

ЗАГРЯЗНЕНИЕ ВОЗДУШНОЙ СРЕДЫ ПРИ ГОРЕНИИ ФОСФОРА

Розроблено тривимірну чисельну модель розрахунку процесу поширення токсичної річовини при горінні фосфору. Модель базується на чисельному інтегруванні рівняння конвективно-дифузійного переносу домишки. Наводяться результати обчислювального експерименту.

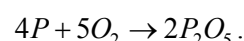
Разработана трехмерная численная модель распространения оксида фосфора в атмосфере при горении фосфора. Модель основывается на численном интегрировании уравнения конвективно-диффузионного переноса примеси. Приводятся результаты вычислительного эксперимента.

The 3D numerical model to simulate the toxic gas dispersion during phosphor firing. The model is based on the K-gradient transport model. The results of numerical experiment are presented.

Введение. Авария при транспортировке фосфора железнодорожным транспортом, которая произошла на Львовской железной дороге в июле 2007 года поставила задачу разработки более надежных, чем существующая нормативная методика [5], методов прогноза уровня загрязнения окружающей среды при горении фосфора. Нормативная методика дает возможность только оценить размеры (площадь) зоны загрязнения и только до высоты 10 метров от уровня земли и не позволяет рассчитать концентрацию оксида фосфора (продукта горения фосфора) на различном расстоянии от места аварии. Особую актуальность приобретает вопрос разработки эффективных методов прогноза уровня загрязнения атмосферы при авариях связанных с эмиссией токсичных веществ с целью оперативного получения научно обоснованной информации об уровне загрязнения воздушной среды, подстилающей поверхности для организации эффективной защиты населения от химического поражения. Целью настоящей работы является создание регуляторной математической модели, ориентированной на использование экологами в повседневной практике для экспресс-прогноза загрязнения атмосферы при горении фосфора.

Достоинством предложенной модели является возможность учета основных физических факторов, влияющих на процесс переноса оксида фосфора в атмосфере и при этом требуются небольшие затраты машинного времени при практической реализации модели.

Постановка задачи. Будем считать, что произошла разгерметизация цистерны с фосфором, в результате которой имело место испарение воды, находящейся в цистерне. Это привело к тому, что фосфор вступил в контакт с воздушной средой и начался процесс его горения:



В результате горения от цистерны начинает распространяться шлейф оксида фосфора, представляющего угрозу для окружающей среды.

Для моделирования процесса переноса оксида фосфора в атмосфере будем использовать трехмерное уравнение миграции примеси [2, 3]

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial (w - w_s)C}{\partial z} =, \\ = - \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \sum Q_i(t) \delta(r - r_i), \end{aligned} \quad (1)$$

где C – концентрация загрязняющего вещества (P_2O_5), попадающего в атмосферу при горении фосфора;

u, v, w – компоненты вектора скорости воздушной среды;

w_s – скорость оседания примеси;

$\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ – коэффициент турбулентной диффузии;

Q – интенсивность выброса токсичного вещества;

$\delta(r - r_i)$ – дельта-функция Дирака;

$r_i = (C_i, \gamma_i, Z_i)$ – координаты источника выброса (цистерны).

В данной модели имеется возможность задавать несколько источников выделения оксида фосфора, т. е. моделировать поступление оксида фосфора в атмосферу при горении от нескольких цистерн.

В разработанной математической модели

используется неравномерный профиль скорости ветра и вертикального коэффициента диффузии

$$u = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n,$$

$$\mu_z = k_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m,$$

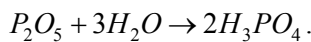
где u_1 – скорость ветра на высоте z_1 ; $k_1; 0, 2$; $n = 0, 16$; $m \approx 1$.

Для моделирования процесса загрязнения атмосферы при горении фосфора необходимо знать массовую скорость выгорания фосфора G , кг/м²·мин. Как правило, массовая скорость выгорания того или иного вещества определяется экспериментальным путем. Для экспресс-прогноза эту величину можно ориентировочно назначить исходя из имеющихся литературных данных [2]. Так как молекула фосфора имеет слабые связи, то можно считать, что массовая скорость выгорания его близка к массовой скорости выгорания бензина. Тогда, зная геометрические размеры цистерны, площадь ее поперечного сечения S можно рассчитать интенсивность Q поступления оксида фосфора в атмосферу

$$Q(t) = S(t)G,$$

где t – время.

Для защиты атмосферы используют подачу воды в шлейф оксида фосфора. В этом случае процесс взаимодействия описывается уравнением



В разработанном пакете прикладных программ процесс взаимодействия оксида фосфора с водой рассчитывается в отдельном модуле. Процесс рассеивания воды от источника (в данной работе рассматривается от вертолета) моделируется с помощью уравнения вида (1). В модели полагается, что капли воды осаждаются со скоростью w_s .

Метод решения. Рассмотрим построение попеременно-треугольной разностной схемы для численного интегрирования уравнения переноса. Заменим производную по времени раздельной разностью «назад»:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{ij}^n}{\Delta t}.$$

Конвективные производные представим в виде:

$$\frac{\partial uC}{\partial x} = \frac{\partial u^+ C}{\partial x} + \frac{\partial u^- C}{\partial x};$$

$$\mu_{2x} = \frac{\mu_x}{1 - \frac{u^- \Delta x}{\mu}} \mu_{1x} = \frac{\mu_x}{1 + \frac{u^+ \Delta x}{\mu}};$$

$$\frac{\partial vC}{\partial y} = \frac{\partial v^+ C}{\partial y} + \frac{\partial v^- C}{\partial y};$$

$$\frac{\partial wC}{\partial z} = \frac{\partial w^+ C}{\partial z} + \frac{\partial w^- C}{\partial z},$$

где $u^+ = \frac{u + |u|}{2}$; $u^- = \frac{u - |u|}{2}$, $v^+ = \frac{v + |v|}{2}$;
 $v^- = \frac{v - |v|}{2}$, $w^+ = \frac{w + |w|}{2}$; $w^- = \frac{w - |w|}{2}$.

Для аппроксимации конвективных производных используем выражения:

$$\frac{\partial u^- C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j,k}^- C_{i+1,j,k}^{n+1} - u_{ijk}^- C_{ijk}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^- C^{n+1};$$

$$\frac{\partial v^+ C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1,k}^+ C_{ijk} - v_{ijk}^+ C_{i,j-1,k}}{\Delta y} = L_y^+ C^{n+1};$$

$$\frac{\partial v^- C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1,k}^- C_{i,j+1,k} - v_{ijk}^- C_{ijk}}{\Delta y} = L_y^- C^{n+1};$$

$$\frac{\partial w^+ C}{\partial z} \approx \frac{w_{i,j,k+1}^+ C_{ijk} - w_{ijk}^+ C_{i,j,k-1}}{\Delta z} = L_z^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial w^- C}{\partial z} \approx \frac{w_{i,j,k+1}^- C_{i,j,k+1} - w_{ijk}^- C_{i,j,k}}{\Delta z} = L_z^- C^{n+1}.$$

Компоненты скорости потока будем задавать на гранях разностной ячейки (контрольного объема). Вторые производные аппроксимируем следующими выражениями:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \approx \tilde{\mu}_x \frac{C_{i+1,j,k}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta x^2} -$$

$$-\tilde{\mu}_x \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1};$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \approx \tilde{\mu}_z \frac{C_{i,j,k+1}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta z^2} - \tilde{\mu}_z \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{ij,k-1}^{n+1}}{\Delta z^2} =$$

$$= M_{zz}^- C^{n+1} + M_{zz}^+ C^{n+1}.$$

В данных выражениях L_x^+ , L_x^- , L_y^+ , L_y^- , L_z^+ , L_z^- , M_{xx}^+ , M_{xx}^- и т. д. – обозначения разностных операторов. С учетом этих обозначений, разностный аналог трехмерного уравнения переноса примеси будет иметь вид:

$$\begin{aligned} \frac{C_{ijk}^{n+1} - C_{ijk}^n}{\Delta t} + L_x^+ C^{n+1} + L_x^- C^{n+1} + L_y^+ C^{n+1} + \\ + L_y^- C^{n+1} + L_z^+ C^{n+1} + L_z^- C^{n+1} + \sigma C_{ijk}^{n+1} = \\ = (M_{xx}^+ C^{n+1} + M_{xx}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1} + \\ + M_{yy}^- C^{n+1} + M_{zz}^+ C^{n+1} + M_{zz}^- C^{n+1}). \end{aligned}$$

Расщепим решение данного разностного уравнения при интегрировании на временном интервале dt так:

– на первом шаге $k = \frac{1}{4}$:

$$\frac{C_{ij}^{n+k} - C_{ij}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k + L_z^+ C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ijk}^k =$$

– на втором шаге $k = n + \frac{1}{2}$; $c = n + \frac{1}{4}$:

$$\begin{aligned} \frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- C^k + L_y^- C^k + L_z^- C^k) + \\ \frac{\sigma}{4} C_{ij}^k = \frac{1}{4} (M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + \\ + M_{yy}^+ C^c + M_{zz}^- C^k + M_{zz}^+ C^c); \end{aligned}$$

– на третьем шаге $k = n + \frac{3}{4}$; $c = n + \frac{1}{2}$ используется формула (4);

– на четвертом шаге $k = n + 1$; $c = n + \frac{3}{4}$ используется формула (3).

В данные разностные соотношения входит «возмущенный» коэффициент диффузии $\tilde{\mu}$:

$$\mu_{1x} = \frac{\mu_x}{1 + \frac{u^+ \Delta x}{\mu}}, \quad \mu_{2x} = \frac{\mu_x}{1 - \frac{u^- \Delta x}{\mu}} \quad \text{и т. д.}$$

На пятом шаге расщепления учитывается влияние источников на изменение концентрации примеси и расчетная зависимость на этом шаге имеет вид:

$$\frac{C_{i,j,k}^{s^{n+1}} - C_{i,j,k}^{s^n}}{\Delta t} = \sum_{l=1}^N \frac{q_l(t^{n+1/2})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \delta_l.$$

В дискретном виде дельта-функция Дирака «размазывается» по объему разностной ячейки с учётом сбережения суммарного количества выбрасываемого загрязнения. Функции δ_l тождественно равняются нулю, кроме ячеек, где расположен l -й источник загрязнения. На каждом шаге расщепления расчет неизвестной концентрации оксида фосфора осуществляется по явной формуле бегущего счета.

Практическая реализация. На основе разработанной численной модели создан пакет прикладных программ CHEMICAL-3D. Разработанная численная модель была применена для решения задачи о загрязнении атмосферы при поступлении оксида фосфора от двух железнодорожных цистерн. Численное моделирование выполнено при следующих параметрах: размеры расчетной области $250 \times 221 \times 55$ м, коэффициент диффузии – $2,35 \text{ м}^2/\text{с}$, скорость ветра – $3,3 \text{ м/с}$ (на высоте 10 м), аварийный выброс происходит на высоте 1,3 м, профиль ветра – неравномерный; скорость оседания капель воды – $0,01 \text{ м/с}$. Для защиты атмосферы от загрязнения осуществляется подача воды от вертолета на высоте 9 м, интенсивность подачи воды – 150 кг/сек , вода подается в течение промежутка времени (100...116 с).

На рис. 2...4 показана зона загрязнения атмосферы возле цистерн для различных направлений ветра.

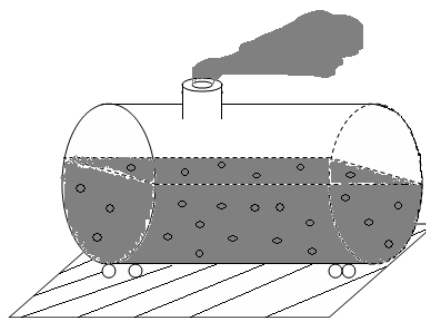


Рис. 1. Выход оксида фосфора из цистерны

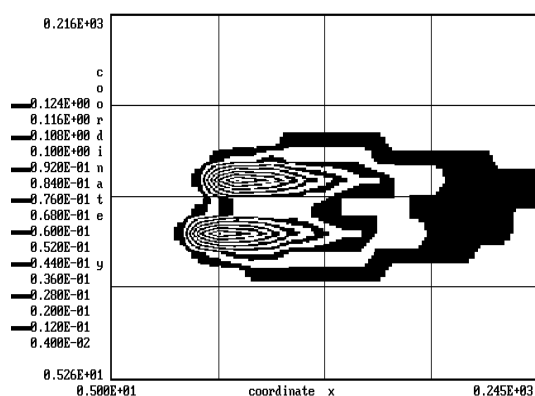


Рис. 2. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора из двух цистерн $t = 70$ с (сечение $z = 9$ м), $\alpha = -45^\circ$

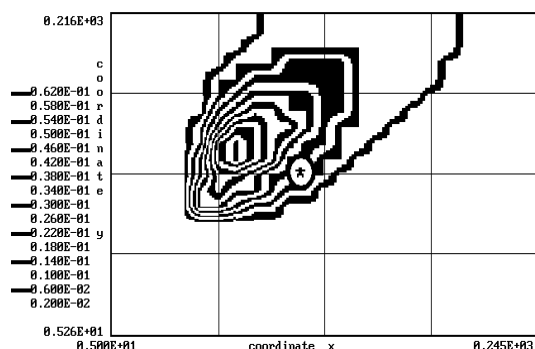


Рис. 3. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора из двух цистерн $t = 70$ с (сечение $z = 9$ м), $\alpha = 45^\circ$, * – место сброса воды от вертолета

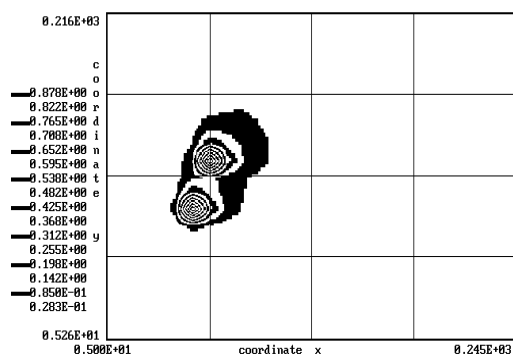


Рис. 4. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора из двух цистерн $t = 70$ с (сечение $z = 1,3$ м), $\alpha = 45^\circ$

Из рис. 2, 3 отчетливо видно, как происходит переориентация зоны загрязнения при изменении направления ветра. Так при угле $\alpha = -45^\circ$ отчетливо выделяется две подзоны с высоким градиентом концентрации оксида фосфора, которые соответствуют положению двух железнодорожных цистерн. Однако, при угле $\alpha = 45^\circ$ эти две подзоны сливаются в одну зону загрязнения на высоте 9 м. На высоте 1,3

м (рис. 4) при данной ориентации ветра можно отчетливо видеть положение дымящихся цистерн. На последующих рисунках показана динамика изменения формы, размеров и интенсивности зоны загрязнения при подачи воды от вертолета. Как видно из рис. 5 в первые секунды после окончания подачи воды зона загрязнения резко уменьшается в размерах (отметим, что подача воды прекращается в момент времени $t = 116$ с). Однако, достаточно быстро зона загрязнения «восстанавливается» в прежних размерах. Это отчетливо видно из рис. 7, который необходимо сравнить с рис.3, где представлена зона загрязнения перед подачи воды с вертолета, т. е. одноразовая подача воды является не слишком эффективным способом защиты атмосферы от загрязнения.

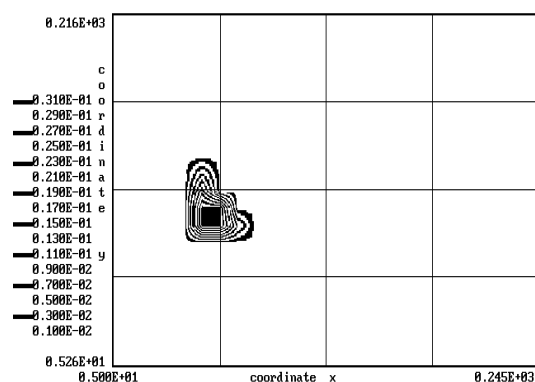


Рис. 5. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора из двух цистерн $t = 120$ с (сечение $z = 9$ м), $\alpha = 45^\circ$ (после подачи воды)

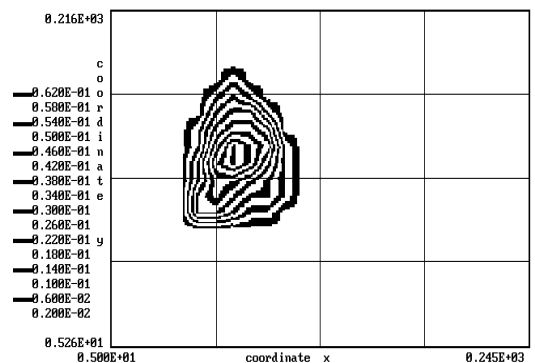


Рис. 6. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора из двух цистерн $t = 160$ с (сечение $z = 9$ м), $\alpha = 45^\circ$ (после подачи воды)

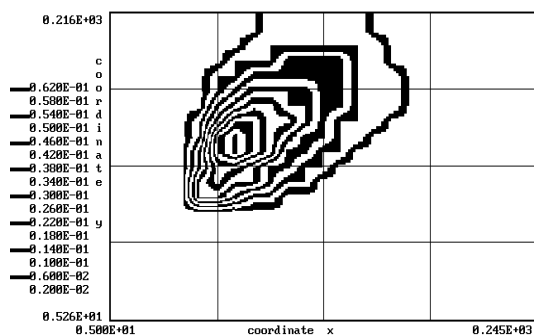


Рис. 7. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора из двух цистерн $t = 200$ с (сечение $z = 9$ м), $\alpha = 45^\circ$ (после подачи воды)

Ниже представлены данные об интенсивности нейтрализации оксида фосфора при подачи воды:

$t = 120$ с	нейтрализовано 8,26 кг оксида фосфора
$t = 140$ с	нейтрализовано 12,41 кг оксида фосфора
$t = 160$ с	нейтрализовано 14,38 кг оксида фосфора
$t = 160$ с	нейтрализовано 15,49 кг оксида фосфора
$t = 200$ с	нейтрализовано 16,14 кг оксида фосфора
$t = 260$ с	нейтрализовано 16,45 кг оксида фосфора
$t = 280$ с	нейтрализовано 16,45 кг оксида фосфора

Из этой таблицы видно, что процесс нейтрализации закончился к моменту времени $t = 260$ с.

Выводы. В работе построена трехмерная численная модель расчета загрязнения воздушной среды в случае горения фосфора. Модель основывается на численном интегрировании уравнения переноса примеси в атмосфере. Разработанная модель позволяет выполнить расчет процесса нейтрализации оксида фосфора (продукт горения фосфора) путем подачи воды от вертолета. Модель дает возможность оперативно рассчитать эффективность процесса нейтрализации с учетом расположения дымящихся цистерн, места, интенсивности и режима подачи воды, метеоусловий. Расчет по предложенной модели требует около 5 с на получение прогнозной информации об уровне загрязнения атмосферы и эффективности организованного процесса нейтрализации. Для практической реализации модели необходима стандартная метеорологическая информация. Дальнейшее совершенствование модели необходимо проводить в направлении ее адаптации к моделированию процесса нейтрализации оксида фосфора с учетом рельефа местности.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Котляревского В. А. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий: Учебн. пособ. В 5-ти кн. / Под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаева. - М.: АСК, 2001. - 200 с.
2. Згуровский М. З. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев - К.: Наук. думка, 1997. - 368 с.
3. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. - М.: Наука, 1982. - 320 с.
4. Методика прогнозування наслідків впливу (викиду) небезпечних хімічних речовин при аваріях на промислових об'єктах і транспорті. - К.: Наук. думка, 2001. - 33 с.

Поступила в редакцию 19.09.2007.