

УДК 519.6:622.812

## МОДИФИКАЦИЯ МЕТОДА КРУПНЫХ ЧАСТИЦ В ЗАДАЧЕ РАСЧЕТА АВАРИЙНЫХ ВЗРЫВОВ ГАЗОВОЗДУШНОЙ СРЕДЫ

БЕЛИКОВ А. С.<sup>1</sup>, *д.т.н., проф.*,  
НАЛИСЬКО Н. Н.<sup>2\*</sup>, *к.т.н., доц.*,  
БАРТАШЕВСКАЯ Л. И.<sup>3\*</sup>, *к.ф-м.н., доц.*,  
РАГИМОВ С. Ю.<sup>4\*</sup>, *к.т.н., доц.*

<sup>1</sup> Кафедра безопасности жизнедеятельности, Государственное высшее учебное заведение «Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры», ул. Чернышевского, 24а, г. Днепр, Украина, 49600, тел. +38 (0562) 47-16-01, e-mail: bgd@mail.pgasa.dp.ua, ORCID ID: 0000-0001-5822-9682

<sup>2\*</sup> Кафедра безопасности жизнедеятельности, Государственное высшее учебное заведение «Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры», ул. Чернышевского, 24а, г. Днепр, Украина, 49600, тел. +38 (0562) 47-16-01, e-mail: 59568@i.ua, ORCID ID: 0000-0003-4039-1571

<sup>3\*</sup> Кафедра физики, Государственное высшее учебное заведение «Национальный горный университет», пр. Д. Яворницкого, 19, г. Днепр, Украина, тел. +38(0562) 46-90-22, e-mail: kafedrazid@ukr.net, ORCID ID: 0000-0003-0205-2245

<sup>4\*</sup> Кафедра организации и технического обеспечения аварийно-спасательных работ Национальный университет гражданской защиты Украины, ул. Чернышевского 94, 61023, Харьков, Украина, тел +38 (057) 370-50-52, e-mail: sergragimov@ukr.net, ORCID ID: 0000-0003-0572-4465

**Цель.** Разработка эффективной схемы численного счета совместного решения задачи газовой динамики и химической кинетики горения газозвушной среды на основе метода крупных частиц. **Методы.** Математическое моделирование, численный эксперимент, анализ и обобщение и результатов. **Результаты.** Для совместного решения задачи газовой динамики и химической кинетики горения газозвушной среды предлагается ввести в численную схему метода крупных частиц концентрационную функцию, которая позволяет учитывать многокомпонентный состав газовой среды. Концентрационная функция дает возможность вводить в численную схему уравнения химической кинетики в виде уравнения Аррениуса и различать компоненты химической реакции и продукты горения. В задаче расчета детонационных взрывов возникают сильные градиенты давлений, которые, при выходе фронта ударной волны на границу «свободный выход» генерируют нефизические флуктуации параметра. Для исключения их влияния проводится анализ различных видов аппроксимации параметров в фиктивный слой расчетной схемы. Из анализа физических процессов найден эффективный вид граничных условий «свободный выход» для задачи распространения ударной волны в канале. **Научная новизна.** Модификация численного метода крупных частиц за счет введения концентрационной функции позволяет производить совместное решение задачи газовой динамики и химической кинетики взрывного горения газозвушной среды. Для корректной работы граничных условий свободный выход в условия разрывных течений разработана схема аппроксимации параметра в фиктивный слой на основе ударной адиабаты конкретного газа. **Практическая значимость.** Проведенная модификация метода крупных частиц позволяет проводить численный эксперимент по расчету безопасных расстояний при аварийных газовых взрывах в условиях угольных шахт, а также на основе расчета распространения ударной воздушной волны по каналу определять динамические нагрузки на взрывозащитные сооружения.

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

## МОДИФІКАЦІЯ МЕТОДУ ВЕЛИКИХ ЧАСТОК В ЗАДАЧІ РОЗРАХУНКУ АВАРІЙНИХ ВИБУХІВ ГАЗОПОВІТРЯНОГО СЕРЕДОВИЩА

БЕЛІКОВ А. С.<sup>1</sup>, *д.т.н., проф.*,  
НАЛИСЬКО М. М.<sup>2\*</sup>, *к.т.н., доц.*,  
БАРТАШЕВСЬКА Л. І.<sup>3\*</sup>, *к.ф-м.н., доц.*,  
РАГИМОВ С. Ю.<sup>4\*</sup>, *к.т.н., доц.*

<sup>1</sup> Кафедра безпеки життєдіяльності, Державний вищий навчальний заклад «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», вул. Чернишевського, 24-а, 49600, Дніпро, Україна, тел. +38 (0562) 47-16-01, e-mail: bgd@mail.pgasa.dp.ua, ORCID ID: 0000-0001-5822-9682

<sup>2\*</sup> Кафедра безпеки життєдіяльності, Державний вищий навчальний заклад «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», вул. Чернишевського, 24а, м. Дніпро, Україна, 49600, тел. +38 (0562) 47-16-01, e-mail: 59568@i.ua, ORCID ID: 0000-0003-4039-1571

<sup>3\*</sup> Кафедра фізики, Державний вищий навчальний заклад «Національний гірничий університет», пр. Яворницького, 19, м. Дніпро, Україна, тел. +38(0562) 46-90-22, e-mail: kafedrazid@ukr.net, ORCID ID: 0000-0003-0205-2245

<sup>4\*</sup> Кафедра організації та технічного забезпечення аварійно-рятувальних робіт Національний університет цивільного захисту України, вул. Чернишевського 94, 61023, Харків, Україна, тел. +38 (057) 370-50-52, e-mail: sergragimov@ukr.net, ORCID ID: 0000-0003-0572-4465

**Ціль.** Розробка ефективної схеми чисельного розрахунку спільного розв'язку завдачі газової динаміки й хімічної кінетики горіння газоповітряного середовища на основі методу великих часток. **Методи.** Математичне моделювання, чисельний експеримент, аналіз і узагальнення й результатів. **Результати.** Для спільного рішення задачі газової динаміки і хімічної кінетики горіння газоповітряної суміші пропонується ввести в чисельну схему методу великих часток концентраційну функцію, яка дозволяє враховувати багатоконпонентний склад газового середовища. Концентраційна функція дає можливість вводити в чисельну схему рівняння хімічної кінетики в вигляді рівняння Арреніуса і розрізняти компоненти хімічної реакції і продукти горіння. У задачі розрахунку детонаційних вибухів виникають сильні градієнти тисків, які, при виході фронту ударної хвилі на границю вільний вихід генерують нефізичні флуктуації параметра. Для виключення їх впливу проводиться аналіз різних видів апроксимації параметрів в фіктивний шар розрахункової схеми. З аналізу фізичних процесів знайдений ефективний вид граничних умов вільний вихід для задачі поширення ударної хвилі в каналі. **Наукова новизна.** Модифікація чисельного методу великих часток за рахунок введення концентраційної функції дозволяє отримувати спільне рішення задачі газової динаміки і хімічної кінетики вибухового горіння газоповітряної суміші. Для коректної роботи граничних умов вільний вихід в умови розривних течій розроблена схема апроксимації параметра в фіктивний шар на основі ударної адиабати конкретного газу. **Практична значимість.** Виконана модифікація методу великих часток дозволяє проводити чисельний експеримент з розрахунку безпечних відстаней при аварійних газових вибухах в умовах вугільних шахт, а також на основі розрахунку поширення ударної повітряної хвилі по каналу визначати динамічні навантаження на вибухозахисні споруди.

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

## A MODIFICATION OF THE METHOD OF LARGE PARTICLES IN THE PROBLEM OF THE CALCULATION OF AN ACCIDENTAL EXPLOSION OF AIR-GAS ENVIRONMENT

BELIKOV A. S.<sup>1</sup>, *Dr. Sc. (Tech.), Prof.*,  
NALISKO N. N.<sup>2\*</sup>, *Cand. Sci. (Tech.), Assoc. Prof.*,  
BARTASHEVSKAYA L. I.<sup>3\*</sup>, *Cand. Sci. (Phys.-Math.), Assoc. Prof.*,  
RAHIMOV S. Yu.<sup>4\*</sup>, *Cand. Sc. (Tech.), Assoc. Prof.*

<sup>1</sup> Department of Vital Activity Safety, State Higher Education Establishment «Pridneprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture», 24-A, Chernishevskogo st., Dnipro, 49600, Ukraine, phone +38 (0562) 47-16-01, e-mail: bgd@mail.pgasa.dp.ua, ORCID ID: 0000-0001-5822-9682

<sup>2\*</sup> Department of Vital Activity Safety, State Higher Education Establishment «Pridneprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture», 24-A, Chernishevskogo str., Dnipro, 49600, Ukraine, phone +38 (0562) 47-16-01, e-mail: 59568@i.ua, ORCID ID: 0000-0003-4039-1571

<sup>3\*</sup> Department of Physics, State Higher Educational Establishment «National Mining University», 19, Yavornitskogo str., Dnipro, 49600, Ukraine, phone +38 (0562) 46-90-22, e-mail: kafedrazid@ukr.net, ORCID ID: 0000-0003-0205-2245

<sup>4\*</sup> Department of Organization and technical support rescue operations National University of Civil Defence of Ukraine, st. Chernyshevsky 94, Kharkiv, 61023, Ukraine, phone +38 (057) 370-50-52, e-mail: sergragimov@ukr.net, ORCID ID: 0000-0003-0572-4465

**Purpose.** Development of an effective scheme for numerical calculation of the joint solution of the problem of gas dynamics and chemical kinetics of combustion of a gas-air medium on the basis of the large-particle method. **Methodology.** Mathematical modeling, numerical experiment, analysis and generalization and results. **Findings.** For joint solution of problems of gas dynamics and chemical kinetics of combustion gas environments proposed in the numerical scheme of the method of large particles concentration function, which allows to take into account the multicomponent composition of the gas medium. The concentration function makes it possible to introduce into the numerical scheme the equations of chemical kinetics in the form of the Arrhenius equation and to distinguish the chemical reaction components and combustion products. In the problem of calculating detonation explosions, strong pressure gradients arise which, when the front of the shock wave reaches the free exit boundary, nonphysical fluctuations of the parameter are generated. To exclude their influence on the process under consideration, various types of approximation of parameters in the fictitious layer of the design scheme are analyzed. From the analysis of physical processes an effective form of the boundary conditions is found for a free yield for the problem of propagation of a shock wave in a channel. **Originality.** Modification of the numerical method of large particles due to the introduction of a concentration function allows the joint solution of the problem of gas dynamics and chemical kinetics of explosive combustion of a gas-air medium. For correct operation of the boundary conditions, a free exit into the conditions of discontinuous flows is developed for the scheme of approximation of the parameter in a fictitious layer on the basis of the shock adiabat of a particular gas. **Practical value.** The

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

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

### Постановка проблемы

Современный уровень проектирования невозможен без применения математического моделирования процессов и, в частности, использования численных методов решения дифференциальных уравнений. Этому способствует значительный прогресс в увеличении вычислительных мощностей персональных компьютеров. Особенно это актуально для быстропротекающих аварийных процессов, последствия которых необходимо с достаточной степенью точности прогнозировать и учитывать в мероприятиях по защите персонала и уменьшению негативных последствий чрезвычайных ситуаций.

В условиях горных выработок угольных шахт наиболее опасные, разрушительные и с недостаточно прогнозируемыми последствиями виды аварий является поземные пожары и взрывы рудничной атмосферы. Прогнозирование параметров ударных воздушных волн в этих условиях является основной задачей для достоверного определения безопасных расстояний при проведении аварийных работ и определения динамических нагрузок для расчета устойчивости взрывозащитных сооружений [7].

### Анализ последних исследований и публикаций

Расчет параметров ударных воздушных волн интересовал исследователей очень давно. Изначально для оценки последствий взрывов на промышленных объектах и в военном деле использовались эмпирические методы, которые обобщали данные произошедших взрывов. Позже стали использоваться экспериментальные методы. Так при моделировании взрывных процессов, на основании закономерностей подобия был сформулирован принцип «кубического корня» Хопкинса-Кранца, который положен в основу прогнозирования последствий точечных взрывов:

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

где  $R$  – расстояние от центра заряда,  $E$  – полная энергия взрыва.

Данный принцип заложен в формуле А. Садовского, которая до настоящего времени используется в нормативных документах по расчету взрывных нагрузок на инженерные сооружения (атомные электростанции, укрытия) от действия ударных воздушных волн:

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

где  $\Delta P_{\phi}$  – избыточное давление во фронте УВВ,  $G$  – масса ВВ в тротиловом эквиваленте,  $R$  – расстояние от точки взрыва.

В условиях горных выработок так же использовались экспериментальные методы. Действующие нормативные методики по расчету параметров ударных волн в горных выработках, основаны на данных натурных измерений, проведенных А. М. Чеховских и В. И. Гудковым.

В последнее десятилетие для расчета параметров ударных воздушных волн применяется численное моделирование разрывных газодинамических течений. Так в работе [4] используется метод конечных разностей для решения систем уравнений газовой динамики, который позволяет получать значения многих параметров распространения ударных воздушных волн по сети выработок. В работе [6] показано применение данного метода в программном комплексе FIRE<sup>®</sup> для расчета параметров детонации. Как показано в работах А. А. Самарского, сложность применения данного метода состоит в построении однородных разностных схем для расчета разрывных течений. Последние перемещаются по массе, а параметры течения по обе стороны от разрыва связаны условием Гюгонио, что вызывает резкие колебания сеточной функции за фронтом ударной волны (рис. 1).

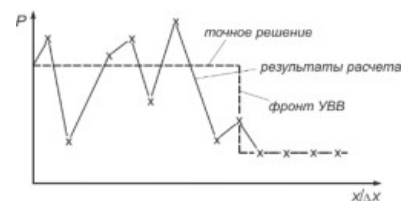


Рис. 1. Расчет движения ударной волны / Calculation of the motion of the shock wave

Для решения этого вопроса в численной схеме необходимо использовать метод «размазывания» фронта за счет введения в систему разностных уравнений диссипативных членов (псевдовязкости).

### Выделение нерешенных ранее частей общей проблемы

Более устойчивым в расчетах разрывных течений является метод крупных частиц за счет наличия в разностных схемах схемной вязкости. В работе [8] данный метод применяется для расчета аварийных взрывов в условия камеры газовых котлов. Однако, в расчете не учитывается кинетика процесса взрывного горения газовых смесей, которая обуславливает параметры ударной волны. При расчете разрывных

течений как правило возникает проблема постановки корректных условий на искусственных границах расчетной области. В задаче расчета детонационных взрывов возникают сильные градиенты давлений, которые, при выходе фронта ударной волны на границу свободный выход генерируют нефизические флуктуации параметра. Для исключения их влияния на процесс необходимо устанавливать границы на значительных расстояниях, что сильно увеличивает объемы вычислений.

### Формулировка целей статьи

Разработка эффективной схемы численного счета совместного решения задачи газовой динамики химической кинетики горения газовой смеси на основе метода крупных частиц.

### Изложение основного материала

Для расчета процесса взрыва газовой смеси и распространения ударных воздушных волн в горных выработках предлагается использовать метод крупных частиц (метод Давыдова) [1]. Основные положения этого метода в рассматриваемых условиях следующие.

Движение среды в цилиндрической системе координат описывается уравнениями Эйлера – неразрывности, движения, энергии:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{W}) &= 0, \\ \left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \bar{W}) + \frac{\partial P}{\partial z} &= -\tau_{mp} \frac{\Pi}{S}, \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v \bar{W}) + \frac{\partial P}{\partial r} &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (1) \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E \bar{W}) + \operatorname{div}(P \bar{W}) &= q \Pi + q_x \rho \frac{\partial \alpha}{\partial t}, \end{aligned}$$

где  $\rho$  – плотность;  $P$  – давление;  $\bar{W}$  – вектор скорости;  $u, v$  – компоненты скорости  $W$  по оси  $z$  и  $r$  соответственно;  $z, r$  – цилиндрические координаты;  $E$  – полная энергия;  $\tau_{mp}$  – напряжение поверхностных сил трения газового потока о стенку;  $q$  – плотность теплового потока в стенку канала;  $S, \Pi$  – поперечное сечение и периметр выработки;  $q_x$  – тепловой эффект химической реакции горения углеводородов;  $\alpha$  – мольная доля углеводорода в шахтной атмосфере;  $t$  – время.

Для замыкания этой системы используется уравнение состояния идеального газа:

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

где  $\gamma$  – показатель адиабаты.

Рассматриваемая задача решена в цилиндрической системе координат, в которой расчетная область представлена в виде цилиндрического канала. По сути, такая схема представляет собой ударную трубу с участком, заполненным газовой смесью. Быстрое горение смеси (дефлаграция или детонация) вызывает формирование и распространение ударных воздушных волн в цилиндрическом канале (рис. 2).

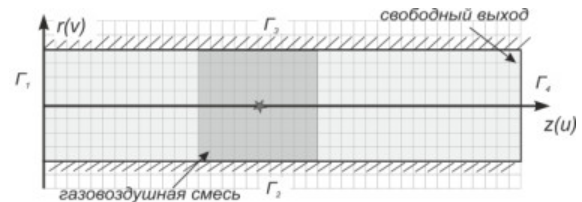


Рис. 2. Общая структура расчётной сетки в плоском представлении:  $\Gamma_1, \Gamma_4$  – тип границы расчетной области «свободный выход»,  $\Gamma_2, \Gamma_3$  – тип границы расчетной области «непротекание»;  $v, u$  – компоненты вектора скорости / General structure of the computational grid in the plan view:  $\Gamma_1, \Gamma_4$  – type of the boundary of the calculated area "free exit",  $\Gamma_2, \Gamma_3$  – type of the boundary of the computational domain "non-flow";  $v, u$  – are the components of the velocity vector

Схема метода крупных частиц, вопросы его устойчивости и порядка аппроксимации достаточно подробно рассмотрены в литературе. Разностная схема решения нестационарных системы дифференциальных уравнений (1) основывается на идее расщеплении этой системы по физическим процессам. Задача решается в три этапа: эйлеров, лагранжев и заключительный. На эйлеровом этапе, промежуточные значения скорости  $\tilde{u}, \tilde{v}$  и энергии потока  $\tilde{E}$  определяются из условия «замораживания» поля плотности ( $\partial \rho / \partial t = 0$ ).

На лагранжевом этапе вычисляем перетоки вещества за время  $\Delta t$  между ячейками по следующим алгебраическим уравнениям, полученным из численной аппроксимации уравнения неразрывности (1).

На заключительном этапе рассчитываются новые значения всех параметров потока с учетом перетока масс.

В результате этих расчётов нам становятся известными величины  $\rho^{n+1}, u^{n+1}, v^{n+1}, E^{n+1}$  на новом временном слое.

Зная эти величины, можно определить внутреннюю энергию  $J = \frac{E - W^2}{2}$ , где  $W^2 = u^2 + v^2$ , а следовательно, определить значение давления по формулам уравнений состояния.

Изначально, численная схема метода крупных частиц позволяет рассчитывать течения в однокомпонентных газовых системах. В рассматриваемом случае необходимо учитывать горение газовой смеси, причем горючим компонентом может быть несколько, т.е. в расчетной ячейке могут присутствовать сразу несколько веществ, поэтому для расчёта давления в ней необходимо знать концентрации этих веществ. Для этой цели вводится концентрационная функция  $C_{i,j}^n(k)$ , для которой, например,  $k = 1$  соответствует углеводороду (метан),  $k = 2$  – кислород,  $k = 3$  – азот.

Перед тем как рассчитать потоки массы через поверхность расчетной ячейки (3), (4), необходимо знать массивы  $C_{i,j}^n(k)$ , т.е. знать концентрации веществ. Это задается начальными условиями. При

расчетах потоков массы через границы счётных ячеек, после введения  $C_{i,j}^n(k)$ , учитывается тот факт, что общий поток массы равен сумме потоков масс отдельных компонентов. Для этого вначале рассчитываются общие потоки массы, затем потоки отдельных компонентов (предполагается односкоростная модель). Для этого производится замена  $\rho_{i,j} \rightarrow \rho_{i,j} C_{i,j}$ . Таким образом, определяются

$$\rho_{i,j}^n(\alpha), \quad \alpha = 1..3.$$

После этого определяем концентрации:

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

Расчёт давления необходимо вести по формуле:

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

где  $P_{i,j}^{n+1}(\alpha)$  – парциальное давление определяется по уравнениям состояния для каждой компоненты газовой среды.

Применение концентрационной функции позволяет решить кинетические уравнения химической реакции. Химическая реакция представляется в виде одной брутто-стадии: «исходные вещества  $\rightarrow$  продукты», а скорость реакции представляется в форме Аррениуса. В нашем случае протекают бимолекулярные реакции, поэтому уравнение (3) по компоненту «метан» имеет вид:

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

Из макрокинетического уравнения горения метана следует, что скорость расходования кислорода в 2 раза больше скорости расходования метана:

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

Проинтегрировав по времени уравнение (5), получим  $c_2 = 2c_1 + A$ , где  $A$  – постоянная интегрирования, которую можно определить из начальных условий:

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

Индекс “H” указывает на начальные значения концентраций.

В результате получим:

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

Таким образом, зная зависимость изменения концентрации от времени  $c_1(t)$ , определяем по формуле (6) функцию  $c_2(t)$ .

Пусть в начальный момент времени  $c_1 = c_{1H}$ , поэтому  $c_2 = c_{2H}$ . При полном выгорании метана  $c_1 = 0$ , концентрация кислорода будет равна:  $c_2 = c_{2H} - 2c_{1H}$ .

При стехиометрическом составе  $c_{2H} = 2c_{1H}$ .

Поэтому метан и кислород полностью выгорают одновременно  $c_1 = 0$ ,  $c_2 = 0$ . Если,  $c_{2H} > c_{1H}$ , то  $c_2 > 0$ ,

т.е. наблюдается остаток  $O_2$ . При  $2c_{2H} < c_{1H}$

кислород выгорает раньше, а остаток метана равен

$$c_1 = c_{1H} - \frac{c_{2H}}{2}.$$

Для описания реакции горения метан-кислород следует особо отметить, что в уравнении (4) в качестве концентрации “c”, используется количество вещества (в молях), приходящегося на единицу объема в  $см^3$ , т.е. размерность  $[c] = \text{моль}/\text{см}^3$ .

В уравнение газовой динамики входит плотность вещества. Химическая реакция не меняет эту величину, так как исходные вещества просто заменяются продуктами реакции. Поэтому, гомогенные плотности веществ, входящих в состав атмосферы нам понадобятся только для задания начальных условий.

Численное решение уравнения химической кинетики совместно с уравнениями газовой динамики и уравнениями состояния выглядит следующим образом. Разностный аналог уравнения (4) представлялся в виде:

$$-\frac{[c_1]_{i,j}^{n+1} - [c_1]_{i,j}^n}{\Delta t} = k \cdot ([c_1]_{i,j}^n)^{v_1} \cdot ([c_2]_{i,j}^n)^{v_2},$$

где  $k = Z \cdot \exp(-E_a/RT)$  – константа скорости химической реакции горения;  $i, j$  – целочисленные координаты расчетной ячейки (крупной частицы);  $n$  – номер временного слоя.

Из уравнений (3), (5) следует:

$$[c_1]_{i,j}^{n+1} = [c_1]_{i,j}^n - \Delta t \cdot k \cdot ([c_1]_{i,j}^n)^{v_1} \cdot ([c_1]_{i,j}^n)^{v_2},$$

$$[c_2]_{i,j}^{n+1} = [c_2]_{i,j}^n + 2([c_1]_{i,j}^{n+1} - [c_1]_{i,j}^n).$$

При расчете уравнения сохранения энергии в правую часть добавляется слагаемое:

$$\Delta t \cdot Q \cdot Z \cdot \exp(-E_a/RT) \cdot ([c_1]_{i,j}^n)^{v_1} \cdot ([c_2]_{i,j}^n)^{v_2}$$

где  $Q$  – теплотворная способность горения метана в воздухе при стехиометрическом составе метан-кислород, Дж/м<sup>3</sup>.

На границах расчётной области  $j = jm$ ,  $i = im$  необходимо задавать условия, которые не искажают параметры в расчётной области. Для этого вводят фиктивные расчётные ячейки, в которых значения параметров определяются экстраполяцией (рис. 3а). Согласно алгоритму МКЧ на неотражающих границах можно использовать экстраполяции нулевого, первого и второго порядка. Для границ  $\Gamma_2$ ,  $\Gamma_3$  используются условие непротекания.

Выбор порядка экстраполяции для неотражающей границы  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_4$  выполнен на основе исследования тестовой задачи – взрыв газового облака в неограниченном пространстве (рис. 3б).

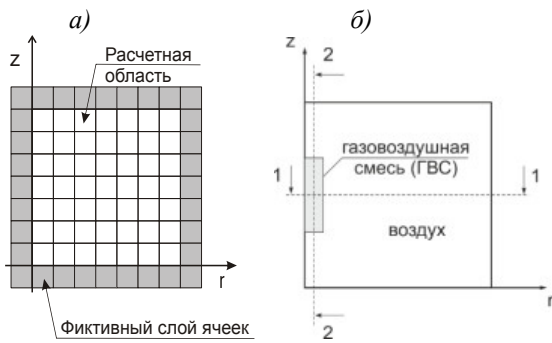


Рис. 3. Структура расчётной сетки (фиктивные ячейки заштрихованы) – а, и схема тестовой задачи выбора порядка экстраполяции – б / The structure of the computational grid (fictitious cells are shaded) – a, and the scheme of the test problem of choosing the order of extrapolation – b

Нулевая экстраполяция  $y_{im+1,j} = y_{im,j}$   $y_{i,jm+1} = y_{i,jm}$  даёт "срезанные" значения параметра (рис. 4). Линейная экстраполяция параметров может быть получена из следующих соображений (рис. 5):

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

$$= y_{im} + \frac{y_{im} - y_{im-1}}{\Delta x} = 2y_{im} - y_{im-1};$$

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

Правые (или левые) производные линейной экстраполяции дают завышенные значения параметров в фиктивной ячейке. Наиболее приемлемые значения получаются при применении центральной производной, которая в большей степени учитывает градиент графика в окрестности границы расчётной области (рис. 5):

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

$$= y_{im} + \frac{y_{im} - y_{im-2}}{2} = \frac{3}{2}y_{im} + \frac{1}{2}y_{im-2}$$



Рис. 4. Аппроксимация параметра в фиктивном слое / Approximation of a parameter in a fictitious layer

Уравнение экстраполяции параметров ударной волны в фиктивной ячейке 2-го порядка:

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

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

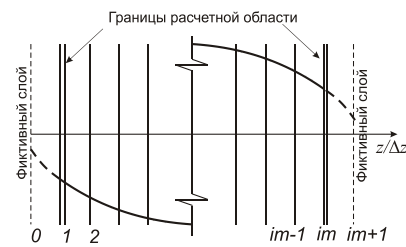


Рис. 5. Выход ударной волны на границе расчётной области при линейной экстраполяции / Shock wave output at the boundary of the calculated region for linear extrapolation

После подстановки получим:

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

Анализ результатов расчета значений параметров, определённых по формуле (4), показал, что они являются весьма завышенными (рис. 5). Таким образом, наиболее приемлемым является использование линейной экстраполяции параметров.

Однако такой вид экстраполяции возможен при малых градиентах функции. При разрывных характеристиках, т.е. во фронте ударной волны, линейная аппроксимация приводит к возникновению противоположных по знаку значений параметра, что противоречит физическому смыслу задачи (рис. 6). В расчёте это проявляется возникновением генерации колебаний давлений после прохождения пика ударной волны через границу (рис. 7).

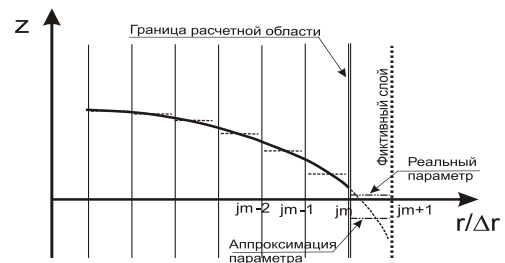


Рис. 6. Аппроксимация параметра в отрицательную область / Approximation of the parameter in the negative region

Подобный эффект наблюдается и при нулевой аппроксимации: в момент выхода ударной волны на границу расчётной области, в фиктивном слое, возникают давления, равные амплитуде в ударной волне. Образуется эффект торможения потока на границе «свободный выход».

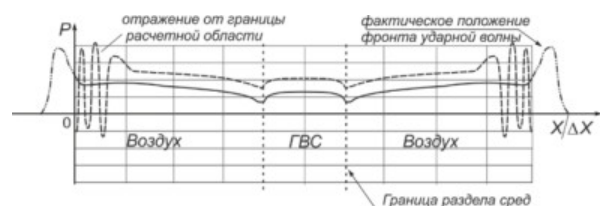


Рис. 7. Генерация скачков давления при аппроксимации параметра в отрицательную область на неотражающей границе / Generation of pressure jumps when the parameter is approximated to the negative region at the nonreflecting boundary

Проблемы корректной работы неотражающих граничных условий (НГУ) существуют в практически во всех численных схемах при расчете разрывных течений [2]. Для обеспечения НГУ на открытых границах, пользуются различными приемами: присоединяют буферные объемы с расчетными ячейками, применяют эвристические зависимости давления от времени релаксационного процесса или используют одномерное характеристическое НГУ. Такие приемы ориентированы на решение конкретной задачи [3].

Задача нахождения корректного решения выполняется проведением совместного исследования граничных условий и физических процессов. Так в работе [2] экстраполяция нулевого порядка для скорости потока определяется соотношением, полученным из условий Гюгоню на скачке уплотнений:

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

где  $a_\infty$ ,  $\rho_\infty$ ,  $p_\infty$  – скорость звука, плотность и давление в невозмущенном потоке газа.

В рассматриваемой задаче ударная волна распространяется по смеси газов и значение ее амплитуды в следующий момент времени зависит от термодинамических свойств этой смеси. Давление в газе имеет тепловое происхождение, оно связано с переносом импульса частицами, участвующими в тепловом движении и всегда определяется видом ударной адиабаты, т.е. пропорционально объему и температуре, а в ударной воздушной волне и скорости движения потока. Поэтому для определения избыточного давления в фиктивной ячейке можно получить уравнение ударной адиабаты в системе  $P-U$ . Согласно работ Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер (1966) зависимость между скоростью фронта УВВ и скоростью вещества за фронтом волны, в широком диапазоне амплитуд, является линейной:

$$D = A + Bu, \tag{7}$$

где  $A$ ,  $B$  – коэффициенты.

Так же известна скорость движения фронта УВВ:

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

где  $\rho_a$ ,  $\rho$  – плотность газа, атмосферная и в ударной волне.

Решая совместно уравнения (5), (6) получим условие "мягкой" стенки:

$$\Delta P_{jm+1} = \frac{(A + B \cdot u_{jm+1})^2}{V_a - V},$$

где  $u_{jm+1}$  – скорость вещества в фиктивной ячейке;  $V_a$ ,  $V$  – удельная плотность газа.

В формуле (5) значение  $A$  близко к скорости звука в веществе и задаётся таблично. Значение

коэффициента  $B$  определяем по граничной ячейке, решая уравнения (7), (8) относительно  $B$ :

$$B = \frac{\sqrt{\Delta P(V_a - V)} - A}{u_{jm}}, \tag{9}$$

Использование зависимости (9) также имеет свою особенность. Величину скорости вещества в ней для граничной ячейки логично определять как полную скорость:  $\bar{U}_{jm} = \sqrt{u_{jm}^2 + v_{jm}^2}$ . Однако это не дает правильных результатов вычисления давлений в фиктивных ячейках по двум причинам. Первое: при расчете  $\bar{U}_{jm}$  на нижней границе происходит потеря знака в направлении скорости, так как скорость имеет отрицательное значение при движении вещества вниз (рис. 8).

Второе: расчет перетока вещества согласно МКЧ определяется через границы ячейки, то есть строго по вертикали или по горизонтали.

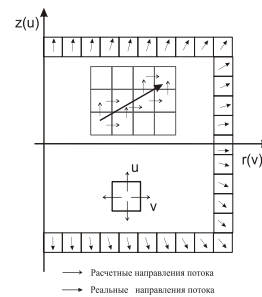


Рис. 8. Направление движения вещества в фиктивных ячейках и расчетное направление потока / Direction of substance movement in fictitious cells and estimated flow direction

Реальная скорость вещества в ячейках на периферии от осей симметрии будет направлена под углом к ним (максимально  $45^\circ$ ). Поэтому давление в крайних фиктивных ячейках будет определено неверно. Для исключения таких явлений в выражении (7) в качестве скорости должна использоваться соответствующая компонента скорости потока.

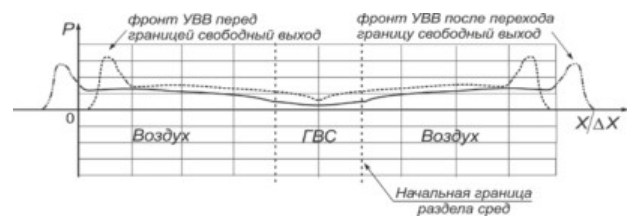


Рис. 9. Переход фронта ударной волны через границу свободный выход с условием «мягкая» стенка / The transition of the front of the shock wave through the boundary is a free exit with the condition "soft" wall

В расчете это реализуется установлением отдельных условий для левой, правой, верхней и нижней границ расчетной области.

МКЧ предполагает выполнение трех этапов расчетов. Соответственно и граничные условия выполняются в конце каждого этапа. Для устойчивости счета необходимым и достаточным

условием является применение "мягкой" границы в заключительной части Лагранжевого этапа для расчета давлений, а граничные условия в Эйлеровом этапе должны определяться по нулевой аппроксимации из-за промежуточного характера результатов. В результате, расчетная схема позволяет корректно выполнить переход фронта ударной волны через границу расчетной области (рис. 9).

#### Выводы

Модификация метода крупных частиц позволяет расширить область его применения на совместное решение задач газовой динамики и химической кинетики горения газоздушных смесей. Условие «мягкой» стенки позволяет не искажать параметры разрывных течений при переходе границы вычислительной области и, таким образом, дает возможность уменьшить объемы вычислений за счет уменьшения размеров расчетной области.

#### СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Егоров, М. Ю. Метод Давыдова – современный метод постановки вычислительного эксперимента в ракетном твердотопливном двигателестроении / М. Ю. Егоров // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Серия: Аэрокосмическая техника. – 2014.– № 37.– С. 6-70.
2. Ильгамов, М. А. Неотражающие условия на границах расчетной области / М. А. Ильгамов, А. Н. Гильманов.– М.: Физматлит, 2003. – 240 с.
3. Лидский Б. В. Неотражающие граничные условия на открытых границах для сжимаемых и несжимаемых многомерных течений. / Б. В. Лидский, В. С. Посвянский, С. М. Фролов [и др.] // Горение и взрыв. Выпуск 2. Под ред. С. М. Фролова.– М.: Торус Пресс, 2009.– С. 31-35.
4. Математическое моделирование нестационарных процессов вентиляции сети выработок угольной шахты / И. М. Васенин, Э. Р. Шрагер, А. Ю. Крайнов, Д. Ю. [и др.] // Компьютерные исследования и моделирование.– 2011.– Т.3 № 2.– С. 155-163.
5. Поландов, Ю. Х. Влияние места расположения источника воспламенения в помещении на развитие взрыва газа / Ю. Х. Поландов, В. А. Бабанков // Пожаровзрывобезопасность.– 2014.– № 3.– С. 68-74.
6. Скоб, Ю. А. Численное моделирование детонации в газовых смесях / Ю.А. Скоб, М.Л. Угрюмов // Вісник Харківського національного університету.– 2013.– № 1058.– С 149-157.
7. Chernay, A.V., Nalisko, N.N. and Bartashevskaya, L.I. (2017), "Regularities ignition gas mixture the heat source associated with accidental emissions gas", *The scientific heritage (Budapest, Hungary)*, no. 10(10), vol. 3, pp. 58-66.

#### REFERENCES

1. Egorov M.Yu. *Metod Davydova – sovremennyy metod postanovki vychislitel'nogo eksperimenta v raketnom tverdotoplivnom dvigatelestroenii* [Davydov's method is a modern method of placing the computational experiment in solid propellant engine]. *Vestnik Permskogo natsional'nogo issledovatel'skogo politekhnicheskogo universiteta. Seriya: Aerokosmicheskaya tekhnika* [PNRPU Aerospace Engineering Bulletin]. (2014), no. 37, pp. 6-70. (in Russian).
2. Ilgamov M.A. and Gilmanov A.N. *Neotrazhaiushchiye usloviia na granitsakh raschetnoy oblasti* [Non-reflecting conditions on boundaries of computational domain]. Moscow: Fizmatlit, 2003, 240 p. (in Russian).
3. Lidskiy B.V., Posvyanskiy V.S. and Frolov S.M. *Neotrazhayushchiye granichnyye usloviia na otkrytykh granitsakh dlia szhimayemykh i neszhimayemykh mnogomernykh techeniy* [Nonreflecting boundary conditions on open boundaries for compressible and incompressible multidimensional flows]. *Goreniye i vzryv* [Combustion and explosion]. Editor-in-Chief and Chair of Editorial Council Professor S.M. Frolov. 2009, Vol. 2, pp. 31-35. (in Russian).
4. Vasenin I.M., Shragr E.R., Kraynov A. Yu. and Paleev D. Yu. *Matematicheskoye modelirovaniye nestatsionarnykh protsessov ventilatsii seti vyrabotok ugol'noy shakhty* [The mathematical modelling of nonsteady ventilation processes of coal mine working net]. *Kompyuternyye issledovaniia i modelirovaniye* [Computer researches and modelling]. 2011, Vol. 3, no. 2. pp. 155-163. (in Russian).
5. Polandov Yu.H. and Babankov V.A. *Vliianiye mesta raspolozheniia istochnika vosplamneniia v pomeshchenii na razvitiye vzryva gaza* [The effect of the location of the source of ignition in the premises for the development of gas explosion]. *Pozharovzryvobezopasnost* [Fire and Explosion Safety]. 2014, no. 3, pp. 68-74. (in Russian).
6. Skob Yu.A. *Chislennoye modelirovaniye detonatsii v gazovykh smesiakh* [Numerical modeling of detonation in gas mixtures]. *Visnyk Kharkivskoho natsionalnoho universytetu* [The Journal of V.N.Karazin Kharkiv National University]. 2013, no. 1058, pp. 149-157. (in Russian).
7. Chernay A.V., Nalisko N.N. and Bartashevskaya L.I. (2017), "Regularities ignition gas mixture the heat source associated with accidental emissions gas", *The scientific heritage (Budapest, Hungary)*, no. 10(10), vol. 3, pp. 58-66.