

Верификация модели распространения волн избыточного давления программного комплекса TOXI+CFD



В.А. Шаргатов,
канд. физ.-мат.
наук, доцент



С.И. Сумской,
канд. техн. наук,
ст. преподаватель



А.С. Софьин,
канд. техн. наук,
зав. отделом,
toxi@safety.ru

НИЯУ МИФИ, Москва, Россия

ЗАО НТЦ ПБ,
Москва, Россия

Описаны актуальность, постановка задачи, подходы, структура, ход разработки, основные уравнения и метод решения, а также особенности проведения расчетов отечественного программного комплекса TOXI+CFD, который позволит моделировать образование и взрывы облаков топливно-воздушных смесей в трехмерном загроможденном пространстве. Разработан и реализован программный код для расчета распространения волн избыточного давления в окружающей среде. Проведена верификация полученных с помощью TOXI+CFD результатов путем сравнения с аналитическим решением задачи Сода, а также экспериментальными исследованиями ударных волн в бронеканере.

Ключевые слова: численное моделирование, гидродинамика, ударные волны, трехмерные модели, программный комплекс, верификация, эксперимент, метод Годунова — Колгана, TOXI+CFD.

DOI: 10.24000/0409-2961-2018-6-44-52

Введение

Одной из актуальных задач в области промышленной безопасности является математическое моделирование последствий взрывных процессов при аварийных выбросах топливно-воздушных смесей (ТВС). В отечественной практике такие подобные расчеты проводятся в рамках количественного анализа риска (КОР) при декларировании промышленной безопасности опасного производственного объекта (ОПО), разработке планов ликвидации аварийных ситуаций [1], а также при проектировании ОПО для оценки устойчивости зданий к внешним ударно-волновым нагрузкам [2].

Выполнение таких расчетов осуществляется в несколько стадий в соответствии с возникающими при аварии физическими процессами: выброс пожаро-взрывоопасных веществ из технологического оборудования в окружающую среду; образование облаков ТВС; дрейф и рассеяние облаков ТВС в атмосфере; попадание источника зажигания в облако ТВС и воспламенение облака; горение (взрыв) облака ТВС с образованием волн повышенного давления или ударных волн (УВ); распространение УВ в воздухе и взаимодействие их с объектами окружающей среды (здания, технологическое оборудование, рельеф местности и т.д.). Рекомендации по расчету этих процессов подробно изложены в руководствах по безопасности Ростехнадзора, а также в нормативно-методических документах по пожарной безопасности и сводятся к применению параметрических и интегральных мате-

матических моделей физических процессов. Обычной платой за условную простоту их применения является высокая консервативность получаемых результатов расчетов. Например, в работе [3] показано, что параметрические модели процессов «горение (взрыв) облака ТВС» и «распространение УВ» могут завышать размеры зон поражения УВ в несколько раз. Такая высокая погрешность вычислений в целом оправдана в рамках КОР из-за необходимости рассмотрения большого числа аварийных сценариев, а также «компенсации» последствий невысокой частотой реализации аварии. Однако результаты расчетов по этим моделям часто становятся камнем преткновения при проектировании ОПО с учетом требования взрывоустойчивости зданий [3, 4]. Другим недостатком общепринятых интегральных и параметрических подходов является ограниченность их применения для случаев компактного размещения оборудования и строений. Так, например, параметрические модели взрыва ТВС [3] базируются на допущении о сферической форме УВ, которая изначально может быть далека от сферической из-за сложной конфигурации облака ТВС либо может быть нарушена при столкновении с препятствием, соизмеримым с волной.

CFD-подходы и промышленная безопасность

Указанные недостатки могут быть устранены при использовании более сложных методических подходов, основанных на численном решении системы уравнений гидрогазодинамики (так называемые ме-

тоды CFD — Computational Fluid Dynamics). В основе такого моделирования лежит подход, базирующийся на стандартных уравнениях в частных производных, выражающих законы сохранения массы, импульса и энергии. Данные уравнения могут быть записаны в различных пространственных постановках: одно-, двух- или трехмерных. Так, например, одномерные модели течения жидкости активно применяются для расчета аварийных утечек и явления гидроудара в трубопроводных системах [5]. Множеством полезных возможностей обладают одномерные модели центро- и осесимметричных взрывов [6–8]. Однако наибольший интерес вызывают модели в многомерных постановках. Даже двухмерные расчеты (2D, например [9, 10]) позволяют решать широкий круг задач в постановке, наиболее приближенной к реальной конфигурации ОПО. Расчет же по трехмерным моделям позволяет описать течение с разрешением почти всех характерных особенностей.

Рекомендации к содержанию таких 3D-моделей представлены в относительно недавно опубликованном руководстве по безопасности [11]. Конечно, реализация положений методики [11] является довольно сложной задачей: как с точки зрения математической постановки, выбора схемы решения, так и с точки зрения ее инженерной реализации. Проведение высокоточных расчетов по подобным моделям часто требует привлечения компьютерных ресурсов, превышающих возможности настольного персонального компьютера. Принципиально такие программные коды должны поддерживать технологии кластерных вычислений, что накладывает дополнительные сложности при их разработке.

Несмотря на высокую эффективность, в настоящее время CFD-подходы в области промышленной безопасности не получили распространения в нашей стране в основном из-за отсутствия на рынке специализированных программных средств, соответствующих [11]. Также нельзя говорить и о широком использовании таких программ за рубежом: можно выделить лишь несколько коммерческих программных продуктов, посвященных тематике промышленных аварий: FLACS [12–14] и KFX [15, 16]. Применение их в России затруднено по многим причинам, например, не изучался вопрос о соответствии подходов, реализованных в программах, рекомендациям Ростехнадзора, что приводит к необходимости обосновывать их использование в каждом конкретном случае. Эти достаточно сложные программы не имеют описания, технической поддержки и курсов на русском языке и отличаются довольно высокой стоимостью.

Существуют также работы по использованию универсальных программ для CFD-моделирования в задачах промышленной безопасности [17–19], однако такие подходы более приемлемы для проведения научных изысканий, чем инженерных расчетов, из-за необходимости выбора между альтернативными

ми моделями физических процессов, задания сложных граничных условий, например при описании атмосферы и т.д.

Структура программного комплекса TOXI+CFD

С учетом вышеизложенного представляет интерес разработка отечественного специализированного программного комплекса, который бы позволял решать перечисленные в начале статьи задачи, связанные с моделированием последствий взрывов облаков ТВС в трехмерной постановке с использованием CFD-методов. Создание такой программы, получившей рабочее название TOXI+CFD, в настоящее время ведется в ЗАО НТЦ ПБ.

Программный комплекс состоит из трех основных компонентов, типичных для подобного программного обеспечения:

- препроцессора — модуля, содержащего графический интерфейс пользователя для задания исходных данных, в том числе 3D-геометрии;

- процессора — кроссплатформенного расчетного ядра с поддержкой технологии кластерных вычислений MPI [20] для выполнения основных расчетов;

- постпроцессора — модуля для обработки и визуализации результатов, полученных при расчетах.

В качестве основы для создания интерфейса пользователя выбрана программная платформа с открытым исходным кодом SALOME [21]. Данная платформа представляет собой оболочку, которая объединяет и позволяет взаимодействовать между собой модулям, разработанным по определенным правилам. Ее главная особенность — наличие уже готовых модулей:

- редактор 3D-графики (модуль GEOMETRY);

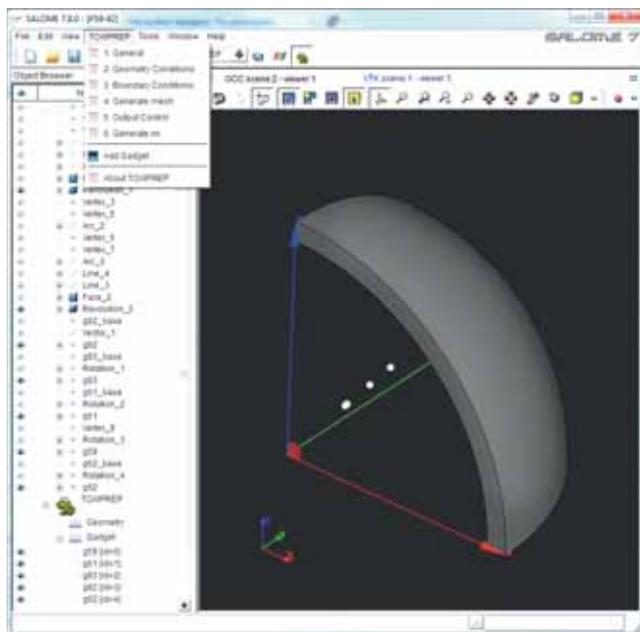
- различные построители расчетных сеток;

- постпроцессор ParaVis, разработанный на основе популярной программы ParaView для визуализации различных типов данных.

Программная платформа с открытым исходным кодом SALOME предоставляет возможность работы на операционных системах Windows и Linux.

Для задания расчетных конфигураций задачи (размещение исходных сред, препятствий, датчиков и т.д.), предназначенных передаче процессору для проведения расчетов, разработан специальный модуль (TOXIPREP) к SALOME, который совершенствуется по мере развития возможностей расчетного ядра TOXI+CFD (рис. 1). Этот модуль с помощью графического интерфейса позволяет ввести все необходимые данные для решения задачи. На рис. 1 представлен пример задания таких данных: серая арка — элемент загромождения, белые точки — местоположение датчиков давления, красная часть сферы в начале координат — область с газом, находящимся под давлением.

Расчетное ядро программы позволяет моделировать распространение волн повышенного давления в окружающем пространстве, вызванных физическим



▲ **Рис. 1. Расчетная модель и интерфейс TOXI+CFD**
 ▲ **Fig. 1. Calculation model and user's interface TOXI+CFD**

взрывом газа. Цель данной работы — проверка адекватности разработанного вычислительного блока.

Особенности проведения расчетов в TOXI+CFD

В основе модели лежит подход руководства по безопасности [9]. Задание исходных данных для расчета проводится в несколько этапов. Вначале пользователь должен создать трехмерные геометрические объекты окружающей среды. Простейшие фигуры (сфера, параллелепипед, конус, цилиндр) могут быть заданы непосредственно в модуле TOXIPREP. Если речь идет о сложной геометрии (например, 3D-модели ОПО), то она может быть создана или загружена из файлов в форматах BREP, STEP, IGES, STL, XAO в модуле GEOMETRY. Далее в TOXIPREP определяются параметры каждого геометрического объекта: объекты могут быть твердыми телами или содержать вещества в газовой фазе. Для последних упомянутых объектов задаются следующие характеристики: объемные доли веществ в газовой фазе, содержащиеся в объеме геометрического объекта (смеси газов), а также давление, температура или плотность. В областях, не занятых геометрическими фигурами, также определяются аналогичные условия по умолчанию. Метод моделирования предполагает разбиение расчетной области на элементарные объемы — ячейки, имеющие форму параллелепипедов. Расчетная область также имеет форму параллелепипеда с заданными пользователем размерами. Расчетная область, разделенная на ячейки, образует расчетную сетку задачи. В узлах этой сетки выполняется решение системы уравнений гидродинамики. Программа поддерживает работу с равномерными (все ячейки имеют одинаковый размер), неравномерными (ячейки могут иметь разный размер, но узлы сетки сосед-

них ячеек должны совпадать) и расширяющимися сетками (равномерная сетка, ячейки которой могут увеличиваться в объеме в процессе расчета).

Начальные и граничные условия в ячейках автоматически определяются параметрами геометрической фигуры, в которой находится ячейка. Если фигура представляет собой твердое тело, то на грани ячейки накладываются граничные условия «жесткая стенка». Если ячейка находится в газовом объеме, то ячейке присваиваются параметры этого объема (параметры смеси газов, давление, температура и т.д.) в качестве начальных условий.

От числа ячеек в расчетной области зависит точность получаемого решения. Поэтому при проведении расчетов следует просчитать несколько вариантов задач с разным числом ячеек для определения влияния размеров ячейки на результат.

В заключение задаются граничные условия на гранях расчетной области. Они могут быть четырех видов: жесткая стенка с прилипанием (скорость среды на стенке равна 0); жесткая стенка без прилипания; неотражающее условие, а также граница, адаптирующаяся к процессу распространения УВ (граница отодвигается от УВ, увеличивая размер расчетной области, когда УВ подходит к такой границе на расстояние, меньшее, чем пять ячеек сетки).

Модуль TOXIPREP генерирует необходимые файлы с исходными данными для запуска на расчет процессора TOXI+CFD. Результатами расчета являются поля распределения различных величин (скорость, плотность, температура, давление, концентрация компонентов газа) по расчетной сетке, выводимые через заданные промежутки времени. Также могут быть получены зависимости перечисленных параметров от времени в заданных точках пространства.

Основные уравнения и метод решения, используемые в TOXI+CFD

Для расчета распространения УВ используются следующие уравнения переноса массы, импульса, энергии и индивидуальных компонент смеси газов без учета химических реакций, пристеночного трения, турбулентности и плавучести:

уравнение сохранения массы:

$$\frac{\partial(\beta_v \rho)}{\partial t} + \frac{\partial(\beta_v \rho u_i)}{\partial x_i} = 0; \quad (1)$$

уравнение сохранения импульса:

$$\frac{\partial(\beta_v \rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\beta_v \rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\beta_v \frac{\partial p}{\partial x_i}; \quad (2)$$

уравнение сохранения энергии:

$$\frac{\partial(\beta_v \rho E)}{\partial t} + \frac{\partial(\beta_v \rho u_j E)}{\partial x_j} = -\beta_v \frac{\partial p u_j}{\partial x_j}; \quad (3)$$

уравнение конвективного переноса для массовой доли каждого компонента смеси:

$$\frac{\partial(\beta_v \rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\beta_v \rho u_j Y_k)}{\partial x_j} = 0, \quad (4)$$

где β_v — объемная пористость (в текущей версии может быть равна либо 0 при попадании ячейки в твердый объект, либо 1 в остальных случаях); ρ — плотность среды; t — время; x_i, x_j — пространственные координаты, $i = 1, 2, 3, j = 1, 2, 3$; u_i, u_j — составляющие скорости, $i = 1, 2, 3, j = 1, 2, 3$; p — давление; E — удельная полная энергия, равная сумме тепловой составляющей, химической составляющей и кинетической энергии; Y_k — массовая доля k -го компонента смеси.

Система уравнений (1)–(4) дополняется уравнением состояния смеси идеальных газов.

Уравнения (1)–(4) для газовой фазы интегрируются методом Годунова — Колгана второго порядка точности [22]. Метод Годунова — Колгана является консервативным монотонным методом. Он допускает разрешение разрывных решений (УВ и контактных разрывов), которые «размазываются» по сетке, но «размазывание» для УВ обычно составляет три-четыре ячейки и не зависит от силы волны. Это приемлемо при имеющейся вычислительной мощности.

Верификация результатов, полученных с помощью TOXI+CFD

Проверка корректности результатов, полученных с помощью TOXI+CFD, выполнена в двух постановках:

путем сравнения с аналитическим решением задачи о распаде разрыва в ударной трубе (задачи Сода — одной из множества задач Римана) со стандартными начальными условиями [23]. Решение задачи о распаде разрыва демонстрирует степень точности, которую может обеспечить используемый численный метод;

путем сравнения с экспериментальными данными по распространению сферических волн, полученными в экспериментальных исследованиях [24]. Решение этой задачи позволяет оценить, насколько точно предложенная математическая модель опи-

сывает реальную физическую картину процесса распространения УВ.

Сравнение с точным решением задачи Сода

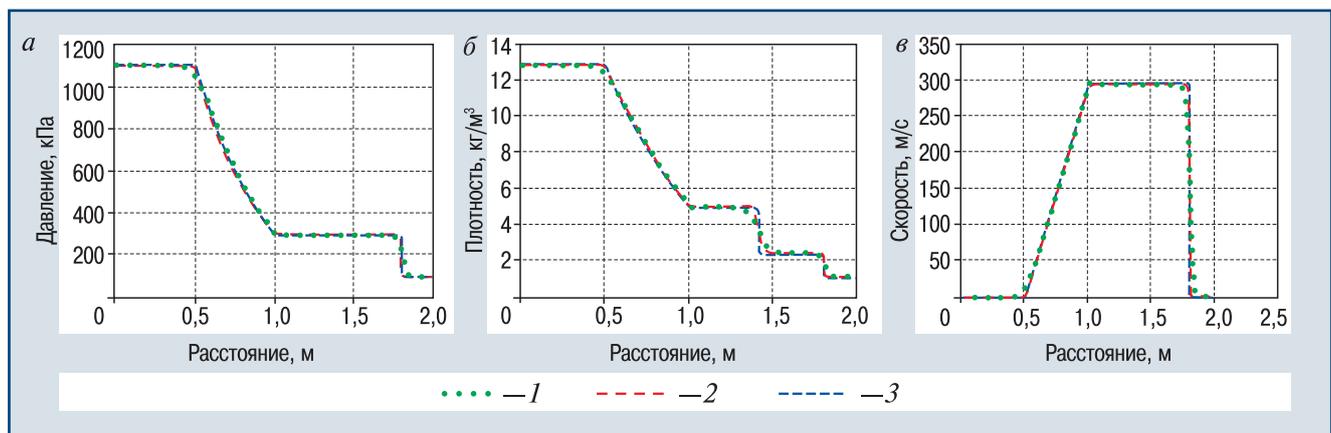
Задачи Римана — это класс задач о нахождении характеристик течения, возникающего в пространстве, когда в начальный момент времени имеются две полубесконечные области с различными параметрами сред, изначально граничащие по плоскости. В этом случае возникает течение с двумя бегущими в противоположенные стороны волнами. Одной из таких задач является задача Сода о течении воздуха из зоны с начальным давлением $11P_0$ и плотностью $\rho_1 = 11\rho_0$ (слева от границы раздела сред) в область с начальным давлением P_0 и плотностью $\rho_0 = 1,1705 \text{ кг/м}^3$. Обе среды изначально покоились. Длина каждой зоны составляет 1 м. Эта задача имеет аналитическое решение.

В результате распада разрыва с приведенными параметрами возникает течение с волной разрежения, бегущей налево, и УВ, бегущей вправо. На рис. 2 приведены профили давления (рис. 2, а), плотности (рис. 2, б) и скорости (рис. 2, в), полученные при численном решении с различным числом расчетных ячеек, а также аналитические решения (здесь 1 — численное решение (сетка $100 \times 10 \times 10$ ячеек); 2 — численное решение (сетка $400 \times 10 \times 10$ ячеек); 3 — аналитическое решение (эталон). Как видно из рис. 2, численное решение с хорошей точностью совпадает с аналитическим: УВ «размазываются» на две-три ячейки, а контактные разрывы — на четыре-пять. Таким образом, данный тест подтверждает правильную работу использованных алгоритмов вычислений и программного кода.

Сравнение с экспериментом

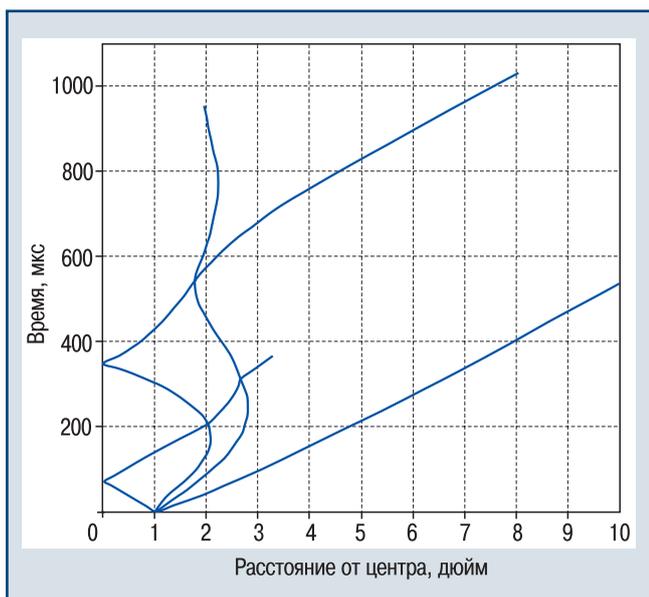
Сравнение с экспериментом является важным этапом верификации программного кода [25, 26].

Экспериментальные исследования [24], в которых измерялись параметры волн избыточного давления, проводились в сферической бронеканере диаметром около 0,914 м. Волны избыточного давления образовывались в результате механического



▲ Рис. 2. Сравнение численных и аналитического решений задачи Сода в момент времени 1,425 мс
 ▲ Fig. 2. Comparison of numerical and analytical solutions of the Sod's problem at time 1.425 ms

разрушения стеклянных сфер со сжатым воздухом диаметром 2", расположенных в центре броникамеры. В экспериментах варьировалось давление в стеклянной сфере, при этом давление в камере примерно соответствовало атмосферному. В ходе экспериментов измерялось избыточное давление на фронте волны давления с помощью специального датчика, располагаемого на различном удалении от центра сферы. Для каждого положения датчика проводилось отдельное испытание. Также получены шлирен-диаграммы со следами распространения волн давления (пример такой диаграммы представлен на рис. 3), по которым определялась скорость фронта первой волны.



▲ Рис. 3. Обработанная шлирен-диаграмма эксперимента с разрушением стеклянной сферы с воздухом под давлением 2,758 МПа

▲ Fig. 3. The processed schlieren-diagram of the experiment with the destruction of the glass sphere with air at a pressure of 2.758 MPa

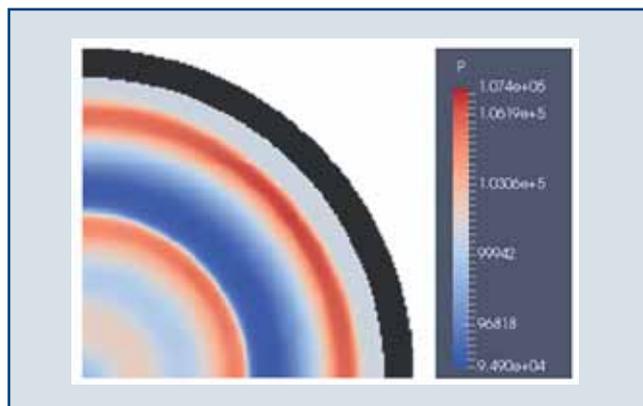
Трехмерная расчетная модель такого эксперимента в TOXI+CFD включала в себя сферу со сжатым воздухом, а также сферическую жесткую стенку камеры. Наличие пространственной симметрии позволило уменьшить расчетную область до четверти всего объема камеры (0,5×0,5×0,5 м). При этом на гранях расчетной области, принадлежащих плоскостям симметрии, накладывались специальные граничные условия («жесткая стенка без прилипания»). Разрушение и разлет фрагментов стеклянных стенок сферы в расчете не моделировались, однако их влияние было учтено за счет корректировки давления внутри стеклянной сферы: в работе [24] показано, что при начальном давлении в сфере 2,758 МПа примерно 16 % энергии сжатого газа расходуется на сообщение кинетической энергии осколкам.

В серии моделирований с помощью TOXI+CFD, как и в экспериментах, варьировалось давление в

стеклянной сфере. Дополнительно для определения зависимости решения от параметров расчетной сетки каждый расчет выполняли дважды: на сетке с $150 \times 150 \times 150 \sim 3,4$ млн ячеек, и на сетке с $200 \times 200 \times 200 = 8$ млн ячеек.

Расчет выполнялся на кластере НИЯУ МИФИ (процессор TOXI+CFD также может работать и на обычных персональных компьютерах под управлением Windows или Linux). Длительность вычислений задач в режиме отладки с сеткой в 3,4 млн ячеек на 15 процессорах составила около 2 ч, а задач сеткой в 8 млн ячеек — около 5 ч.

В результате расчетов получены распределения давлений в пространстве и во времени. Сечение одного из таких полей в фиксированный момент времени приведено на рис. 4 (здесь черным цветом отмечена стенка броникамеры). Расчет проведен для стеклянной сферы, заполненной воздухом под давлением 1,158 МПа. Рисунок 4 соответствует моменту времени 0,9 мс, на нем видна первичная УВ, подходящая к стенке броникамеры, и вторичная УВ, образовавшаяся при схлопывании области разрежения в центре броникамеры.

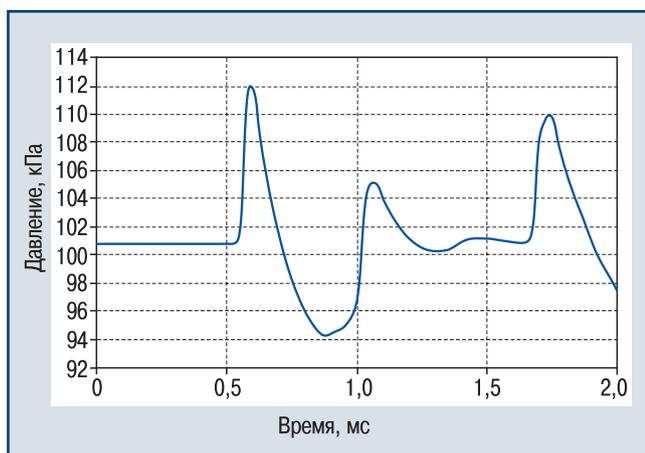


▲ Рис. 4. Распределение давления (Па) в радиальном сечении броникамеры

▲ Fig. 4. The pressure distribution (Pa) in the radial section of the shock sphere

Также получены зависимости давлений от времени в заданных точках пространства (на виртуальных датчиках), с помощью которых оценены максимальные значения давлений на фронте первой УВ. Пример одной из таких зависимостей изображен на рис. 5. Расчет проведен для стеклянной сферы, заполненной воздухом под давлением 1,158 МПа. Датчик зафиксирован на расстоянии 0,254 м от центра броникамеры. Первый пик давления вызван прохождением первичной УВ, за которой после области разрежения следует вторичная УВ. После фиксации датчиком вторичной УВ первичная достигает стенки броникамеры, отражается от нее и второй раз проходит через датчик (пик на 1,7 мс).

Результаты измерений таких значений, полученные в экспериментах, а также с помощью



▲ Рис. 5. Зависимость давления от времени на одном из виртуальных датчиков TOXI+CFD

▲ Fig. 5. Time pressure change on the TOXI + CFD virtual sensor

TOXI+CFD, сведены в табл. 1 и демонстрируют предельные отклонения результатов для сетки 3,4 млн ячеек — не более 9 %, а для сетки 8 млн ячеек — не более 7 %, что является показателем удовлетворительной работы модели. Из результатов также следует, что с ростом числа расчетных ячеек расчетное давление становится ближе к экспериментальным значениям на 1–2 %, что свидетельствует о сходимости решения задачи. Единственным исключением является серия экспериментов 2, в которой наблюдается обратная зависимость. Вероятным объяснением такого исключения является то, что доля энергии, затрачиваемой на разгон осколков стеклянной сферы, составила больше 16 % (значение 16 % оценено в эксперименте, где давление было в 2 раза выше).

Помимо амплитуды давления на фронте УВ, важной характеристикой процесса перемещения

Таблица 1

Эксперимент				Расчет	Сравнение
Номер эксперимента	Положение датчика относительно центра броникамеры, дюйм	Абсолютное давление на фронте УВ, измеренное датчиком, кПа	Скорость УВ, м/с	Давление, полученное в расчете, кПа	Относительное отклонение от экспериментального значения, %
Серия экспериментов 1. Давление в стеклянной сфере 2,758 МПа (в расчете принималось 2,248 МПа) и среднее атмосферное давление в броникамере 100,1 кПа в начальный момент времени					
P59	5,7	149,8	377,3	137,6 [*] 140,2 ^{**}	-8,1 [*] -6,4 ^{**}
P60	5,7	143,6	372,5	137,6 [*] 140,2 ^{**}	-4,2 [*] -2,4 ^{**}
P61	5,6	146,4	377,9	137,6 [*] 140,2 ^{**}	-6,0 [*] -4,2 ^{**}
P76	8,0	133,3	372,5	123,8 [*] 125,7 ^{**}	-7,1 [*] -5,7 ^{**}
P83	8,0	130,5	371,6	123,8 [*] 125,7 ^{**}	-5,1 [*] -3,7 ^{**}
P82	10,0	124,3	363,0	118,1 [*] 119,5 ^{**}	-5,0 [*] -3,9 ^{**}
Серия экспериментов 2. Давление в стеклянной сфере 1,379 МПа (в расчете принималось 1,158 МПа) и среднее атмосферное давление в броникамере 100,7 кПа в начальный момент времени					
P62	5,8	118,8	372,5	123,1 [*] 125,2 ^{**}	3,6 [*] 5,4 ^{**}
P64	5,7	119,5	370,9	124,3 [*] 126,2 ^{**}	4,0 [*] 5,6 ^{**}
P77	10,0	111,9	361,2	112,0 [*] 113,0 ^{**}	0,1 [*] 1,0 ^{**}
Серия экспериментов 3. Давление в стеклянной сфере 2,248 МПа (в расчете принималось 1,888 МПа) и среднее атмосферное давление в броникамере 99,3 кПа в начальный момент времени					
P48	5,8	138,8	375,5	131,0 [*] 133,7 ^{**}	5,6 [*] 3,7 ^{**}
P49	5,7	145,0	375,8	132,5 [*] 134,9 ^{**}	8,6 [*] 6,9 ^{**}
P50	5,7	141,5	374,0	132,5 [*] 134,9 ^{**}	6,4 [*] 4,7 ^{**}

^{*} Результаты получены на сетке с 3,4 млн ячеек.

^{**} Результаты получены на сетке с 8 млн ячеек.

Таблица 2

Серия экспериментов	Диапазон зафиксированных скоростей, м/с	Средняя скорость, рассчитанная TOXI+CFD (3,3 млн ячеек), м/с	Средняя скорость, рассчитанная TOXI+CFD (8 млн ячеек), м/с	Относительное отклонение от эксперимента (3,3 млн ячеек), %	Относительное отклонение от эксперимента (8 млн ячеек), %
1	363–378	381	385	От 0,8 до 5,0	От 1,9 до 6,0
2	361–373	361	368	От –3,2 до 0	От –1,3 до 1,9

волны является ее скорость. Как видно из шлирен-диаграммы, полученной в эксперименте, скорость первичной УВ в процессе ее движения меняется незначительно (см. рис. 3). Таким образом, в расчетах за оценку скорости УВ может быть принято ее среднее значение, определенное по полученным с помощью «виртуальных датчиков» зависимостям давления от времени. Она будет равна расстоянию между крайними датчиками, деленному на промежуток времени между реализациями амплитудных значений давления этих датчиков. Оценки средней скорости УВ по TOXI+CFD и значения, полученные в экспериментах, сведены в табл. 2 и показывают расхождение не более 6 %, что также является удовлетворительным результатом моделирования.

Выводы

В рамках проекта по созданию программного комплекса TOXI+CFD для оценки последствий взрывных процессов при аварийных выбросах ТВС разработан модуль, позволяющий рассчитывать распространение УВ в загроможденном трехмерном пространстве в соответствии с руководством по безопасности [11]. Волны в задачах генерируются в результате разлета сжатого газа.

Выполнена проверка реализации численного метода путем сравнения с аналитическим решением задачи Сода, которая показала, что численное решение с хорошей точностью совпадает с аналитическим.

Проведено моделирование серии экспериментов [24] с помощью TOXI+CFD. Показано, что моделирование позволяет воссоздать сложную динамику движения УВ в бронекамере. Проведен также количественный анализ полученных значений давлений и скоростей УВ, который показал удовлетворительное совпадение результатов с экспериментом с различием в 9 или 7 % в зависимости от числа ячеек расчетной сетки.

Представлены отличительные особенности программного комплекса (наличие графического интерфейса пользователя, возможность работы под управлением операционных систем Windows и Linux, поддержка кластерных вычислений), а также основные этапы его использования. На следующей стадии работ по совершенствованию TOXI+CFD планируется добавить в программный комплекс модель турбулентности и силу тяжести, а впоследствии — модель атмосферы с учетом стратификации и модель горения.

Список литературы

1. *О промышленной безопасности опасных производственных объектов: федер. закон от 21 июля 1997 г. № 116-ФЗ (ред. от 07.03.2017).* — М.: ЗАО НТЦ ПБ, 2017. — 52 с.
2. *Общие правила взрывобезопасности для взрывопожароопасных химических, нефтехимических и нефтеперерабатывающих производств: федер. нормы и правила в обл. пром. безопасности.* — 3-е изд., испр. и доп. — Сер. 09. — Вып. 37. — М.: ЗАО НТЦ ПБ, 2018. — 132 с.
3. *Расчет зон разрушения зданий и сооружений при взрывах топливно-воздушных смесей на опасных производственных объектах/ К.В. Ефремов, М.В. Лисанов, А.С. Софьин и др.// Безопасность труда в промышленности.* — 2011. — № 9. — С. 70–77.
4. *Количественный анализ риска при обосновании взрывоустойчивости зданий и сооружений/ Д.В. Дегтярев, М.В. Лисанов, С.И. Сумской, А.А. Швыряев// Безопасность труда в промышленности.* — 2013. — № 6. — С. 82–89.
5. *Сверчков А.М., Сумской С.И.* Верификация программного средства TOXI+Гидроудар для моделирования нестационарных процессов в трубопроводах// *Безопасность труда в промышленности.* — 2017. — № 10. — С. 5–10.
6. *Расчет параметров ударных волн при детонации горючих газообразных смесей переменного состава/ Б.Е. Гельфанд, С.А. Губин, В.Н. Михалкин, В.А. Шаргатов// Физика горения и взрыва.* — 1985. — Т. 21. — № 3. — С. 92–97.
7. *Губин С.А., Шаргатов В.А.* Параметры воздушных ударных волн при переходе горения в детонацию// *Физика горения и взрыва.* — 1989. — Т. 25. — № 5. — С. 111–115.
8. *Параметры воздушных ударных волн при разных режимах взрывного превращения горючих газовых смесей/ А.А. Борисов, Б.Е. Гельфанд, С.А. Губин и др.// Химическая физика.* — 1986. — Т. 3. — № 5. — С. 435.
9. *Numerical modeling of the detonation of a submerged hydrogen-air jet/ Y.A. Gostintsev, S.A. Gubin, S.I. Sumskoi, V.A. Shargatov// Combustion, Explosion, and Shock Waves.* — 1990. — Vol. 26. — № 4. — P. 473.
10. *Детонация топливно-воздушных смесей над поверхностью земли/ А.А. Борисов, Б.Е. Гельфанд, С.А. Губин и др.// Физика горения и взрыва.* — 1988. — Т. 24. — № 2. — С. 124–126.
11. *Методика оценки последствий аварий на взрывопожароопасных химических производствах: рук. по безопасности.* — Сер. 09. — Вып. 43. — М.: ЗАО НТЦ ПБ, 2015. — 32 с.
12. *Сравнительный анализ российских и зарубежных методик и компьютерных программ по моделированию аварийных выбросов и оценке риска/ Е.А. Агапова, Д.В. Дегтярёв, М.В. Лисанов и др.// Безопасность труда в промышленности.* — 2015. — № 9. — С. 71–78.

13. *CFD modeling of large-scale flammable cloud dispersion using FLACS/ Ankit Dasgotra, G.V.V. Varun Teja, Ankit Sharma, Kirti Bhushan Mishra// Journal of Loss Prevention in the Process Industries.* — 2018. DOI: 10.1016/j.jlp.2018.01.001

14. *Hansen O.R., Mathieu R., Davis S.G.* Validation of FLACS for Vapor Dispersion from LNG Spills: Model Evaluation Protocol// 12th Annual International Symposium of the Mary Kay O'Connor Process Safety Center. — Texas, 2009.

15. *Coherent Computational Analysis of Large-Scale Explosions and Fires in Complex Geometries — From Combustion Science to a Safer Oil and Gas Industry/ K.E. Rian, T. Evanger, B.E. Vembe et al.// Chemical engineering transactions.* — 2016. — Vol. 48. — P. 175–180. DOI 10.3303/CET1648030

16. *Chang Bong Jang, Seungho Jung.* Numerical computation of a large-scale jet fire of high-pressure hydrogen in process plant// *Energy Science and Engineering.* — 2016. — Vol. 4. — Iss. 6. DOI 10.1002/ese3.143

17. *Comparisons between FLUENT and ADMS for atmospheric dispersion modeling/ A. Riddle, D. Carruthers, A. Sharpe et al.// Atmospheric Environment.* — 2004. — Vol. 38. — Iss. 7. — P. 1029–1038. DOI 10.1016/j.atmosenv.2003.10.052

18. *Солодовников А.В., Ахматвалиева Е.Р.* Повышение безопасности насосной станции на основе моделирования образования и рассеивания пожаровзрывоопасных смесей// *Нефтегазовое дело.* — 2013. — № 2. — С. 395–406.

19. *Численное моделирование пограничного слоя атмосферы с учетом ее стратификации/ А.И. Купцов, Р.Р. Акберов, Д.Я. Исламхузин, Ф.М. Гимранов// Фундаментальные исследования.* — 2014. — № 9–7. — С. 1452–1460.

20. *Антонов А.С.* Параллельное программирование с использованием технологии MPI: учеб. пособие. — М.: Изд-во МГУ, 2004. — 71 с.

21. *SALOME.* The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation. URL: <http://salome-platform.org/> (дата обращения: 27.04.2017).

22. *Колган В.П.* Применение принципа минимальных значений производной к построению конечноразностных схем для расчета разрывных решений газовой динамики// *Ученые записки ЦАГИ.* — 1972. — Т. 3. — № 6. — С. 68–77.

23. *Sod G.A.* A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws// *Journal of Computational Physics.* — 1978. — Vol. 27. — Iss. 1. — P. 1–31. DOI: 10.1016/0021-9991(78)90023-2

24. *Boyer D.W.* An experimental study of the explosion generated by a pressurized sphere// *Journal of Fluid Mechanics.* — 1960. — Vol. 9. — Iss. 3. — P. 401–429.

25. *Верификация методик оценки последствий аварийных выбросов газа от источников продолжительного действия/ С.И. Сумской, А.В. Пчельников, М.В. Лисанов и др.// Безопасность труда в промышленности.* — 2005. — № 8. — С. 28–35.

26. *Верификация методик для последствий химических аварий/ С.А. Губин, С.М. Лыков, И.В. Маклашова и др.// Химическая промышленность.* — 1999. — № 10. — С. 58.

toxi@safety.ru

Материал поступил в редакцию 3 мая 2018 г.

«Bezopasnost Truda v Promyshlennosti»/ «Occupational Safety in Industry», 2018, № 6, pp.

DOI: 10.24000/0409-2961-2018-6-

Verification of the model of overpressure waves propagation in the TOXI+CFD software

V.A. Shargatov, Cand. Sci. (Phys.-Math.), Associate Professor

S.I. Sumskoi, Cand. Sci. (Eng.), Senior Lecturer
NIYAU MEPhI, Moscow, Russia

A.S. Sofyin, Cand. Sci. (Eng.), Department Head,
toxi@safety.ru

STC «Industrial Safety» CJSC, Moscow, Russia

Abstract

The article describes the topicality, formulation of the problem, the structure, the basic equations and the solution method, as well as the specifics of using TOXI+CFD software package that implements the numerical solution of the hydrodynamic equations (the so-called CFD methods — Computational Fluid Dynamics). The simulation is based on an approach based on standard partial differential equations of the laws of conservation of mass, momentum and energy. The use of CFD methods will allow more accurate modeling of cloud formation and explosions of fuel-air mixtures in three-dimensional space. The software for calculating the propagation of waves of overpressure in the 3D cluttered environment developed and tested in this work. The verification of the TOXI+CFD calculation results obtained by comparison with the analytical solution of the Sod's problem, as well as experimental studies of shock waves in a shock sphere. The results of measurements obtained in experiments, as well as using TOXI+CFD demonstrate the limiting deviations of the results for the grid of 3,4 million cells — no more than 9 %, and for the grid of 8 million cells — no more than 7 %, which is an indicator of the satisfactory quality of the model. It also follows from the results that as the number of cells increases, the calculated pressure becomes closer to the experimental values by 1–2 %, which indicates the convergence of the solution. The features of the software package are presented, such as the presence of a graphical user interface, the ability to work under Windows and Linux operating systems, support for cluster computing, as well as the main stages of its use. At the next stage of works on TOXI+CFD improvement it is planned to add turbulence and gravity model to the software package, and subsequently the atmosphere model taking into account stratification and combustion model.

Key words: numerical simulation, hydrodynamics, shock waves, 3D models, software, verification, experiment, Godunov — Kolgan's method, TOXI+CFD.

References

1. On industrial safety of hazardous production facilities: Federal Law of July 21, 1997 № 116-FZ (as amended of 07.03.2017). Moscow: ZAO NTTs PB, 2017. 52 p. (In Russ.).
2. General Rules of Explosion Safety for Fire and Explosion Hazardous Chemical, Petrochemical and Oil Processing Plants: Federal Norms and Regulations in the Field of Industrial Safety. 3-e izd., ispr. i dop. Ser. 09. Iss. 37. Moscow: ZAO NTTs PB, 2018. 132 p. (In Russ.).

3. Efremov K.V., Lisanov M.V., Sofin A.S., Samuseva E.A., Sumskoj S.I., Kirienko A.P. Calculation of zones of destruction of buildings and constructions at explosions of fuel and air mixes on dangerous production objects. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2011. № 9. pp. 70–77. (In Russ.).
4. Degtyarev D.V., Lisanov M.V., Sumskoj S.I., Shvyryayev A.A. Quantitative risk analysis at the substantiation of buildings and structures blast resistance. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2013. № 6. pp. 82–89. (In Russ.).
5. Sverchkov A.M., Sumskoj S.I. Verification of TOXI+Gidroudar software for modeling unsteady processes in pipelines. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2017. № 10. pp. 5–10. (In Russ.).
6. Gelfand B.E., Gubin S.A., Mikhalkin V.N., Shargatov V.A. Calculation of shock wave parameters during detonation of combustible gaseous mixtures of variable composition. *Fizika gorennya i vzryva = Physics of Burning and Explosion*. 1985. Vol. 21. № 3. pp. 92–97. (In Russ.).
7. Gubin S.A., Shargatov V.A. Parameters of air shock waves in the transition of combustion into detonation. *Fizika gorennya i vzryva = Physics of Burning and Explosion*. 1989. Vol. 25. № 5. pp. 111–115. (In Russ.).
8. Borisov A.A., Gelfand B.E., Gubin S.A., Odincov V.V., Shargatov V.A. Parameters of air shock waves at different modes of explosive transformation of combustible gas mixtures. *Khimicheskaya fizika = Chemical Physics*. 1986. Vol. 3. № 5. p. 435. (In Russ.).
9. Gostintsev Y.A., Gubin S.A., Sumskoj S.I., Shargatov V.A. Numerical modeling of the detonation of a submerged hydrogen-air jet. *Combustion, Explosion, and Shock Waves*. 1990. Vol. 26. № 4. p. 473.
10. Borisov A.A., Gelfand B.E., Gubin S.A., Sumskoj S.I., Shargatov V.A. Detonation of fuel-air mixtures above the ground. *Fizika gorennya i vzryva = Physics of Burning and Explosion*. 1988. Vol. 24. № 2. pp. 124–126. (In Russ.).
11. Methods of assessment of consequences of accidents at explosion and fire hazardous chemical plants: Safety Guide. Ser. 09. Iss. 43. Moscow: ZAO NTTs PB, 2015. 32 p. (In Russ.).
12. Agapova E.A., Degtjarjov D.V., Lisanov M.V., Krjukov A.S., Kulberg S.B., Sumskoj S.I. Comparative analysis of Russian and foreign methods and software for emergency emission modeling and risk assessment. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2015. № 9. pp. 71–78. (In Russ.).
13. Ankit Dasgotra, G.V.V. Varun Teja, Ankit Sharma, Kirti Bhushan Mishra. CFD modeling of large-scale flammable cloud dispersion using FLACS. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2018. DOI: 10.1016/j.jlp.2018.01.001
14. Hansen O.R., Mathieu R., Davis S.G. Validation of FLACS for Vapor Dispersion from LNG Spills: Model Evaluation Protocol. 12th Annual International Symposium of the Mary Kay O'Connor Process Safety Center. Texas, 2009.
15. Rian K.E., Evanger T., Vembe B.E., Lilleheie N.I., Laksa B., Hjertager B.H., Magnussen B.F. Coherent Computational Analysis of Large-Scale Explosions and Fires in Complex Geometries — From Combustion Science to a Safer Oil and Gas Industry. *Chemical engineering transactions*. 2016. Vol. 48. pp. 175–180. DOI 10.3303/CET1648030
16. Chang Bong Jang, Seungho Jung. Numerical computation of a large-scale jet fire of high-pressure hydrogen in process plant. *Energy Science and Engineering*. 2016. Vol. 4. Iss. 6. DOI 10.1002/ese3.143
17. Riddle A., Carruthers D., Sharpe A., McHugh C., Stocker J. Comparisons between FLUENT and ADMS for atmospheric dispersion modeling. *Atmospheric Environment*. 2004. Vol. 38. Iss. 7. pp. 1029–1038. DOI 10.1016/j.atmosenv.2003.10.052
18. Solodovnikov A.V., Akhmatvalieva E.R. Improving the safety of the pumping station on the basis of modeling the formation and dispersion of fire-explosive mixtures. *Neftegazovoe delo = Oil and Gas Business*. 2013. № 2. pp. 395–406. (In Russ.).
19. Kuptsov A.I., Akberov R.R., Islamkhuzin D.Ya., Gimranov F.M. Numerical simulation of the atmospheric boundary layer taking into account its stratification. *Fundamentalnye issledovaniya = Fundamental Researches*. 2014. № 9–7. pp. 1452–1460. (In Russ.).
20. Antonov A.S. Parallel programming using MPI technology: Textbook. Moscow: Izd-vo MGU, 2004. 71 p. (In Russ.).
21. SALOME. The Open Source Integration Platform for Numerical Simulation. Available at: <http://salome-platform.org/> (accessed: April 27, 2017).
22. Kolgan V.P. Application of the principle of minimal values of derivatives to the construction of finite difference schemes for the calculation of discontinuous solutions of gas dynamics. *Uchenye zapiski TsAGI = Uchenie Zapiski TsAGI*. 1972. Vol. 3. № 6. pp. 68–77. (In Russ.).
23. Sod G.A. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. *Journal of Computational Physics*. 1978. Vol. 27. № 1. pp. 1–31. DOI: 10.1016/0021-9991(78)90023-2
24. Boyer D.W. An experimental study of the explosion generated by a pressurized sphere. *Journal of Fluid Mechanics*. 1960. Vol. 9. Iss. 3. pp. 401–429.
25. Sumskoj S.I., Pchelnikov A.V., Lisanov M.V., Pecherkin A.S., Shargatov V.A. Verification of methodologies for assessing the consequences of accidental releases of gas from sources over long term. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2005. № 8. pp. 28–35. (In Russ.).
26. Gubin S.A., Lykov S.M., Maklashova I.V., Pecherkin A.S., Sidorov V.I., Sumskoj S.I. Verification of procedures for the consequences of chemical accidents. *Khimicheskaya promyshlennost = Chemical Industry*. 1999. № 10. pp. 58. (In Russ.).

Received 3 May, 2018

