіювання ГД. Крім того вони не можуть прогнозувати динаміку розповсюдження ГД у просторі і часі, не враховують профіль ШВ, зміну значень коефіцієнтів атмосферної дифузії та інших параметрів приземного шару атмосфери. Емпіричні моделі неможливо використати для

моделювання складних тривимірних процесів викиду ГД у повітря, нестаціонарної хімічної взаємодії її з киснем повітря, побудови просторових розподілів таких небезпечних факторів, як ударно-імпульсне, токсичне і термічне навантаження на навколишнє середовище, та застосування ймовірнісного підходу для аналізу наслідків аварій.

До групи простих можна віднести і статистичні математичні моделі, сукупність яких виділяється у роботах [93, 94]. У цих моделях для встановлення зв'язку між ВМК ГД і параметрами, які впливають на фізичний процес забруднення приземного шару атмосфери і вимірялися під час спостережень, використовуються стохастичні співвідношення. Моделі ці є дуже простими у використанні і не потребують комп'ютерної підтримки, однак прив'язані тільки до умов виконаних спостережень, тому що основним припущенням під час побудови цих моделей є незмінність розташування й інтенсивності джерел забруднення за час спостережень і прогнозу [132].

ІМ другої групи згідно MEG-класифікації долучають коробкові моделі (КМ), моделі стаціонарного шлейфу, узагальнені стаціонарні ШМ та одновимірні ІМ шлейфу. Долучені до другої групи моделі мілинного шару є найбільш складними.

КМ [133-151] мають справу з описом швидкоплинних викидів у вигляді приземлених хмар і базуються на запровадженні консервативного рівняння балансу мас для актуального контрольного об'єму камери-боксу, якість повітря в якому прогнозується. Van Ulden [133] сформулював основні ідеї цього підходу, згідно якому припускалося, що хмара ГД мала форму циліндру визначеного розміру. Систему звичайних диференційних рівнянь (ДР), яка відповідала за горізонтальне розповсюдження ГД, підмішування повітря до хмари та зміну її теплового стану, було інтегровано за часом. ВМК домішки визначають як осереднену масу викиду відносно коробкового об'єму. Вихідними даними є швидкість повітря, поверхнева шорсткість і атмосферна стабільність, яка зазвичай описується класом за градацією Раsquill-Gifford (від набільш турбулентної і нестабільної до найменш турбулентної і найбільш стабільної) або довжиною Моніна-Обухова (висота, де турбулентність генерується більш ефектом пловучісті ніж зсувом вітру). ГД розсіюється у нерухомому повітрі або рухається за вітром зі швидкістю, залежною від його швидкості, у той час як горизонтальне розповсюдження, тобто радіус хмари, розраховується за допомогою гравітаційної швикості фронту, яка у свою чергу залежить від гравітаційної постіної, щільностей хмари і повітря та висоти хмари. Масообмін між хмарою і повітрям скрізь поверхні циліндру залежить від вхідних швидкостей, що визначаються емпіричними залежностями, які зазвичай включають число Ричардсона (Ri). Цей безрозмірний параметр відповідає за гравітаційний вплив і залежить від співвідношення складників пловучісті хмари і зсуву повітря, геометричного масштабу витоку (розміру хмари або витікання) та характерної турбулентної швидкості (швидкості вітру, тертя або конвекції). Розсіювання хмари під впливом різниці щільностей буде мати місце, якщо число *Ri* вийде за межі критичного значення. ТО хмари зазвичай обчислюється на контактній поверхні із землею і за рахунок розчинення у приземному шарі атмосфери. У більш просунутих КМ враховуються такі ефекти нестаціонарного ТО, як фазовий перехід або присутність водяної пари, які базуються на гомогенній рівновазі [151]. Деякі математичні моделі мали термодинамічні модулі урахування химічної взаємодії окремих хімічних речовин. Для терміну нейтральної пловучісті хмари розподіл ВМК зазвичай отримують за допомогою рівняння Гауса для викиду ГД. Більшість КМ припускають наявність плаского РМ. Тільки декілька окремих моделей розглядають розсіювання на поверхні з ухилом або з простою перепоною. КМ задовільно відповідають результатам польових і лабораторних досліджень. За висновками Markiewicz [91] емпіричний характер КМ, як і інших ІМ, має ясне фізичне пояснення. Невибагливість моделей до комп'ютерних ресурсів (і як наслідок низькі витрати) та вимог до потенціальних користувачів, простий спосіб отримання вихідних даних роблять КМ та інші ІМ моделі привабливими інструментами в інженерному застосуванні під час оцінювання впливу на довкілля та ризико-орієнтованого прогнозування НВ, планування заходів із запобігання або пом'якшення НВ [152-154]. Але головним недоліком КМ є їх нездатність до тривимірної диференціації розподілу ВМК домішки, яка є однією з вимог до математичних моделей, призначених для прогнозування аварійного забруднення приземного шару атмосфери.

Стаціонарні ШМ призначені для моделювання безперервних приземних викидів ГД [155-158]. Як зазначено в роботі [91], у основі перших математичних моделей цієї категорії лежали ті ж базові фізичні передумови, що й у КМ, за виключенням того, що інтегрування звичайних ДР проводилося уздовж напрямку вітру, і передбачалося, що форма поперекового перетину шлейфу є прямокутником, де усі параметри усереднено. Усереднене значення ВМК домішки визначається масовою інтенсивністю викиду і об'ємною інтесивністю течії у шлейфі. Вихідні метеорологічні дані є такими же, як і в КМ: ШВ на актуальній висоті, клас стабільності атмосфери, температура повітря і поверхні землі, атмосферний тиск і відносна вологість повітря. Передбачається, що РМ є пласким, а шосткість поверхні є єдиним параметром, який визначає РМ. ШВ є основою для обчислення швидкості шлейфу, або остання визначається згідно з рівнянням зберігання імпульса. Урахування основних термодинамічних ефектів, використання профіля Гауса або інших профілей подібності для ВМК, обчислення швидкостей підмішування повітря до шлейфу, гравітаційної течії для генерації горизонтального розсіювання, критерію переходу до пасивної пловучісті та практична неможливість присутності перепон для розсіювання є такі самі, як і в ранніх КМ.

В узагальнених стаціонарних ШМ [159-165] просторовий розподіл ВМК та інших параметрів у поперековому перетині відповідає узагальненим профілям, які змінюються під час руху хмари за вітром, що забезпечує безперервність обчислення навіть після транзиту важкої суміші до пасивної і не потребує окремих математичних моделей для різних режимів пловучісті. Модель HAGADAS (розсіювання важкого газу з поверхневого джерела) [159, 162], яка є складовою комп'ютерного пакету HGSYSTEM [161], та модель DEGADIS (розсіювання щільного газу) [163] є найбільш користованими представниками означеної модельної категорії. DEGADIS інтегровано у комп'ютерну систему ALOHA, яка у

свою чергу є складовою пакету САМЕО. Згідно з даними роботи [91], поперековий перетин шлейфу у цих математичних моделях є прямокутником, вертикальний профіль ВМК є Гаусовим, а горизонтальний поперековий є Гаусовим на краях, постійним у середині шлейфу та стає повністю Гаусовим із зникненням серединної пласкої частини. Інші математичні моделі цієї категорії мають еліптичну форму поперекового перетину, та концентраційний профіль з гладким переходом від верхнього до Гаусового уздовж шляху шлейфа. Вони здатні відтворювати термодинамічні ефекти, хімічну взаємодію та метеорологічні умови, як і кращі КМ.

Одновимірні шлейфові ІМ призначені для математичного опису безперервних наземних викидів [166-177]. Дослідження цього фізичного явища почалося з робіт Ooms [166] та групи авторів Hoot, Meroney and Peterka [167]. Markiewicz у обзорі [91] зазначає, що моделі цієї категорії базуються на законах зберігання маси, домішок, повздовжнього та поперекового за вітром імпульса та осередненої у поперековому перетині шлейфу енергії. Система цих співвідношень дає змогу обчислити усі параметри шлейфу, осереднені у поперековому його перетині. або Рівномірний, Гаусовий узагальнений профіль подібності зазвичай використовується для просторового опису змінних шлейфу у поперековому перетині шлейфу. У сталих за часом математичних моделях параметри шлейфу обчислюються уздовж траєкторії шлейфу. У нестаціонарних математичних моделях вони змінюються не тільки уздовж траєкторії але і з часом. Шлях шлейфу змінюється під впливом гравітації, сил тертя основного потоку та імпульса підмішуваного повітря [91], швидкість якого залежить від різних факторів, у тому числі й від турбулентності струменя, поперекового потоку [175] і атмосфери. Остання складова у деяких моделях не враховується, в інших виводится зі співвідношень для коефіціентів розсіювання згідно звичайного Гаусового шлейфа. Вихідні дані для моделей цієї категорії, питання щодо урахування термодинаміки та хімічної кінетики схожі з іншими інтегральними методами.

До цієї категорії можна віднести й аналітичні моделі точного розв'язання рівняння переносу домішки, які широко використовуються для моделювання точкового, лінійного і обмеженого площиною джерел викиду, серед яких виділяється модель Гауса [118, 178, 179], яка є аналітичним розв'язком рівняння транспортування пасивної ГД за умов деяких спрощень (стаціонарно діюче постійне точкове джерело або точковий миттєвий викид, незмінна за висотою ШВ та інш.). В [93] перевага Гаусової моделі – роботі відзначається загальна простота розрахункового співвідношення розповсюдження ГД у приземному шарі атмосфери, але підкреслюються і недоліки, притаманні усім аналітичним моделям: потреба корегування коефіцієнтів дисперсії, неможливість комплексного урахування під час прогнозування різної форми первинної хмари, змінність ШВ і коефіцієнтів дифузії за висотою, деформації профілю швидкості повітря, яка викликана обтіканням складного РМ.

Згідно класифікації [91] для важких газів одновимірні або двовимірні математичні моделі поврехневого (мілинного) шару зазвичай розроблялися і використовувалися для симуляції приземлених викидів [180-191] і підмурівок для розвинення цієї групи моделей заклав Zeman [180], розглянувши закони зберігання маси, імпульса і енергії суміші у вигляді ДР у часткових похідних (ЧП), причому у двовимірному випадку рівняння осереднено у напрямку глибини хмари, бо висота її є незначною. Для одновимірного випадку осереднення виконано у поперековому перетині. Масообмін між хмарою та повітрям моделюється за рахунок швидкості засмоктування. Деякі моделі, наприклад SLAM (модель мілинного шару) [185], тиск не розглядається як гідросатичний а швидкість засмоктування винаходиться із баланса кінетичної енергії турбулентності. Для моделювання гравітаційних ефектів у випадку складного РМ додаткові члени додаються до рівняння імпульса, хоча урахування присутності непроникних перепонів стикається з труднощами. Крім того математичні моделі цієї групи не призначені для ГД пасивної пловучісті та легких газів та лімітовані тільки однофазними випадками викидів. Зазвичай ці моделі мають урахування ТО із поверхнею землі і покладаються на стандартні метеорологічні дані в єдиній точці вимірювання для завдання вихідних параметрів середовища навколо хмари. Моделі доволі реалістично описують пересування хмар важких газів у просторі над пласкою поверхнею або з ухилом. Вони більш вільні від емпірики ІМ та є більш простими у застосування ніж моделі RANS (усереднені за Рейнольдсом рівняння Нав'є-Стокса), які є складовою групи моделей CFD. За часом виконання симуляції вони займають проміжне місце. За твердженнями Markiewicz [91] у математичних моделях цієї групи є потенціал використання у якості інструмента оцінювання HB, але поки не достає свідоцтв їх застосування в інженерній практиці.

Наступними за складністю є просунуті Лагранжеві моделі для траєкторії частинки і для хмари. Перші беруть свій початок з кодів для домішок пасивної пловучісті [192-199], маса яких представлена уявними частинками, а пересування та розсіювання останніх розглядається уздовж траєкторій. Шлях частинки за часовий крок обчислюється з урахуванням середньої швидкості потоку, атмосферної турбулентності та надлишку щільності. Середня ШВ зазвичай є вихідним параметром для траєкторійних моделей і обчислюється попередньо за допомогою інших метеорологічних моделей. Як зазначає Markiewicz у оглядовій роботі [91], турбулентні швидкості отримуються розв'язанням тривимірної форми рівняння Ланжевена для броунівського руху частинок. Інші характеристики турбулентного потоку (турбулентна кінетична енергія, інтенсивність її дисипації, Лагранжеві масштаби часу) також беруть з метеорологічних моделей. Для моделювання пловучісті використовують локальну зміну числа *Ri* з метою обчислення впливу різності щільностей частинок і повітря на турбулентність. У сучасних математичних моделях для надземних шлейфів ГД траєкторія частинки визначається розв'язанням системи рівнянь збереження енергії, маси і складових імпульса. Згідно з оглядом [91] майже усі сучасні Лагранжеві моделі для траєкторії частинки ураховують термодинамічні процеси, складну топографію і присутність суцільних перепонів у потоці та використовуються сумісно зі тривимірними метеорологічними моделями аналізу і прогнозу. Траєкторні Лагранжеві моделі у класифікації потрапляють десь проміж IM і RANS моделями. Як зазначає Markiewicz, вони добре послуговують на підготовчому етапі завдяки їх робастності й можливістю відносно швидко

отримування результат.

На додадок до траєкторних математичних моделей до тієї ж категорії можна долучити Лагранжеву модель розсіювання ГД різної пловучісті [200], яку було розвинуто з коду SCIPUFF, що використовувалася для газів нейтральної пловучісті. Модель бере за основу Гаусову хмару для обчислення розподілу ВМК як суму внесків комбінації хмар, може користуватися різними метеорологічними даними. модель була модифікована з метою урахування Оригінальна динамічних властивостей, які виникають завдяки активній пловучісті, та зменшення ТД у вертикальному напрямку. Недоліком моделі відсутність € урахування термодинамічних процесів.

Останньою за складністю є категорія CFD моделей [91], які розглядають тривимірну систему нестаціонарних ДР у ЧП. Рівняння є відображенням законів зберігання маси, імпульса і енергії суміші та маси ГД. Зазвичай ці математичні моделі опрацьовують усі можливі сценарії потрапляння домішки у повітря, складний характер РМ та умови довколишнього середовища, а для урахування ефектів тяжіння використовуються принципи зберігання. Усі фізичні процеси описуються детально і у повному обсязі. Зазвичай розподіл усієї категорії CFD моделей запроваджується на три базові підгрупи у залежності до форми рівнянь, які розглядаються: моделі RANS, моделі LES (симуляція великих віхорей) та моделі DNS (пряма чисельна симуляція).

Більшість кодів CFD, які здатні розглядати ГД різної пловучісті, реалізують моделі RANS [201-231], що розв'язують систему рівнянь Нав'є-Стокса для осереднених за Рейнольдсом параметрів потоку, долучаючи для замкнення системи модель турбулентності (МТ). Для розв'язання рівнянь використовують кінцеворізницеві методи, методи кінцевих елементів або методи кінцевих об'ємів. Значної уваги зазвичай потребує моделювання турбулентності. На початку розвитку моделей RANS воно базувалося на *К*-теорії замкнення, на сучасному етапі використовується k- $\varepsilon$  модель, хоча існують і інші співвідношення: k-l замкнення, k- $\omega$  модель, замкнення SST і SSG. Усі МТ потребують завдання емпіричних

коефіцієнтів. Цe стосується і підгрупи LES моделей ДЛЯ моделювання турбулентності на підсітковому рівні. Треба зауважити, що ступінь долучення емпіричних даних у моделей RANS значно менша, ніж в IM. К-теорія, яка лежить у основі усіх МТ, припускає наявність місцевої рівноваги і використовує дифузійні коефіцієнти, які визначаються локальними властивостями ГПС і навколишнього середовища і базуються на числі *Ri* [91]. Інші МТ не припускають наявність місцевої рівноваги і дозволяють утворення, переміщення і зникнення турбулентності. Markiewicz у обзорі МТ [91] зазначає, що k- $\varepsilon$  модель належить об'єднанню так званих МТ в'язкості і запроваджує дві нові змінні до системи рівнянь зберігання, kтурбулентна кінетична енергія і є – інтенсивність турбулунтної дисипації, які безпосередньо обчислюються виходячи з транспортних ДР для турбулентної i інтенсивністі зникнення кінетичної енергії турбулунтності. Причому припускається, що турбулентна в'язкість є залежною від значень цих двох параметрів. k-l модель (як і SST модель) є різновидом моделі турбулентної в'язкості, де остання є залежною від турбулентної кінетичної енергії k і масштабу довжини турбулентності *l*. Як зазначено в роботі [91] турбулентна кінетична енергія обчислюється із рівняння зберігання, однією з найважливіших складових якого є кінетична енергія дисипації. Співвідношення замикання k-w належить до моделей дисипації віхрів, у яких турбулентна в'язкість має зв'язок з турбулентними кінетичною енергією k і частотою  $\omega$ , що обчислюються з рівнянь зберігання турбулентних кінетичної енергії і частоти. Модель замикання SST розроблялася з метою виправлення недоліку моделей  $k \cdot \varepsilon$  і  $k \cdot \omega$ , які не враховують турбулентну напругу зсуву, що призводить до завищеної прогнозовості вихорової в'язкості. Для досягнення цієї мети до k- $\omega$  MT замикання додається запобіжник, який лімітує розвиток вихорової в'язкості. Markiewicz зазначає, що модель зсуву Рейнольдса базується на рівняннях пересування для усіх компонентів тензора зсуву Рейнольдса та інтенсивності дисипації. Загальна гнучкість МТ супроводжується зростанням кількості рівнянь пересування і, як наслідок, ускладненням математичних моделей, зменшенням робастності і зростанням обчислювальних витрат. Результати

використання призначених для щільних ГД моделей MERCURE-GL [209] і ADREA-НF (розсіювання важких забруднювачів у атмосфері над нерегулярною поверхнею землі) [210, 211] показали достатньо задовільні результати з відтворення концентраційних розподілів за допомогою  $k \cdot \varepsilon$  і  $k \cdot l$  моделей для розсіювання важких хмар [215]. Як зазначається у огляді [91], результати обчислень з використанням моделей замикання SSG, k- $\varepsilon$ , k- $\omega$  i SST на основі загально цільового коду CFX [228, авторами Sklavounos i Rigas у роботі [223] показали добрий збіг з 229] експериментальними даними, покращення робастності k- $\omega$  і SST моделей, у той час як SSG модель мала підвищення часу використання центрального процесора комп'ютера без будь-якого покращення у точності результатів. Моделі SSG, k-є і SST результували завищеними максимальними концентраціями, а модель k- $\omega$ навпаки занижувала їх. До перерахованих раніше RANS моделей треба додати ще низку призначених спеціально для щільних газів математичних моделей, які інтегровано у такі коди: SIGMET [201], TRANSLOCK [204], HEAVYGAS [202-203], FEM3 (модель кінцевих елементів) [205-207], MARIAH [208], MDPG (модель розсіювання важкого газу) [212], модель Pereira i Chen [213], Burman [214], моделей колективів авторів на чолі з Bayanov [219], Ohba [217], Scargiali [218]. На додачу до CFX до моделей RANS загального призначення можна віднести такі, як FLACS [219-225] і FLUENT [226, 227]. Виходячи з огляду, моделі RANS вважаються прийнятною альтернативою у намаганні досягти потрібної точності результатів розрахунку, але нераціонально витрачаючи наявні комп'ютерні ресурси. Їх можна задовільним інструментом оцінювання наслідків розглядати V перспективі техногенних аварій зі складним комплексом сценаріїв і складною топографією актуальної локальної місцевості. Однак більшість МТ не описують однаково адекватно різноманітні типи течії. Особливо це стосується течії з інтенсивними відривами потоку і / або великими градієнтами тиску і температури, що притаманно для процесів вибуху і детонації. До того ж інженерне використання моделей RANS виглядає проблематичним у зв'язку з наявністю таких недоліків, як високі вимоги до рівня експертизи користувача, значна ціна закувлі програмного продукту та великі

70

витрати на придбання потрібних комп'ютерних ресурсів.

Математичні моделі группи LES розв'язують рівняння зберігання для основного осередненого потоку і великих віхрів, вживаючи моделювання турбулентності на малих масштабах [232, 233] із залученням, наприклад, моделі замикання Smagorinsky [234]. Як зазначається в огляді [91] моделі великих віхорів доки не стали інструментом у розв'язанні практичних задач, бо великою проблемою для них залишаються високі комп'ютерні витрати, високі вимоги до підготовки вихідних даних та значна інтенсивність праці. Таким чином моделі цієї групи виглядають більш прийнятними у якості дослідницьких засобів покращення наукового розуміння актуальних фізичних процесів та забезпечення вірного напрямку для удосконалення менш вартісних комп'ютерних моделей.

Моделі групи DNS розв'язують точні рівняння Нав'є-Стокса з використанням дуже дрібних обчислювальних сіток та часових кроків без залучення турбулентних замикаючих співвідношень [235, 236], але є надзвичайно вимогливими до комп'ютерних ресурсів і є придатними для обчислень практично простих течій з малими значеннями числа *Re*. Наприклад, у роботі [235] Hattori, Houra i Nagano застосували пряме числове моделювання стабільних і нестабільних турбулентних теплових граничних шарів, а колектив авторів Luo, Lu i Liu [236] використав модель DNS для порівняння з результатами обчислень розсіювання на основі стохастичної моделі Лагранжа. Моделі групи DNS залучені до пакетів PHOENICS [236], STAR [237], FDS (симулятор динамики пожара) [238-240]. Комп'ютерні коди з DNS є надзвичайно вибагливими з технічної точки зору і рівня експертної компетентності користувача. Тому їх використання обмежено виключно дослідницьким колом задач для специфічних випадків обчислень, які зазвичай супроводжуються одночасним експериментальним дослідженням актуального фізичного процесу.

Що стосується математичного моделювання теплопереносу в актуальних задачах, які розглядаються у данній роботі, то зазвичай, дослідники нехтують теплопровідністю газового середовища [243], не розглядають нестаціонарний характер передічі теплового потоку до суцільних твердих тіл, які обтікаються газом, що не дає змогу адекватно оцінити просторовий характер термічного стану цих суцільних об'єктів і його зміну з часом під пливом навколишнього газового середовища. Це потребує від моделі здатності розв'язання спряжених задач тепло- і масопереносу.

## 1.3 Аналітичний огляд обчислювальних методів газової динаміки

Наявні аналітичні методи рішення задач теплопровідності у суцільних тілах виявляються ефективними тільки для однозв'язних тіл простої форми [303-305]. У розрахункові нестаціонарні залежності цьому випадку поля температур виражаються у вигляді експоненційних рядів, збіжність яких залежить від місця розташування контрольної точки (КТ) всередині тіла і часу з моменту початку процесу. Чисельні методи на базі сучасної обчислювальної техніки забезпечують можливість подолати проблеми і вирішувати поставлену задачу вже без застосування комплексних ієрархічних методів, таких як поетапне моделювання [305]. Ряд робіт пропонують спосіб моделювання, який базується на застосуванні кінцево-різницевого методу та методу кінцевих елементів [306], однак, як правило, розрахунки проводяться без урахування багатовимірності процесу [307] або тільки для нескінченно великих інтенсивностей теплообміну твердих тіл з навколишнім середовищем [308].

Для обчислення адиабатичного ядра потоку повітря прийнятої математичної моделі треба застосувати якийсь числовий метод нестаціонарної газової динаміки [262], до яких зазвичай відносять кінцево-різницеві [320, 321], кінцево-об'ємні [322, 323] за варіантом розбиття обчислювального простору на дискретні розрахункові комірки, явні [320, 321, 324, 325] і неявні [324, 326, 327] – за урахуванням дискретизації за часом.

Великий вплив на ефективність обчислювального методу, точність результатів обрахунку і легкість використання має вибір обчислювальної сітки, за яким алгоритми можна розділити на такі характерні угруповання [330, 333]:
– методи характеристик, які працюють на гладких областях [328, 329, 330];

 обчислювальні схеми, які побудовані на використанні у системі ейлерових координат на основі сіток, які не рухаються у просторі [331];

схеми, які задіяні у ейлерово-лагранжевих координатах [330, 332];

- схеми обчислення з використанням ейлерової сітки, яка рухається [262];

 метод часток у обчислювальних комірках [328, 330, 334], у якому використовується нерухома розрахункова сітка та зберігається інформація про шлях часток.

З огляду різноманітних методів газової динаміки для роз'вязання задачі руху багатокомпонентної газової суміші у приземному шарі атмосфери з урахуванням складного РМ і хімічною взаємодією ГД з киснем повітря найбільш придатним є явний за часом метод кінцевих об'ємів, який побудовано на основі задачі розпаду довільного розриву параметрів газу на поверхнях контакту газових сумішей у сусідніх РК [262]. Під час розрахунку стану потоку одного режима, зазвичай, використовується метод установлення [28, 67], за яким часовий крок обчислюється індивідуально для кожної РК на кожній ітерації згідно умові Фрідріхса-Куранта-Лєві стійкості алгоритму до розбалнсування. Але у задачі, що розглядається, важливо рухатися у всіх комірках одночасно (тобто з єдиним часовим кроком) для нестаціонарного відстежування поточної картини надлишкових параметрів збурення і накопичення факторів негативного впливу на довкілля з метою застосування ПА для отримання у кожну мить полів умовної ймовірності наслідків впливу збурення повітря на людину і конструкції у зоні збурення. Як зазначалося раніше, для контролю за поведінкою домішок розрахункова схема для ГПС повинна бути доповнена кінцево-об'ємним рівнянням для кожного ДР руху ГД.

#### 1.4 Постановка завдання дослідження

Таким чином, для розв'язання технічної проблеми отримання просторовочасових розподілів газотермодинамічних параметрів газової суміші у зоні хімічноскладового, баричного і теплового збурення сталого потоку повітря у приземному шарі атмосфери внаслідок неконтрольованого або підконтрольного викиду займистих (вибухонебезпечних) і токсичних ГД будемо розглядати простір техногенного об'єкту, де зберігаються, транспортуються або використовуються у технологічному процесі ці ГД. Сталий потік незбуреного повітря переходить до стану хімічно-складового збурення внаслідок потрапляння ГД до атмосфери з утворенням ГПС, яка рухається разом з основним потоком за напрямом вітру, обтікаючи на своєму шляху суцільні об'єкти інфраструктури та поверхню ландшафту. З часом збурення хімічного складу повітря у просторі техногенного об'єкту поступово зменшується, повертаючись до початкового незбуреного стану. У разі токсичної домішки, надлишковим параметром під час збурення є ВМК ГД. Якщо у зоні збурення (в якійсь точці простору, який розглядається) знаходиться людина, вона потрапляє під вплив ФВ – інгаляційної токсодози, інтегральної часової характеристики, яка є складовою, необхідною для отримання експертної оцінки негативного впливу під час застосування детермінованого підходу і вихідним значенням для отримання умовної ймовірності ураження внаслідок токсичного отруєння із застосуванням ПА. У випадку вибухонебезпечної ГД утворена під час ХСЗ ГПС може вибухнути, якщо ВМК ГД потрапляє у межі займання. У разі вибуху (швидкоплинного горіння) формується нові складові збурення: баричне і теплове. Внаслідок вибуху утворюється ВУХ, яка рухається в усі напрямки від епіцентру вибуху, стикаючись з перепонами у вигляді об'єктів інфраструктури і людьми, і поступово втрачаючи свою інтенсивність. Кожна точка руху ВУХ характеризується надлишковим тиском і часом цого впливу (тобто імпульсом). Негативними ФВ у цьому випадку є максимальний надлишковий тиск і максимальний імпульс первинної фази стискання у фронті ВУХ. Як і у випадку токсичного ураження, негативні фактори можуть слугувати для детермінованої оцінки ступеню наслідків або вихідними даними для ПА з подальшим прогнозом часово-просторового розподілу умовної ймовірності наслідків різного ступеню ураження людини і інфраструктури УІН. Якщо збурення супроводжується екзотермічною хімічною

74

реакцією, полум'я і продукти горіння є джерелом формування ще одного небезпечного параметру потоку – високої температури і, відповідно, ФВ – ЩТВ, яке діє на довкілля. Аналогічно, цей параметр може бути використаний під час детермінованого або ймовірністного аналізу і прогнозу можливих ННВ.

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

Розрахункова схема Годунова потребує завдання початкового розподілу параметрів незбуреного потоку і ГУ на поверхнях РП, землі, суцільних об'єктів інфраструктури. Спеціальних ГУ потребують поверхні ВО та випаровування з плями пролиття ЗГ. Кожна РК у разі явної схеми повинна зберігати усі геометричні характеристики сітки (координати центру, вершин, площі проекцій усіх граней, об'єм), свій стан (щільність, складові вектору швидкості, тиск і температуру суміші, масову концентрацію домішок) на попередньому часовому шарі, щоб обчислити параметри стану на новому часовому «шарі». Крім того кожна РК повинна накопичувати і визначати максимальні інтегральні характеристики впливу (надлишковий тиск та імпульс фази стискання у фронті ВУХ і ЩТВ), які у будьякий момент часу можуть бути застосовані для ПА з метою визначення ПФ визначеного ступеню впливу і, відповідно, умовної ймовірності ураження. Остання інформація є базою для оцінки ризиків функціонування ТО.

## 1.5 Основні положення системної методології оцінювання стану повітря техногенного об'єкту в умовах збурення

Наведено основні положення удосконаленої системної методології оцінювання змінних стану збуреного повітря ТО, яка на основі отриманих за результатами моделювання нестаціонарних просторових розподілів таких ФВ, як ІТД ОХР, УІН у фронті ВУХ та ЩТВ забезпечує можливість оцінити наслідки впливу та прийняти рішення щодо ефективності 33 довкілля. Структуру методології представлено на рис. 1.3.

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

Тому під час розв'язання основної наукової проблеми було прийнято за основу *концепцію структурованості*, згідно з якою процес аналізу параметрів стану повітря ТО, збуреного викидами газоподібних хімічних речовин, і прогнозу наслідків впливу збурень на довкілля з метою пошуку раціональної конструкції ЗЗ, представляється множиною паралельних або послідовних операцій, виконання яких пов'язані з матеріальними і часовими витратами.

Для удосконалення захисних споруд з метою гарантування безпечного і безперервного функціонування ТО визнано необхідними розробка і використання в інженерній практиці низки узгоджених ефективних методів розв'язання задач сформульованої міждисциплінарої проблеми. З метою її розв'язання 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 процесу аналізу і прогнозу стану повітря ТО у цілому:



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

a) 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 підібраного 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 розв'язання 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;

г) в області раціоналізації і прийняття рішення – *принцип реконструкції* (модифікації) прототипа 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 буди 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 КТ.

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 преоритету моделей і підпорядкування цьому усіх форм представлення знань, інформації та засобів їх обробки.

Згідно обраної концепції структурованості, яка базується на сформульованих принципах, розроблено системну модель аналізу стану повітря техногенного об'єкту, збуреного викидами газових домішок, і прогнозу наслідків їх впливу на довкілля. Постановкою різних початково-крайових умов до загальної моделі руху багатокомпонентної суміші багатозв'яним простором створено новий клас моделей хімічно-складового, баричного і термічного збурення повітря, які у комбінації з моделями прогнозу наслідків впливу збурення на персонал та інфраструктуру техногенного об'єкту.

За результатами узгодження методів отримання надлишкових параметрів збуреного стану повітря техногенного об'єкту та методів оцінювання наслідків впливів на довкілля, та побудови програмного засобу комп'ютерної реалізації методології, отримано інформаційну технологію, яка дає змогу здійснити пошук раціональних конструкцій захисних споруд для уникнення або помєякшення наслідків впливів.

## Висновки до розділу 1

1. За результатами аналізу комплексу фізичних процесів, що виникають у приземному шарі атмосфери внаслідок тимчасового локального збурення хімічного складу повітря за рахунок аварійного або контрольованого викиду у загальному випадку токсичних і вибухонебезпечних газових домішок, прийнято у якості припущення, що основний вплив на увесь процес руху багатокомпонентної суміші газів має конвективний обмін масою, імпульсом і енергією, ТД, хімічна кінетика горіння домішок у кисні повітря, термодинаміка за рахунок теплообміну між газовою сумішшю і суцільними об'єктами, що обтікаються, і перехідних процесів теплопровідності у матеріалі цих об'єктів, баричний, токсичний і термічний впливи ударної вибухової хвилі, накопиченої інгаляційної токсодози і теплового

випромінювання продуктів сгоряння на об'єкти (людину і споруди) у зоні збурення.

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

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

 урахування структуризованих процесів хімічної взаємодії домішки з киснем повітря здійснити додаванням до рівнянь руху суміші (які відображають закони збереження маси, імпульса і енергії) джерельних членів;

 процеси струминного викиду домішки у повітря, випаровування з поверхні плями пролиття рідкої фази, витікання суміші (втікання повітря) у ВО у приміщенні виконати завдяки моделюванню граничних умов протікання;

 – розсіювання домішки у просторі завдяки ТД здійснити додаванням джерельних членів до рівняннь переносу компонент суміші (токсична або вибухонебезпечна домішка і продукти згоряння) з урахуванням швидкості дифузії;

 вплив присутності у газоповітряній суміші аерозольних домішок горючого пилу і пригнічуючих горіння крапель водяної завіси здійснити додаванням джерельних членів до рівняннь переносу енергії суміші;

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

3. Оцінку наслідків впливу на довкілля збуреного повітряного потоку у приземному шарі атмосфери здійснити:

– детермінованим шляхом за рахунок обчислення факторів баричного впливу вибухової хвилі (надлишковий тиск і імпульс фази стискання у фронті хвилі), токсичного впливу інгаляційної токсодози і термічного ураження тепловим випромінюванням високотемпературних продуктів сгоряння (щільність теплового потоку) і порівняння отриманих значень з пороговими для різного ступеня впливу на людину (споруду);

- ймовірнистним шляхом за рахунок обчислення умовної ймовірності

ураження людини (руйнування споруди) на основі пробіт-аналізу з метою отримання нестаціонарного просторового розподілу ймовірності ураження різного ступеня.

4. Сформульовано основні положення удосконаленої системної методології оцінювання змінних стану збуреного повітря техногенного об'єкту, яка на основі моделювання нестаціонарних просторових розподілів основних факторів впливу забезпечує можливість прогнозувати наслідки впливу та прийняти рішення щодо ефективності засобів захисту довкілля. Сформульовано концепцію і обрано підхід, на основі яких розв'язується наукова проблема дослідження, та наукові принципи, узгоджене використання яких буде сприяти підвищенню ефективності процесів аналізу і прогнозу стану повітря техногенного об'єкту у цілому.

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

# РОЗДІЛ 2 РОЗРОБКА СИСТЕМНОЇ МЕТОДОЛОГІЇ ІНЖЕНЕРНОГО АНАЛІЗУ ПРОЦЕСІВ ПРОМИСЛОВИХ ГАЗОПОДІБНИХ ВИКИДІВ

Ha основі запропонованої системної методології інженерного аналізу фізичних процесів потрапляння, розповсюдження і вибухів промислових ГД у повітрі приземного шару атмосфери розроблено тривимірну нестаціонарну математичну модель руху багатокомпонентної газової суміші у багатозв'язному просторі з урахуванням хімічної взаємодії, розпилення крапель рідини (або часток твердих фракцій). Математична модель описується системою ДР руху газової суміші, які відповідають законам зберігіння маси, імпульса і енергії для суміші, які замикаються рівнянням стану і доповнені законом зберігання маси ГД. Розроблено математичні моделі: а) миттєвого фізичного вибуху (ФВ) ГПС без урахування хімічної взаємодії для моделювання вивільнення хімічно пасивних ГД внаслідок руйнування ЄЗ високого тиску; б) миттєвого хімічного вибуху газоповітряної суміші хімічної реакції ΓД 3 3 урахуванням киснем повітря 3 утворенням високотемпературних ПГ і високим тиском із генерацією ВУХ; в) дефраграційного горіння ГД у повітрі приземного шару атмосфери на основі моделі «брутто» хімічної реакції із визначеною швидкістю горіння; г) випаровування з поверхні ПП ЗГ довільної форми; д) витяжної (напорної) механічної вентиляції з поверхні ВО; струминного витікання в актуальний простір з поверхні отвору ГПС заданої концентрації домішки; є) нестаціонарного СТО між газовим середовищем і суцільним твердим тілом. Розроблено метод дискретизації актуального простору на кінцево-об'ємні обчислювальні комірки. Здійснено постановку ГУ і ПУ.

Розглянуто методи чисельної оцінки впливу на людину і споруди у зоні параметричного (баричного, хімічно-складового, теплового) збуруння повітряного потоку. Відокремлено негативні ФВ у залежності від параметру збурення. Розглянуто алгоритм детермінованого підходу до оцінки наслідків негативного впливу і ймовірнісного підходу, який базується на ПА. Розроблено обчислювальну технологію автоматизованого нестаціонарного ПА з використанням ККС.

2.1 Тривимірна нестаціонарна математична модель руху суміші в багатозв'язаному просторі з урахуванням хімічної взаємодії, розпилення крапель рідини (часток пилу твердих фракцій)

### 2.1.1 Тривимірна математична модель руху багатокомпонентної суміші

Повна система ДР, що описує нестаціонарний тривимірний потік багатокомпонентної газової суміші у запропонованій постановці має такий вигляд [3, 22, 23]

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

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

$$\vec{a} = \left[\rho, \ \rho u, \ \rho v, \ \rho w, \ E\right]^T, \tag{2.2}$$

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

$$\vec{c} = \left[\rho v, \ \rho v u, \ P + \rho v^2, \ \rho v w, \ (E+P)v\right]^T,$$
(2.4)

$$\vec{d} = \left[\rho w, \ \rho w u, \ \rho w v, \ P + \rho w^2, \ (E + P) w\right]^T,$$
(2.5)

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

де *t* – час,

u, v, w – складові вектора швидкості суміші  $\vec{q}$ ,

*Р*,  $\rho$  – тиск і щільність ГПС,

### Е – повна енергія одиниці об'єму ГПС такого вигляду

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

де е – внутрішня енергія одиниці маси ГПС,

 $\vec{f}$  – суть проекції розподілених об'ємних джерел,

g – прискорення вільного падіння,

*e<sub>s</sub>* – інтенсивність тепловиділення в одиниці об'єму газу внаслідок хімічної реакції.

Закон перенесення компоненти ГПС з урахуванням швидкості ТД, має такий вигляд [33]

$$\frac{\partial(\rho Q_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Q_i)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v Q_i)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w Q_i)}{\partial z} = \rho_{O_u} + \rho_{O_u}, \qquad (2.8)$$

де  $Q_i$  – відносна масова щільність домішки (відношення щільності газоподібної речовини домішки до щільності суміші),  $\rho_{Q_{it}}$  – інтенсивність зміни щільності ГД внаслідок ТД відповідно до закону Фіка  $\rho_{Q_{it}} = div(\rho \mathcal{G}_D grad Q_i)$ ,  $\rho_{Q_{is}}$  – інтенсивність зміни щільності компоненти суміші, внаслідок хімічної реакції,  $\mathcal{G}_D$  – коефіцієнт ТД, який визначався за методикою М. О. Берлянда [241].

Коефіцієнт ТД можна знайти за допомогою числа Шмідта, яке за визначенням дорівнює

$$Sc_t = \mu_t / (\rho \vartheta_D),$$
 (2.9)

де  $\mu_t$  – коефіцієнт динамічної в'язкості для турбулентного режиму течії. Відомо, що коефіцієнт кінематичної в'язкості дорівнює  $\mathcal{G}_t = \mu_t / \rho$ . Звідси випливає, що

$$\mathcal{P}_D = \mathcal{P}_t / Sc_t \,. \tag{2.10}$$

85

Надалі будемо враховувати анізотропію ТД. Будемо вважати, що коефіцієнт ТД у різних напрямках пропорційний модулю повної швидкості потоку

$$\mathcal{G}_{ii} = k_i \left| q \right|, \tag{2.11}$$

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

Будемо вважати, що, з урахуванням формули М. О. Берлянда [241]

$$k_{y} = \begin{cases} k_{01}, & y \le y_{1}; \\ k_{01} \left( y/y_{1} \right)^{(1-1/p)}, & y > y_{1} \end{cases} I(y^{0}),$$
(2.12)

де  $k_{01} = \chi^2 y_1 / \ln(y_1 / y_0)$ ,  $\chi = 0.38$  – константа Кармана,  $y_1$  – висота точки вимірювання,  $y_0$  – шорсткість поверхні,  $I(y^0)$  – поправка Моніна-Обухова,  $y^0 = y_1 / L'$  – масштаб Моніна-Обухова.

З урахуванням того, що масштаб Моніна-Обухова визначається як

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

поправку Моніна-Обухова можна обчислити таким чином

$$I(y^{0}) = \begin{cases} 1+0.54 |y^{0}|^{0.8}, & y^{0} < 0; \\ (1+0.9y^{0})^{-1}, & 0 < y^{0} < 1;, \\ 0.53(y^{0})^{-1}, & y^{0} \ge 1. \end{cases}$$
(2.14)

Величина *р* задавалася у залежності від типу стабільності атмосфери (інверсія, конвекція, ізотермія)

$$p = \begin{cases} \infty, & \partial T / \partial y > 0; \\ 2.5, & \partial T / \partial y < 0; \\ 10, & \partial T / \partial y = 0. \end{cases}$$
(2.15)

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

$$Sc_{t} = \left(Sc_{t_0}S(Ri)\right) / \left(L^2(Ri)\right), \qquad (2.16)$$

де число Річардсона *Ri* визначається таким чином

$$Ri = -\frac{g}{\rho} \frac{\partial \rho / \partial y}{\left(\partial q / \partial y\right)^2} = -\frac{gR_x}{a_{\kappa\rho}^2} \frac{\partial \overline{\rho} / \partial \overline{y}}{\overline{\rho} \left(\partial \overline{q} / \partial \overline{y}\right)^2}.$$
(2.9)

У цьому випадку коефіцієнт ТД буде дорівнювати [242]

$$\mathcal{G}_{D} = \mathcal{G}_{t} / Sc_{t} = \left( \mathcal{G}_{t_{0}} L^{2}(Ri) \right) / \left( Sc_{t_{0}} S(Ri) \right), \qquad (2.18)$$

де  $\mathcal{G}_{t_0}$  - коефіцієнт турбулентної в'язкості, без урахування стратифікації;  $Sc_{t_0} = 0,9$ число Шмідта;  $S(Ri) = \frac{(1+3,33Ri)^{1,5}}{(1+10Ri)^{0,5}}; L(Ri) = \begin{cases} 1-\beta_1 Ri, & Ri \ge 0, & \beta_1 \approx 7; \\ (1-\beta_1 Ri)^{-1/4}, & Ri < 0, & \beta_1 \approx 14. \end{cases}$ 

Система рівнянь (1-8) є незамкненою. Доповнимо її рівняннями, які визначають теплофізичні властивості компонент газоповітряної суміші. Для ідеального політропного газу значення *е* зв'язано з тиском *P* і щільністю  $\rho$  суміші такою залежністю

$$e = P/((k-1)\rho). \tag{2.19}$$

# 2.2 Тривимірна математична модель миттєвого вивільнення стисненої газоповітряної суміші (фізічний вибух)

Модель «фізичного» вибуху € напростішою y низці розроблених математичних моделей, які забезпечують можливість імітувати фізичний процес формування баричного і термічного збурення параметрів приземного шару атмосферу внаслідок вибуху ГПС [6, 7]. Процесс викиду займистої газової домішки і формування суміші не розглядається. Припускається, що процес горіння є миттєвим і вибух проходить з початку розрахунку. Тобто подробиці складних фізико-хімічних перетворень не розглядаються, а в момент вибуху у об'єму, де відбулося горіння, газове середовище набуває параметри ПГ (рис. 2.1). Таким чином, згідно з цією моделлю, починаючи з початкового моменту (часу вибуху) з локалізованому об'єму РП починається розширення стисненого високотемпературного газу з параметрами горіння займистого газу у повітрі. У цей час формується суміш ПГ з повітрям і подальший рух двокомпонентної неактивної суміші в актуальному РП.



Рис. 2.1 Розрахункова схема «фізичного» вибуху: 1 – повітря; 2 – хмара ПГ; 3 – турбулентне змішування; 4 – ГПС

Аналогічну модель «фізичного» вибуху можна застосувати для моделювання ударною хвилі, яка генерується, наприклад, під час руйнування ЄЗ стиснених газів. Їх звільнення також формує ударну невибухову хвилю, яка розповсюджується від епіцентру руйнування і створює УІН на довкілля. Рух двокомпонентної ГПС вивільненого газу і повітря атмосфери описується системою рівнянь (2.1-2.19).

# 2.2.1 Тривимірна математична модель миттєвого вибуху газоповітряної суміші (хімічний вибух)

Фізичний процес розсіювання у повітрі вибухонебезпечної газової домішки може у якийсь момент часу може призвести суміш до стану, коли активна ГД почне реагувати з киснем повітря з вивілненням великого обсягу тепла і утворенням значного надлишкового тиску, що характерно для вибуху.

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



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

У момент вибуху в обсязі того об'єму розрахункової області, в якому

розташовується вибухонебезпечна суміш з концентрацією домішки у діапазоні між мінімальною і максимальною концентраційними межами займистості  $Q_{\min} \leq Q \leq Q_{\max}$ , значення газодинамічних параметрів двокомпонентної суміші (повітря і пальне) миттєво змінювалися на значення газодинамічні параметри трикомпонентної суміші (повітря, ПГ і залишок пального).

Маса пального, яке бере участь у горінні, визначається як сума мас домішки для елементарних об'ємів з концентрацією у межах займистості  $Q_{\min} \leq Q \leq Q_{\max}$ 

$$m'' = \sum (\rho Q \Delta V). \tag{2.20}$$

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

$$m_0'' = \sum (\rho Q \Delta V). \tag{2.21}$$

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

$$m = \sum (\rho \Delta V). \tag{2.22}$$

З іншого боку, загальна маса суміші m містить маси окислювача m, пального m, яке бере участь в горінні, і пального  $m_0^m$ , яке не бере участь у хімічній реакції

$$m = m' + m'' + m_0''. \tag{2.23}$$

Зі співвідношення (14) маса окислювача у суміші дорівнює

$$m' = m - m'' - m_0''. \tag{2.24}$$

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

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

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

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

Коефіцієнт надлишку повітря у суміші а дорівнює

$$\alpha = m' / (\mathcal{G}_0 m'') = (1 - Q'' - Q_0'') / (\mathcal{G}_0 Q''), \qquad (2.28)$$

де  $\mathcal{G}_0 = m'_{th}/m''$  – стехіометричне число,

*m*<sup>'</sup><sub>th</sub> – маса повітря, теоретично необхідна для повного згоряння 1 кг палива.

Задаємо нижню теплоту згоряння горючої домішки  $H_u$  з таблиць теплофізичних властивостей речовин [314]. Молярна маса  $\mu_{np}$  і коефіцієнт адіабати  $k_{np}$  ПГ визначаються на основі гіпотези зворотності хімічних реакцій, що реалізуються.

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

$$\mu = 1 / \left( \left( 1 - \left( \vartheta_0 + 1 \right) Q'' - Q_0'' \right) / \mu' + \left( \vartheta_0 + 1 \right) Q'' / \mu_{np} + Q_0'' / \mu'' \right),$$
(2.29)

$$C_{p} = \left[1 - \left(\vartheta_{0} + 1\right)Q'' - Q_{0}''\right]C_{p}' + \left(\vartheta_{0} + 1\right)Q''C_{p}^{np} + Q_{0}''C_{p}'', \qquad (2.30)$$

$$C_{\nu} = \left[1 - \left(\mathcal{G}_{0} + 1\right)Q'' - Q_{0}''\right]C_{\nu}' + \left(\mathcal{G}_{0} + 1\right)Q''C_{\nu}''' + Q_{0}''C_{\nu}''', \qquad (2.31)$$

де  $C'_p$ ,  $C^{np}_p$ ,  $C''_p$  – теплоємність за постійного тиску окислювача, ПГ і пального у

суміші, відповідно,

 $C'_{\nu}$ ,  $C^{np}_{\nu}$ ,  $C''_{\nu}$  – теплоємність за постійного об'єму окислювача, ПГ і пального у суміші, відповідно.

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

$$\mu = \mathcal{G}_{0} / \left( \left( (1 + \mathcal{G}_{0})Q' \right) / \mu_{np} + \left( \mathcal{G}_{0} - (1 + \mathcal{G}_{0})Q' \right) / \mu'' \right),$$
(2.32)

$$C_{p} = (1 - Q_{np})C_{p}'' + Q_{np}C_{p}^{np}, \qquad (2.33)$$

$$C_{\nu} = (1 - Q_{np})C_{\nu}'' + Q_{np}C_{\nu}^{np}.$$
(2.34)

В обох випадках після вибуху газодинамічні параметри суміші дорівнюють

$$P = \left(H_{u}m_{th}''(k-1)\right)/V + P_{a} = \left(H_{u}\left(1-Q''-Q_{0}''\right)m''(k-1)\right)/\left(\mathcal{G}_{0}Q''V\right) + P_{a}, \qquad (2.35)$$

$$T = PV \mu / (mR_{y_{H}}), \qquad (2.36)$$

$$\rho = m/V, \qquad (2.37)$$

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

де P, T, p, k – тиск, температура, щільність, коефіцієнт адіабати суміші, відповідно,

*R*<sub>ун</sub> – універсальна газова постійна,

Ра – атмосферний тиск.

Таким чином, розроблена математична модель вибуху ГПС є джерелом отримання часово-просторових розподілів надлишкового тиску і імпульса у фронті ВУХ [1], і може бути у подальшому використана для детермінованого експертного аналізу полів фізичних параметрів збуреного вибухом потоку у зоні можливого аварійного вибуху і ймовірністного аналізу ФВ з метою оцінювання і прогнозу можливих наслідків впливу вибуху на людину і споруди.

# 2.2.2 Моделювання процесу дефлаграційного горіння газоподібної домішки у атмосфері

Іноді важливо мати детальну інформацію у часі про розвиток процесів займання у суміші повітря з вибухонебезпечним газом, розповсюдження фронту полум'я у просторі газоповітряної хмари, динаміку проходження хімічної реакції горіння, нестаціонарних полів ГД, чистого повітря і ПГ. Розвиток розробленої математичної моделі руху багатокомпонентної газової суміші у приземному шарі атмосфери у бік урахування означених вище процесів забезпечить можливість отримати більш точну інформацію про ВУХ у фазі стискання, щоб мати можливість обчислити поля максимального надлишкового тиску і імпульсу в актуальному просторі з метою побудови розподілу умовної ймовірності ураження людини і руйнування навколишніх будівель у зоні техногенної аварії.

#### 2.2.2.1 Загальна постановка задачі горіння суміші газів

Розглядаються процеси дефлаграційного горіння займистої ГД у повітрі приземного шару атмосфери і подальшого розсіювання ПГ і залишків горючого у відкритому просторі або у закритому приміщенні з природною або механічною вентиляцією (рис. 2.3).



Рис. 2.3 Розрахункова схема руху хімічно реагуючої суміші газів

Відомі параметри навколишнього середовища (температура, тиск, вектор швидкості потоку  $\vec{q}_1$ , що набігає), хімічний склад ГПС (ВМК домішки  $Q_1$ ), ГУ і ПУ формування суміші. Розрахункової областю  $\Omega$  є паралелепіпед, розташований у правій декартовій системі координат (*X*, *Y*, *Z*) із основою у земній площині *XOZ*. РП разбивається на просторові комірки, причому розміри граней підбираються у відповідності до характерного розміру особливостей РП (шорсткості поверхні, що обтікається, розмірністю об'єктів).

### 2.2.2.2 Математична модель горіння суміші газів

Повна система рівнянь, що описує нестаціонарний тривимірний потік двокомпонентної ГПС (2.1) зазнає змін. Вектор-стовпець  $\vec{f}$  справа тепер має такий вигляд [1, 10]

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

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

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

$$\partial(\rho Q_i)/\partial t + \partial(\rho u Q_i)/\partial x + \partial(\rho v Q_i)/\partial y + \partial(\rho w Q_i)/\partial z = \rho_{Q_{ii}} + \rho_{Q_{is}}, \qquad (2.40)$$

де  $Q_i$  – відносна масова щільність *i*-тої компоненти суміші, яка є щільністною часткою домішки у суміші (індекс *i* = 1...3: 1 – займиста домішка, 2 – повітря, 3 – продукти згоряння; *u*, *v*, *w* – складові вектора швидкості потоку  $\vec{q}$ ;  $\rho_{Q_i}$  –

інтенсивність зміни щільності домішки внаслідок ТД відповідно до закону Фіка  $\rho_{Q_{ii}} = div(\rho \mathcal{P}_D grad Q_i); \mathcal{P}_D - коефіцієнт ТД за М. Є. Берляндом [241]); \rho_{Q_{is}}$ інтенсивність зміни щільності компоненти суміші, внаслідок хімічної реакції.

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

$$\mu = 1 \Big/ \sum_{i=1}^{3} \frac{Q_i}{\mu_i}, \ C_P = \sum_{i=1}^{3} Q_i \left( C_P \right)_i, \ C_v = \sum_{i=1}^{3} Q_i \left( C_v \right)_i, \ \sum_{i=1}^{3} Q_i = 1, \ k = \frac{C_p}{C_v}.$$
(2.41)

Для ідеального політропного газу величина внутрішньої енергії *е* пов'язана з тиском *P* і щільністю *р* суміші залежністю

$$e = P/((k-1)\rho).$$
(2.42)

Інтенсивність зміни щільності пального  $\rho_{Q_{1s}}$  внаслідок хімічної реакції визначалася як добуток молекулярної маси пального  $\mu_1$  на швидкість його мольної зміни  $w_1$ . Розглядалася хімічна реакція-«брутто»

$$\sum_{i=1}^{2} v_i \chi_i \to v_3 \chi_3, \qquad (2.43)$$

де  $v_i$  – стехіометричні коефіцієнти,  $\chi_i$  – хімічні речовини. Швидкість мольної зміни  $w_1$  визначалася за формулою

$$w_{1} = -\nu_{1}A_{1}T^{\beta_{1}} \exp[-E_{1}/(R_{yH}T)]\prod_{i=1}^{2} [\chi_{i}]^{\nu_{i}}, \qquad (2.44)$$

де  $A_1, \beta_1, E_1, v_1', v_2'$  – параметри, отримані узагальненням експериментальних даних

[342],  $[\chi_i] = \rho Q_i / (\mu_i v_i)$  – мольна концентрація *i*-тої компоненти суміші. Інтенсивність зміни щільності ПГ  $\rho_{Q_{3s}}$  визначалася на основі закону рухомих мас

$$\rho_{Q1s} / (\mu_1 v_1) = \rho_{Q2s} / (\mu_2 v_2) = -\rho_{Q3s} / (\mu_3 v_3).$$
(2.45)

Інтенсивність тепловиділення у одиниці об'єму газу внаслідок хімічної реакції *e<sub>s</sub>* визначалася за формулою

$$e_s = -\xi H_{u1} \rho_{O1s}, \tag{2.46}$$

де  $\xi$  – коефіцієнт повноти згоряння,  $H_{u1}$  – нижня теплота згоряння пального.

Припускається, що хімічна взаємодія має місце там, де локалізована ГПС із 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 [264].

## 2.2.3 Моделювання присутності крапель рідини (часток пилу) під час вибуху газоповітряної суміші

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

#### 2.2.3.1 Урахування розпилення крапель рідини (твердих часток пилу)

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

$$P = 1 - \exp\left(-\left(\frac{d}{d_{+}}\right)^{n}\right), \qquad (2.47)$$

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

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

## 2.2.3.2 Урахування впливу аеродинамічного опору крапель рідини (часток вугільного пилу) на течію газоповітряної суміші

Сила супротиву, що діє на краплю (частку пилу), визначається формулою

$$\vec{F}_{mp} = -C_d \left( \rho q^2 / 2 \right) \sigma_k \, \vec{q} / | \, \vec{q} \, |, \qquad (2.49)$$

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

можна рекомендувати співвідношення [344]

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

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

$$\vec{F}_{mp} = N_k \sum_{i=1}^{I} \rho(d_i) \vec{F}_{mp}(d_i), \qquad (2.51)$$

де  $N_k = G_{H_2O} \tau / \left( m \rho_{H_2O} \sum_{i=1}^{I} \rho(d_i) V_{ki} \right)$  – кількість крапель у контрольному об'ємі,  $G_{H_2O}$ – загальна витрата води (передбачається, що вода безперервно подається у розрахункову область),  $\tau$  – крок за часом, m – кількість контрольних об'ємів в області з джерелами (крапель, частинок пилу твердих фракцій),  $V_{ki} = (\pi/6) d_i^3$  – об'єм дисперсної частки.

Кількість часток пилу в актуальному об'ємі визначається за формулою

$$\mathbf{N}_{k} = \rho_{C+} \Delta \mathbf{V} / \left( \rho_{C} \sum_{i=1}^{I} \rho(d_{i}) \mathbf{V}_{ki} \right), \qquad (2.52)$$

де  $\rho_{C^+}$  – концентрація пилу в підвішеному стані,  $\Delta V$  – контрольний об'єм,  $\rho_C$  – щільність вугільного пилу.

Вплив аеродинамічного супротиву дисперсних часток на параметри течії ГПС здійснювався введенням у рівняння руху усередненої об'ємної сили опору

$$\vec{\mathbf{f}}_{mp} = \left(1/\rho\right) / \left(\vec{F}_{mp}/\Delta \mathbf{V}\right). \tag{2.53}$$

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

## 2.2.3.3 Урахування впливу тепловиділення внаслідок кипіння (горіння) дисперсних часток на течію газоповітряної суміші

Швидкість зміни маси ГД внаслідок кипіння води визначимо за формулою

$$\rho_{\mathrm{H}_{2}\mathrm{Os}} = G_{H_{2}O} / (\mathrm{m}\Delta V), \qquad (2.54)$$

а швидкість зміни маси ГД внаслідок реакції горіння пилу – за формулою

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

де *G<sub>C</sub>* – загальна зміна за одиницю часу маси частинок пилу твердих фракцій внаслідок хімічної реакції горіння.

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

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

де  $k = 6,14 \cdot 10^6$ ,  $M_{0i} = \rho_C V_{ki}$ . Згідно відомих з математичного аналізу і теорії звичайних ДР перетворень, поточна маса твердої частинки, яка горить є такою

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

а швидкість зміни маси твердих частинок за рахунок згоряння має такий вигляд

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

де *t* – час.

Зміна сумарної маси твердих дисперсних частинок за рахунок згоряння може бути визначено за формулою

$$G_{\rm C} = m N_k \sum_{i=1}^{I} \rho(d_i) G_{Ci} \,. \tag{2.59}$$

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

$$\mathbf{e}_{\mathrm{H}_{2}\mathrm{Os}} = -r(P)\rho_{H_{2}\mathrm{Os}}, \ \mathbf{e}_{\mathrm{Cs}} = \xi H_{\mathrm{uC}}\rho_{Cs}, \tag{2.60}$$

де r(P) – питома теплота пароутворення,  $\xi$  – коефіцієнт повноти згоряння,  $H_{\rm uC}$  – найнижча теплота згоряння.

### 2.3 Тривимірна математична випаровування з плями пролиття

Технологічні процеси сучасних промислових підприємств включають використання, транспортування і зберігання отруйних хімічних речовин (ОХР) у зрідженому стані [243]. Порушення правил експлуатації обладнання призводить до його відмов, які супроводжуються викидом у атмосферу ОХР з утворенням токсичних хмар [245]. Одним із найбільш небезпечних видів техногенної аварії є руйнування ЄЗ або ємностей транспортування ЗГ з утворенням ПП [335] (рис. 2.4).



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

ВМК токсичної газоподібної речовини у ГПС характеризує негативне відхилення від нормального хімічного складу повітря і разом з часом експозиції є небезпечним параметром для обслуговуючого персоналу, який опинився у межах зони ТА.

Експозиція обслуговуючого персоналу ТО певним концентраціям ОХР формує уражаючий фактор – ІТД. Перевищення граничних значень допустимого діапазону токсодози призводить до соціальних наслідків – отруєння різного ступеня тяжкості і людських жертв. Тому визначення ризику підприємства для такого роду аварії є важливою і актуальною інженерно-практичною задачею.

Оцінка наслідків ТА включає у себе визначення ймовірності ураження обслуговуючого персоналу, який може бути підданий впливу ОХР, на основі математичного моделювання розсіювання токсичної домішки в атмосфері [246].

Математичне моделювання фізичних процесів викиду і розсіювання шкідливої

ГД у приземному шарі атмосфери забезпечує можливість здійснити прогноз полів масової концентрації ОХР, визначити ІТД і отримати поля умовної ймовірності ураження обслуговуючого персоналу ТО [22, 33].

Сучасні методики оцінки забруднення засновані на детермінованому підході [243, імовірнісному підході визначення наслідків 244]. а при ураження обслуговуючого персоналу на основі ПА використовують залежність умовної ймовірності ураження від ПФ у табличному вигляді для експертного аналізу [33]. Це не дає змогу застосувати даний підхід в автоматичному режимі за допомогою комп'ютерної системи для отримання нестаціонарних полів уражаючих факторів і ймовірності обчислювальної умовної ураження та вимагає удосконалення технології.

# 2.3.1 Постановка задачі розсіювання токсичної речовини з плями пролиття

Розглянемо формування і рух ГПС на відкритому майданчику, де сталося аварійне руйнування ЄЗ токсичного ЗГ (рис. 2.5).



Рис. 2.5 Схема аварійного пролиття: 1 – ПП; 2 – потік повітря; 3 – ГД; 4 – газоповітряна хмара

Під впливом навколишнього середовища ЗГ випаровується з ПП і надходить у приземний шар атмосфери із сумарною інтенсивністю  $G_{\Sigma}$ . Свіже повітря зі ШВ

надходить через ухідну грань розрахункової області, перемішується з ГД, утворюючи газоповітряну хмару з масовою концентрацією *Q*. Для спрощення математичної моделі і прискорення комп'ютерних обчислень приймаємо припущення, що фізичні процеси переходу речовини, яка викидається у приземний шар атмосфери, (закипання) з рідкого стану у газоподібну фазу проходять миттєво і у нескінченно-тонкому за висотою шарі. Це припущення трохи огрубляє розрахунки, але, загалом, дає змогу досить адекватно описати процес потрапляння ГД у повітря РП.

Течія газової суміші у розрахунковій області буде визначатися параметрами навколишньої атмосфери, площею ПП, параметрами ГД, що надходить у результаті випаровування в атмосферу. У якийсь момент часу випаровування може припинитися і надходження ГД в область не буде мати місце.

#### 2.3.2 Моделювання випаровування з плями пролиття

У результаті дискретизації розрахункової області поверхня ПП ЗГ також розбивається на шар кінцево-об'ємних комірок біля землі у площині XOZ (рис. 2.6а).



Рис. 2.6 Схема розрахунку для визначення швидкості випаровування рідини (а – дискретизація ПП; б – схема випаровування):

За рівномірного розбиття у напрямку осей ОХ та ОZ грані комірок, які «випаровують» ГД, мають однакову площу. Припускаючи рівномірність потоку з ПП, можна визначити індивідуальну задану витрату газу  $G_i = G_{\Sigma}/k$  для кожної з комірок «випаровування», де k – кількість прилеглих до ПП ЗГ комірок.

Нехай є газове середовище, для якого термодинамічні величини (тиск p, щільність  $\rho$ , внутрішня енергія одиниці маси  $\varepsilon$ ) підкоряються рівнянню стану. Припустимо, що у початковий момент часу t для «нижнього» напівпростору y < 0 середовище характеризується значеннями параметрів  $p_1$ ,  $\rho_1$ ,  $u_1$ .

Для «верхнього» напівпростору y > 0 – значеннями  $p_2$ ,  $\rho_2$ ,  $u_2$  (тут  $u \in$  компонентою вектора швидкості у напрямку координати у, а інші її компоненти дорівнюють нулю) (рис. 2.6б).

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

У свою чергу, ці області відокремлені від незбурених областей з параметрами  $(p_1, \rho_1, u_1)$  знизу і  $(p_2, \rho_2, u_2)$  зверху або ударною хвилею (УХ) чи хвилею розрідження (ХР).

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

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



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

#### 2.3.3 Узагальнене розв'язання задачі розпаду розриву

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

Нехай є багатокомпонентне газове середовище, для якого термодинамічні величини (тиск p, щільність  $\rho$ , внутрішня енергія одиниці маси  $\varepsilon$  і коеффіцієнт адіабати k) підкоряються рівняння стану ідеального газу  $\varepsilon = p/((k-1)\rho)$ .

Припустимо, що у початковий момент часу t = 0 для напівпростору «ліворуч»

x < 0 середовище характеризується значеннями параметрів  $p_1$ ,  $\rho_1$ ,  $u_1$ ,  $k_1$ , а для напівпростору «праворуч» x > 0 – значеннями  $p_2$ ,  $\rho_2$ ,  $u_2$ ,  $k_2$  (тут  $u \in$  компонентою вектора швидкості у напрямку координати x, тоді як інші її компоненти дорівнюють нулю). Якщо зробити припущення, що у зоні розпаду розриву параметрів середовища коефіцієт адіабати має едине осереднене значення  $k = (k_1 + k_2)/2$ , то усі співвідношення, отримані С. К. Годуновим для одного газу [262], можуть бути використані для суміші газів (рис. 2.8).



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

Якщо привести до стикання дві маси суміші газів, стиснуті до різних тисків ( $p_1$  – тиск «ліворуч»,  $p_2$  – тиск «праворуч»), і прибрати перегородку між ними, то поверхня їхнього стикання буде поверхнею розриву у початковому розподілі тиску. При цьому стрибки на розриві можуть бути довільними [262].

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



Рис. 2.9 Можливі конфігурації автомодельної течії

Перші чотири конфігурації (рис. 2.9а-2.9г) долучають контактний розрив (КР), де має місціе стрибок щільності R, а значить, і внутрішня енергія  $E(R_1, E_1 - для$ області «ліворуч» і  $R_2$ ,  $E_2 - для$  області «праворуч»), а тиск P і поперечна компонента швидкості U є безперервними. Ці області відокремлені від незбурених зон із параметрами ( $p_1$ ,  $\rho_1$ ,  $u_1$ ) «ліворуч» і ( $p_2$ ,  $\rho_2$ ,  $u_2$ ) «праворуч» або ударною хвилею або хвилею розрідження. Конфігурація на рис. 2.9д є граничною.

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

$$[\rho]D - [\rho u] = 0,$$
  

$$[\rho u]D - [p + \rho u^{2}] = 0,$$
  

$$[\rho(\varepsilon + u^{2}/2)]D - [\rho u(\varepsilon + u^{2}/2) + pu] = 0.$$
(2.61)

За допомогою рівняння стану (1) із рівнянь (2) у роботі [262] було отримано адіабату Гюгоніо

$$R = \rho((k+1)P + (k-1)p)/((k-1)P + (k+1)p), \qquad (2.62)$$

де ( $\rho$ , p,  $\varepsilon$ ) – параметри до УХ, (P, R, E) – параметри після фронту УХ.

Якщо увести масову швидкість  $a_1 = \rho_1 (u_1 - D_1) = R_1 (U - D_1)$ , то для лівої УХ (якщо вона є такою) можна виписати наступні співвідношення

$$U - u_1 + (P - p_1)/a_1 = 0, (2.63)$$

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

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

$$U - u_2 + (P - p_2)/a_2 = 0, (2.65)$$

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

У випадку XP замість співвідношень (2) треба використати умови безперервності риманових інваріантів [262]

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

де  $c = \sqrt{k p / \rho} - \epsilon$  швикістю звуку.

Якщо увести умовні масові швидкості

$$a_{1} = \left( \left( k - 1 \right) / (2k) \right) \rho_{1} c_{1} \left( 1 - P / p_{1} \right) / \left( 1 - \left( P / p_{1} \right)^{(k-1)/(2k)} \right),$$
(2.68)

$$a_{2} = (k-1)/(2k)\rho_{2}c_{2}(1-P/p_{2})/(1-(P/p_{2})^{(k-1)/(2k)}), \qquad (2.69)$$

то і для випадку ХР маємо співвідношення, які виглядають аналогічно УХ

$$U - u_1 + (P - p_1)/a_1 = 0, (2.70)$$

$$U - u_2 + (P - p_2)/a_2 = 0 (2.71)$$

для лівої і правої хвиль, відповідно.

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

Кожної ітерації (*i*) можна обчислити нове значення «великого» тиску  $P^{(i)}$ , маючи ітераційно незмінні «малі» параметри тиску і швидкості з обох боків від розриву і масових швидкостей для попередньої ітерації (*i*-1), користуючись формулою, яка є похідною формул (2.65) і (2.66)

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

За початкове значення тиску візьмемо брати «звуковий розпад розриву»

$$P^{(0)} = \left( p_1 \rho_2 c_2 + p_2 \rho_1 c_1 + (u_1 - u_2) \rho_1 c_1 \rho_2 c_2 \right) / (\rho_1 c_1 + \rho_2 c_2).$$
(2.73)

Ітераційний процес швидко зходиться. Значення «великої» швидкості контактного розриву можна обчислити після його завершення

$$U = (a_1 u_1 + a_2 u_2 + p_1 - p_2) / (a_1 + a_2).$$
(2.74)

а «велика» щільність обчислюється за адіабатою Гюгоніо

$$R_{1} = \rho_{1} \left( (k+1)P + (k-1)p_{1} \right) / \left( (k-1)P + (k+1)p_{1} \right) = \rho_{1}a_{1} / \left( a_{1} - \rho_{1} \left( u_{1} - U \right) \right).$$
(2.76)

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

$$D_1 = u_1 - c_1, \quad D_1^* = U - c_1^*, \tag{2.77}$$

де  $c_1^* = c_1 + (k-1)/2(u_1 - U).$ 

Щільність «ліворуч» контактного розриву обчислюється за формулою


Рис. 2.10 Блок-схема алгоритму узагальненої схеми розпаду розриву

$$R_1 = kP / (c_1^*)^2$$
. (2.78)

Подібні формули виписано і для правої хвилі. Якщо вона є ударною, її швидкість і щільність обчислюється за такими співвідношеннями

$$D_2 = u_2 - a_2 / \rho_2, \ R_2 = \rho_2 a_2 / (a_2 - \rho_2 (u_2 - U)).$$
(2.79)

Якщо вона є хвилею розрідження, її «великі» параметри обчислюється за формулами

$$D_2 = u_2 + c_2, \quad c_2^* = c_2 - (k-1)/2(u_2 - U), \quad (2.80)$$

$$D_2^* = U + c_2^*, \ R_2 = k P / (c_2^*)^2.$$
 (2.81)

Таким чином, алгоритм розв'язку задачі розпаду розриву [262] було модіфіковано для розповсюдження дії співвідношень на розриві на ГПС.

#### 2.3.4 Інтерполяція функції інтенсивності випаровування

Під час моделювання випаровування з ПП інтенсивність «викиду» домішки у газовій фазі в атмосферу зазвичай приймають постійною G = const (рис. 2.11а) і визначають за формулою (2.82).

Якщо є сумарна маса m пролитого ЗГ і час початку  $t_1$  і кінця  $t_2$  процесу випаровування, тоді поточна інтенсивність випаровування може бути знайдена із такого співвідношення [24]

$$G = m/(t_2 - t_1) = const.$$
 (2.82)

Іноді закон ІВ  $G_3 = f(t)$  (рис. 2.11б) є заданим табличною функцією, яку отримано або з експерименту, або за допомогою аналітичної моделі.



Рис. 2.11 Закони IB *G*: а – постійний; б – змінний; *t*<sub>1</sub> і *t*<sub>2</sub> – початок і кінець випаровування; *G*<sub>3</sub> – задана інтенсивність випаровування

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

Площа ПП рідини  $F(M^2)$  може бути визначеною за такою формулою

$$F = \left( M^{p} - M^{e} - M^{p}_{a} \right) / \left( 0,05\rho_{p} \right),$$
(2.83)

де  $\rho_p$  – щільність рідкої небезпечної речовини, кг/м<sup>3</sup>;

*М<sup> р</sup>* – сумарна маса пролитої рідкої небезпечної речовини, кг/м<sup>3</sup>;

*M<sup>2</sup>* – маса небезпечної речовини, яка переходить у газову фазу первинної хмари під час миттєвого закипання перегрітої речовини, кг;

*М*<sup>*p*</sup><sub>*a*</sub> – 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 ПП визначаємо за формулою

$$q^{s} = F \sqrt{\mu} 10^{-6} \left( 5,38 + 4,1u_{0e\phi}^{s} \right) P_{\mu}, \qquad (2.84)$$

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

*u*<sup>*e*</sup><sub>0*e*\$\$\phi\$} – початкова ефективна швидкість вторинної хмари, що утворюється на стадії випаровування з ПП, м/с;</sub>

*P<sub>н</sub>* – тиск насиченої пари небезпечної речовини за температури повітря, мм рт. ст., який можна визначити за формулою

$$P_{H} = 760 \exp(\Delta H_{\kappa un} \,\mu (1/T_{\kappa un} - 1/T_{nos})/R), \qquad (2.85)$$

де *Т*<sub>пов</sub> – температура повітря, К;

*T<sub>кип</sub>* – температура кипіння рідкої небезпечної речовини за тиску за нормальних умов *P*<sub>0</sub>, K;

Δ*H<sub>кип</sub>* – теплота випаровування (кипіння) рідкої небезпечної хімічної речовини, Дж/кг.

### 2.4 Обчислювальна технологія врахування вентиляції під час розрахунку руху газової суміші у приміщенні

Сучасний рівень технічного прогресу передбачає зростаюче використання у промисловості, транспорті і побуті вибухонебезпечних і токсичних газів [265]. Відмови у роботі обладнання призводять до аварійних викидів газів в атмосферу, формуванню вибухонебезпечних і токсичних хмар, розсіювання їх у приміщеннях,

вибухів і пожеж [10], які супроводжуються людськими жертвами і значними матеріальними збитками [266, 267].

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

Проблемі оцінки ризиків виникнення HC, пов'язаних з витоком водню з автомобілів, обладнаних водневими паливними баками у вентильованих тунелях, було присвячено у роботі [276], яка базується на застосуванні CFD. Отримано базові дані про поведінку водню під впливом умов примусової вентиляції.

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

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

Питанням детонації у результаті аварійного викиду водню у замкненому просторі присвячено роботу [278]. На основі технології CFD отримано істотний вплив умов попереднього формування вибухонебезпечного хмари на масштаб наслідків від подальшого детонаційного вибуху.

Розсіювання водню у приміщенні було чисельно досліджено в роботі [279] з використанням аналітичних моделей і CFD-підходу, заснованого на LES-моделі. Отримано, що аналітичне рішення не забезпечує можливість адекватно відтворити явища ТД і стратифікації на етапі змішування у процесі формування ГПС.

У роботі [280] проведено комплексне порівняння можливостей різних CFD-

моделей прогнозувати різні за тривалістю варіанти розсіювання і змішування водню у гаражі. Отримано істотні розбіжності у результатах моделювання, що пояснюється відмінностями у МТ і точності розрахунків (дискретизація у часі і просторі, порядок апроксимації кінцево-різницевої схеми).

У розрахунково-експериментальному дослідженні [281] вивчалися можливості доправки трубопроводом кінцевому користувачеві воднево-метанової суміші, екстрагуванню водню із суміші та використання у різних побутових пристроях. Відповідно, аварійні викиди водню тягнуть за собою загрозу громадській безпеці, рівень якої оцінюється у роботі на базі розробленої моделі. Інтерпретація результатів показує, як фактор плавучості, так і вентиляція грають важливу роль у розсіюванні водню в атмосфері.

У експериментальній роботі [282] вивчався вплив вентиляції й інтенсивність витікання водню на розподіл його концентрації у закритій системі та оцінки ризиків, асоційованих з дефлаграціонним згорянням. Отримано, що надлишковий тиск під час дефлаграції у більшості випадків є незначним і несе невеликий ризик ураження людей і руйнування приміщення. Основний ризик несе термічне навантаження на довкілля, що призводить до пожеж. Із дослідження випливає, що максимальна концентрація водню пропорційна відношенню інтенсивності витікання до швидкості вентиляції. Тому потрібну швидкість вентиляції можна оцінити виходячи із передбачуваної інтенсивності витікання водню.

У роботі [283] розглядаються ризики виникнення вибухонебезпечної ситуації внаслідок неконтрольованого викиду водню з автомобіля, що працює на водні, який розташований у закритому просторі гаража. Як захід зменшення масштабу наслідків від можливого вибуху та пожежі розглядається вентиляція гаража, і проведена оцінка її оптимальної роботи.

Розрахункове дослідження [284] було присвячено комп'ютерному моделюванню викиду і розсіювання стисненого водню у вентильованому боксі на заправній станції на основі CFD-коду ADREA-HF. Структура виникаючих потоків аналізувалася на базі прогнозованих розподілів концентрації водню. Досліджувався

також вплив параметрів викиду, природної вентиляції і вітрових умов.

Наведений огляд показує, що комп'ютерне моделювання вентиляції на базі СFD є найбільш загальним методологічним підходом. З іншого боку, специфічні сценарії розвитку розглянутих аварійних ситуацій включають умови для повільних типів течій (ламінарних і перехідних), вибір МТ для яких не є тривіальною задачею. Крім того, кожна з великої кількості МТ, добре поводиться тільки для того типу течії, для якого вона була розроблена. Внаслідок того, що масштаби і складність задачі припускають величезні витрати ресурсів обчислювальної техніки, виникає необхідність різного роду спрощень, які не призведуть до зниження точності отримуваного розв'язання [270-273]. Застосуємо розроблену математичну модель руху багатокомпонентної газової суміші до моделювання вентиляції у приміщеннях.

#### 2.4.1 Постановка задачі моделювання руху газу крізь вентиляційний отвір

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

Оскільки для отримання тривимірної картини руху газової суміші у самому вентильованому приміщенні знання низки характеристик вентиляційної системи (довжина і геометрія каналів, конструкція вентиляторів та ін.) не є принципово важливим, роботу вентиляційної системи уцілому можна не розглядати детально, а враховувати лише параметри потоку (наприклад, витрата газу), які вона забезпечує. Абстрагуємося від вентиляційної системи, а для врахування впливу її роботи на загальну картину течії у приміщенні будемо ставити додаткові ГУ на поверхнях основної розрахункової області, які прилягають до ВО.

Розглянемо рух ГПС у приміщенні, де стався аварійний викид небезпечної ГД (рис. 2.12). Під впливом роботи витяжного вентилятора у вихідний отвір буде надходити газова суміш із приміщення з сумарною витратою  $G_{\Sigma}$ . Подача свіжого

хмара вихід Х вхіл

Рис. 2.12 Розрахункова схема витяжної вентиляції приміщення/

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

#### 2.4.2 Метод дискретизації поверхонь вентиляційних отворів

За результатами дискретизації РП поверхня кожного ВО також розбивається низкою кінцево-об'ємних комірок, які прилягають до отвору (рис. 2.13).

За умов рівномірного розбиття отвору у напрямку відповідних осей площі граней «вентиляційних» комірок є однаковими. Припустивши рівномірність потоку у ВО, можна визначити індивідуальну задану витрату газу для кожної з «вентиляційних» комірок  $G_i = G_{\Sigma}/k$ , де k – кількість комірок, які прилягають до ВО.

Розглядається схема, схожа зі схемою «випаровування». Тільки замість фіктивних комірок під поверхнею випаровування розташуємо фіктивні «вентиляційні» комірки, які знаходятся у отворі вентиляції. Різниця у тому, що ВО можуть бути у будь-якій площині в актуальному просторі (на стелі, підлозі, стінах приміщення) [19].

#### повітря зі швидкістю С<sub>1</sub> здійснюється через вхідний отвір приміщення.





Рис. 2.13 Дискретизація стіни з отвором вентиляції

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



Рис. 2.14 Схема варіантів задачі довільного розпаду у площині YOZ для примусової витяжної вентиляції: 1 – параметри «ліворуч»; 2 – параметри «праворуч»; *G<sub>i</sub>* – витрата газу крізь одну комірку «вентиляції»

Таким чином, моємо 12 різних варіантів схеми розпаду довільного розриву параметрів газу для усіх варіантів розташування ВО і типу примусової вентиляції.

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

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

# 2.5 Математичне моделювання струминного витікання суміші із заданою концентраціїю домішки

Іноді обладнання зберігання, траспортування або використання у техпроцесі суміші газів з визначеною ВМК зазнає часткового руйнування, і крізь аварійний отвір починає витікати вибухонебезпечна або токсична суміш із визначеною витратою (рис. 2.15) [23].



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

ГПС турбулентно змішується із повітрям, яке натікає із входу в актуальний простір, і результуюча хмара продовжує свій рух у ПША. Якщо ГД є горючим газом, можливий вибух з формуванням ударно-імпульсного впливу на довкілля. У випадку ТД можливе інгаляційне отруєння людей.

Течія ГПС у РП буде визначатися параметрами атмосфери, площею отвору

СВ, параметрами ГД (у тому числі її ВМК). У якийсь момент часу СВ може припинитися і надходження домішки в область завершиться. Як і у випадку випаровування витрата ГПС у отворі є функцією часу.

Для моделювання CB газоповітряної суміші заданої концентрації домішки з отвору заданої площі використаємо розроблену модель випаровування з поверхні плями пролиття зрідженого газу. Модель базується на розв'язанні задачі розпаду довільного розриву параметрів газу на поверхні контакту ГПС з параметрами усередені обладнання і параметрами середовища, куди витікає струмінь.

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

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

Таким чином модель СВ бути мати шість варіантів схеми розташування у РП, які визначаються площиною, з поверхні якої має місце СВ, і напрямом вектора нормалі до цієї площини. Це схоже з варіантами вентиляції (рис. 2.14)

## 2.6 Тривимірна математична модель нестаціонарного процесу спряженого те плообміну між газом і твердим тілом

Тверді тіла, які потрапили у потік ГПС, можуть мати іншу ніж суміш температуру. У цьому разі мають місце процеси теплообміну між потоком і твердим тілом крізь поверхню твердого тіла [15], і подальшого розвовсюдження теплових потоків усередені твердого тіла завдяки теплопровідності (рис. 2.16) [12].

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

$$\iiint_{V} \rho^{d} \left( C_{v} T \right) / dt \, dV = \iiint_{V} div \, q \, dV \,, \tag{2.86}$$

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

$$q = -\lambda gradT, \qquad (2.87)$$

де  $\lambda$  – коефіцієнт теплопровідності.



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

Застосуємо теорему Остроградського-Гаусса до правої частини рівняння (2.86)

$$\iiint_{V} div (-\lambda grad T) dV = \bigoplus_{\sigma} (-\lambda grad T, \vec{n}) d\sigma, \qquad (2.88)$$

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

Тепловий потік на межі твердої комірки, спряженої із газовою коміркою (рис. 2.17) можна визначити відповідно до закону Ньютона

$$q_w = \alpha \left( T_w - T_e \right) = -\lambda \,\partial T / \partial n \,, \tag{2.89}$$

де  $T_w$  – температура на стінці,  $T_e$  – температура у спряженій газовій комірці,  $\alpha$  – коефіцієнт тепловіддачі.



Рис. 2.17 Розрахункова схема тепловіддачі на межі «газ-тіло»:

1 – газ; 2 – «тверде» тіло

Припустивши однаковий розмір h комірок в усіх напрямках, рівняння (2.89) можна спростити таким чином

$$\alpha (T_w - T_e) \cong -\lambda (T_w - T_0) / h/2. \qquad (2.90)$$

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

$$T_{w} = \left(h\alpha T_{e} + 2\lambda T_{0}\right) / \left(h\alpha + 2\lambda\right).$$
(2.91)

Коефіцієнт температуропровідності для матеріалу твердого тіла з теплоємністю  $C_v$  і щільністю  $\rho$  визначається таким чином

$$a = \lambda / (C_{\nu} \rho). \tag{2.92}$$

Уведемо безрозмірний параметр ТО Ві для комірки (число Біо)

$$\overline{Bi} = (\alpha h) / \lambda \,. \tag{2.93}$$

Тоді співвідношення (2.91) можна привести до зручного вигляду

$$T_{w} = \left(T_{e} \overline{Bi}/2 + T_{0}\right) / \left(\overline{Bi}/2 + 1\right).$$
(2.94)

#### 2.7 Метод представлення розрахункової області

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

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

Поверхні ВО, ПП ЗГ, дискретизуються гранями шару обчилювальних комірок, прилеглих до відповідних поверхонь. Грань комірки рахується поверхнею отвору вентиляції або плями пролиття ЗГ, якщо геометричний центр грані потрапляє до контуру відповідної поверхні.

#### 2.8 Постановка граничних і початкових умов

Під час постановки граничних умов передбачається, що витратна складова

швидкості не перевищує швидкість звуку. Вхідні ГУ будемо задавати на поверхнях тих граней РК, що прилягають до кордонів РП і через які в обчислювальний простір надходить повітря. Вхідними є такі параметри течії:

– повна ентальпія

$$I_{00} = k / (k-1) P / \rho + (u^2 + v^2 + w^2) / 2; \qquad (2.95)$$

– ентропійна функція

$$S_0 = P/\rho^k ; \qquad (2.96)$$

– напрямок вектора швидкості потоку (кутами  $\alpha_x$ ,  $\alpha_y$ ,  $\alpha_z$  до осей координат);

відносна масова щільність ГД *Q*, якщо повітря надходить забруднене
 газоподібною речовиною домішки (0 ≤ *Q* ≤ 1).

Параметри потоку на вході визначаються з рівнянь (9, 10) з урахуванням заданих кутів  $\alpha_x$ ,  $\alpha_y$ ,  $\alpha_z$  із залученням співвідношення для «лівого» інваріанта Рімана [262, 345]. На непроникних ділянках, що обмежують розрахункову область поверхонь, виконуються ГУ «непротікання»  $q_n = 0$ , де  $\vec{n}$  – вектор нормалі до поверхні комірки, що розглядається.

ГУ на виході будемо ставити на поверхнях тих граней РК, які прилягають до кордонів на виході із розрахункової області і через які передбачається витікання ГПС. На виході з області, крім атмосферного тиску  $P_A$ , яке береться, наприклад, з експерименту, використовувалися співвідношення для «правого» інваріанта Рімана [262, 345].

У початковий момент часу розрахунку у всіх «газоподібних» РК розрахункової області задаються параметри навколишнього середовища. У комірках, геометричні центри яких розташовані всередені хмари газоподібної домішки, яка утворилася у результаті залпового викиду, відносна масова концентрація домішки приймається рівною  $Q \le 1 (\le 100\%)$ .

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

На гранях РК, які прилягають до плями аварійного пролиття ЗГ і де передбачається випаровування, або до отворів, з яких очікується СВ ГД, чи потоки механічної вентиляції, задається початкове значення витрати суміші згідно із заданим часовим законом.

## 2.9 Методи оцінки наслідків впливів, спричинених факторами ураження техногенних аварій

Із системного аналізу фізичних процесів, які супроводжують збурення повітряного потоку у приземному шарі атмосфери під час ТА, можна виділити такі основні фактори негативного впливу довкілля: максимальна ІТД для токсичних викидів, УІН від ВУХ і ЩТВ від високотемпературних ПГ. У інженерній практиці найбільш поширеними є детермінований і ймовірнісний підходи до аналізу негативного впливу цих факторів на людину і споруди у зоні навколо епіцентру параметричного збурення.

#### 2.9.1 Негативні фактори впливу під час техногенних аварій

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

ВУХ має характерні параметри, які визначають її вплив на довкілля: максимальний надлишковий тиск Δ*P*<sub>+</sub> щодо атмосферного тиску у фронті хвилі

$$\Delta P_{+} = P_{1} - P_{0}, \qquad (2.97)$$

де  $P_1$ ,  $P_0$ , Па – максимальний і атмосферний тиск та імпульс фази стиснення  $I_+$ , Па с

$$I_{+} = \int_{\tau_{a}}^{\tau_{a}+\tau_{+}} \Delta P \, dt \,, \tag{2.98}$$

де  $\tau_a$ ,  $\tau_+$ , с – час прибуття фронту хвилі, тривалість фази стиснення. Перший параметр визначає ударну складову, другий – інтегрально-імпульсну. У інженерній практиці прогноз наслідків аварійного вибуху полягає у визначенні розмірів зон можливих втрат, ступеня впливу УІН на людину і обладнання.



Рис. 2.18 Типовий профіль вибухової хвилі тиску

Фактором впливу газоподібної ОХР на людину у зоні аварійного викиду є ІТД, отримана під час експозиціїї отруйній хмарі (рис. 2.19). У результаті моделювання руху токсичної ГД у ПША можна отримати часово-просторові функції зміни ВМК домішки Q. Виходячи із припущення, що максимальна концентрація домішки потрапляє до легенів людини, можна обчислити інгаляційну токсідозу D – інтеграл за часом массової концентрації ОХР у повітрі (рис. 2.19) [22]

$$D = \int_{\tau_0}^{\tau_e} Q^n d\tau , \qquad (2.99)$$

де  $\tau_0$  і  $\tau_e$  – час початку і кінця експозиції токсичної газоповітряної суміші (час, за який накопичується ІТД), с;

 Q – часово-просторове значення відносної масової концентрації отруйної хімічної речовини ppm;

*n* – табличний коефіцієнт для ОХР.



Рис. 2.19 Токсодоза інгаляційного ураження людини

Фактором негативного впливу теплового випромінювання є ЩТП [21], максимальне значення якої можно обчислити за результатами математичного моделювання горіння горючої ГД у кисні атмосферного повітря [54]

$$q_{\rm max} = C_0 \left[ \left( T_1 / 100 \right)^4 - \left( T_2 / 100 \right)^4 \right] \left( \Delta F_1 / \left( \pi r^2 \right) \right) \overline{p} , \qquad (2.100)$$

де  $C_0$  – коефіцієнт випромінювання полум'я, кВт/м<sup>2</sup>/К<sup>4</sup>;

*T*<sub>1</sub> – середня температура поверхні, що випромінює, К;

- *T*<sub>2</sub> середня температура поверхні приймача випромінювання, К;
- r відстань від поверхні випромінювання до приймача, м;

 $\Delta F_1$  – площа поверхні випромінювання, м<sup>2</sup>.

#### 2.9.2 Детермінована оцінка наслідків впливу негативних факторів

Згідно з детермінованим підходом вплив негативного фактору обчислюється на основі математичної моделі і його абсолютні значення порівнюються із пороговими діапазонами припустимих значень відповідно до ступенів наслідків впливу.

Уражаючий ефект ВУХ визначається величиною максимального надлишкового тиску у фронті хвилі  $\Delta P_+$ , яку порівнюють з пороговими значеннями для знаходження ступеня ураження (табл. 2.1) [314].

Таблиця 2.1

∆₽+, кПа	Ступінь ураження людини				
< 10	Безпечна				
1040	Легка (забиття, втрата слуху)				
4060	Средняя (кровотечение, вывихи)				
60100	Важка (контузія)				
> 100	Летальний наслідок				

Порогові значення ураження

### 2.9.3 Ймовірнісна оцінка впливу фактора негативного впливу

Значення цих показників у кожній КТ актуального простору можна використовувати для визначення індивідуального ризику ураження персоналу (руйнування споруд). Оцінка ризику шкідливого впливу ушкоджуючих факторів на організм людини у зоні аварії є одним з основних етапів процесу аналізу безпеки та величини загального ризику функціонування ТО (поряд із виявленням небезпечного обладнання, дослідження експлуатаційних загроз, оцінки ймовірності аварії). Оцінка ризику забезпечує можливість зробити висновки про прийнятність ризику та оцінити ефективність захисних споруд та дій персоналу. Імовірність конкретного сценарію розвитку аварії  $P_{\Sigma}$  залежить від статистичної ймовірності виникнення такої аварії  $P_a$  та умовної ймовірності ураження постраждалої людини P, яку можна отримати завдяки математичному моделюванню аварії.

$$P_{\Sigma} = P_a P \,. \tag{2.101}$$

Умовна ймовірність *P* шкідливого впливу ударної хвилі вибуху на людину, залежить від пробіт функції Pr – верхньої межі певного інтеграла нормального закону розподілу із математичним сподіванням 5 та дисперсією 1

$$P_{c} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\Pr} e^{-\frac{1}{2} \left(t-5\right)^{2}} dt, \qquad (2.102)$$

де  $t \in iнтергальним ступенем впливу.$ 

З іншого боку, інтегральну степінь впливу t можна оцінити за допомогою рівняння регресії  $t = a + b f(\vec{x})$ , де  $\vec{x} = \{x_k\}$  – кількісні оцінки уражающих факторів, *a* і *b* – коефіцієнти рівняння регресії. Задаючи верхню межу інтегралу (18) (ПФ  $\Pr = t|_{\vec{x}}$ ), можна визначити умовну ймовірність ураження.

У інженерній практиці фахівці з безпеки працюють із таблицею дискретних значень інтеграла (2.102), візуально оцінюючи ймовірність для конкретного обрахованого значення ПФ для певного ступеня ушкодження (табл. 2.2).

Візуальний пошук ймовірності ураження у таблиці є незручним і не забезпечує можливість використовувати даний апарат інтегрованим у комп'ютерній системі оцінки техногенної безпеки. З метою автоматизації обчислювального процесу аналізу та прогнозування таблицю дискретних значень залежності «ПФ – умовна ймовірність ураження» було замінено кусочно-кубічним ермітовим сплайном (рис. 2.20), узагальненим Ю. К. Чернишевым [248].

Таблиця 2.2

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

Табличні значення ймовірності наслідків впливу



Рис. 2.20 Інтерполяція табличній залежності «ПФ – умовна ймовірність ураження»:1 – таблиця, 2 – сплайн, 3 – обчислена ПФ Pr<sup>\*</sup>, 4 – точка на сплайні, 5 – обчислена умовна ймовірність ураження *P*<sup>\*</sup>

Характеристики такого сплайна дають змогу уникнути можливих коливань апроксимованої функції у проміжках. За потреби обрахувати ймовірність ураження  $P^*$  у заданий момент часу у заданій комірці сітки виконується обрахування параметрів для ФВ і ПФ для цього фактору  $Pr^*$  і звернення до сплайну ймовірності.

Інтегральна ступінь впливу ударної хвилі потребує обох параметрів фази стискання вибухової хвилі (рис. 2.18): максимального надлишкового тиску  $\Delta P_+$  у

фронті хвилі та імпульсу фази стискання *I*<sub>+</sub>. Наприклад, ПФ для летального наслідку для людини, спричиненого ВУХ, можна визначити таким чином [340]

$$Pr_{1} = 5 - 0,26 \ln \left[ \left( \frac{17500}{\Delta P_{+}} \right)^{8,4} + \left( \frac{290}{I_{+}} \right)^{9,3} \right].$$
(2.103)

ПФ для розриву барабанних перетинок у людини залежить тільки від рівня надлишкового тиску і може бути знайдена за формулою [341]

$$\Pr_2 = -15, 6+1,93\ln\Delta P_+. \tag{2.104}$$

ПФ для ураження людини внаслідок впливу інгаляції смертельної токсодози *D* (2.99) ОХР у загальному випадку визначається за такою формулою

$$P_r = A + B \ln(D), \qquad (2.105)$$

де A і B – табличні напівемпіричні коефіцієнти [313].

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

$$\Pr = -14 + 2,56 \ln \left( q^{1,33} \tau \right), \qquad (2.106)$$

де *т* – час експозиції тепловому потоку.

У зазначений момент часу, маючи обраховані у математичній моделі небезпечні параметри і фактори ураження, можна використовуючи формули (2.103)-(2.106), обчислити відповідні ПФ і, звернувшись до сплайну (рис. 2.20), визначити наслідки впливу відповідних факторів у вигляді значення умовної ймовірності ураження (негативного впливу).

### Висновки до розділу 2

1. У роботі вперше розроблено новий клас ефективних тривимірних ММ у вигляді нелінійних початково-крайових задач зі складними ГУ, які відрізняються розрахунковими схемами для моделювання характерних сценаріїв виникнення і руху ГПС у ПША зі складним рельєфом і в системах промислової аеродинаміки, та на відміну від наявних, базуються на запропонованому єдиному підході до моделювання актуальних процесів. Уперше розроблено:

– нестаціонарні ММ розподілу тиску, які, на відміну від наявних використовують нелокальні початкові умови, що забезпечує можливість моделювати такі сценарії БЗ повітря, як «фізичний» вибух (вивільнення стисненого газу) і «хімічний» вибух (миттєва хімічна реакція брутто в області займистості) для оцінювання наслідків впливу ВУХ на довкілля та ефективність ЗЗ від її дії;

 нестаціонарну математичніу модель руху хімічно-реагуючої ГПС зі складними ГУ, яка, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовує розрахункову схему брутто-взаємодії пального та кисню повітря;

нестаціонарну 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;

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

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

4. Удосконалено обчислювальний метод розв'язання задачі розпаду довільного розриву параметрів газу С. К. Годунова, яка, на відміну від оригінальної розглядає взаємодію двох газоповітряних сумішей різної схеми, 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 РК для реалізації інтегро-інтерполяційного обчислювального наскрізного загального методу розв'язання системи інтегральних рівнянь суміші розрахунку для руху розрахунковим простором.

5. Удосконалено обчислювальний метод моделювання СТО газової суміші і твердих тіл, який, на відміну від наявних, використовує розв'язання зв'язаної задачі ТО з умовами сполучення у вигляді ГУ ІІІ роду.

6. Удосконалено обчислювальний метод пробіт-аналізу наслідків впливу основних факторів (надлишкового тиску, імпульсу первинної фази стискання ВУХ, щільності теплового випромінювання) на довкілля, у якому на відміну від існуючих, табличну залежність умовної ймовірності ураження від пробіт-функції замінено кусково-кубічним сплайном, що забезпечило зниження на порядок часової складності розробленого методу прогнозу наслідків впливу викидів техногенного об'єкту на довкілля та пошуку ефективних засобів його захисту.

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

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

## РОЗДІЛ З РОЗРОБКА СТРУКТУРИ ПРОГРАМНОГО ЗАСОБУ КОМП'ЮТЕРНОЇ РЕАЛІЗАЦІЇ МОДЕЛІ ІНЖЕНЕРНОГО АНАЛІЗУ ПРОЦЕСІВ ВИКИДУ, РОЗСІЮВАННЯ І ВИБУХУ ГАЗОПОДІБНИХ ДОМІШОК В АТМОСФЕРІ

У третьому розділі досліджуються стадії розробки структури засобів прикладної інформаційної технології інженерного аналізу процесів потрапляння у повітря і розповсюдження у приземному шарі атмосфери ГД. Надаються основні етапи узагальненого алгоритму системного моделювання руху багатокомпонентної газової суміші з урахуванням обміну теплом і масою. Розглянуто формалізоване уявлення і призначення САЕ-системи. Надано структуру програмного засобу. складові технології розробки САЕ-системи. Спроектовано Надано основні комп'ютерну інформаційну технологію із застосуванням IDEF методології. Розроблено IDEF0 загальну контекстну діаграму, яку деталізовано до основних функціональних процесів у IDEF0 методології. Подальшу деталізацію процесів зроблено засобами IDEF3 методології для виявлення послідовності основних робіт програмного засобу. Потоки даних у інформаційній системі проведено засобами DFD методології. Розглянуто перспективи і поточне застосування засобів організації паралельних обчислень для прискорення розв'язання поставлених проблем дослідження. Об'єктно-орієнтовану класову ієрархію комп'ютерної системи спроектовано за допомогою мови UML засобами Rational Rose. Проведено аналіз сучасних мов програмування для реалізації інформаційної системи у вигляді програмного засобу комп'ютерної реалізації системної математичної моделі.

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

газової суміші.

# 3.1 Узагальнений алгоритм системного моделювання руху сумішей, з урахуванням тепломасообміну

Векторне рівняння (1) є наслідком законів збереження маси, їмпульсу і енергії суміші, які можуть бути представлені в інтегральної формі для кожної РК [1]

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V} a \, dV + \bigoplus_{\sigma} \hat{A} \, d\sigma = \iiint_{V} \rho f \, dV \,, \tag{3.1}$$

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

Закон перенесення кожної компоненти суміші (8) може бути також представлений в інтегральній формі для кожної РК [3]

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_{V} \rho Q_{i} \, dV + \bigoplus_{\sigma} \rho Q_{i} q \, d\sigma = \iiint_{V} \left( \rho_{Q_{it}} + \rho_{Q_{is}} \right) dV \,. \tag{3.2}$$

Під час чисельного моделювання поширення газоподібних домішок у атмосфері розрахункова область  $\Omega$  розбивається трьома родинами поверхонь з кінцевою кількістю елементарних об'ємів (обчислювальних комірок). Визначимо локацію ровузлів зрахункової комірки трійкою індексів (*i*, *j*, *k*), причому індекси граней комірок змінюються у таких межах:  $i \in [0, L]$ ;  $j \in [0, M]$ ;  $k \in [0, N]$ , де L, M, N – кількість обчислювальних комірок у відповідних напрямках розрахункового простору. Кожному параметру течії і комірки буде відповідати трійка напівцілих чисел (*i* -  $\frac{1}{2}$ , *j* -  $\frac{1}{2}$ , *k* -  $\frac{1}{2}$ ), а потокам маси, імпульса і енергії скрізь кожну грань – одне ціле (грань, нормаль до якої має напрямок відповідної осі)) і два напівцілих числа.

Згідно методу С. К. Годунова [262, 263] для побудови різницевої схеми застосуємо інтегральні закони збереження (3.1, 3.2) до елементарного об'єму комірки з номером ( $i - \frac{1}{2}$ ,  $j - \frac{1}{2}$ ,  $k - \frac{1}{2}$ ). Параметри суміші газів для фіксованого часу  $t^n$  усередині кожної комірки вважаються постійними, усередненими за її об'ємом. Під час обчислення відповідних поверхневих інтегралів вважалося, що «великі» потокові величини на гранях є незмінними протягом кроку за часом  $\tau$  і обраховуються розв'язанням задачі розпаду довільного розриву параметрів газу. Сукупність газодинамічних параметрів у всіх комірках розрахункової області у момент часу  $t^n$  є відомим розв'язком у часовому шарі з індексом *n*. Газодинамічні параметри у момент часу  $t^{n+1} = t^n + \tau$  (у часовому шарі n+1) розраховувалися за допомогою застосування явних різницевих апроксимацій для співвідношень (2.5, 2.6) у межах загального інтегро-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку [262], згідно якого розв'язок знаходиться за схемою

$$\vec{a}_{i-1/2,j-1/2,k-1/2}^{n+1} = \vec{a}_{i-1/2,j-1/2,k-1/2}^{n} - \tau [(\hat{A}\vec{\sigma})_{i-1,j-1/2,k-1/2} + (\hat{A}\vec{\sigma})_{i-1,j-1/2,k-1/2} + (\hat{A}\vec{\sigma})_{i-1/2,j-1/2,k-1/2} + (\hat{A}\vec{\sigma})_{i-1/2,j-1/2,k-1/2} + (\hat{A}\vec{\sigma})_{i-1/2,j-1/2,k-1/2} + (\hat{A}\vec{\sigma})_{i-1/2,j-1/2,k-1/2} + \tau (\rho \vec{f})_{i-1/2,j-1/2,k-1/2},$$

$$(\hat{A}\vec{\sigma})_{i-1/2,j-1/2,k-1} + (\hat{A}\vec{\sigma})_{i-1/2,j-1/2,k}] / V_{i-1/2,j-1/2,k-1/2} + \tau (\rho \vec{f})_{i-1/2,j-1/2,k-1/2},$$
(3.3)

$$(\rho Q)_{i-1/2,j-1/2,k-1/2}^{n+1} = (\rho Q)_{i-1/2,j-1/2,k-1/2}^{n} - \tau [(\rho Q \vec{q} \vec{\sigma})_{i-1,j-1/2,k-1/2} + (\rho Q \vec{q} \vec{\sigma})_{i,j-1/2,k-1/2} + (\rho Q \vec{q} \vec{\sigma})_{i-1/2,j-1/2,k-1/2} + (\rho Q$$

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

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

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

т – трійка чисел, що визначає бічну грань комірки з номером

 $(i - \frac{1}{2}, j - \frac{1}{2}, k - \frac{1}{2}).$ 

За аналогією з [262] вирази для потоків векторів і тензорів через бічні грані елементарного об'єму будемо називати «великими» параметрами, тоді як параметри течії в об'ємних розрахункових комірках – «малими». Тобто, відповідно до рівнянь (1.1) для визначення малих величин  $(\vec{a}, Q)^{n+1}$  у момент часу  $t^{n+1}$  для комірки з номером ( $i - \frac{1}{2}$ ,  $j - \frac{1}{2}$ ,  $k - \frac{1}{2}$ ) необхідно знати малі величини  $(\vec{a}, Q)^n$  у момент часу  $t^n$  у цій же РК і великі величини цих параметрів на бічних гранях розглянутої РК.

Чисельне розв'язання основних рівнянь грунтується на використанні схеми розпаду довільного розриву параметрів газу. Рівняння (30, 31) допускають виникнення і існування поверхонь розриву трьох видів: ударних хвиль, контактних поверхонь і хвиль розрідження. Функції, що задовольняють рівнянням (30, 31), можна розглядати в якості узагальнених розв'язків рівнянь газової динаміки. Використання інтегральних законів збереження маси, імпульсу, енергії і концентрації ГД в якості вихідних для побудови різницевих рівнянь забезпечує побудову розривних рішень без відокремлення розривів.

На першому етапі безперервний розподіл параметрів замінюється кусочнопостійними середньо-інтегральними значеннями у кожній РК. При цьому межі комірки є нестійкими поверхнями довільного розриву, які розпадаються на стійкі хвильові елементи: УХ, контактну поверхню і ХР. Для кожного типу такого розриву визначаються кількість маси, імпульсу і енергії ГПС, що перетинає грань між сусідніми комірками.

Стійкість кінцево-різницевої схеми забезпечується за рахунок вибору величини кроку за часом *τ*. Для газової комірки цей крок інтегрування *т* визначався із умови стійкості різницевої схеми для лінеаризованої системи рівнянь [10]

$$\tau \leq \tau_x \tau_y \tau_z / \left( \tau_x \tau_y + \tau_y \tau_z + \tau_x \tau_z \right), \tag{3.5}$$

де  $\tau_x$ ,  $\tau_y$ ,  $\tau_z$  – часи, за які звукові хвилі досягають відповідні грані сусідніх комірок.

На відміну задачі установлення, коли для кожної комірки розраховуються і використовуються свої індивідуальні часові кроки згідно з формулою (2.13), нестаціонарна задача, що розглядається потребує єдиного для усіх комірок розрахункової області часового кроку, значення якого розраховується як мінімальне значення з часових кроків усіх комірок на попередньому часовому шарі.

Для твердої комірки з розмірами  $h_x$ ,  $h_y$  і  $h_z$  уздовж осей координат умова стійкості кінцево-різницевої схеми виглядає таким чином

$$2a\tau \le 1/(1/h_x^2 + 1/h_y^2 + 1/h_z^2).$$
(3.6)

У такому випадку безпечний з точки зору неруйнування обчислювального процеу крок за часом для явної кінцево-різницевої схеми розрахунку можна визначити з співвідношення [12, 15]

$$\tau \le 1 / \left( 2a \left( 1/h_x^2 + 1/h_y^2 + 1/h_z^2 \right) \right). \tag{3.7}$$

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

Запропонований алгоритм чисельного моделювання змішування і руху суміші газів описує процес поширення у просторі з часом газоподібних токсичних і вибухонебезпечних речовини у приземному шарі атмосфери, забезпечує можливість аналізувати поля температури, тиску і концентрації домішок в означеному об'ємі, прогнозувати зони негативного впливу на довколишнє середовище небезпечних факторів, які формуються у зоні аварійного викиду цих речовин.

#### 3.2 Технологія розробки САЕ-системи

#### 3.2.1 Проектування комп'ютерної системи засобами IDEF методології

Базовою методологією проектування сучасних інформаційних систем є методологія IDEF0 [319], метою застосування якої є визначення вимог і відокремлення функцій системи, яка розробляється. За результатами використання IDEF0 з'являється модель цієї системи у вигляді ієрархічно-впорядкованого комплекса діаграм, які зв'язані за допомогою перехресних посилань. Найбільш важливими компонентами такої моделі є роботи, у вигляді прямокутників, і дані та об'єкти, зображені стрілками, які пов'язують роботи. Головна діаграма (контекстна) в ієрархії моделі уособлює функціонування системи загалом (рис. 3.1а).

До контестного змісту першої діаграми долучають загальний опис мети моделювання, область (опис того, що буде розглядатися компонентом системи та зовнішнім впливом) і точка зору, з якої будується модель. Вихідними даними для системи будуть параметри незбуреного стану повітря, геометричні характеристики непроникних для повітря об'єктів підприємства та варіант сценарію збурення навколишнього середовища. Управляючими параметрами для системи будуть мапа об'єктів і рельєфу місцини підприємства, банки кліматичних даних, нормативні документи, які регламентують безпечне функціонування техногенного об'єкту. У якості механізмів можна розглядати саму інформаційну систему, експерта з питань безпеки та керівника ТО. За результатами роботи інформаційної системи експерт оцінить наслідки негативного збурення повітряного середовища і розробить рекомендації підвищення рівня безпеки для керівництва підприємства.

Після більш детального опису контесту застосовується функціональна декомпозиція системи на підсистеми з використанням того ж синтаксису (рис. 3.16).

Подальшу декомпозицію системи проведемо у нотації IDEF3 (прямокутники – функції, роботи, процеси, а стрілки – послідовність виконання функцій).





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

IDEF3 є засобом опису процесів з використанням структурованого методу, який дає змогу спеціалісту у предметній області репрезентувати стан речей у вигляді впорядкованої послідовності подій поряд з одночасним описом об'єктів, які мають безпосереднє відношення до процесу. Така логічна послідовність подій, пов'язаних з розрахунком кінцево-різницевої сітки, зображена на рис. 3.2а. Використовуючи дані, які уведені експертом, та інформацію про колекцію об'єктів на мапі підприємства, проводиться рівномірна дискретизація габаритних розмірів простору уздовж напрямів тривимірної системи координат. Отримані координати формують вершини РК у формі паралелепипедів. Для кожної РК обраховуються площі граней та іх проекцій на відповідні площини декартової системи координат, координати геометричного центру, об'єм, які є незмінними властивостями об'єкту комірки.

Логічна послідовність взаємодії інформаційних потоків у нотації більш детального опису контесту застосовується функціональна декомпозиція системи на підсистеми із використанням того ж синтаксису (рис. 3.26-3.36).

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

#### 3.2.2 Проектування комп'ютерної системи засобами «Rational Rose»

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



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



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

Уніфікована мова UML дозволяє виразити і фіксувати ідеї, роздуми над архітектурою майбутнього застосунку і поведінкою комп'ютерної системи, які виникли під час аналізу. UML є системою позначень, яку можна застосовувати для об'єктно-орієнтованого аналізу і проектування [315]. UML використано для візуалізації, специфікації, конструювання та документування програмних продуктів комп'ютерних систем. Зазвичай, модель UML визначає комплекс наступних графічних діаграм:

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

Під час аналізу і розробки цей комплекс діаграм надає множинне уявлення, колекцію видів системи, яка проектується. Модель UML інтегрує усі ці види таким чином, що внутрішньо-узгоджену комп'ютерну інформаційну систему можна проаналізувати і побудувати.

#### 3.2.3 Побудова діаграми варіантів використання

Діаграми варіантів використання є послідовністю дій, які виконуються системою у відповідь на подію, що ініціюється зовнішнім об'єктом (дійовою особою –користувачем). Варіанти використання надають уявлення типової взаємодії між користувачем і системою, описують, що повинна буде робити система. Однак, щоб фактично розробити систему, належить надати більш конкретні деталі, які описуються у документі «потоку подій». Основною метою потоку подій є документування процесу обробки даних, який є реалізованим у межах варіанту використання. Цей документ детально описує як дії користувача системи, так і дії самої системи. Хоча потік подій і описується докладно, він також не повинен залежати від реалізації, бо його метаою є опис того, що буде робити система, а не як вона буде робити це. Зазвичай потік подій містить наступне: стислий опис, передумови, основний потік подій, альтернативний потік подій та післяумови.

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

Також було відокремлено наступні варіанти використання.

1. Прецедент «Увести вихідні дані».

Передумовою є факт попереднього запуску застосунку на виконання.

Розглядаються наступні потоки:

a) основний (інженер стає об'єктом запиту на значення вихідних параметрів розрахунку, які він повинен увести у відповідні вікна редагування застосунку);

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

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

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

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

Розглядаються наступні потоки:

 а) основний 1 – базовий розрахунок основних параметрів потоку згідно математичної моделі руху суміші у просторі;

б) потоки помилок – збій в роботі застосунку (виводиться повідомлення про виключну ситуацію і обробка виключення).

Післяумовою є виконання певної за часом частини обчислення.

3. Прецедент «Розрахунок ймовірності наслідків» є обчисленням показників
ймовірних наслідків впливу параметрів збуреного потоку суміші на людину і споруди на основі пробіт-аналізу.

Передумовою є накопичення інформації про інтегральні за часом значення основних факторів впливу на стан довкілля в актуальному просторі ПША.

Розглядаються наступні потоки:

a) основний 1 – базовий розрахунок пробіт-функції для наслідків можливого негативного впливу відповідних факторів згідно формул пробіт-аналізу;

б) основний 2 – обчислення умовної ймовірності можливих наслідків на довкілля на основі отриманих в основному потоці 1 пробіт-функцій;

в) потоки помилок – збій в роботі застосунку (виводиться повідомлення про виключну ситуацію і обробка виключення).

Післяумовою є виконання певної за часом частини обчислення.

Діаграму використання для даного проекту наведено на рис. 3.4а.

#### 3.2.4 Побудова діаграми діяльності

Варіанти використання лише починають описувати, що повинна буде робити система. Фактична розробка системи, однак, потрібує більш детальної конкретизації. Діаграми варіантів використання є відображенням лише набору функцій комп'ютерної системи, але послідовність їх виконання залишається невизначеною. З метою уявлення процесів взаємодії користувачів з системою розробникам треба застосовувати діаграми діяльності, які відображають взаємний зв'язок і порядок виконання функцій системи, яка проектується (рис. 3.6, 3.4в).

## 3.2.5 Побудова діаграми класів системи

Діаграма класів є основною ланкою об'єктно-орієнтованих методів проектування сучасного застосунку, призначеного для обчислення руху газових сумішей в атмосфері. Діаграма класів визначає типи класів системи і різного роду

статичні зв'язки, які поєднують їх. Діаграма класів є тим місцем, де відображено атрибути класів, операції класів та обмеження доступу, які накладаються на зв'язки між класами. Діаграма класів відображає взаємодію між класами.

Класи можна розглядати як типи користувача об'єктів. Згідно з принципом інкапсуляції класи містять змінні, які описують поточний стан об'єкту і функції (методи), які відображають його поведінку. Діаграма класів засобами таких CASEінструментів, як середовище Rational Rose, може бути основою для побудови реального коду застосунку – його каркасу, який у подальному заповнюється розробниками реалізацією конкретних обчислень обраною мовою програмування. Користуючись діаграмою класів, аналітики можуть показати конкретні деталі системи, а архітектори – зрозуміти її на стадії проектування. Діаграмма класів допоможе виявити несбалансованість функціонального навантаження між класами і перерозподілити його оптимальним чином.

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

Існують три різних точки зору на побудову діаграм класів:

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

специфікаційна (на рівні програмного забезпечення розглядаються тільки інтерфейси без програмної реалізації);

реалізаційна (модель визначає реалізацію класів).

Під час побудови діаграми точка зору повинна бути ясною і єдиною. Відповідно цієї вимоги будемо триматися специфікаційної точки зору, маючи на функціональну таблицю можливостей кожного класу. З іншого боку, побудова діаграми класів на стадії формування вимог до програмного засобу комп'ютерної реалізації повинна виконуватися з концептуальної точки зору, бо треба визначити класи, які будут розв'язувати математичну модель, займатися уведенням вихідних і початкових даних, візуалізувати проміжні та фінальні результати обчислення, контролювати хід виконання і координувати функціонування усіх класів застосунку.



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

Не уникнути часткової відповідності й реалізаційної точки зору, бо технологія реалізації застосунку вимагає конкретної структури класів. Тим паче, що конструкції UML можна використовувати з будь-якою з трьох точок зору.

Зазвичай класи розділяються на категорії із використанням спеціального механізму стереотипів. Мові UML визначає три основні стереотипи класів: пограничні (класи, які межують між системою і навколишнім середовищем), сутнісні (класи, які містять постійну інформацію) і керуючі (класи, які відповідають за координацію дій інших класів).

Попередньо маючи на увазі застосування технології Майкрософт «Документ-Вигляд» і однодокументного шаблону застосунку та базуючись на обраній змішаній точці зору проектування, під час аналізу предметної області були виявлені наступні основні класи [347]:

– «Застосунок» (CFirApp), який забезпечує базову функціональність об'єкта, який побудовано на однодокументному шаблоні за технологією «Документ-Вигляд», який координує роботу класів Документа (CFirDoc), Вида (CFirView) і головного вікна застосунку (CMainFrame). Клас є похідним від класу САрр стандартної бібліотеки класів MFC (Microsoft Foundation Classes);

– «Головна рамка» (CMainFrame) забезпечує функціонування інтерфейсу користувача (меню команд, панель інструментальних кнопок, вікно Виду для візуалізації), є похідним від класу CFrame бібліотеки MFC;

– «Вихідні дані» (СМуРгорегtySheet) описує усі вихідні дані (параметри потоку і розрахункової області), які необхідні для початку розрахунку. Успадковує клас CPropertySheet бібліотеки MFC, який забезпечує можливості уведенню вихідних даних, які функціонально згруповані і містяться на окремих сторінках властивостей;

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

– «Візуалізація» (CFirView) є класом Виду, який за технологією Microsoft

реалізує відображення результатів основного розрахунку (поля параметрів, графіки) у своєму єдиному вікні, яке міститься у вікні «Головної рамки». Успадковує клас CView бібліотеки MFC. Загальну діаграму класів проекту наведено на рис. 3.5а. Групу «Вихідні дані» репрезентує клас CMyPropertySheet, він виконується після команд класу CFirDoc або CFirView, із застосуванням графічного інтерфейсу у вікні CMainFrame. Група «Алгоритм» є уособленням класу Документа CFirDoc, який відповідає за розрахунок і зберігання важливих даних математичної моделі. Група «Результати розрахунку» представлена безпосередньо класами Документу CFirDoc, який містить усі масиви параметрів потоку і сериалізує дані на диск, Виду CFirView, який виводить поля і графіки параметрів потоку у своє вікно.

Опис основних класів із специфікаційної і, частково, концептуальної і реалізаційної точок зору представлено на рис. 3.56.

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

#### 3.2.6 Вибір мови програмування

Під час вибору мови програмування було взято до уваги необхідність об'єктно-орієнтованого підходу до розробки програмного забезпечення, підтримку мови популярними інтегрованими середовищами програмування, вимогами замовників, відповідністю мови до паралелізації обчислення, та ін. Якщо розглянути статистику використання мов програмування останніми роками (рис. 3.6) і результати опитування програмістів їх рівнем задоволенності обраною мовою програмування (рис. 3.7), то зрозуміло, що найбільш популярними є Java і С-подібні об'єктно-орієнтовані мови програмування [316].



Рис. 3.5 Діаграми застосунку: а – загальна; б – класів; в – станів Опис основних класів із специфікаційної і, частково, концептуальної і



Рис. 3.6 Рейтинг використання мов програмування



Рис. 3.7 Діаграма задоволеності мовами програмування

Виходячи з огляду найбільш розповсюджених і популярних серед програмістів мов, і, зважаючи на специфіку математичної моделі фізичних процесів, що розглядаються, було знайдено низку переваг мови С++.

1. Якщо інфраструктуру проекту вже утворено, основні підходи і бібліотеки обрано, швидкість розробки мовою С++ майже однакова у порівнянні з популярними Java і С#.

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

3. Зручність налагодження коду у середовищі Microsoft Visual Studio.

4. Синтаксис С++ традиційно вважається простим і лаконічним.

5. Система проектування програмного забезпечення Rational Rose має можливість безпосередньо утворювати каркас застосунку мовою C++ за результатами проектування.

6. Найбільш відомі і популярні системи інженерного аналізу руху газових сумішей в атмосфері (наприклад, FLUENT) надають можливість користувачеві робити додаткові вставки коду C++.

7. Є можливість використання технології архітектури Microsoft «Документ-Вигляд» із застосуванням бібліотеки основних класів MFC.

Зважаючи на перелічені переваги, було вирішено обрати мову програмування Visual C++ [348].

# **3.3** Організація паралельних обчислень нестаціонарних задач газової динаміки

Існує безліч задач, розв'язання яких вимагає величезних витрат часових ресурсів процесора електронно-обчислювальної техніки. До таких задач відносяться і нестаціонарні тривимірні задачі газової динаміки, зокрема задачі екології атмосфери, які розглядають процеси формування, подальшого розсіювання і горіння ГД у приземному шарі атмосфери з урахуванням складного рельєфу місцевості, що виникають внаслідок техногенних аварій (пролиття зрідженого токсичного газу з ємності зберігання та його випаровування, залповий викид стисненого газу у результаті руйнування балонів високого тиску, вибух пального з утворенням токсичного хмари та інші.). Внаслідок того, що процес розрахунку займає досить тривалий час, виникає необхідність скоротити його будь-яким чином для розв'язання поставленої інженерної задачі за практично прийнятні терміни. Одним із засобів зменшення витрат часу на обчислювальний експеримент є організація паралельних обчислень. У даній роботі було розроблено ефективний алгоритм паралельного розрахунку нестаціонарних задач газової динаміки і реалізація його

стосовно математичної моделі процесу розсіювання домішкових газів у атмосфері.

#### 3.3.1 Аналіз технологій розпаралелення розрахунку

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

Однак розподіл обчислювального навантаження на окремі комп'ютери мережі вимагає додаткових зусиль з синхронізації виконуваних розрахунків у клієнтській частини програми і неминуче пов'язане з проблемами передавання великих обсягів інформації між серверами і клієнтами під час поділу загальних даних. Цих недоліків позбавлені підходи, пов'язані із використанням багатопроцесорних комп'ютерів [298], оскільки загальні дані розташовуються в єдиній оперативній пам'яті і відсутня передача мережею. Але такого роду високопродуктивна обчислювальна техніка (мульти-комп'ютери Silicon Graphics, Cray T3D, Cray T3E, IBM SP2 і ін.) все ще є надзвичайно коштовною і не має широкого вжитку в інженерній практиці більшості науково-технічних організацій і навчальних закладів [14, 27].

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

Після випуска .NET 4.0 у розпорядженні розробника з'явився цілий набір інструментів паралельного програмування (клас Parallel, паралельні конструкції задач, паралельні колекції), який називається PFX (Parallel Framework) [300]. Клас Parallel і паралельні конструкції складають бібліотеку TPL (Task Parallel Library), яка входить в ядро мови програмування Visual C# (версії 4.0 і пізніше). Загальна схема побудови паралельного застосунку полягає у наступному (рис. 3.8):

- розбиття обчислювального навантаження на частини;

- виконання цих частин паралельно за допомогою потоків;

 об'єднання результатів після того, як вони стають доступними, з урахуванням безпеки потоків.



Рис. 3.8 Загальна схема побудови паралельного застосунку

З огляду на вимоги тривимірного розрахунку задачі газової динаміки, а також враховуючи такі переваги багато-потокового програмування з використанням інфраструктури PFX, як убудованість основних інструментів в ядро мови програмування С#, полегшені можливості з синхронізації потоків і розподілу даних, можливість реалізувати цю технологію на персональних комп'ютерах із багатоядерними процесорами, які набувають все більшого поширення, було зроблено висновок про необхідність застосування багатозадачної технології із застосуванням засобів бібліотеки TPL, як найбільш придатною для розв'язання поставленої завдачі.

# 3.3.2 Особливості математичної моделі руху суміші газів стосовно паралелізації розрахунку

Для порівняльного обчислювального експерименту, що дає змогу оцінити ефективність розробленої технології паралельного розрахунку, використовувалася математична модель формування і розсіювання газоповітряної суміші у призеному шарі атмосфери [33]. Передбачається, що основним фактором, що впливає на розглянуті фізичні процеси, є конвективний перенос маси, імпульсу і енергії. Використовуються спрощені рівняння Нав'є-Стокса, які отримані відкиданням в'зких членів у рівняннях руху газової суміші (Ейлерів підхід з джерельними членами).

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



Рис. 3.9 Схема розподілу обчислювального простору на підобласті

Комп'ютерне розв'язання системи фундаментальних рівнянь газової динаміки

для суміші, доповненої законами збереження маси домішок в інтегральної формі, отримується явним інтегро-інтерполяційним обчислювальнийм методом наскрізного розрахунку [262]. Для апроксимації рівнянь Ейлера застосовується кінцево-об'ємна схема першого порядку. Центральні різниці другого порядку використовуються для дифузійних джерельних членів у рівняннях збереження домішок. Проста інтерполяція тиску застосовується у вертикальному напрямку. Модифікований метод Годунова характеризується робастним алгоритмом, стійким до великих збурень параметрів потоку (наприклад, тиску).

### 3.3.3 Алгоритм паралельного розрахунку

Потоки маси, імпульсу, енергії і концентрації домішки через спільні грані підобластей є розподіленими даними читання-запису, тому щоб уникнути проблем із синхронізацією будемо обчислювати ці дані незалежно для кожної підобласті з урахуванням невеликої втрати ефективності алгоритму. В даному випадку спільними даними читання є газодинамічні параметри у комірках, які прилягають до кордонів між підобластями, і синхронізація для доступу до них не потрібна.

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

З урахуванням припущень і спрощень загальний алгоритм нестаціонарного розрахунку руху газу у глобальній розрахункової області можна представити у вигляді наступних формальних блоків (Додаток В):

 – розрахунок геометричних параметрів глобальної сітки, причому кількість комірок уздовж осі ОZ має бути кратною кількості подобластей KML; ініціалізація газодинамічних параметрів глобальної сітки;

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

MinTimeSteps = new double[KML];

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

while (t < TimeStop) {...};</pre>

– формування і запуск задач для паралельного розрахунку течії у поточний момент часу у кожній nm-й подобласти з наявних KML подобластей за допомогою паралельного циклу Parallel.For з бібліотеки TPL. Тілом кожної задачі є виклик функції FlowSubDomain(), яка приймає додатково в якості параметрів крок за часом dt, поточний час t, діапазон комірок L1-L2 поточної подобласти уздовж осі OZ:

Parallel.For(0, KML, nm => {

MinTimeSteps[nm] = FlowSubDomain(dt, t, L1, L2, nm); }

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

dt = kfl \* FindMinDT();

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

t = t + dt;

завершення основного циклу за часом t (заданий час закінчення розрахунку
 TimeStop минув);

- виведення результуючих газодинамічних параметрів розрахунку.

#### 3.3.4 Апробація розробленої технології паралельного розрахунку

Запропонований алгоритм був реалізований у вигляді програми розрахунку на мовою С#. Тестування аплікації та аналіз ефективності паралельного алгоритму проводились з використанням чотирьохядерного процесору для прикладу розсіювання сферичної хмари водню радіусом 4 м з координатами центру x = 5 м, y = 5 м, z = 10,5 м у розрахунковій області з габаритами  $10 \times 10 \times 180$  м і двома варіантами за кількістю обчислювальних комірок уздовж координатних осей  $10 \times 10 \times 180$  і  $10 \times 10 \times 300$ . Час розсіювання становило 10 с, а ШВ на вході у розрахункову область була 15 м/с. Глобальна розрахункова область розбивалася відповідно на 1-4 подобластей для кожного варіанта обчислювальної сітки.

Прискорення *S<sub>p</sub>*, що отримується під час використання паралельного алгоритму для *p* процесорів (ядер процесора), у порівнянні із послідовним варіантом виконання обчислень визначається таким чином

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

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

Результати обчислювального експерименту представлено на рис. 3.10, 3.11.

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

В обох варіантах розбивання області присутнє вирівнювання залежностей зі збільшенням кількості підобластей – криві прагнуть до асимптот. Таку поведінку

можна пояснити збільшенням «накладних витрат», пов'язаних з додатковими витратами часу на утворення і видалення все більшої кількості робочих потоків на кожному часовому шарі і необхідною роботою з синхронізації їх функціонування. Розрахунок ефективності алгоритму дає ідентичні результати для обох варіантів обчислювальної сітки (рис. 3.11). Ефективність зростає зі збільшенням кількості підобластей простору [27].



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

Таким чином, розроблений алгоритм паралельного розрахунку нестаціонарної тривимірної задачі руху газової суміші у багатозв'язній області на основі інтегрованої в ядро мови програмування Visual C# технології паралельних потоків забезпечує можливість організувати паралельні обчислення в окремих підобластях, на які розбивається глобальна розрахункова область, і істотно знизити час розрахунку на комп'ютерах із багатоядерними процесорами. Для реалізації алгоритму використовується концепція багатозадачності, що припускає розподіл всієї розрахункового навантаження за окремими задачами, які відповідальні за Синхронізація розрахунок y своїй підобласті. розрахунків y підгалузях використанням паралельних циклів класу Parallel бібліотеки забезпечується

паралельних потоків TPL мови С# [27].



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

## Висновки до розділу 3

1. На основі запропонованої математичної моделі створено програмний засіб комп'ютерної реалізації FIRE® інженерного аналізу і прогнозу газодинамічних процесів руху хімічно реагуючих газів в атмосфері. Вона забезпечує можливість прогнозувати зміну надлишкового тиску, температури, концентрацій домішки і продуктів згоряння та інших термо- і газодинамічних параметрів компонент суміші у часі і просторі. Результати прогнозу дає змогу використовувати для оцінки зон максимального впливу збурення повітря ТО на конструкції виробничих приміщень і обслуговуючий персонал внаслідок аварійного навантаження (ударної хвилі, токсодози і високої температури продуктів згоряння).

2. Досліджено стадії розробки структури програмного засобу комп'ютерної реалізації системної моделі інженерного аналізу процесів потрапляння у повітря і

розповсюдження у приземному шарі атмосфери газоподібних домішок. Надано основні етапи узагальненого алгоритму системного моделювання руху багатокомпонентної газової суміші з урахуванням хімічної реакції, обміну теплом і масою. Розглянуто формалізоване уявлення і призначення САЕ-системи. Надано структуру програмного засобу та наведено основні складові технології розробки САЕ-системи. Спроектовано програмний засіб підтримки прийняття рішення із застосуванням IDEF методології. Розроблено IDEF0 загальну контекстну діаграму, яку деталізовано у IDEF0 методології основні функціональні процеси. Подальшу деталізацію процесів зроблено засобами IDEF3 методології для виявлення послідовності основних робот системи. Потоки даних в інформаційній системі проведено засобами DFD методології.

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

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

# РОЗДІЛ 4 АНАЛІЗ ОСОБЛИВОСТЕЙ ПРОЦЕСІВ ВИКИДУ І ПОШИРЕННЮ ГАЗОПОДІБНИХ СУМІШЕЙ У ВІДКРИТОМУ ПРОСТОРІ ЗІ СКЛАДНИМ РЕЛЬЄФОМ МІСЦЕВОСТІ

Розділ присвячено аналізу особливостей процесів викиду і розповсюдження ГД у відкритому просторі зі складним РМ [3]. Розглянуто основні особливості чисельного моделювання процесу СВ різної інтенсивністі ГД в атмосферу. Проведено аналіз чисельного моделювання процесу випаровування зрідженого газу з поверхні ПП у повітря приземного шару атмосфери. Розглянуто особливості моделювання миттєвого викиду стисненого хімічно неактивного газу (фізичного вибуху) у приземний шар атмосфери [6]. Проаналізовано чисельне моделювання миттєвого викиду стисненого хімічно неактивного газу (фізичного вибуху) у приземний шар атмосфери [6]. Проаналізовано чисельне моделювання миттєвого вибуху ГПС з урахуванням хімічної взаємодії. Розглянуто особливості моделювання дефлаграційного горіння ГПС у повітрі приземного шару атмосфери. Зроблено аналіз чисельного моделювання процесу переходу дефлаграційного горіння газокисневої суміші у детонацію [8]. Проаналізовано особливості чисельного моделювання впливу водяної завіси на процес вибуху метано-повітряної суміші у присутності вугільного пилу.

# 4.1 Верифікація і валідація математичної моделі тепломасопереносу під час руху багатокомпонентної суміші

З метою оцінки якості запропонованих моделей і їх продуктивності в інженерній практиці, для опису діяльності, спрямованої на демонстрацію адекватності чисельних моделей, довіри до результатів їх використання поведено їх верифікацію і валідацію.

#### 4.1.1 Методи верифікації і валідації математичних моделей

Перевірка коректності адекватності розробленої розрахункової моделі

проводилася за процедурою верифікації і валідації моделі [318], запропонованою міжнародною ассоціацією спеціалістів з інженерного моделювання, аналізу і симуляції NAFEMS і американською спілкою інженерів-механіків ASME. Відповідно цієї процедури послідовно утворюється розрахункова схема і два різновида моделей – математична (математичне уособлення реального об'єкта) і чисельна (компьютерна реалізація об'єкта у наближеному до алгоритмічного опису вигляді, який долучає набір даних (класів), що характеризують властивості і поведінку об'єкта) [318].

Використовувалися верифікація (установлення рівня відповідності чисельної і математичної моделі в області математики) і валідація (процес визначення відповідності розрахункової моделі реальному об'єкту у межах її використання). Згідно з процедурою верифікації [318], алгоритмічна схема якої представлена у Додатку Б, проводилася верифікація компьютерного коду з метою коректності роботи математичної моделі і алгоритму чисельного розв'язання відповідних систем рівнянь і верифікація обчислень з метою перевірки коректності дискретизації РП і відповідності дискретного розв'язку з необхідною точністю MM.

#### 4.1.2 Статистичні показники ефективності математичних моделей

У роботі [92] відокремлено десять основних кількісних статистичних показників ефективності, які є уособленням різних підходів і методів, що використовуються під час оцінювання якості моделей дисперсії ГД. У роботі [317], яку присвячено огляду методів оцінки ефективності моделей аналізу якості атмосфери, розглядається шість показників із попередньої групи, їх визначення, ідеальні і допустимі значення (табл. 4.1).

Під час обчислення статистичних показників ефективності ММ передбачається, що «набір даних» містить пари  $C_{M}$  і  $C_{e}$  (відповідно, значення математичної моделі і експериментальне), і що вони представляють середні значення за час усереднення  $t_{y}$ .

## Таблиця 4.1

	י ר		•	U
	TOTIOTIALIII	TUNUICONU	dVOOT1	ΜΟΠΑΠΑΙΙ
•	латистичні	показники	AROUT	MOLUIUN

Назва стати- стичного пара- метра	Визначення	Формула	Ідеальне значення, (рекомендований діапа- зон)
Fractional Bias	Нормалізоване відхилення	$FB = 2 \left( \frac{\overline{C_e} - \overline{C_M}}{\overline{C_e} + \overline{C_M}} \right)$	0, (граничний діапазон -2 < FB < 2; допустимий -0,5 < FB < 0,5)
Geometric Mean Bias	Надійність моделі	$MG = \exp\left(\overline{\ln C_e} - \overline{\ln C_{\mathcal{M}}}\right)$	1, (0,75 < <i>MG</i> < 1,25)
Normalized Mean Square Error	Параметр підкреслює розкид у всьому наборі даних і відо- мий як нормалізована се- редньоквадратична помилка	$NMSE = \frac{\overline{\left(C_{e} - C_{M}\right)^{2}}}{\overline{C_{e}} \ \overline{C_{M}}}$	0, <i>NMSE</i> ≤ 0,5
Geometric Mean Variance	Надійність моделі	$VG = \exp\left[\overline{\left(\ln C_{e} - \ln C_{M}\right)^{2}}\right]$	1, (0,75 < VG < 1,25)
Correlation Coef- ficient	Відображає лінійну залеж- ність між двома змінними і є, таким чином, нечутливим до адитивного або мультипліка- тивного фактора	$r = \frac{\overline{\left(\overline{C_e} - \overline{\overline{C_e}}\right)\left(\overline{C_{_{\mathcal{M}}} - \overline{\overline{C_{_{\mathcal{M}}}}}\right)}}{\sqrt{\left(\overline{C_e^2 - \overline{\overline{C_e}}^2}\right)\left(\overline{C_{_{\mathcal{M}}}^2 - \overline{\overline{C_{_{\mathcal{M}}}}^2}\right)}}$	1, (допустимий можливо ближче до 1)
Factor of 2	Відсоток прогнозів, які задо- вольняють умові	$0,5 \le \frac{C_{M}}{C_{e}} \le 2,0$	1 (100%), (допустимий <i>Fa</i> <sub>2</sub> ≥ 0,8)

# 4.1.3 Чисельне моделювання процесу дефлаграції газової домішки в атмосфері

Для валідації та верифікації математичної моделі проведено порівняння отриманих за моделлю результатів розрахунку з експериментальними даними лабораторії Fraunhofer ICT і результатами використання інших моделей [288] процесу горіння стехіометричної хмари воднево-повітряної суміші v дефлаграційному режимі з урахуванням утворення ПГ у приземному шарі атмосфери. Експерименти здійснювалися за таких початкових даних ЛЛЯ напівсферичної хмари: загальний об'єм 2094 м<sup>3</sup>, тиск 98,9 кПа, температура 283 К, радіус 2 м. Часова зміна надлишкового тиску, температури, масової концентрації пального та ПГ на відстанях 5 м (точка В), 8 м (точка С) і 18 м (точка D) від епіцентру горіння (точка А) контролювалися під час розрахунків (рис. 4.1).



Рис. 4.1 Схема РП і розташування КТ

РП мав такі розміри: довжину 200 м, ширину 100 м і висоту 30 м. Розміри сітки становили 200х100х30 комірок. Характеристики комп'ютера були наступними: 1 Intel® Celeron® CPU PCs (2,4 ГГц), 0,75 Гб RAM, Windows XP. Час розрахунку складав 4 години (треба 45годин, використовуючи модель Нав'є-Стокса [[288]]).

Динаміка надлишкового тиску у КТ В, С і D представлена на рис. 4.2 у порівнянні з експериментальними даними і результатами обчислювальних експериментів інших авторів [288]. Більш «гостра» форма розрахункової кривої може бути пояснена специфічними рисами прийнятої моделі горіння. Більш інтенсивне зниження надлишкового тиску на шляху ВУХ від КТ С до КТ D може бути віднесено до особливостей кінцево-різницевої схеми апроксимації рівнянь.

Розподіл температури у КТ В і С представлений на рис. 4.3. Динаміку зміни ВМК водню і ПГ у КТ В зображено на рис. 4.4.

Валідація математичної моделі дефлаграції водню відносно єкпериментальних результатів вимірювання надлишкового тиску у фронті вибухової хвилі проводилася оцінкою статистичних показників, рекомендованих роботах [92, 317]. V Досліджувалася тільки фаза стискання фронту хвилі, тому що тільки її характеристики присутні у співвідношеннях для ймовірністної оцінки негативного впливу хвилі на довкілля. Для хвилі у КТ В було виявилено такі значення показників ефективності моделі: FB = 0.23; VG = 1.88; MG = 1.56; NMSE = 0.29; Fa2 = 71%; r = 0,78. У КТ С ці показники мали такі значення: FB = -0,18; VG = 2,97; MG = 1,07; NMSE = 1,51; Fa2 = 33%; r = 0,01. I для точки C вони були такими: FB = -0,43; VG = 4,00; MG = 2,39; NMSE = 0,57; Fa2 = 42%; r = 0,63.



Рис. 4.2 Динаміка надлишкового тиску у точках: a) B; б) C; в) D



Рис. 4.3 Динаміка температури у КТ В (а) і С (б)

Значення статистичних показників VG, MG і Fa2 для точки B, величин VG, NMSE і Fa2 для точки C і величин VG, MG, NMSE і Fa2 для точки D дещо виходять за рекомендовані у роботі [317] межі (табл. 4.1), що пояснюється деякою розсинхронізацією у часі проходження вибухової хвилі крізь КТ у порівнянні з реальним процесом [6].



Рис. 4.4 Динаміка ВМК водню  $Q_1$  (а) і ПГ  $Q_3$  (б) у КТ В

Але загальний якісний і кількісний аналіз фази стискання вибухової хвилі у КТ з точки зору параметрів впливу хвилі на довкілля дає значно кращі результати:

– для максимальний надлишковий тиск маємо такі показники: 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 моделі знаходяться у рекомендованих межах. Тому можна вважати, що математична модель дефлаграційного горіння газоповітряної суміші може бути використана для цілей, які поставлено у дослідженні, а саме, для симуляції широкомасштабних вибухів ГПС у приземному шарі атмосфери й оцінки і прогнозу можливих наслідків баричного і термічного впливів ПГ домішки на людей і конструкції будівель у зоні епіцентру ТА.

#### 4.1.4 Моделювання випаровування з поверхні пролиття зрідженого газу

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

#### 4.1.4.1 Моделювання випаровування пролиття зрідженого пропана

Моделювалося випаровування рідкого пропану з плями пролиття площею 256 м<sup>2</sup> і подальше розсіювання газоподібного пропана за таких атмосферних умов: тиск 101325 Па, температура 291 К, ШВ 5,4 м/с. Пропан випаровувався з постійною витратою 27,16 кг/с протягом 450 с і мав початкову температуру 260 К у газоподібному стані. Вихідні дані для розрахунку формувалися відповідно до експериментальних даних пролиття № 46 [301] (рис. 4.5).



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

Також моделювалося випаровування рідкого пропану з ПП площею 900 м<sup>2</sup> за тих самих атмосферних умов, за виключенням ШВ, яка складала 2,53 м/с. Цього експерименту пропан випаровувався із постійною витратою 22,31 кг/с також протягом 450 с і мав температуру 260 К на початку газової фази. Вихідні дані для розрахунку формувалися відповідно до експериментальних даних пролиття № 54 [301] (рис. 4.6).

Розрахункові розподілу концентрації пропану на різних висотах від поверхні пролиття якісно і кількісно відповідають експериментальним даним.

Валідація математичної моделі випаровування з ПП рідкого пропану і розсіювання домішки над поверхнею моря відносно єкпериментальних результатів вимірювання надлишкового тиску у фронті вибухової хвилі проводилася оцінкою статистичних показників, рекомендованих у роботах [92, 317]. Моделювання експерименту № 46 виявило такі значення показників ефективності: FB = -0,23; NMSE = 0,14; r = 0,97. Моделювання експерименту № 54 дає такіі результати: FB = -0,24; VG = 1,18; MG = 0,86; NMSE = 0,50; Fa2 = 100%; r = 0,89.



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

Узагальнені за результатами обох експериментів статистичні показники мають такий вигляд: FB = -0,24; NMSE = 0,29; r = 0,88. Статистичні показники якості моделі є у межах рекомендованих діапазонів [317], що дає змогу оцінити її такою, яка адекватно описує фізичні процеси випаровування зрідженого газу з плями пролиття і поширення газової домішки у приземному шарі атмосфери.

### 4.1.4.2 Моделювання випаровування пролиття зрідженого водню

Розглядається аварійна ситуація на станції заправки водневим паливом транспортних засобів. Станція має цистерну з рідким воднем (5,7 м<sup>3</sup>), 12 балонів загальним обсягом 799,2 м<sup>3</sup> для зберігання газоподібного водню при температурі навколишнього середовища [272]. Моделювалося випаровування водню з ПП площею 65 м<sup>2</sup> за таких атмосферних умов: тиск 101325 Па, температура 288 K, ШВ 2,2 м/с. Водень випаровувався з постійною витратою 11,56 кг/с протягом 21 с і мав початкову температуру 180 К після переходу до газової фази. Вихідні дані для

розрахунку формувалися відповідно до експериментальних даних пролиття № 6 [302] (рис. 4.7). Час розрахунку складав 1 годину (треба 11годин з використанням моделі Нав'є-Стокса [302]).



Рис. 4.7 Експериментальний розподіл об'ємної концентрації водню

Не дивлячись на низьку початкову температуру газової фази, водень швидко перемішується за повітрям, втрачаючи концентрацію у суміші. Його висока пловучість передумовлює підняття шлейфу з часом. Зі зростанням швидкості вітру з висотою інтенсивність розсіювання природньо зростає також (рис. 4.8).



Рис. 4.8 Розрахунковийий розподіл об'ємної концентрації водню

Порівняння просторового розподілу концентрації водню дають змогу виявити загалом якісне і кількісне співпадіння експериментальних і розрахункових даних для водню, що дає можливість використовувати побудовану модель для газів, щільність яких відрізняється від повітря.

Для виявлення впливу ШВ на поля щільності домішки (водню) було проведено обчислювальний експеримент для вітру слабкої 1 м/с, середньої 3 м/с і високої 10 м/с швидкостей. Розподіли концентрації водню, отримані обчислювальним шляхом за допомогою розробленої математичної моделі, представлено на рис. 4.9.



Рис. 4.9 Розрахункові поля щільності водню за умов вітру різної швидкості: а – 1 м/с, б – 3 м/с, в –10 м/с

Результати натурного експериметнту – фотографії шлейфу водневої хмари, яка з'являється випаровуванням з плями пролиття рідкого водню і рухається за вітром різної швидкості, зображено на рис. 4.10.

Розроблена математична модель адекватно відображає якісний характер

фізичного процесу утворення і руху повітряно-водневої суміші: за умов слабкого вітру хмара практично вертикально здіймається над поверхнею землі, трохи нахиляючись за вітром, з посиленням вітру траєкторія середньої лінії шлейфу все більше тяжіє до землі, а за умов сильного вітру хмара практично стелеться понад поверхнею землі.



Рис. 4.10 Натурний експеримент: розсіювання водню, що випаровується з плями пролиття за різного вітру (а – 1,6 м/с, б – 3,8 м/с, в – 6,3 м/с)

# 4.1.5 Верифікація математичної моделі випаровування пролиття зрідженого токсичного газу

Поряд з валідацією математичної моделі щодо результатів фізичного експерименту, реалізацію її у вигляді програмного коду піддають верифікації, одним із інструментів якої є перевірка поведінки математичної моделі на розрахункових сітках різної щільності. Математична модель повинна давати стійкий розв'язок, який наближається до «точного».

Верифікаційний обчислювальний експеримент проводився для сценарію аварійного пролиття зрідженого ціаністого водню [64] з утворенням ПП круглої форми з центром С(18 м; 18 м) відносно початку системи координат і радіусом 8 м на майданчику квадратного перетину 60 х 60 м біля землі. Випаровування відбувається з поверхні плями з постійною інтенсивністю 1,19 кг/с/м2, яка визначається для ШВ 3 м/ для степеневого профілю із коеффіцієнтом 0,4 і температурою повітря 293 К. Випаровування припиняється за 3 с. Вітер набігає під кутом 45° до поздовжньої осі. Параметри безпеки контроліровались у точках Р0

(35 м; 35 м) і Р1 (55 м; 55 м).

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



Рис. 4.11 Поля умовної ймовірності ураження: a-e – варіанти V1-V6 сітки

Обчислювальна сітка послідовно ущільнювалася у варіантах від V1 до V8: 60, 90, 120, 150, 180, 210, 240 і 270 РК, відповідно, уздовж усіх напрямів системи координат. Зміна умовної ймовірності летального наслідку від ураження інгаляційною токсичною дозою у контрольній точці у залежності від варіанту розбиття РР представлено на рис. 4.12.

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

Порівняння полів умовної ймовірності ураження, умовних ймовірностей у контрольних точках можливого розташування обслуговуючого персоналу і площ небезпечних зон для сіток різної щільності забезпечує можливість зробити висновок

про стійкість розробленої математичної моделі випаровування і розсіювання токсичної газоподібної хімічної речовини з плями аварійного пролиття і програмного коду її реалізації, і очевидну поступову збіжность до єдиного розв'язку зі збільшенням щільності обчислювальної сітки. Видно, що дрібніша сітка точніше описує фізичний процес, що даю змогу зробити висновок про адекватність розробленої математичної моделі.



Рис. 4.12 Діаграма умовної ймовірності смертельного токсичного ураження людини у КТ Р0 і Р1: V1-V8 – варіанти щільності

розрахункової сітки



Рис. 4.13 Діаграма площі небезпечної зони *S*<sub>50</sub> у КТ Р0 і Р1: V1-V8 – варіанти щільності розрахункової сітки

#### 4.1.6 Моделювання теплообміну у суцільних «твердих» тілах

Верифікація розробленої математичної моделі ТО проводилася співставленням результатів чисельного моделювання з відомими аналітичними розв'язками одновимірних тестових задач для нескінченної пластини з різними початковими, ГУ і змінною інтенсивністю ТО з теплопровідним газоподібним навколишнім середовищем [303].

#### 4.1.6.1 Тестова задача теплообміну за схемою 1

Розглядається нестаціонарний процес охолодження нескінченної суцільної твердої пластини за умови нескінченно великої інтенсивності теплообміну з навколишнім газоподібним середовищем (рис. 4.14а).

$$T\big|_{\tau=0} = T_0. \tag{4.1}$$

На одній границі пластини виконується умова

$$T\Big|_{\mathbf{y}=0} = T_{\mathbf{w}}.\tag{4.2}$$

У початковий момент часу температура у пластині має постійне значення. На іншій границі виконується така гранична умова

$$\partial T / \partial x \big|_{x=h} = 0. \tag{4.3}$$

Аналітичний розв'язок для розподілу параметра температури представлено таким нескінченним рядом

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







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

177

де коефіцієнти  $\mu_n$  і  $A_n$  виглядають таким чином

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

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

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

Результати порівняння чисельного й аналітичного розв'язків представлені на рис. 4.146, 4.14в.

## 4.1.6.2 Тестова задача теплообміну за схемою 2

Розглядається нестаціонарний процес охолодження нескінченної суцільної твердої пластини з градієнтним розподілом початкової температури за умови нескінченно великої інтенсивності ТО з навколишнім середовищем (рис. 4.15а).

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

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

На обох границях пластини виконується така умова

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

Аналітичний розв'язок для розподілу параметра температури представлено таким таким нескінченним рядом



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

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

де коефіцієнти  $\mu_n$  і  $A_n$  виглядають таким чином

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

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

Результати порівняння чисельного й аналітичного розв'язків представлені на рис. 4.156, 4.15в.

# 4.1.6.3 Тестова задача теплообміну за схемою 3

Розглядається процес ТО у нескінченній пластині з постійним поперековим розподілом початкової температури за умов кінцевого коефіцієнта тепловіддачі  $\alpha$  з навколишнім газом середовищем із заданою температурою  $T_e$  (рис. 4.16а).

У початковий момент часу температура у пластині має постійне значення  $T|_{\tau=0} = T_0$ . На одній границі пластини виконується ГУ

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

де температура навколишнього середовища  $T_e = const$ ,  $\lambda$  – коефіцієнт теплопровідності для матеріалу пластини,  $\alpha$  – коефіцієнт тепловіддачі для системи «газ-матеріал». З іншого боку пластини виконується гранична умова  $\frac{\partial T}{\partial x}\Big|_{x=h} = 0$ , а аналітичний розв'язок розподілу параметра температури представлено таким нескінченним рядом


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

181

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

де співвідношення для коефіцієнтів  $\mu_n$  і  $A_n$  виглядають таким чином

$$ctg\,\mu_n = 1/Bi\,,\tag{4.14}$$

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

Результати порівняння чисельного й аналітичного розв'язків за умов, що  $\eta = 0$ і  $\eta = 1$ , представлені на рис. 4.16б, 4.16в і 4.17, відповідно. Результати чисельних розрахунків добре узгоджуються з аналітичними даними, що забезпечує можливість використовувати розроблену математичну модель для розв'язання поставленої задачі теплопереносу під час руху газоповітряної суміші у приземному шарі атмосфери за присутності в актуальному просторі суцільних твердих тіл заданої теплопровідності.

# 4.1.7 Чисельне моделювання процесів теплообміну у твердих тілах складної геометричної форми

Перехідні режими роботи енергетичних і теплотехнічних установок, холодильників і камер високотемпературної обробки пов'язані з нестаціонарними процесами ТО і теплопроводності у їх різних складових деталях, що може призводити до неприпустимих змін технологічних зазорів у їх робочій частини через неоднакове розширення (охолодження) або до надмірних температурних напружень у деталях з матеріалів різних теплофізичних властивостей. Для оптимального управління такими режимами теплових установок необхідно мати нестаціонарні тривимірні температурні поля в елементах обладнання [12].







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

183

Прогнозування та аналіз теплових полів забезпечує можливість уникнути неприпустимої зміни температури або виникнення критичних її перепадів.

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

Чисельно моделювалася динаміка тривимірних полів температури В однорідних багатозв'язних твердих тілах під час їх нагрівання (охолодження) у газоподібному теплопровідному середовищі. Аналітичні методи розв'язання таких задач виявляються ефективними тільки для тіл простої форми [303, 304]. У цьому випадку розрахункові нестаціонарні залежності поля температур виражаються у вигляді експоненційних рядів, збіжність яких залежить від місця розташування КТ усередині тіла і часу з моменту початку процесу. Чисельні методи на базі сучасної обчислювальної техніки дають змогу подолати ці проблеми і розв'язувати поставлену задачу вже без застосування комплексних ієрархічних методів, таких як поетапне моделювання [305]. Ряд робіт пропонують спосіб моделювання, який базується на застосуванні кінцево-різницевого методу та методу кінцевих елементів [306], однак розрахунки проводяться без урахування багатовимірності процесу [307] або тільки для нескінченно великих інтенсивностей ТО твердих тіл із навколишнім середовищем [308]. Тому створення нової математичної моделі, яка адекватно описує перехідні теплові процеси у твердих тілах, побудова ефективного методу розв'язання поставленої задачі і реалізація її у вигляді сучасного програмного засобу комп'ютерної реалізації, який можна використовувати в інженерних цілях для аналізу і прогнозу, є актуальним завданням.

#### 4.1.7.1 Розрахунок теплопереносу у твердих об'єктах простих форм

Були обчислені температурні поля у тривимірних твердих тілах примітивних геометричних форм: сфери, циліндра, паралелепіпеда, призми з основою

правильного багатогранника і довільного полігону. Була можливість довільного розташування цих фігур у просторі відносно заданої системи координат.

Для спрощення розрахунків передбачалося, що оточуюче газове середовище є нерухомим й інтенсивність тепловіддачі від газу до тіла є нескінченно великою. Результати тривимірного нестаціонарного математичного моделювання температурних розподілів у перетині суцільних твердих об'єктів простої геометричної форми представлені на рис. 4.18 [12].



Рис. 4.18 Ізотерми у поперековому перетині: а – тригранної призми; б – паралелепіпеда; в – циліндра

### 4.1.7.2 Розрахунок теплопереносу у тілах з порожнинами

Крім суцільних твердих тіл розроблений програмний засіб комп'ютерної реалізації забезпечує можливість розглядати температурний стан твердих тіл із порожнинами, заповненими газовим середовищем. Перераховані раніше геометричні форми представлені у програмному засобі комп'ютерної реалізації як система родинних класів, що дає змогу використовувати їх для конструювання порожнин у твердих тілах. Результати охолодження циліндричного тіла з порожниною у формі паралелепіпеда представлені на рис. 4.19. Очевидно, що форма поперекового перетину суцільних твердих тіл і наявність порожнин різних геометричних форм істотно впливають на характер полів температур і швидкість процесу охолодження [12].



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

#### 4.1.7.3 Розрахунок теплопереносу у тілах складних форм

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

Часто теплонапружені деталі мають абсолютно довільну форму, яка не може бути компіляцією фігур простих геометричних форм. Прикладом такого тіла може бути лопатка турбіни. Для такого роду тіл програмний засіб комп'ютерної реалізації пропонує використовувати тіла з основою довільного полігону. Координати плоского перетину лопатки турбіни і формують такий полігон. Були проведені модельні розрахунки процесу охолодження типової турбінної суцільної лопатки (рис. 4.21а) і з порожнинами охолодження (рис. 4.21б) за умов нескінченно великої інтенсивності теплообміну. Видно, що наявність порожнин у суцільному твердому тілі прискорює теплообмін [12].



Рис. 4.20 Ізотерми у поперековому перетині тіла складної форми у момент 1,49 с з початку охолодження



Рис. 4.21 Ізотерми у поперековому перетині лопатки турбіни: а – суцільної через 8,5 с і з порожнинами 1,98 с після початку охолодження

## 4.1.8 Охолодження твердих тіл потоком теплопровідного газу

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

Нестаціонарний процес охолодження кубічного твердого тіла у центральному перетині камери термообробки зображений на рис. 4.22 [15].

Результати чисельних розрахунків із прийнятною точністю узгоджуються з очікуваною фізичною картиною. Необхідно відзначити нерівномірний характер отриманих температурних полів, які визначаються наявністю більш холодногогазового середовища із боку потоку, що набігає на тіло, порівняно з полями, отриманими для тіл, оточених нетеплопровідним нерухомим газом [12]. Урахування теплового переносу газом наближає модельну картину до фізичної, що забезпечує можливість використовувати математичну модель оцінки ДЛЯ ефективності функціонування камер термообробки твердих тіл потоці V газоповітяної суміші.



Рис. 4.22 Ізотерми у перетині камери термообробки у різні моменти часу після початку охолодження: а – 0 с; б – 20 с; в – 30 с; г – 40 с; д – 50 с; е – 60 с; ж – 70 с; з – 80 с, відповідно

# 4.2 Чисельне моделювання процесу струминного витікання газової домішки в атмосферу

Розглядалося формування струменя газової домішки з розвитком ударної хвилі під час виходу із детонаційної труби у необмежений простір [8], що отримується у режимі примусового імпульсного прискорення потоку за хвилею, з метою визначення умов, за яких забезпечується підтримання інтенсивності ударної хвилі зі сферичним фронтом на період проходження хвилею довжини детонаційної комірки [309]. Такий режим струминного витікання газу використовується, наприклад, з метою ініціювання детонації у необмеженому об'ємі прискорюваним струменем [8] у якості безпечного способу знешкодження полів, оснащених вибуховими пристроями натискної дії у зонах мілітарних конфліктів [309]. Особливість запропонованого способу вибухового розмінування полягає у застосуванні струменя відпрацьованих газів важкої техніки для отримання хмари паливоповітряної суміші і подальшого об'ємного вибуху з метою суцільного розмінування або гасіння пожежі [9]. Броньований транспортний об'єкт 1 (рис. 4.23), рухаючись мінно-вибуховим загородженням 2, розпорошує детонаційнопридатну рідину, формуючи протяжну паливо-повітряну хмару 3. Впорскування палива здійснюється у струмінь відпрацьованих газів 4 об'єкта для забезпечення підігріву і поліпшення змішування парів палива і повітря і, тим самим, покращення якості паливоповітряної суміші з більш рівномірним розподілом концентрації палива у сформованій хмарі. Треба зазначити, що робочий процес у дизельному двигуні об'єкта здійснюється з надлишком повітря майже в 2 рази. Тому, струмінь відпрацьованих газів містить не менше 80% повітря, кисень якого не реагував. Після розподілення суміші над небезпечною ділянкою, у ній ініціюється детонація 5 [8]. Це призводить до виникнення імпульсу тиску над ділянкою і, відповідно, вибухового розмінування. Для пересування об'єктів 1 небезпечними ділянками використовуються ножові колійні трали 6, які витягають вибухові пристрої у бік від колії руху об'єкта. В основу технічного рішення було покладено застосування

детонаційної труби, яка має пристрій імпульсного прискорення газового потоку за фронтом детонаційної хвилі у період виходу хвилі у необмежений об'єм.



Рис. 4.23 Формування паливо-повітряної суміші та її детонація

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

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

За аналогією виникнення детонації у детонаційної трубі, де детонаційна хвиля з'являється за рахунок збільшення інтенсивності пакету хвиль стискання, у пристрої (рис. 4.24) під час виходу ударної хвилі з детонаційної труби 1 у потоці продуктів детонації утворюється плазмовий «поршень» 2, який електродинамічно прискорюється і підтискає продукти детонації до сферичного фронту хвилі. Зрозуміло, що швидкість руху поршня  $U_1$  повинна перевищувати швидкість поширення ударної хвилі  $U_2$ . За рахунок цього компенсується падіння тиску за фронтом хвилі під час її розповсюдження.



Рис. 4.24 Схема пристрою ініціації сферичної детонації струменем

Закон зміни швидкості на зрізі детонаційної труби задавався у вигляді

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

за умов, що t ≤ 40 мкс, i

$$U_1(t) = const. \tag{4.17}$$

за умов, що t > 40 мкс, а  $U_0 = 800$  м/с.

При цьому вважалося, що значення щільності газу на перетині сопла, вихідний діаметр сопякого дорівнював 100 мм, підтримувалося постійним.

Результати моделювання витікання струменя за закона витрати газу, що зростає і зменшується, представлені на рис. 4.25-4.27.



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



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



Рис. 4.27 Порівняння полів щільності через 96 мкс після викиду за різної динаміки витікання струмені:  $a - U_1(t)$ ,  $\delta - U_2(t)$ ).

У результаті порівняння розрахункових і експериментальних параметрів газу, отриманих під час розвитку струменя, що прискорюється у необмеженому просторі, було встановлено, що форма поверхонь збурених областей газу на один і той же момент часу практично збігається. Інтенсивний імпульсний підпір газу за переднім фронтом струменя забезпечує короткочасне «утримання» термодинамічних параметрів газу за умов сферичного фронту розповсюдження збурень. Швидкість розширення області збурення у разі прискорення потоку зростає незначно. Це призводить до збільшення градієнтів термодинамічних параметрів газу в області за сферичним фронтом ударної хвилі.

Також моделювалося утворення детонаційно-здатної хмари шляхом

змішування палива у струмені відпрацьованих газів силової установки бронеоб'єкта [8]. У розрахункової області задавалося непроникне тіло з формою, що відповідає поперековому перетину об'єкта. У цьому тілі формувалася щілина прямокутної форми з розмірами 250 х 1500 мм<sup>2</sup>, через яку здійснювалося струминне витікання паливо-повітряної суміші. Масова концентрація палива у суміші на виході з щілини дорівнювала 10 % і не змінювалася з часом. Масова витрата суміші становила 5,7 кг/с. Швидкість набігаючого повітряного потоку дорівнювала 3 м/с. Результати розрахункових розподілів відносної масової концентрації домішки у вертикальному і горизонтальному перетинах уздовж осі струменя на момент часу 15 с представлені на рис. 4.28.



Рис. 4.28 Поля масової концентрації узовж хмари через 15 с у: а – у вертикальному, б – горизонтальному перетинах

Результати моделювання також співставлялися з експериментальними дослідженнями динаміки витікання струменя з діаметром соплового отвору 2 мм [8]. Інтенсивне імпульсне прискорення потоку у даному випадку забезпечувалося у результаті струмового розігріву газу імпульсною дугою. Щільність газу у розрядній порожнині була більше щільності газу в області витікання. Об'єм порожнини був підібраний таким чином, щоб за час витікання газу у період його імпульсного прискорення зниження щільності відбулося не більше ніж на 10%. Динаміка розвитку струменя приведена на рис. 4.29.

Результати експерименту якісно підтверджують припущення, що інтенсивне імпульсне підтискання потоку призводить до зміни форми струменя.

Спостерігається практично напівсферичне поширення області збурювання.



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

Співставлення розрахункового поля щільності газової суміші у струмені з експериментальтими даними фотозйомки для одного змоментів часу представлено на рис. 4.30.



Рис. 4.30 Розподіл щільності газоподібних ПГ під час формування недорозширеного струменя через 96 мкс після викиду (а – результати розрахунку, б – кадр фотозйомки)

Таким чином, результати математичного моделювання підтверджують можливість формування детонаційно-здатних сумішей у струмені відпрацьованих

газів бронеоб'єкта розмінування. Розроблена математична модель забезпечує можливість виявити необхідний режим прискорення струменя у залежності від діаметра детонаційної труби за умов якого забезпечується «утримання» інтенсивності сферичної ударної хвилі, яка формується, на період проходження хвилею довжини детонаційної комірки. Модель забезпечує можливість також ураховувати вплив атмосферних умов на розмір детонуючої хмари.

# 4.3 Чисельне моделювання процесу миттєвого вибуху газоподібної домішки в атмосфері

Валідація і веріфікація моделі миттєвого вибуху газоповітряної суміші проводиляся співставленням з результатами експериментальних досліджень вибуху пропану та методом оцінювання надлишкого тиску, який використовує регресійну залежність [310-312]. Моделювався вибух хмари стехіометричної пропаноповітряної суміші за таких умов з експерименту: об'єм хмари горючої суміші – 1495 м<sup>3</sup>, енергія вибуху – 4640 МДж.

У роботі [311] на основі натурних експериментів із дослідження вибуху хмар різних сумішей повітря з ацетиленом, пропаном і метаном, та сумішей пропану і метану з киснем було отримано регресійну залежність надлишкового тиску у фронті ударної хвилі від відстані від епіцентру вибуху для заданої вибухової енергії у випадку, якщо динамічний радіус хмари  $R_0 \ge 0,3$ 

$$\Delta P_{\phi} = 0.6 \cdot 10^{-1} / R_0 + 1.4 \cdot 10^{-2} / R_0^2 + 2.5 \cdot 10^{-3} / R_0^3$$
(4.18)

та у випадку, якщо динамічний радіус хмари  $0,08 \le R_0 < 0,3$ 

$$\Delta P_{\phi} = 0.052 / R_0^{1.7} , \qquad (4.19)$$

де  $R_0 = R/E^{1/3}$  – динамічний радіус; R – відстань від епіцентру; E – енергія вибуху. Рис. 4.38 дає результати валідації і веріфікації ММ вибуху пропану.



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

Валідація математичної моделі вибуху ГПС відносно єкпериментальних результатів вимірювання надлишкового тиску у фронті ВУХ проводилася оцінкою статистичних показників, рекомендованих у роботах [92, 317]. Усі обчислені значення знаходяться у межах прийнятності (табл. 4.1): FB = 0,42; VG =1,11; MG =0,93; NMSE 0,21; Fa2 = 100%; r = 0,997.

Співставлення результатів обчислення надлишкового тиску у фронті вибухової хвиля за моделлю з експериментальними даними і результатами розрахунку за регресійною залежністю, дає змогу зробити висновок про достатньо прийнятну точність розробленої моделі миттєвого вибуху газоповітряної суміші і придатність математичної моделі для її використання для оцінки наслідків впливу баричного збурення потоку газоповітряної суміші у приземному шарі атмосфери внаслідок її вибуху на довкілля.

# 4.4 Чисельне моделювання дефлаграційного горіння водню у гаражному приміщенні

Газодинамічний процес водневого дефлаграціонного горіння на початковій стадії пожежі у приміщенні гаража моделювався з урахуванням його фактичного розміру за стандартних атмосферних умов навколишнього середовища. Вважалося, що всі вікна, двері і в'їзні ворота були зруйновані в результаті миттєвого вибуху ємностей високого тиску для зберігання водню (приміщення відкрите для надходження атмосферного повітря всередину і, навпаки, для викиду продуктів горіння назовні).

### 4.4.1 Визначальні геометричні параметри розрахункової області

План приміщення представлений на рис. 4.32. Несучі конструкції будівлі – цегляні стіни товщиною 0,25 м, висота приміщення – 3 м. Приміщення складається з двох кімнат, розділених внутрішньою перегородкою товщиною 0,25 м із прорізом площею  $2 \times 0,25$  м<sup>2</sup>. Товщина перекриття 0,25 м. Приміщення обладнане чотирма віконними прорізами площею  $1 \times 1,5$  м<sup>2</sup> кожен. На вході в кожну кімнату розташовувалися дверні прорізи  $4 \times 2,5$  м<sup>2</sup>.



Рис. 4.32 Схема РП і розташування КТ

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

#### 4.4.2 Сценарії розвитку водневої пожежі

На умови розвитку пожежі у виробничому приміщенні можуть впливати такі чинники, як місце виникнення пожежі, розташування всередині вікон і дверних отворів (відкриті чи закриті), а також об'єм і параметри джерела викиду пального. З метою визначення впливу зазначених факторів на параметри пожежі було досліджено кілька можливих сценаріїв розвитку пожежі за умов різних параметрів хмари викиду пального. Вхідні отвори і вікна виробничого приміщення під час розвитку пожежі передбачалися відкритими. Були розглянуті два сценарії. У першому випадку передбачалося, що після витікання водню з балона, де він знаходився під тиском, утворилася хмара радіусом R = 2 м воднево-повітряної стехіометричної суміші з параметрами відповідних атмосферних умов (сценарій 1). У другому випадку передбачалося, що у результаті руйнування балонів, у яких знаходився стиснений водень, утворювалася хмара радіусом R = 2 м з тиском 134213 Па і масовою концентрацією водню  $Q_1 = 0,111$ , температура якої відповідала атмосферним умовам (сценарій 2). Початкові умови для сценарію 2 відповідали миттєвого вибуху 12 балонів об'ємом 0,51 м<sup>3</sup> кожний. Передбачалося, що для обох сценаріїв центр А хмари розташовувався у отворі між кімнатами (рис. 4.32).

## 4.4.3 Результати моделювання водневої пожежі у приміщенні

У результаті реалізації обох сценаріїв розвитку пожежі були отримані наступні дані:

 розподіли ВМК водню і ПГ у різні моменти часу у площині, яка паралельна підлозі на висоті 1,125 м (рис. 4.33);

– часові зміни надлишкового тиску, температури, концентрації пального та ПГ у КТ В, С і D (рис. 4.34–4.36).



Рис. 4.33 Концентрація водню (а) і ПГ (б) у точці В (сценарій 1)

Динаміка зміни концентрації водню і його продуктів горіння у точці В, надлишкового тиску і температури у точках В, С і D для сценарію 1 представлені на рис. 4. 34–4.36.



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



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



Рис. 4.36 Надлишковий тиск (а) і температури (б) у точці D (сценарій 1)

Поля концентрації водню і ПГ для сценарію 1 за різних часів після моменту займання представлені на рис. 4.37.

Часові зміни відносної масової концентрації газоподібного водню і продуктів горіння у контрольній точці В, надлишкового тиску і температури у контрольних точках В, С і D для аварійного сценарію 2 представлені на рис. 4.38-4.41.

Поля відносної масової концентрації концентрації водню і продуктів горіння для аварійного сценарію 2 за різних часів після моменту займання газоповітряної суміші представлені на рис. 4.42.

Аналіз результатів обчислення представлених на рис. 4.33-4.42 показує, що параметри середовища усередині приміщення (сценарії 1 і 2) відрізняються від параметрів середовища при горінні водню у відкритому просторі.



Рис. 4.37 Динаміка концентрації водню (а-в) і продуктів згоряння (г-е) за часів 0,15 с, 0,25 с і 0,35 с після займання (сценарій 1)

Зокрема, максимальна відносна масова концентрація продуктів горіння у приміщенні гаражного боксу нижче (рис. 4.33б, 4.38б), ніж у відкритому просторі. Максимальний надлишковий тиск у фронті вибухової хвилі у приміщенні гаража нижче (рис. 4.34а-4.36а і рис. 4.39а-4.41а), ніж у відкритому просторі. Спостерігається виникнення відбитих хвиль тиску, пов'язаних з наявністю суцільних стінок будівлі. Максимальна температура газоповітряної суміші у гаражному приміщенні вище (рис. 4.34б-4.366 і рис. 4.39б-4.41б), ніж у відкритому просторі. Виявлені особливості обумовлені конструкцією виробничого приміщення боксу і наявністю інтенсивного тепло- і масообміну газоповітряної суміші з навколишнім середовищем.



Рис. 4.38 Концентрація водню (а) і ПГ (б) у точці В (сценарій 2)



Рис. 4.39 Надлишковий тиск (а) і температури (б) у точці В (сценарій 2)



Рис. 4.40 Надлишковий тиск (а) і температури (б) у точці С (сценарій 2)



Рис. 4.41 Надлишковий тиск (а) і температури (б) у точці D (сценарій 2)



Рис. 4.42 Концентрація водню (а-в) і ПГ (г-е) за 0.1, 0.15, 0.2 с (сценарій 2)

Аналіз результатів обчислення представлених на рис. 4.38-4.42 показує, що параметри середовища усередині приміщення (сценарій 2) відрізняються від параметрів середовища за сценарієм 1. Зокрема, максимальна концентрація ПГ за сценарієм 2 вище (рис. 4.38б), ніж за сценарієм 1 (рис. 4.33б). Максимальний надлишковий тиск за сценарієм 2 нижче (рис. 4.39а-4.41а), ніж за сценарієм 1 (рис. 4.34а-4.36а). Максимальна температура за сценарієм 2 вище (рис. 4.39б-4.41б), ніж за сценарієм 1 (рис. 4.346-4.36б). Ці відмінності спричинені більшою масою пального, яка бере участь у горінні, а також більш інтенсивним розсіюванням суміші за сценарієм 2, ніж за сценарієм 1.

У разі виникнення водневої пожежі у виробничому приміщенні можна рекомендувати низку впливів на інтенсивність горіння (якщо спрацьовували датчики, які реєструють підвищену концентрацію горючого газу):

 розпилення води (призводить до зниження температури суміші і, як наслідок, швидкості горіння);

– подачу у приміщення нейтрального газу (наприклад, діоксид вуглецю) або уведення хімічно активних домішок (призводить до зростання мінімальної концентраційної межі займистості і, як наслідок, до зниження температури суміші).

# 4.5 Чисельне моделювання процесу переходу дефлаграційного горіння газоподібної домішки у детонацію

Виконано математичне моделювання нестаціонарного згоряння суміші хімічно реагуючих газів у детонаційному режимі. Чисельне рішення отримано на основі інтегро-інтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку. Верифікація математичної моделі проведена шляхом порівняння результатів розрахунку з відомими аналітичними рішеннями тестових задач вибуху за постійного об'єму і детонаційних умов Чепмена-Жуге (ЧЖ) у трубі. Отримані розподіли тиску, температури, концентрацій реагуючого газу і ПГ уздовж РП для метану і водню. Детонаційні величини параметрів потоку можуть бути використані для оцінки впливу ефектів детонаційних вибухів на довкілля.

#### 4.5.1 Актуальність проблеми переходу дефлаграції у детонацію

Займання вибухонебезпечних хмар призводить до пожеж, руйнування інфраструктури підприємств і людських втрат. Часто після займання хвиля горіння, яка рухається газоповітряною горючою сумішшю, переходить із дозвукового режиму поширення полум'я (дефлаграція) у надзвуковий режим (детонація), який сам себе підтримує. Газове середовище ПГ з детонаційними параметрами має великий руйнівний потенціал, тому їх чисельна оцінка на основі математичного моделювання руху хімічно реагуючих газів є надзвичайно актуальною проблемою.

Злиття хвиль стискання біля фронту полум'я генерує ударну хвилю, яка підтримує займання під час стискання. Перехід дефлаграційного горіння у детонацію реалізується на певній відстані і залежить від низки умов: початкової температури і тиску суміші, хімічної активності, ВМК і геометрії області. Основними характеристиками детонаційної хвилі є середня швидкість поширення, детонаційні тиск і температура, ширина зони реакції [250]. Детонаційні режими горіння більшості реагують газів схожі, тоді як параметри детонації (швидкість і тиск) можуть істотно відрізнятися, що забезпечує можливість використовувати класичні теорії детонації ЧЖ і Зельдовича для аналізу процесу детонації газів [251].

Відомі результати чисельних досліджень процесу газової детонації у одновимірній [252, 253] і двовимірній [254] постановках задачі. Огляд досліджень з теорії і практики чисельного моделювання руху хімічно реагуючих газів взагалі, і газофазної детонації зокрема, представлений у роботах [255, 256]. Процесам горіння попередньо підготовлених газових сумішей у закритому просторі, ініційованого температурними неоднорідностями, взаємодії згенерованих хвиль тиску, присвячені роботи [257, 258]. Чисельному моделюванню переходу горіння у детонацію метанокисневих і воднево-кисневих стехіометричних сумішей присвячено роботу [259]. Ефект згасання метано-повітряного полум'я за моделлю, побудованої за спрощеної схеми хімічної реакції, був досліджений у роботі [260]. Питанням зменшення негативних ефектів, викликаних поширенням детонаційної хвилі, за допомогою водяної дисперсії приділено уваги у дослідженні [261].

Розроблені математичні моделі і ефективний чисельний метод можуть бути застосовані для опису нестаціонарних процесів руху суміші хімічно реагуючих газів у детонаційної трубі. Чисельне моделювання було виконано для вивчення характеристик полум'я заздалегідь підготовлених водородо-кисневої та метанокисневої сумішей у напівобмеженій області.

#### 4.5.2 Загальна постановка задачі горіння суміші у детонаційній трубі

Розглядаються процеси горіння стехіометричної суміші «горючий газ-кисень» у детонаційної трубі (рис. 4.43). Відомі початкові параметри суміші (температура  $T_c = 300$  K, тиск  $P_c = 0,1$  МПа, стехіометрична масова концентрація горючої домішки  $Q_c$ ), температура ініціювання займання суміші з боку закритого торця  $T_i = 1800$  K. Розрахунковою областю є одновимірний простір довжиною 1 м у напрямку OZ, який розбивається на 1000 РК.

Високотемпературна зона утворюється енергетичним «накачуванням» комірки біля закритого торця детонаційної труби до моменту займання газової суміші (досягнення температури ініціювання). Далі виникає нестаціонарний процес горіння, під час якого енергія, що виділилася в області реагуючої суміші, генерує у напрямку фронту полум'я хвилі тиску зі зростаючою амплітудою. Зростаючий градієнт тиску поблизу фронту полум'я прискорює сам фронт і призводить до сталого ударного займання.

Основними ознаками формування детонації є генерація хвиль стискання, їх злиття з трансформацією в ударну хвилю, перехід від ламінарного полум'я до турбулентного, поява поперечних хвиль і взаємодія ударної хвилі з пограничним шаром [259]. Із цього випливає, що повна модель повинна бути просторовою. Але для моделювання надзвукових реагуючих течій часто використовуються одновимірні нестаціонарні моделі, які не розглядають молекулярні явища, але відтворюють основні ефекти моделі Зельдовича і дають невелике відхилення від ідеальної швидкості детонації ЧЖ [252].



Рис. 4.43 Розрахункова схема горіння у трубі (1 – високотемпературна зона, 2 – горюча суміш, 3 – ПГ, 4 – фронт полум'я):
а) стан перед займанням; б) початковий розподіл тиску і температури вздовж труби; в) рух фронту полум'я

## 4.5.3 Математична модель горіння суміші у трубі

Припущення моделі про переважний вплив конвективного обміну масою, імпульсом і енергією дає змогу для опису руху трикомпонентного газу (пальне, окислювач і продукти згоряння) з урахуванням хімічної взаємодії компонент суміші використовувати рівняння Ейлера з джерельними членами [39]. Система рівнянь включає закони перенесення компонент суміші з урахуванням швидкості ТД за законом Фіка, коефіцієнт якої визначався за методикою М. Є. Берлянда [241] і замикається рівняннями, що визначають теплофізичні властивості компонент газоповітряної суміші [10].

#### 4.5.4 Метод чисельного розв'язання

Чисельне розв'язання основних рівнянь грунтується на використанні схеми розпаду довільного розриву. Параметри потоку розраховувалися за допомогою застосування апроксимацій законів збереження згідно інтегроявних обчислювального наскрізного інтерполяційного методу розрахунку [262]. Передбачалося, що горіння відбувається в обсязі розрахункової області, що займається горючою сумішшю з концентрацією горючого у діапазоні між мінімальною і максимальною концентраційними межами займистості, які задавалися на основі узагальнення експериментальних даних [264]. Прогноз розподілів концентрації домішки і інших газодинамічних параметрів суміші у часі і просторі виконувався за допомогою програмного засобу комп'ютерної реалізації FIRE [68].

### 4.5.5 Результати моделювання газофазной детонації у трубі

За результатами моделювання процесу газофазной детонації були отримані розподіли наступних параметрів потоку уздовж детонаційної труби, які фіксувалися у різні моменти часу після займання [18]:

- тиску (рис. 4.44а, 4.45а);

- температури (рис. 4.44б, 4.45б);
- масової концентрації горючого (рис. 4.44в, 4.45в);
- масової концентрації ПГ (рис. 4.44г, 4.45г).

Ударний фронт, за яким мають місце зони індукції і хімічної реакції, являє собою типову структуру детонаційної хвилі тиску.



Рис. 4.44 Динаміка тиску (а), температури (б), концентрацій метану (в) і ПГ (г) у трубі: 1-7 – моменти часу 30, 60, 90, 120, 150, 180 и 210 мкс; 8 – параметри вибуху за постійного об'єму, 9 – детонаційні параметри Чепмена–Жуге

Генерація теплової енергії внаслідок хімічної реакції взаємодії компонент газоповітряної суміші призводить до зростання температури і зменшення тиску у зоні реакції. Ця зона закінчується у точці Чепмена–Жуге, в якій досягається хімічна рівновага і швидкість потоку дорівнює звуковій. Критерієм того, що детонаційний режим наступив, є досягнення цією точкою стаціонарного стану, що визначається теоретичними значеннями тиску і температури Чепмена–Жуге. Навіть якщо хімічний пік (точка Зельдовича-Неймана-Дерінга) продовжує зростати, значення параметрів у точці Чепмена–Жуге під час детонації постійні [18].



Рис. 4.45 Динаміка тиску (а), температури (б), концентрацій водню (в) і ПГ (г) у детонаційної трубі: 1-7 – моменти часу 30, 60, 90, 120, 150, 180 и 210 мкс; 8 – параметри вибуху за постійного об'єму, 9 – детонаційні параметри ЧЖ

Тиск і температура вибуху за постійного об'єму і для стану ЧЖ для стехіометричних сумішей метан-кисень і водень-кисень за  $P_{z} = 0,1$  МПа і  $T_{z} = 300$  К були отримані у роботі [259], де докладно описаний механізм часової еволюції переходу горіння у детонацію. Полум'я рухається через незгорілий газ, генеруючи хвилі стискання низької інтенсивності.

Цей режим горіння локально схожий на вибух у постійному об'ємі. Однак існує локальна швидкість потоку, обумовлена конвективним переносом, який залежить від градієнта тиску. З плином часу тиск за фронтом полум'я зростає, що призводить до прискорення потоку у зоні реакції, скорочення довжини зони індукції і збільшення швидкості поширення фронту полум'я. Починає формуватися пік тиску, а хвилі стискання об'єднуються, утворюючи ударний фронт. Після того, як хвиля горіння наздоганяє ударну хвилю, відбувається перехід до детонації і обидві хвилі рухаються спільно. У момент виникнення детонаційної хвилі формується інша хвиля (ретонаційна), яка рухається у зворотному напрямку, спалюючи залишок компоненти горючої домішки за ударним фронтом.

Розрахункові параметри горіння у стані ЧЖ і за постійного об'єму зображено горизонтальними лініями (рис. 4.44, 4.45). У початковій стадії область займання характеризується ізобаричною поведінкою і більш низьким градієнтом температури, що дає змогу представляти область горіння на цій стадії як вибух за постійного об'єму. Параметри потоку у детонаційної хвилі близькі до параметрів у точці Чепмена–Жуге.

Оскільки використовується модель хімічної реакції «брутто», хімічну структуру полум'я можна простежити за зміною розподілу масової концентрації горючого газу і продуктів згоряння уздовж каналу (рис. 4.44в, 4.44г і рис. 4.45в, 4.45г). Відомо, що під час горіння велику роль відіграє хімічна структура полум'я, що забезпечує його сталий розвиток, оскільки хімічна кінетика дуже залежна від складу і температури [260]. Однак за умов детонації більш важливим є генерований тепловий потік, який зберігає надзвукові умови [261].

# 4.6 Чисельне моделювання впливу водяної завіси на вибух суміші метану і вугільного пилу в шахті

Вибухи газу і вугільного пилу відносяться до аварій з найбільш тяжкими наслідками. Хімічна реакція у ГПС за присутності горючого пилу, яка

супроводжується формуванням і поширенням мережею гірничих виробок ударних хвиль, є дуже небезпечним видом підземної аварії. Загрожуючи життю і здоров'ю гірників, вибух завжди призводить до руйнування виробок і пошкодження розташованого в них гірського устаткування. Пом'якшити наслідки вибуху, або навіть усунути початок хімічної реакції, можна впливом на вугільний пил водяної дисперсії. Гасіння пилу у повітрі забою може здійснюватися попереднім нагнітанням води у пласт для його зволоження, зрошенням забою водою з подачею <u>ïï</u> безпосередньо місця відбою вугілля, також y а ШЛЯХОМ утворення загороджувальних завіс. Таким чином, актуальною є технічна проблема підвищення ефективності засобів гасіння вугільного пилу шляхом зниження енергетичних витрат на утворення загороджувальних завіс у мережі гірничих виробок [16].

Комп'ютерне моделювання процесу хімічної взаємодії метану з повітрям гірничого підприємства за присутності пилу вугілля і чисельна оцінка впливу водяної завіси у якості захисного заходу проводилися з використанням програмного комплексу FIRE [68], який забезпечує можливість обчислювати часово-просторові розподіли усіх параметрів ГПС в актуальній області [31].

У якості додаткових даних, які необхідні для урахування впливу фазового переходу під час кипіння крапель води (хімічної реакції горіння частинок вугільного пилу) на параметри руху газової суміші, використовувалися такі характеристики:

– розподіл дисперсних крапель води за розмірами –  $d \in [10, 150] \cdot 10^{-6}$  м,  $d_+ = 75 \cdot 10^{-6}$  м;

– розподіл часток вугільного пилу за розмірами –  $d \in [10, 750] \cdot 10^{-6}$  м,  $d_{+} = 75 \cdot 10^{-6}$  м;

- щільність вугілля  $\rho_C = 1,5 \cdot 10^3$  кг/м<sup>3</sup>;

— найнижча теплота згоряння кам'яного вугілля  $H_{uC} = 27 \cdot 10^6$  дж/кг і антрациту  $H_{uC} = 28 \cdot 10^6$  дж/кг;

– температура займання дрібнодисперсного вугільного пилу (антрациту)T = 500C;

– концентрація вугільного пилу в підвішеному стані ρ<sub>C+</sub> ≤ 0.4 кг/м<sup>3</sup>.
 Розрахункова область представлена на рис. 4.46 [16].



Рис. 4.46 Схема розрахункового простору тунелю

Обчислювальний експеримент проводився за таких умов: довжина штреку  $L_z = 31,2$  м, висота –  $L_y = 2,2$  м, ШВ на вході становила q = 6 м/с, область ГПС була локалізована на відстані  $Z_1 = 10,1$  м від входу, радіус хмари становив  $R_1 = 1,6$  м Ha розташовувалася (рис. 4.46a). відстані  $Z_2 = 13$  м зона, заповнена дрібнодисперсного фазою – частинками вугільного пилу або краплями води (у залежності від розглянутого сценарію розрахунку). Припускалося, що присутність в актуальній області дисперсних крапель рідини викликає повне пригнічення пилу горючих твердих часток. На відстані Z<sub>3</sub> = 14,9 м розташовувалася КТ Р, у якій здійснювався контроль зміни надлишкового тиску, температури газової суміші. Форма поперекового перетину штреку представлена на рис. 4.466, де  $L_x = 3,2$  м,  $Y_1 =$ 0,6 м, R<sub>2</sub> = 1,6 м [29].

У початковий момент часу після вибуху формувалося хмара ПГ, які поширювалися за вітром за умов переважно конвективного переносу і турбулентного розсіювання. Згідно першого сценарію моделювалося поширення ПГ за присутності горючих твердих часток у повітрі, другий сценарій відбувався без дисперсних фаз і третій сценарій моделював присутність дрібнодисперсних крапель водяної рідини (рис. 4.47) [29].



Рис. 4.47 Зміна надлишкового тиску (а) і температури у КТ: 1 – за наявності пилу у повітрі; 2 – за відсутності дисперсних фаз; 3 – за наявності водяної завіси у повітрі

Наявність у повітряному середовищі штреку твердих вугільних часток викликає суттєвий ріст НТ і температури у зоні аварійного вибуху, що пояснюється додатковим загоряння вугільного пилу. Водяна завіса не тільки призводить до повного пригнічення твердих часток, але й знижує НТ і температуру внаслідок випаровуванню крапель води у середовищі ПГ ГПС [16, 29].

Висновки до розділу 4

У розділі 4 з використанням вперше розробленого нового класу 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, наведено валідацію і верифікацію результатів моделювання відносно наявних результатів експериментальних досліджень та розрахунків на базі інших відомих моделей.

1. На основі розроблених моделей розподілу тиску газоповітряної суміші, 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 брутто в області займистості) для оцінювання наслідків впливу хвилі тиску на довкілля та ефективність засобів захисту від її дії, було проведено валідацію моделі з наявними результатами експериментальних і модельних досліджень щодо вибуху пропану і водню. Отримано прийнятну точність розробленої моделі і придатність математичної моделі для її використання з метою оцінки наслідків впливу баричного збурення потоку багатокомпонентної газової суміші внаслідок її вибуху на довкілля.

2. На основі розробленої нестаціонарної математичної моделі руху хімічнореагуючої газової суміші зі складними граничними умовами, яка, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовує розрахункову схему брутто-взаємодії пального та кисню повітря, було отримано розподіли хімічноскладового, баричного і температурного збурення повітря під час дефлаграційного горіння напівсферичної стехіометричної хмари і підтверджено адекватність розробленої тривимірної математичної моделі горіння газоповітряної суміші у приземному шарі атмосфери і її працездатність на вилучення небезпечних факторів вибухової ударної хвилі (максимального надлишкового тиску та імпульсу фази стискання у фронті хвилі) з метою подальшої оцінки впливу ударної хвилі на людину і інфраструктуру в епіцентрі вибуху.

3. На основі розробленої математичної моделі руху суміші хімічно реагуючих газів досліджено в одновимірної постановці процес горіння, що виникає від гарячої точки у напівобмеженій області. Розглянуто результати розв'язання задачі горіння стехіометричних сумішей метан-кисень і водень-кисень у порівнянні з рівноважними параметрами вибуху у постійному об'ємі і в точці ЧЖ. Досліджено

динаміку зміни тиску, температури, концентрації горючого газу і продуктів згоряння уздовж труби. З аналізу результатів випливає, що структура детонаційної хвилі включає первинну область займання, яка поводиться як вибух у постійному об'ємі і пік, який відповідає точці ЧЖ.

4. На основі моделі руху хімічно-реагуючої газової суміші досліджено динаміку розвитку водневої пожежі у приміщенні з природною вентиляцією. Отримано чисельні розв'язки для різних сценаріїв викиду і горіння водневоповітряної суміші у разі руйнування ємності високого тиску для зберігання стисненого водню. Виявлено особливості розсіювання і горіння водню у повітрі.

3. На основі моделі 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, проведено аналіз захисту підземних гірничих виробок від руйнівного впливу вибухів шляхом утворення водяних завіс з метою зниження концентрації вугільного пилу у повітрі. Розрахунковим шляхом підтверджено вибухо-локалізуючу дію водяних завіс, яка полягає у створенні середовища гасіння на шляху поширення фронту полум'я метано-повітряної суміші гірничою виробкою. Отримано, що ефективність водяних завіс знижується під час гасіння горіння метано-повітряної суміші за відсутності вугільного пилу.

4. На основі розробленої нестаціонарної математичної моделі потрапляння (відбору) газової домішки в актуальну область, у якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми отримано розподіли хімічно-складового збурення повітря навколо залізничної станції внаслідок випаровування з поверхні плями пролиття зрідженого водню і пропану, які якісно і кількісно відповідають експериментальним даним для різних швидкостей вітру.

5. На основі розробленого обчислювального методу 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, було отримано просторово-часові розподіли температури у перетинах твердих тіл різної геометричної форми, які якісно і кількісно відповідають очікуваним температурним полям. Проведено верифікацію результатів моделювання на основі співстівлення з даними аналітичних моделей охолодження сталевих нескінченних пластин за різних початково-крайових умов. Отримано практично абсолютне співпадіння розподілів температури.

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

## РОЗДІЛ 5 АНАЛІЗ І ПРОГНОЗ ФІЗИЧНИХ ПОЛІВ ПАРАМЕТРІВ ПОТОКУ В ПРОЦЕСІ ВЕНТИЛЯЦІЇ ПРИМІЩЕНЬ

У цьому розділі проведено аналіз і прогнозування фізичних полів параметрів потоку газоповітряної суміші у процесі вентиляції приміщень. Розглянуто особливості застосування обчислювальної технології вилучення газової суміші з приміщення або подачі свіжого повітря у приміщення для моделювання механічної і природньої вентиляції. Зроблено аналіз результатів моделювання розсіювання водню у приміщенні, яке вентилюється.

#### 5.1 Аналіз розподілу концентрації домішки під час вентиляції боксу

Розглянемо розсіювання стехіометричної сферичної хмари водню радіусом 1 м з координатами центру x = 1,8 м, y = 1,4 м, z = 2,2 м у розрахунковій області бокса з габаритами  $3,6 \times 2,8 \times 4,5$  м і кількістю комірок уздовж координатних осей  $36 \times 28 \times 45$ . ВО для подачі свіжого повітря до приміщення природним способом розміщувався у центрі передньої стінки боксу біля землі і мав габарити  $0,4 \times 0,4$  м. Витяжний ВО з такими ж габаритами знаходився у центрі задньої стінки боксу біля стелі (рис. 5.1) [20].

Сумарна витрата газу  $G_{\Sigma}$ , яка забезпечувалася вентиляційною системою, становила 0,9369888 кг/с. Розрахунок проводився до повного видалення водню із приміщення за рахунок витяжної вентиляції.

Стаціонарна картина розподілу осьової (уздовж осі OZ) складової швидкості представлена на рис. 5.1. Видно, що у вхідному отворі природної вентиляції виробляється течія, яка подібна згенерованій біля отвору витяжки.

Аналіз зміни розподілу масової концентрації водню проводився у центральній щодо осі ОХ площині (рис. 5.2). У процесі розсіювання хмара істотно змінює форму і розміри відповідно до течії газової суміші, яка виробляється, виходячи з обраної схеми примусової вентиляції [57].



Рис. 5.1 Розподіл осьової швидкості у площині вентиляції



Рис. 5.2 Поля масової концентрації водню у різні моменти часу t після початку вентиляції: a - t = 0,2 с; 6 - t = 3,0 с

Якщо розглядати вибух як потенціальну небезпеку, показником рівня пожежовибухобезпеки виробничого приміщення може служити маса вибухонебезпечної домішки водню (рис. 5.3), визначена як сума мас домішки у тих елементарних розрахункових комірках, масова концентрація водню в яких потрапляла до концентраційний діапазон займистості 0,014 < Q < 0,929 для газоподібного водню [271].

Аналіз часової залежності сумарної маси водневої домішки у повітрі актуальної розрахункової області, який ймовірно може зайнятись і вибухнути [57], свідчить про поступове зменшення її величини у процесі вентиляції і, відповідно, зниження ризиків матеріальних збитків і людських втрат, ймовірних у разі пожежі у даному технологічному боксі [20].



Рис. 5.3 Часовий розподіл сумарної маси водню у приміщенні

# 5.2 Дослідження ефективності осьового вентилятора під час вентиляції приміщення

Вентиляційна система є сукупністю різних за призначенням вентиляційних установок, здатних обслуговувати окреме приміщення. Залежно від способу переміщення повітря у приміщеннях розглядають вентиляція штучну (механічну), природну і комбіновану. За природної вентиляції обмін повітря здійснюється двома способами: неорганізовано, за допомогою провітрювання через вікна, двері і інфільтрації через щілини у вікнах і дверних отворах, і організовано, за допомогою аерації та дефлекторів [268].

У системах механічної вентиляції рух повітря здійснюється вентиляторами. За місцем розташування механічна вентиляція буває загально обмінна (зміна повітря у всьому приміщенні), місцева або локальна (обмін повітря у місцях утворення викидів) і комбінована. За способом подачі повітря механічна вентиляція підрозділяється на припливну, витяжну і припливно-витяжну [269].

Використовуючи розроблену модель руху багатокомпонентного газу [28] зробимо оцінку ефективності роботи осьового вентилятора з точки зору забезпечення необхідного рівня пожежовибухобезпеки технологічного боксу, у якому стався аварійний викид водню.

#### 5.2.1 Характеристики мережі і вентилятора

Усю систему, через яку проходить переміщуване вентилятором повітря, називають мережею. Втрати тиску, пов'язані з цим переміщенням, складають опір мережі (втрати на тертя, вихороутворення, удар під час раптового розширення та інше). Для створення і підтримки певної витрати повітря у мережі (усталена течія) необхідно, щоб вентилятор виробляв підвищення тиску  $P_{\nu}$ , що дорівнює опору мережі за даної продуктивності Q. Аеродинамічна характеристика вентилятора є залежністю тиску  $P_{\nu}$ , потужності на валу робочого колеса N і коефіцієнта корисної дії  $\eta = P_{\nu}Q/N$  від продуктивності Q. Тип вентилятора характеризується швидкохідністю  $n = Q^{1/2}/P_{\nu}^{3/4}$ . Клас осьових вентиляторів досить широкий.

Найбільш простою в експлуатації є схема вентилятора без вхідного направляючого і вихідного спрямляючого апаратів (рис. 5.4) [19]. Ця схема застосовується, коли необхідно отримати невеликі підвищення тиску, а швидкість закручування потоку у колесі невелика у порівнянні з окружною швидкістю вентилятора [67]. При цьому невеликі і втрати тиску через втрати кінетичної енергії потоку, обумовлені швидкістю закручування.



Рис. 5.4 Типовий осьовий вентилятор

На втулці робочого колеса рівномірно під одним кутом розташовані однакові

лопатки, систему яких називають лопатковим вінцем. Число лопаток у вінцях може становити від 2 до 30 у залежності від типу вентилятора і його особливостей.

#### 5.2.2 Геометричні параметри решіток профілів

Вивчення обтікання лопаткових вінців осьового вентилятора часто зводиться до розгляду течії у плоских решітках, які характеризуються певним набором геометричних параметрів [346]: відносною товщиною профілю  $\bar{c} = c/b$ , де c – товщина профілю, b – його хорда; відносної увігнутістю профілю  $\bar{f} = f/b$ , де f – стріла прогину; розташуванням максимальної товщини до хорди  $\bar{x}_c = x_c/b$ , де  $x_c$  – максимальна товщина; розташуванням максимальної стріли прогину вздовж хорди  $\bar{x}_f = x_f/b$ ; гущиною решітки  $\tau = b/t$ , де t – крок решітки; кутом установки (кутом нахилу профілю між хордою профілю і фронтом решітки)  $\theta_c$ .

Для вентиляторів характерні наступні значення параметрів решітки і профілю:  $\bar{c} = 0,03...0,15$ ,  $\bar{f} = 0...0,15$ ,  $\bar{x}_c = 0,25...0,4$ ,  $\bar{x}_f = 0,4...0,6$ ,  $\tau = 0,08...2,0$ ,  $\theta_c = 10...80^\circ$ . Конфігурація профілю задається координатами, що визначають симетричний профіль, наприклад, узагальнений аналітичний профіль С. А. Чаплигіна, який «надягається» на середню лінію.

Разом із профільними лопатками широко використовуються у практиці лопатки листової конструкції постійної товщини.

### 5.2.3 Газодинамічні параметри потоку в осьовому вентиляторі

Потік між лопатками осьового вентилятора є суттєво тривимірним і характеризується величиною і напрямком вектора швидкості, тиском і щільністю газу у різних перетинах. Основні закономірності течії описуються рівняннями руху і нерозривності. Реальна структура потоку у вентиляторі відрізняється від теоретичної схеми через в'язкість газу, а також через наявність радіальних зазорів. Сили тертя, що виникають на обтічних поверхнях лопаток, корпусу і втулки, призводять до виникнення пограничних шарів і вторинних течій, що у свою чергу викривлює ідеалізовану структуру потоку, генерує його радіальну і окружну нерівномірність.

Для урахування істотно тривимірного характеру течії було побудовано математична модель та розв'язано задачу обтікання вінців турбомашин просторовим потоком з урахуванням ефектів в'язкості [28, 67]. На основі автоматизованого комп'ютерного комплексу програм для розрахунку в'язких течій у міжлопаткових каналах турбомашин «Експерт» [274] і розробленої методики просторового профілювання дозвукових вінців осьових компресорів в області сполучення пера лопаток із торцевою поверхнею було здійснено оптимізацію профілів вінців і проведено імітаційне моделювання управління відривом потоку у міжлопаткових каналах турбомашин [1].

#### 5.2.4 Аналіз ефективності роботи осьового вентилятора

Аналіз ефективності роботи вентилятора з використанням розробленої моделі і програмних засобів [68] проведено на прикладі розсіювання стехіометричної сферичної водневої хмари у технологічному боксі, який обладнано витяжною вентиляцією. Геометричні і газодинамічні початкові параметри розрахунку представлено у розділі 5.1. Для механічної витяжки газів із приміщення використовувався осьової вентилятор ВО 06-300 №2,5 Донецького вентиляторного заводу [275], характеристика якого під час роботи на повітрі зображено на рис. 5.5.

Діаметр робочого колеса вентилятора становить 250 мм, продуктивність – 550-850 м<sup>3</sup>/ч, надлишковий тиск – 19-26 Па. Цей вентилятор є вентилятором загальнопромислового призначення і призначений для роботи з неагресивними газами [19].

Сумарна витрата газу  $G_{\Sigma}$ , яка забезпечується вентилятором на мінімальному (550 м<sup>3</sup>/год), номінальному (750 м<sup>3</sup>/ч) і максимальному (850 м<sup>3</sup>/год) режимах

витяжки газової суміші, підтримувався за припущення, що крізь вхідний отвір у приміщення надходить повітря, яке відповідає нормальним умовам. Розрахунки проводилися до повного видалення водню з приміщення за рахунок витяжної вентиляції.



Рис. 5.5 Характеристика вентилятора ВО 06-300 №2,5 (1340 об/мин, 0,12 кВт): 1 – мінімальний, 2 – номінальний і 3 – максимальний режими

Робота осьового вентилятора здійснює примусовий відтік газової суміші з витратою  $G_{\Sigma}$  із приміщення через вихідний ВО (рис. 5.1). При цьому у вхідному отворі природної вентиляції, виробляється приточна течія, подібна згенерованому потоку у отворі витяжки. Аналіз динаміки поля масової концентрації водню для роботи осьового вентилятора на всіх режимах проводився у центральній щодо осі ОХ площині. На рис. 5.6 зображено часову динаміку області, яку займає частина хмари, у якій концентрація водню перебуває у концентраційних межах займання. У процесі вентиляції хмара істотно змінює свою форму і розміри відповідно до картини течії газової суміші, яка виробляється виходячи з обраної схеми примусової вентиляції [19].

У якості показника рівня вибухобезпеки вентильованого приміщення може бути суммарна маса вибухонебезпечної домішки водню (рис. 5.7), яка визначається як сума маси домішки в усіх елементарних контрольних об'ємах, де ВМК водню є у концентраційоних межах займистості (0,014<Q<0,929) [314], тобто там, де

можливий вибух [57].

Розрахунок припинявся, коли поточна сумарна маса вибухонебезпечної домішки водню у межах приміщення, віднесена до її початкового значення у момент викиду хмари під час аварії, ставала менше 1%.



Рис. 5.6 Динаміка зміни області займання у процесі вентиляції: 1-6 – область у моменти 0, 3, ..., 15 с після початку вентиляції



Рис. 5.7 Часова динаміка маси домішки у межах займання у приміщенні: 1 – максимальний, 2 – номінальный і 3 – мінімальний режими роботи вентилятора

Аналіз сумарної маси водню, який може зайнятися і вибухнути, свідчить про зменшення її величини у процесі вентиляції, і відповідно зниження ризиків матеріальних збитків і людських жертв, ймовірних у разі пожежі у даному технологічному боксі. Як і слід було очікувати, час до повної витяжки домішки з приміщення для максимального режиму роботи вентилятора становить мінімальну величину порівняно з іншими режимами роботи вентиляційної системи. Найгірший рівень пожежовибухобезпеки забезпечує мінімальний режим, під час якого час витяжки збільшується більш ніж у 1,5 рази. Номінальний режим можна рекомендувати як основний, тому що час витяжки зростає небагато щодо максимального режиму, а ККД вентилятора при цьому відповідає максимальним значенням.

### 5.3 Аналіз ефективності схеми розміщення вентиляційної витяжки у гаражі

Водень останнім часом стає все більш популярним паливом для транспортних засобів. Розробка рекомендацій та законодавчих інструкцій, що стосуються задач дослідження умов зберігання водневих систем усередині приміщень є однією з цілей європейського проекту HYSAFE (Safety of Hydrogen as an Energy Carrier).

Розглядається рух воднево-повітряної газової суміші, яка виникла внаслідок витоку водню з інтенсивністю 7200 л/год із автомобіля, що знаходиться у гаражному приміщенні (рис. 5.8), яке обладнане отворами природної (на вході) і примусової витяжної (на виході) вентиляції. Під впливом роботи вентиляційної системи у витяжний отвір буде надходити газова суміш із приміщення з сумарним витратою  $G_{\Sigma}$ . Подача свіжого повітря зі швидкістю  $C_1$  буде здійснюватися через вхідний BO приміщення. Для симуляції різних варіантів вентиляції використовувався CFD-код FIRE [68]. Отриманий розподіл концентрації водню використовувався для аналізу потенціалу ймовірного вибуху газового хмари.

Геометрію гаражного приміщення представлено на рис. 5.8 [17], а габаритні

характеристики і розташування окремих дискретних блоків розрахункової схеми наведені у табл. 5.1. Для спрощення апроксимації, автомобіль розбивається на ряд суцільних блоків: шасі, кабіна, багажник (клин 1), капот (клин 2) і колеса у вигляді паралелепіпедів. Виходячи із заданої геометрії споруди і розташування плями витікання водню, ВО, передбачається наявність площини симетрії, яка є паралельною YOZ. Тому, з метою економії ресурсів комп'ютера, розглядалася половина розрахункової області у ширину. Щоб уникнути невизначеності у завданні граничних умов на виході, розрахункову область було подовжено за межі гаража у напрямку ОZ, і габарити її складали 10 м у довжину, 2,8 м – у ширину і 1,9 м – у висоту. Обчислювальні комірки мали форму паралелепіпедів із розмірами 0,1 м у всіх напрямках.



Рис. 5.8 Схема розташування геометричних об'єктів: 1 – автомобіль; 2 – брама; 3 – виток; 4 – отвори природної вентиляції; 5-7 – отвори витяжки

На всіх твердих поверхнях виконувалися умови непротікання. Витік водню моделювався постановкою ГУ СВ ГД з ВМК 100%, температурою 293,15 К і постійною витратою  $G_{\Sigma} = 0,000178$  кг/с. Витяжка здійснювалася постановкою

додаткових ГУ витікання газової суміші з постійною витратою  $G_{\Sigma} = 0,1171236$  кг/с.

Розрахунки різних варіантів розташування примусової вентиляції гаражного приміщення проводилися до виходу на стаціонарний режим за розподілом масової концентрації усередині гаража. Розрахунок варіанту з природною вентиляцією (рис. 5.9а) був зупинений раніше для економії комп'ютерних ресурсів. Для оцінки рівня пожежовибухобезпеки приміщення аналізувався просторовий розподіл масової концентрації водню Q, сумарна маса водню M, концентрація якого була у межах займистості 1,4 < Q < 92,9 %, і об'єм приміщення V, який займає суміш з такою концентрацією водню (табл. 5.2).

Таблиця 5.1

228

Об'єкт	]	Розташування			Габарити			
Координати	Ζ, м	Х, м	Ү, м	Z, м	Х, м	Ү, м		
Гараж	0,0000	0,0000	0,0000	6,4203	3,7084	2,3067		
Шасі	0,7112	1,0414	0,2032	4,9784	1,6256	0,6000		
Клин 1	0,7112	1,0414	0,8032	1,6000	1,6256	0,5430		
Клин 2	4,0896	1,0414	0,8032	1,6000	1,6256	0,5430		
Кабіна	2,3112	1,0414	0,8032	1,7784	1,6256	0,5430		
Колесо 1	1,3500	1,0414	0,0000	0,6096	0,2032	0,2032		
Колесо 2	4,4000	1,0414	0,0000	0,6096	0,2032	0,2032		
Колесо 3	1,3500	2,4638	0,0000	0,6096	0,2032	0,2032		
Колесо 4	4,4000	2,4638	0,0000	0,6096	0,2032	0,2032		
Ворота	6,4003	0,4826	0,0000	0,0200	2,7432	2,1336		
Отвір 1	6,4003	0,4826	1,9558	0,0200	2,7432	0,5000		
Отвір 2	6,4003	0,4826	0,0000	0,0200	2,7432	0,5000		
Витік	0,7112	1,7000	0,2032	0,0000	0,2000	0,1000		
Витяжка 1	0,0000	1,7000	1,9000	0,0000	0,2000	0,2000		
Витяжка 2	3,1000	1,7000	2,3000	0,2000	0,2000	0,0000		
Витяжка 3	6,4000	1,7000	1,9000	0,0000	0,2000	0,2000		

Геометричні характеристики об'єктів

Внаслідок фізичних властивостей, водень підіймається, розсіюючись, до стелі і накопичується у верхній частині приміщення. До досягнення стаціонарного стану, коли ГД почне витікати з верхнього вентиляційного каналу природної вентиляції, маса *M* і об'єм *V* небезпечної зони продовжує збільшуватися.

Обладнання гаража витяжним каналом примусової вентиляції на стелі замість верхнього отвору природної вентиляції у гаражних воріт призводить до істотної перебудови просторової картини.



Рис. 5.9 Розподіл масової концентрації водню: природна вентиляція (a); витяжка «зверху» (б), «праворуч» (в) і «ліворуч» (г)

#### Таблиця 5.2

Схема вентиляції	М, кг	<i>V</i> , м <sup>3</sup>
Природна вентиляція	0.237764	5.918525
Витяжка праворуч	0.027786	0.971292
Витяжка зверху	0.043324	1.597871
Витяжка ліворуч	0.018796	0.643162

#### Розрахункові показники вибухобезпеки

Після увімкнення витяжки (одночасно з початком витоку водню) формується вертикальний потік газу заданої витрати (рис. 5.9б), який захоплює із собою і домішку, яка викидається з автомобіля.

Розрахунок значно раніше виходить на стаціонарний режим. Сумарна маса *M* і об'єм *V* вибухонебезпечного водню істотно знижується, зменшуючи ризик виникнення пожежі.

Постановка витяжки «праворуч» ще більш перебудовує потік. З'являється потужна горизонтальна течія (рис. 5.9в), яка перешкоджає накопиченню спливаючого водню під стелею. Тому, не досягаючи верхньої частини приміщення, домішка залишає гараж (рис. 5.10в), що сприятливо відбивається на сумарних показниках вибухобезпеки (табл. 5.2) порівняно з розглянутими схемами вентиляції.

До ще більш кардинальних змін у картині течії призводить постановка витяжного вентилятора «ліворуч» (рис. 5.9г).

У даному випадку формується горизонтальний поздовжній потік зворотного напрямку відповідно до заданого режиму роботи вентилятора. Витяжка не тільки перешкоджає спливання водню і накопичення його під стелею, а й розташовується ближче всього до джерела ГД, що і пояснює ефективність вентиляції (рис. 5.10в).

Сумарна маса вибухонебезпечного водню M знижується в ще більше. Об'єм області V, у якії може зайнятися суміш, також зменшується (табл. 5.2). Ці параметри є визначальними під час детермінованої оцінки потужності потенційного вибуху, інтенсивності вибухової хвилі і рівня термічного навантаження на конструкції, що знаходяться у приміщенні гаража.



Рис. 5.10 Розподіл швидкості потоку під час механічної вентиляції: а) вертикальної складової (витяжка «зверху»); б) поздовжньої складової (витяжка «праворуч»); в) поздовжньої складової швидкості (витяжка «ліворуч»)

#### 5.4 Детермінований аналіз схем множинної вентиляції у гаражі

Розглянемо аварійний викид і розсіювання у гаражному приміщенні за умов витяжки стехіометричної сферичної хмари суміші водню з повітрям [57, 60, 61]. Хмара газоповітряної суміші має такі початкові параметри: статична температура 273К, тиск 101325 Ра, молярна маса газової домішки 0,002 кг/моль, радіус 0,5 м з координатами центру x = 1,8 м, y = 1,6 м, z = 2,3 м у розрахунковій області з габаритами 3,6 × 2,8 × 4,6 м і кількістю обчислювальних комірок уздовж координатних осей 36 × 28 × 46. Витяжні вентиляційні отвори у місцях P1–P3 та природний вхідний вентиляційний отвір Р0 мали габарити 0,4 × 0,4 м і розміщувалися згідно розрахункової карти об'єктів на рис. 5.11. Максимальна сумарна витрата газу  $G_{\Sigma}$ , яку забезпечувала вентиляційна система, становила 0.284443 кг/с [61].



Рис. 5.11 Схема вентиляції приміщення: Р0 – отвір природною вентиляції; Р1–Р3 – місця витяжних отвірів механічної вентиляції

Варианти V1-V7 різних схем механічної вентиляції представляли собою різні поєднання присутності «+» або відсутності «-» витяжки в місцях можливого розташування Р1-Р3 вентиляторів (табл. 5.3) [61].

#### Таблиця 5.3

Варіанти схем вентиляції

Місця отворів	V1	V2	V3	V4	V5	V6	<b>V</b> 7
P1	+	_	-	+	_	+	+
P2	_	+	_	+	+	_	+
P3	_	_	+	_	+	+	+

За розробленою методологією оцінки ефективності різних схем механічної вентиляції у якості небезпечного параметра будемо розглядати сумарну масу водню у приміщенні у межах займистості М. З часом внаслідок вентиляції ця величина буде зменшуватися. У якийсь момент часу маса М досягне значення 1% відносно початкової маси водню, тому порівняння різних схем вентиляції проведемо за цим критерієм (рис. 5.12, 5.13).



Рис. 5.12 Динаміка зміни маси водню у межах займистості для варіантів V1-V7 схем механічної вентиляції

Отримано, що найбільш ефективними схемами витяжки водню є варіанти V2, V4, V5, V7, де присутня витяжка P2, а найменш ефективними – варіанти V1, V3 з однобічною витяжкою. Проміжне місце зайняла схема V6 з двома бічними

витяжками. Кращою є схема V2 як одна з найбільш ефективних і найменш енергозатратних.



Рис. 5.13 Час витяжки 99% маси водню у межах займистості для варіантів V1-V7 схем вентиляції

#### Висновки до розділу 5

У розділі 5 з використанням уперше розробленого нового класу 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, наведено результати моделювання процесів вентиляції приміщень. На основі моделі потрапляння (відбору) газової домішки в актуальну область, у якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми:

– розглянуто можливості використання розроблених математичних моделей, обчислювальних методів і програмного засобу іх комп'ютерної реалізації для аналізу впливу роботи механічної і природної вентиляції на просторову картину потоку газової суміші у приміщеннях промислового і побутового призначення;

аеродинамічні – розглянуто геометричні та характеристики осьових вентиляторів, які застосовуються для забезпечення вентиляції у виробничих технологічних процесів приміщеннях, де під час можуть утворюватися вибухонебезпечні газові суміші;

– виконано чисельне моделювання течії воднево-повітряної газової суміші у технологічному боксі в умовах механічної вентиляції за мінімального, номінального і максимального режимів роботи вентилятора. Аналіз сумарної маси горючого газу, що знаходиться у межах займистості, забезпечує можливість рекомендувати номінальний режим вентилятора як оптимальний з точки зору рівня вибухобезпеки приміщення і мінімальних витрат енергії для забезпечення процесу вентиляції.

– проведено аналіз найбільш ефективного розташування витяжної пимусової вентиляції у гаражному приміщенні з автомобілем, у якого сталося аварійне витікання паливного водню. За допомогою детермінованого підходу з'ясовано зони найбільш небезпечного накопичення водневої домішки у повітрі гаража. запропоновано найбільш ефективні схеми множинної вентиляції гаражного боксу.

Основні результати разділу опубліковано у роботах [17, 19, 20, 28, 57, 61].

## РОЗДІЛ 6 АНАЛІЗ І ПРОГНОЗУВАННЯ ПОЛІВ ФІЗИЧНИХ ПАРАМЕТРІВ ПОТОКУ У КАМЕРАХ ТЕРМООБРОБКИ

У даному розділі на основі розробленої математичної моделі [3, 15, 23] зроблено чисельний аналіз і прогнозування розподілів фізичних параметрів у камерах термообробки.

#### 6.1 Чисельне моделювання процесів теплової обробки в термокамерах

Робота обладнання швидкісного кріогенного охолоджування заснована на проточній схемі організації процесу, яка передбачає одноразове використання робочого тіла. Їм може бути будь-який нереагуючий з охолоджуваним продуктом скраплений газ (кисень, вугле-кислота, азот і ін.). Найбільш перспективним і широко використовуваним холодоагентом є рідкий азот, якийкиплить за атмосферному тиску і температури -196 С [3].

З метою швидкого і якісного заморожування харчових продуктів ефективною є тризонна проточна система холодопостачання [3], яка забезпечує можливість використовувати пари кріоагента після його випаровування у секції заморожування (зона I) для попереднього охолодження продукту (зона II) і вирівнювання його температури (зона III). При цьому доцільним є порівняно повільне охолодження продукту у зоні І для рівномірного досягнення кріоскопічної температури у всій його товщі. Заморожування продукту у зоні ІІ, навпаки, бажано проводити досить реалізації дрібнокристалічної структури інтенсивно 3 метою i швидкого проходження інтервалу температур між кріоскопічною і -10 С, 3a якого відбуваються несприятливі зміни якості продуктів.

Вибір режимів заморожування визначається перш за все динамікою криогенного середовища численьне моделювання руху якого під час роботи обладнання швидкого охолодження здійснювалося на основі розробленої тривимірної математичної моделі руху газової суміші у замкненому просторі з вентиляцією, яка подається струмінями (розділ 2) [5]. Після отримання тривимірних температурних полей середовища охолодження можна розв'язувати задачу СТО і теплопровідності усередені об'єкта охолодження [3].

Швидкоморозильний тунель (рис. 6.1) складається з трьох послідовно розташованих секцій: попереднього охолодження, заморожування і вирівнювання температури і має наступні внутрішні розміри: довжину 2,31 м, ширину 0,66 м, висоту у секції заморожування 0.4 м, в інших секціях – 0.16 м.

Подавання азоту здійснювалося у верхній частині секції заморожування через блок черези два ряди форсунок (по чотири форсунки у кожному). Під час експерименту рідкий холодоагент подавався з витратою 0,01 кг/с.

У нижній частині тунелю розташовувався роликовий транспортер, на якому може розміститися від 4 до 6 яток з продуктом заморожування. Для інтенсифікації теплообміну у секції попереднього охолодження передбачено вентилятор. З метою контролю стану продукту і охолоджуючого середовища над продуктом система вимірювання містила нерухомі датчики температури у секціях тунелю і термопари, які рухалися разом із лотком.



Рис. 6.1 Швидкоморозильний тунельний апарат:

1 – секція попереднього охолодження; 2 – секція заморожування;
3 – секція вирівнювання температури; 4 – блок форсунок для подачі
холодоагенту; 5 – вентилятор; 6 – ятки з продуктом заморожування;
7 – нерухомі термопари; 8 – рухливі термопари у лотку з продуктом

Результати розрахунку поля температури суміші у поздовжньому (у площині симетрії) і поперечному (у секції заморожування) перетинах тунелю представлено на рис. 6.2. Вони порівнювалися з результатами вимірювань температури нерухомими термопарами у натурних експериментах під час заморожування чорної смородини (рис. 6.3) [12].



Рис. 6.2 Поле температури у поздовжньому (a) і поперечному (б) перетинах у секції заморожування скороморозильного тунелю



Рис. 6.3 Розподіл температури хладагенту (1) і чорної смородини (2) під час її заморожування у тунелі (лінії – розрахунок, маркери – експеримент)

Валідація математичної моделі теплопереносу під час СВ хладагенту у швидкоморозильній камері відносно екпериментальних результатів вимірювання температури охолоджуючого газового середовищи проводилася обчисленням статистичних показників ефективності моделі, які було рекомендовано у роботах [92, 317]. Формули показників і рекомендовані діапазони іх прийнятних значень 4.1. табл. 3a представлено V резульатами статистичної обробки низки експериментальних і модельних температур (рис. 6.3) було виявилено такі значення показників ефективності моделі: FB = -0.002; VG = 1.00; MG = 0.99; NMSE = 0.002; Fa2 = 100%; r = 0,97. Значення показників свідчать про якісний і кількісний збіг розрахункових і експериментальних даних. Тому розроблена математична модель руху газової суміші та програмний засіб її комп'ютерної реалізації, можуть використовуватися для вибору оптимальної (за обраної швидкості роликового транспортера) витрати холодоагенту у камерах заморожування [3].

### Висновки до розділу 6

У розділі 6 з використанням розробленого нового класу 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, наведено валідацію результатів моделювання відносно наявних результатів експериментальних досліджень.

На основі розробленої нестаціонарної математичної моделі потрапляння (струминного витікання) газової домішки в актуальну область, у якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми:

- отримано результати математичного моделюваня процесів утворення

шляхом багатоструминного витікання заданої інтенсивності кріоагенту (азоту), утворення азото-повітряної суміші і її руху у швидкоморозильному тунелі з метою заморожування харчових продуктів;

– проведено валідацію математичної моделі відносно даних натурного експерименту на прикладі заморожування смородини. Якісний і кількісний збіг розрахункових і експериментальних даних забезпечує можливість використовувати математичну модель і програмний засіб її комп'ютернї реалізації у якості інженерного інструмента під час аналізу і прогнозу тривимірних температурних полей у камерах термообробки з метою підвищення ефективності роботи термообладнання.

Основні результати разділу опубліковано у роботах [3, 5, 12, 15, 23].

## РОЗДІЛ 7 АНАЛІЗ І ПРОГНОЗ БЕЗПЕКИ ПІД ЧАС ТЕХНОГЕННИХ АВАРІЙ

Розділ присвячено здійсненню чисельного аналізу і прогнозу безпекового стану на промислових об'єктах під час техногенних аварій. Застосовано методи ймовірнісної і детермінованої оцінки безпекового стану людини та конструкцій будівель у навколишньому середовищі, які зазнають впливів негативних факторів, які виникають під час аварійного викиду і поширенню газових домішок у приземному шарі атмосфери [53].

## 7.1 Чисельний аналіз ймовірності ураження персоналу отруйними хімічними речовинами

Одним із найбільш небезпечних сценаріїв техногенних аварій є викид у повітря приземного шару атмосфери токсичних газоподібних домішок внаслідок часткового або повного руйнування ємностей їх зберігання або транстпортування.

Розроблена математична модель процесу випаровування токсичної домішки з поверхні плями аварійного пролиття скрапленого токсичного газу, формування хмари отруйної хімічної речовини (ОХВ) з повітрям і її подальшого поширення у приземному шарі атмосфери з урахуванням захаращення простору забезпечує можливість отримати просторово-часові поля фактора ураження (інгаляційної токсодози) і визначити розподіл ймовірності негативних наслідків на людину на основі апарату пробіт-аналізу [52]. Запропонований алгоритм і метод урахування змінної ІВ зрідженого токсичного газу з поверхні плями протоки у процесі викиду газової домішки в приземний шар атмосфери був реалізований у вигляді підсистеми дослідницького програмного комплексу «Toxic Spill Safety» [72]. Комплекс забезпечує можливість проводити тривимірний аналіз розсіювання токсичних ГД у часі і просторі за практично прийнятні терміни часу і робити прогноз ризиків летального ураження внаслідок інгаляції людиною випарів токсичного газу.

# 7.1.1 Математичне моделювання наслідків випаровування аварійного пролиття токсичних речовин на залізничному транспорті

Одним із засобів транспортування токсичних речовин на великі відстані є його переміщення у зрідженому стані у залізничних цистернах. Відмова функціонування системи герметизації, часткове ушкодження або повне руйнування цистерни призводить до аварійного пролиття ЗГ на землю з утворенням плями, з поверхні якої має місце випаровування рідини і потрапляння газової фази до чистого повітря атмосфери з утворенням токсичної хмари. Особливо небезпечним перебігом подій є здійснення такої аварії поблизу населених пунктів, наприклад, на території залізничних станцій.

# 7.1.1.1 Вплив загромадження простору на наслідки випаровування аварійного пролиття токсичних речовин

Розглянемо випаровування 6925 кг зрідженого ціаністого водню (токсичного вибухонебезпечної речовини щільністю 689 кг/м<sup>3</sup>, молярної масою 0,027 кг/моль, температурою кипіння 298,6 К, теплотою випаровування 933 кДж/кг) з плями пролиття у формі кола радіусом R, яке утворилося внаслідок руйнування цистерни на майданчику стоянки залізничної станції у межах населеного пункту з великими будинками (коефіцієнт степеневої залежності для апроксимації швидкості в атмосферному шарі над поверхнею землі k = 0,4) (рис. 7.1) [24].

Центр кола плями пролиття розташовувався на відстані Xc = 16 м, Zc = 16 мвід початку координат у розрахунковій області з габаритами  $Lx \times Ly \times Lz = 85 \times 10 \times 85 \text{ м}$  і варіантом за кількістю комірок уздовж координатних осей  $85 \times 10 \times 85$ , відповідно [55].

На відстані Xa = 30 м і Za = 28 м від початку координат був будинок станції з габаритами Dx  $\times$  Dy  $\times$  Dz = 15  $\times$  5  $\times$  25 м.

Вітер набігає зі швидкістю 3 м/с під кутом 45° до осі ОД на висоті 0,5 м. У

цьому випадку початкова ефективна швидкість вторинної хмари, що утворюється на стадії випаровування з плями пролиття, становила 1,19 м/с.



Рис. 7.1 Мапа об'єктів біля землі: 1 – вектор швидкості вітру; 2 – пляма пролиття; 3 – будівля

Якщо знехтувати масою газової фракції первинної хмари, що утворилася внаслідок аварійного руйнування ємності і врахувати, що температура кипіння речовини вище температури навколишнього середовища (тобто, маса небезпечної речовини, що переходить в аерозоль до первинної хмари дорівнює нулю), тодя за формулою (14) можна визначити площу плями пролиття 201 м<sup>2</sup> і радіус кола плями R = 8 м. Тоді згідно з формулою (15) інтенсивність випаровування ціаністого водню з плями протоки становитиме 0,00106 кг/с/м<sup>2</sup>.

Вважалося, що випаровування починалося з моменту часу  $t_1 = 0$  с і примусово припинялося після  $t_2 = 5$  с, наприклад, за допомогою заливання плями пролиття спеціальною піною. Час закінчення розрахунків було прийнято таким, щоби газоповітряна токсична хмара залишила межі розрахункової області.

Було виконано два варіанти розрахунку: 1 – без урахування наявності будівлі залізничної станції і 2 – з урахуванням загромождения області розрахунку будівлею.

Аналіз зміни полів масової концентрації ціаністого водню проводився у площині XOZ у шарі обчислювальних комірок біля землі. Розвиток процесу поширення домішки до моменту завершення випаровування представлено для варіанту без будівлі на рис. 7.2. Хмара продовжує підживлюватися домішкою (рис. 7.2а), яка продовжує випаровуватися з плями пролиття, рухаючись за вітром і захоплюючи все більший простір біля землі (рис. 7.2б). У момент припинення випаровування підживлення домішкою завершується, і хмара поступово залишає майданчик (рис. 7.3а).



Рис. 7.2 Поля масової концентрації домішки у різні моменти часу *t* після початку випаровування (варіант без будівлі): а) *t* = 2 c; 6) *t* = 3 c

Присутність загромадження простору будівлею буде суттєво впливати на картину розподілу домішки у просторі. Якщо будівля відсутня, видно, що хмара випаровування безперешкодно полишає розрахункову область, поступово втрачаючи щільність токсичної домішки (рис. 7.3а).

У разі присутності об'єкту загромождения розрахункової області хмара отруйної хімічної речовини зустрічає перешкоду на шляху своєго руху (рис. 7.36). Вона змінює форму і розміри відповідно до течії газової суміші, яка виробляється у процесі обтікання будівлі. Наявність перешкоди збільшує не тільки максимальні

значення масової концентрації токсичної речовини, але й час проходження хмари розрахунковою області, а значить, і час експозиції обслуговуючого персоналу шкідливому впливу.



Рис. 7.3 Поля відносної масової концентрації токсичної домішки у момент часу t = 20 с після початку випаровування: а – без будівлі; б – з будівлею

Нестаціонарні поля масової концентрації ціаністого водню можна розглядати як просторово-часовий розподіл небезпечного параметра фізичного процесу, який розглядається. Ці дані використовуються для розрахунку інгаляційної токсодози, як фактора ураження, пробіт-функції для ціаністого водню і, відповідно, умовної ймовірності летального наслідку для людини під час інгаляції даної токсичної речовини (рис. 7.4) [22].

Використаємо характерну площа *S<sub>x</sub>* розрахункової області біля землі, яку займає зона з умовною ймовірністю летального ураження 50% і вище, для порівняння розглянутих варіантів обчислювального експерименту.

У випадку врахування загромадження будівлею (рис. 7.4б) характерна небезпечна зона становила 1290 м<sup>2</sup>, що істотно більше (на 29%), ніж у першому варіанті розрахунку (рис. 7.4а) – 1001 м<sup>2</sup>.



Рис. 7.4 Поле умовної ймовірності летального ураження людини біля землі (%): а – без будівлі; б – з будівлею

Якісний і кількісний аналіз представлених полів умовної ймовірності летального результату внаслідок ураження людини інгаляційної токсодозою забезпечує можливість зробити висновок про суттєвий вплив загромадження простору будівлею на розташування і форму небезпечної для обслуговуючого персоналу зони, що обґрунтовує необхідність урахування даного фактора під час аналізу і прогнозу розвитку техногенної аварії розглянутого типу на підприємствах з метою розробки рекомендацій щодо зниження ризиків летальних наслідків.

## 7.1.1.2 Вплив форми плями аварійного пролиття токсичних речовин на наслідки випаровування у повітря

Проливання рідкої фази після аварійного руйнування ємності зберігання призводить до утворення плями, форма якої може бути різною. Розглянемо вплив еліпсної плями форма якої змінюється залежно від коеффіцієнта стиснення (еліптичності) [56]. Маємо майданчик тієї ж форми і розмірів, дискретизований тим же чином, як і в розділі 7.1.1.

Розглядається еліпсоїдна пляма пролиття цианістого водню з напіввісями *a* та *b* (табл. 7.1) та центром C, який знаходиться на відстані  $X_C = 16$  м та  $Z_C = 16$  м від початку координат O (рис. 7.5) [30, 48].

Форма плями характеризується коефіцієнтом стиснення (розтягування) уздовж напрямку вітру (співвідношення малої *b* та великої *a* напіввісей еліпса)  $\omega = b/a$ . Цей параметр називається коефіцієнтом стиснення еліпса або еліптичністю. Розглядаються еліпси трьох типів із різною еліптичністю  $\omega$  але однакової площі *S* (рис. 7.6а). Уздовж осі симетрії зони дисперсійної домішки розташовані три КТ з координатами P<sub>0</sub> (34.5; 34.5), P<sub>1</sub> (54.5; 54.5) і P<sub>2</sub> (74.5; 74.5).



Рис. 7.5 Мапа об'єктів: 1- вектор швидкості вітру;

 $2 - пляма пролиття; P_0-P_2 - KT.$ 

#### Таблиця 7.1

Параметри форми еліпса плями пролиття

Banjaur Aninca	Напіввісь	Напіввісь b,	Площа еліпса	Еліптичність
Баріані еліпса	а, м	М	<i>S</i> , м <sup>2</sup>	ω
0	16.0	4.0	201.1	0.25
1	8.0	8.0	201.1	1.0
2	4.0	16.0	201.1	4.0

Вітер дме зі швидкістю 3 м/с під кутом 45° до осі ОZ на висоті 0,5 м. У цьому випадку початкова ефективна швидкість вторинної хмари, що утворюється на стадії випаровування із плями пролиття, становить 1,19 м/с.

Дискретизація плями пролиття здійснюється кінцево-різницевою сіткою за принципом: якщо центр обчислювальної комірки знаходиться всередині контуру плями, на цій грані комірки буде вистановлено граничні умови «випаровування», в іншому разі — вистановляються граничні умови «потік-земля» (тобто «непротікання»). Результати такої дискретизації плями пролиття для варіанту 1 (з еліптичністю  $\omega = 1$ ) представлені на рис. 7.66.

Як було зазначено у розділі 7.1.1, площа плями пролиття становила 201 м<sup>2</sup>, а інтенсивність випаровування ціаністого водню складала 0.00106 кг/с/м<sup>2</sup>.



Рис. 7.6 Еліпсоїдні плями пролиття: а – форми еліптичності (варіант 0 –  $\omega$  = 0,25; варіант 1 –  $\omega$  = 1,0; варіант 2 –  $\omega$  = 0,25); b – дискретизація плями варіанту 1.

Процес випаровування починався одразу з початком розрахунку  $t_1 = 0$  с ы припинявся в момент часу  $t_2 = 5$  с. Розрахунок завершувався після того, як хмара залишала актуальний простір (приблизно 20 с).

Було виконано три варіанти розрахунку, кожен з яких характеризується величиною коефіцієнта еліптичноті  $\omega$ : 0 – варіант з найменш розтягнутим уздовж напряму вітру еліпсом  $\omega = 0,25$ ; 1 – варіант з круглою плямою  $\omega = 1,0$ ; 2 – варіант з найбільш розтягнутим еліпсом  $\omega = 4$ . Аналіз зміни полів масової концентрації

ціаністого водню проводився у площині XOZ в шарі обчислювальних комірок біля землі. На рис. 7.7 показано типову картину розподілу токсичної речовини для різних варіантів плями пролиття.



Рис. 7.7 Поля масової концентрації домішки у момент часу 5 с від початку випаровування: а, б, в – варіанти 0, 1, 2 (рівні 1-6 відповідають концентраціям 0,05; 0,1; 0,15; 0,2; 0,25; 0,3%).

Динаміка змін масової концентрації домішки у КТ для різної форми плями пролиття зображена на рис. 7.8.



Рис. 7.8 Історія масової концентрації для плями пролиття різної форми: 1-3 – у КТ Р<sub>0</sub>; 4-6 – у КТ Р<sub>1</sub>; 7-9 – у КТ Р<sub>2</sub>.

Нестаціонарні поля масової концентрації ціаністого водню розглядалися як просторово-часові розподіли небезпечного параметра фізичного процесу розсіювання токсичної домішки. Ці дані використовувалися для обчислення інгаляційної токсидози як фактора ураження, пробіт-функції для ціаністого водню і умовної ймовірності летального впливу для людини (рис. 7.9).

Для аналізу безпекового стану у КТ порівняльна діаграма залежності летальної умовної ймовірності від форми плями пролиття відображено на рис. 7.10а. Ще однією порівняльною характеристикою небезпеки розглянутого процесу розповсюдження токсичної домішки є площа  $S_{50}$ , яку займає зона із летальною умовною ймовірністю 50% і вище (рис. 7.10б) [42].



Рис. 7.9 Поля летальної умовної ймовірності (%): а, б, в – варіанти 0, 1, 2



Рис. 7.10 Летальна умовна ймовірність для різних КТ (а) та небезпечна зона для різних форм плями пролиття (б).

Просторовий аналіз полів масової концентрації ціаністого водню поблизу землі для еліптичної плями пролиття з різною еліптичністю (рис. 7.7) забезпечує можливість побачити типову картину розподілу газоподібної домішки з максимальною концентрацією у ядрі над плямою пролиття, розсіювання хмари у напрямку вітру з поступовим зменшенням значень концентрації, що обумовлено турбулентним змішуванням домішок з чистим повітрям. Після припинення випаровування хмара вільно залишає актуальний простір, поступово розсіюючись.

Шя підтверджується часовою динамікою зміни точка зору масової концентрації домішки у КТ, як показано на рис. 7.8 для різних форм плями пролиття. Видно, що кожен варіант дає типову картину поступового зменшення максимальної величини масової концентрації, коли хмара віддаляється від епіцентру випаровування. Більше того, зі зростанням величини еліптичності *ω* плями пролиття зростає максимальна масова концентрація у КТ. Ця різниця поступово нівелюється з віддаленням від центру плями. Якісний та кількісний аналіз полів умовної ймовірності летальних наслідків, представлений на рис. 7.9, забезпечує можливість зробити висновок про значний вплив форми плями пролиття на місце розташування та форму небезпечної для людини зони. Чим менший коефіцієнт  $\omega$  еліптичної плями, тим менші за значення летальна умовна ймовірність у КТ (рис. 7.10а) та характерна площа S<sub>50</sub> найнебезпечнішої зони, де умовна ймовірність летальних наслідків для людини більше 50% (рис. 7.10б). Зі збільшенням коефіцієнта  $\omega$ відносно кругової плями тенденція до збільшення летальної умовної ймовірності у КТ зберігається, але менш значущо, а характеристична площа S<sub>50</sub> навіть дещо зменшується, що можна пояснити більш вузьою серединною зоною щільного ядра домішки у хмарі та шляхом більш інтенсивного змішування з чистим повітрям.

Таким чином, виявлені особливості розсіювання токсичної домішки обгрунтовують необхідність ураховувати фактор ω для еліпсоїдальної форми плями пролиття токсичної рідини під час аналізу та прогнозу розвитку техногенної аварії подібного типу з метою розробки рекомендацій щодо зменшення ризиків летальних наслідків для людини.

## 7.1.1.3 Чисельна оцінка впливу швидкості вітру на наслідки випаровування пролитої токсичної речовини

Моделювався викид 6098 кг зрідженого ціаніду водню [56, 59, 62] (токсичного

вибухонебезпечної речовини щільністю 689 кг / м3, молярної масою 0,027 кг / моль, температурою кипіння 298,6 К, теплотою випаровування 933 кДж / кг) з плями пролиття довільної форми площиною S=177 м<sup>2</sup>, що утворилася в результаті руйнування ємності в районі морського порту (коефіцієнт статечної залежності для апроксимації швидкості вітру в атмосферному шарі над землею k = 0,4) [37].

Вітрова обстановка у приземному шарі атмосфери впливає на інтенсивність випаровування аварійного пролиття зрідженої токсичної речовини і формування небезпечної зони токсичного ураження людини. Моделювалося випаровування з плями заданого контуру для різних варіантів V1-V5 вітру: 3, 5, 7, 9, 11 м/с. Вітер набігав під кутом 45° до поздовжньої осі простору, який біля землі був майданчиком квадратної форми 60 х 60 м. Уздовж діагоналі на відстанях 35, 55 і 75 м від початку координат розташовувалися КТ Р0, Р1 і Р2 [62].

Були обраховані профілі швидкості вітру для степеневого закону з коеффіцієнтом k = 0,4 з метою отримати ефективну ШВ на висоті поверхні випаровування 0,05 м (табл. 7.2). Профілі візуалізовано на рис. 7.11.



Рис. 7.11 Профілі швидкості повітря біля землі

За характерні швидкісті вітру, які описують вітрову обстановку на майданчику було обрано величини швидкості на середині висоти кінцево-об'ємної
розрахункової комірки (точка заміру). За значення ефективної швидкісті вітру було обрано величину швидкості на прийнятій висотї шару пролитої рідини. Це дало змогу обчислити інтенсивність випаровування аварійно пролитої токсичної речовини з поверхні плями пролиття, які наведено в табл. 7.2.

Таблиця 7.2

Висота		Варіанти розрахунку				
Н1, м	V1	V2	V3	V4	V5	
10,00	9,94	16,57	23,20	29,83	36,46	
9,00	9,53	15,89	22,24	28,60	34,95	
8,00	9,09	15,16	21,22	27,28	33,35	
7,00	8,62	14,37	20,12	25,86	31,61	
6,00	8,11	13,51	18,91	24,32	29,72	
5,00	7,54	12,56	17,58	22,61	27,63	
4,00	6,89	11,49	16,08	20,68	25,27	
3,00	6,14	10,24	14,33	18,43	22,52	
2,00	5,22	8,71	12,19	15,67	19,15	
1,00	3,96	6,60	9,24	11,88	14,51	
0,50	3,00	5,00	7,00	9,00	11,00	
0,45	2,88	4,79	6,71	8,63	10,55	
0,40	2,74	4,57	6,40	8,23	10,06	
0,35	2,60	4,34	6,07	7,80	9,54	
0,30	2,45	4,08	5,71	7,34	8,97	
0,25	2,27	3,79	5,31	6,82	8,34	
0,20	2,08	3,47	4,85	6,24	7,62	
0,15	1,85	3,09	4,32	5,56	6,80	
0,10	1,58	2,63	3,68	4,73	5,78	
0,05	1,19	1,99	2,79	3,58	4,38	
0,00	0,00	0,00	0.00	0,00	0.00	

Профілі швидкості вітру для варіантів V1-V5

Кожного обчислювального експерименту для різних швидкостей вітру контролювалися нестаціонарні просторові розподіли масової концентрації токсичної газоподібної речовини (варіант розрахунку для швидкості вітру V1 = 3 м/с представлено на рис. 7.12)

Також було проведено нестаціонарну зміну масової концентрації домішки у КТ РО-Р2 (рис. 7.13). Видно, що з пришвидшенням всіх вітру у КТ значення максимальної масової концентрації зменшується, що пояснюється підвищеною інтенсивністю розсіювання. Таким же чином веде себе і токсодоза, яка є інтегральним значенням. Для порівняння поведінки максимальної массової концентрації і токсодози для одного режиму вітрової обстановки на рис. 7.14 і 7.15 відображено поведінку цих характеристик в різних КТ РО-Р2.

Таблиця 7.3

Параметр	Варіанти розрахунку				
	V1	V2	V3	V4	<b>V</b> 5
<i>V</i> <sub>1</sub> , м/с	3	5	7	9	11
$u^e_{0ef}$	1,19	1,99	2,79	3,58	4,38
Інт. вип., кг/с/м <sup>2</sup>	0,00106	0,00139	0,00173	0,00206	0,00240
S <sub>50</sub>	861	408	140	34	0

Параметри випаровування пролиття для варіантів V1-V5



Рис. 7.12 Поля масової концентрації домішки біля землі для варіанту V1: а-д – моменти часу 3, 13, 23, 33, 43 с, відповідно



Рис. 7.13 Зміна масової концентрації домішки в часі: а-в – КТ РО-Р2, відповідно



Рис. 7.14 Зміна масової концентрації домішки в часі для КТ РО-Р2 (варіант вітру V1)



Рис. 7.15 Ймовірність ураження у точках РО-Р2 для варіантів V1-V5

Поля масової концентрації домішки за розробленою методологією використовуються для розрахунку просторового розподілу умовної ймовірності летального ураження людини (рис. 7.16).



Рис. 7.16 Поле умовної ймовірності смертельного ураження біля землі: а-д – для варіантів V1-V5, відповідно

Оцінювалася також площа небезпечної зони  $S_{50}$ , де ймовірність ураження перевищувала 50% (рис. 7.17), на підставі чого було побудовано залежність масштабу ймовірного смертельного ураження людини (площі небезпечної зони) внаслідок інгаляції токсичної речовини у залежності від швидкості вітру (рис. 7.18). Видно, що максимальну небезпеку складає варіант з мінімальною ШВ, а з пришвидшенням вітру площа небезпечної зони значно зменшується, досягаючи практично нульового значення для максимальної швидкості вітру.

Таким чином, розроблена методологія є корисним інструментом фахівців з безпеки, які оцінюють стан ТО для рози вітрів у зоні розташування об'єкту.



Рис. 7.17 Діаграма площі небезпечної зони біля землі для варіантів V1-V5



Рис. 7.18 Залежність площі небезпечної зони біля землі від швидкості вітру

Користуючись залежністю на рис. 7.18, можна отримати ймовірний масштаб аварії (площу небезпечної зони) для любої швидкості вітру. Наприклад, для вітру зі швидкостю 6 м/с площа зони буде охоплювати приблизно 250 м<sup>2</sup>.

## 7.1.1 Чисельне моделювання струминного витікання в атмосферу газоповітряної суміші різної концентрації домішок

Часто має місце аварійний або контрольовний викид не чистої газоподібної речовини, а її суміші з повітрям, в якій відносна масова концентрація домішки Q може бути фіксованою у межах 0 < Q < 100%.

Проводилося моделювання витікання в атмосферу хлору (токсичного важкого газу) з отвору у формі кола радіусом 0,5 м з координатами центру х = 16 м, z = 16 м в області з габаритами 19 × 5 × 50 м і варіантом за кількістю обчислювальних комірок уздовж координатних осей 19 × 5 × 50. Вітер набігає зі швидкістю 10 м/с під кутом 0° до осі ОZ. Питома інтенсивність витікання суміші дорівнювала 7,415  $\Gamma/(c \cdot m^2)$ .

Вважалося, що витікання починалося з моменту часу  $t_1 = 0$  с і припинялося у момент  $t_2 = 5$  с.

Температура суміші відповідала даним скипання хлору 259 К, молярна маса домішки становила 0,035 кг/моль.

Пляма витікання після сканування карти об'єктів апроксимується колекцією просторових обчислювальних комірок, на нижній грані яких буде виставлено граничні умови «витікання» токсичною домішки заданої концентрації.

Аналіз зміни полів масової концентрації хлору проводився в площині XOZ у шарі обчислювальних комірок біля землі (рис. 7.19).

Максимальну за площею і найбільш щільну за концентрацією домішки зону газоповітряна хмара займає у випадку вихідної концентрації домішки у струмені, що викидається, Q = 100% (рис. 7.19а). Зі зменшенням початкової концентрації до Q = 50% (рис. 7.19б) площа небезпечної зони зменшується з помітним зниженням щільності домішки у хмарі, що у підсумку повинно позначитися і на картині токсичної безпеки на промисловому майданчику.

Поля відносної масової концентрації хлору можна розглядати як часовопросторовий розподіл небезпечного параметра токсичного газу.



Рис. 7.19 Поля масової концентрації домішки у момент часу t = 5 с для різної концентрації Q: a) Q = 100%; 6) Q = 50%

Концентрація домішки є вихідним даним, що використовується для розрахунку токсодози, як фактора інгаляційного ураження людини у зоні викиду, подальшого обчислення пробіт-функції для інтоксикації хлором і, відповідно, умовної ймовірності летального ураження людини, яка зазнала токсичного впливу (рис. 7.20).

Як і слід було очікувати, найбільш небезпечним є варіант викиду чистої домішки Q = 100% (рис. 7.20а). Зі зменшенням концентрації до Q = 50% (рис. 7.20б) площа зони з небезпечними значеннями умовної ймовірності ураження персоналу токсичним газом зменшується, що призводить у кінцевому підсумку до зниження сумарного ризику і сприятливо позначається на стані безпеки промислового підприємства.



Рис. 7.20 Поля умовної ймовірності ураження людини у момент часу t = 5 с для різної концентрації Q: a) Q = 100%; 6) Q = 50%

## 7.2 Чисельна оцінка впливу вибуху водню на споруди довколишньої забудівлі

Водень стає все більш популярним паливом для транспортних засобів [57]. Однак, під час роботи заправних станцій можливі аварійні ситуації, викликані витоком газоподібного водню різної інтенсивності з несправного обладнання, витікання рідкого водню з цистерни, викидом газоподібного водню в результаті руйнування балонів високого тиску. Всі ці аварії призводять до формування вибухонебезпечної хмари воднево-повітряної суміші і його розсіювання в атмосфері під впливом вітру. Одним з найбільш небезпечних сценаріїв з точки зору потенційних катастрофічних наслідків, які загрожують обладнанню станції, первсоналу і населенню прилеглих житлових будівель [39] є детонаційний вибух воднево-повітряної суміші у результаті викиду в атмосферу всього обсягу стисненого газоподібного водню з балонів високого тиску. Математичне моделювання техногенних аварій такого типу є актуальною науково-прикладною проблемою, розв'язання якої може суттєво підвищити рівень безпеки техногенних об'єктів [45, 46, 47].

#### 7.2.1 Постановка задачі вибуху водню на заправній станції

Розглянемо типову станцію заправки транспортних засобів водневим паливом. Роздавальна станція має криогенну цистерну з рідким воднем (5,7 м3). Цистерна живить три пакети балонів (по 12 балонів в кожному блоці) високого тиску загальним обсягом 18,4 м3, в яких зберігається газоподібний водень при температурі навколишнього середовища [272].

Під час моделювання вибуху воднево-повітряної суміші на заправній станції передбачалося, що хмара вибухонебезпечної суміші сформувалася у результаті викиду всього обсягу стисненого газоподібного водню з балонів роздачі і подальшого його розсіювання у потоці повітря, яке набігає зі швидкістю 10 м/с. В якості вихідних умов були прийняті наступні параметри хмари: об'єм 798 м<sup>3</sup>, маса водню у хмарі 687,4 кг, масова концентрація водню 100%, тиск 1031371,3 Па, температура 288 К. Передбачалося, що розсіювання хмари відбувалося протягом 0,06 с після миттєвого руйнування балонів (фізичний вибух). Після цього, у результаті зовнішнього впливу, відбувався детонаційний вибух водородо-повітряної суміші (хімічний вибух). Хімічний вибух, зазвичай, супроводжується появою продуктів згорання і ударної хвилі, яка впливає на господарські та житлові будівлі навколо. План місцевості з забудовою представлений на рис. 7.21. Висота будівель становила 5-12 м. Місцезнаходження заправної станції (позиції А і В на рис. 7.21) а також засобів захисту будівель (обвалування, відбійна стіна) від руйнівного впливу ударної вибухової хвилі варіювалося по відношенню до забудови. Зміна тиску у часі контролювалася в епіцентрі вибуху й у характерній точці на стіні будівлі біля землі

#### (позиції А, В і С на рис. 7.21, відповідно) [39].



Рис. 7.21 План місцевості з забудовою (А, В – можливі місця розташування заправної станції; С – точка контролю тиску на будівлі)

#### 7.2.2 Вибух хмари водню на заправної станції

Розглядався випадок (V1) розташування заправної станції у безпосередній близькості від будівель забудови (позиція В на рис. 7.21). Ніяких засобів захисту забудови від руйнівної дії ударної хвилі від вибуху хмари не застосовувалося. Розподіл об'ємної концентрації водню у суміші з повітрям представлено на рис. 7.22. Очевидно, що радіус напівсферичної зони детонаційного горіння становить приблизно 25 м і перевершує максимальну висоту забудови [7].

Розподіл надлишкового тиску у площинах XOZ (біля поверхні землі) і YOZ (у вертикальному перетині) у момент часу, коли тиск у контрольній точці С досяг максимального значення, представлено на рис. 7.23. Аналіз просторового розподілу надлишкового тиску показує, що тиск у фронті вибухової ударної хвилі у кутових зонах біля фундаменту будівель вище приблизно у два рази, ніж у відкритому просторі [40].



Рис. 7.22 Розподіл об'ємної концентрації водню у площині YOZ (V1) (В – епіцентр вибуху, С – точка контролю тиску на стіні будівлі)



Рис. 7.23 Розподіл тиску у площинах (V1): а – XOZ біля землі, б – YOZ

Зміну тиску з часом у КТ С представлено на рис. 7.24. Максимальний пік тиску відповідає моменту часу проходження фронту ударної хвилі – результату хімічного вибуху. З часом амплітуда ударної хвилі швидко згасає (рис. 7.24).



Рис. 7.24 Динаміка тиску у точці С (V1)

Інший випадок (V2) стосувався розташування заправної станції на відстані від будівель забудови (позиція A на рис. 7.21). Відстань від заправної станції до найближчих будівель обиралася згідно рекомендацій [272]. Ніяких засобів захисту забудови від руйнівного впливу ударної хвилі не застосовувалося. Аналіз розподілу об'ємної концентрації водню у суміші з повітрям показав, що розмір і форма зони детонаційного горіння аналогічні випадку з ближньою забудовою (рис. 7.22).

Розподіл тиску у площинах ХОZ біля землі і YOZ у момент часу, коли тиск у КТ С сягнув максимального значення, представлено на рис. 7.25.



Рис. 7.25 Розподіл тиску у площинах (V2): а – XOZ біля землі, б – YOZ

Динаміку тиску у КТ С представлено на рис. 7.26.



Рис. 7.26 Динаміка тиску у точці С (V2)

Форма кривої відповідає класичному зменшенню тиску під час походження ударної хвилі, яка виникає за результатів вибуху газової суміші. Слід зазначити, що більш віддалене від забудови розташування епіцентру вибуху призводить до істотного зниження тиску (приблизно в 5 разів) на стіни будівель (рис. 7.24, 7.26).

Розглядався аналогічний до V2 випадок (V3) віддаленого розташування станції від забудови (позиція A на рис. 7.21). Але для захисту будівель від руйнівного впливу вибухової ударної хвилі застосовувалося обвалування епіцентру вибуху висотою 7 м (рис. 7.27, 7.28а). Аналіз розподілу об'ємної концентрації водню у суміші з повітрям показав, що розміри і форма зони детонаційного горіння змінилися внаслідок складного рельєфу обвалування (рис. 7.27).



Рис. 7.27 Концентрація водню (V3) в епіцентрі вибуху у площині YOZ

Поле тиску у площинах XOZ біля землі і YOZ у момент часу, коли тиск у КТ С досяг максимального значення, представлено на рис. 7.28. Розподіл тиску у розрахунковій області змінився несуттєво у порівнянні з результатами розрахунків, описаних для варіанта V2 (випадку віддаленого вибуху без обвалування).

Розглядався аналогічний варінту V3 випадок (V4) віддаленого розташування станції від забудови (позиція A на рис. 7.21). Але для захисту будівель від руйнівного впливу ударної хвилі від вибуху хмари застосовувалася часткове північно-східне обвалування епіцентру вибуху висотою 7 м (рис. 7.29, 7.30а). Аналіз розподілу об'ємної концентрації водню у суміші показав, що розміри і форма зони



детонаційного горіння дещо змінилися відповідно до форми обвалування (рис. 7.29).

Рис. 7.28 Розподіл тиску у площинах (V3): а – XOZ біля землі, б – YOZ



Рис. 7.29 Розподіл об'ємної концентрації водню (V4)

Розподіл тиску у площинах ХОZ біля землі і YOZ у момент часу, коли тиск у КТ С досяг максимального значення, представлено на рис. 7.30. Аналіз даних показує, що часткове обвалування (порівняно з повним обвалуванням) практично не змінило характер розподілу тиску на місцевості.

Розглядався аналогічний варіанту V4 випадок (V5) віддаленого розташування станції від забудови (позиція A на рис. 7.21). Для захисту будівлі від руйнівного впливу ударної хвилі від вибуху хмари застосовувалося часткове північно-східне обвалування епіцентру вибуху більшою висотою – 13 м (рис. 7.31, 7.32а), яке розташовувалося на 12 м далі від епіцентру вибуху, ніж в разі варіанту V4. Аналіз розподілу об'ємної концентрації водню в суміші з повітрям показав, що розміри і



форма зони детонаційного горіння близькі до випадку без обвалування (рис. 7.31).

Рис. 7.30 Розподіл тиску у площинах (V4): а – XOZ біля землі, б – YOZ



Рис. 7.31 Розподіл об'ємної концентрації водню (V5)

Розподіл тиску у площинах ХОZ біля землі і YOZ в момент часу, коли тиск в КТ С досяг максимального значення, представлено на рис. 7.32. Аналіз даних показує, що збільшення висоти обвалування розглянутої форми забезпечує можливість незначно знизити ударно-імпульсне навантаження вибухової хвилі на стіни будівель (рис. 7.32б).

Розглядався випадок (варіант V6) віддаленого розташування станції від забудови із захистом забудови від руйнівного впливу вибухової ударної хвилі у вигляді відбійної стіни висотою 8 м і товщиною 3 м у безпосередній близькості від будівель (рис. 7.33а). Розподіл тиску у площинах ХОZ біля землі і YOZ у момент часу, коли тиск у КТ С досяг максимального значення, представлено на рис. 7.33.

Аналіз даних показує, що постановка відбійної стіни призводить до зниження тиску у КТ приблизно на 10% у порівнянні з випадком без захисту (рис. 7.26, 7.34).



Рис. 7.32 Розподіл тиску у площинах (V5): а – XOZ біля землі, б – YOZ



Рис. 7.33 Розподіл тиску у площинах (V6): а – XOZ біля землі, б – YOZ

Слід зазначити, що всі розглянуті види захисних споруд не дають змогу знизити максимальний надлишковий тиск у КТ на стіні будівлі до безпечного рівня.



Рис. 7.34 Динаміка тиску у точці С (V6)

Таким чином, виконано чисельне моделювання вибуху хмари газоподібного водню, яка утворилася після руйнування балонів високого тиску на заправній станції. Проведено аналіз різних способів захисту будівель навколишньої забудови від руйнівного впливу ударної вибухової хвилі [49]. Показано, що розглянуті види захисних споруд (часткове або повне обвалування епіцентру вибуху, відбійна стіна біля будівель забудови) впливають на розподіл тиску у розрахунковій області, але не дають змогу знизити тиск на стінах будівель забудови до безпечного рівня. У якості найбільш ефективних засобів захисту споруд від впливу вибухової хвилі можуть бути рекомендовані використання відбійних стін у безпосередній близькості від забудови і віднесення вибухонебезпечних об'єктів далі від будівель. Під час вибору розмірів зон відчуження слід мати на увазі тривимірність ударної хвилі з урахуванням істотного збільшення амплітуди тиску поблизу будівель.

# 7.3 Детермінована чисельна оцінка ефективності пристроїв зниження надлишкового тиску під час вибуху водню

Розглядається типова станція для заправки воднем транспортних засобів [272] (рис. 7.35). Станція містить криогенну ємність для зберігання рідкого водню (5,7 м<sup>3</sup>), циліндри високого тиску (6500 psi = 44,8 МПа) для зберігання стисненого газоподібного водню, призначеного для заправки. Об'єм кожного циліндра становить 0,51 м<sup>3</sup> [43].

Припустимо, що один з роздавальних циліндрів високого тиску миттєво руйнується, що призводить до викиду стисненого водню, розширенню його до атмосферного тиску 101325 Па з підмішуванням чистого повітря до утворення напівсферичного стехіометричної хмари радіусом 2 м біля землі з температурою навколишнього середовища 293 К (рис. 7.35). Розглянемо миттєвий вибух сформованої хмари водню з утворенням у контрольному об'ємі продуктів згоряння з наступними параметрами: температурою 3450 К, тиском 901 325 Па, молярної масою 0,02441 кг/моль і коефіцієнтом адіабати 1,24 [13].



Рис. 7.35 Схема розташування хмари, захисної споруди і КТ

Передбачається, що деякі 33 мають окремі елементів нижче поверхні землі, тому частина РП буде займати шар землі (рис. 7.36) товщиною 2 м.



Рис. 7.36 Мапа об'єктів у вертикальній площині області

Для аналізу ефективності захисних заходів надлишковий тиск контролювався (за аналогією з роботами [288-296]) у декількох критичних точках біля землі: Р0 – у безпосередній близькості біля захисної споруди, Р1 і Р2 – на деякому віддаленні від нього (рис. 7.35, 7.36). Крім того, аналізувався максимальний надлишковий тиск на поверхні захисної споруди з боку вибуху для оцінки максимального навантаження.

Розглядалася варіанти V0-V10 використання 33 персоналу ТО від дії ВУХ.

Варіант відсутності захисних пристроїв (випадок V0) відповідає найбільш песимістичним сценарієм (рис. 7.35), коли КТ максимально відкриті впливу ударної вибухової хвилі порівняно з будь-якими іншими варіантами захисту, що відображено на рис. 7.37-7.39.



Рис. 7.37 Надлишковий тиск у КТ РО (1-10 – варіанти V1-V10)

Природно, що надлишковий тиск у випадку V0 менше ніж в інших варіантах у КТ Р0, оскільки перешкода відсутня, але більше – у КТ Р1 і Р2 через відсутність захисних засобів.

Установлення суцільної відбійної стіни (випадок V1) шириною 10 м, товщиною 0,2 м і висотою 2 м (рис. 7.35, 7.36) призводить до істотної перебудови результуючого потоку (рис. 7.40).

Відповідно, істотно збільшується надлишковий тиск перед стіною у точці Р0, але при цьому спостерігається його зниження у точках Р1 і Р2 – місцях можливого розташування персоналу (рис. 7.37-7.39). Розподіл тиску на поверхні стіни свідчить про навантаження, які можуть призвести до утворення тріщин [289] і руйнування захисної стіни (рис. 7.41).



Рис. 7.38 Надлишковий тиск у КТ Р1 (1-10 – варіанти V1-V10)



Рис. 7.39 Надлишковий тиск у КТ Р2 (1-10 – варіанти V1-V10)

Для зниження навантаження на захисну споруду необхідно передбачити конструктивні зміни, деякі з яких розглядаються у даній роботі (випадки 2, 7-9).

Одним із заходів (випадок V2), який забезпечує можливість зменшити максимальний надлишковий тиск на стіні, є перепускний канал шириною 0,6 м на глибині 1,2 м під стіною. У даному випадку спостерігається зменшення пікового навантаження на стіні (рис. 7.42) при незначному впливі на надлишковий тиск у КТ Р1 і Р2 (рис. 7.38, 7.39).

0		P, 6ap 0,100 0,267 0,433 0,600 0,767 0,933
		1,100 1,267 1,433 1,600 1,767 1,933 2,100 2,267

Рис. 7.40 Зміна тиску у розрахунковій області біля землі (випадок V1) у моменти часу: 0,004 мкс; 0,008 мкс; 0,012 мкс; 0,016 мкс; 0,020 мкс; 0,028 мкс



Рис. 7.41 Розподіл максимального надлишкового тиску у площині біля поверхні стіни (V1)

Перепускний канал з'єднує простір із підвищеним тиском перед стіною з простором за стіною, що викликає перетікання газу під стіною і якоюсь мірою знижує пікове навантаження на стіну.

Одним з визначальних факторів, що впливають на розподіл тиску в КТ Р1 і Р2, є висота стіни. Природно, що збільшення висоти стіни (випадок V3) до 3 м призводить до зниження пікових надлишкових тисків за стіною на відміну від випадку 1 (рис. 7.38, 7.39). Тому дана висота була вибрана для інших захисних пристроїв (випадки V7-V10).



Рис. 7.42 Розподіл максимального надлишкового тиску у площині біля поверхні стіни з перепуском (V2)

Ефективність 33 V3можна підвищити, виконавши зверху Т-подібний козирок (випадок V4), який виступає на 1 м по обидва боки від стіни (рис. 7.43).



Рис. 7.43 Розподіл тиску у момент часу 0,0168 мкс після вибуху (V4)

За експериментальними даними роботи [291] це призводить до двократного розширення потоку на крайках козирка, що позитивно позначається на показниках надлишкового тиску в КТ Р1 і Р2 (рис. 7.38, 7.39).

Ще одним пом'якшуючим захисним заходом щодо зниження тиску в контрольних точках є поглиблення підпростору з хмарою водню по відношенню до поверхні землі (випадок V5). Розташуємо хмару в ямі квадратної форми 3х3 м і висотою 2 м (рис. 7.44).



Рис. 7.44 Розподіл тиску у момент часу 0,0157 мкс після вибуху (V5)

Під час вибуху кромки ями грають роль козирка на стінці, та й саме поглиблення виконує кумулятивну функцію, розвантажуючи надлишковий тиск у вертикальному напрямку, що сприятливо позначається на поведінці тиску у КТ (рис. 7.38, 7.39).

Вибух у поглибленні (випадок V5) призводить до збільшення надлишкового тиску на стінках ями, особливо в кутах внизу. Знизити пікові навантаження в цих областях можна за допомогою розвантажувальних порожнин уздовж периметру ями (рис. 7.45) – випадок V6.



Рис. 7.45 Характерні розміри розвантажувальних порожнин (V6)

Така конструкція поглиблення призводить до деякої перебудови потоку під час вибуху (рис. 7.46), хоча не суттєво впливає на надлишок тиску (рис. 7.38, 7.39).



Рис. 7.46 Розподіл тиску у момент часу 0,0158 мкс після вибуху (V6)

Заслуговує увагу застосування не тільки окремих заходів, а й їх комбінація (випадок V7). Доповнимо заглиблення області вибуху (випадок V5) і набором з чотирьох рядів стовпчиків квадратного перетину (0,2 х 0,2 м) висотою 3 м. Ряди стовпчиків шаблону 1 відстоять один від одного на відстані 0,2 м (рис. 7.47) і розташовані за КТ Р0 (замість суцільної стіни).



Рис. 7.47 Шаблон 1 розташування стовпчиків (V7)

Така конструкція призводить до часткової втрати інтенсивності ударної хвилі внаслідок багаторазового відбиття від стовпчиків (рис. 7.48) і забезпечує можливість знизити навантаження на захисну перешкоду.

Конструкцію пристрої для випадку V7 змінимо, розташувавши стовпчики за шаблоном 2 (рис. 7.49) – випадок V8.

Тепер конструкція призводить до більшого розсіювання ударної хвилі під час проходження між стовпчиками і забезпечує можливість знизити навантаження на захисну конструкцію (рис. 7.50).



Рис. 7.48 Розподіл максимального тиску (кПа) на поверхні у перепони (V7)



Рис. 7.49 Шаблон 2 розташування стовпчиків (V8)



Рис. 7.50 Розподіл тиску у момент часу 0,0158 мкс після вибуху (V8)

Суцільна стіна випадку V3 дає добрий захист, але призводить до надмірного навантаження на поверхню перешкоди. Виконання несуцільної конструкції знижує степінь навантаження. Виконаємо перешкоду з двох бетонних стін (як у випадку V3), які відстоять один від одного на 0,4 м, і перфоровані рядами отворів квадратного перетину 0,2 х 0,2 м (випадок V9). Причому, отворам на одній стіні відповідають суцільні ділянки іншої стіни (рис. 7.51).



Рис. 7.51 Шаблон перфорації стінки (випадок V9)

Тепер конструкція призводить до комбінованого ефекту: часткової рагрузке перешкоди за рахунок розсіювання ударної хвилі в процесі проходження в отвори на стінах і дає змогу ефективно перепинити шлях ударної хвилі до КТ за перепоною (рис. 7.37-7.39).

Т-подібна суцільна стіна (випадок 4) і заглиблення зони вибуху (випадок 5) дають одну з найкращих захистів від впливу надлишкового тиску при проходженні вибухової ударної хвилі через КТ Р1 і Р2. Тому використання комбінації цих пристроїв (випадок V10) теж має давати ефективний захист. Наявність обох ефектів радикально впливає на ударну хвилю і призводить до перебудови потоку (рис. 7.52).



Рис. 7.52 Розподіл тиску у момент часу 0,023 мкс після вибуху (V10)

# 7.4 Чисельний аналіз варіантів розташування захисної стіни від епіцентру вибуху газової суміші

Розглядається випадок аварійного швидкоплинного руйнування декількох дозуючих водневих балонів високого тиску на станції заправки транспортних засобів [50, 272]. Припустимо, що це призводить до викиду стисненого водню у

атмосферу біля землі, його розширення до атмосферного тиску та утворення напівсферичної стехіометричної воднево-повітряної хмари з радіусом 1,5 м і температурою навколишнього середовища 293 К (рис. 7.53). Розглянемо миттєвий вибух цієї водневої хмари, який спричиняє утворення продуктів згоряння з такими параметрами: температурою 3450 К, тиском 901 кПа, молярною масою 0,02441 кг/моль та коефіцієнтом адіабати 1,24 [66].

Обчислювальний простір був (рис. 7.53) завдовжки Lz = 31 м, завширшки Lx = 20 м і висотою Ly = 14 м. Усі сторони обчислювальних комірок мали однаковий розмір 0,2 м, отже обчислювальна сітка мала  $155 \times 100 \times 70$  комірок відповідно. Крок часу обчислювався таким чином, щоб зберегти стійкість явного методу Годунова [262].

Захисна стіна мала такі розміри: довжину Xw = 10,0 м, ширину Zw = 0,2 м і висоту Yw = 2,2 м (рис. 7.53).



Рис. 7.53 Схема розташування водневої хмари, захисної стінки та КТ Рі поблизу землі

Для кожного варіанту експериментів стіна встановлювалася на деякій відстані Lw від епіцентру вибуху (табл. 7.4).

#### Таблиця 7.4

Варіанти розташування захисної стіни

Номер варіанту	V0	V1	V2	V3	V4
Zw [M]	_	5,0	6,0	7,0	8,0

Для аналізу ефективності захисної споруди надлишковий тиск контролювався у декількох точках Рі (РО-Р4) біля землі на відстані Zp від епіцентру вибуху (4, 5, 6, 7 і 8 м, відповідно). За винятком точки РО, одна з решти КТ у кожному варіанті розташовалася перед стіною (з боку вибуху) для оцінки навантаження, яке здійснює надлишковий тиск на поверхню стіни. Наприклад, для варіанту V2 розташування стіни (табл. 7.4) КТ РО, Р1 і Р2 знаходяться між епіцентром вибуху та стіною, точка Р2 є біля стіни, а КТ РЗ та Р4 знаходяться за стіною та захищені від основного впливу надлишкового тиску.

Різниця між варіантами експерименту полягає у різній відстані Zw стіни від епіцентру вибуху. Варіант V0 взагалі не містить захисної споруди.

Під час усіх експериментів збиралася історія надлишкового тиску у всіх КТ (рис. 7.54) і розподіл тиску у всіх площинах може бути отриманий для аналізу впливу стінки на трансформацію поля тиску (рис. 7.55).



Рис. 7.54 Історія надлишкового тиску у КТ РО-Р4: а – без захисту (варіант V0); б – із захистом (варіант V2 розташування стіни).

Модель забезпечує можливість знайти просторовий розподіл тиску (рис. 7.55).



Рис. 7.55 Розподіл тиску [бар] у момент часу 0,0107 с після вибуху для варіанту захисту V2: а – площина XOZ (біля землі); б – площина YOZ

Динаміка зміни надлишкового тиску у кожній КТ дає інформацію для визначення максимального надлишкового тиску  $\Delta P_+$  та імпульсу  $I_+$  (рис. 7.56) для кожного сценарію розташування стіни з метою аналізу ймовірного ураження персоналу (рис. 7.57) та розподілу максимального надлишкового тиску на поверхні стіни збоку впливу вибухової хвилі (рис. 7.58). Це дає змогу оцінити навантаження на стіну від надлишкового тиску та вибрати відповідної міцності матеріал, з якого треба виготовити стіну [35].

За умов сценарію V0 (стінки немає) хвиля тиску поширюється вздовж обчислювальної області (рис. 7.54, а), плавно втрачаючи інтенсивність ударного (рис. 7.56, а) й імпульсного навантаження (рис. 7.56, б) разом із відстанню від епіцентру вибуху. Ця хвиля тиску не створює летальної небезпеки (рис. 7.57, а) і веде до значно ймовірнішого розриву барабанних перетинок у людини у точках P0 та P1 (рис. 7.57, б).

Установлення захисної стіни різко змінює стан безпеки (рис. 7.57). Хвиля тиску здебільшого відбивається від стіни, посилюючи фазу тиску перед стіною (рис. 7.54, б) і зменшуючи її за стіною (рис. 7.55).



Рис. 7.56 Ударно-імпульсне навантаження у точках РО-Р5 для варіантів стіни V0-V5: а – максимальний надлишковий тиск; б – імпульс



Рис. 7.57 Умовна ймовірність ураження у точках РО-Р4 для варіантів розташування стіни V0-V4: а – летальна травма; б – розрив барабанної перетинки

Відбита хвиля тиску може спричинити високий летальний ризик у варіантах V1 та V2 (рис. 7.57а) та ризик розриву барабанних перетинок у всіх варіантах, крім V4 (рис. 7.57б). Ситуацію за стіною можна вважати повністю безпечною (рис. 7.57). З іншого боку, поверхня стіни піддається значному навантаженню надлишковим тиском, ЩО може спричинити руйнування захисної споруди (рис. 7.58). Використовуючи порогові значення надлишкового тиску руйнування для різних стінових матеріалів (табл. 7.5), можна вирішити, що для всіх сценаріїв усі матеріали, крім антисейсмічного бетону, не можуть бути використані для виготовлення захисної стіни через загальний ризик її руйнування (рис. 7.58).



Рис. 7.58 Поля максимального надлишкового тиску (кПа) на поверхні стіни: а, б, в, г – для варіантів V1, V2, V3 та V4 розташування стіни, відповідно

Таблиця 7.5

Номер типу	Стіновий матеріал	Ступінь руйнування залежно від надлишкового тиску, [кПа]				
		слабкий	середній	сильний	повний	
1	Антисейсмічний бетон	2535	80120	150200	200	
2	Секційний залізобетон	1020	2030	—	3060	
3	Цегла	815	1525	2535	3545	
4	Деревина	68	812	1220	2030	

Ступінь руйнування стіни залежно від діапазону надлишкового тиску

### 7.5 Ймовірнісний аналіз впливу вибухової ударної хвилі на довкілля

Розроблена методологія оцінки безпекового стану техногенного об'єкту у зоні вибуху газоповітряної суміші є корисним інструментом порівняння різних варіантів

розміщення захисних споруд, рел'єфу місцини, де розташовується обслуговуючий персонал і має місце епіцентр вибуху.

### 7.5.1 Чисельне дослідження впливу рельєфу місцевості на наслідки впливу вибухової хвилі

Розглядався миттєвий вибух [65] воднево-повітряної суміші з утворенням напівсферичної хмари продуктів згоряння радіусом 2,88 м із тиском 9 бар і 3400 К. На відстані 7 м від епіцентру вибуху розташовувалася КТ заміру навантаження людини дією ударної хвилі. Розглядалися варіанти V1-V5 взаємного розміщення рівня горизонталі ландшафту, де знаходиться людина (+4, +2, 0, -2, -4 м) відносно горизонталі епіцентру аварійного вибуху. На рис. 7.59а–7.59в представлено інформацію, яка є необхідною для ймовірнісної оцінки впливу варіанту ландшафту місцевості на ступінь наслідків від вибуху. Варіант V3 однорівневого розташування є найбільш небезпечним для людини, бо вона максимально відкрита для впливу вибухової хвилі. Первинна фаза стиснення хвилі тиску у фронті (рис. 7.59а) є джерелом складових анарату пробіт-аналізу ймовірних наслідків вибуху. Найбільше заглиблення робочого місця видається найбільш прийнятним з точки зору захищеності людини у КТ (рис. 7.59в).

Таким чином, можна зробити висновок, що люба зміна рівня горизонту КТ і епіцентру вибуху (заглиблення або підйом) призводить до зниження ймовірності негативних наслідків впливу вибухової хвилі на організм людини, як з точки зору летального ураження, так і розриву барабанних перетинок. Ударна хвиля втрачає свою інтенсивність із збільшенням довжини шляху від епіцентру вибуху, а варіанти ландшафту з різними рівнями (V1, V2, V4, V5) мають довший шлях у порівнянні з варіантом V3 (однорівневе розташування).

Крім того, вибухова хвиля зазнає втрати інтенсивності під час проходження кута між різними рівнями ландшафту, де має місце процес додаткового розширення.



Рис. 7.59 Вплив рельєфу на наслідки вибуху у КТ: а) динаміка надлишкового тиску (1–5 варіанти V1–V5 ландшафту); ударное (б) й імпульсне (в) навантаженя для варіантів V1-V5; ймовірність ураження (летальний наслідок (г) і розрив барабанних перетинок (д) для варіантів V1-V5 ландшафту

### 7.5.2 Чисельна оцінка раціональних габаритів захисної споруди під час вибуху водню

Розглядалася проблема визначення габаритів (висоти і ширини) захисної стіни [63], яка встановлюється між епіцентром вибуху і місцем можливого розташування людини у КТ і дасть змогу знизити ймовірність ураження людини до заданого значення (наприклад, 30%), на типовій станції для заправки воднем транспортних засобів [272]. Станція містить криогенну ємність для зберігання рідкого водню (5,7 м<sup>3</sup>), яка живить циліндри високого тиску (44,8 МПа) для зберігання стисненого газоподібного водню, призначеного для заправки. Об'єм циліндра становить 0,51 м<sup>3</sup>. Припустимо, що три циліндра високого тиску миттєво руйнується, що призводить до викиду стисненого водню, розширенню його до атмосферного тиску 101325 Па з підмішуванням чистого повітря до утворення напівсферичної стехіометричної хмари радіусом 2,88 м у землі з температурою навколишнього середовища 293 К (рис. 7.53). Використовувалася модель миттєвого вибуху з урахуванням хімічної взаємодії. Розглянемо миттєвий вибух хмари водню з утворенням у контрольному об'ємі продуктів згоряння з наступними параметрами: температурою 3450 К, тиском 901325 Па, молекулярною вагою 0,02441 кг/моль і коефіцієнтом адіабати 1,24.

#### 7.5.2.1 Розробка карти об'єктів промислового майданчика

Обчислювальний простір має такі розміри: довжина – 31 м; ширина – 20 м, висота – 14 м (включаючи землю глибиною 2 м). Всі сторони обчислювальних осередків мають однаковий розмір – 0,2 м, тому обчислювальна сітка має 155 х 100 х 70 осередків відповідно. Часовий крок розраховується для збереження стійкості явного кінцево-різницевого методу Годунова.

Було проведено серію з трьох експериментів, для визначення оптимального співвідношення габаритів для отримання заданого замовником відсотку максимального ураження людини, яка знаходиться за захисною спорудою.

Математичне моделювання процесу вибуху забезпечує можливість отримати просторові розподіли тиску у будь-який момент часу для подальшого аналізу наслідків впливу вибухової хвилі на людину. Кожного разу контролювалася зміна надлишкового тиску у КТ Р у залежності від часу, яка порівнювалася для кожної серії варіантів обчислення.

#### 7.5.2.2 Визначення впливу ширини стіни на стан безпеки

У першому експерименті розглядалася захисна стіна з «нескінченною» висотою та регульованою шириною аби визначити вплив цієї ширини на розподіл ймовірності ураження у місці розташування персоналу (без впливу висоти).

Аналіз динаміки надлишкового тиску у контрольній точці розташування персоналу аварійного техногенного об'єкту (рис. 7.60а) дає змогу побачити поступове зниження максимального тиску, та імпульсу фази стиснення у фронті ударної хвилі зі збільшенням ширини стіни. З рисунку видно, що відсутність захисної суцільної стіни між епіцентром вибуху і робочим місцем персоналу (варіант V1.0) дає максимальне ударне навантаження на людину під час проходження фронту хвилі. Стіна будь-якої ширини суттєво знижує це навантаження і, починаючи з варіанту V1.3 цей вплив стає незначним, тобто подальше збільшення ширини не дає бажаного ефекту.

У таблиці 3.1 представлено максимальний надлишковий тиск і імпульс фази стиснення, для першої серії експериментів, які отримувалися у автоматичному режимі під час моделювання процесу вибуху. Ці фактори ураження слугували вихідними даними для обчислення пробіт-функцій (формули 3.3, 3.4). Ці значення пробіт-функції є верхнім лімітом інтегралу для ймовірності ураження (формула 3.2). З таблиці 3.1 можна зробити висновки, що найбільше змінюється умовна ймовірність ураження людини для ширини стіни з нуля до 4,2 метри, де можна побудувати лінійний тренд.



Рис. 7.60 Чисельний експеримент V1.х: а) зміна надлишкового тиску; імпульс фази стиснення (б) і максимальний надлишковий тиск (в); ймовірність летального ураження (г) і розриву барабанних перетинок (д)
Варіант	V1.0	V1.1	V1.2	V1.3	V1.4	V1.5
$P_1, \%$	47,1	14,1	1,8	0,2	0,0	0,0
<i>P</i> <sub>2</sub> , %	86,6	47,7	9,0	0,9	0,1	0,0
<i>I</i> +, кПа∙с	280,9	185,9	121,9	86,1	67,8	57,6
$\Delta P_{\rm max},$ кПа	76860,0	41915,0	21565,0	12550,0	8416,0	6263,0
Pr <sub>1</sub>	4,92	3,92	2,90	2,06	1,49	1,09
Pr <sub>2</sub>	6,11	4,94	3,66	2,61	1,84	1,27
<i>W</i> <sub>х</sub> , м	0,0	2,2	4,2	6,2	8,2	10,2

Розрахункові параметри безпеки для експерименту V1.х

На рис. 7.606, 7.60в представлено діаграми факторів ураження відносно варіантів виготовлення захисної стіни різної ширини, що є графічним відображенням числової інформації з табл. 7.6.

Аналогічним чином діаграми умовної ймовірності летального наслідку і розриву барабанних перетинок у людини внаслідок негативного впливу вибухової хвилі зображено на рис. 7.60г і . 7.60д, де видно помітний вплив для варіантів 0-2, а захисні стіни варіантів 3-5, мають практично однаковий ефект: подальше збільшення ширини не має сенсу.

З аналізу рис. 7.60в можна зробити висновок, що тільки сегмент діаграми для варіантів V0-V2 дає можливість побудувати лінійний тренд, який буде використано у подальшому для визначення оптимальних габаритів стіни (рис. 7.61).

#### 7.5.2.3 Визначення впливу висоти стіни на стан безпеки

У другому експерименті V2.х розглядалася захисна стіна з «нескінченною» шириною та регульованою висотою аби визначити вплив цієї висоти на розподіл ймовірності ураження у місці розташування персоналу (без впливу ширини).

Аналіз динаміки надлишкового тиску у КТ (рис. 7.62а) забезпечує можливість побачити поступове зниження максимального тиску, та імпульсу фази стиснення у

фронті ударної хвилі зі збільшенням висоти стіни. З рисунку видно що відсутність стіни (варіант V2.0) дає максимальне ударне навантаження на людину під час проходження фронту хвилі. Стіна будь-якої висоти суттєво знижує це навантаження і, починаючи з варіанту V2.3 цей вплив стає незначним, тобто подальше збільшення висоти не дає бажаного ефекту.



Рис. 7.61 Залежність умовної ймовірності розриву барабанних перетинок від ширини «нескінченно» високої стіни для експерименту V1.х: 1 – розрахунок; 2 – лінійний тренд

У таблиці 7.7 представлено усі необхідні параметри для обчислення умовної ймовірності негативного впливу УІН від ВУХ на організм людини, яка знаходиться у зоні техногенної аварії, пов'язаної з викидом горючого газу з обладнання, змішуванням його з повітрям з утворенням ГПС, займанням та вибуховим згорянням, яке супроводжується БЗ навколишнього атмосферного середовища.

Ударна хвиля, як і у першій серії експериментів, характеризується двома факторами ураження: максимальним надлишковим тиском у фронті і імпульсом фази стиснення (рис. 7.626 і 7.62в)

На рис. 7.62г і 7.62д представлено діаграми факторів ураження відносно варіантів виготовлення захисної стіни різної висоти, що є графічним відображенням

числової інформації з табл. 7.7.

Аналогічно діаграми ймовірності летального наслідку і розриву барабанних перетинок у людини внаслідок негативного впливу вибухової хвилі зображено на рис. 7.62г і 7.62д, де помітний вплив для варіантів 0-2, а захисні стіни варіантів 3-5, мають практично однаковий ефект: подальше збільшення висоти не має сенсу.

З аналізу рис. 7.62г можна зробити висновок, що увесь сегмент діаграми для варіантів V0-V4 дає можливість побудувати лінійний тренд (рис. 7.63), який буде використано у подальшому для визначення оптимальних габаритів стіни.

Таблиця 7.7

Варіант	V2.0	V2.1	V2.2	V2.3	V2.4
<i>P</i> <sub>1</sub> , %	47,1	26,6	12,1	3,6	0,9
<i>P</i> <sub>2</sub> , %	86,6	70,8	42,2	16,0	4,3
<i>I</i> +, кПа∙с	280,9	224,2	178,3	137,7	108,4
$\Delta P_{ m max},$ кПа	76860	57302	39018	25832	17850
Pr <sub>1</sub>	4,92	4,38	3,82	3,20	2,62
Pr <sub>2</sub>	6,11	5,55	4,80	4,01	3,29
<i>W</i> <sub>v</sub> , м	0,0	0,6	1,2	1,8	2,4

Розрахункові параметри безпеки для експерименту V2.х

#### 7.5.2.4 Визначення співвідношення потрібних габаритів стіни

Серії експериментів V1.х і V2.х дають змогу отримати співвідношення висоти і ширини для «оптимальної» з точки зору стану безпеки у КТ (табл. 7.8). З рисунків 3.7 і 3.11 можна визначити габарити стіни для однакової ймовірності ураження, користуючись лінійними трендами. Виходячи з таблиці 7.8, отримуємо коефіцієнт k відношення висоти до ширини стіни, який дорівнює приблизно 0,52. Базуючись на цьому співвідношенні габаритів проведемо V3.х, з кінцевими значеннями висоти і ширини (табл. 7.9).



Рис. 7.62 Чисельний експеримент V2.х: а) зміна надлишкового тиску; імпульс фази стиснення (б) і максимальний надлишковий тиск (в); ймовірність летального ураження (г) і розриву барабанних перетинок (д)



Рис. 7.63 Залежність умовної ймовірності розриву барабанних перетинок від ширини «нескінченно» високої стіни для експерименту V2.х:

1 – розрахунок; 2 – лінійний тренд

Таблиця 7.8

$P_2, \%$	<i>W</i> <sub>у</sub> , м	<i>W</i> <sub>х</sub> , м	$k = W_y / W_x, M$
80	0,2	0,4	0,50
60	0,8	1,5	0,53
40	1,3	2,5	0,52
20	1,9	3,6	0,53
10	2,1	4,2	0,50

Визначення раціональних габаритів стіни

Таблиця 7.9

Габарити стіни для експерименту V3.х

Варіант	<i>W</i> <sub>у</sub> , м	<i>W</i> <sub>х</sub> , м	$k = W_y / W_x, M$
3.1	1,2	2,2	0,54
3.2	2,2	4,2	0,52
3.3	3,0	5,8	0,52
3.4	4,0	7,8	0,51

### 7.5.2.5 Визначення впливу стіни раціональних габаритів на стан безпеки

У третьому експерименті V3.х розглядалася захисна стіна з «оптимальними» шириною та висотою, співвідношення яких обраховано у табл. 7.9 аби визначити вплив стіни на розподіл ймовірності ураження у місці розташування персоналу (з урахуванням впливу конкретних ширини і висоти).

Аналіз динаміки надлишкового тиску у КТ (рис. 7.64) забезпечує можливість побачити поступове зниження максимального тиску, та імпульсу фази стиснення у фронті ударної хвилі зі збільшенням висоти (а таким чином і ширини) стіни. З рисунку видно що відсутність стіни (варіант V3.0) дає максимальне ударне навантаження на людину під час проходження фронту хвилі. Стіна будь-яких габаритів суттєво знижує це навантаження і, починаючи з варіанту V3.3 цей вплив суттєво зменшується і подальше збільшення габаритів не дає бажаного ефекту.

У табл. 7.10 представлено усі необхідні газодинамічні параметри параметри для обчислення умовної ймовірності негативного впливу ударно-імпульсного навантаження вибухової хвилі на організм людини, яка знаходиться у зоні техногенної аварії, пов'язаної з викидом горючого газу з обладнання, змішуванням його з повітрям з утворенням газоповітряної суміші, займанням та вибуховим згорянням, яке супроводжується баричним збуренням навколишнього атмосферного середовища. Ударна хвиля, як і у першій та другій серіях експериментів, характеризується двома факторами ураження: максимальним надлишковим тиском у фронті вибухової ударної хвилі і імпульсом первинної фази стискання вибухової ударної хвилі.

З аналізу табл. 7.10 можна зробити висновок, що увесь сегмент діаграми для варіантів виготовлення захисної стіни V3.1-V3.4 дає можливість побудувати лінійний тренд, який можна використовувати експертами з безпеки у подальшому для визначення «оптимальних» габаритів стіни для заданого рівня умовної ймовірності ураження людини (рис. 7.65). Наприклад, замовником обумовлено, що

потрібно побудувати стіну, яка забезпечує ймовірність ураження 30% у контрольній точці розташування персоналу техногенного об'єкту. Користуючись трендом, визначаємо що ширина стіни повинна бути 5,5 м. Маючи на увазі, що коефіцієнт зв'язку довжини і висоти захисної стіни дорівнює приблизно 0,52, отримуємо що висота стіни має бути 2,86 м. Час модельних розрахунків склав 8 годин, за старої методики долучення візуальної експертизи потребувало б додатково 80 годин. Тобто впровадження нової методології дозволило загалом пришвидшити пошук раціональної захисної конструкції в 11 разів, тобто більш ніж на порядок.



Рис. 7.64 Зміна надлишкового тиску для експерименту V3.х

#### Таблиця 7.10

Параметр	V3.0	V3.1	V3.2	V3.3	V3.4
<i>P</i> <sub>1</sub> , %	47,1	35,7	16,0	6,7	2,4
<i>P</i> <sub>2</sub> , %	86,6	80,5	45,4	18,5	4,5
<i>I</i> +, кПа∙с	280,9	248,9	192,9	156,2	127,8
$\Delta P_{\rm max},$ кПа	76860	67397	40668	27094	18010
Pr <sub>1</sub>	4,92	4,63	4,01	3,50	3,02
Pr <sub>2</sub>	6,11	5,86	4,88	4,10	3,31
<i>W</i> <sub>х</sub> , м	0	2,2	4,2	5,8	7,8

Розрахункові параметри безпеки для експерименту V3.х



Рис. 7.65 Залежність умовної ймовірності розриву барабанних перетинок від ширини «нескінченно» високої стіни для експерименту V3.х: 1 – розрахунок; 2 – лінійний тренд

#### 7.5.3 Чисельний аналіз наслідків водневого вибуху у тунелі шахти

Водень як і метан, є одним з найбільш вибухонебезпечних газів, які присутні у шарах гірської породи, що видобувається у вугільній промисловості [79]. Тому видобуток вугілля має великий рівень ризику вибухових аварій, що призводять до тяжких соціальних та економічних наслідків [335]. Порушення техніки безпеки, несправності обладнання, фактори природного походження часто тягнуть за собою викиди водню у гірничих виробках, змішування горючого газу з повітрям з утворенням вибухонебезпечної газової суміші, вибух якої супроводжується утворенням і поширенням ударних хвиль (рис. 7.66) [336, 337].



Рис. 7.66 Розвиток техногенної аварії

Ударні хвилі чинять ударно-імпульсне навантаження на навколишнє середовище, загрожуючи життю та здоров'ю шахтарів, руйнуючи шахти та

пошкоджуючи розташоване в них гірниче обладнання. У результаті таких аварій соціальні, матеріальні та фінансові втрати можуть набути катастрофічних масштабів.

Для створення безпечних умов праці на шахтах необхідно розробляти та захисне обладнання, запобігти або застосовувати яке може зменшити ЛО прийнятного рівня можливі наслідки, спричинені вибухом газоповітряної суміші. Ефективність методів захисту можна перевірити експериментально [338]. Однак повномасштабний фізичний експеримент важко здійснювати, бо він є громіздким і коштовним. Тому останнім все частіше використовується занадто часом обчислювальний експеримент, який імітує розглянуті сценарії HC (рис. 7.67) з використанням комп'ютерних систем [288].



Рис. 7.67 Схема ймовірнісної оцінки наслідків аварії

Комп'ютерне моделювання процесу вибуху хмари воднево-повітряної суміші, яка виникла внаслідок аварійного викиду з тріщини у підошві штреку вугільної шахти. Розрахункова область представлена на рис. 7.68 [58].



Рис. 7.68 Мапа об'єктів уздовж (а) і поперек (б) розрахункової області

Хмара стехіометричної суміші розташовувалося на відстані  $Z_1 = 5,03$  м від входу до розрахункової області, радіус хмари становив  $R_1 = 0,8$  м (рис. 7.68а). На відстані  $Z_2 = 6,33$  м розташовувався акумуляторний електровоз, основні розміри якого відповідали моделі АРП8С ( $H_x = 1,4$  м,  $H_z = 4,5$  м,  $H_y = 1,67$  м,  $D_x = 0,76$  м,  $D_y = 0,1$  м,  $D_z = 1,17$  м). У характерних місцях аварійної зони розташовувалися КТ РО-Р4, у яких здійснювався контроль зміни у часі надлишкового тиску (точка Р4 була на висоті 1,82 м).

Для оцінки впливу закритого характеру потоку у штреку і загромадження простору електровозом на результуючі поля надлишкового тиску і ймовірності ураження розглядалися шість варіантів розрахункової схеми (табл. 7.11):

- відкритий простір без електровоза (V1);
- відкритий простір з електровозом (V2);
- штрек зі сферичною стелею без електровоза (V3);
- штрек зі сферичною стелею з електровозом (V4);
- штрек зі прямокутною стелею без електровоза (V5);
- штрек зі прямокутною стелею з електровозом (V6).

#### Таблиця 7.11



#### Варіанти схеми розрахунку

У початковий момент часу у результаті вибуху газової суміші формувалася хмара продуктів згоряння з високими тиском і температурою. Далі реалізувався процес руху продуктів згоряння, який супроводжувався конвективним переносом і турбулентним розсіюванням продуктів згоряння уздовж штреку і розповсюдженням ударної хвилі від епіцентру вибуху. Під час розрахунку отримувалися поля тиску в будь-який момент часу у всіх трьох площинах області розрахунку (рис. 7.69), збиралася уся необхідна інформація для обчислення полів умовної ймовірності ураження персоналу та збору колекцій надлишкового тиску у характерних контрольних точках тунелю.

Динаміку надлишкового тиску у контрольних точках РО-Р4 для різних варіантів розрахунку V1-V6 представлено на рис. 7.70-7.71.



Рис. 7.69 Розподіл тиску для опції V6 у момент *t* = 0,003 с: а – площина YOZ; б – XOZ; в – XOY

Із аналізу поведінки надлишкового тиску (рис. 7.70-7.71, 7.72а) видно, що наявність закритого простору тунелю (V3-V6) призводить до значного збільшення максимального надлишкового тиску в точках Р1 та Р3 у порівнянні з варіантами відкритого простору (V1, V2) внаслідок ефекту відбитої від стінок тонелю ударної хвилі. У решті КТ вплив стінок тунелю є незначним. З іншого боку, у точці Р0 загромадження простору локомотивом (V2, V4, V6) суттєво впливає на надлишковий тиск. З точки зору імпульсного навантаження (рис. 7.72б),

спостерігається подібна до ударної складової поведінка, за винятком точок Р2, Р4, у яких ефект тунельних стінок помітно збільшується за рахунок вторинного піку відбитої хвилі тиску.



Рис. 7.70 Динаміка надлишкового тиску у КТ РО (a) і Р1 (б)



Рис. 7.71 Динаміка надлишкового тиску у КТ РЗ (a) і Р4 (б)

Зібрані колекції даних забезпечують можливість обчислити фактори ураження ударною хвилею (максимальний надлишковий тиск й імпульс фази стиснення) (рис. 7.72) та отримати значення умовної ймовірності летального наслідку (рис. 7.73а) та розриву барабанних перетинок (рис. 7.73б) у КТ.

Умовна ймовірність розриву барабанних перетинок (рис. 7.73б) поводиться в КТ відповідно до поведінки максимального надлишкового тиску (рис. 7.72а), що є логічним, оскільки у формулі (3) присутній лише ударний компонент. Видно, що максимальні ймовірності відповідають точкам Р1 і Р3 для варіантів із тунелем і точці Р0 через наявність локомотива. Значення менше 50% ймовірність має тільки у

точці РЗ у відкритому просторі. Поведінка летальної ймовірності є більш складною (рис. 7.73а) через наявність у формулі (2) імпульсної складової навантаження від ударної хвилі. Для КТ Р1-Р4 наявність стінок тунелю є визначальним для генерацій високих значень ймовірності летального ураження, тоді як у відкритому просторі величини ймовірності – незначущі. Для точки РО ймовірність летального ураження збільшується від 40% до 60% за рахунок присутності електровоза.



Рис. 7.72 Небезпечні параметри у КТ: а – надлишковий тиск; б – імпульс



Рис. 7.73 Імовірність летального ураження (а) і розриву барабанних перетинок (б) у КТ РО-Р4 для варіантів V1-V6

Аналіз просторового розподілу умовної ймовірності ураження В області 7.74-7.76) обчислювальній (рис. забезпечує можливість візуально простежити ускладнення картини течії, спричинене наявністю стінок тунелю (рис. 7.74б,д-7.75б,д, 7.76б), у порівнянні з відкритим простором (рис. 7.74а,г-7.75а,г). Загромадження робочої зони електровозом призводить до додаткового збурення тиску внаслідок відбиття ударної хвилі від стінок локомотива у площині YOZ та в площині XOZ (рис. 7.75). Такий вплив у площині XOY є незначним (рис. 7.76). Тунель з прямокутною стелею має менше ударно-імпульсного навантаження у випадках шахти без локомотива та з локомотивом у порівнянні з тунелем з круглим варіантом стелї без локомотива та з локомотивом, що можна пояснити більшим розвантаженням у верхній частині тунелю (рис. 7.76).

Наявність стінок збільшує площу  $S_{50}$ , де ймовірність ураження досягає небезпечних значень (> 50%) (рис. 7.77), особливо для тунелю з круглою стелею. Наявність електровоза несуттєво змінює значення цього параметра, що може свідчити про перерозподіл цієї небезпечної зони вздовж тунелю.

З метою порівняльного аналізу різних варіантів організації видобутку копалин у шахті було використано методологію імовірнісної оцінки ураження персоналу у зоні аварійного викиду хмари вибухової газоподібної хімічної речовини (водню). Під час аналізу розглядалися умови відкритого або закритого (тунельного) типу актуального простору, а також наявність (відсутність) загромадження простору акумуляторним електровозом. Виявлено зони найбільш небезпечного знаходження людини у зоні аварії. Для отримання факторів негативного впливу на людину використано розроблену тривимірну математичну модель вибуху хмари водневоповітряної газової суміші, що утворилася в результаті випадкового викиду водню з тріщини у підніжжі шахтного заносу. Отримані результати можуть бути використані експертами з безпеки для розробки заходів щодо зменшення ризику таких аварій на шахті та для аналізу ефективності їх використання.

## 7.6 Математичне моделювання наслідків вибуху об'ємного шлангового заряду на рослинний покрив

Одним із засобів локалізації лісових пожеж [10] є створення мінералізованих смуг за допомогою зарядів об'ємного вибуху [285].



Рис. 7.74 Імовірність розриву барабанних перетинок у площинах YOZ для варіантів V1 (а), V3 (б) і V5 (в) та XOZ для варіантів V1 (г), V3 (д) і V5 (е)



Рис. 7.75 Імовірність розриву барабанних перетинок у площинах YOZ для варіантів V2 (а), V4 (б) і V6 (в) та XOZ для варіантів V2 (г), V4 (д) і V6 (е)



Рис. 7.76 Імовірність ураження (ХОҮ) для варіантів V1 (а), V3 (б) і V5 (в)



Рис. 7.77 Відносна площа S<sub>50</sub> небезпечної зони у площині YOZ

Даний спосіб відносно простий у застосуванні, має низьку ціну і високу ефективність, особливо за відсутності поблизу засобів гасіння. З огляду на те, що зі зростанням ширини мінералізованою смуги відбувається зростання її ефективності, потрібно розв'язувати задачу про оптимальний розподіл зарядів для створення суцільних широких смуг. Зростанню ширини мінералізованою смуги сприяє збільшення діаметра оболонки шлангового заряду. Але при цьому збільшуються матеріальні витрати на паливо і матеріал оболонки заряду, відбувається зменшення продуктивності інженерної техніки у зв'язку з обмеженою швидкістю наповнення оболонки шлангового заряду. Звідси постає актуальна проблема визначення габаритів заряду розв'язання якої проведемо на основі розробленої моделі миттєвого вибуху (розділ 2.1.1). Щоб врахувати присутність у просторі рослин під час руху ВУХ задіємо підхід А. М. Гришина [285]. Враховувався вплив сили тяжіння. Повна система рівнянь (2.1)-(2.8) зазнає змін: у правій частині ДР, які відповідають законам збереження імпульса, з'являються члени, які враховують вплив фітоценозу  $-k\rho q_i \sqrt{u^2 + v^2 + w^2}$ , де  $q_i$  – відповідна проекція вектора швидкості

потоку на осі ОХ, ОҮ, ОZ (u, v, w),  $\rho$  –щільність, k – коефіцієнт спротиву середовища, а теплофізичні властивості компонентів суміші розраховувалися шляхом усереднення.

Під час моделюванні вибуху об'ємного шлангового заряду у полозі лісу, вісь заряду у розрахунковій області була на середині висоти лісу H<sub>зар</sub> = H<sub>леса</sub>/2, яка дорівнювала H<sub>леса</sub> = 3 м (рис. 7.78).

Діаметр заряду був прийнятий рівним d = 0,9 м. Габарити актуального простору мали такі значення H<sub>x</sub> = 5 м, H<sub>y</sub> = 9 м, H<sub>z</sub> = 19 м. Вони дискретизувалися 25, 45 і 95 січними площинами, відповідно. Вважалося, що фітоценоз утворений сосновим молодняком (представлений заштрихованої областю на рис. 7.78), для якого коефіцієнт спротиву середовища дорівнює k = 0,7 (розповсюдження ВУХ простором проходить за k = 0). Динаміка розширення продуктів детонації розглядалася стосовно фізичного вибуху. Вважалося, що напочатку у оболонці ПГ мають детонаційні значення: тиск  $P_{\rm A} \approx 11 \cdot 10^5$  Па, температура  $T_{\rm A} = 2842$  K, коеффіцієнт адіабати  $\gamma_{\rm A} = 1,278$ , щільність  $\rho_{\rm A} = 1,32$  кг/м<sup>3</sup> і молярна маса  $\mu = 28,36 \cdot 10^{-3}$  кг/моль, тоді як в інших газових осередках простору прийняті параметри повітря з температурою  $T_{\rm c} = 293$  K, тиском  $P_{\rm c} = 101325$  Па, коеффіцієнтом адіабати  $\gamma_{\rm c} = 1,4$ . ШВ дорівнювала q = 3 м/с.



Рис. 7.78 Схема розташування об'ємного шлангового заряду у полозі лісового масиву

Моделювання показало, що далекобійність вибухової хвилі ОШЗ з габаритом 0,9 м дорівнює приблизно 2,5 м і 5 м для критичних перепадів тиску, які дорівнюють  $1,2 \cdot 10^5$  Па і  $0,4 \cdot 10^5$  Па, відповідно (рис. 7.79). Під критичним перепадом тиску розуміють тиск, у разі перевищення якого забезпечується здування тонких хвоїнок і гілочок. Слід ураховувати, що у фронті ударної хвилі стрибок тиску удвічі перевищує розрахунковий. Отриманий результат показує, що за даного діаметра заряду утворюється мінералізована смуга шириною від 5 м до 10 м у молодому сосновому лісі висотою 3 м.

Математичне моделювання ударного впливу на рослинний покрив проведено відповідно до схеми (рис. 7.80а), за якої застосовувалося два паралельно розташованих шлангових заряди 1. Вважалося, що середня висота рослинного покриву 2 становила h = 0,15 м. У розрахункових комірках, які моделюють спротив даного шару, коефіцієнт спротиву прийнятий рівним k = 0,9. У проведеній серії розрахунків змінювалася відстань між оболонками і їх діаметр d.



Рис. 7.79 Розподіл надлишкового тиску у поперековому перетині під час вибуху шлангового заряду діаметром 0,9 м

В результаті чисельного моделювання отримано, що на рослинний покрив заданих параметрів впливає ударна хвиля з надлишком тиску за її фронтом більше 1,2·10<sup>5</sup> Па на полосі шириною 8 м.

Дальнобійність ВУХ зростає за рахунок її відскоку від землі і взаємодією ВУХ, які поширюються зустрічними курсами у напрямках від епіцентрів пари зарядів (рис. 7.81).



Рис. 7.80 Мапа розташування об'ємних шлангових зарядів (a) і розподіл надлишкового тиску (б) у площині YOZ



Рис. 7.81 Розподіл надлишкового тиску у площині YOZ згодом 0,0025 с після вибуху

Оскільки під час вибуху двох зарядів необхідно домогтися не тільки зриву рослинного покриву, але і викиду його за межі області зформованої мінералізованої смуги, відстань між зарядами має бути такою, щоб внаслідок взаємодії продуктів вибуху, що розлітаються, сталося перебудування динаміки розльоту як у напівсферичного однозарядного вибуху: за діаметра обох шлангових зарядів d = 0,9

м ця умова досягається, якщо відстань між осями двох шлангових зарядів не перевищує 2,7 м.

Слід враховувати, що математична модель, яка застосовується, забезпечує можливість розрахувати ударну дію виходячи з енергії вибуху шлангового заряду. Це дає змогу оптимізувати діаметр зарядів і відстань між ними. Але може мати місце випадок, коли у розрахованому діаметрі об'ємного шлангового заряду не може поширюватися детонація, яка самопідтримується. У цьому випадку критичний габарит визначає діаметр об'ємного шлангового заряду газоповітряної вибухонебезпечної суміші (табл. 7.12).

#### Таблиця 7.12

Патиро	Розмір детонаційної	Критичний	
Паливо	комірки λ, мм	діаметр <i>D</i> <sub>кр</sub> , м	
$H_2$	15,9±2	0,32	
CH <sub>4</sub>	500±80	10	
$C_2H_2$	13,6±1,6	0,27	
$C_2H_4$	39±6	0,78	
$C_2H_6$	88±14	1,76	
$C_3H_8$	72±12	1,44	
$C_4H_{10}$	85	1,7	

Критичний діаметр заряду стехіометричних газоповітряних сумішей

Стійка верхова пожежа з'являється внаслідок зародження низової пожежі [286]. Установлено, що під час поширення низової пожежі вгору схилом, вона часто переходить у верхову. Виходячи з характеру поширення верхової пожежі, техніка гасіння з використанням ВУХ полягає у генерації у кронах дерев лісу простору без дрібного займистого матеріалу. Ці області у вигляді смуг необхідно перемежати із певним зміщенням із мінералізованими смугами (рис. 7.82). Тобто, один або кілька шлангових зарядів необхідно розташовувати на земній поверхні на підстилці лісу з метою утворення мінералізованої смуги для відсікання низової пожежі, а локалізацію верхової пожежі треба забезпечувати вибухом одного або декількох зарядів, розташованих поверх крон дерев.



Рис. 7.82 Схема гасіння лісової пожежі, яка має верхову і низову стадії: L – дистанція між зарядами уздовж землі, H – висота розташування заряду, яка забезпечує локалізацію верхової пожежі

# 7.7 Моделювання області обриву лісо-горючих материалов, що формується під час вибуху паливо-повітряних зарядів у лісовому фітоценозі

Проведемо чисельну оцінку розмірів області обриву ЛГМ, яка утворюється після вибуху паливо-повітряних шлангових зарядів різних діаметрів за їх розташування поверх крон дерев [11]. Таким чином, розрахунок забезпечить можливість встановити область, де стрибок тиску в ударній хвилі під час поширення у лісовому фітоценозі перевищує критичне значення. Під критичним стрибком тиску вважається експериментально встановлений надлишковий тиск, за якого досягається ступінь обриву лісо-горючих матеріалів більше, ніж 75%. За даними роботи [285] ця величина для соснових молодих лісів становить  $\Delta P = 0, 4 \cdot 10^5$  Па.

У разі довільного розташування заряду поверх дерев частина ділянок шлангового заряду розташується над кронами дерев, а інші його долі потраплять між кронами. Усереднюючи розташування заряду у лісовому фітоценозі, приймемо наступну розрахункову схему (рис. 7.83). Заряд діаметром d розташовується наполовину заглибленим у крони дерев відносно до середньої їх висоти, різниця між висотами верхніх і нижніх лісових крон дорівнює h, а відстань між землею і нижніми кронами становить Н. За результатами оцінки дальнобійності вибухової дії за такого розташування заряду необхідно встановити область перевищення критичного тиску уздовж лінії нижньої кромки дерев. Зрозуміло, що ширина смуги обриву ЛГМ по всій висоті кромки дерев буде визначаться не тільки діаметром заряду, а й середньою відстанню між верхніми і нижніми кронами h. А висота Н впливатиме на щільність розподілу обірваних ЛГМ на земній поверхні.



Рис. 7.83 Мапа розташування об'єктів у поперековій (а) і поздовжній (б) площинах: 1 – паливо-повітряний шланговий заряд,

2 – область крон дерев, 3 – земна поверхня

В роботі [271] встановлено, що за циліндричного вибуху конденсованих вибухових речовин закон падіння тиску після стрибка тиску у фронті хвилі  $\Delta P \approx 10^6$  Па має такий вигляд

$$\Delta P \sim r^{-\frac{3}{2}},\tag{7.1}$$

де *r* – радіус від центру вибуху до ударної хвилі.

Формула (1) не може бути застосована для розрахунку області обриву ЛГМ тому, що внаслідок детонації топлівовоздушних сумішей середній тиск продуктів детонації сягає близько 10<sup>6</sup> Па.

У роботі [287] отримано наявність закону подібності для параметрів ВУХ, які

породжені детонацією. На базі закону подібності можна отримати залежність НТ від відстані від епіцентру вибуху ГПС [287]

$$\overline{p} = 0,285 \exp\left(0,52\left(\ln\left(\overline{R}\right)\right)^2\right) / \overline{R}, \qquad (7.2)$$

де  $\overline{p} = \Delta P / P_0$  – безрозмірний надлишковий тиск,  $P_0$  – початковий тиск в атмосфері,  $\overline{R} = R / R_0$  – безрозмірна відстань, R – відстань від центру вибуху,  $R_0 = (E_0 / P_0)^{1/3}$ ,  $E_0 = mH_u$  – енергія вибухового перетворення,  $H_u$  – питома теплота вибуху паливоповітряної суміші, m – маса газової хмари.

Автори [287] вказують, що несферичнf форма хмари і відмінності у складі суміші призводять до відхилення реального надлишкового тиску від розрахункового на 10-15%.

Формула (2) може бути застосовано для ударної хвилі, яка поширюється у повітрі. З огляду на те, що лісовий фітоценоз є середовищем більшого супротиву течії газового потоку, співвідношення (2) дає змогу приблизно оцінити максимальний габарит простору обриву ЛГМ. Точніший його прогноз можна виконати на основі CFD моделювання [9] з використанням інтерактивного програмного засобу FIRE [68]. Початкові параметри детонаційних ПГ в оболонці ОШІЗ задавалися відповідно моделі миттєвого ФВ і для ГПС були такими:  $P_{su\delta} = 9,5 \cdot 10^5$  Па,  $T_{su\delta} = 2840$  К. Діаметр заряду у розрахунках дорівнював d = 1,3 м, висоти h = 3 м і H = 4 м. Вітер задавався у поперечному напрямку до заряду і мав швидкість 5 м/с. Коефіцієнт супротиву приземного шару атмосфери дорівнював k = 0,7.

Просторовий розподіл ВМК ПГ після 0,3 с від моменту вибуху представлено на рис. 7.84. Видно, що бічний вітер викликає асиметрію у розподілі концентрації продуктів реакції. Але його вплив на формування поля тиску надзвичайно мала.

Розподіл максимального тиску вздовж нижньої смуги, що моделює нижню кромку дерев представлено на рис. 7.85.



Рис. 7.84 Поле концентрації продуктів детонації: 1 – область крон дерев



Рис. 7.85 Розподіл максимального надлишкового тиску уздовж нижньої кромки крон дерев

Користуючись величиною критичного тиску і результатами розрахунків, можемо визначити, що ширина смуги обриву ЛГМ складатиме у даному випадку близько 3 м. Надлишковий тиск за формулою (2) ширину смуги 5,5 м від центру вибуху, що більш ніж на 1,2 м перевищує значення результатів CFD моделювання. Таким чином, аналітична залежність призводить до суттєвих перекручень в оцінці області обриву ЛГМ через неврахування зростання спротиву середовища.

## 7.8 Чисельний аналіз ймовірності ураження персоналу тепловим випромінюванням

Одним із найбільш небезпечних видів техногенної аварії є неконтрольоване горіння газоповітряної суміші з утворенням високотемпературних продуктів згоряння [335], які є джерелом теплового випромінювання у навколишній простір (рис. 7.86).



Рис. 7.86 Схема утворення теплового випромінювання

Таким чином, надлишок високої температури над звичайною температурою довкілля характеризує відхилення від нормального стану повітря і є небезпечним параметром [246]. Експозиція обслуговуючого персоналу промислового об'єкта тепловому потоку певної щільності формує фактор негативного впливу – дозу теплового випромінювання (рис. 7.87). Перевищення граничних значень дози призводить до соціальних наслідків – опіків різного ступеня тяжкості і навіть до летального результату.

Аналіз і прогноз наслідків техногенної аварії містить визначення умовної ймовірності ураження персоналу, який може бути підданий впливу теплової радіації, на основі математичного моделювання розсіювання високотемпературних продуктів згоряння домішки в атмосфері [22, 33]. Отримані за результатами моделювання просторово-часові поля небезпечного параметра – температури газової суміші продуктів сгоряння з повітрям, забезпечують можливість визначити величину основного фактора ураження – щільність теплового потоку від джерела до приймача, теплову дозу й умовну ймовірність ураження *P* обслуговуючого персоналу (рис. 7.88) [51, 54].



Рис. 7.87 Схема моделі теплового впливу на людину: 1- потік повітря; 2 – джерело теплового випромінювання; 3 – тепловий потік; 4 – людина



Рис. 7.88 Структурна схема пробіт-аналізу теплового впливу

Для розв'язання системи фундаментальних рівнянь газової динаміки для суміші, доповненої законами збереження маси домішок в інтегральної формі, використовується явний кінцево-різницевий метод С. К. Годунова [262]. Математичну модель реалізовано у вигляді підсистеми дослідницьких програмних комплексів «Fire» [68] и «Thermal Radiation Safety» [73].

З метою визначення умовної ймовірності ураження персоналу, що знаходиться під впливом вражаючого фактора, із обчисленим значенням пробіт-функції можна звернутися до узагальненого кусково-кубічного эрмітового сплайну [248] (безперервного представлення таблиці значень ймовірності від пробіт-функції [118, 313]), якого було реалізовано у вигляді комп'ютерної підсистеми «ProbitSafety» [70] з метою автоматизувати обчислювальний процес.

Розглянемо СВ високотемпературних (3450 К) продуктів згоряння водню із отвору, який виник внаслідок часткового руйнування обладнання (рис. 7.89). Пляма

отвору прийняло форму кола радіусом R = 0,5 м з координатами центру Xc = 7,5 м, Zc = 2,5 м у РП з габаритами  $15,0 \times 9,0 \times 15,0$  м і варіантом за кількістю комірок уздовж координатних осей  $15 \times 9 \times 15$ . ШВ дорівнювала 0 м/с.



Рис. 7.89 Мапа розташування об'єктів

#### Таблиця 7.13

#### Розташування контрольних точок

Номер точки	P1	<b>P</b> 2	P3	P4	<b>P</b> 5
Zр [м]	5.0	6.0	7.0	8.0	9.0

Високотемпературні продукти згоряння водню із заданою інтенсивністю викидаються з отвору в атмосферу, змішуються з повітрям і стають джерелом теплового потоку, який впливає довкілля. Вважається, що викид гарячого газу починається з моменту часу  $t_1 = 0$  с і примусово припиняється після  $t_2=5$  с.

Під час руху газової суміші високотемпературна зона істотно змінює форму і розміри. Зона максимальних температур має місце у момент часу  $t_2=5$  с (рис. 7.90), після якого викид припиняється (у відповідних комірках отвору виставляються граничні умови «непротікання») і хмара, втрачаючи максимальну концентрацію через розсіювання, починає поступово зникати. Розподіли умовної ймовірності

летального ураження людини внаслідок впливу теплового випромінювання у КТ Р<sub>і</sub> (табл. 7.13) представлені на рис. 7.91. Видно, що з віддаленням від епіцентру теплового випромінювання максимальна умовна ймовірність летального наслідку поступово зменшується.



Рис. 7.90 Поля температури у площині YOZ: а-з – у моменти часу 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, 15 с, відповідно



Рис. 7.91 Зміна ймовірності ураження тепловим потоком без перепони у КТ: 1-5 – КТ Р1-Р5, відповідно

На відстані Zw = 0 м від центру отвору витікання високотемпературного струменя могло розташовано суцільну, непроникну для теплових і газових потоків перепону кубічної форми з габаритами 1,0×1,0×1,0 м (рис. 7.89). Для кожної КТ під

час підрахунку складалася колекція комірок, які є «невидимими» з відповідної КТ (рис. 7.92). Ці комірки виключалися під час інтегрування простором сумарного теплового потоку від комірок-джерел до комірки-приймача у відповідній КТ.



Рис. 7.92 Локалізація «невидимих» комірок: 1 – «невидима зона», 2 – перепона, 3 – КТ Р1, а – у площині YOZ, б – у площині XOZ біля землі, в-е – у площині YOX, на відстані Z = 0, 1, 2, 3 м, відповідно



Рис. 7.93 Зміна ймовірності ураження тепловим потоком з перепоною у КТ: 1-5 – КТ Р1-Р5, відповідно

У варіанті без суцільної перепони ймовірність летального ураження людини з

відстанню від епіцентру випромінювання поступово згасає (рис. 7.91). Установлення перепони кардинально змінює безпековий стан (рис. 7.93) у КТ. Точка Р1 із найнебезпечнішої у варіанті без перепони стає навпаки найбільш безпечною внаслідок максимальної захищеності від теплових потоків завдяки перепоні. З відстанню від перепони її корисна дія зменшується, відкриваючи доступ більшій кількості джерел теплового випромінювання, але й інтенсивність випромінювання вщухає, як і у першому варіанті без перепони (рис. 7.91, 7.93). Такий характер розподілу ймовірності ураження у КТ забезпечує можливість стверджувати необхідність урахування впливу непроникнених для теплових потоків перепон для оцінки безпекового стану на об'єкті, де має місце викид високотемпературних газів.

### Висновки до розділу 7

У розділі 7 з використанням розробленого класу 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, виконано аналіз стану збуреного повітря ТО і прогноз наслідків впливу уражаючих факторів на довкілля з метою пошуку раціональних засобів захисту.

1. На основі розроблених моделей розподілу тиску газоповітряної суміші, які, на відміну від наявних використовують нелокальні початкові умови, що забезпечує можливість моделювати вибух вибух ГПС для оцінювання наслідків впливу хвилі тиску на довкілля та ефективність засобів захисту від її дії, було виконано наступне:

– досліджено вивільнення стисненого водню з циліндру зберігання високого тиску на станції заправки воднем транспортних засобів з утворенням водневоповітряної суміші. 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. Виявлено, що найбільш ефективними засобами захисту споруд від впливу вибухової ударної є відбійні стіни у безпосередній близькості до забудови та віднесення вибухонебезпечних об'єктів далі від будівель;

розглянуто вибух напівсферичної хмари водню, що утворюється внаслідок миттєвого руйнування балона високого тиску на заправній станції. Проведено порівняльний аналіз ефективності заходів захисту від наслідків впливу надлишкового тиску ударної хвилі (суцільна стіна різної конфігурації, пакет перфорованих стін, набори стовпчиків двох шаблонів, заглиблення області вибуху, розвантажувальні порожнини під стіною і в заглибленою зоні вибуху). Виявлено, що найбільш ефективними засобами захисту є перепони у вигляді суцільної Т-подібної стіни, пакету із декількох рядів стовпчиків, пакету з двох перфорованих стін у комбінації із заглибленням зони вибуху. Для зниження навантаження на поверхні захисних перешкод рекомендовано розташувати розвантажувальні канали під пристроєм. Застосування таких пристроїв забезпечує можливість підвищити рівень безпеки функціонування обслуговуючого персоналу і обладнання TO. ШО використовує водень;

– виконано порівняльний аналіз ефективності захисної споруди (стіна), яку розташовано на різній відстані від епіцентру вибуху. Одночасно проведено аналіз розподілу максимального надлишкового тиску на поверхні захисної стіни збоку вибуху з метою визначити безпечний матеріал виготовлення стіни. Зроблено рекомендації щодо найбільш ефективного розташування захисної стіни та матеріалу, з якого її треба виготовити, враховуючи безпеку персоналу та здатність стіни витримати навантаження від надлишкового тиску без руйнування;

- проведено оцінку стану безпеки персоналу, захищеного прямокутною

суцільною стіною, на станції заправки транспорту воднем. Визначено тренди поведінки умовної ймовірності ураження людини для серій захисних споруд різних габаритів з метою пошуку їх оптимального співвідношення. Отримано лінійний тренд ймовірності ураження для серії цих споруд із визначеним оптимальним співвідношенням габаритів, який може застосовуватися фахівцями з безпеки на етапі проектування захисної стіни із заданим рівнем ймовірності ураження.

– проведено чисельний аналіз впливу вибухової хвилі на промисловому майданчику з різними варіантами ландшафтного розташування робочого місця персоналу щодо епіцентру вибуху. Отримано, що заглиблення або підйом робочого місця відносно горизонту епіцентру вибуху призводить до зниження ймовірності негативних наслідків впливу вибухової хвилі на організм людини;

– здійснено 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 загромадження тунелю акумуляторним електровозом;

– розглянуто використання ударно-імпульсного впливу від вибуху ГПС як засобу припиниення розповсюдження пожежі у лісі. Отримано оптимальний діаметр шлангового заряду у залежності від необхідної енергії на 1 погонний метр заряду і умови поширення детонації;

– проведено дослідження впливу надлишкового тиску вибухової хвилі від паливо-повітряного шлангового заряду у разі його розташування поверх крон лісових дерев. Здійснено чисельну оцінку ефективності способу локалізації пожеж вибухом паливо-повітряних зарядів у лісовому фітоценозі.

2. На основі розробленої нестаціонарної математичної моделі потрапляння газової домішки в актуальну область, у якій, на відміну від відомих, використовуються нелокальні граничні умови на поверхнях отворів довільної форми:

 отримано розподіли хімічно-складового збурення повітря навколо залізничної станції внаслідок випаровування з поверхні плями аварійного пролиття зрідженого ціаністого водню після руйнування транспортної цистерни. Виявлено зони токсичного ураження персоналу станції, вплив форми плями пролиття, швидкості вітру та загромадження простору будівлею станції на масштаби наслідків аварії;

– 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.

3. На основі розробленої нестаціонарної математичної моделі теплового випромінювання газової домішки в актуальній області отримано розподіли наслідків ураження людини тепловим потоком, який випромінюється струменем високотемпературних продуктів згоряння водню у залежності від відстані від епіцентру випромінювання. Виявлено вплив захисного непроникного твердого об'єкту на перерерозподіл полів ураження людини.

Основні результати разділу опубліковано у 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 програмних засобів 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 нестаціонарні 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 брутто в області займистості) для оцінювання наслідків впливу хвилі тиску на довкілля та ефективність засобів захисту від її дії.

На основі програмних засобів комп'ютерної реалізації розробленої моделі було досліджено вивільнення стисненого водню з циліндру зберігання високого тиску на станції заправки воднем транспортних засобів з утворенням водневоповітряної 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 загромадження тунелю акумуляторним електровозом;

– уперше розроблено нестаціонарну математичніу модель руху хімічнореагуючої газової суміші зі складними граничними умовами, яка, на відміну від наявних, для опису процесів хімічної кінетики використовує розрахункову схему брутто-взаємодії пального та кисню повітря.

На основі програмних засобів комп'ютерної реалізації розробленої математичної моделі отримані розподіли хімічно-складового, баричного і
температурного збурення повітря під час дефлаграційного горіння водневоповітряної суміші після викиду водню внаслідок руйнування циліндру зберігання високого тиску у гаражному приміщенні. Вироблено рекомендаціїї 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 детонаційной трубі;

– уперше розроблено нестаціонарну математичну модель руху хімічнореагуючої 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.

На основі програмних засобів комп'ютерної реалізації розробленої моделі отримані 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 нестаціонарну 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 програмних засобів комп'ютерної реалізації розробленої математичної моделі отримано розподіли хімічно-складового збурення повітря навколо залізничної станції внаслідок випаровування з поверхні плями аварійного пролиття зрідженого ціаністого водню після руйнування транспортної цистерни. Виявлено зони токсичного ураження персоналу станції, вплив форми плями пролиття, швидкості вітру та загромадження простору будівлею станції на масштаби

наслідків аварії. Також з використанням моделі досліджено процеси вентиляції гаражного приміщення з аварійним витоком водневого палива, рекомендовано найбільш ефективний режим роботи стандартного витяжного вентилятора, і раціональну схему розміщення вентилятора з точки зору можливих налідків 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 витікання хлору з газопроводу. Виявлено зростаючий вплив струминного 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 нестаціонарних 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 інтегроінтерполяційного обчислювального методу наскрізного розрахунку без зростання часової складності проведено аналіз параметрів стану не тільки потоку чистого повітря простором техногених 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 випомінювання.

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 ІІІ 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 програмних засобів 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 з використанням 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 використовувся 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 програмні засоби 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 ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

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.

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. *Науковий вісник будівництва: Зб. наук. пр.* 2001. Вип. 14. С. 258–262.

3. Скоб Ю. А. Математическое моделирование выброса и рассеяния в атмосфере газообразных примесей. Вестник Харк. нац. ун-та. Серия: Математическое моделирование. Информационные технологии. Автоматизированные системы управления. 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.

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.

8. Стаховский О. В., Корытченко К. В., Угрюмов М. Л., Скоб Ю. А. Способ инициирования детонации в неограниченном пространстве. Системи обробки інформації: зб. наук. праць Харк. ун-ту повітряних сил імені Івана Кожедуба. 2008. Вип. 2(69). С. 105–107.

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.

10. Скоб Ю. А. Математическое моделирование дефлаграционного горения газовых смесей в помещении. Вестник Харк. нац. ун-та. Серия: Математическое моделирование. Информационные технологии. Автоматизированные системы управления. 2009. № 863. Вып. 12. С. 218–236.

11. Корытченко 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.

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.

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.

18. Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Численное моделирование детонации в газовых смесях. Вестник Харк. нац. ун-та: сер. Математическое моделирование. Информационные технологии. Автоматизированные системы управления. 2013. № 1058. Вып. 21. С. 149–157.

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.

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.

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 газовоздушной 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 Дніпровського нац. ун-ту залізн. транспорту.* 2018. № 3(75). С. 52–66. DOI : https://doi.org/10.15802/stp2018/133637 (*PIHЦ*)

25. Korytchehko K. V., Ozerov A. N., Vinnikov D. V., Skob Yu. 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*)

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.

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.

28. Men'shikov V. A., Skob Yu. A., Ugryumov M. L. Solution of the threedimensional 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*)

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. (РІНЦ)

30. Skob Y., Ugryumov M. and Granovskiy E. Numerical Evaluation of Probability of Harmful Impact Caused by Toxic Spill Emergencies. Environmental and Climate Technologies. *The Journal of Riga Technical University*. 2019. Vol. 23, Issue 3. P. 1–14. DOI : https://doi.org/10.2478/rtuect-2019-0075 (*Scopus*)

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*)

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 р. URL : http://fluid.ippt.gov.pl/ictam04/text/pdf/i04abstracts.pdf (дата звернення 05.07.2021)

33. Granovskiy E. A., Lyfar V. A., Skob Yu. 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. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/110021.pdf (дата звернення 05.07.2021)

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. *Пожежна безпека та аварійно-рятувальна справа: стан, проблеми і перспективи (Пожежна безпека – 2005)* : Матеріали VII Всеукраїнської наук.-практ. конф., 30 лист.–1 груд. 2005 р., Київ, УкрНДІПБ МНС України, 2005. С. 79–82.

35. Грановский Э. А., Лыфарь В. А., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л., Коробчинский К. П. Компьютерное моделирование последствий взрыва газовоздушной смеси. *Дисперсные системы. Тезисы докладов XXII науч. конф. стран СНГ*, 18–22 сент. 2006 р., Одесса, 2006. С. 117–118.

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)

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. Ш Міжнар. наук.-практ. конф., 10–14 верес. 2007 р., Алушта-Харьків, 2007. Т. 2. С. 233–237.

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.

39. Granovskiy E. A., Lyfar V. A., Skob Yu. 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)

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-Харьків, 2008. Т. 2. С. 298-303.

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 2007, Ajaccio-Corsica, France. 2009. 12 p. URL : http://conference. ing.unipi.it/ichs2009/images/stories/papers/182.pdf (дата звернення 05.07.2021)

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-Харьків, 2009. Т. 1. С. 47–51.

43. Skob Yu. 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)

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.

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

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

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.

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

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 (МІNTT-2017)* : збірка матеріалів IX Міжнар. наук.-практ. конф., 23–25 травня 2017 р. Херсон, 2017. С. 254-257.

50. Skob Yu. 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 p. URL : https://hysafe.info/uploads/2017\_papers/159.pdf (дата звернення 05.07.2021)

51. Скоб Ю.А., Васильченко Е. А. Численное моделирование теплового

излучения продуктов горения газа. *Сучасні інформаційні та інноваційні технології* на транспорті (*MINTT-2018*) : збірка матеріалів X Міжнар. наук.-практ. конф., 22–25 травня 2018 р. Херсон, 2018. С. 250–253.

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

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.

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

55. Шайтан А. Ф., Скоб Ю. А. Численная оценка последствий загрязнения атмосферы токсичным веществом : *матеріали І міжнар. наук.-практ. конф. IT-професіоналів та аналітиків комп'ютерних систем «ProfIT Conference»*, 24–26 квітня 2018 р., Харків, 2018. С. 68-69.

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

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

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 р. URL : https://hysafe.info/uploads/2019\_papers/173.pdf (дата звернення 05.07.2021)

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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.

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*)

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*)

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.

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.

70. Скоб Ю. О., Евтушенко Д. В., Бондаренко Ю. В., Тищенко А. С. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система підтримки прийняття рішень «ProbitSafety» для оцінки безпеки під час техногенної аварії на промисловому підприємстві»: свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 69555. *Офіційний бюлетень: Авторське право і суміжні права*. Київ: Держ. служба. інтел. власності України. 2017. № 44. С. 21.

71. Скоб Ю. О., Угрюмов М. Л., Чернишов Ю. К. Комп'ютерна програма

«Комп'ютерна система «Piecewise Cubic Spline» сплайн-апроксимації таблично заданої функції з використанням узагальненого кусочно-кубічного сплайна»: свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 71733. *Авторське право і суміжні права. Офіційний бюлетень*. Київ: Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. 2017. № 45. С. 186–187.

72. Скоб Ю. О., Угрюмов М. Л. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна інтерактивна система інженерного аналізу та прогнозу «Toxic Spill Safety» для оцінки безпеки під час аварійного пролиття токсичного зрідженого газу»: свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 71797. *Авторське право і суміжні права. Офіційний бюлетень*. Київ: Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. 2017. № 45. С. 212.

73. Скоб Ю. О., Угрюмов М. Л. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система «Thermal Radiation Safety» інженерного аналізу та прогнозу ймовірності ураження персоналу тепловим випромінюванням під час аварійного горіння газоповітряної суміші для оцінки безпеки промислового підприємства»: свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 71933. *Авторське право і суміжні права. Офіційний бюлетень*. Київ: Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. 2017. № 45. С. 264.

74. Скоб Ю. О., Угрюмов М. Л. Комп'ютерна програма «Компьютерна система «Point Inside Region» визначення знаходження точки всередині замкненого контуру довільної форми на площині» («PIR»): свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 86423. *Авторське право і суміжні права. Офіційний бюлетень*. Київ: Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. 2019. № 52. С. 964–965.

75. Скоб Ю. О., Угрюмов М. Л. Комп'ютерна програма «Компьютерна система «Arbitrary Region Discretization» кінцево-різницевої дискретизації на площині однозв'язної області, яка є обмеженою замкненим довільним контуром» («ARD»): свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 86452. *Авторське право і суміжні права. Офіційний бюлетень*. Київ: Міністерство економічного

розвитку і торгівлі України. 2019. № 52. С. 976.

76. Скоб Ю. О., Угрюмов М. Л. Комп'ютерна програма «Комп'ютерна система «Tunnel Explosion Safety» для інженерного аналізу безпекових показників під час аварійного вибуху газоповітряної суміші у тунелі шахти» («TES»): свідоцтво про реєстрацію авторського права на твір № 86493. *Авторське право і суміжні права. Офіційний бюлетень*. Київ: Міністерство економічного розвитку і торгівлі України. 2019. № 52. С. 993.

77. Шохин В. Н., Лопатин А. Г. Гравитационные методы обогащения. Москва : Недра, 1993. 313 с.

78. Абрамов А. А. Переработка, обогащение и комплексное использование твердых полезных ископаемых. Т. І. Обогатительные процессы и аппараты: учебник для вузов. Москва : Изд-во Московск. гос. горн. ун-та, 2001. 472 с.

79. Pramod Thakur. Advanced Mine Ventilation: Respirable Coal Dust, Combustible Gas and Mine Fire Control. Woodhead Publishing, 2018. 528 p. DOI : https://doi.org/10.1016/C2014-0-04167-6

80. Ляшенко А. М., Нечипорук Н. В., Кобрина Н. В., Вамболь С. А. Физические аспекты пылеподавления и распылительные устройства для их реализации. *Открытые информационные и компьютерные интегрированные технологии*. Вып. № 48. С. 234–239.

81. Кобрина H. B., Костюк B. E., Кобрин B. H., Вамболь C. A. Моделирование процесса при погрузке, пылеподавления разгрузке И транспортировке сыпучих материалов. Открытые информационные u компьютерные интегрированные технологии. 2010. Вып. № 48. С. 248–252.

Britter R. E. Atmospheric Dispersion of Dense Gases. Ann. Rev. Fluid. Mech.
1989. Vol. 21. P. 317–344.

83. Sklavounos S., Rigas F. Advanced multi-perspective computer simulation as a tool for reliable consequence analysis. *Process Safety and Environmental Protection*. 2012. No. 90(2). P. 129–140.

84. Чернишов Ю. К. Методи обчислення статистичних параметрів в подієвому моделюванні. Харків : Фактор, 2014. 248 с.

85. Коган М. Н. Динамика разреженного газа (кинетическая теория). Москва : Наука, 1967. 440 с.

86. Bird G. A. Molecular Gas Dynamics and the Direct Simulation of Gas Flows (Oxford Engineering Science Series). Clarendon Press, 1994. 484 p.

87. Sone Yoshio. Molecular Gas Dynamics: Theory, Techniques, and Applications (Modeling and Simulation in Science, Engineering and Technology). Boston : Birkhäuser, 2007. 671 p.

88. Sharipov Felix. Rarefied Gas Dynamics: Fundamentals for Research and Practice. Wiley-VCH, 2015. 303 p.

89. Белоцерковский О.М., Давыдов Ю.М. Метод крупных частиц в газовой динамике. Москва: Наука. Главная редакция физико-математической литературы, 1982. 392 с.

90. Хокни Р., Иствуд Дж. Численное моделирование методом частиц. Москва : Мир, 1987. 640 с.

91. Markiewicz M. T. A review of mathematical models for the atmospheric dispersion of heavy gases. Part I. *Ecological Chemistry and Engineering S.* 2012. 19(3). P. 297–314.

92. Markiewicz M. A review of models for the atmospheric dispersion of heavy gases. Part II: Model quality evaluation. *Ecological Chemistry and Engineering S*. 2013. 20(4). P. 763–782.

93. Біляєв М. М., Гунько О. Ю., Машихіна П. Б. Математичне моделювання в задачах екологічної безпеки та моніторингу надзвичайних ситуацій. Дніпро : Акцент ПП, 2013. 159 с.

94. Пшінько О. М., Біляєв М. М., Машихіна П. Б. Моделювання забруднення атмосфери під час техногенних аварій. Дніпро : Нова ідеологія, 2011. 168 с.

95. Biliaiev M., Biliaieva V., Kozachyna V., Berlov O., Kalashnikov I. Numerical simulation of toxic chemical transport after accidental release at chemical plant. *Romanian Journal of Information Science and Technology*. 2020. Issue 23. Num. S. P. S3–S13.

96. Biliaiev M. M., Rusakova T. I., Kolesnik V. Ye., Pavlichenko A. V. Determination of areas of atmospheric air pollution by sulfur oxide emissions from mining and metallurgical and energy generating enterprises. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*. 2017. Issue 3. P. 100–106.

97. Biliaiev M. M., Rusakova T. I., Kolesnik V. Ye., Pavlichenko A. V. The predicted level of atmospheric air pollution in the city area affected by highways. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*. 2016. Issue 1, P. 90–97.

98. Biliaiev M. M., Rusakova T. I., Kalashnikov I. V., Bondarenko I. O., Gunko E. Y. Numerical modeling of air pollution from dumps. Наука та прогрес транспорту. Вісник Дніпропетровського національного університету залізничного транспорту. 2019. № 4(82). С. 7–17.

99. Біляєв М. М., Калашніков І. В., Козачина В. А. Визначення меж поясу безпеки при терактах із використанням хімічних агентів. *Наука та прогрес транспорту. Вісник Дніпропетровського національного університету залізничного транспорту.* 2018. № 4(76). С. 7–14.

100. Biliaiev M. M., Kalashnikov I. V., Kozachyna V. A. Territorial risk assessment after terrorist act: express model. *Nauka ta prohres transport – Science and Transport Progress*. 2018. No. 1(73). P. 7–14. DOI : 10.15802/stp2018/123474.

101. Biliaiev M. M., Muntian L. Ya. Numerical simulation of toxic chemical dispersion after accident at railway. *Nauka ta prohres transport – Science and Transport Progress*. 2016. No. 2(62), P. 7–15. DOI : 10.15802/stp2016/67279.

102. Abramov Y., Basmanov O., Krivtsova V., Khyzhnyak A. Estimating the influence of the wind exposure on the motion of an extinguishing substance. *EUREKA*. *Physics and Engineering*. 2020. 2020(5). P. 51–59.

103. Abramov Yu. O., Basmanov O. Ye., Krivtsova V. I., Salamov J. Modeling of spilling and extinguishing of burning fuel on horizontal surface. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*. 2019. Issue 4, P. 86–90.

104. Abramov Y., Basmanov O., Salamov J., Mikhayluk A., Yashchenko O. Developing a model of tank cooling by water jets from hydraulic monitors under conditions of fire. *Eastern-European Journal of Enterprise Technologies*. 2019. 1(10-97). P. 14–20.

105. Abramov Y. A., Basmanov O. E., Salamov J., Mikhayluk A. A. Model of thermal effect of fire within a dike on the oil tank. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*. 2018. Issue 2, P. 95–100.

106. Kobilskaya E. B., Lyashenko V. P., Hryhorova T. A. Integral conditions in the inverse problems of heat conduction. *Mathematical Modeling and Computing*. 2020. 7(2). P. 219–227.

107. Дем'янченко О., Кобильська О., Ляшенко В. Математична модель теплообміну у валковому калібрі. Вісник Харківського національного університету імені В.Н. Каразіна, серія «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління». 2019. № 42, 58–67. DOI : https://doi.org/ 10.26565/2304-6201-2019-42-06.

108. Zagirnyak M., Kobilskaya E., Lyashenko V., Salenko A. Mathematical models of the temperature field in the filament-extruder system during 3D printing : *AIP Conference Proceedings*. 2020. 2302. 100008. DOI : https://doi.org/10.1063/5.0033797

109. Zaika, A., Hrytsiuk, O., Kobilskaya, E., Lyashenko, V. The generalized mathematical model of heat conduction in a complex multi-layered area : AIP Conference Proceedings. 2017. 1895. 090004. 9 p. DOI : https://doi.org/10.1063/1.5007404.

110. Ляшенко В. П., Кобильська О. Б. Відновлення імпульсного джерела тепла в задачі теплопровідності. Вісник Кременчуцького національного університету імені Михайла Остроградського. 2016. № 2(1). С. 27-32.

111. Налисько М. М., Барташевська Л. І. Чисельне моделювання аварійних вибухів рудникової атмосфери. *Физико-технические проблемы горного* 

*производства* : сб. научн. тр. 2020. Вип. 22. С. 85–102. DOI : https://doi.org/10.37101/ftpgp22.01.007

112. Беликов А. С., Налисько М. М., Барташевська Л. І. Оценка распространения ударных воздушных волн в протяженных сооружениях с учетом диссипации внутренней энергии газового потока. *Вісник Придніпровської державної академії будівництва та архітектури*. 2019. № 1. С. 249–250. DOI : https://doi.org/10.30838/J.BPSACEA.2312.260319.10.401

113. Беликов А. С., Налисько М. М. Повышение безопасности при возникновении аварийных газовых взрывов и распространении ударных воздушных волн в протяженных сооружениях. *Строительство, материаловедение, машиностроение. Серия: Безопасность жизнедеятельности.* 2018. Вып. 105. С. 16–28. DOI : https://doi.org/10.30838/P.CMM.2415.250918.16.126

114. Налисько М. М. Параметры распространения ударных воздушных волн через сопряжения протяженных каналов. Збірник наукових праць Національного гірничого університету. 2018. № 55. С. 222–238. DOI : https://doi.org/10.30838/ J.BPSACEA.2312.260319.10.401

115. Model Evaluation Group on Major Industrial Hazards. URL : https://cordis.europa.eu/article/id/2540-model-evaluation-group-on-major-industrial-hazards(датазвернення 06.07.2021)

116. Blackmore D. R., Herman M. N., Woodward J. L. Heavy gas dispersion models. *J Hazard Mater*. 1982. 6(1–2). P. 107–128.

117. Koopman R. P., Ermak D. L., Chan S. T. A review of recent field tests and mathematical modelling of atmospheric dispersion of large spills of Denser-than-air gases. *Atmospheric Environment*. 1989. 23(4). P. 731–745.

118. РД-03-26-2007. Методические указания по оценке последствий аварийных выбросов опасных веществ. Сер. 27. Вып. 6. Москва : НТЦ «Промышленная безопасность», 2008. 122 с.

119. Clancey V. J. The evaporation and dispersion of flammable liquid spillage's. *Chemical Process Hazards*. 1974. Vol. 5. P. 80–98. URL : https://www.icheme.org/media/ 12199/v-paper-07.pdf (дата звернення 06.07.2021)

120. Koopman R. P., Ermak D. L. Lessons learned from LNG safety research. J Hazard Mater. 2007. Vol. 140. P. 412–428.

121. Duijm N. J., Duijm B., Mercer A., Bartholome C., Giesbrecht H. Development and test of an evaluation protocol for heavy gas dispersion models. *Journal of Hazardous Materials*. 1997. Vol. 56(3). P. 273–285.

122. Brighton P. W. M., Byrne A. J., Cleaver R. P., Cleaver P., Webber D. M. Comparison of heavy gas dispersion models for instantaneous releases. *Journal of Hazardous Materials*. 1994. Vol. 36(3). P. 193–208.

123. Technical and scientific guidelines in the VDI-Manual on air pollution prevention. *Atmospheric Environment*. 1967. Vol. 20. P. 1651–1652.

124. Schatzmann M. Atmospheric dispersion models for regulatory purposes in the Federal Republic of Germany. Part II: The current situation. *International Journal of Environment and Pollution*. 1995. Vol. 5. P. 431–440.

125. Britter R. E., Hanna S. R., Briggs G. A., Robins A. Short-range vertical dispersion from a ground level source in a turbulent boundary layer. *Atmospheric Environment*. 2003. Vol. 37. P. 3885–3894.

126. Гринин А. С., Новков В. Н. Экологическая безопасность. Защита территории и населения при чрезвычайных ситуациях. Москва : ФАИР-ПРЕСС, 2000. 336 с.

127. Емельянов В. М., Коханов В. Н., Некрасов П. А. Защита населения и территорий в чрезвычайных ситуациях. Москва : Академический проект «Трикста», 2005. 480 с.

128. Кацман М. Д., Кононов Г. Б., Діденко І. В., Огороднічук Н. В. Ліквідація пожеж на залізничному транспорті. Київ : Основа, 2006. 216 с.

129. Методика прогнозування наслідків впливу (викиду) небезпечних хімічних речовин при аваріях на промислових об'єктах і транспорті. Київ, 2001. 33 с.

130. Molkov V., Shentsov V., Brennan S., Makarov D. Hydrogen non-premixed combustion in enclosure with one vent and sustained release: Numerical experiments. *Proceedings the International Conference on Hydrogen Safety*, 9–11 Sept. 2013, Brussels, Belgium. 2013. 16 p. URL : http://www.ichs2013.com/images/papers/153.pdf (дата звернення 05.07.2021)

131. Dadashzadeh M., Kashkarov S., Makarov D., Molkov V. Risk assessment methodology for onboard hydrogen storage. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2018. No. 43(12), P. 6462–64755. DOI : 10.1016/j.ijhydene.2018.01.195.

132. Берлянд М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы. Ленинград : Гидрометеоиздат, 1985. 273 с.

133. Van Ulden A. P. On the spreading of a heavy gas released near the ground. In: Bushmann CH, editors. Loss prevention and safety promotion in process industries. Delft, The Netherlands: Elsevier, 1974. P. 221–226.

134. Kaiser G. D., Walker B. C., Releases of anhydrous ammonia from pressurized containers – the importance of denser-than-air mixtures. *Atmos Environ*. 1978. Vol. 12. P. 2289–2300.

135. Mocho P., Desauziers V., Plaisance H., Sauvat N. Improvement of the performance of a simple box model using CFD modeling to predict indoor air formaldehyde concentration. *Building and Environment*. 2017. Vol. 124. P. 450–459.

136. Eidsvik K. J. A model for heavy gas dispersion in the atmosphere. *Atmos Environ*. 1980. No.14(7). P. 769–777.

137. Fay J. A., Ranck D. A. Comparison of experiments on dense gas cloud dispersion. *Atmos Environ*. 1983. No.17(2). P. 239–248.

138. Fay J. A., Zemba S. G. Dispersion of initially compact dense gas clouds. *Atmos Environ*. 1985. No.19(8). P. 1257–1261.

139. Van Ulden A. P. The heavy gas mixing process in still air at Thorney Island and in the laboratory. *J Hazard Mater*. 1987. No.16. P. 411–425.

140. Carpenter R. J., Cleaver R. P., Waite P. J., English M. A. The calibration of a simple model for dense gas dispersion using the Thorney Island Phase I trials data. *J Hazard Mater*. 1987. No.16. P. 293–314.

141. Crabol B., Roux A., Lhomme V. Interpretation of the Thorney Island Phase I trials with the box model CIGALE2. *J Hazard Mater*. 1987. No.16. P. 201–214.

142. Wheatley C. J., Prince A. J.. Translational cloud speeds in the Thorney Island trials: Mathematical modelling and data analysis. *J Hazard Mater*. 1987. No.16. P. 185–199.

143. Puttock J. S. Comparison of Thorney Island data with predictions of HEGABOX/HEGADAS. *J Hazard Mater*. 1987. No.16. P. 439–455.

144. GASTAR 3.2 user manual. Cambridge, UK : Cambridge Environmental Consultants Ltd. 2009. URL : https://www.cerc.co.uk/environmental-software/assets/data/ doc\_userguides/CERC\_GASTAR3\_User\_Guide.pdf (дата звернення 05.07.2021)

145. Vergison E. A Quality-Assurance guide for the evaluation of mathematical models used to calculate the consequences of Major Hazards. *Journal of Hazardous Materials*. 1996. No.49(2–3). P. 281–297.

146. Webber D. M., Jones S. J., Martin D. A model of the motion of a heavy gas cloud released on a uniform slope. *J Hazard Mater*. 1993. No.33(1). P. 101–122.

147. Kunsch J. P., Fannelop T. K. Unsteady heat-transfer effects on the spreading and dilution of dense cold clouds. *J Hazard Mater*. 1995. No.43. P. 69–193.

148. Nielsen M. Comment on 'A model of the motion of a heavy gas cloud released on a uniform slope'. *J Hazard Mater*. 1996. No.48. P. 251–258.

149. Kunsch J. P., Webber D. M. Simple box model for dense-gas dispersion in a straight sloping channel. *J Hazard Mater*. 2000. No.75. P. 29–46.

150. Kumar A., Mahukart A., Joshi A. Study of the spread of a cold instantaneous heavy gas release with surface heat transfer and variable entrainment. *J Hazard Mater*. 2003. No.101(2). P. 157–177.

151. Kukkonen J., Kulmala M., Nikimo J., Vesala T., Webber D. M., Wren T. The homogeneous equilibrium approximation in models of aerosol cloud dispersion. *Atmospheric Environment*. 1994. No.28(17). P. 2763–2776.

152. Ditali S., Colombi M., Moreschini G., Senni S. J. Consequence analysis in LPG installation using an integrated computer package. *Hazard Mater*. 2000. No.71. P. 159–197.

153. Quaranta N., DeMartini A., Bellasio R., Bianconi R., Marioni M. A decision support system for the simulation of industrial accidents. *Environ Monit Softw.* 2002. No.17(6). P. 487–504.

154. Scenna N. J., Santa Cruz A. S. M. Road risk analysis due to the transportation of chlorine in Rosario city. *Reliability Engineering & System Safety*. 2005. No.90(1). P. 83–90.

155. Cleaver R. P., Cooper M. G., Halford A. R. Further development of a model for dense gas dispersion over real terrain. *J Hazard Mater*. 1995. No.40. P. 85–108.

156. Mohan M., Panwar T. S., Singh P. Development of dense gas dispersion model for emergency preparedness. *Atmospheric Environment*. 1995. No.29. P. 2075–2087.

157. Fay J. A., Zemba S. G.. Integral model of dense gas plume dispersion. *Atmospheric Environment*. 1986. No.20. P. 1347–1354.

158. Computer Program CRUNCH, Dispersion Model for Continuous Dense Vapour Release in Atmosphere. 1987. URL : http://www.oecd-nea.org/tools/abstract/ detail/nea-1040/ (дата звернення 05.07.2021)

159. Witlox H. W. M. The HEGADAS model for ground-level heavy-gas dispersion – I. Steady-state model. *Atmospheric Environment*. 1994. No. 28. P. 2917–2932.

160. Britter R., Weil J., Leung J., Hanna S. Toxic industrial chemical (TIC) source emissions modeling for pressurized liquefied gases. *Atmospheric Environment*. 2011. No.45. P. 1–25.

161. Witlox H. W. M., McFarlane K. Interfacing dispersion models in the HGSYSTEM hazard-assessment package. *Atmospheric Environment*. 1994. No.28. P. 2947–2962.

162. Witlox H. W. M. The HEGADAS model for ground-level heavy-gas dispersionII. Time-dependent model. *Atmospheric Environment*. 1994. No.28. P. 2933–2946.

163. Spicer T. O., Havens J. A.. Modeling the Phase I Thorney Island experiments. *J Hazard Mater*. 1984. No.11. P. 237–260.

164. Puttock J. S., Colenbrander G. W. Thorney island data and dispersion modelling. *Journal of Hazardous Materials*. 1985. No.11. P. 381–397.

165. Puttock J. S., Blackmore D. R., Colenbrander G. W. Field experiments on dense gas dispersion. *Journal of Hazardous Materials*. 1982. No.6(1–2). P. 13–41.

166. Ooms G., Mahiue A. P., Zelis F. The plume path of vent gases heavier then air. In: Birschman CH, editors. Loss prevention and safety promotion in the process industries. Hague/Delft, The Netherlands: Elsevier Press, 1974. P. 211–219.

167. Puttock J. S., McFarlane K., Prothero A., Rees F. J., Blewitt D. N. Dispersion models and hydrogen fluoride predictions. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 1991. No.4. P. 16–28.

168. Woodward J. L. Dispersion modelling of an elevated high momentum release forming aerosols. *J Loss Prevent Proc Ind*. 1989. No. 2(1). P. 22–32.

169. Woodward J. L., Cook J., Papadourakis A. Modeling and validation of a dispersing aerosol jet. *J Hazard Mater*. 1995. No. 44(2–3). P. 185–207.

170. Cleaver R. P., Edwards P. D. Comparison of an integral model for predicting the dispersion of a turbulent jet in a crossflow with experimental data. *J Loss Prevent Proc Ind.* 1990. No. 3(1). P. 91–96.

171. Epstain M., Fauske H. K., Hauser G. H. A model of the dilution of a forced two-phase chemical plume in a horizontal wind. *J Loss Prevent Proc Ind*. 1990. No. 3(3). P. 280–290.

172. Chaplin, Z., Cruse, H., Tickle, G., Tucker, H. Modelling flammable chemical major hazards using the DRIFT 3 dispersion model. *Institution of Chemical Engineers Symposium Series*. 162. 2017. No. 27. P. 350–356.

173. Khan F. I., Abassi S. A. Modelling and simulation of heavy gas dispersion on the basis of modifications in plume path theory. *J Hazard Mater*. 2000; No. 80. P. 15–30.

174. Benerjee S., Martini R., Pattison M. J. CLOUD: A vapour-aerosol dispersion model accounting for plume 3D motion and heat and mass transfer between phases. *J Hazard Mater*. 1996. No. 46(2–3):23. P. 1–240.

175. Bricard P., Friedel L. Two-phase jet dispersion. *J Hazard Mater*. 1998. No. 59. P. 287–310.

176. Crane G., Panofsky H. A., Zeman O. A model for dispersion from area sources in convective turbulence. Atmospheric Environment. 1977; No. 11(10): P. 893–900.

177. Ooms G, Dijum NJ. Dispersion of stack plume heavier than air. In: Ooms G, Tennekes H, editors. Atmospheric dispersion of heavy gases and small particles. Berlin : Springer Verlag, 1984. P. 1–21.

178. Буяцкий Е. В. Теория атмосферной диффузии радиоактивных выбросов. Киев: Институт гидромеханики НАН Украины, 2000. 443 с.

179. Павлихин Г. П. Экологическая экспертиза. Программы ликвидации запасов химического оружия армии США. *Пробл. окружающей среды и природных ресурсов*. 1991. № 8. С. 1–16.

180. Zeman O. The dynamics and modeling of heavier-than-air, cold gas releases. *Atmospheric Environment*. 1982. No. 16. P. 741–751.

181. Ermak D. L. User's Manual For SLAB: An Atmospheric Dispersion Model For Denser-Than-Air Releases. UCRL-MA-105607. Livermore, California : Lawrence Livermore National Laboratory, 1990. URL : https://gaftp.epa.gov/Air/aqmg/SCRAM/ models/nonepa/slab/SLAB.PDF (дата звернення 05.07.2021)

182. Meroney R. N. Transient characteristics of dense gas dispersion. Part 1: A depth-averaged numerical model. *Journal of Hazardous Materials*. 1984. No. 9. P. 139–157.

183. Meroney R. N. Transient characteristics of dense gas dispersion. Part II: Numerical experiments on dense cloud physics. *J Hazard Mater*. 1984. No. 9. P. 159–170.

184. Wurtz J., Bartzis J., Venestanos A., Andronopoulos S., Statharas J., Nijsing R. A dense vapour dispersion code package for applications in the chemical and process industry. *J Hazard Mater*. 1996. No. 46. P. 273–284.

185. Folch A., Costa A., Hankin R. K. S. twodee-2: A shallow layer model for dense gas dispersion on complex topography. *Computers & Geosciences*. 2009. No. 35. P. 667–674.

186. Hankin R. K. S, Britter R. E. twodee: the Health and Safety Laboratory's shallow layer model for heavy gas dispersion Part 1. Mathematical basis and physical assumptions. *J Hazard Mater*. 1999. No. 66. P. 211–226.

187. Hankin R. K. S, Britter R. E. twodee: The Health and Safety Laboratory's shallow layer model for heavy gas dispersion Part 2: Outline and validation of the computational scheme. *J Hazard Mater*. 1999. No. 66. P. 227–237.

188. Hankin R. K. S. Major hazard risk assessment over non-flat terrain. Part I: continuous releases. *Atmospheric Environment*. 2004. No. 38. P. 695–705.

189. Hankin R. K. S. Major hazard risk assessment over non-flat terrain. Part II: instantaneous releases. *Atmospheric Environment*. 2004. No. 38. P. 707–714.

190. Hankin R. K. S. Heavy gas dispersion: integral models and shallow layer models. *J Hazard Mater*. 2003. No. 103. P. 1–10.

191. Venestanos A. G., Bartzis J. G., Wurtz J., Papailiou D. D. DISPLAY-2: a twodimensional shallow layer model for dense gas dispersion including complex features. *J Hazard Mater*. 2003. No. A 99. P. 111–144.

192. Schreurs P., Mewis J. Development of a transport phenomena model for accidental (heavy gas) releases in an industrial environment. *Atmos Environ*. 1987. No. 21. P. 765–776.

193. Gaffen D. J., Benocci C., Olivari D. Numerical modeling of buoyancy dominated dispersal using a Lagrangian approach. *Atmos Environ*. 1967. No. 21(6). P. 1285–1293.

194. Lange R. ADPIC—A Three-Dimensional Particle-in-Cell Model for the Dispersal of Atmospheric Pollutants and its Comparison to Regional Tracer Studies. *Journal of Applied Meteorology*. 1978. No. 17(3). P. 320–329.

195. Gopalakrioshnan S. G., Sharan M. A Lagrangian particle model for marginally heavy gas dispersion. *Atmos Environ*. 1997. No. 31(20). P. 3369–3382.

196. Argyropoulos C. D., Ashraf A. M., Markatos N. C., Kakosimos K. E. Mathematical modelling and computer simulation of toxic gas building infiltration. *Process Safety and Environmental Protection*. 2017. No. 111. P. 687–700.

197. Lee Ch., Kim B. G., Ko S. Y. A new Lagrangian stochastic model for the gravity-slumping/spreading motion of a dense gas. *Atmos Environ*. 2007. No. 41. P. 7874–7886.

198. Anfossi D., Tinarelli G., Trini Castelli S., Nibart M., Orly C., Commanay J. A new Lagrangian particle model for the simulation of dense gas dispersion. *Atmos Environ*. 2010. No. 44. P. 753–762.

199. Markiewicz M. Methods of determining meteorological data used in air pollution dispersion models. *Environ Prot Eng.* 2007. No. 33(4). P. 75–86

200. Sykes R. I., Cerasoli C. P., Henn D. S. The representation of dynamic flow effects in a Lagrangian puff dispersion model. *J Hazard Mater*. 1999. No. 64. P. 223–247.

201. Havens J. A. A description and computational assessment of the SIGMET LNG vapor dispersion model. *Journal of Hazardous Materials*. 1982. No. 6(1–2). P. 181–195.

202. Deaves D. M. Application of advanced turbulence models in determining the structure and dispersion of heavy gas clouds. In: Ooms G, Tennekes H, editors. Atmospheric dispersion of heavy gases and small particles. Berlin: Springer Verlag, 1984. P. 93–103.

203. Deaves D. M. 3-dimensional model predictions for the upwind building trial of thorney island phase II. *J Hazard Mater*. 1985. No. 11. P. 341–346.

204. Deaves D. M. Development and application of heavy gas dispersion models of varying complexity. *J Hazard Mater*. 1987. No. 16. P. 427–438.

205. Ermak D. L., Chan S. T., Morgan D. L., Morris L. K. A comparison of dense gas dispersion model simulations with burro series LNG spill test results. *J Hazard Mater*. 1982. No. 6. P. 129–160.

206. Chan S. T., Ermak D. L., Morris L. K. FEM3 model simulations of selected thorney island phase I trials. *J Hazard Mater*. 1987. No. 16. P. 267–292.

207. Zhang X., Li J., Zhu J., Qiu L. Computational fluid dynamics study on liquefied natural gas dispersion with phase change of water. *International Journal of Heat and Mass Transfer*. 2015. No. 91. P. 347–354

208. Taft J. R., Ryn M. S., Weston D. A. MARIAH a dispersion model for evaluating realistic heavy gas spills scenarios : *Proceedings of the American Gas Association Transmission Conference*, 2 May 1983 Seattle, WA, USA, 1983. 12 p.

209. Riou Y. J. Comparison between MERCURE-GL code calculations, wind tunnel measurements and Thorney Island field trials. *Hazard Mater*. 1987. No. 16. P. 247–266.

210. Betts P. L., Harountunian V. Finite element calculations of transient dense gas dispersion. In: Puttock J. S., editors. Stably stratified flows and dense gas dispersion. Oxford, England : Clarendon Press, 1988. 349 p.

211. Venetsanos A. G., Papanikolaou E., Bartzis J. G. The ADREA-HF CFD code for consequence assessment of hydrogen applications. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2010. No. 35. P. 3908–3918.

212. Bellasio R., Tamponi M. MDGP: A new Eulerian 3D unsteady state model for heavy gas dispersion. *Atmos Environ*. 1994. No. 28. P. 1633–1643.

213. Pereira J. C. F, Chen X. Q. Numerical calculations of unsteady heavy gas dispersion. *J Hazard Mater*. 1996. No. 46. P. 253–272.

214. Burman J. An evaluation of topographical effects on neutral and heavy-gas dispersion with a CFD model. *J Wind Eng Ind Aerodynam*. 1998. No. 74–76. P. 315–325.

215. Efthimiou G. C., Bartzis J. G., Koutsourakis N. Modelling concentration fluctuations and individual exposure in complex urban environments. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. 2011. No. 99. P. 349–356.

216. Bayanow I. M, Gilmullin M. Z., Shagapov V. Calculation of Heavy Gas Spreading Over the Earth Surface by a Three-Dimensional Model. *J Appl Mech Tech Phys.* 2003. No. 44(6). P. 858–865. 217. Ohba R., Kouchi A., Hara T., Vieillard V., Nedelka D. Validation of heavy and light gas dispersion models for the safety analysis of LNG tank. *J Loss Prev Proc Ind*. 2004. No. 17(5). P. 325–337.

218. Scargiali F., Di Rienzo E., Ciofalo M., Grisafi F., Brucato A. Heavy Gas Dispersion Modelling Over a Topographically Complex Mesoscale: A CFD Based Approach. *Process Safety and Environmental Protection*. 2005. No. 83(3). P. 242–256.

219. Luketa-Hanlin A., Koopman R. P., Ermak D. L. On the application of computational fluid dynamics codes for liquefied natural gas dispersion. *J Hazard Mater*. 2007. No. 140. P. 504–517.

220. Hanna S. R., Chang J. C. Use of the Kit Fox field data to analyze dense gas dispersion modeling issues. *Atmos Environ*. 2001. No. 35. P. 2231–2242.

221. Hanna S. R., Hansen O. R, Dharmavaran S. FLACS CFD air quality model performance evaluation with Kit Fox, MUST, Prairie Grass, and EMU observations. *Atmos Environ*. 2004. No. 38. P. 4675–4687.

222. Hanna S. R., Hansen O., Ichard M., Strimatis D. CFD model simulation of dispersion from chlorine railcar releases in industrial and urban areas. *Atmos Environ*. 2009. No. 43. P. 262–270.

223. Sklavounos S., Rigas F.. Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles. *Journal of Hazardous Materials*. 2004. No. 108(1–2), P. 9–20.

224. Sklavounos S., Rigas F.. Simulation of Coyote series trials – Part I : CFD estimation of non-isothermal LNG releases and comparison with box-model predictions. *Chem Eng Sci.* 2006. No. 61(5). P. 1434–1443.

225. Sklavounos S., Rigas F. Simulation of Coyote series trials – Part II: A computational approach to ignition and combustion of flammable vapor clouds. *Chem Eng Sci.* 2006. No. 61. P. 1444–1452.

226. Qi R., Ng D., Cormier B. J., Mannan M. S. Numerical simulations of LNG vapor dispersion in Brayton Fire Training Field tests with ANSYS CFX. *J Hazard Mater*. 2010. No. 183. P. 51–61.

227. Cormier B. R., Qi R., Yun G., Zhang Y., Mannan M. S. Application of computational fluid dynamics for LNG vapor dispersion modeling: A study of key parameters. *J Loss Prevent Proc Ind*. 2009. No. 22. P. 332–352.

228. Gavelli F., Bullister E., Kytomaa H. Application of CFD (Fluent) to LNG spills into geometrically complex environments. *J Hazard Mater*. 2008. No. 159. P. 158–168.

229. Gavelli F., Chernovsky M. K., Bullister E., Kytomaa H. K. Modeling of LNG spills into trenches. *J Hazard Mater*. 2010. No. 180. P. 332–339.

230. Andersson, B., Andersson, R., Hakansson, L. Computational Fluid Dynamics for Engineers. New York : Cambridge University Press Publ., 2012. 212 p.

231. Jayanti, Sreenivas. Computational Fluid Dynamics for Engineers and Scientists. Burlington : Springer, 2018. 402 p.

232. Wingstedt E. M. M., Osnes A. N., Åkervik E., Eriksson D., Pettersson Reif B.A. Large-eddy simulation of dense gas dispersion over a simplified urban area.*Atmospheric Environment*. 2017. No. 152. P. 605–616.

233. Tolias I. C., Koutsourakis N., Hertwig D., Efthimiou G. C., Bartzis J. G. Large Eddy Simulation study on the structure of turbulent flow in a complex city. *Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics*. 2018. No. 177. P. 101–116.

234. Smagorinsky J. General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment.*Month Weather Rev*.1963. No. 91(3). P. 99–164.

235. Hattori H., Houra T., Nagano Y. Direct numerical simulation of stable and unstable turbulent thermal boundary layers. *International Journal of Heat and Fluid Flow*. 2007. No. 28(6). P. 1262–1271.

236. Luo J., Lu Z., Liu Y. Simulation of Lagrangian dispersion using a Lagrangian stochastic model and DNS in a turbulent channel flow. *Journal of Hydrodynamics. Ser. B.* 2009. No. 21(6). P. 767–773.

237. Kassomenos P., Karayannis A., Panagopoulos I., Karakitsios S., Petrakis M. Modelling the dispersion of a toxic substance at a workplace. *Environmental Modelling & Software*. 2008. No. 23(1). P. 82–89.

238. Ivings M. J., Lea C. J., Webber D. M., Jagger S. F., Coldrick S. A protocol for the evaluation of LNG vapour dispersion models. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2013. No. 26(1). P. 153–163.

239. Mouilleau Y., Champassith A. CFD simulations of atmospheric gas dispersion using the Fire Dynamics Simulator (FDS). *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2009. No. 22(3). P. 316–323.

240. Cocchi G. Modeling instantaneous heavy gas releases with FDS5. *Fire Safety Journal*. 2014. No. (6). P. 89–98.

241. Берлянд М. Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. Ленинград : Гидрометеоиздат, 1975. 448 с.

242. Роди В. Модели турбулентности окружающей среды // В сб.: Методы расчета турбулентных течений / Под ред. В. Колльмана. Москва : Мир, 1984. 464 с.

243. Беляев, Н. Н., Коптилая О.В. Компьютерное моделирование загрязнения окружающей среды при разливе аммиака. *Екологія і природокористування* : зб. наук. праць ІППЕ НАН України. 2002. Вип. 2. С. 158–162.

244. Мацак В. Г., Хоцянов Л. К. Гигиеническое значение скорости испарения и давления пара токсических веществ, применяемых в производстве. Москва : Медгиз, 1959. 231 с.

245. Hughes Ph., Ferrett E. Introduction to Health and Safety at Work: The Handbook for the NEBOSH National General Certificate. Kidlington, Oxford : Butterworth-Heinemann, 2011. 608 p.

246. Assael M. J., Kakosimos K. E. Fires, Explosions, and Toxic Gas Dispersions: Effects Calculation and Risk Analysis. New York : CRC Press, 2010. 349 p.

247. Knott G. D. Interpolating Cubic Splines. Boston : Birkhäuser, 2012. 254 p.

248. Чернышев Ю. К. Выпуклые векторные сплайны в применении к профилированию лопаток ГТД. *Авиационно-космическая техника и технология* : сб. научн. трудов. 2000. Вып. 21. С. 16–18.

249. Engeln-Müllges G., Niederdrenk K., Wodicka R. Numerik-Algorithmen: Verfahren, Beispiele, Anwendungen. Berlin : Xpert.press, 2010. 756 p. 250. Schmitt R. G., Butler P. B. Detonation properties of gases at elevated initial pressures. *Combust. Sci. Technol.* 1995. V. 106. P. 167–193.

251. Westbrook C. K. Chemical kinetics of hydrocarbon oxidation in gaseous detonations. *Combust. Flame*. 1982. V. 46. P. 191–210.

252. Bruls H. K., Lefebvre M. H., Berghmans J. On deriviations from ideal Chapman-Jouguet detonation velocity : *Twenty-Fifth Symp. (Intern.) on Combustion*, 31 Jul – 5 Aug 1994, Pittsburgh: The combustion Inst., 1994. P. 37–44.

253. Smirnov N. N., Panfilov J. J. Deflagration to detonation transition in combustible gas mixtures. *Combust. Flame*. 1995. V. 101. P. 91–100.

254. Kailasanath K., Oran E. S., Boris J. P., Young T. R. Determination of detonation cell size and the role of transverse waves in two-dimensional detonations *Combust. Flame*. 1985. V. 61. P. 199–209.

255. Oran E. S., Boris J. P. Numerical Simulation of reactive flow. New York : Elsevier, 1987. 1186 p.

256. Warnatz J., Maas U., Dibble R. W. Combustion: Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation. Springer, 2006. 390 p.

257. Weber H. J., Mack A., Roth P. Combustion and pressure wave interaction in enclosed mixture initiated by temperature nonuniformities. *Combust. Flame*. 1994. V. 97. P. 281–295.

258. Bielert U., Sichel M. Numerical simulation of premixed combustion processes in closed tubes. *Combust. Flame*. 1998. V. 114(3–4). P. 397–419.

259. Парра-Сантос М. Т., Кастро-Руис Ф., Мендес-Буено Ц. Численное моделирование перехода горения в детонацию. Физика горения и взрыва. 2005. Т. 41. № 2. С. 108–115.

260. Bechtold J. K., Law C. K. Extinction of premixed methane-air flames with reduced reaction mechanism. *Combust. Sci. Technol.* 1994. V. 100(1-6). P. 371–378.

261. Thomas G. O., Edwards M. J., Edwards D. H. Studies of detonation quenching by water sprays. *Combustion Science and Technology*. 1990. V. 71(4-6). P. 233–245.

262. Годунов С. К., Забродин А. В., Иванов М. Я., Крайко А. Н., Прокопов Г. П. Численное решение многомерных задач газовой динамики. Москва : Наука, 1976. 400 с.

263. Toro E. F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics: A Practical Introduction. Berlin : Springer, 2009. 724 p.

264. Физика взрыва / Под ред. К. П. Станюковича. Москва : Наука, Главная редакция физико-математичекой литературы, 1975. 704 с.

265. Батурин В. В. Основы промышленной вентиляции Москва : Профиздат, 1990. 450 с.

266. Макашев В. А., Петров С. В. Опасные ситуации техногенного характера и защита от них : учеб. пособ. Москва : ЭНАС, 2008. 191 с.

267. Brauer R. L. Safety and Health for Engineers. New Jersey : Wiley, 2015. 742 p.

268. Отопление и вентиляция : учебник для вузов: в 2 ч. Вентиляция / под ред. В. Н. Богословского. Москва : Стройиздат, 1976. Ч. 2. 439 с.

269. Волков О. Д. Проектирование вентиляции промышленного здания : учеб. пособ. Харьков : Вища школа, Изд-во при ХГУ, 1989. 240 с.

270. Papanikolaou E. A. Venetsanos A. G. CFD modeling for helium releases in a private garage without forced ventilation : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 11 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/320121.pdf (дата звернення 05.07.2021)

271. Баум Ф. А., Станюкович К. П., Шехтер Б. И. Физика взрыва Москва : Гос. изд-во физ.-мат. лит-ры, 1959. 801 с.

272. Safety and Security Analysis : Investigative Report by NASA on Proposed EPA Hydrogen-Powered Vehicle Fueling Station. Assessment and Standards Division Office of Transportation and Air Quality U.S. Environment Protection Agency, EPA420-R-04-016 October 2004. 45 p.

273. Шенг Дж. С. Обзор численных методов решения уравнений Навье-Стокса для течений сжимаемого газа. *Аэрокосмическая техника*. 1986. № 2. С. 65–92.

274. Угрюмов М. Л., Чернишов Ю. К., Скоб Ю. А., Прокоф'єв С. А. Комп'ютерна інтерактивна система аеродинамічного аналізу і удосконалення вінців турбомашин «Експерт»: Свідоцтво про державну реєстрацію виключної правомічності особи на твір ВП № 666, Національний аерокосмічний університет ім.Н.Е.Жуковського «Харківський авіаційний інститут». Україна. Дата реєстрації 27.10.2000. Дата видачі 27.11.2000.

275. Донецкий вентиляторный завод. Вентилятор осевой ВО 06-300 №2,5. URL : http://dwz.com.ua/product/23 (дата звернення 06.07.2021)

276. Mukai S., Suzuki J., Mitsuishi H., Oyakawa K., and Watanabe S. CFD simulation on diffusion of leaked hydrogen caused by vehicle accident in tunnels : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 10 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/ 320033.pdf (дата звернення 05.07.2021)

277. Barley C. D., Gawlik K., Ohi J., and Hewett R. Analysis of buoyancy-driven ventilation of hydrogen from buildings : *Proceedings of the 2nd International Conference on Hydrogen Safety*, september 11-13 2007, San Sebastian, Spain. 2007. 14 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user\_upload/CD/PAPERS/11SEPT/3.1.68.pdf (дата звернення 05.07.2021)

278. Bedard-Tremblay L., Fang L., Bauwens L., Finstad P. H. E., Cheng Z. and Tchouvelev A. V. Simulation of detonation after an accidental hydrogen release in enclosed environments : *Proceedings of the 2nd International Conference on Hydrogen Safety*, september 11-13 2007, San Sebastian, Spain. 2007. 12 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user\_upload/CD/PAPERS/11SEPT/1.3.95.pdf (дата звернення 05.07.2021)

279. Zhang J., Hereid J., Hagen M., Bakirtzis D., Delichatsios M.A., and Venetsanos A.G. Numerical studies of dispersion and flammable volume of hydrogen in enclosures : *Proceedings of the 2nd International Conference on Hydrogen Safety*, september 11-13 2007, San Sebastian, Spain. 2007. 12 p. URL :
http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user\_upload/CD/PAPERS/13SEPT/6.1.0 0.pdf (дата звернення 05.07.2021)

280. Venetsanos A. G., Papanikolaou E., Delichatsios M. An inter-comparison exercise on the capabilities of CFD models to predict the short and long term distribution and mixing of hydrogen in a garage. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2009. Vol. 34, Issue 14. P. 5912-5923. DOI : https://dx.doi.org/10.1016/j.ijhydene.2009.01.055

281. Lowesmith B. J., Hankinson G., Spataru C., and Stobbart M. Gas build-up in a domestic property following releases of methane/hydrogen mixtures : *Proceedings of the 2nd International Conference on Hydrogen Safety*, september 11-13 2007, San Sebastian, Spain. 2007. 13 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user\_upload/ CD/PAPERS/12SEPT/1.1.62.pdf (дата звернення 05.07.2021)

282. Ishimoto Y., Merilo E., Groethe M., Chiba S., Iwabuchi H., Sakata K. Study of hydrogen diffusion and deflagration in a closed system : *Proceedings of the 2nd International Conference on Hydrogen Safety*, september 11-13 2007, San Sebastian, Spain. 2007. 10 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user\_upload/ CD/PAPERS/13SEPT/1.1.83.pdf (дата звернення 05.07.2021)

283. Gupta S., Brinster J., Studer E., Tkatschenko I. Hydrogen related risks within a private garage: concentration measurements in a realistic full scale experimental facility : *Proceedings of the 2nd International Conference on Hydrogen Safety*, september 11-13 2007, San Sebastian, Spain. 2007. 12 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2007/fileadmin/user\_upload/CD/PAPERS/12SEPT/1.1.51.pdf (дата звернення 05.07.2021)

284. Papanikolaou E. A., Venetsanos A. G. CFD simulations of hydrogen release and dispersion inside the storage room of a hydrogen refueling station using the ADREA-HF code : *Proceedings of the 2nd International Conference on Hydrogen Safety*, september 11-13 2007, San Sebastian, Spain. 2007. 12 p. URL : http://conference.ing. unipi.it/ichs2007/fileadmin/user\_upload/CD/PAPERS/11SEPT/1.1.112.pdf (дата звернення 05.07.2021)

285. Гришин А. М. Математическое моделирование лесных пожаров и новые способы борьбы с ними. Москва : Наука, 1992. 408с.

286. Брушлинский Н. Н., Корольченко А. Я. Моделирование пожаров и взрывов. Москва : Изд. «Пожнаука», 2000. 482 с.

287. Колодкин В. М., Мурин А. В., Петров А. К., Горский В. Г. Количественная оценка риска химических аварий. Ижевск: Издательский дом «Удмуртский университет», 2001. 228 с.

288. Gallego E., Garcia J., Migoya E., Crespo A. An Intercomparison Exercise on the Capabilities of CFD Models to Predict Deflagration of a Large-Scale H2-Air Mixture in Open Atmosphere : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 10 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ ichs2005/Papers/120003.pdf (дата звернення 05.07.2021)

289. Nozu, T. Numerical Simulation of Hydrogen Explosion Tests with a Barier Wall for Blast Mitigation : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 12 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/130028.pdf (дата звернення 05.07.2021)

290. Schneider H. Large Scale Experiments: Deflagration and Deflagration to Detonation within a partial Confinement similar to a lane : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 7 р. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/120018.pdf (дата звернення 05.07.2021)

291. Tanaka T., Azuma T., Evans J. A., Cronin P. M. Experimental study on hydrogen explosions in a full-scale hydrogen filling station model : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 12 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/120018.pdf (дата звернення 05.07.2021)

292. Keβler A., Ehrhardt W., Lang G. Hydrogen detection: visualization of hydrogen using noninvasive optical schlieren technique BOS : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 6 р. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/110127.pdf (дата звернення 05.07.2021)

293. Breitung W. Analysis methodology for hydrogen behaviour in accident scenarios : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 12 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ ichs2005/Papers/120009.pdf (дата звернення 05.07.2021)

294. Takeno K., Okabayashi K., Ichinose T., Kouchi A. Phenomena of Dispersion and Ex- plosion of High Pressurized Hydrogen : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 12 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/120009.pdf (дата звернення 05.07.2021)

295. Dorofeev S. B. Evaluation of safety distances related to unconfined hydrogen explosions : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 12 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ ichs2005/Papers/100129.pdf (дата звернення 05.07.2021)

296. Hansen O. R., Renoult J., Sherman M. P., Tieszen S. R. Validation of FLACShydrogen CFD consequence prediction model against large scale H2 explosion experiments in the flame facility : *Proceedings of the 1st International Conference on Hydrogen Safety*, september 8-10 2005, Pisa, Italy. 2005. 12 p. URL : http://conference.ing.unipi.it/ichs2005/Papers/120075.pdf (дата звернення 05.07.2021)

297. Локальные вычислительные сети : справочник / Под ред. С. В. Назарова. Москва : Финансы и статистика, 1994. 250 с.

298. Гергель В. П., Стронгин Р. Г. Основы параллельных вычислений для многопроцессорных вычислительных систем : учеб. пособ. Нижний Новгород : Издво ННГУ им. Н.И. Лобачевского, 2003. 184 с.

299. Корнеев В. Д. Параллельное программирование в МРІ. Новосибирск : Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2002. 215 с.

300. Freeman A. Pro .NET 4 Parallel Programming in C#. New York: Apress, 2010. 311 p.

301. Puttock G. S., Colenbrander G. W., Blackmore D. R. Marlin Sands experiments 1980 : Dispersion results from continuous releases of refrigerated liquid propane. *Heavy Gas and Risk Assessment*. 1980. No. 11. P. 147–161.

302. Witcofski R. D., Chirivella J. E. Experimental and Analytical Analyses of the Mechanisms Governing the Dispersion of Flammable Clods Formed by Liquid Hydrogen Spills. *Int. J. Hydrogen Energy*. 1984. Vol. 9, No. 5. P. 425–435.

303. Пехович А. И., Жидких В. М. Расчеты теплового режима твердых тел. Ленинград : Энергия, 1976. 352 с.

304. Карслоу Г., Егер Д. Теплопроводность твердых тел. Москва : Наука, 1964. 302 с.

305. Дульнев Г. Н., Парфенов В. Г., Сигалов А. В. Методы расчета теплового режима приборов. Москва : Радио и связь, 1990. 312 с.

306. Дульнев Г. Н., Парфенов В. Г., Сигалов А. В. Применение ЭВМ для решения задач теплообмена. Москва : Высшая школа, 1990. 207 с.

307. Ярышев Н. А. Приближенный анализ одномерных процессов теплопроводности. *Изв. Вузов. Приборостроение*. 2000. Т. 43. №3. С. 54–61.

308. Золотухин Ю. А. Моделирование и расчет температурных полей в переходных процессах теплопроводности. *Современные технологии*: сб. научных статей Санкт-Петербургского государственного университета информационных технологий, механики и оптики. СПб : ГИТМО (ТУ), 2001. № 1(15). С. 249–256.

309. Alekseev V. I. et al. Experimental study of large-scale unconfined fuel spray detonation. *Progress in astronautics and aeronautics*. 1993. Vol. 154. P. 95–104. DOI : https://doi.org/10.2514/5.9781600866272.0095.0104

310. Бейкер У. и др. Взрывные явления. Оценки и последствия : пер. с англ. Москва : Мир, 1986. 319 с.

311. Когарко С. М., Адушкин В. В., Лямин А. Г. Исследование сферической детонации газовых смесей. *Научно-технические проблемы горения*. 1965. № 2. С. 22–34.

312. Борисов А. А., Гельфанд Б. Е., Цыганов С. А. О моделировании волн давления, образующихся при детонации и горении газовых смесей. *Физика горения и взрыва*. 1985. № 2. С. 163–165.

313. Методика оценки последствий аварийных выбросов опасных веществ. Методика «ТОКСИ», редакция 3.1. Москва : ФГУП НТЦ «Промышленная безопасность», 2005. 67 с.

314. Руководство по безопасности «Методика оценки последствий аварийных взрывов топливно-воздушных смесей». Серия 27. Выпуск 15. М. : Закрытое акционерное общество «Научно-технический центр исследований проблем промышленной безопасности», 2015. 44 с.

315. Буч Г., Рамбо Д., Джекобсон А. Язык UML. Руководство пользователя. Москва, Санкт-Петербург : ДМК Пресс, Питер, 2004. 432 с.

316. Shevchenko R. Рейтинг языков программирования № 8. URL : https://dou.ua/lenta/articles/language-rating-jan-2017/ (дата звернення 06.07.2021)

317. Chang J. C. and Hanna S. R. Air quality model performance evaluation. *Meteorol Atmos Phys.* 2004. No. 87. P. 167–196.

318. Верификация и валидация моделей для инженерных расчетов. 2016. URL : https://multiphysics.ru/stati/blog/verifikatciia-i-validatciia-modelei-dlia-inzhenernykh-raschetov.htm (дата звернення 06.07.2021)

319. Жихарев В. Я., Илюшко В. М., Кравец Л. Г., Мелешенко С. Ю., Соколов А. Ю., Торчило В. Н. САЅЕ-технологии в управлении проектами. Житомир : Издательство «Волынь», 2005. 534 с.

320. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные методы решения задач газовой динамики : учеб. пособ. Москва : Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1992. 424 с.

321. Волков К. Н. Разностные схемы в задачах газовой динамики на неструктурированных сетках. Москва : Физматлит, 2015. 416 с.

322. Ковеня В. М., Чирков Д. В. Методы конечных разностей и конечных объемов для решения задач математической физики : учеб. пособ. Новосибирск : Новосиб. гос. ун-т, 2013. 87 с.

323. Ильин В. П. Методы конечных разностей и конечных объемов для эллиптических уравнений. Новосибирск : Изд-во Ин-та математики, 2000. 345 с.

324. Рождественский Б. Л., Яненко Н. Н. Системы квазилинейных уравнений и их приложения к газовой динамике. Москва : Наука, 1978. 687 с.

325. Шемарулин В. Е. Дифференциально-геометрические свойства уравнений одномерной изэнтропической газовой динамики. Саров : РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2015. 199 с.

326. Ковеня В. М. Алгоритмы расщепления при решении многомерных задач аэрогидродинамики. Новосибирск : СО РАН, 2014. 280 с.

327. Самарский А. А. Теория разностных схем : учеб. пособ. Москва : Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», 1977. 657 с.

328. Олдер Б., Фернбах С., Ротенберг М. Вычислительные методы в гидродинамике : пер. с англ. Москва : Мир, 1967. 385 с.

329. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. Том 1 : пер. с англ. Москва : Мир, 1991. 504 с.

330. Флетчер К. Вычислительные методы в динамике жидкостей. Том 2. Методы расчета различных течений : пер. с англ. Москва : Мир, 1991. 552 с.

331. Годунов С. К., Рябенький В. С. Разностные схемы : учеб. пособ. Москва : Наука, 1977. 440 с.

332. Яненко Н. Н. Избранные труды. Математика. Механика. Москва : Наука, 1991. 418 с.

333. О методах расчета задач газовой динамики с большими деформациями. 11 с. URL : http://www.prometeus.nsc.ru/math/yanenko/pdf/006.pdf (дата звернення 06.07.2021)

334. Дьяченко В. Ф. Основные понятия вычислительной математики. Москва : Наука, 1977. 128 с.

335. Nolan Dennis P. Handbook of Fire and Explosion Protection Engineering Principles: for Oil, Gas, Chemical and Related Facilities. Burlington : Gulf Professional Publishing, Elsevier, 2011. 340 p. 336. Jianwei Cheng. Explosions in Underground Coal Mines. Risk Assessment and Control. Berlin : Springer International Publishing AG, 2018. 208 p. DOI : 10.1007/978-3-319-74893-1

337. Fedorov A. V., Khmel' T. A., Lavruk S. A. Exit of a heterogeneous detonation wave into a channel with linear expansion. Propagation regimes. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 2017. Vol. 53, Issue 5. P. 585–595. DOI : 10.1134/S0010508217050136

338. Baraldi D., Kotchourko A., Lelyakin A., Yanez J., Middha P., Hansen O.R., Gavrikov A., Efimenko A., Verbecke F., Makarov D., Molkov V. An inter-comparison exercise on CFD model capabilities to simulate hydrogen deflagrations in a tunnel. *International Journal of Hydrogen Energy*. 2009. Vol. 34. P. 7862–7872. DOI : 10.1016/j.ijhydene.2009.06.055

339. Jallais S., Kudriakov S. An Inter-Comparison Exercise on Engineering Models Capabilities to Simulate Hydrogen Vented Explosions. *Proceedings the International Conference on Hydrogen Safety*, 9–11 Sept. 2013, Brussels, Belgium. 2013. 13 p. URL : http://www.ichs2013.com/images/papers/176.pdf (дата звернення 05.07.2021)

340. Methods for the determination of possible damage to people and objects resulting from releases of hazardous materials (CPR-16E). Green book / Director-General of Labour. 1992. 337 p.

341. Pietersen C. M. Consequences of accidental releases of hazardous material. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 1990. No. 3(1), P. 136–141.

342. Физико-химические процессы в газовой динамике. Комьютезированный справочник в 3-х томах / Под редакцией Г.Г. Черного и С.А. Лосева. Т. 2. Физикохимическая кинетика и термодинамика. Москва : Научно-издательский центр механики, 2002. 368 с.

343. Пажи Д. Г., Галустов В. С. Распылители жидкостей. Москва : Химия, 1979. 216 с.

344. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. Т. 1. Москва : Наука, 1987. 384 с.

345. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика : учеб. пособ. в 10 т. Т. 6. Гидродинамика. Москва : Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986. 736 с.

346. Брусиловский И. В. Аэродинамика осевых вентиляторов. Москва : Машиностроение, 1984. 240 с.

347. Нечипорук Н. В., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Математическое моделирование экологических процессов : учеб. пособие по лаб. практикуму. – Харків, 2007. – 89 с.

348. Кобрин В. Н., Скоб Ю. А., Угрюмов М. Л. Решение инженерных задач экологии средствами прикладных пакетов Excel, MathCad, Delphi, Visual C++ : учеб. пособие по лаб. практикуму. – Харків, 2007. – 109 с.

## ДОДАТОК А. СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА 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. *Науковий вісник будівництва: Зб. наук. пр.* 2001. Вип. 14. С. 258–262. (Особистий внесок: моделювання викиду газової домішки у повітря приміщення і розсіювання їх під впливом природньої вентиляції)

3. Скоб Ю. А. Математическое моделирование выброса и рассеяния в атмосфере газообразных примесей. Вісник Харк. нац. ун-та. Серія: Математичне моделювання. Інформаційні технологіі. 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. Системи обробки інформації: зб. наук. праць Харк. ун-ту повітряних сил імені Івана Кожедуба. 2008. Вип. 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. Вісник Харк. нац. ун-та. Серія: Математичне моделювання. Інформаційні технологіі. Автоматизовані системи управління. 2009. № 863. Вып. 12. С. 218–236.

К. В., Вамболь С. А., Скоб М. Л., 11. Корытченко Ю. А., Угрюмов Назаренко А. А. Моделирование области обрыва ЛГМ, формируемой при взрыве фитоценозе. Проблемы топливовоздушных зарядов В лесном 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 технологіі. 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. *Авиационнокосмическая 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 газовоздушной 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 залізн. транспорту.* 2018. № 3(75). С. 52–66. DOI: https://doi.org/10.15802/ stp2018/133637 (*PIHU*) (Особистий внесок: модель потрапляння газової домішки в атмосферу внаслідок випаровування зрідженого газу з плями полиття)

25. Korytchehko 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 паралельної 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 threedimensional 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 внурішньому каналі і інтегро-інтерполяційний метод наскрізного розрахунку)

29. Вамболь C. A., Скоб Ю. А., H. B., O. A. Нечипорук Трухмаев управления экологической безопасностью Моделирование системы c 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. (РІНЦ) (Особистий внесок: модель вибуху газоповітряної суміші за присутності дисперсних часток)

30. Skob Y., Ugryumov M. and Granovskiy 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 загромадження 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 р. (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 р. (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. Пожежна 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 газовоздушной 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-Харьків, 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-Харьків, 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 Х 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 І 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 І міжнар. наук.-практ. конф. IT-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*)

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 X 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 р. (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 Ш 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)

## **ДОДАТОК Б. СХЕМА ВЕРИФІКАЦІЇ І ВАЛІДАЦІЇ МОДЕЛІ**



## ДОДАТОК В. БЛОК-СХЕМА АЛГОРИТМУ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ОБЧИСЛЕННЯ



## ДОДАТОК Г. АКТИ ВПРОВАДЖЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЙНОГО ДОСЛІДЖЕННЯ



#### ЗАТВЕРДЖУЮ

Технічний директор ТОВ «Науковий центр вивчення ризиків «РІЗІКОН» Я. М. Ландесман 20» лютого 2020 р.

АКТ

щодо впровадження результатів, наукових положень та висновків дисертаційної роботи на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук Скоба Юрія Олексійовича у практичну діяльність підприємства НЦВР «Ризикон»

Математичні моделі руху хімічно реагуючих газових сумішей в атмосфері і методи розв'язання виникаючих під час моделювання задач, які було розроблено у дисертаційній роботі Скоба Юрія Олексійовича, застосовано у створеній у ТОВ «Науковий центр вивчення ризиків «РІЗІКОН» (надалі - НЦВР «РІЗІКОН») комп'ютерній системі підтримки прийняття рішень «РізЕкс-2», яка використовується для оцінки ризиків функціонування промислових підприємств підвищеної небезпеки. Комп'ютерна система та обчислювальні засоби розроблені з використанням нових моделей і методів, запропонованих у дисертаційній роботі, а саме:

 моделі викиду в атмосферу вибухонебезпечного або токсичного газу після миттєвого руйнування ємності високого тиску;

 моделі випаровування зрідженого газу в атмосферу з плями проливу після руйнування ємності зберігання;

 моделі струминного витікання під тиском в атмосферу газоподібного домішку з утворенням газоповітряної суміші;

 моделі розповсюдження газоподібного домішку в атмосфері з урахуванням складного тривимірного рельєфу місцевості, ефектів сил тяжіння і турбулентної дифузії;

- моделі вибуху в атмосфері газоповітряної суміші з утворенням ударної хвилі;

# Rizikon науковий центр вивчення ризиків «різікон»



 обчислювальних методів вирішення задач моделювання процесів викиду в атмосферу хімічно реагуючої газоподібної речовини, її розсіюванні у повітрі, вибуху та горіння з генерацією небезпечних факторів впливу на довколишнє середовище;

 технології паралельного обчислення великих за обсягом розрахункових просторів з використанням вбудованих у мову програмування засобів.

За допомогою комп'ютерної системи «РізЕкс-2» НЦВР «РІЗІКОН» здійснюється оцінка ризиків виникнення техногенних аварій, їх розвитку та наслідків під час сертифікації підприємств підвищеної небезпеки, на яких зберігаються або використовуються вибухонебезпечні і токсичні газоподібні речовини. Результати чисельного моделювання засобами даної комп'ютерної системи також використовуються під час розробки декларацій промислової безпеки об'єктів підвищеної небезпеки та інших документів, необхідних для підвищення рівня їх безпеки.

Застосування запропонованих моделей, математичних методів та програмних продуктів на їх основі дозволяє значно скоротити час на процес оцінки ризиків техногенних аварій та прийняття рішень щодо зниження рівня небезпеки підприємства до нормативного.

Акт складено для пред'явлення у спеціалізовану вчену раду та не є підставою для фінансових розрахунків.

Завідувач відділом моделювання та розробки програмних продуктів

еления / В. В. Смалій /

<sup>(</sup>підпис)

«ЗАТВЕРДЖУЮ́» Генеральний директор Приватного Акціонерного Товариства «Грета» м. Дружківка, Донецької обл. Аннєнков В. З. 2020 p. АКТ

#### щодо впровадження результатів, наукових положень та висновків дисертаційної роботи Скоба Юрія Олексійовича

Комісія у складі: Начальник технічних відділів Куликов Є.О. Головний технолог Точка І.В.

склала цей акт про те, що в роботу Приватного Акціонерного Товариства «Greta» впроваджено наступні результати дисертаційної роботи Ю. О. Скоба:

– тривимірні математичні моделі і обчислювальні методи оцінки ризику небезпечних техногенних об'єктів, комп'ютерного аналізу фізичних процесів аварійного потрапляння у повітря атмосфери вибухонебезпечних газів, утворення газоповітряних сумішей, їх горіння з утворенням факторів впливу на навколишні об'єкти та прогнозу наслідків, що виникають;

 універсальна обчислювальна технологія автоматизованого нестаціонарного аналізу умовної ймовірності впливу факторів ударно-імпульсного, токсичного та теплового ураження на основі апарату пробіт-аналізу;

 математичні моделі і обчислювальні методи руху газоповітряних сумішей у приміщеннях з з витяжною і напірної вентиляцією;

 методологія порівняльного детермінованого і ймовірнісного аналізу ефективності захисних пристроїв, які призначені для зниження негативного впливу факторів ураження;

– комп'ютерної технології паралельного обчислення значних за обсягом просторових областей, які дозволяють отримувати результати аналізу і прогнозу процесів аварійного потрапляння у повітря атмосфери вибухонебезпечних газів, утворення газоповітряних сумішей та їх горіння в інженерно прийнятні терміни часу.

Застосування запропонованих Скобом Ю. О. математичних моделей, обчислювальних методів та програмних застосунків в роботі підприємства ПАТ «Greta» дозволило:

 автоматизувати обчислювальний процес попередньої оцінки індивідуального ризику об'єктів, які зберігають, застосовують або транспортують вибухонебезпечні речовини, під час проектної стадії;

 оптимізувати структуру необхідних захисних споруд щодо відповідності безпекового стану техногенного об'єкта, який проектується, до прийнятного значення.

Начальник технічних відділів

Головний технолог

\_\_\_\_\_ Куликов Є.О. \_\_\_\_\_\_ Точка І.В. ЗАТВЕРДЖУЮ Помічник ректора із забезпечення якості освіти Національного аерокосмічного університету ім. М. Є. Хуковського «Харківський авіаційний інститут» «<u>03</u>»<u>2020 р.</u> АКТ<sup>202066</sup>

щодо впровадження результатів дисертаційної роботи на здобуття наукового ступеня доктора технічних наук Скоба Юрія Олексійовича у навчальний процес Національного аерокосмічного університету ім. М. Є. Жуковського «Харківський авіаційний інститут»

Ми, що підписалися нижче, декан факультету систем управління літальними апаратами доцент Заболотний О. В., голова методичної комісії факультету систем управління літальними апаратами доцент Анікін А. М., завідувач кафедрою математичного моделювання та штучного інтелекту доцент Чухрай А. Г. склали цей акт про те, що результати дисертаційної роботи Скоба Юрія Олексійовича впроваджено у навчальний процес по кафедрі математичного моделювання та штучного інтелекту для спеціальностей 113 «Прикладна математика», 122 «Комп'ютерні науки», а саме:

 математичні моделі викиду в атмосферу хімічно реагуючих газоподібних речовин під час техногенних аварій;

 удосконалений метод розв'язання системи рівнянь руху багатокомпонентної суміші у навколоземному шарі атмосфери з урахуванням тривимірності процесу, сил тяжіння, термодинамічних властивостей газів, хімічної реакції компонентів;

– методики розв'язання задач прогнозу і аналізу розповсюдження небезпечних факторів техногенних аварій (вибухової ударної хвилі, токсичної дози і теплового випромінювання) та їх впливу на довколишнє середовище за допомогою комп'ютерної системи підтримки прийняття рішень «Fire<sup>®</sup>».

Результати дисертаційної роботи впроваджено у рамках курсів «Математичне моделювання фізичних процесів», «Чисельні методи математичної фізики», «Моделювання та аналіз складних систем», а також у курсовому і дипломному проектуванні під час підготовки бакалаврів і магістрів кафедри математичного моделювання та штучного інтелекту. За результатами роботи було розроблено теоретичне та методичне забезпечення до 15 лабораторних робіт.

Результати наукового дослідження увійшли до навчальних посібників «Математичне моделювання екологічних процессов» на 89 сторінках, «Розв'язання інженерних задач екології засобами прикладних пакетів Excel, MathCad, Delphi, Visual C++» на 109 сторінках, розроблених Скобом Ю. О. у співавторстві.

#### Декан

факультету систем управління літальними апаратами доцент, д. т. н.

Голова методичної комісії факультету систем управління літальними апаратами доцент, к. т. н.

Завідувач кафедрою математичного моделювання та штучного інтелекту доцент, д. т. н.

Заболотний О.В.

Анікін А. М.

Чухрай А. Г.