

**ISSN 0453-8048**

Міністерство освіти і науки України  
Харківський національний університет імені В. Н. Каразіна

# **BІCHНИК**

**Харківського національного  
університету імені В.Н. Каразіна**



**№ 863**

**Серія**  
**«Математичне моделювання.**  
**Інформаційні технології.**  
**Автоматизовані системи управління»**

**Випуск 12**

Серія заснована у 2003 р.

**Харків**  
**2009**

До випуску увійшли статті, присвячені дослідженням у галузі математичного моделювання та обчислювальних методів, зокрема, з теорії та застосувань методів дискретних особливостей, а також висвітлюються нові математичні методи дослідження та керування фізичними, технічними та інформаційними процесами, дослідження з інформаційних технологій, програмування та комп'ютерного моделювання.

Збірник включає статті, що були подані до розгляду редакційної колегії у період з квітня по вересень 2009 року.

Для викладачів, наукових працівників, аспірантів, працюючих у відповідних або суміжних напрямках.

Друкується за рішенням Вченої Ради Харківського національного університету імені В. Н. Каразіна (Протокол № 10 від 25.09.2009 р.)

**Редакційна колегія:**

**Азаренков М.О., (гол. редактор),** д.ф.-м.н., член-кор. НАН України, проф., ІВТ ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Гандель Ю.В.,** д.ф.-м.н., проф., ММФ ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Жолткевич Г.М., (заст. гол. редактора),** д.т.н., проф. ММФ ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Золотарьов В.О.,** д.ф.-м.н., проф., ММФ ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Куклін В.М.,** д.ф.-м.н., проф., ФКН ІВТ ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Лазурік В.Т.,** д.ф.-м.н., проф., ФКН ІВТ ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Мацевитий Ю.М.,** д.т.н., академік НАН України, проф., фізико-енергетичний ф-т ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Міщенко В.О., (відпов. секретар),** к.ф.-м.н., доц., ММФ і ФКН ІВТ ХНУ імені В.Н. Каразіна

**Раскін Л.Г.,** д.т.н., проф., Національний технічний університет "ХПІ"  
**Стрельнікова О.О.,** д.т.н., проф. Ін-т проблем машинобудування НАН України  
**Руткас А.Г.,** д.ф.-м.н., проф., ММФ ХНУ імені В. Н. Каразіна  
**Соколов О.Ю.,** д.т.н., проф., Національний аерокосмічний університет імені М.Є. Жуковського "ХАІ"  
**Сорока Л.С.,** д.т.н., проф., ФКН ІВТ ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Стервоєдов М.Г.,** к.т.н., доц., ФКН ІВТ ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Целуйко О.Ф.,** к.ф.-м.н., проф., ІВТ ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Черваньов І.Г.,** д.т.н., проф., геологогеографічний ф-т ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Шейко Т.І.,** д.т.н., проф., фізико-енергетичний ф-т ХНУ імені В.Н. Каразіна  
**Щербина В.А.,** д.ф.-м.н., проф., ММФ ХНУ імені В.Н. Каразіна

**Адреса редакційної колегії:** 61077, м. Харків, пл. Свободи, 4,  
ХНУ імені В. Н. Каразіна, каф. Теоретичної та прикладної інформатики,  
к.7-60  
Тел. +380 (57) 707-55-35, Email: Victor.O.Mischenko@univer.kharkov.ua

Свідоцтво про державну реєстрацію КВ № 11825-696 ПР від 04.10.2006 р.

## ЗМІСТ

<ul style="list-style-type: none"> <li>▪ <b>М. О. Alieksieiev</b>..... 5 Parallel Fast Fourier Transform Algorithms Applications for Telecommunications</li> <li>▪ <b>А. Я. Бомба, А. В. Теребус</b> ..... 13 Просторові узагальнення краївих задач на конформні відображення з особливостями</li> <li>▪ <b>А. В. Боровинский, А. В. Гахов, В. О. Мищенко</b> ..... 21 Компьютерное моделирование 3D дифракции в плоскопараллельной среде: опыт реализации МДО методом расширенных программ</li> <li>▪ <b>Г. Г. Буланчук, О. Н. Буланчук, С. А. Довгий</b> ..... 36 Метод локальных вихревых рамок со вставкой промежуточных точек на вихревой пелене</li> <li>▪ <b>Т. В. Бутенко, А. П. Слесаренко</b> ..... 46 Интеграл Дюамеля и операционно-структурный метод в математическом моделировании нестационарных температурных процессов для областей неканонической формы</li> <li>▪ <b>С. В. Волкотруб, С. Н. Герасин</b> ..... 53 Пошаговая дискретная модель оптимального управления динамическим балансом страховой компании</li> <li>▪ <b>Ю. А. Гладышев</b> ..... 61 Об одной краевой задаче теории нестационарного переноса на графе</li> <li>▪ <b>Л. С. Глоба, А. В. Ермольчев, В. Н. Оленюк</b> ..... 68 Платформонезависимый подход моделирования и разработки распределённых систем</li> <li>▪ <b>Г. В. Голубев</b> ..... 77 Решение нелинейной задачи определения поля коэффициента проницаемости с использованием дискретных особенностей</li> <li>▪ <b>А. А. Гуржий, Д. И. Черний</b> ..... 83 Решение задачи о двухмерной адвекции пассивной примеси морскими течениями прогностическим методом</li> <li>▪ <b>М. В. Давидов, Ю. В. Нікольський, О. В. Пасічник, С. В. Тиханський</b> ..... 92 Метод пошуку елементів відеозображення у тренажері для навчання мові жестів людей з вадами слуху</li> <li>▪ <b>А. В. Деревянко</b> ..... 101 Построение эмпирических моделей для управления сложными технологическими процессами</li> </ul>	<p style="margin-top: 100px;">5</p> <p style="margin-top: 10px;">13</p> <p style="margin-top: 10px;">21</p> <p style="margin-top: 10px;">36</p> <p style="margin-top: 10px;">46</p> <p style="margin-top: 10px;">53</p> <p style="margin-top: 10px;">61</p> <p style="margin-top: 10px;">68</p> <p style="margin-top: 10px;">77</p> <p style="margin-top: 10px;">83</p> <p style="margin-top: 10px;">92</p> <p style="margin-top: 10px;">101</p>
--	--

<b>■ С. А. Довгий, А. В. Шеховцов .....</b>	<b>111</b>
Апробация УМДВ для класса задач о колебаниях крыла в вязкой среде с ограниченным решением на кромках	
<b>■ С. И. Киркоров, Л. С. Киркорова .....</b>	<b>129</b>
Параллельные алгоритмы математических моделей: исследование локальности и применение языка Ada	
<b>■ В. Т. Лазурник, В. Г. Рудычев, Д. В. Рудычев .....</b>	<b>143</b>
Компьютерное моделирование процесса инспекции больших объектов методом дуальных энергий	
<b>■ М. С. Львов</b>	<b>157</b>
Об одном подходе к реализации алгебраических вычислений: вычисления в алгебре высказываний	
<b>■ М. В. Макасеев .....</b>	<b>169</b>
Нестационарное глиссирование по поверхности тяжелой жидкости	
<b>■ К. В. Максименко-Шейко .....</b>	<b>179</b>
Метод R-функций в математическом моделировании теплообмена при движении жидкости по цилиндрическим каналам с пристеночными винтовыми вставками	
<b>■ М. А. Саттаров .....</b>	<b>190</b>
Гидромеханические аспекты изучения структуры турбулентного потока с поперечным сдвигом в каналах и пористых средах	
<b>■ А. В. Сенина .....</b>	<b>202</b>
Автоматизированное построение непрерывных текстур	
<b>■ Ю. А. Скоб .....</b>	<b>217</b>
Математическое моделирование дефлаграционного горения газовых смесей в помещении	
<b>■ М. А. Скулиш .....</b>	<b>236</b>
Удосконалення алгоритму керування інформаційними потоками у вузлах телекомунікаційних мереж	
<b>■ В. С. Смирнова, А. Д. Тевяшев .....</b>	<b>245</b>
Исследование свойств решения задачи Коши для системы уравнений стационарного течения газа в трубопроводе	
<b>■ Е. С. Сосюрка .....</b>	<b>252</b>
Математическая модель и стратегия решения задачи покрытия выпуклого многогранного множества семейством прямых параллелепипедов	
<b>■ Т. З. Чочиев .....</b>	<b>263</b>
Плоская динамическая задача термоупругости в компонентах смещения и уравнение в частных производных третьего порядка	

УДК 533.27:519.63

## Математическое моделирование дефлаграционного горения газовых смесей в помещении

Ю. А. Скоб

*Національний аерокосмічний університет ім. Н.Е. Жуковського «ХАІ», Україна*

Разработана трехмерная математическая модель горения газовой смеси в замкнутом помещении. Процесс описывается системой дифференциальных уравнений газовой динамики. Изменения концентраций топлива и продуктов сгорания определяются с помощью законов сохранения, принимая во внимание темпы убыли и притока компонентов и турбулентную диффузию. Химическая реакция происходит там, где концентрация топлива находится в пределах пределов воспламеняемости. Эта модель проверена на основе тестового расчета дефлаграционного горения водорода с использованием экспериментальных данных. Разработанная компьютерная система использована для прогнозирования водородного пожара в замкнутом помещении с целью оценки опасных зон разрушений и рекомендации некоторых мер безопасности.

**Ключевые слова:** математическая модель, горение газовой смеси, дифференциальные уравнения газовой динамики, турбулентная диффузия, тестовый расчет, горение водорода.

Розроблено тривимірну математичну модель горіння газової суміші у замкненому приміщенні. Процес описано системою диференційних рівнянь газової динаміки. Зміни концентрації палива та продуктів горіння визначаються за допомогою законів збереження, беручи до уваги темпи витрати та притоку компонентів і турбулентну дифузію. Хімічна реакція має місце там, де концентрація палива досягає межі зайнання. Цю модель перевірено на основі тестового розрахунку дефлаграційного горіння водню з використанням експериментальних даних. Розроблену комп'ютерну систему використано для прогнозування водневої пожежі у замкненому приміщенні з метою оцінки небезпечних зон руйнації і розробки деяких заходів безпеки.

**Ключові слова:** математичну модель, горіння газової суміші, диференціальні рівняння газової динаміки, турбулентна дифузія, тестовий розрахунок, воднева пожежа.

A three-dimensional mathematical model of gas mixture fire in enclosed space is developed. The process is described by the system of gas dynamics differential equations. The fuel and combustion products concentration changes are determined using conservation laws taking into account rates of component disappearance and formation and turbulent diffusion. The chemical reaction takes place in the volume where the fuel concentration is within the inflammability limits. The mathematical model is validated during an intercomparison test of hydrogen deflagration. A computer system is used to predict the fire loadings in the enclosed space, to estimate dangerous zones of destruction and recommend some safety measures.

**Keywords:** mathematical model, gas mixture fire, differential equations of gas dynamics, turbulent diffusion, test calculation, hydrogen deflagration.

### 1. Постановка проблемы и её актуальность

Газодинамические процессы движения химически реагирующих газов в помещении имеют место в процессе реализации производственных циклов или в результате аварий на промышленных предприятиях, которые используют, хранят или производят данные вещества. Выбросы горючих газов в атмосферу приводят к пожарам и, как следствие, материальному ущербу и человеческим жертвам. Поэтому оценка уровня пожарной безопасности производственных

помещений является актуальной и имеющей большое практическое значение проблемой [1, 2]. Наиболее перспективным в данной области представляется изучение опасных факторов пожара на основе принципов математического моделирования возникновения и развития пожара с использованием компьютерного моделирования движения газов CFD (Computational Fluid Dynamics Methods) [3, 4].

Адекватное описание физических процессов смешения реагирующих газов с воздухом, их горения (с учетом химического взаимодействия компонент смесей) и дальнейшего распространения смеси в открытом пространстве или замкнутом помещении с принудительной (или естественной) вентиляцией возможно только с использованием системы нестационарных уравнений Навье-Стокса для сжимаемого газа. В настоящее время, численное моделирование турбулентных течений осуществляют путем решения осредненных по Рейнольдсу-Фавру уравнений Навье-Стокса, дополненных моделью турбулентности [5, 6]. Однако большинство моделей турбулентности не описывают с одинаковой степенью адекватности различные типы течений. Особенно это касается течений с интенсивными отрывами потока и/или большими градиентами давления и температуры, что характерно для процессов горения. С другой стороны, рассматриваемый класс задач требует больших вычислительных ресурсов, что не позволяет осуществлять численное моделирование реальных процессов с приемлемыми затратами времени. Поэтому существует необходимость построения новых математических моделей и эффективных вычислительных методов для решения инженерных задач выброса, рассеяния в атмосфере, горения газо-воздушных смесей и использования результатов моделирования для прогноза последствий пожаров в производственных помещениях.

Целью данной работы является разработка трехмерной математической модели, которая адекватно описывает нестационарные процессы движения смеси химически реагирующих газов в помещении с естественной или принудительной вентиляцией, эффективного алгоритма численного моделирования этих процессов, а также анализ влияния различных сценариев возникновения пожара на его динамику и горючей нагрузки на несущие конструкции помещения и обслуживающий персонал.

В результате структурного анализа течения и декомпозиции полной математической модели газодинамического процесса принято допущение о том, что основное влияние на процесс оказывает конвективный обмен массой, импульсом и энергией. Это предположение позволяет для описания движения трехкомпонентного газа (горючее, воздух и продукты сгорания) с учетом химического взаимодействия компонент смеси использовать усеченные уравнения Навье-Стокса, полученные путем отбрасывания вязких членов (приближение Эйлера с источниками членами). На основе предложенной математической модели разработана компьютерная система FIRE®, которая позволяет анализировать и прогнозировать трехмерные поля концентрации примеси и других газодинамических параметров смеси во времени и пространстве, оценивать масштабы последствий возможных техногенных аварий, формулировать рекомендации по организации и расположению опасных производств.

В данной работе в качестве горючего газа рассматривается водород, который является наиболее перспективным источником энергии с точки зрения альтернативы традиционному углеводородному топливу. Проведена верификация математической модели на основе решения тестовой задачи о дефлаграционном горении водородно-воздушной смеси в приземном слое атмосферы. Получено численное решение задачи о водородном пожаре в производственном помещении с естественной вентиляцией. Исследовано влияние горючей нагрузки на динамику пожара при различных сценариях его возникновения. Выявлены особенности рассеяния и горения водорода в воздухе. Они обусловлены его низкой плотностью, высоким коэффициентом диффузии, высокой скоростью химического взаимодействия с кислородом, широким диапазоном между концентрационными пределами воспламеняемости и большой скоростью распространения пламени в дефлаграционном режиме.

## 2. Общая постановка задачи

Рассматриваются процессы выброса газообразной примеси (водорода) в атмосферу, формирования газовоздушной горючей смеси, дефлаграционного горения примеси и дальнейшего рассеяния продуктов сгорания в закрытом помещении с естественной вентиляцией. Известны параметры окружающей среды (температура, давление, вектор скорости набегающего потока  $\vec{q}_1$ ), химический состав примеси (массовая концентрация горючей примеси  $Q_1$ ), граничные и начальные условия формирования смеси. Расчетной областью  $\Omega$  является параллелепипед с прямолинейными образующими, расположенный в правой декартовой системе координат ( $X$ ,  $Y$ ,  $Z$ ) с основанием в плоскости  $XOZ$  (ось  $Y$  ориентирована в направлении, противоположном действию сил тяжести Земли (рис. 2.1)). Расчетная область разбивается на пространственные ячейки, причем размеры граней подбираются в соответствии с характерным размером особенностей расчетной области (шероховатости обтекаемой поверхности, размерностью обтекаемых объектов).

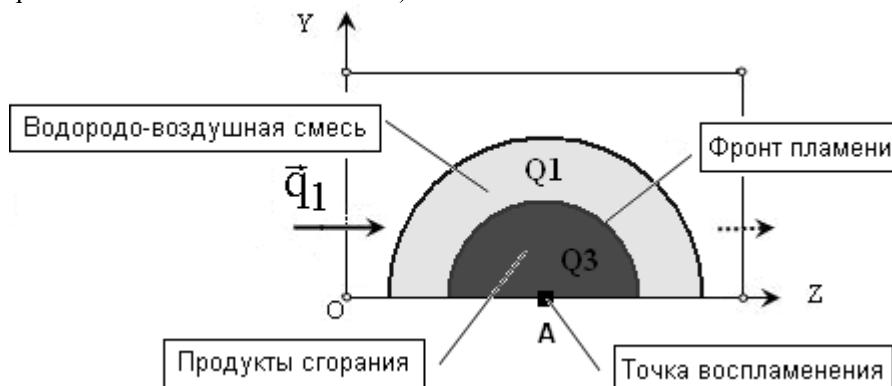


Рис.2.1. Расчетная схема движения химически реагирующей смеси газов

## 3. Математическая модель течения смеси газов

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

$$\frac{\partial \vec{a}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{b}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{c}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{d}}{\partial z} = \rho \vec{f}, \quad (3.1)$$

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

$$\vec{a} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, E]^T, \quad (3.2)$$

$$\vec{b} = [\rho u, P + \rho u^2, \rho uv, \rho uw, (E + P)u]^T, \quad (3.3)$$

$$\vec{c} = [\rho v, \rho vu, P + \rho v^2, \rho vw, (E + P)v]^T, \quad (3.4)$$

$$\vec{d} = [\rho w, \rho vu, \rho vw, P + \rho w^2, (E + P)w]^T, \quad (3.5)$$

$$\vec{f} = [0, 0, -g, 0, -gv + e_s/\rho]^T, \quad (3.6)$$

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

$$E = \rho \left( e + \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) \right); \quad (3.7)$$

$e$  – внутренняя энергия единицы массы газа; компоненты вектора  $\vec{f}$  – суть проекции распределенных объемных источников;  $g$  – ускорение свободного падения;  $e_s$  – интенсивность тепловыделения в единице объема газа вследствие химической реакции.

Закон переноса компоненты смеси (горючий газ, воздух, продукты сгорания) с учетом скорости диффузии, имеет следующий вид [7, 8]:

$$\frac{\partial(\rho Q_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Q_i)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v Q_i)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w Q_i)}{\partial z} = \rho_{Q_{it}} + \rho_{Q_{is}}, \quad (3.8)$$

где  $Q_i$  – относительная массовая плотность  $i$ -той компоненты смеси,  $i = 1 \dots 3$  (отношение плотности газообразного вещества примеси к плотности смеси): 1 – горючее, 2 – воздух, 3 – продукты сгорания;  $\rho_{Q_{it}}$  – интенсивность изменения плотности примеси вследствие диффузии в соответствии с законом Фика  $\rho_{Q_{it}} = \text{div}(\rho \vartheta_D \text{grad} Q_i)$  (коэффициент диффузии  $\vartheta_D$  определялся по методике, предложенной М.Е. Берляндом [9]);  $\rho_{Q_{is}}$  – интенсивность изменения плотности компоненты смеси, вследствие химической реакции.

Система уравнений (1-8) является незамкнутой. Дополним ее уравнениями, определяющими теплофизические свойства компонент смеси:

$$\mu = \frac{1}{\sum_{i=1}^3 \frac{Q_i}{\mu_i}}, \quad C_p = \sum_{i=1}^3 Q_i C_{pi}, \quad C_v = \sum_{i=1}^3 Q_i C_{vi}, \quad \sum_{i=1}^3 Q_i = 1, \quad k = \frac{C_p}{C_v}. \quad (3.9)$$

Для идеального политропного газа величина  $e$  связана с  $P$  и  $\rho$  смеси зависимостью:

$$e = \frac{P}{(k-1)\rho}. \quad (3.10)$$

Интенсивность изменения плотности горючего  $\rho_{Q1s}$ , вследствие химической реакции, определялась как произведение молекулярной массы горючего  $\mu_1$  на скорость его мольного изменения  $w_1$ . Рассматривалась химическая реакция «брутто»:

$$\sum_{i=1}^2 \nu_i \chi_i \rightarrow \nu_3 \chi_3, \quad (3.11)$$

где  $\nu_i$  – стехиометрические коэффициенты,  $\chi_i$  – химические вещества. Скорость мольного изменения  $w_1$  определялась по формуле:

$$w = -\nu_1 A_1 T^{\beta_1} \exp[-E_1/(R_{\text{жн}} T)] \prod_{i=1}^2 [\chi_i]^{\nu_i}, \quad (3.12)$$

где  $A_1, \beta_1, E_1, \nu'_1, \nu'_2$  – параметры, полученные на основе обобщения экспериментальных данных [10],  $[\chi_i]$  – мольная концентрация  $i$ -той компоненты смеси:  $[\chi_i] = \frac{\rho Q_i}{\mu_i \nu_i}$ . Интенсивность изменения плотности продуктов сгорания  $\rho_{Q3s}$  определялась на основе закона движущихся масс:

$$\frac{\rho_{Q1s}}{\mu_1 \nu_1} = \frac{\rho_{Q2s}}{\mu_2 \nu_2} = -\frac{\rho_{Q3s}}{\mu_3 \nu_3}. \quad (3.13)$$

Интенсивность тепловыделения в единице объема газа вследствие химической реакции  $e_s$  определялась по формуле:

$$e_s = -\xi H_{u1} \rho_{Q1s}, \quad (3.14)$$

где  $\xi$  – коэффициент полноты сгорания,  $H_{u1}$  – нижняя теплота сгорания горючего.

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

– полной энталпии

$$I_0^0 = \frac{k}{k-1} \frac{P}{\rho} + \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2}; \quad (3.15)$$

– функции энтропии

$$S_0 = \frac{P}{\rho^k}; \quad (3.16)$$

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

– относительной массовой плотностью примеси  $Q_1$  ( $Q_1 \leq 1$ , если поступает газообразное вещество примеси, например водород  $H_2$ ).

Параметры потока на входе определяются из равенств (3.15, 3.16) с учетом заданных  $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$  с привлечением соотношения для “левого” инварианта

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

В начальный момент времени во всех «газообразных» ячейках расчетной области принимаются параметры окружающей среды. В ячейках, занимаемых облаком газообразной примеси, которое образовалось в результате мгновенного выброса, относительная массовая концентрация примеси принимается равной  $Q_1 \leq 1$ . В ячейках с испарением или истечением газа задается закон изменения расхода примеси.

Компьютерное моделирование рассматриваемых процессов осуществлялось с использованием программного комплекса FIRE®, реализующего предложенную математическую модель. Для выполнения расчетов требуется задание следующих входных данных: геометрии моделируемого объема; плана помещения, включающего размеры входных и оконных проемов; атмосферных условий; типа, параметров и местоположения источника возгораемой компоненты (горючего); местоположения источника зажигания, теплофизических свойств компонентов, размеров вычислительной сетки.

Программный комплекс FIRE® позволяет вычислять плотность, скорость, давление, температуру смеси, концентрации компонентов смеси (горючего, воздуха, продуктов сгорания), скорость тепловыделения в пределах каждого контрольного объема смеси на каждом дискретном временном шаге.

Обобщенные величины, зарегистрированные в соответствии с программным комплексом FIRE®, включают: суммарную скорость тепловыделения; избыточное среднеобъемное давление; среднеобъемную температуру.

#### **4. Используемый метод решения и его программная реализация**

Векторное уравнение (3.1) является следствием законов сохранения массы, импульса и энергии, которые могут быть представлены в интегральной форме для каждой расчетной ячейки:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \vec{a} dV + \iint_{\sigma} \hat{A} d\vec{\sigma} = \iiint_V \rho \vec{f} dV, \quad (4.1)$$

где  $V$  – объем элементарной расчетной ячейки;  $\vec{\sigma}$  – ограничивающая поверхность данной ячейки, которая имеет внешнюю нормаль  $\vec{n}$  ( $\vec{\sigma} = \sigma \vec{n}$ );  $\hat{A}$  – тензор плотности потока консервативных переменных  $\vec{a}$ , столбцами которого являются векторы  $\vec{b}, \vec{c}, \vec{d}$ , соответственно.

Закон переноса компоненты смеси (3.8) может быть также представлен в интегральной форме для каждой расчетной ячейки:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho Q_i dV + \iint_{\sigma} \rho Q_i \bar{q} d\bar{\sigma} = \iiint_V (\rho Q_{it} + \rho Q_{is}) dV \quad (4.2)$$

Численное решение основных уравнений основывается на использовании схемы распада произвольного разрыва. Уравнения (4.1, 4.2) допускают возникновение и существование поверхностей разрыва двух видов: ударных волн и тангенциальных разрывов. Функции, удовлетворяющие уравнениям (4.1, 4.2), можно рассматривать в качестве обобщенных решений уравнений газовой динамики. Использование интегральных законов сохранения массы, импульса, энергии и концентрации газообразной примеси в качестве исходных для построения разностных уравнений обеспечивает построение разрывных решений без выделения разрывов.

Совокупность газодинамических параметров во всех ячейках в момент времени  $t^n$  представляет собой известное решение на временном слое с индексом  $n$ . Параметры в момент времени  $t^{n+1} = t^n + \tau$  (на временном слое  $n+1$ ) рассчитывались посредством применения явных разностных аппроксимаций для соотношений (4.1, 4.2) в рамках метода С.К. Годунова [11]. На первом этапе непрерывное распределение параметров заменяется кусочно-постоянными средне-интегральными значениями в каждой расчетной ячейке. При этом границы ячейки представляют собой неустойчивые поверхности произвольного разрыва, которые распадаются на устойчивые волновые элементы: ударную волну, контактную поверхность и волну разрежения. Для каждого такого разрыва определяются потоки массы, импульса, энергии, концентрации газообразной примеси через грани газовых ячеек. Предполагалось, что горение происходит в объеме расчетной области, занимаемом горючей смесью с концентрацией горючего в диапазоне между минимальным и максимальным концентрационными пределами воспламеняемости  $Q_{1\min} \leq Q_1 \leq Q_{1\max}$ . Величины  $Q_{1\min}$  и  $Q_{1\max}$  задавались на основе обобщения экспериментальных данных [12]. Устойчивость конечно-разностной схемы обеспечивается выбором величины шага по времени  $\tau$ .

## 5. Верификация математической модели

Выброс горючего газа в атмосферу и взрыв смеси приводят к формированию и распространению ударных волн давления, образованию зон высоких температур, и, как следствие, к поражению обслуживающего персонала и разрушению жизненно важных объектов. Избыточное давление во фронте ударной волны и максимальная температура обычно используются для оценки горючих нагрузок на поверхности конструкций производственного помещения, возникающих в результате пожара.

Для верификации математической модели проведено сравнение результатов расчета с экспериментальными данными горения стехиометрического облака водородно-воздушной смеси в дефлаграционном режиме с учетом образования продуктов сгорания в приземном слое атмосферы (Fraunhofer ICT [13]). Эксперименты осуществлялись при таких условиях: общий объем полусферического облака  $2094 \text{ м}^3$ ; начальное давление  $98.9 \text{ кПа}$ ; начальная температура  $283 \text{ К}$ ; радиус  $R$  облака  $20 \text{ м}$ . Временное изменение избыточного

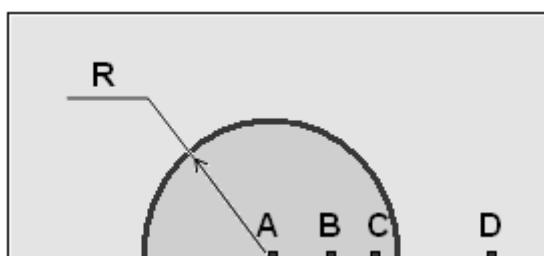
давления  $P$ , температуры  $T$ , массовой концентрации горючего  $Q_1$  и продуктов сгорания  $Q_3$  на расстояниях 5 м (точка В на рис. 5.1), 8 м (точка С) и 18 м (точка D) от эпицентра горения (точка А) контролировались в процессе расчетов.

Размеры расчетной области составляли следующие значения: длина – 200 м; ширина – 100 м, высота – 30 м. Размеры вычислительной сетки составляли 200x100x30 ячеек. Характеристики компьютера были следующими: 1 Intel® Celeron® CPU PCs (2.4 ГГц), 0.75 Гб RAM, Windows XP. Время расчета составило 4 ч центрального процессора.

Динамика избыточных давлений в контрольных точках В, С и D представлена на рис. 5.2-5.4 в сравнении с экспериментальными данными, а также результатами вычислительных экспериментов, полученными различными авторами [13]. Более «остроя» форма расчетной кривой может быть объяснена специфическими особенностями принятой модели горения. Более интенсивное снижение избыточного давления на пути ударной волны от точки С до точки D может быть отнесено к особенностям конечно-разностной схемы первого порядка аппроксимации С.К. Годунова.

Распределение температуры в контрольных точках В и С представлены на рис. 5.5. Динамика изменения массовых концентраций водорода и продуктов сгорания в контрольной точке В представлена на рис. 5.6.

В общем, результаты расчетов достаточно хорошо согласуются с экспериментальными данными и результатами, полученными с использованием других компьютерных систем. При этом затраты машинных ресурсов разработанной программы расчета были значительно меньше за счет простоты предложенной математической модели и эффективности алгоритма расчета. Это позволяет эффективно использовать разработанную математическую модель и программу расчета для компьютерного моделирования широкомасштабных взрывов водородо-воздушной смеси в атмосфере и оценки последствий горючей нагрузки пожара на окружающие конструкции производственных помещений и оборудования.



*Рис. 5.1. Схема расчетной области и расположение контрольных точек*

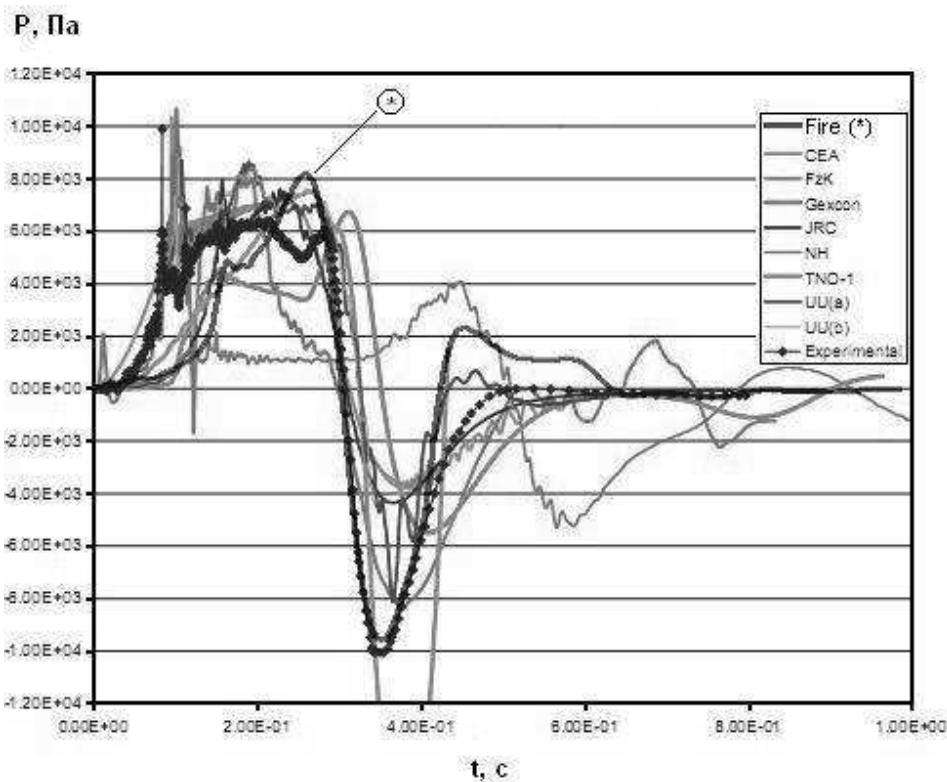


Рис.5.2. Динамика избыточного давления в контрольной точке В у земли

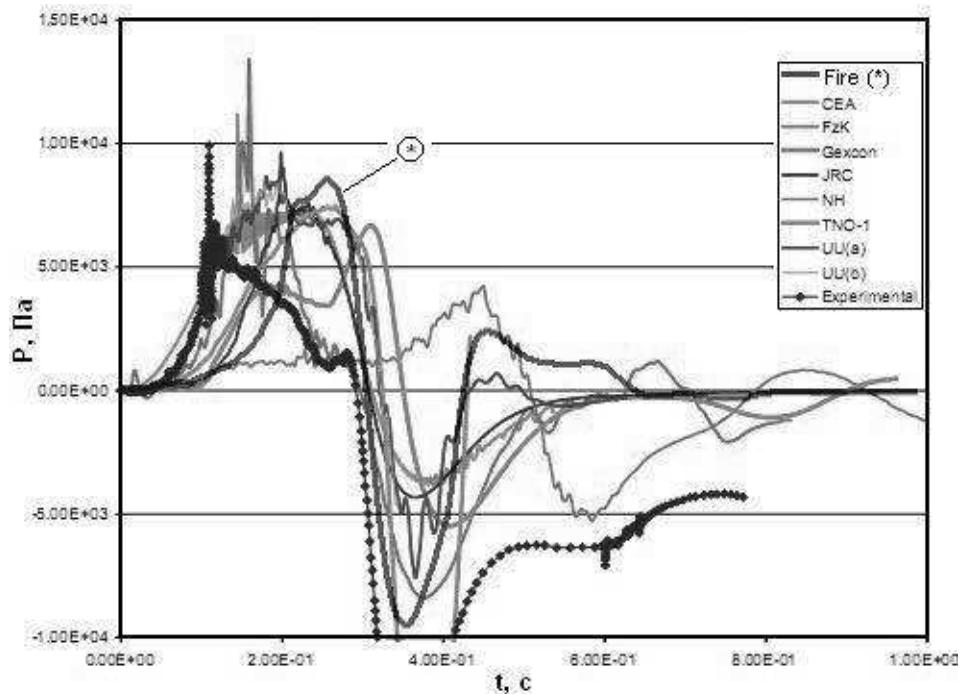


Рис.5.3. Динамика избыточного давления в контрольной точке С у земли

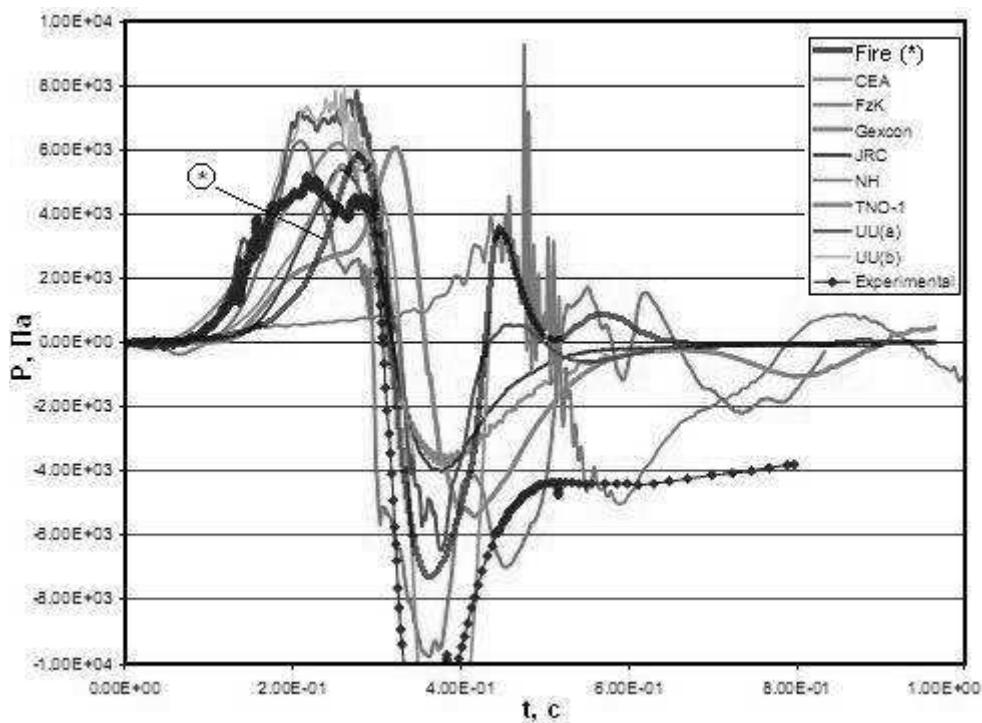


Рис. 5.4. Динаміка избыточного давлення в контрольній точці D у землі

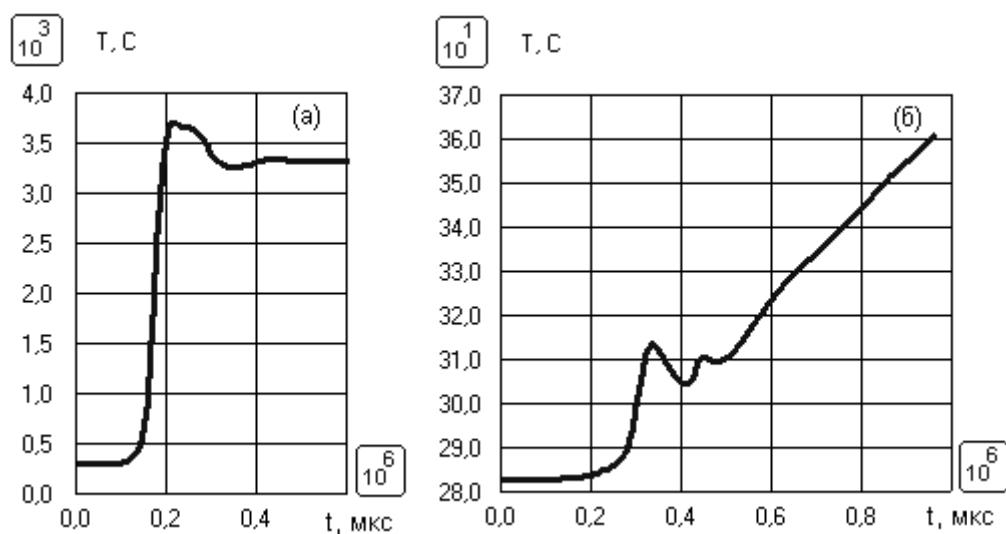


Рис. 5.5. Динаміка температури в контрольних точках B (а) і C (б) у землі

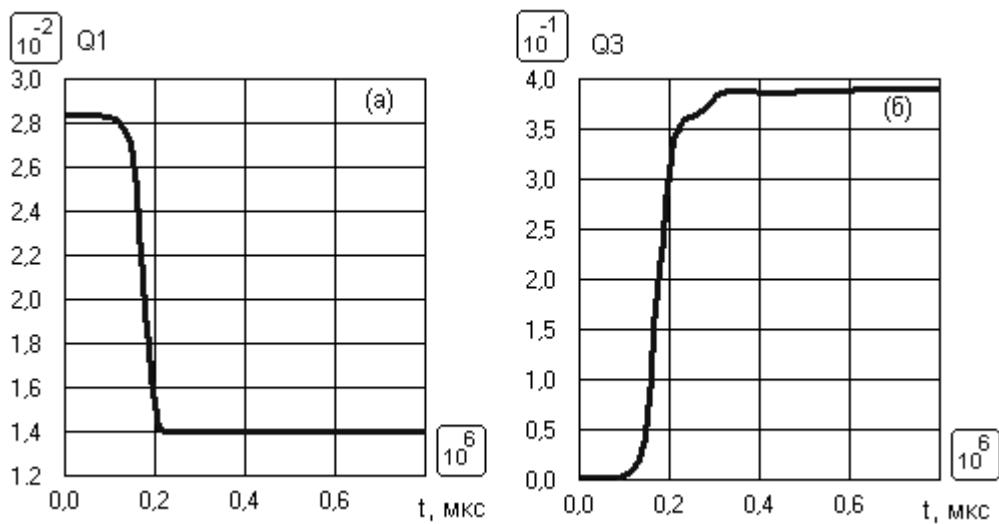


Рис. 5.6. Динамика массовых концентраций водорода  $Q_1$  (а) и продуктов сгорания  $Q_3$  (б) в контрольной точке В у земли

## 6. Моделирование пожара в производственном помещении

Газодинамический процесс водородного дефлаграционного пожара в производственном помещении моделируется с учетом его фактического размера при стандартных атмосферных условиях окружающей среды. Считается, что все окна, двери и въездные ворота разрушены в результате мгновенного разрушения емкостей высокого давления для хранения водорода. Таким образом, они открыты для поступления окружающего атмосферного воздуха внутрь помещения и, наоборот, для выброса продуктов сгорания наружу.

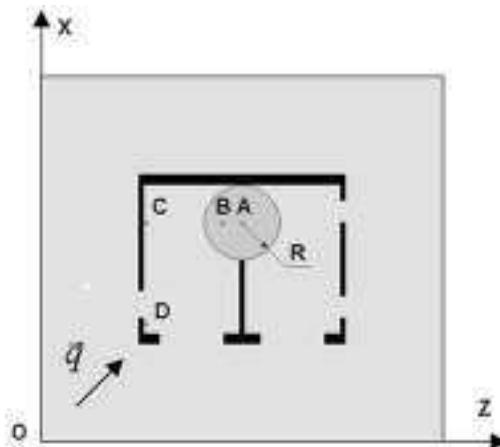


Рис. 6.1. Схема расчетной области и расположение контрольных точек

### 6.1. Определяющие параметры расчетной области

План производственного помещения представлен на рис. 6.1. Несущие конструкции здания – кирпичные стены толщиной 0,25 м. Высота помещения –

$3\text{ м}$ . Помещение состоит из двух комнат, разделенных внутренней перегородкой толщиной  $0.25\text{ м}$  с проёмом площадью  $2 \times 2.5\text{ м}^2$ . Толщина перекрытия  $0.25\text{ м}$ . Помещение оборудовано окнами площадью  $1 \times 1.5\text{ м}^2$  каждый. Площадь дверных проёмов составляла  $4 \times 2.5\text{ м}^2$ .

При реализации математической модели в расчетной области использовался контрольной объем размером  $0.25 \times 0.25 \times 0.25\text{ м}^3$ . Центр горючего облака радиусом  $R = 2\text{ м}$  и точка воспламенения А, контрольные точки В, С и D располагались на высоте  $1.125\text{ м}$ .

### 6.2. Сценарии развития водородного пожара

На условия развития пожара в производственном помещении могут оказывать влияние такие факторы, как место возникновения пожара, положение внутри окон и дверных проемов (открытое или закрытое), а также объем и параметры источника выброса горючего. С целью определения влияния указанных факторов на параметры пожара было исследовано несколько возможных сценариев развития пожара при различных параметрах облака выброса горючего. Входные проемы и окна производственного помещения во все время развития пожара предполагались открытыми. Были рассмотрены два сценария. В первом случае предполагалось, что в результате истечения водорода из баллона, в котором находился сжатый водород под давлением, образовалось облако радиусом  $R = 2\text{ м}$  с водородно-воздушной стехиометрической смесью и параметрами, соответствующими атмосферным условиям (сценарий 1). Во втором случае предполагалось, что в результате разрушения баллонов, в которых находился сжатый водород под давлением, образовывалось облако радиусом  $R = 2\text{ м}$ , температура которого соответствовала атмосферным условиям с давлением  $134213\text{ Па}$ , а массовая концентрация водорода составляла  $Q_1 = 0.111$  (сценарий 2). Начальные условия для сценария 2 соответствовали мгновенному взрыву 12 баллонов, предназначенных для хранения водорода под давлением, объемом  $0.51\text{ м}^3$  каждый. Предполагалось, что для обоих сценариев центр А облака располагался в проеме между комнатами у перегородки.

### 6.3. Результаты моделирования водородного пожара в помещении

Выходными данными, полученными в результате реализации обоих сценариев развития пожара, являются:

- распределения массовой концентрации водорода и продуктов сгорания (параметры фиксировались в разные моменты времени в плоскости параллельной полу на высоте  $1.125\text{ м}$ );
- временные изменения избыточного давления, температуры, концентрации горючего и продуктов сгорания в контрольных точках В, С и D (см. рис. 6.1).

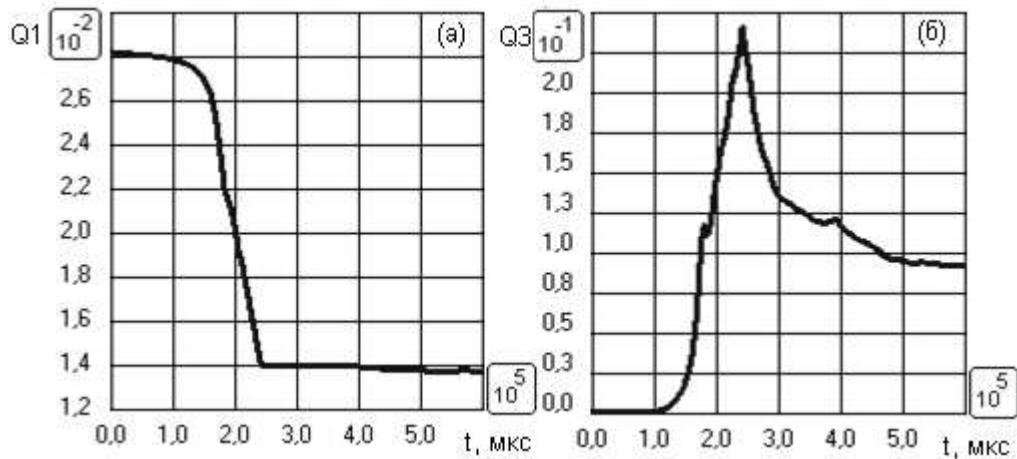


Рис. 6.2. Изменения концентрации водорода (а) и продуктов сгорания (б) в точке В

Динамика изменения концентраций водорода и продуктов сгорания в точке В, избыточного давления и температуры в точках В, С и D для сценария 1 представлены на рис. 6.2 – 6.5.

Поля концентрации водорода и продуктов сгорания для сценария 1 во времена 0.15, 0.25 и 0.35 секунды с момента воспламенения представлены на рис. 6.6.

Временные изменения концентраций водорода и продуктов сгорания в точке В, избыточного давления и температуры в точках В, С и D для сценария 2 представлены на рис. 6.7 – 6.10.

Распределения концентрации водорода и продуктов сгорания для сценария 2 в моменты времени 0.1, 0.15 и 0.2 секунды с момента воспламенения изображены на рис. 6.11.

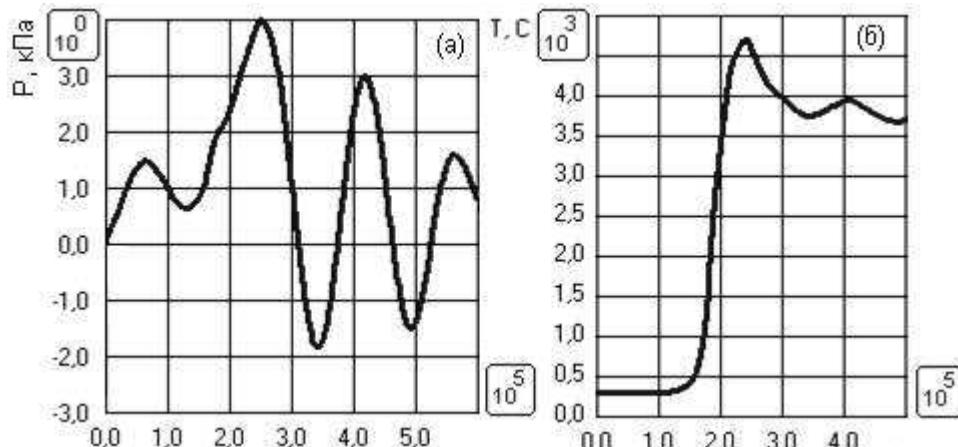


Рис. 6.3. Изменения избыточного давления (а) и температуры (б) в точке В (сценарий 1)

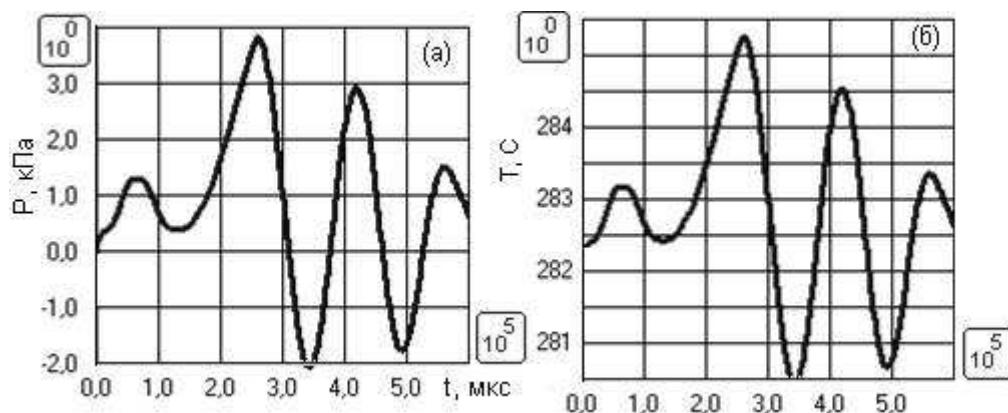


Рис. 6.4. Изменения избыточного давления (а) и температуры (б) в точке С (сценарий 1)

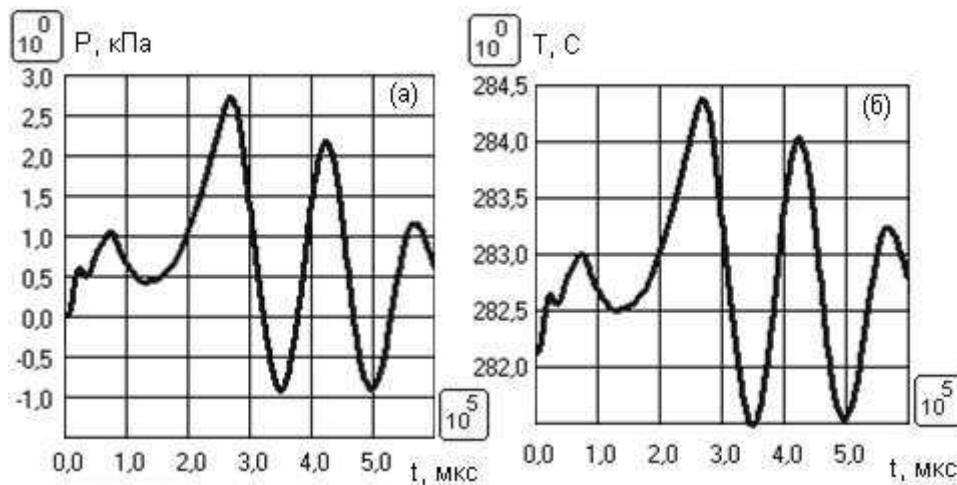


Рис. 6.5. Изменения избыточного давления (а) и температуры (б) в точке D (сценарий 1)

Аналіз результатів використання, представлених на рис. 6.3-6.5 показує, що параметри середи всередині приміщення (сценарій 1) відрізняються від параметрів середи при горінні водородно-воздушної суміші в відкритому пространстві (см. рис. 5.2, 5.3, 5.5, 5.6). Так, в частності, максимальна концентрація продуктів сгорання в приміщенні нижче (рис. 6.2, б), ніж в відкритому пространстві (рис. 5.6, б). Максимальне избыточное давление в помещении ниже (см. рис. 6.3, а и рис. 6.5, а), чем в открытом пространстве (см. рис. 5.2 и рис. 5.3). Наблюдається наявність відбитих хвиль тиску, пов'язаних з наявністю стінок будівлі (см. рис. 6.3, а и рис. 6.5, а). Максимальна температура суміші в приміщенні вище (рис. 6.3, б), ніж в відкритому пространстві (рис. 5.5, а). Виявлені особливості обумовлені конструкцією промислового приміщення і наявністю інтенсивного тепломасообміну суміші з оточуючою середою.

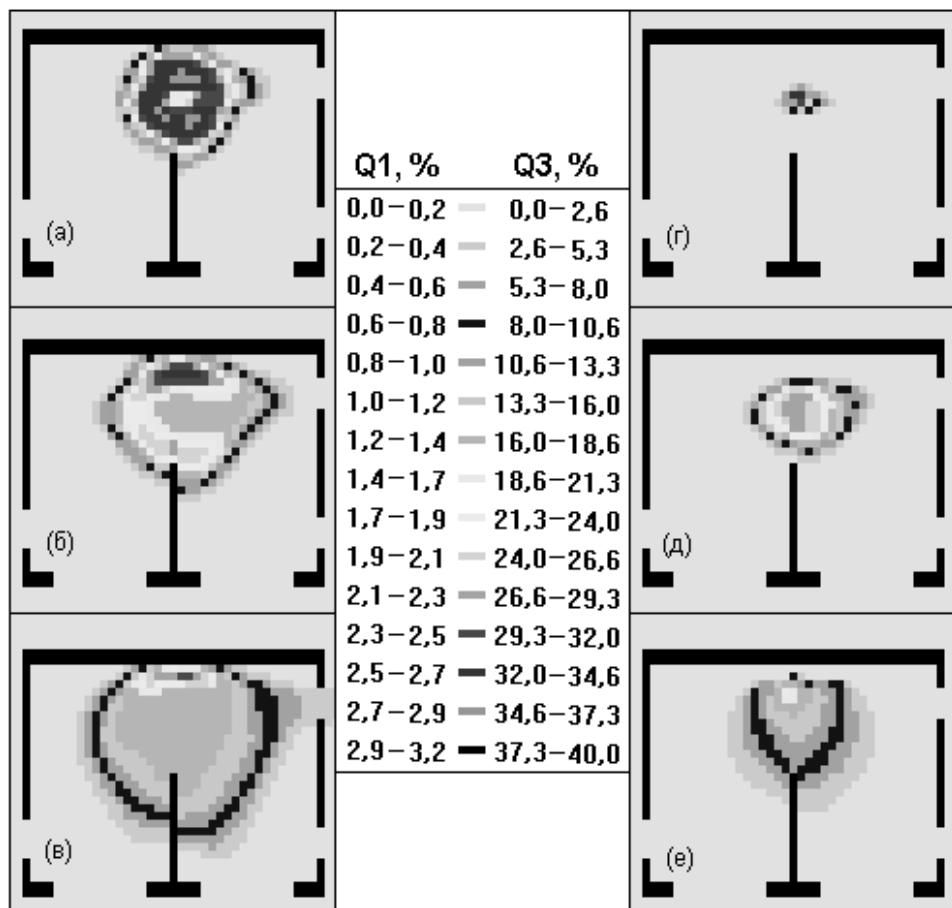


Рис. 6.6. Динамика изменения концентрации водорода (а-в) и продуктов сгорания (г-е) во времена 0,15, 0,25, 0,35 секунды с момента воспламенения в точке В (сценарий 1)

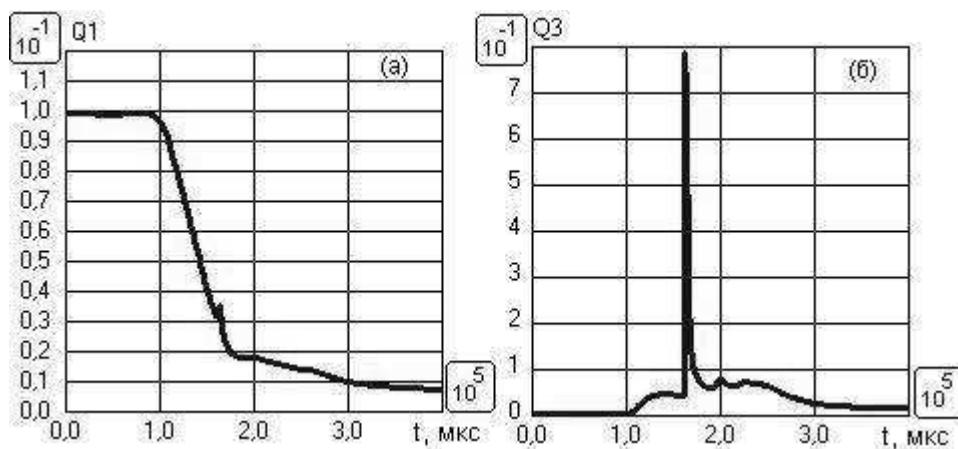


Рис. 6.7. Изменения концентрации водорода (а) и продуктов сгорания (б) в точке В (сценарий 2)

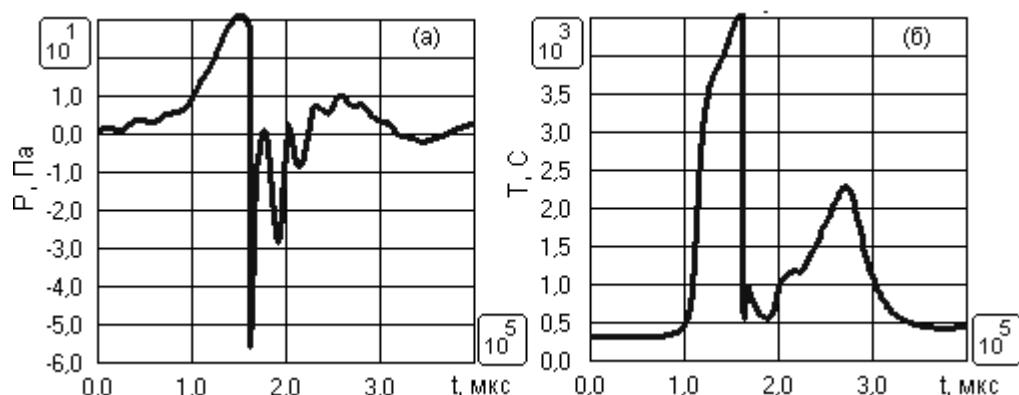


Рис. 6.8. Изменения избыточного давления (а) и температуры (б) в точке В (сценарий 2)

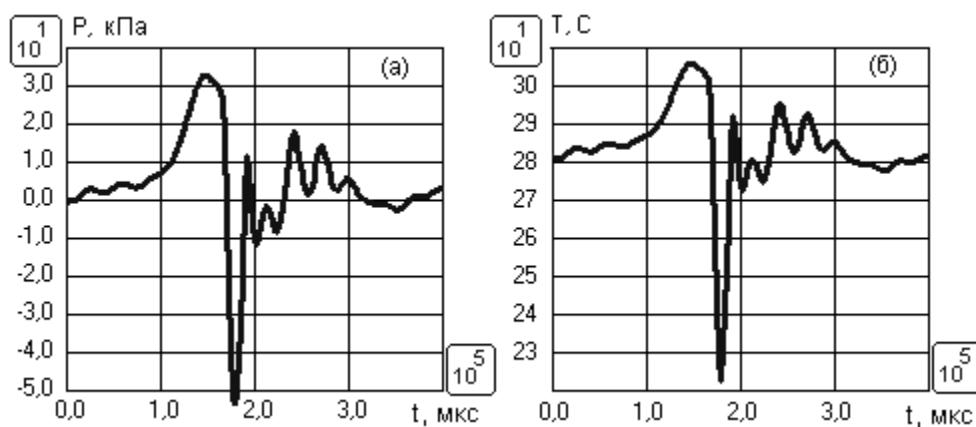


Рис. 6.9. Изменения избыточного давления (а) и температуры (б) в точке С (сценарий 2)

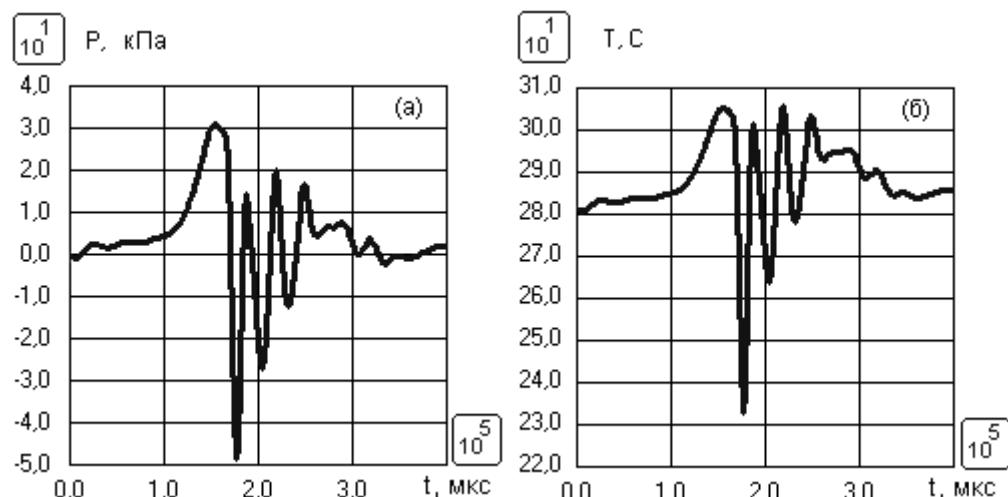


Рис. 6.10. Изменение избыточного давления (а) и температуры (б) в точке D (сценарий 2)

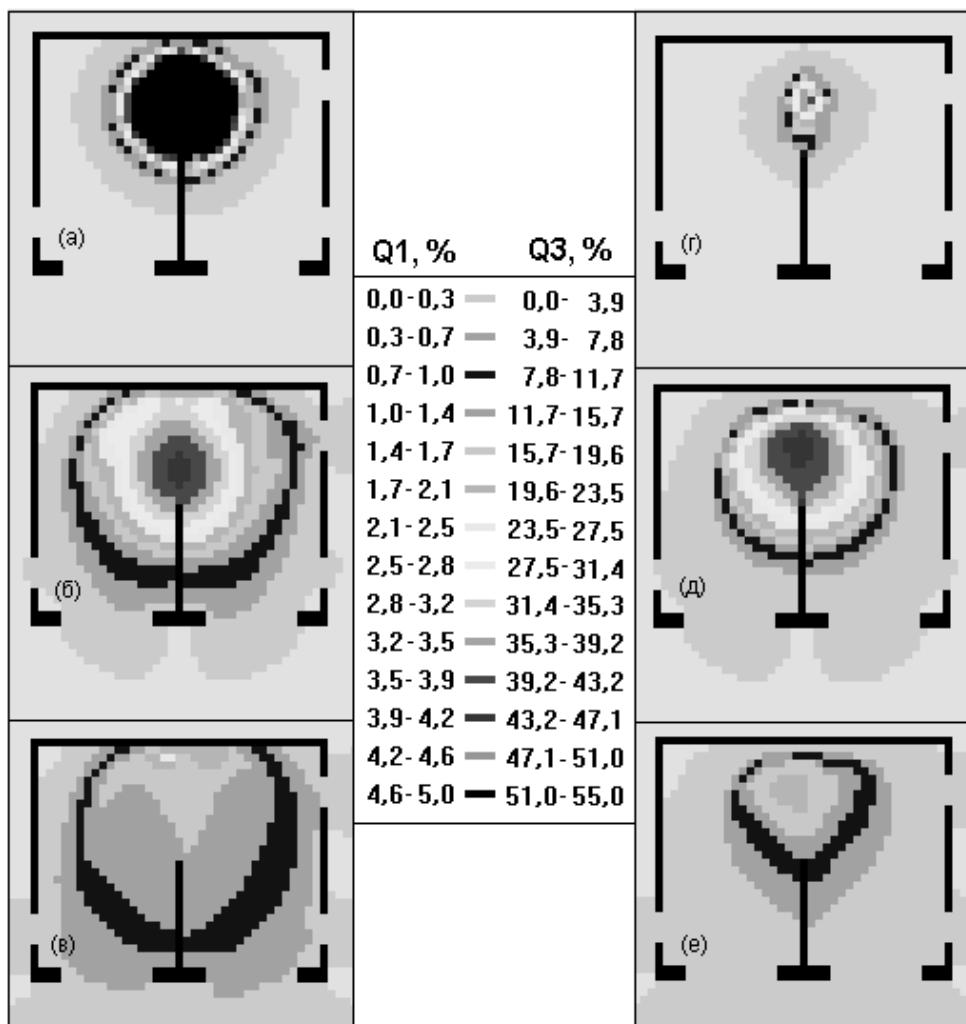


Рис. 6.11. Динамика изменения концентрации водорода (а-в) и продуктов сгорания (г-е) во времена 0.1, 0.15, 0.2 секунды с момента воспламенения (сценарий 2)

Анализ результатов вычисления, представленных на рис. 6.7-6.11 показывает, что параметры среды внутри помещения (сценарий 2) отличаются от параметров среды при сценарии 1. Так, в частности, максимальная концентрация продуктов сгорания при сценарии 2 выше (рис. 6.7,б), чем в при сценарии 1 (рис. 6.3,б). Максимальное избыточное давление при сценарии 2 ниже (см. рис. 6.8,а и рис. 6.9,а), чем при сценарии 1 (см. рис. 6.3,а и рис. 6.4,а). Максимальная температура при сценарии 2 выше (см. рис. 6.8,б и рис. 6.9,б), чем при сценарии 1 (см. рис. 6.3,б и рис. 6.5,б). Эти отличия вызваны большей массой горючего, участвующего в горении, а также более интенсивным рассеиванием смеси в случае сценария 2, по сравнению со сценарием 1.

В случае возникновения водородного пожара в производственном помещении можно рекомендовать ряд воздействий на интенсивность горения

(при срабатывании датчиков, регистрирующих повышенную концентрацию горючего газа):

- распыление воды (приводит к снижению температуры смеси и, как следствие, скорости горения);
- подача в помещение нейтрального газа (например, диоксид углерода) или введение химически активных добавок (приводит к росту минимального концентрационного предела воспламеняемости и, как следствие, к снижению температуры смеси).

## **7. Выводы по результатам исследований**

Разработана новая трехмерная математическая модель горения многокомпонентной газовой смеси в дефлаграционном режиме с учетом образования продуктов сгорания в закрытых помещениях с вентиляцией. Разработан эффективный алгоритм численного решения системы основных уравнений газовой динамики на базе законов сохранения с использованием конечно-разностной схемы распада произвольного разрыва С.К. Годунова.

На основе предложенной математической модели создана компьютерная система FIRE® инженерного анализа и прогноза газодинамических процессов движения химически реагирующих газов в атмосфере. Она позволяет прогнозировать изменение избыточного давления, температуры, концентраций компонент смеси и других термо- и газодинамических параметров компонент смеси во времени и пространстве. Результаты прогноза можно использовать для оценки зон максимального влияния пожара на конструкции производственных помещений и обслуживающий персонал под воздействием горючей нагрузки (ударной волны и высокой температуры продуктов сгорания).

Рассмотрены результаты решения тестовой задачи дефлаграционного горения полусферического стехиометрического облака водородно-воздушной смеси в приземном слое атмосферы.

Исследована динамика развития водородного пожара в производственном помещении с естественной вентиляцией. Получены численные решения для различных сценариев выброса и горения водородо-воздушной смеси в случае разрушения емкости высокого давления для хранения сжатого водорода. Выявлены особенности рассеяния и горения водорода в воздухе. Они обусловлены его низкой плотностью, высоким коэффициентом диффузии, высокой скоростью химического взаимодействия с кислородом, широким диапазоном между концентрационными пределами воспламеняемости и большой скоростью распространения пламени в дефлаграционном режиме.

## **ЛИТЕРАТУРА**

1. Ми Зуй Тхань, Корольченко А.Я. Моделирование пожаров в жилых зданиях // Пожаробезопасность. – 2005. – № 5. – С.42 – 50.
2. Взрывные явления. Оценки и последствия: В 2-х кн. Пер. с англ. / Бейкер У. и др.; под ред. Я.Б. Зельдовича, Б.Е. Гельфанда. – М.: Мир, 1986.– 319 с.

3. Парр-Сантос М.Т., Кастро-Руис Ф., Мендес-Буено Ц. Численное моделирование перехода горения в детонацию // Физика горения и взрыва.– 2005.– т. 41, №2.– С. 108-115.
4. Ma T. G., Quintiere J. G, Numerical simulation of axi-symmetric fire plumes: accuracy and limitations // Fire Safety Journal. – 2003. – № 38. – Р. 467 - 492.
5. Шенг Дж. С. Обзор численных методов решения уравнений Навье-Стокса для течений сжимаемого газа // Аэрокосмическая техника.– 1986.– №2.– С. 65-92.
6. Андерсон Д., Таннхилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен: В 2-х т. – М.: Мир, 1990. – 726 с.
7. Numerical Modeling of Hydrogen Release, Mixture и Dispersion in Atmosphere / E.A. Granovskiy, V.A. Lyfar, Yu.A. Skob, M.L. Ugryumov // Abstracts Book и CD-ROM Proceedings the International Conference on Hydrogen Safety. – Pisa (Italy). – 2005. – 10 p. (ICHS Paper No. 110021)
8. Computational Modeling of Pressure Effects from Hydrogen Explosions / E.A. Granovskiy, V.A. Lyfar, Yu.A. Skob, M.L. Ugryumov // Abstracts Book и CD-ROM Proceedings of the 2-nd International Conference on Hydrogen Safety. – San Sebastian (Spain). – 2007. – 15 p. (ICHS Paper No. 1.3.52)
9. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Ленинград: Гидрометеоиздат, 1975. – 448 с.
10. Физико-химические процессы в газовой динамике Комьютизированный справочник в 3-х томах / Под редакцией Г.Г. Черного и С.А. Лосева. – Т. 2. – Физико-химическая кинетика и термодинамика. – М.: Научно-издательский центр механики, 2002. – 368 с.
11. Численное решение многомерных задач газовой динамики / С.К. Годунов, А.В. Забродин, М.Я. Иванов, А.Н. Крайко, Г.П. Прокопов. – М.: Наука, 1976. – 400 с.
12. Физика взрыва / Под ред. К.П.Станюковича. – М.: наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1975. – 704 с.
13. An Intercomparison Exercise on the Capabilities of CFD Models to Predict Deflagration of a Large-Scale H<sub>2</sub>-Air Mixture in Open Atmosphere / E. Gallego, J. Garcia, E. Migoya, A. Crespo, A. Kotchourko, J. Yanez, A. Beccantini, O.R. Hansen, D. Baraldi, S. Hoiset, M.M. Voort, V. Molkov // CD-ROM Proceedings the International Conference on Hydrogen Safety. – Pisa (Italy). – 2005. (ICHS Paper No. 120003)

---

Надійшла у першій редакції 05.10.2009, в останній - 01.11.2009.

© Скоб Ю. А., 2009

---

## **ВІСНИК ХАРКІВСЬКОГО НАЦІОНАЛЬНОГО УНІВЕРСИТЕТУ**

**Серія «Математичне моделювання. Інформаційні технології. Автоматизовані системи управління»**

*Випуски даної серії розповсюджуються у академічних та наукових колах України та за її межами з метою оперативного висвітлення досліджень у таких актуальних галузях: математичне та комп'ютерне моделювання, обчислювальний експеримент, теорія і прикладні методи обробки та захисту інформації, програмно-апаратні системи інформаційного або управлюючого призначення, застосування математичного моделювання та системного аналізу у високих, наукових технологіях, враховуючи технології створення програмної продукції.*

*Виходить 2 рази на рік.*

*Приймаються роботи, що відносяться до напрямів фізико-математичних і технічних наук (бажаний об'єм 6-18 сторінок). Усі рукописи рецензуються.*

*Офіційний сайт <http://mia.univer.kharkov.ua>*

---

## **ВЕСТНИК ХАРЬКОВСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА**

**Серия «Математическое моделирование. Информационные технологии. Автоматизированные системы управления»**

*Выпуски данной серии распространяются в академических и научных кругах Украины и за ее пределами с целью оперативного освещения исследований в следующих актуальных областях: математическое и компьютерное моделирование, вычислительный эксперимент, теория и прикладные методы обработки и защиты информации, программно-аппаратные системы информационного или управляющего назначения, приложения математического моделирования и системного анализа в высоких, научных технологиях, включая технологии создания программной продукции.*

*Выходит 2 раза в год.*

*Принимаются работы, относящиеся к направлениям физико-математических и технических наук (желательный объем 6-18 страниц). Все рукописи рецензируются.*

*Официальный сайт <http://mia.univer.kharkov.ua>*

*Наукове видання*

**Вісник Харківського національного університету  
№863**

Серія «Математичне моделювання. Інформаційні  
технології. Автоматизовані системи управління»  
Випуск 12.

*Збірник наукових праць*

Комп'ютерне верстання Н.В. Благіня

Підписано до друку 02.11.2009 р.  
Формат 70 × 108/16. Папір офсетний. Друк ризограф.  
Умовн. – друк. арк. – 22.9  
Обл. – вид. арк. – 26.6  
Тираж 100 прим.  
Ціна договірна

61077, м. Харків, пл. Свободи, 4  
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна.

Надруковано: ХНУ імені В. Н. Каразіна  
61077, Харків, пл. Свободи, 4.  
Тел.: 705-24-32