

УДК 622.812: 534.612.1

Н. Н. Налісько, канд. техн. наук

*Стахановський навчально-науковий інститут горних і освітніх технологій Української інженерно-педагогічної академії, г. Стаханов, Україна*

## Численний розрахунок параметрів вибухового горіння газовоздушних сумішей в вироботках угольних шахт

Розглянуті існуючі методики визначення значень надлишкового тиску вибуха газовоздушних сумішей для специфічних умов різних галузей промисловості. Обґрунтований новий газодинамічний підхід до розрахунку амплітуди тиску вибуха рудничної атмосфери за умов угольних шахт з використанням закономірностей фізичної хімії в області кінетики газозварних вибухових реакцій горіння.

Ключові слова: гірська вироботка, вибуховий газовий суміш, хімічна реакція, тиск вибуха, численний розрахунок.

**Вступлення.** Аварійні ділянки угольних шахт, де відбулися вибухи газу або виникли пожежі, несуть в собі небезпеку повторних вибухів рудничної атмосфери. Безпека робіт гірничознахідників в таких умовах забезпечується вибухозащитними спорудами. Надійність роботи таких споруд залежить в т.ч. від правильного оцінки навантаження на них від дії ударних хвиль, викликаних повторними вибухами газовоздушних сумішей. Для розрахунку вибухозащитних споруд існує нормативна база, яка була розроблена в 80-х роках минулого століття. Однак проблема вибухів метановоздушних сумішей на аварійних ділянках і проблема зведення до мінімуму руйнівного впливу повітряних ударних хвиль залишається по-прежнему актуальною. Об цьому свідчать випадки руйнування вибухозащитних споруд при вибуху газу в закритих просторах і виходи ударної хвилі з небезпечною для людини надлишковою тиском в місця укриття персоналу, незважаючи на дотримання всіх діючих методик визначення безпечних відстаней. По цій причині точність існуючих методів розрахунку в складних ситуаціях перестала задовольняти гірничознахідників.

**Аналіз останніх досягнень.** В діючих нормативних документах [1, 2] початкова амплітуда надлишкового тиску вибуха рудничної атмосфери залежить від довжини газозварного ділянки вироботки. Її розрахунок ґрунтується на залежностях, встановлених за експериментальними вибухами, на пробних ділянках шахт [3, 4]. Такі емпіричні залежності не можуть задовольняти всім різноманітним умовам угольних шахт і відповідно виникає невизначеність в розрахунках. Так, наприклад, діючі в Росії і в Україні нормативи по-різному визначають максимальні значення надлишкового тиску при вибуху газозварного ділянки вироботки (1,6 МПа і 2,8 МПа).

Складність теоретичного підходу до розрахунку надлишкового тиску вибуха вуглеводородних газовоздушних сумішей визначається тим, що в режимі дефлаграційного горіння, характерного для умов угольних шахт, спостерігається значительний розброс в швидкості поширення пламени (від 4 до 500 м/с відносно стінок вироботки [5, 6, 7]) і відповідно швидкості енерговиділення. На цей процес значительний вплив мають умови вибуха. Найбільшу інтенсивність вибухи розвивають в витягнутих шероховатих каналах, якими і є гірські вироботки [8, 9].

В фізиці горіння і вибуха газів відомі аналітичні рішення розрахунку максимального тиску, яке може виникати при вибуху газу в закритому об'ємі [8, 9, 10], процес вважається адиабатним. Ця залежність отримана з рівняння стану ідеального газу і використовується в нормативних документах для розслідування аварійних вибухів, встановлення норм вибухозащитності на промислових і громадянських об'єктах [11, 12]:

$$p_{\text{макс}} = \frac{p_{\text{н}} T_{\text{ад}}(V) \sum m_{j_k}}{T_{\text{н}} \sum m_{i_{\text{н}}}}, \quad (1)$$

где  $p_{\text{н}}$  — начальное давление, при котором находится исходная смесь, кПа;

$T_{\text{ад}}(V)$  — адиабатическая температура горения стехиометрической смеси горючего с воздухом при постоянном объеме, К;

$\sum m_{j_k}$  — сумма числа молей конечных продуктов горения;

$T_{\text{н}}$  — температура исходной смеси, К;

$\sum m_{i_{\text{н}}}$  — сумма числа молей газообразных исходных веществ.

Согласно (1) максимальное давление в закрытом объеме определяется в основном соотношением адиабатической температуры горения стехиометрической смеси к исходной температуре. В такое же количество раз и увеличивается начальное давление. Вклад в увеличение давления, величины изменения количества молей продуктов взрыва к исходной смеси, для углеводородных газов незначителен. Большой вклад, в этом смысле, оказывает фазовый переход воды (продукт горения) в газообразное состояние – 2/3 от начального объема газа [13].

Однако, реальные взрывы газоздушных смесей редко происходят в полностью закрытых объемах и зависимость (1) может использоваться только для весьма ориентировочных оценок. Как правило, взрывы происходят в объемах (производственные или жилые помещения, горные выработки), в которых имеются разгрузочные площади: окна, легко разрушаемые стеновые проемы и др. Для протяженных горных выработок это торцевые площади загазированных участков. В этих условиях, по отношению к формуле (1), значения максимального давления могут быть как значительно ниже расчетных, так и значительно выше расчетных. Последний случай наблюдается в горных выработках, за счет известного эффекта ускорения движения фронта пламени под воздействием на него прогрессирующих турбулентных пульсаций, искривляющих и резко увеличивающих поверхность горения [8, 9]. При наличии в горных выработках локальных сопротивлений движению фронта пламени (загроможденность оборудованием) могут возникать области детонационного горения некоторых объемов газа.

В настоящее время, различные отрасли промышленности, для своих специфических условий, решают задачу более точного определения избыточного давления взрыва путем проведенных экспериментальных взрывов в типичных условиях и установления на их основе эмпирических зависимостей.

Так, в области промышленного строительства, в расчет зданий на импульсные нагрузки внешнего взрыва заложена амплитуда ударной воздушной волны, определяемая по эмпирическим формулам М.А. Садовского [14, 15].

В области промышленной переработки взрывоопасных материалов (нефтепродукты, горючие газы) избыточное давление при аварийных взрывах устанавливается по экспериментальным графикам, которые связывают амплитуды взрыва с возможными объемами утечек взрывчатых газов [16, 17]. Графики получены путем проведения экспериментальных взрывов [16, С. 15] или определены по принципу подобия «кубического корня» Хопкинса–Кранца к известным аварийным взрывам [16, С. 18].

В области гражданского строительства, в помещениях, где используется природный газ, величина давления возможного аварийного взрыва устанавливается по табличным данным. Данные получены в Московском инженерно-строительном институте при проведении экспериментальных взрывов пропановоздушной смеси в камере кубической формы объемом 14 м<sup>3</sup> [13, С. 303].

В области промышленной переработки взрывоопасных пылевидных и сыпучих материалов (угольная пыль, декстрины, пластмассы и т.п.), в расчет устойчивости аппаратов переработки к аварийным взрывам заложены максимально возможные давления взрыва, которые определены в экспериментальных установках [17]. Установки имитируют условия переработки и позволяют в экспериментальных взрывах установить параметры взрыва и взрывозащиты (площади разгрузочных окон) для различных материалов и конструкций аппаратов.

В Украине для установления категории помещения по взрывопожарной опасности действует нормативный акт МЧС [19], который определяет методику расчета избыточного давления возможного взрыва газозвудушных смесей по следующей формуле:

$$\Delta P = (P_{\max} - P_0) \cdot \frac{m \cdot z}{V_{\text{своб}} \cdot \rho_z} \cdot \frac{100}{C_{\text{ст}}} \cdot \frac{1}{K_n}, \text{ Па} \quad (2)$$

где  $P_{\max}$  – максимальное давление взрыва стехиометрической газозвушной или паровоздушной смеси в закрытом объеме;

$P_0$  – начальное давление, кПа;

$m$  – масса горючих газов или паров легковоспламеняющейся жидкости, которые попали в результате расчетной аварии в помещение, кг;

$z$  – коэффициент участия горючих газов или паров во взрыве, который может быть рассчитан на основании характера распределения газов и паров в объеме помещения;

$V_{\text{своб}}$  – свободный объем помещения, м<sup>3</sup>;

$\rho_{г,п}$  – плотность газа или пара при расчетной температуре  $t_p$ , кг/м<sup>3</sup>.

Определяющим параметром в этой зависимости является  $P_{\max}$  – максимальное давление взрыва стехиометрической газозвушной смеси в закрытом объеме. Остальные члены уравнения (2) являются уточняющими в сторону снижения  $P_{\max}$ . Значение  $P_{\max}$  согласно [19]: «... определяется исследовательским путем или принимается по справочным данным...». В случае отсутствия таких данных, допускается принимать  $P_{\max}$  таким, что равняется 900 кПа».

**Формулирование целей.** Анализ методов определения параметров аварийных взрывов, используемых в различных отраслях, показал, что при этом используется чисто эмпирический подход. Для объективного учета всех факторов, влияющих на процесс формирования избыточного давления при взрыве газозвушных смесей необходимо физико-математическое обоснование методов расчета.

**Изложение основного материала.** Рассмотрим взрыв газозвушных смесей в протяженной горной выработке. Поскольку зажигание смеси происходит от слабых источников, то при условии существования в выработке взрывных концентраций углеводородов происходит дефлаграционное горение [20]. Несмотря на разнообразия проявления режимов дефлаграционного горения и наличия турбулентных искривлений фронта распространения пламени, усреднено, модель процесса можно представить по схеме рисунка 1.

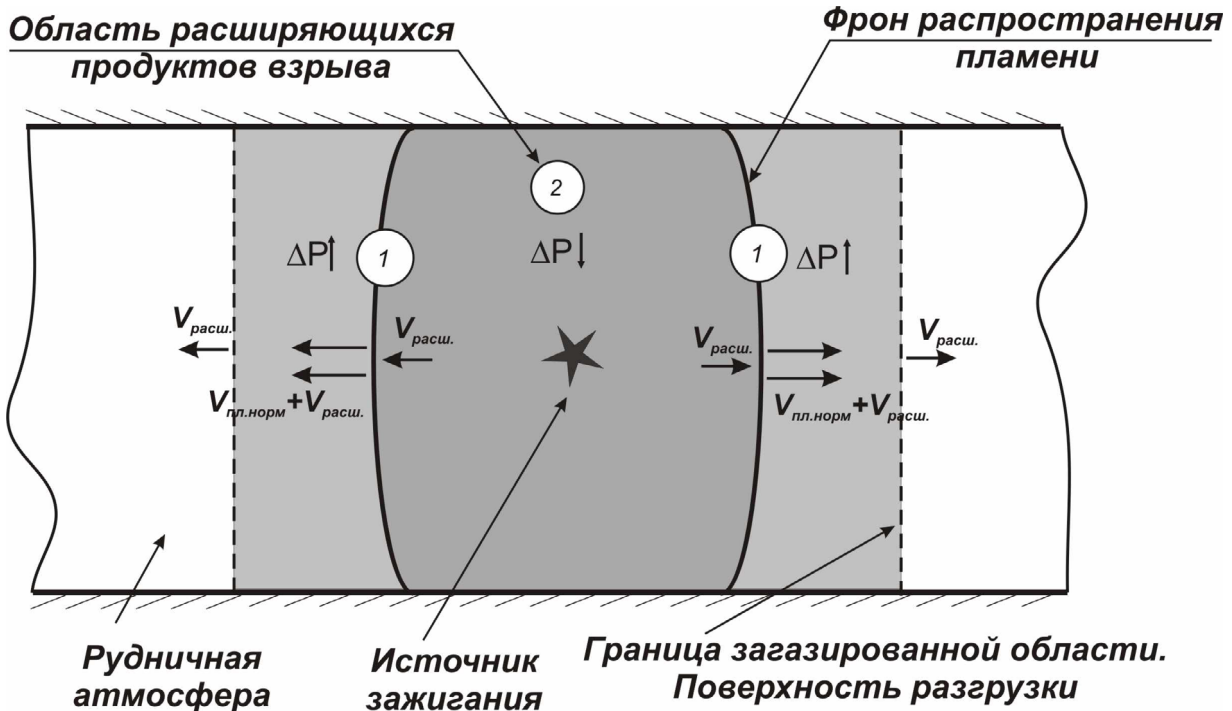


Рис. 1. Модель процесса дефлаграционного горения газозвушной смеси в горной выработке

Поскольку процесс происходит в полужакрытом пространстве, то одновременно с процессом горения газовоздушной смеси происходит расширение нагретых продуктов горения. Применение здесь зависимости (1) для расчета избыточного давления, невозможно по следующей причине. Скорость фронта распространения горения в этой модели, обусловлено двумя факторами: нормальной скоростью распространения пламени  $V_{пл.норм}$  (для метана 0,45 м/с) плюс скорость расширения продуктов горения  $V_{расш.}$ . Рост избыточного давления происходит в зонах горения (тепловыделения) – 1 (рис. 1). Одновременно с процессом горения происходит расширение продуктов взрыва и как следствие их охлаждение, что соответственно вызывает падения избыточного давления в зоне 2 (рис. 1). Поэтому общая температура сгорания смеси не будет соответствовать адиабатической.

В каждом конкретном случае общее избыточное давление  $\Delta P$  взрыва будет определяться балансом между скоростью энерговыделения, а равно и скоростью прироста  $\Delta P$  (зона 1), и скоростью падения давления и температуры в зоне 2 за счет расширения газов. На этот баланс, при прочих равных условиях, влияют следующие факторы: 1) степень турбулизации фронта пламени, которая может увеличивать площади ламинарных слоев горения в турбулентных потоках и соответственно увеличивать скорость тепловыделения; 2) величина площади разгрузки в полужакрытом пространстве, в качестве которой, в горной выработке, выступает площадь торцов загазированных участков. Влияние второго фактора характерно не только для условий горных выработок, но и в условиях взрыва в помещениях и аппаратах переработки взрывоопасных материалов [13, 17]. В экспериментальных исследованиях в этих отраслях второй фактор принято учитывать коэффициентом сброса – соотношением площади разгрузки к объему полужакрытого пространства.

Для решения рассматриваемой задачи – расчета амплитуды давления взрыва рудничной атмосферы в угольных шахтах предлагается использовать новый газодинамический подход, основанный на численном решении системы уравнений газовой динамики [21]. Задача решалась путем использования методов численного счета уравнений гидродинамики в системе "газовая взрывчатая среда – окружающая среда". Движение среды в цилиндрической системе координат описывается уравнениями Эйлера (в дивергентном виде):

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho \bar{W}) &= 0, && \text{неразрывности;} \\ \left. \begin{aligned} \frac{\partial \rho u}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho u \bar{W}) + \frac{\partial P}{\partial z} &= 0, \\ \frac{\partial \rho v}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho v \bar{W}) + \frac{\partial P}{\partial r} &= 0 \end{aligned} \right\} &&& \text{движения;} \quad (3) \\ \frac{\partial \rho E}{\partial t} + \operatorname{div}(\rho E \bar{W}) + \operatorname{div}(PW) &= 0, && \text{энергии;} \end{aligned}$$

где  $\rho$  – плотность;  $P$  – давление;  $W$  – скорость;  $u, v$  – компоненты скорости  $W$  по оси  $z$  и  $r$  соответственно;  $z, r$  – цилиндрические координаты;  $E = J + \frac{1}{2}(u^2 + v^2)$  – полная энергия.

Для замыкания этой системы используются уравнение состояния (УРС) среды. В качестве УРС продуктов взрыва и рудничной атмосферы используется уравнение состояния идеального газа:

$$P = (\gamma - 1)\rho \cdot J \quad (4)$$

где  $J$  – внутренняя энергия;  $\gamma$  – показатель адиабаты;  $\rho$  – плотность газа.

Таким образом, система уравнений (3) является замкнутой и полностью описывает среду при решении газодинамических задач. Решения системы уравнений (3) производилось с использованием однородной схемы сквозного счета. В качестве такой схемы был применен модифицированный метод численного счета – метод Давыдова или «метод крупных частиц» (МКЧ) [22].

Поскольку формирование избыточного давления при взрыве определяется скоростью тепловыделения, то для ее расчета предлагается использовать уравнения химической кинетики газофазных реакций горения в форме Аррениуса [9, С. 366]:

$$Q = q \cdot c_1^n \cdot c_2^m \cdot k(T), \quad (5)$$

где:  $q$  – тепловой эффект реакции, кДж/моль;  
 $c_1, c_2$  – концентрации компонентов смеси (метан, кислород);  
 $n, m$  – порядок реакции (для смеси метан+воздух: 1, 1);  
 $k(T)$  – константа скорости химической реакции:

$$k(T) = A \exp\left(-\frac{E}{RT}\right),$$

где  $A$  – предэкспонент;  $E$  – энергия активации  $T$  – температура компонентов реакции,  $R$  – универсальная газовая постоянная.

Выделившееся в результате реакции тепло увеличивает внутреннюю энергию частиц газа  $J$ , зная которую, можно определить избыточное давление взрыва по уравнению состояния газа (4).

Сложность в использовании уравнений химической кинетики газофазных реакций горения состоит в том, что кинетический механизм окисления и горения углеводородов является не однозначным. Реакция горения углеводородов протекает в несколько десятков или сотен стадий с образованием промежуточных соединений, и описывается детальными кинетическими механизмами (ДКМ). Так, для метана известен полный ДКМ состоящий из 179 уравнений промежуточных хим. реакций и сокращенный ДКМ из 80 уравнений реакций, для которых известны уравнения химической кинетики в форме Аррениуса [23, 24]. Аналогичные механизмы известны и для гомологов метана, например, пропана [25]. Производить расчеты, используя ДКМ практически невозможно, т.к. порядок цепочки промежуточных реакции может сильно меняться в зависимости от условий. Поэтому, для расчета предлагается использовать принцип эйлеровых сеток: когда нет необходимости следить за судьбой отдельных частиц, а рассматривается состояние системы в целом. Таким образом, не нужно знать площади слоев ламинарного горения в турбулентных потоках. Такой подход согласуется и с методом численного счета – методом «крупных» частиц, который использует совместное эйлера-лагранжевое представление расчетной сетки. Для такого подхода возможно использовать глобальные кинетические параметры газофазных реакций, которые специально разработаны для случаев сложных газодинамических течений [26-29]. Они позволяют рассчитать скорость горения и тепловыделения для метана и других углеводородов в целом. В результате, состояние системы будет полностью определено.

Используя такой подход, была разработана программа численного счета состояния газовой среды в процессе ее горения. Были проведены тестовые расчеты зажигания и горения газовой смеси «топливо-воздух». Результаты расчета приведены на рисунке 2. Получена качественная картина состояния системы: в начальный момент времени, в точке зажигания (рис. 1) была задана температура 800°C; через 0,4 мкс в расчетной ячейке («крупной» частицы), согласно уравнения (5) возникает горение (тепловыделение) и согласно уравнению (4) возникает скачок избыточного давления (рис. 2, линия 1). Через некоторое время, процесс горения распространяется на остальные участки газовой смеси (линии 2, 3). Величины констант скорости химической реакции уравнения Аррениуса были приняты произвольно, как тестовые.

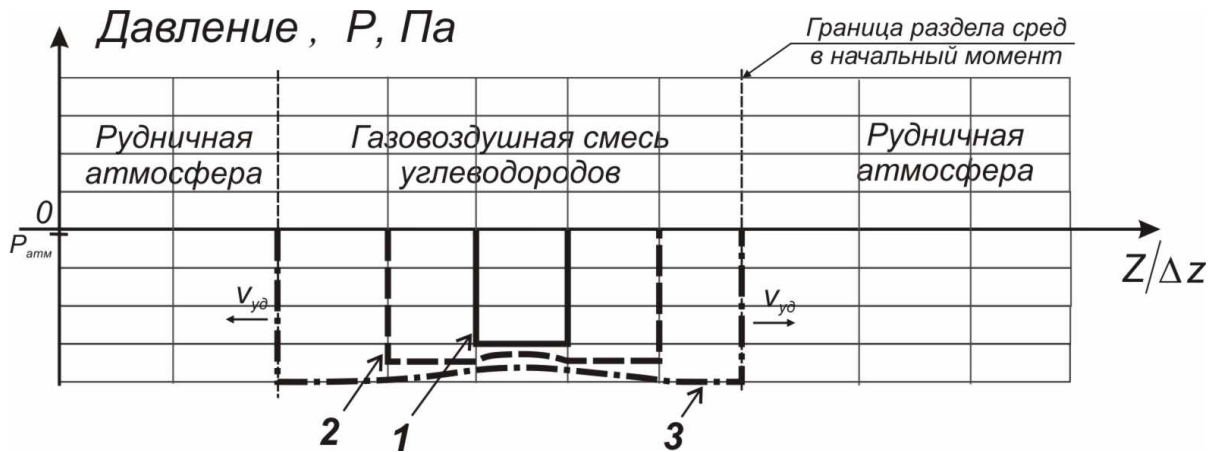


Рис.2. Результаты тестового расчета зажигания и горения газовой смеси «топливо-воздух»: 1 – давление, возникающее в области зажигания через 0,4 мкс после возникновения температуры 800°С; 2– давление через 0,6 мкс; 3 – давление через 10 мкс.

**Заключение.** Результаты тестового расчета показывают возможность использования предложенного метода определения избыточного давления и других параметров взрывного горения газовоздушных смесей в выработках угольных шахтах. Развитие рассмотренного метода численного счета будет производиться в направлении апробации эффективных констант скорости химической реакции уравнения Аррениуса для конкретных углеводородных газовоздушных смесей.

### Библиографический список

1. Устав ГВГСС по организации и ведению горноспасательных работ: ДНАОП 1.1.30-4.01-97. – Киев, 1997. – 450 с.
2. Устав военизированной горноспасательной части (ВГСЧ) по организации и ведению горноспасательных работ на предприятиях угольной и сланцевой промышленности. – М.: Недра, 1997. – 201 с.
3. О коэффициенте затухания воздушных ударных волн при их распространении по прямолинейным участкам выработок / [А.М. Чеховских, В.И. Гудков И.Л. Пономарев и др.] // Техника безопасности, охрана труда и горноспасательное дело. – 1970. – №11-12. – С. 38-39.
4. Гурин А.А. Ударные воздушные волны в горных выработках / А.А. Гурин, П.С. Малый, С.К. Савенко. – М.: Недра, 1983. – 223 с.
5. Петрухин П.М. К вопросу о выборе мест установки автоматических средств гашения взрывов метана и угольной пыли / П.М. Петрухин, М.И. Нецепляев, Е.П. Плоскоголовый // Безопасность взрывных работ в угольных шахтах. – Макеевка: МакНИИ, 1977. – С. 54–56.
6. Кудинов Ю.В. Совершенствование взрывозащиты шахтных дегазационных систем / Ю.В. Кудинов. – Макеевка-Донбасс: МакНИИ, 2006. – 285 с.
7. Булгаков Ю.Ф. Исследование процесса затухания ударных волн в упруго-пластической дисперсной среде / Ю.Ф. Булгаков, В.С. Сергеев, Г.М. Шецер // Физика аэродисперсных систем: респ. межвед. науч. сб. – 1986. – Вып.29. – С. 74-76.
8. Зельдович Я.Б. Физика ударных волн и высоко-температурных гидродинамических явлений / Я.Б. Зельдович, Ю.П. Райзер. – М.: Наука, 1966. – 686 с.
9. Баум Ф.А. Физика взрыва / Ф.А. Баум, К.П. Станюкович, Б.И. Шехтер. – М.: Физматгиз, 1959. – 800 с.
10. Люис Б. Горение, пламя и взрывы в газах / Б. Люис, Г. Эльбе; под ред. К.И. Щелкина, А.А. Борисова. – М.: Мир, 1968. – 592 с.
11. Расчет основных показателей пожаровзрывоопасности веществ и материалов: Руководство. – М.: ВНИИПО, 2002. – 77 с.
12. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения: ГОСТ 12.1.044-89. - [Введен 01.01.1991].
13. Стаскевич Н. Л. Справочник по газоснабжению и использованию газа / Н. Л. Стаскевич, Г. Н. Северинец, Д. Я. Вигдорчик. – Л.: Недра, 1990. - 762 с.
14. Динамический расчет сооружений на специальные воздействия / [М.Ф. Барштейн, Н.М. Бородачев, Л.Х. Блюмина и др.]; под ред. Б.Г. Корнеева, И.М. Рабиновича. – М.: Стройиздат, 1981. – 215 с.
15. Расторгуев Б.С. Проектирование зданий и сооружений при аварийных взрывных воздействиях / Б.С. Расторгуев, А.И. Плотников, Д.З. Хуснутдинов. – М.: Изд. Ассоц. строит. ВУЗов, 2007. – 152 с.

16. Бесчастнов М.В. Промышленные взрывы оценка и предупреждение / М.В. Бесчастнов. – М.: Химия, 1991. – 432 с.
17. Взрывные явления. Оценка и последствия: у 2-х кн. / [У. Бейкер, П. Кокс, П. Уэстайн и др.]; под ред. Я.Б. Зельдовича, Б.Е. Гельфанда. – М.: Мир, 1986. – Кн. 1. – 1986. – 319 с.
18. Таубкин С.И. Пожаро- и взрывоопасность пылевидных материалов и технологических процессов их переработки / С.И. Таубкин, И.С. Таубкин. – М.: Химия, 1976. – 264 с.
19. Нормы определения категорий помещений, зданий и наружных установок по взрывопожарной и пожарной опасности: НАПБ Б.03.002-2007. – Киев, 2007. – 27 с.
20. Полежаев Ю.В. От дефлаграции до детонации – три режима горения / Ю.В. Полежаев, О.Г. Сотник // Теплофизика высоких температур. – 2010. – Т. 48, №4. – С. 561-567.
21. Чернай А.В. Численное моделирование взрыва заряда ВВ вблизи открытой поверхности / А.В. Чернай, Н.Н. Налісько, К.М. Лукашенко // Сборник научных трудов Донбасского государственного технического университета. – 2011. – Вып. 34. – С. 40-45.
22. Белоцерковский О.М. Метод крупных частиц в газовой динамике / О.М. Белоцерковский, Ю.М. Давыдов. – М.: Наука, 1982. – 391 с.
23. Басевич В.Я. Детальные кинетические механизмы горения гомогенных газовых смесей с участием кислорода содержащих окислителей / В.Я. Басевич // Успехи химии. – 1987. – Т. LVI, вып. 5. – С. 705-731.
24. Варнац Ю. Горение. Физические и химические аспекты, моделирование, эксперименты, образование загрязняющих веществ / Ю. Варнац, У. Маас, Р. Дибл; под ред. П.А. Власова. – М.: Физматлит, 2006. – 352 с.
25. Jürgen Warnatz. Modeling and simulation of charged species in lean methane-oxygen flames. Inaugural-Dissertation / Jürgen Warnatz. – Frankfurt, 2005. – 108 p.
26. Зимунт В.Л. О суммарной кинетике горения углеводородных горючих / В.Л. Зимунт, Ю.М. Трушин // Физика горения и взрыва. – 1969. – Т.5, №4. – С. 567–573.
27. Бабушок В.И. Глобальные кинетические параметры для высокотемпературных газофазных реакций / В.И. Бабушок, А.Н. Докданча // Физика горения и взрыва. – 1993. – №4. – С. 48–80.
28. Цуканова О.А. Расчет суммарной скорости реакции и скорости пламени в газовых смесях / О.А. Цуканова // Кинетика и распространения пламени. – М.: АН СССР, 1959. – С. 3–32.
29. Ахметов Д.Б. Вычисление кинетических характеристик нормального распространения пламени на ЭВМ / Д.Б. Ахметов, В.А. Лобышев, В.В. Померанцев // Физика горения и взрыва. – 1969. – Т.5, №1. – С. 93-99.

Надійшла до редакції 20.07.2013

**М.М. Налісько**

*Стахановський навчально-науковий інститут гірничих та освітніх технологій Української інженерно-педагогічної академії*

### **Чисельний розрахунок параметрів вибухового горіння газоповітряних сумішей у виробках вугільних шахт**

Розглянуто існуючі методики визначення значень надлишкового тиску вибуху газоповітряних сумішей для специфічних умов різних галузей промисловості. Обґрунтовано новий газодинамічний підхід у розрахунок амплітуди тиску вибуху рудничної атмосфери для умов вугільних шахт із використанням закономірностей фізичної хімії в області кінетики газофазних вибухових реакцій горіння.

Ключові слова: гірська виробка, вибухова газова суміш, хімічна реакція, тиск вибуху, чисельний розрахунок.

**N.N. Nalisko**

*Stakhanovsky Educational and Research Institute of Mining and Education Technologies of Ukrainian Pedagogical-Engineering Academy*

### **Numerical calculation of the parameters of explosive combustion of gas-air mixtures in coal mines**

The article considers the existing techniques of determining the values of excessive pressure of air-gas mixture explosion for specific conditions in various branches of industry. A new gas-dynamic approach is substantiated for calculating the amplitude of mine air explosion pressure for coal mine conditions with the use of physical chemistry laws in the field of gas-cycle explosive combustion reactions kinetics .

Keywords: excavation, explosive gas mixture, chemical reaction, pressure of explosion, numerical calculation.