



**MINISTERUL CERCETĂRII ȘI INOVĂRII**  
**UNIVERSITATEA DIN PETROȘANI**  
**FACULTATEA DE MINE**



***TEZĂ DE DOCTORAT***  
***- REZUMAT -***

***CERCETĂRI PRIVIND MODELAREA VIRTUALĂ***  
***A FENOMENELOR DE COMBUSTIE DIN MINELE GRIZUTOASE***

**Conducător Științific**

**Prof.univ.dr.ing. Eugen COZMA**

**Doctorand**

**Ing. Nicolae-Ioan VLASIN**

**Petroșani**

**2017**

**Cuvinte cheie: atmosfere explozive, metan, simulări computerizate, explozie de metan, CFD**

## **INTRODUCERE**

<b>CAPITOLUL 1.</b>	<b>DINAMICA FLUIDELOR COMPUTERIZATĂ</b>
<b>CAPITOLUL 2.</b>	<b>CARACTERISTICI ALE AMESTECULUI AER-METAN, TRANSPUSE ÎN SIMULĂRI COMPUTERIZATE</b>
<b>CAPITOLUL 3.</b>	<b>TURBULENȚA ÎN SIMULĂRILE COMPUTERIZATE</b>
<b>CAPITOLUL 4.</b>	<b>CINETICA CHIMICĂ ÎN SIMULAREA EXPLOZIILOR AMESTECURILOR AER-METAN</b>
<b>CAPITOLUL 5.</b>	<b>SUBROUTINE PENTRU DEFINIREA FUNCȚIILOR ȘI IMPLEMENTAREA LOR ÎN CADRUL SIMULĂRILOR COMPUTERIZATE</b>
<b>CAPITOLUL 6.</b>	<b>SIMULĂRI COMPUTERIZATE ALE EXPLOZIILOR AMESTECURILOR AER-METAN</b>
<b>CAPITOLUL 7.</b>	<b>EXPERIMENTE FIZICE ȘI VALIDAREA SIMULĂRILOR COMPUTERIZATE</b>
<b>CAPITOLUL 8.</b>	<b>CONCLUZII ȘI CONTRIBUȚII PERSONALE</b>

## **BIBLIOGRAFIE**

**ANEXA 1**

**ANEXA 2**

În minele de cărbune, metanul și praful de cărbune sunt asociate, în mod natural, cu cărbunele rezultat din activitatea minieră. Riscul apariției unei atmosfere explozive și a consecințelor acesteia diferă de la o mină la alta, în funcție de tipul de mină, configurația acesteia, cărbunele extras și probabilitatea apariției metanului sau a prafului combustibil. Cu toate măsurile de prevenire luate, riscul potențial de explozie nu poate fi exclus din minele grizutoase, ci doar redus, cât mai mult posibil.

De aceea, acolo unde există posibilitatea formării acestor atmosfere explozive, este necesară evaluarea riscului la explozie prin elaborarea unor scenarii care să considere existența, în aceeași locație și la același timp, a sursei de aprindere, a gazului metan și a oxigenului. Funcție de locația inițierii amestecului exploziv, evaluarea trebuie să prevadă extinderea zonei periculoase, pentru cel mai rău caz, al unei reacții stoichiometrice oxigen-metan. Această predicție e greu de realizat, mai ales acolo unde spațiul tehnologic este ocupat de o serie de echipamente care îngreunează sau fac imposibilă previzionarea comportamentului undei de șoc și a frontului de flacără. În acest sens, tehnicile CFD pot fi unelte deosebit de utile evaluatorilor de risc.

În domeniul modelării computerizate a exploziilor de gaze, preocupările pe plan mondial sunt destul de scăzute, iar în prezent, în România nu se cunosc preocupări în domeniul simulărilor virtuale ale exploziilor de gaze, acest teren fiind total neacoperit. De aceea, această lucrare este prima reușită de acest gen din România și una dintre puținele care au fost realizate la nivel internațional.

## Relevanța

Atunci când nici o metodă nu poate descrie un fenomen periculos, evaluarea riscurilor și optimizarea măsurilor de siguranță devine o misiune greu de îndeplinit.

Simulările computerizate, realizate a priori, pot conduce la crearea unei culturi bazate pe o prevenire durabilă a evenimentelor nedorite, deci formarea unei viziuni preventive în căutarea stării optime de securitate. Totodată, prin îmbinarea analizei computerizate cu tehnica WHAT IF (ce s-ar întâmpla dacă ...), se pot examina consecințele modificărilor aduse unor procese sau mijloace de muncă și implicit riscurile impuse sau create de aceste modificări. Prin analizele computerizate, cunoștințele retrospective pot fi transformate cu succes în acțiuni de perspectivă.

Dacă pentru industriile petrolului și gazelor au fost elaborate standarde și metodologii care facilitează utilizarea analizelor CFD în studiul factorilor de risc, nu există motiv pentru care modelările virtuale să nu vină în ajutorul industriei miniere, fără a se limita la aceasta.

Datorită sferei largi de consumatori ai gazului metan, avantajele dezvoltării modelelor de simulare virtuală a exploziilor de gaze nu se regăsesc doar în starea de siguranță a personalului din exploatarea subterană de cărbune, putând influența benefic o arie mult mai extinsă, de la marile industrii până la micul consumator casnic, de la activitățile din centrele urbane până la protecția mediului înconjurător.

Cercetările efectuate în vederea elaborării prezentei lucrări au vizat câteva **obiective** esențiale:

- cunoașterea particularităților dinamicii fluidelor computerizată, în special cele ce caracterizează dinamica gazelor;
- cunoașterea modalităților de transpunere a caracteristicilor amestecului combustibil aer-metan în modele matematice și relevarea importanței gradului de aproximare;
- selecționarea modelului de turbulență adecvat simulărilor exploziilor de gaze;
- cunoașterea modalităților de aplicare a cineticii chimice în cadrul simulărilor computerizate privind combustii rapide ale gazelor;
- aprofundarea cunoștințelor în mediul programabil C, pentru transpunerea în cod a funcțiilor definite de utilizator;
- realizarea simulărilor computerizate ale exploziilor amestecurilor aer-metan la un grad superior de acuratețe.

În scopul atingerii obiectivelor propuse în cadrul tezei, au fost desfășurate următoarele **activități de cercetare**:

- Documentarea și aprofundarea cunoștințelor în domeniul dinamicii fluidelor computerizată;
- documentarea privind modelarea matematică a proceselor referitoare la curgerile fluidelor;
- studiul modalităților de reducere a erorilor de aproximare și discretizare în procesul de simulare;
- aprofundarea modalităților de postprocesare a datelor rezultate din calculul computerizat;
- cercetarea modurilor de transpunere a caracteristicilor amestecurilor explozive în modele matematice;

- selectarea, prin testare, a modelului de turbulență adecvat realizării simulărilor exploziilor de gaze;
- documentarea și aprofundarea cunoștințelor privind comportamentul și transformările chimice ale amestecurilor de gaze, din punct de vedere al cineticii chimice;
- testarea funcțiilor matematice scrise în cod de programare, în cadrul simulărilor computerizate.

Teza este structurată pe opt capitole, la care se adaugă o parte de Introducere, un capitol de Concluzii și Contribuții Personale, o parte de Bibliografie și două Anexe.

Primul capitol, intitulat ”**Dinamica fluidelor computerizată**”, descrie un scurt istoric al evoluției tehnicilor și metodelor aparținând acestui domeniu, urmat de o prezentare generală a metodelor matematice utilizate. În continuare, în capitol sunt descrise etapele necesar a fi parcurse pentru transformarea unui proces real într-un model matematic, aplicarea acestuia pe un domeniu spațial virtual și modalități de soluționare a problemelor de curgere a fluidelor, ținând cont de erorile de aproximare sau discretizare ce intervin implicit.

Deseori, modelarea neglijează unele detalii cu importanță scăzută referitoare la problema studiată. În timp ce experimentele reliefează caracteristicile particulare ale proceselor, modelul matematic permite stabilirea legilor generale și, astfel, contribuie la cunoașterea fundamentală a fenomenelor. În mecanica fluidelor, evoluția metodelor matematice a permis studiul unor modele tot mai complexe: fluidele ideale incompresibile, fluidele ideale compresibile, fluidele vâscoase aflate în mișcare laminară, fluidele vâscoase aflate în mișcare turbulentă etc.

Odată cu introducerea simulărilor computerizate în anumite domenii din industrie sau chiar pentru demonstrații casnice, a intervenit necesitatea verificării și validării rezultatelor acestor unelte, prin compararea datelor obținute cu cele ale experimentelor fizice corespunzătoare. Validarea rezultatelor constă din procesul comparativ de date și acceptarea sau inacceptarea unui anumit nivel de abatere de la rezultatele obținute din experimente.

Următorul capitol, ”**Caracteristici ale amestecului aer-metan, transpuse în simulări computerizate**”, tratează parametri și caracteristici ale gazelor sau amestecurilor de gaze, atât prin prisma literaturii de specialitate, cât și din punct de vedere al implementării acestora în cadrul simulărilor computerizate.

Mișcarea unui fluid este deosebit de complexă, considerarea simultană a tuturor factorilor ce intervin în timpul acesteia conducând la o formulare matematică mult prea complicată pentru a putea fi pusă în practică. Astfel, se impune simplificarea fenomenului real prin eliminarea factorilor neesențiali, dar cu păstrarea celor al căror rol este determinant.

Pentru exemplificare, în acest capitol sunt prezentate simulări computerizate ce evidențiază: difuzia unui volum de metan în aer, influența presiunii asupra direcțiilor și vitezelor de difuziune a metanului, transportul de căldură și influența temperaturii asupra comportamentului masei de metan în volumul de aer.

Capitolul al treilea, ”**Turbulența în simulările computerizate**”, explică termenii turbulenței și modalitățile de modelare a acesteia, modul de implementare a modelelor în cadrul uneltelor CFD. Capitolul face o trecere în revistă a numeroaselor modele matematice de rezolvare a problemelor de turbulență și prezintă constantele și numerele consacrate acestui tip de probleme.

Prin două simulări computerizate ale exploziei unei atmosfere aer-metan în interiorul unui tub rectangular prevăzut cu obstacole, în acest capitol se face selecția modelului de turbulență ce va fi utilizat în continuare, în prezenta lucrare. Au fost testate două modele ale turbulenței, pentru care au fost afișate serii de imagini reprezentând contururi de culoare ale temperaturilor, liniile de curent ale vitezelor și contururi de culoare ale numărului Reynolds. Rolul obstacolelor din aceste simulări este acela de a facilita formarea turbioanelor în spațiile dintre acestea, turbioane care, conform teoriei, își preiau energia din fluxul din partea superioară a tubului dreptunghiular și o transmit spre turbioanele de dimensiuni mai mici, prin efectul de cascadă.

Al patrulea capitol, "**Cinetica chimică în simularea exploziilor amestecurilor aer-metan**", tratează combustia metanului din punct de vedere al reacțiilor și mecanismelor chimice și se axează pe modelarea computerizată a vitezei de reacție a metanului în prezența oxigenului.

Vitezele de reacție variază de la reacțiile ce par a decurge instantaneu, la reacțiile ce par a nu avea loc. Însă, în toate cazurile, concentrația reactanților prezintă o descreștere în timp, iar viteza de reacție descrie cât de rapid se petrece această descreștere. Cele mai multe reacții, studiate prin măsurarea constantei de proporționalitate, prezintă o creștere a vitezei de reacție odată cu creșterea temperaturii.

În cadrul capitolului a fost transpusă într-o aplicație grafică reacția de ardere a metanului în prezența oxigenului, obținem curbele de descompunere a gazului metan, respectiv de producere a dioxidului de carbon. Tot aici au fost evidențiate câteva mecanisme de combustie a metanului, unele dintre ele contribuind la realizarea simulărilor computerizate ale exploziilor de amestecuri aer-metan ce stau la baza cercetării efectuate prin această lucrare.

Tot în acest capitol a fost realizat un studiu comparativ între datele rezultate ale unei simulări computerizate și datele rezultate ale calculului prin metode obișnuite, pentru evidențierea similitudinii dintre cele două metode.

Capitolul cinci, "**Subrutine pentru definirea funcțiilor și implementarea lor în cadrul simulărilor computerizate**", prezintă posibilitățile de scriere, în cod de programare, a funcțiilor matematice care să înlocuiască valorile constante ale unor parametri și exemplifică, prin simulări, utilizarea acestora.

Sunt descrise terminologia rețelei de discretizare și tipurile de date utilizate în cadrul codului sursă, este prezentat modul de apelare a secvențelor de program în decursul procesului de soluționare și sunt enumerate tipurile de macro-uri puse la dispoziție de aplicația utilizată, în vederea definirii funcțiilor necesare.

Sunt exemplificate, prin intermediul mai multor simulări, profilul parabolic al vitezei de intrare a unui fluid într-un tub, creșterea unui debit și a temperaturii unei suprafețe metalice în timp, precum și modul de indexare a elementelor rețelei de discretizare pe un anumit domeniu de studiu.

Capitolul șase, "**Simulări computerizate ale exploziilor amestecurilor aer-metan**", tratează două cazuri ale proceselor de explozie a amestecului aer-metan în două medii diferite, considerând, pentru al doilea caz, scenarii diferite.

Primul caz, *Simularea exploziei amestecului aer-metan într-un spațiu cu obstacole*, reprezintă prima reușită de acest gen din România, și una dintre puținele realizate pe plan mondial. Explozia virtuală este reprezentată printr-o serie de imagini ce evidențiază inițierea și propagarea flăcării în interiorul unui tub cu obstacole.

Un caz interesant în studiul presiunilor de explozie îl constituie intersecțiile lucrărilor miniere subterane. Pentru a observa comportamentul câmpului de presiuni în astfel de situații, în domeniul virtual a fost construită o intersecție a două galerii miniere care conțin un amestec exploziv aer-metan la o concentrație stoichiometrică. Una dintre galerii are ramificații cu două lucrări închise cu diguri. Analiza efectelor unei explozii de metan în lucrările miniere considerate au fost realizată în cadrul a 3 scenarii, cu dispunerea locației inițierii amestecului exploziv în 3 puncte diferite.

Capitolul șapte, ”**Experimente fizice și validarea simulărilor computerizate**”, prezintă experimentele fizice realizate privind explozii ale amestecului aer-metan și compararea rezultatelor cu cele ale simulărilor computerizate, în vederea validării acestora.

În acest scop, al realizării analizei comparative, a fost conceput și construit un spațiu experimental care să permită abordarea într-o manieră diferită, modernă, a studiului fenomenologiei exploziilor atmosferelor combustibile, prin utilizarea tehnicilor Schlieren și înregistrarea procesului cu o cameră de mare viteză. Pentru standul experimental realizat a fost depusă **Cererea de Brevet de Invenție** înregistrată la Oficiul de Stat pentru Invenții și Mărci cu numărul A/00788 din 04.11.2016.

Ulterior efectuării experimentelor fizice au fost realizate simulări ale combustiei metanului, respectând datele constructive ale modelului real al camerei de explozie, astfel putându-se efectua analiza comparativă.

Ultimul capitol, ”**Concluzii și contribuții personale**”, încheie teza prin prezentarea concluziilor finale, precum și a contribuțiilor personale aduse prin prezenta lucrare. Au fost subliniate viitoarele direcții de cercetare posibil de urmat, utilizând rezultatele obținute prin intermediul acestei teze de doctorat. Principalele contribuții personale sunt enumerate în continuare:

- Am prezentat structura codurilor CFD, metodele pe care se bazează aceste aplicații și principiile realizării unei simulări computerizate.
- Am relevat importanța alegerii modelului matematic într-o rezolvare reușită a cazurilor de curgere a fluidelor și aportul fiecărei componente a modelului, respectiv a condițiilor de frontieră și a ecuațiilor de guvernare la rezultatele finale ale simulărilor.
- Am evidențiat importanța considerării factorilor ce intervin în formularea matematică a simulărilor computerizate, din punct de vedere al simplificării fenomenului real.
- Am prezentat caracteristicile principale ale amestecului aer-metan, în baza documentării din literatura de specialitate.
- Am realizat o simulare computerizată în scopul vizualizării difuziei gazului metan într-un volum de aer, în prezența gravitației. Pe fondul aceleiași simulări, am evidențiat diferențele de densități în baza cărora are loc fenomenul de difuziune.
- Am arătat, printr-o a doua simulare computerizată, efectele presiunii asupra răspândirii masei de metan într-un volum de aer.
- Prin intermediul a două simulări computerizate, am evidențiat transportul temperaturii în mediul analizat și dependența de temperatură a comportamentului difuziv al gazului metan într-un volum de aer.

- Am prezentat modul de calcul considerat de aplicația Fluent, în cazurile ecuației termice de stare, a difuziei, viscozității, căldurii specifice și conductivității termice, software utilizat în lucrarea de față pentru realizarea simulărilor computerizate.
- Am relevat metodele de modelare a turbulenței prin tehnicile CFD și am evidențiat modelele des utilizate în problemele de mecanica fluidelor.
- Am realizat două simulări computerizate ale exploziilor de amestec aer-metan, prin metodele de turbulență LES și  $k-\epsilon$ , pentru determinarea modelului adecvat prezentei lucrări.
- Am pus în evidență rolul cineticii chimice în studiul proceselor de tip explozie a amestecurilor de gaze.
- Am identificat soluțiile tehnice ce trebuie aplicate pentru realizarea unei simulări computerizate privind combustia metanului, prin prisma legilor cineticii chimice.
- Am identificat mecanismele adecvate soluțiilor computerizate ale exploziilor amestecurilor aer-metan.
- Am realizat, cu ajutorul aplicației Reaction Kinetics Live, o simulare a oxidării metanului în prezența oxigenului, pentru evidențierea descompunerii reactanților și creării produșilor de reacție.
- Am realizat, prin aplicația Fluent, o simulare computerizată a unui amestec stoichiometric aer-metan, pentru culegerea datelor privind viteza de reacție.
- Am efectuat un studiu comparativ între datele rezultate ale simulării computerizate și datele rezultate ale calculelor prin metode obișnuite, pentru evidențierea similitudinii dintre cele două metode.
- Am prezentat facilitățile oferite de pachetul multiphysics ANSYS pentru realizarea geometriilor virtuale, discretizarea domeniului studiat, rezolvarea problemelor de curgere a fluidelor și postprocesarea datelor rezultate.
- Am studiat și prezentat terminologia rețelei de discretizare, tipurile și structurile de date aferente mediului de programare utilizat de aplicația Fluent pentru implementarea funcțiilor definite de utilizator.
- Am studiat și prezentat modul de apelare a secvențelor în procesul de soluționare a problemelor de curgeri de fluide, pașii executați de la inițiere până la atingerea convergenței.
- Am studiat și prezentat tipurile de macro-uri utilizate pentru definirea funcțiilor prin limbaj de programare C și modul de implementare, prin interpretare sau compilare, în cadrul problemei.
- Am realizat teste de compilare și rulare a unor funcții pe elementele rețelei de discretizare pentru înțelegerea indexării și localizării acestora în cadrul domeniului analizat.
- Am realizat trei simulări computerizate cu utilizarea funcțiilor definite de utilizator, pentru crearea unui profil parabolic al vitezei la intrarea într-un domeniu, creșterea unui debit funcție de timp și creșterea temperaturii unei suprafețe metalice.
- Am elaborat setul de condiții inițiale și condiții de frontieră necesare realizării unei simulări computerizate a exploziei amestecului aer-metan într-un spațiu cu obstacole.

- **Am realizat simularea computerizată a exploziei amestecului aer-metan, reprezentând prima reușită de acest gen din România, și una dintre puținele realizate pe plan mondial.**
- Am realizat o simulare computerizată pentru studiul presiunilor de explozie în punctul de intersecție a două lucrări miniere subterane, una dintre galerii având ramificații cu alte două lucrări închise cu diguri, demonstrând teoria conform căreia presiunile de explozie cresc în intersecții.
- Am realizat un stand de experimentare a exploziilor de gaz, care oferă posibilitatea înregistrării continue a frontului de flacără, stand pentru care a fost depusă **Cererea de Brevet de Invenție** înregistrată la Oficiul de Stat pentru Invenții și Mărci cu numărul A/00788 din 04.11.2016.
- Am efectuat experimente fizice ale exploziilor de metan pe standul experimental, cu înregistrarea parametrilor principali ai procesului.
- Am realizat simulări respectând elementele constructive ale standului și caracteristicile amestecurilor aer-metan și am dovedit validitatea rezultatelor obținute în mediul virtual, prin comparare cu cele obținute din experimentele fizice.

Având în vedere contribuțiile aduse și problemele de cercetare identificate în acest domeniu, continuarea cercetărilor vizează următoarele **direcții** ce pot fi elaborate în viitor:

- Implementarea sistemelor FSI (Fluid Structure Interaction) în simulările computerizate ale exploziilor de gaze în spații închise.
- Utilizarea rețelelor de discretizare dinamice, pentru o aproximare superioară a modului de eliberare a presiunilor de explozie.
- Îmbunătățirea continuă a funcțiilor ce descriu fenomene din natură, utilizarea acestora pentru rezolvarea problemelor din domeniul sănătății și securității în muncă.