

## НЕЙТРАЛИЗАЦИЯ ОБЛАКА ТОКСИЧНОГО ГАЗА В АТМОСФЕРЕ

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

На основе разработанной трехмерной численной модели рассчитан процесс нейтрализации токсичного газа в атмосфере. 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 and the process of neutralization of toxic gas after accidents was developed. The model is based on the transport gradient model. The results of numerical experiments are presented.

### Введение

Аварии при транспортировке, погрузке, разгрузке химически опасных грузов могут привести к значительной эмиссии токсичных веществ, что является причиной масштабного загрязнения окружающей среды (очень часто атмосферы) и создает угрозу поражения людей. При ликвидации последствий аварий с химически опасными веществами применяются различные защитные мероприятия, в число которых входит подача нейтрализатора для уменьшения зоны загрязнения атмосферы [1, 5]. При применении метода нейтрализации возникает закономерный вопрос – чем гарантируется обеспечение требуемого уровня экологической безопасности? Количество поданного нейтрализатора? Очевидно, нет. Количество нейтрализованного токсичного газа? Очевидно, да. Понятно, что подача нейтрализатора в облако токсичного газа может осуществляться с различных позиций, с различной интенсивностью, при различных метеоусловиях и т.д., и все это, естественно, будет влиять на количество нейтрализованного токсичного газа, а значит на эффективность защитного мероприятия и на уровень экологической безопасности. Поэтому одним из важнейших вопросов при разработке плана организации защитных мероприятий является не только прогноз возможных масштабов загрязнения (прогноз масштаба угрозы), но и *количественная оценка эффективности планируемых средств защиты. Иными словами, принятие решения по организации защитных мероприятий должно основываться на расче-*

*те.* Только на основе такого подхода можно научно обоснованно определить параметры защитных установок, рациональное их размещение, режим работы для минимизации экологического ущерба и обеспечения требуемого уровня безопасности.

Использование аналитических моделей для решения задачи оценки эффективности нейтрализации токсичного газа в атмосфере не представляется возможным в силу сложности задачи – неравномерный профиль ветра, необходимость учета формы облака (для выполнения критерия геометрического подобия в модели), изменение в атмосфере концентрации токсичного газа, нейтрализатора с течением времени при их химическом взаимодействии. Поэтому единственным методом расчета является численное моделирование. **Целью данной работы** явилось применение построенной трехмерной численной модели (CFD model) для расчета процесса загрязнения атмосферы при аварийном выбросе фтористого водорода и расчета процесса нейтрализации облака токсичного газа в атмосфере за счет подачи реагента. Построенная модель дает возможность выполнить прямое численное моделирование процессов рассеивания токсичного газа и его нейтрализации с учетом неравномерного профиля ветра, неравномерных значений коэффициентов диффузии, геометрической формы облака, режима подачи нейтрализатора. Модель позволяет получить прогнозные результаты в течение нескольких секунд на ПК средней и малой мощности.

## Математическая модель

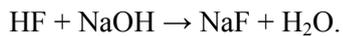
Рассматривается процесс загрязнения атмосферы при поступлении в нее токсичного газа – HF. Моделируется ситуация, когда над местом аварии образовалось облако газа сложной геометрической формы. С целью защиты атмосферы от загрязнения и минимизации экологического ущерба применяется подача нейтрализатора в мигрирующее облако. Такая подача может осуществляться как с помощью наземных средств (стационарные лафетные установки, пожарные машины), так и воздушных (вертолет, самолет).

Для расчета процесса загрязнения атмосферы при распространении токсичного газа, попавшего в воздушную среду вследствие аварии, используем трехмерное уравнение переноса примеси (модель градиентного типа) [2, 3]. Данное уравнение переноса используется для моделирования рассеивания нейтрализатора (NaOH) в атмосфере, подаваемого для снижения уровня загазованности атмосферы:

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

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

Место подачи нейтрализатора моделируется с помощью дельта-функции Дирака. Процесс взаимодействия токсичного газа и нейтрализатора рассчитывается на основе уравнения реакции



В разработанной численной модели используется неравномерный профиль скорости ветра и вертикального коэффициента 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  $z_1$ ;  $k_1 = 0,2$ ;

$n = 0,15$ ;  $m \approx 1$ . Принимается, что коэффициенты  $\mu_y$  и  $\mu_x$  одинаковы.

Постановка краевых условий для рассмотренного уравнения переноса примеси рассмотрена в работах [2, 3].

## Метод решения

Численное интегрирование уравнения (1) проводится с использованием попеременно-треугольной разностной схемы расщепления [2] на прямоугольной разностной сетке. Разработанный код реализован на алгоритмическом языке FORTRAN. Форма облака токсичного газа формируется в численной модели с помощью маркеров [2].

## Практическая реализация

На основе разработанного кода была решена задача по оценке эффективности метода нейтрализации для защиты атмосферы от загрязнения при миграции облака токсичного газа. Рассматривался следующий сценарий. Произошла авария, в результате которой на месте аварии образовалось облако сложной (грибовидной) формы (рис. 1). Для защиты атмосферы от загрязнения используется подача щелочи NaOH. Исследуется эффективность процесса нейтрализации при различной интенсивности и месте подачи нейтрализатора.

Вычислительный эксперимент проводился при следующих параметрах: размеры облака: высота – 20,4 м; максимальная ширина шляпки – 60 м; ширина ножки – 30 м; масса HF в облаке составляет порядка 5,9 т; скорость ветра (на высоте 10 м) – 4,7 м/с; коэффициент диффузии  $\mu_x = 2,7 \text{ м}^2/\text{с}$ ; скорость оседания капель нейтрализатора – 0,01 м/с; размеры расчетной области 180 x 180 x 40,8 м. Интенсивность подачи нейтрализатора варьируется – 50 кг/с (второй вариант – 90 кг/с, третий вариант – 350 кг/с). Координаты источника эмиссии NaOH:  $x = 67,5 \text{ м}$ ;  $y = 82,5 \text{ м}$ ;  $z = 22,1 \text{ м}$  (другой вариант –  $z = 8,5 \text{ м}$ ). При расчете полагалось, что подача нейтрализатора начинается в момент времени  $t = 0 \text{ с}$ .

Оценку эффективности процесса нейтрализации проведем по двум параметрам: по количеству нейтрализованного токсичного газа и по величине токсодозы. Рассмотрим результаты расчета. В табл. 1 – 5 представлены данные по расчету количества нейтрализованного токсичного газа в зависимости от различной интенсивности подачи нейтрализатора. На основе этих данных можно количественно оценить

эффективность метода нейтрализации. В табл. 1 представлены данные, как о массе нейтрализованного газа, так и процент нейтрализованного газа от его начальной массы. В других таблицах приводится процент нейтрализованного газа для оперативной оценки эффективности процесса нейтрализации.

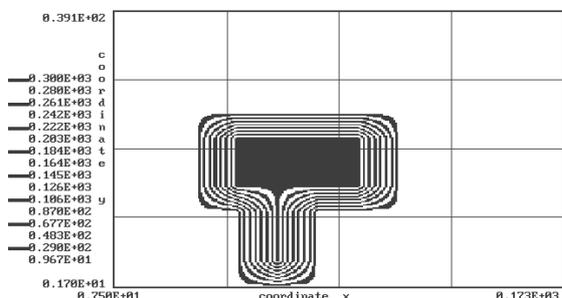


Рис. 1. Форма облака токсичного газа на месте аварии (сечение  $y = 82,5$  м)

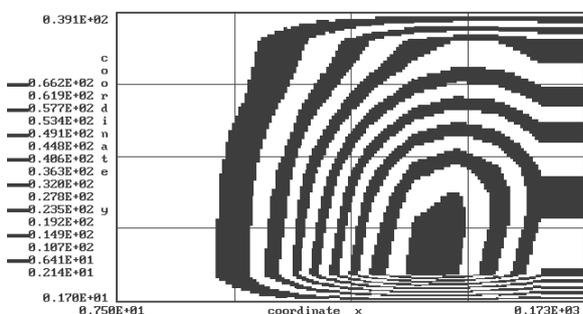


Рис. 2. Зона загрязнения атмосферы для момента времени  $t = 12$  с (сечение  $y = 82,5$  м); нет подачи нейтрализатора

Таблица 1

**Количество нейтрализованного токсичного газа, высота подачи нейтрализатора 22,1 м (подача нейтрализатора  $Q = 50$  кг/с)**

$t, c$	7	20	27
нейтрализовано	174,8 кг 2,92 %	407,1 кг 6,80 %	501,8 кг 8,38 %

Таблица 2

**Количество нейтрализованного токсичного газа, высота подачи нейтрализатора 22,1 м (подача нейтрализатора  $Q = 90$  кг/с)**

$t, c$	7	20	27
нейтрализовано	4,99 %	11,19 %	13,73 %

Таблица 3

**Количество нейтрализованного токсичного газа, высота подачи нейтрализатора 22,1 м (подача нейтрализатора на одном уровне  $Q = 350$  кг/с)**

$t, c$	7	20	27
нейтрализовано	14,78 %	31,63 %	37,42 %

Таблица 4

**Количество нейтрализованного токсичного газа, высота подачи нейтрализатора 8,5 м (подача нейтрализатора на одном уровне  $Q = 350$  кг/с)**

$t, c$	7	20	27
нейтрализовано	17,20 %	33,89 %	39,75 %

Таблица 5

**Количество нейтрализованного токсичного газа, подача нейтрализатора на двух уровнях 22,1 м и 8,5 м ( суммарная подача нейтрализатора  $Q = 350$  кг/с)**

$t, c$	7	20	27
нейтрализовано	18,20 %	34,62 %	40,23 %

Отметим, что к моменту времени  $t = 27$  с может быть нейтрализовано порядка 37...40 % токсичного газа при интенсивности подачи нейтрализатора в количестве 350 кг/с, т.е. за достаточно короткий промежуток времени будет нейтрализована значительная часть токсичного вещества и, что важно, на относительно коротком участке местности. Даже если нет возможности нейтрализовать оставшуюся часть токсичного газа, то понятно, что после организованного природоохранного мероприятия в атмосфере теперь переносится практически вдвое меньше токсичного вещества.

Теперь выполним оценку эффективности использования нейтрализатора. Для анализа рассмотрим ситуацию, когда интенсивность подачи нейтрализатора равна  $Q = 50$  кг/с, подача осуществляется на уровне 22,1 м. В табл. 6 представлены данные о количестве нейтрализатора, не вступившего в реакцию с токсичным газом на определенный момент времени.

Таблица 6

**Количество «неиспользованного» нейтрализатора, подача нейтрализатора на уровне 22,1 м (интенсивность подачи нейтрализатора  $Q = 50$  кг/с)**

$t, c$	7	20	27
Не использовано нейтрализатора, кг	0,27	185,7	346,3

Из табл. 6 отчетливо видно, что количество «неиспользованного» нейтрализатора все время возрастает с течением времени. Это объясняется сносом облака токсичного газа относительно источника подачи реагента и, следовательно, «уходом» токсичного газа из зоны влияния источника подачи нейтрализатора.

Оценить эффективность метода нейтрализации для уменьшения зоны загрязнения атмосферы можно на основе анализа представленных ниже рисунков, где показано распределение изолиний концентрации HF (сечение  $y = 82,5$  м) для момента времени  $t = 12$  с.

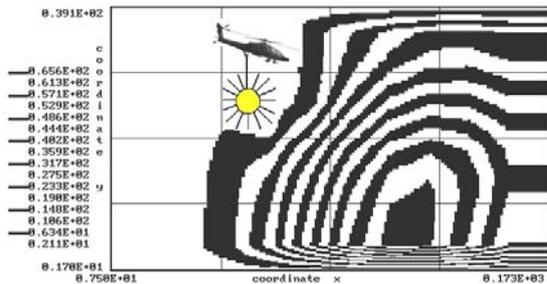


Рис. 3. Зона загрязнения атмосферы для момента времени  $t = 12$  с (сечение  $y = 82,5$  м); подача нейтрализатора  $Q = 50$  кг/с, высота подачи  $z = 22,1$  м

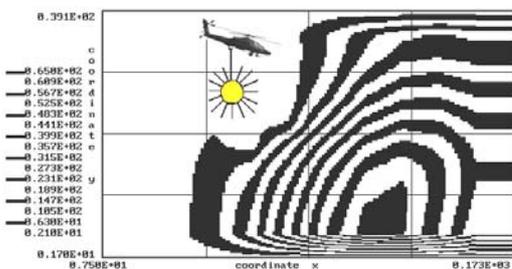


Рис. 4. Зона загрязнения атмосферы для момента времени  $t = 12$  с (сечение  $y = 82,5$  м); подача нейтрализатора  $Q = 90$  кг/с, высота подачи  $z = 22,1$  м

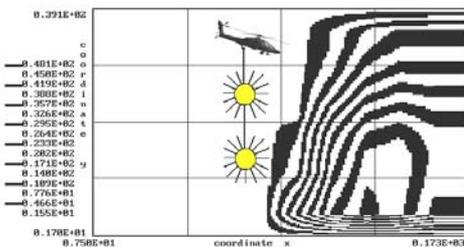


Рис. 5. Зона загрязнения атмосферы для момента времени  $t = 12$  с (сечение  $y = 82,5$  м); подача нейтрализатора от двух источников, каждый интенсивностью  $Q = 175$  кг/с и расположенных на разных уровнях:  $z = 22,1$  м и  $z = 8,5$  м

Хорошо видно влияние изменения интенсивности и места подачи нейтрализатора на размеры «нейтрализованной» зоны (для такой оценки следует сравнить рис. 2 и рис. 3 – 7). Отчетливо видно, что подача нейтрализатора на двух уровнях (рис. 5) существенно уменьшила размеры зоны загрязнения атмосферы по сравнению с подачей реагента на одном уровне.

Поскольку при авариях с химически опасными веществами поражающим фактором яв-

ляется концентрация загрязнителя, то при разработке ПЛАСа особо важным вопросом является расчет токсодозы в тех или иных зонах. Расчет токсодозы крайне важен с позиции оценки эффективности защитных мероприятий, рекомендуемых в ПЛАСе, и, в первую очередь, с целью выбора безопасного расположения людей, техники и т.п. В данной работе для оценки уровня экологической безопасности на месте расположения рецептора рассчитывалось значение токсодозы по следующей зависимости:

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

где  $t$  – время,  $C$  – концентрация токсичного газа.

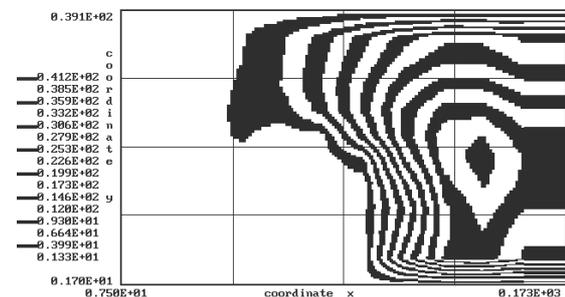


Рис. 6. Зона загрязнения атмосферы для момента времени  $t = 12$  с (сечение  $y = 82,5$  м); подача нейтрализатора  $Q = 350$  кг/с, высота подачи  $z = 8,5$  м

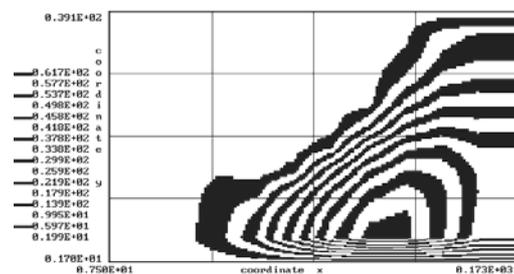


Рис. 7. Зона загрязнения атмосферы для момента времени  $t = 12$  с (сечение  $y = 82,5$  м); подача нейтрализатора  $Q = 350$  кг/с, высота подачи  $z = 22,1$  м

В последующих таблицах показано прогнозное значение величины токсодозы на месте расположения рецептора:  $x = 157,5$  м;  $y = 82,5$  м; и на высоте  $z = 1,7$  м (зона дыхания). Эти данные позволяют также оценить эффективность процесса нейтрализации.

Принимая во внимание, что значение токсодозы  $7,5$  мг·мин/л является смертельно опасной величиной при загрязнении воздуха HF [1], видно, что подача нейтрализатора при выбранных параметрах работы установки *не обеспечивает* безопасность на месте расположения рецептора, кроме варианта подачи нейтрализато-

ра на уровне  $z = 8,5$  м, с интенсивностью 350 кг/с. Для объяснения этого факта необходимо еще раз проанализировать представленные выше рисунки, откуда видно, что для рассматриваемых случаев подачи нейтрализатора на высоте 22,1 м нейтрализации подвергается верхняя часть облака, а зона загрязнения атмосферы возле земли не подвергается нейтрализации. Для варианта подачи реагента на высоте  $z = 8,5$  м, наоборот, верхняя часть облака не подверглась нейтрализации.

Таблица 7

**Изменение величины токсодозы с течением времени, уровень  $z = 1,7$  м (нет подачи нейтрализатора)**

$t, c$	15	18	25	27
токсодоза, мг·мин/л	5,39	7,79	12,34	13,26

Таблица 8

**Изменение величины токсодозы с течением времени, уровень  $z = 1,7$  м (подача нейтрализатора 50 кг/с)**

$t, c$	15	18	25	27
токсодоза, мг·мин/л	5,37	7,73	12,14	12,92

Таблица 9

**Изменение величины токсодозы с течением времени, уровень  $z = 1,7$  м (подача нейтрализатора 90 кг/с)**

$t, c$	15	18	25	27
токсодоза, мг·мин/л	5,35	7,68	11,97	12,78

Таблица 10

**Изменение величины токсодозы с течением времени, уровень  $z = 1,7$  м (подача нейтрализатора 350 кг/с на уровне  $z = 22,1$  м)**

$t, c$	15	18	25	27
токсодоза, мг·мин/л	5,21	7,37	10,89	11,39

Таблица 11

**Изменение величины токсодозы с течением времени, уровень  $z = 1,7$  м (подача нейтрализатора на двух уровнях, величина суммарной подачи 350 кг/с)**

$t, c$	15	18	25	27
токсодоза, мг·мин/л	4,63	6,34	8,45	8,54

Таблица 12

**Изменение величины токсодозы с течением времени, уровень  $z = 1,7$  м (подача нейтрализатора 350 кг/с на уровне  $z = 8,5$  м)**

$t, c$	15	18	25	27
токсодоза, мг·мин/л	4,05	5,31	6,26	6,27

В заключение отметим, что расчет с использованием построенной численной модели требует около 5...10 с для получения прогнозных результатов с помощью разработанного кода.

**Выводы**

В работе на основе разработанной трехмерной численной модели и созданного на ее основе кода выполнен расчет процесса нейтрализации облака токсичного, мигрирующего газа в атмосфере. Методом вычислительного эксперимента исследована эффективность процесса нейтрализации при различной интенсивности подачи нейтрализатора и месте его подачи. Дальнейшее развитие данной модели должно быть направлено на создание численной модели для расчета рассеивания и нейтрализации тяжелых газов.

**БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК**

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий [Текст] : учеб. пособие в 5-ти книгах / под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаева. – М.: АСВ, 2001. – 200 с.
2. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде [Текст] / М. З. Згуровский и др. – К.: Наук. думка, 1997. – 368 с.
3. Марчук, Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды [Текст] / Г. И. Марчук. – М.: Наука, 1982. – 320 с.
4. Мацак, В. Г. Гигиеническое значение скорости испарения и давления пара токсических веществ, применяемых в производстве [Текст] / В. Г. Мацак, Л. К. Хоцянов. – М.: Медгиз, 1959. – 231 с.
5. Методика прогнозування наслідків вилливу (викиду) небезпечних хімічних речовин при аваріях на промислових об'єктах і транспорті [Текст]. – К., 2001. – 33 с.
6. Самарский, А. А. Теория разностных схем [Текст] / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1983. – 616 с.

Поступила в редколлегию 01.09.2009.  
Принята к печати 14.09.2009.