

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НЕЙТРАЛИЗАЦИИ ОКСИДА ФОСФОРА В АТМОСФЕРЕ

Запропоновано метод розрахунку процесу нейтралізації токсичного газу в атмосфері. В якості математичної моделі використовується двовимірне рівняння переносу домішок. Розрахунок здійснюється з використанням неявної різницевої схеми.

Предложен метод расчета процесса нейтрализации токсичного газа в атмосфере.. Метод основывается на численном интегрировании двухмерного уравнения конвективно-диффузионного переноса примеси. Для расчета используется неявная разностная схема. Приводятся результаты вычислительного эксперимента.

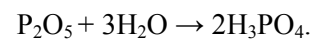
A numerical model was used to calculate the process of toxic gas neutralization. The 2D transport model is used to simulate the process. The implicit difference scheme was used. The results of numerical experiment are presented.

Одним из эффективных методов защиты атмосферы от загрязнения при миграции токсичных веществ является метод нейтрализации. При разработке плана ликвидации аварийной ситуации весьма важно иметь простые и эффективные методы расчета процесса нейтрализации, чтобы оперативно принять научно обоснованное решение по размещению технических средств, подающих нейтрализатор в шлейф токсичного газа. Следует иметь в виду, что данная задача является достаточно сложной с точки зрения теоретического решения, поскольку в атмосфере происходит процесс переноса токсичного газа, нейтрализатора и одновременно процесс их химического взаимодействия. В этой связи основным методом решения становится численное моделирование (CFD модели). В рамках данного направления, для практики, имеет смысл разработка регуляторных численных моделей, т.е. моделей, учитывающих, с одной стороны, основные физические процессы переноса, а с другой стороны, требующих небольших затрат машинного времени при практической реализации и незначительного количества исходных данных (вполне доступных) для моделирования. Поэтому **целью данной работы** явилась разработка эффективного метода расчета процесса нейтрализации токсичного вещества в атмосфере при его аварийной утечке с помощью подачи нейтрализатора от вертолета (движущегося или неподвижного).

Математическая модель

Будем рассматривать аварийную ситуацию, в результате которой в атмосферу происходит эмиссия токсичного газа – P_2O_5 (продукт горе-

ния фосфора) Для нейтрализации токсичного газа используется подача воды в шлейф P_2O_5 . Процесс взаимодействия токсичного газа и нейтрализатора рассчитывается на основе уравнения реакции



Чтобы рассчитать это взаимодействие, а значит определить эффективность процесса нейтрализации, необходимо знать концентрацию воды и P_2O_5 в каждой точке пространства, где возможно это взаимодействие. Вода и токсичный газ рассеиваются в атмосфере под действием ветра, атмосферной диффузии, поэтому их концентрация изменяется под действием этих факторов в каждой точке. Для расчета переноса этих веществ в атмосфере воспользуемся моделью градиентного типа, осредненной по высоте переноса примеси (токсичный газ, нейтрализатор) [3]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \sigma C = \text{div}(\mu \text{ grad} C) + \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(x - x_i(t)) \delta(y - y_i(t)), \quad (1)$$

где C – концентрация примеси в атмосфере; u, v – компоненты вектора скорости воздушной среды; $\mu = (\mu_x, \mu_y)$ – коэффициенты турбулентной диффузии; Q – интенсивность выброса примеси (токсичного газа, нейтрализатора); $\delta(x - x_i(t)) \delta(y - y_i(t))$ – дельта-функция Дирака; x_i, y_i – координаты источника эмиссии примеси, зависящие от времени; σ – коэффициент, учитывающий оседание примеси, химический

распад загрязнителя, характер взаимодействия с подстилающей поверхностью [3]; t – время.

Постановка краевых условий для задачи переноса рассмотрены в [2, 3].

Метод решения

Для численного интегрирования уравнения (1) используется прямоугольная разностная сетка. Уравнение (1) интегрируется с использованием попеременно-треугольной неявной разностной схемы расщепления. Выполним следующее физическое расщепление уравнения переноса примеси при интегрировании на временном шаге dt :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \sigma C = 0;$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial C}{\partial y} \right);$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \sum Q_i(t) \delta(r - r_i),$$

где $r_i = (x_i, y_i)$ – координаты источника эмиссии примеси.

Первое уравнение из данной системы описывает процесс переноса примеси под действием ветра, второе уравнение – под действием диффузии, а третье – изменение концентрации примеси под действием источников эмиссии.

Выполним следующую замену производных:

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

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

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

где $u^+ = \frac{u + |u|}{2}; \quad u^- = \frac{u - |u|}{2}; \quad v^+ = \frac{v + |v|}{2};$

$$v^- = \frac{v - |v|}{2};$$

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

$$\frac{\partial v^- C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1}^- C_{i,j+1} - v_{ij}^- C_{ij}}{\Delta y} = L_y^- C^{n+1} \text{ и т.д.}$$

Вторые производные аппроксимируем так:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \approx \tilde{\mu}_{x_1} \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - C_{ij}^{n+1}}{\Delta x^2} -$$

$$-\tilde{\mu}_{x_2} \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1};$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \approx \tilde{\mu}_{y_1} \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - C_{ij}^{n+1}}{\Delta y^2} -$$

$$-\tilde{\mu}_{y_2} \frac{C_{i,j}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} = M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1},$$

где $\tilde{\mu}_{x_1} = \frac{2\mu_i \mu_{i+1}}{\mu_i + \mu_{i+1}}$ и т.д.

Здесь $L_x^+, L_x^-, M_{xx}^+, M_{xx}^-$ и т.д. – обозначения разностных операторов.

Решение исходного уравнения разбивается на ряд шагов:

– на первом шаге $k = \frac{1}{4}$:

$$\frac{C_{ij}^{n+k} - C_{ij}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k) + \frac{\sigma}{2} C_{ij}^n = 0;$$

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

$$\frac{C_{ij}^k - C_{ij}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- C^k + L_y^- C^k) + \frac{\sigma}{2} C_{ij}^c = 0;$$

– на третьем шаге $k = n + \frac{3}{4}; c = n + \frac{1}{2}$:

$$\frac{C_{ij}^k - C_{ij}^c}{\Delta t} = \frac{1}{2} (M_{xx}^- C^c + M_{xx}^+ C^k + M_{yy}^- C^c + M_{yy}^+ C^k);$$

– на четвертом шаге $k = n + 1; c = n + \frac{3}{4}$:

$$\frac{C_{ij}^k - C_{ij}^c}{\Delta t} = \frac{1}{2} (M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c).$$

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

$$\frac{C_{i,j}^{5n+1} - C_{i,j}^{5n}}{\Delta t} = \sum_{l=1}^N \frac{q_l(t^{n+1/2})}{\Delta x \Delta y} \delta_l.$$

В дискретном виде дельта-функция Дирака «распределяется» по объему разностной ячейки с учётом сохранения суммарного количества выбрасываемой примеси. Функции δ_i тождественно равняются нулю, кроме разностных ячеек, где расположен источник выброса примеси.

Результаты моделирования

Построенная численная модель реализована в виде пакета программ «AIR-2D» (программы записаны на алгоритмическом языке FORTRAN). Применение этого пакета программ для решения конкретной задачи рассматривается ниже.

Рассматривается следующий сценарий: происходит аварийный выброс P_2O_5 в количестве $Q = 1$ (этот и другие параметры задачи приводятся далее в безразмерном виде). На месте выброса образовался шлейф (рис. 1). В момент времени $t = 15$ начинается подача воды (нейтрализатора) в шлейф в количестве $Q_n = 22.2$. Подача воды заканчивается в момент времени $t = 25$. Скорость ветра – 7 м/с; коэффициент диффузии – 4.7 м²/с; коэффициент $\sigma = 0.01$. Размеры расчетной области 1500 x 800 м.

На рис. 1 показана зона загрязнения атмосферы токсичным газом непосредственно перед началом нейтрализации. Как видно из данного рисунка, возле места аварии образовался шлейф, вытянутый в направлении движения воздушного потока. На последующих трех рисунках показано, как изменяется зона загрязнения атмосферы при подаче нейтрализатора от неподвижного вертолета. Видно, что первоначально происходит «разрыв» шлейфа в том месте, где осуществляется подача нейтрализатора, т.е. образуется зона свободная от токсичного газа (рис. 2). Затем зона загрязнения локализуется только возле источника эмиссии токсичного газа ($t = 25$, рис. 3). Но т.к. подача нейтрализатора прекращается в момент времени $t = 25$, а источник эмиссии токсичного газа продолжает действовать, то, как видно из рис. 4, шлейф токсичного газа практически в течение короткого промежутка времени после прекращения подачи воды «восстанавливается» в размерах.

На последующих рисунках (рис. 5 – 7) представлена динамика изменения зоны загрязнения при подаче нейтрализатора из движущегося вертолета. Представленные результаты моделируют «неудачный» маршрут вертолета, когда он движется вдоль границы шлейфа. Тем не менее, как видно из результатов моделирования, и в этом случае происходит изменение, хо-

тя и незначительное, формы зоны загрязнения атмосферы вследствие взаимодействия токсичного газа и нейтрализатора.

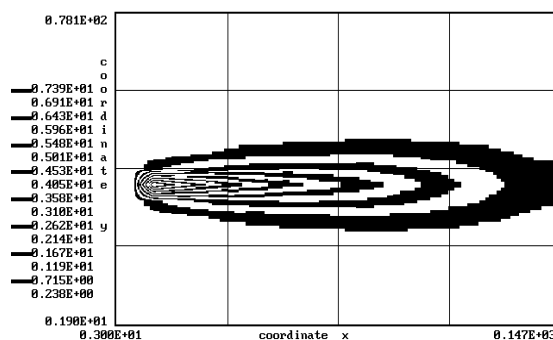


Рис. 1. Зона загрязнения атмосферы после аварии (вид сверху), $t = 15$ (нет подачи нейтрализатора)

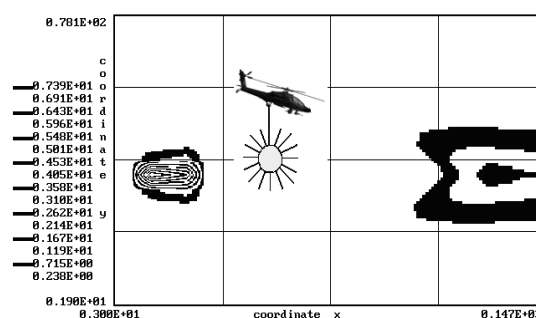


Рис. 2. Зона загрязнения после аварии (вид сверху), $t = 20$ (идет подача нейтрализатора, вертолет не движется)

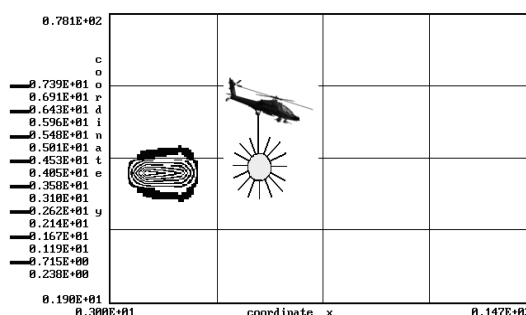


Рис. 3. Зона загрязнения после аварии (вид сверху), $t = 25$ (идет подача нейтрализатора, вертолет не движется)

Выводы

Рассмотренный в данной работе метод расчета нейтрализации токсичного газа в атмосфере является эффективным инструментом решения комплекса задач при разработке плана ликвидации аварийной ситуации. На решение задачи с помощью модели требуется около 3...5 секунд машинного времени, что позволяет в течение короткого промежутка времени выполнить расчет десятков вариантов организа-

ции подачи нейтрализатора. При практическом применении разработанного пакета программ не требуется каких-либо дополнительных специальных сервисных программ. Разработанный пакет программ имеет удобную для пользователя систему ввода исходной информации и вывода получаемых результатов. Дальнейшее совершенствование предложенного метода необходимо вести в направлении создания пространственной модели переноса примеси.

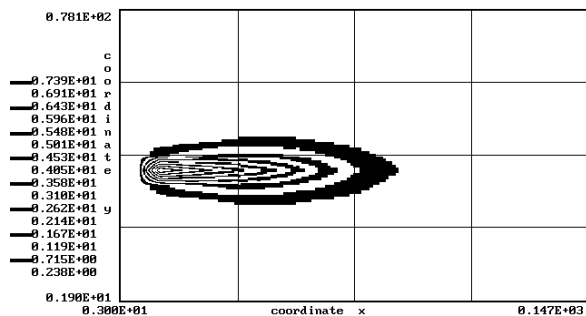


Рис. 4. Зона загрязнения после аварии (вид сверху), $t = 30$ (подача нейтрализатора прекращена)

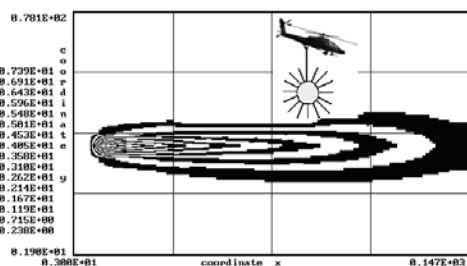


Рис. 5. Зона загрязнения после аварии (вид сверху), $t = 16$ (идет подача нейтрализатора, вертолет движется)

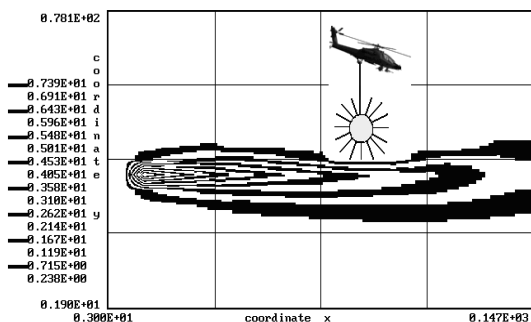


Рис. 6. Зона загрязнения после аварии (вид сверху), $t = 18$ (идет подача нейтрализатора, вертолет движется)

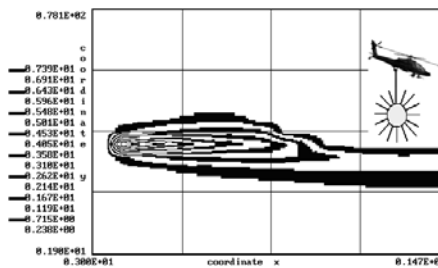


Рис. 7. Зона загрязнения после аварии (вид сверху), $t = 24$ (идет подача нейтрализатора, вертолет движется)

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий [Текст] : учеб. пособие в 5 кн. / под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаяева. – М.: Изд-во 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. Самарский, А. А. Теория разностных схем [Текст]. – 2-е изд., испр. / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1983. – 616 с.

Поступила в редколлегию 18.03.2009.
Принята к печати 02.04.2009.