

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ НА БАЗЕ ПОЛЕВОЙ МОДЕЛИ

На базі тривимірної чисельної моделі виконано розрахунок процесу поширення у атмосфері аміаку. Модель базується на чисельному інтегруванні 3D рівняння конвективно-дифузійного переносу домішки. Наводяться результати обчислювального експерименту щодо прогнозу рівня забруднення атмосфери.

На основе трехмерной численной модели рассчитан процесс распространения в атмосфере аммиака. Модель основывается на численном интегрировании уравнения конвективно-диффузионного переноса примеси. Приводятся результаты вычислительного эксперимента по прогнозу уровня загрязнения атмосферы.

The 3D CFD model to simulate the pollutant transfer of toxic gas after accidents was used. The model is based on the transport gradient model. The results of numerical experiments on forecasting the level of air contamination are presented.

Введение

При разработке плана ликвидации аварийной ситуации (ПЛАС) в случае аварийных разливов, выбросах токсичных веществ ответственным этапом является прогноз возможных масштабов загрязнения [9]. На основе такого прогноза можно научно обоснованно определить параметры защитных установок, их размещение, режим работы для минимизации экологического ущерба. Для прогноза загрязнения атмосферы при авариях достаточно активно применяются аналитические модели [3, 6] и основанные на них коммерческие коды (программы) расчета рассеивания токсичных газов в атмосфере. Например, на практике широко используется модель Гаусса [4, 10, 11], как в коде «Аммиак» (Россия). Данный код создан на основе «Методики расчета концентрации в воздухе и распространения газового облака» (приложение 1 ПБ 09-597-03). Следует иметь в виду, что модель Гаусса (используется в США с 1929 г.) подвергалась серьезной критике сотрудниками Главной геофизической лаборатории им. А. И. Воейкова [5] и данная модель не учитывает изменение с высотой профиля скорости ветра, вертикального коэффициента диффузии, геометрическую форму облака и т.д. В данном коде для расчета коэффициентов дисперсии используются формулы Briggs'a (разработанные в 1973 г.), причем есть неточность – Briggs предложил различные формулы для определения вертикального и поперечного коэффициентов дисперсии [10], а в коде «Аммиак» для расчета продольного коэффициента дисперсии используется та же зависимость, что и для поперечного коэффициента дисперсии. Эм-

пирические зависимости, применяемые в данном коде, определялись для конкретной территории США и для конкретных метеоусловий на этой территории. Возникает закономерный вопрос, например такой: «Эквивалентны ли метеоусловия в г. Индианаполис, где проф. S. Hanna [11] проводил эксперименты по уточнению ряда коэффициентов для модели Гаусса, метеоусловиям для Тульской или, например, Кировоградской области?» К сожалению, не получилось найти научные публикации, где обсуждались бы результаты экспериментов по определению коэффициентов дисперсии на территории Украины (для обоснованного применения их в модели Гаусса при прогнозе миграции примеси в Украине) и давалось бы подтверждение правомерности использования эмпирических зависимостей для коэффициентов дисперсии, других параметров и полученных в США, например, для Днепропетровской области. В целом можно сказать, что аналитические модели не позволяют комплексно учесть те закономерности, которые оказывают существенное влияние на перенос примеси в атмосфере в силу тех допущений, которые приняты для получения аналитического решения [4, 10].

Универсальным методом решения задач данного класса является численное моделирование.

Целью данной работы явилось применение построенной трехмерной численной модели (полевой модели, CFD model) [2] для расчета пространственного процесса загрязнения атмосферы при аварийном разливе сжиженного аммиака. Построенная модель дает возможность выполнить прямое численное моделирование процессов рассеивания токсичного газа с уче-

том неравномерного профиля ветра, неравномерных значений коэффициентов диффузии, геометрической формы облака (т.е., в модели выполняется критерий геометрического подобия). Модель позволяет получить прогнозные результаты в течение нескольких секунд на ПК средней и малой мощности.

Математическая модель

Рассматривается процесс загрязнения атмосферы при поступлении в нее токсичного газа – аммиака. Моделируется ситуация, когда над местом аварийного разлива образовалось облако газа (первичное облако) сложной геометрической формы.

Для расчета процесса загрязнения атмосферы при распространении токсичного газа, попавшего в воздушную среду вследствие аварии, используем трехмерное уравнение переноса примеси (модель градиентного типа) [1, 8]:

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

где C – концентрация примеси; u, v, w – компоненты вектора скорости воздушной среды; w_s – скорость оседания примеси (при решении данной задачи принята равной 0); $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ – коэффициенты атмосферной диффузии; Q – интенсивность выброса примеси; $\delta(r-r_i)$ – дельта-функция Дирака; $r_i = (x_i(t), y_i(t), z_i(t))$ – координаты источника эмиссии примеси.

В разработанной численной модели используется неравномерный профиль скорости ветра и вертикального коэффициента диффузии [2, 3]:

$$\begin{aligned} u = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n; \\ \mu_z = 0,11z, \end{aligned} \quad (2)$$

где u_1 – скорость ветра на высоте z_1 ; $n = 0,15$. Коэффициент μ_y принимается равным $\mu_y = \mu_x$.

При построении математической модели процесса загрязнения атмосферы, при разливе

сжиженного аммиака, делается следующая схематизация рассматриваемого процесса:

– полагается, что после аварийного разлива на месте аварии сформировалось первичное облако с известной формой, размерами и концентрацией аммиака (размеры облака могут быть рассчитаны например, по зависимостям [1]);

– полагается, что одновременно происходит загрязнение атмосферы вследствие испарения аммиака от зоны разлива (форма, размеры зоны разлива известны, интенсивность испарения рассчитывается или задается [6]).

Постановка краевых условий для рассмотренного уравнения переноса примеси рассмотрена в работах [7, 8].

Метод решения

Численное интегрирование уравнения (1) проводится с использованием попеременно-треугольной неявной разностной схемы расщепления [7] на прямоугольной разностной сетке. Разработанный код реализован на алгоритмическом языке FORTRAN. Форма облака токсичного газа, зоны разлива формируется в численной модели с помощью маркеров [7].

Алгоритм решения задачи

Алгоритм решения задачи заключается в следующем.

1. Вводится информация о размерах первичного облака, его форме, концентрации в нем, задается скорость, направление ветра, коэффициенты турбулентной диффузии.

2. Осуществляется расчет процесса загрязнения атмосферы при миграции первичного облака и при испарении аммиака от места разлива (уравнение 1).

3. Осуществляется вывод на печать (дисплей) изолиний концентрации токсичного вещества, на основе которых строится прогноз о возможном поражении людей на местности, если концентрации превышает пороговое (смертельное) значение.

Практическая реализация

Рассматривается применение трехмерной численной модели для расчета загрязнения атмосферы при аварийном разливе аммиака. Вычислительный эксперимент проведен при следующих исходных данных: размеры расчетной области $400 \times 336 \times 84$ м; коэффициенты $\mu_x = \mu_y = 2,7$ м²/с. Скорость ветра и вертикальный

коэффициент диффузии рассчитывались по зависимости (2), $V_{10} = 6,7$ м/с. Высота «гриба» – 44 м; длина порядка – 80 м, ширина порядка 32 м. Шляпка гриба имеет наклон (рис. 1).

Зона разлива имеет размеры 16×16 м; интенсивность испарения от зоны разлива – $100 \text{ г/м}^2/\text{с}$. Масса токсичного газа в «грибе» составляет порядка 700 кг.

Рассмотрим результаты вычислительного эксперимента. Как известно, при решении задач, связанных с авариями при перевозках, хранении, производстве опасных веществ, весьма важно получить данные о динамике загрязнения атмосферы (как изменяются форма, размеры, интенсивность зоны загрязнения со временем). На рис. 1 – 5 показана динамика развития зоны загрязнения атмосферы для рассматриваемого сценария, которая характеризуется размывом грибовидной формы облака, сносом облака в направлении ветра и «примыканием» к уходящему облаку шлейфа от зоны разлива.

Зона разлива четко выделяется на рисунках в виде области возле земли с высоким градиентом концентрации примеси. По высоте зона загрязнения атмосферы, вблизи области разлива, составляет около 20 м (для момента времени $t = 45$ с).

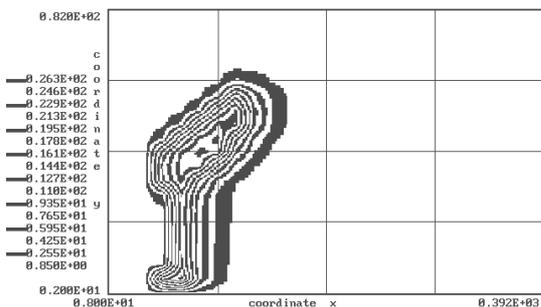


Рис. 1. Изолинии концентрации аммиака для момента времени $t = 1$ с (сечение $y = 184$ м)

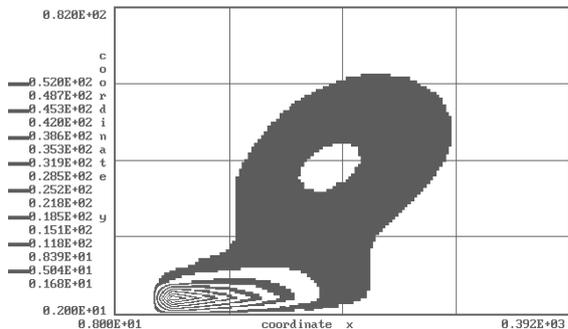


Рис. 2. Изолинии концентрации аммиака для момента времени $t = 15$ с (сечение $y = 184$ м)

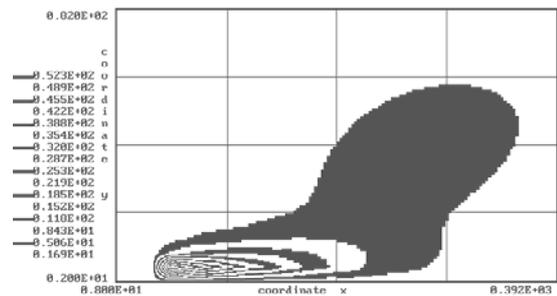


Рис. 3. Изолинии концентрации аммиака для момента времени $t = 25$ с (сечение $y = 184$ м)

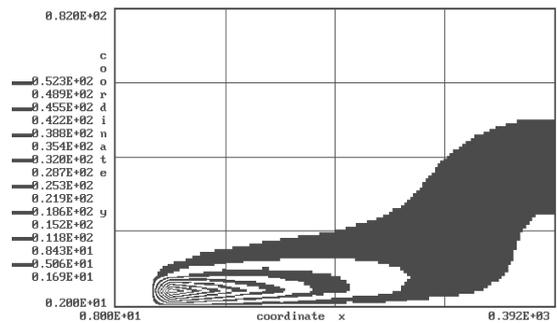


Рис. 4. Изолинии концентрации аммиака для момента времени $t = 35$ с (сечение $y = 184$ м)

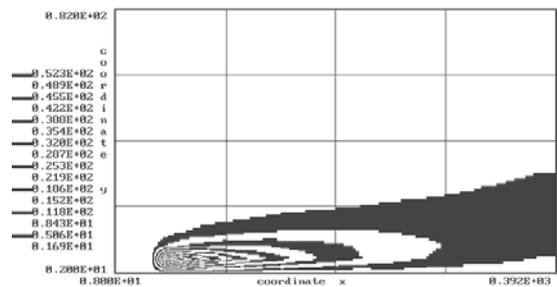


Рис. 5. Изолинии концентрации аммиака для момента времени $t = 45$ с (сечение $y = 184$ м)

Из рис. 5 хорошо видно, что шлейф от зоны разлива ветровым потоком как бы «прижимается» к поверхности земли.

При прогнозе химической обстановки в случае аварий возникает необходимость достаточно детальной оценки уровня загрязнения атмосферы в ряде конкретных мест (например, планируемые места размещения личного состава бригад, техники и т.д.). В табл. 1 представлены прогнозные данные о динамике изменения концентрации токсичного газа в точке, расположенной с координатами $x = 344$ м, $y = 184$ м, $z = 2$ м. Отчетливо видно, что на рассматриваемом временном интервале происходит интенсивный рост концентрации газа. Учитывая, что ПДК (в рабочей зоне) для аммиака составляет 20 мг/м^3 , то к моменту времени $t = 50$ с его концентрация будет превосходить ПДК почти в 140 раз.

Таблица 1

**Изменение концентрации токсичного газа
в расчетной точке с течением времени**

<i>t</i> , с	19	25	34	50
Концентрация токсичного газа, г/м ³	0,05	0,28	1,12	2,88

Степень токсичного поражения людей на местности может быть оценена не только по величине концентрации отравляющего вещества, но также на основании расчета токсодозы, например, по модели [1]:

$$TD = \int_0^t C dt, \quad (3.2)$$

где *C* – концентрация токсичного вещества в расчетной точке; *t* – время экспозиции.

В табл. 2 представлены прогнозные данные о динамике изменения токсодозы в точке с координатами *x* = 264 м, *y* = 184 м, *z* = 2 м.

Таблица 2

**Изменение токсодозы в расчетной точке
с течением времени**

<i>t</i> , с	28	31	36	39
Токсодоза мг/л·мин	0,08	0,12	0,23	0,30

Учитывая, что при значении токсодозы 0,25 мг/л·мин появятся симптомы отравления [1], то как видно из табл. 2, это значение токсодозы будет достигнуто примерно через 36 с в расчетной точке.

В заключение отметим, что решение задачи получено за 5 с. Таким образом, построенная численная модель позволяет оперативно выполнять прогнозные расчеты по анализу динамики формирования зоны загрязнения, ее интенсивности, прогнозу уровня загрязнения воздушной среды в интересующих точках, т.е. получить необходимую информации для научного обоснования тех или иных защитных мероприятий.

Выводы

В работе на основе трехмерной численной модели, выполнен расчет процесса рассеивания токсичного газа в атмосфере. Методом вычислительного эксперимента исследована динамика загрязнения атмосферы с учетом миграции первичного облака и шлейфа, формирующегося над зоной разлива. Благодаря быстрому счету

(3...5 с) модель может служить эффективным инструментом для оперативного прогноза обстановки при авариях, сопровождающихся выбросом, разливом химически опасных веществ. Дальнейшее развитие данной модели должно быть направлено на создание численной модели для расчета рассеивания тяжелых газов.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий [Текст] : учеб. пособ. в 6-ти кн. / под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаева). – М.: АСВ, 2001. – 200 с.
2. Беляев, Н. Н. Защита атмосферы от загрязнения при миграции токсичных веществ [Текст] / Н. Н. Беляев, В. М. Лисняк. – Д.: Инновация, 2006. – 150 с.
3. Берлянд, М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы [Текст] / М. Е. Берлянд. – Л.: Гидрометеиздат, 1985. – 273 с.
4. Бруцкий, Е. В. Теория атмосферной диффузии радиоактивных выбросов [Текст] / Е. В. Бруцкий. – К.: Изд-во ин-та гидромеханики НАН Украины, 2000. – 443 с.
5. Генихович, Е. Л. К вопросу о применимости гауссовой модели для расчета загрязнения воздуха [Текст] / Е. Л. Генихович // Тр. ГГО. – 1982. – Вып. 450. – С. 35-40.
6. Заказнов, В. Ф. Распространение аммиака при разгерметизации аммиакопровода, емкостей [Текст] / В. Ф. Заказнов, Л. А. Куршева // Исследования и разработки по созданию магистральных аммиакопроводов и складов жидкого аммиака: Тр. ГИАП. – М., 1985. – С. 57.
7. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде [Текст] / М. З. Згуровский и др. – К.: Наук. думка, 1997. – 368 с.
8. Марчук, Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды [Текст] / Г. И. Марчук. – М.: Наука, 1982. – 320 с.
9. Методика прогнозування наслідків вилливу (викиду) небезпечних хімічних речовин при аваріях на промислових об'єктах і транспорті [Текст] : Наказ МНС України № 73/82/64/122. – К.: Вид-во Чорнобильінтерінформ, 2001. – 33 с.
10. Hanna, S. Air Quality Modelling over Short Distances [Text] / S. Hanna // College on Atmospheric Boundary Layer and Air Pollution Modelling: 16 May – 3 June 1994. – № SMR/760-2. – P. 712-743.
11. Hanna, S. Hybrid Plume Dispersion Model (HPDM) Improvements and Testing [Text] / S. Hanna, J. C. Chang // College on Atmospheric Boundary Layer and Air Pollution Modelling: 16 May – 3 June 1994. – № SMR/760-4. – P. 1491-1508.

Поступила в редколлегию 04.09.2009.
Принята к печати 22.09.2009.