

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАССЕЙВАНИЯ ТЯЖЕЛОГО ГАЗА В АТМОСФЕРЕ

Запропонована чисельна модель та на її базі розроблено метод розрахунку процесу розповсюдження важкого газу в атмосфері. В якості математичної моделі використовуються тривимірні рівняння переносу домішки та потенціального руху повітря. Розрахунок здійснюється з використанням неявних різницьових схем. Надаються результати обчислювального експерименту з моделювання забруднення повітря у випадку аварійного витoku токсичної речовини.

Разработана численная модель и на ее основе построен метод расчета процесса распространения тяжелого токсичного газа в атмосфере. В качестве математической модели используется трехмерные уравнения переноса примеси и потенциального течения воздушной среды. Расчет осуществляется с использованием неявных разностных схем. Приводятся результаты вычислительного эксперимента по моделированию загрязнения воздушной среды в случае аварийной утечки токсичного вещества.

A numerical model to simulate the process of heavy gas transfer was developed. The numerical simulation is carried out using 3D models of pollutant transfer and potential air flow. The implicit finite difference schemes are used. The results of numerical simulation of air pollution are presented.

Введение

При авариях на химических объектах, транспорте могут иметь место утечки, выбросы тяжелых токсичных газов. Прогноз уровня загрязнения атмосферы при таких аварийных ситуациях, оценка размеров зон возможного токсичного поражения – важнейшая задача [1] при разработке ПЛАСа (план ликвидации аварийной ситуации). Необходимо отметить, что для моделирования переноса тяжелых газов существует несколько подходов. Один подход базируется на применении полных уравнений Навье-Стокса или применении данных уравнений в приближении Буссинеска [2]. Однако, при таком подходе необходимо использовать мелкую сетку. Учитывая, что размеры расчетной области могут оставлять сотни метров, то при этом подходе затраты машинного времени будут крайне высоки. На практике нередко «эффект» оседания токсичного газа часто не учитывают [7]. Другим подходом для моделирования переноса тяжелого газа может служить подход, рассмотренный в работе [5], при котором процесс оседания тяжелого аэрозоля моделируется введением в уравнение переноса примеси скорости гравитационного оседания w_s . Основная сложность состоит в определении этой величины. При переносе пылевых частиц, капель скорость оседания рассчитывается по ряду эмпирических зависимостей или по формуле Стокса. В настоящей работе рассматривается подход к определению этой величины, осно-

ванный на применении уравнения состояния идеального газа, позволяющий на базе трехмерного уравнения конвективно-диффузионного переноса примеси построить эффективный численный алгоритм расчета рассеивания тяжелого газа в атмосфере с учетом рельефа местности, профиля вектора скорости воздушного потока и неравномерного значения коэффициентов атмосферной турбулентной диффузии.

1. Математическая модель

Для моделирования процесса переноса тяжелого газа в атмосфере будем использовать трехмерное уравнение миграции примеси [3, 5]:

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

где C – концентрация загрязняющего вещества;
 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;

$r_i = (x_i, y_i, z_i)$ – координаты источника выброса.

Для расчета поля скорости воздушного потока с учетом рельефа местности делается допущение, что движение воздушной среды – потенциальное, тогда компоненты скорости воздушной среды определяются соотношениями

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial P}{\partial y}, \quad w = \frac{\partial P}{\partial z},$$

где P – потенциал.

Уравнение для определения потенциала имеет вид

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = 0. \quad (2)$$

Постановка краевых условий для уравнения (1) рассмотрена в работах [5, 3]. Для уравнения (2) ставятся следующие граничные условия:

- на твердых стенках $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$, где n – единичный вектор внешней нормали;
- на входной границе (границы втекания воздушного потока) $\frac{\partial P}{\partial n} = V_n$, где V_n – известное значение скорости;
- на выходной границе $P = P(x = \text{const}, y) + \text{const}$ (условия Дирихле).

В модели учитывается неравномерный профиль ветра и величины коэффициента атмосферной диффузии:

$$u = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n, \quad \mu_z = k_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m,$$

где u_1 – скорость ветра на высоте z_1 ;

$$k_1 = 0,1 \text{ м/с};$$

$$n = 0,15;$$

$$m \approx 1.$$

2. Метод решения

Численное интегрирование уравнения (1) осуществляется с использованием неявной поперечно-треугольной разностной схемы расщепления [3]. Для численного интегрирования уравнения (2) используется идея установления решения по времени, т.е. интегрируется уравнение вида

$$\frac{\partial P}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2},$$

где τ – фиктивное время.

Численное интегрирование данного уравнения проводится с использованием неявной разностной схемы условной аппроксимации. В разработанном пакете программ осуществляется также численное интегрирование уравнения (2) с помощью поперечно-треугольного метода Самарского [6].

3. Алгоритм расчета скорости w_s

На первом этапе расчета рассеивания тяжелого газа осуществляется решение уравнения (1), и притом полагается, что $w_s = 0$. Таким образом, в каждом контрольном объеме (разностной ячейке « ijk ») известна концентрация газа C_{ijk} на первом расчетном шаге. На втором этапе рассчитывается величина w_s в каждом контрольном объеме по следующему алгоритму:

1. Используя уравнение состояния идеального газа, рассчитывается парциальное давление токсичного газа в каждом контрольном объеме [3]

$$P_{ijk} = \frac{C_{ijk} R_u T}{M},$$

где R_u – универсальная газовая постоянная;

T – температура;

M – молекулярная масса токсичного газа.

2. Рассчитывается парциальный объем токсичного газа в каждой разностной ячейке (на основе закона Бойля-Мариотта).

3. Рассчитывается газовая постоянная смеси в каждой разностной ячейке.

4. Рассчитывается плотность смеси ρ в каждой разностной ячейке.

5. Из балансового соотношения [2] $\frac{\rho w_s^2}{2} = g \Delta z (\rho - \rho_a)$, определяется величина w_s в каждом контрольном объеме (здесь ρ_a – плотность воздуха; $g = 9,81 \text{ м/с}^2$).

6. В каждом контрольном объеме интегрируется уравнение

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\partial C w_s}{\partial z} = 0.$$

Таким образом, в конце второго этапа значение концентрации тяжелого газа в каждом контрольном объеме подправляется с учетом оседания газа.

4. Практическая реализация

Рассмотрим применение разработанной численной модели и построенного метода расчета загрязнения атмосферы при утечке хлора. Решение задачи находится при таких данных: размеры расчетной области: $120 \text{ м} \times 60 \text{ м} \times 60 \text{ м}$; коэффициент диффузии на высоте $z_1 = 10 \text{ м}$ – $\mu = 1 \text{ м}^2/\text{с}$. Скорость ветра на высоте 10 м – $1,5 \text{ м/с}$; температура воздуха – 20°C , атмосферное давление – 1 бар . Утечка хлора осуществляется с интенсивностью 10 кг/с , место утечки – перед первой насыпью (рис. 1). Расчетная область имеет сложную геометрическую форму и представляет собой комбинацию двух насыпей, между которыми находится впадина. Форма расчетной области формируется с помощью маркеров, которые позволяют выделить те разностные ячейки, которые относятся к области течения и отдельно выделить разностные ячейки, которые относятся к рельефу местности.

Рассмотрим результаты вычислительного эксперимента. В табл. 1 представлены расчетные значения величины максимальной концентрации токсичного газа во впадине между насыпями.

Таблица 1

Максимальная концентрация хлора во впадине, $t = 75 \text{ с}$

$x, \text{ м}$	10	20	30
$C, \text{ г/м}^3$	27,9	21,4	17,9

Как видно из данной таблицы внутри впадины происходит интенсивное загрязнение воздушной среды. Если принять во внимание, что ПДК для хлора составляет 1 мг/м^3 , то очевидно, что во впадине формируется подзона со смертельными концентрациями.

На рис.1 показана зона загрязнения воздушной среды в расчетной области для момента времени $t = 75 \text{ с}$. Хорошо видно, что шлейф токсичного газа огибает обе насыпи и между насыпями сформировалась обширная зона загрязнения с поражающими концентрациями.

Выводы

В работе разработана трехмерная численная модель, на основе которой построен метод расчета динамики загрязнения атмосферы при

утечке тяжелого газа. Численный расчет проводится с учетом рельефа местности и требует малых затрат машинного времени (около 10 с) на расчет одного варианта задачи. Дальнейшее совершенствование данного направления необходимо вести по созданию банка данных для компьютерных моделей относительно наиболее типичных загрязнителей.

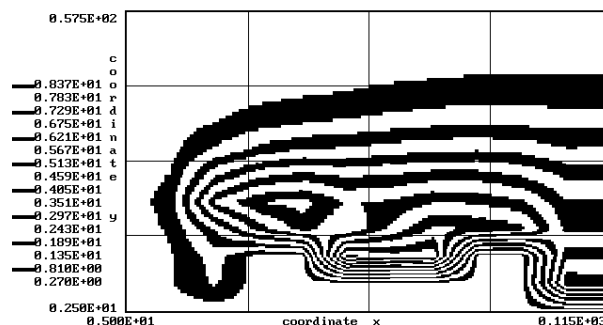


Рис. 1. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 75 \text{ с}$ (сечение $y = 60 \text{ м}$)

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий [Текст] : учеб. пособие в 5-ти кн. / под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаяева. – М.: АСВ, 2001. – 200 с.
2. Беляев, Н. Н. Основы теплопередачи [Текст] / Н. Н. Беляев. – К.: Вища шк. Головне вид-во, 1989. – 343 с.
3. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде [Текст] / М. З. Згуровский и др. – К.: Наук. думка, 1997. – 368 с.
4. Крейт, Ф. Основы теплопередачи [Текст] : [пер. с англ.] / Ф. Крейт, У. Блэк. – М.: Мир, 1983. – 512 с.
5. Марчук, Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды [Текст] / Г. И. Марчук. – М.: Наука. – 1982. – 320 с.
6. Самарский, А. А. Теория разностных схем [Текст]. – 2-е изд., испр. / А. А. Самарский. – М.: Наука. – 1983. – 616 с.
7. Эльтерман, В. М. Вентиляция химических производств [Текст]. – 3-е изд., перераб. / В. М. Эльтерман. – М.: Химия, 1980. – 288 с.

Поступила в редколлегию 10.11.2008.