

ЛОКАЛИЗАЦИЯ ЗОНЫ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ ПРИ ЛИКВИДАЦИИ АВАРИИ С ХИМИЧЕСКИ ОПАСНЫМ ГРУЗОМ

Розроблено тривимірну чисельну модель розрахунку процесу нейтралізації токсичної речовини на промайданчику в разі її аварійного витоку. Модель базується на чисельному інтегруванні рівняння конвективно-дифузійного переносу домішки та на моделі течії нев'язкої нестислої речовини. Наводяться результати обчислювального експерименту щодо прогнозу рівня забруднення атмосфери.

Разработана трехмерная численная модель расчета процесса нейтрализации токсичных веществ на площадке при их аварийной эмиссии. Модель основывается на численном интегрировании уравнения конвективно-диффузионного переноса примеси и на модели течения невязкой несжимаемой жидкости. 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 and the model of inviscid incompressible fluid. The results of numerical experiments are presented.

Введение

Железнодорожный транспорт Украины осуществляет в больших объемах перевозку грузов, в том числе токсичных веществ. Аварии при транспортировке таких грузов, разгрузке, погрузке способны вызвать значительную эмиссию опасных веществ, что приводит к масштабному загрязнению окружающей среды. Особенно опасны аварии с этими грузами возле населенных пунктов, станций, терминалов портов, предприятий, т.е. в непосредственной близости от людей [1, 4]. Даже при относительно небольшой эмиссии токсичного вещества в этом случае очень велик риск токсичного поражения людей. Кроме этого, здания, оборудование на территории объектов создают препятствия для развертывания техники, предназначенной для ликвидации последствий аварии, что создает дополнительные трудности при организации защитных мероприятий. При ликвидации последствий аварий с химически опасными грузами применяют различные мероприятия, в число которых входит подача воды, нейтрализатора для локализации зоны загрязнения атмосферы. Такие средства локализации могут подаваться от передвижных мотопомп [5], стационарных лафетных установок, установленных на объекте, от выносных стрел, на которых размещены спринклеры (по аналогии с тем, как создается искусственный дождь на киностудиях), а при невозможности подхода техники к месту аварии – от вертолетов и самолетов. Одним из важнейших вопросов при организации защиты атмосферы от загрязнения яв-

ляется оценка эффективности применяемого средства защиты. Без расчетов понятно, что подача нейтрализатора способствует уменьшению интенсивности и размеров зоны загрязнения атмосферы. Но для принятия решения надо иметь *количественную оценку* относительно этих и других параметров, которые важны при разработке ПЛАСа (план ликвидации аварийной ситуации). Более конкретно – необходимо знать, какое *количество* токсичного вещества будет нейтрализовано при реализации того или иного варианта защиты, а также как *количественно* изменятся в этом случае *размеры, интенсивность* зоны загрязнения атмосферы (что важно знать при организации эвакуации людей на объекте, размещении аварийных бригад и техники). Только на основании таких данных можно оценивать эффективность применяемой системы защиты и рекомендовать ее при разработке ПЛАСа, для использования на объекте с учетом его специфики (учет размещения зданий, маршрута эвакуации и т.д.). Единственным средством решения данной задачи является применение метода математического моделирования.

Целью работы явилась разработка трехмерной численной модели (CFD model) для расчета процесса загрязнения атмосферы при аварийном выбросе, разливе вредных веществ и расчета процесса нейтрализации токсичного газа в атмосфере за счет подачи нейтрализующего средства. Особенностью разработанной модели является то, что она позволяет осуществлять трехмерное моделирование процессов рассеивания токсичного газа и его нейтрализа-

ции с учетом размещения зданий или других препятствий на участке, где происходит ликвидация аварии (например, здания на станции, сооружения в портах и т.п.), с учетом неравномерного профиля ветра, режима подачи нейтрализатора. Модель позволяет получить прогнозные результаты в течение нескольких секунд.

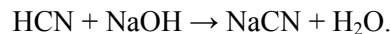
Математическая модель

Рассматривается аварийная ситуация, когда происходит поступление токсичного газа в атмосферу (например, разлив из цистерн и испарение опасного груза от поверхности разлива и т.п.). Авария происходит вблизи застройки (здания на станции, производственные корпуса объекта, где происходит слив, заправка и т. п.). Наличие зданий и других препятствий влияет на процесс переноса загрязнителя. Для расчета процесса загрязнения атмосферы при миграции в ней токсичного газа, попавшего в воздушную среду вследствие аварии, будем использовать трехмерное уравнение переноса примеси (модель градиентного типа) [2, 3]. Это же уравнение используется для моделирования переноса нейтрализатора в атмосфере:

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

где C – концентрация токсичного газа (нейтрализатора); u, v, w – компоненты вектора скорости воздушной среды; w_s – скорость оседания примеси; $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ – коэффициенты атмосферной диффузии; Q – интенсивность выброса токсичного газа (нейтрализатора); $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ – координаты источника выброса токсичного газа (нейтрализатора); $\delta(r - r_i)$ – дельта-функция Дирака, с помощью которой моделируется место подачи нейтрализатора.

Процесс химического взаимодействия токсичного газа и нейтрализатора рассчитывается на основе уравнения реакции, например, при нейтрализации HCN щелочью уравнение реакции имеет вид



Процесс химического взаимодействия «токсичный газ + нейтрализатор» рассчитывается в отдельной подпрограмме разработанного кода.

Для практического применения уравнения (1) необходимо рассчитать поле скорости воздушного потока при обтекании зданий и различных препятствий. Как известно, применение уравнений Навье-Стокса, различных современных моделей турбулентности требует применения очень мелкой сетки, что приводит к весьма существенным затратам компьютерного времени на получение результата (так, например, на решение двумерных задач может потребоваться более суток). Особенностью задач данного класса является требование получения прогнозных данных за короткий промежуток времени. Поэтому в данной работе расчет поля скорости воздушного потока с учетом обтекания препятствий осуществляется на базе модели потенциального течения. В этом случае 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 скорости.

Уравнение для определения потенциала скорости 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 [2, 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:

$$P = P(x = \text{const}, y) + \text{const}$$

(условие Дирихле).

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 ; $k_1 = 0,2$; $n = 0,16$; $m \approx 1$. Коэффициент μ_y принимается равным $\mu_y = kv$, $k = 0,1$.

При необходимости пользователь разработанного кода может задавать иную зависимость скорости ветра и коэффициентов диффузии. Интенсивность эмиссии токсичного газа может быть рассчитана, например, на базе эмпирических моделей [1, 4].

Метод решения

Расчет выполняется на прямоугольной разностной сетке. Численное интегрирование уравнения (1) осуществляется с использованием попеременно-треугольной разностной схемы расщепления [2]. Особенностью данной разностной схемы является то, что на каждом шаге расщепления строится неявная разностная схема. Однако, определение неизвестного значения концентрации токсичного вещества (нейтрализатора) определяется по явной формуле бегущего счета.

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 [6]. В разработанном коде осуществляется также численное интегрирование уравнения (2) с помощью попеременно-треугольного метода А. А. Самарского [6]. Граничное условие непроницаемости реализуется с помощью фиктивных ячеек. Расчет потенциала скорости в разработанном коде «SITE-3» (язык программирования – FORTRAN) проводится одновременно с использованием указанных методов численного интегрирования, с целью внутреннего контроля результатов расчета поля скорости. Форма объектов (здания и т.п.), положение источника загрязнения, место подачи нейтрали-

затора определяются в модели с помощью маркеров [3]

Практическая реализация

С помощью разработанного кода была решена следующая задача. На объекте (станция, терминал) происходит авария, в результате которой в воздушную среду начинает поступать токсичный газ – HCN. Возле места аварии расположены здания (их расположение и форма показаны на рис. 2), оказывающие влияние на процесс переноса примеси. Для локализации зоны загрязнения атмосферы используется подача раствора щелочи NaOH (например, подача может происходить от струйных лафетных установок). Вычислительный эксперимент проводится при следующих параметрах: интенсивность выброса HCN = 1 кг/с; скорость ветра (на высоте 10 м) – 4 м/с; коэффициент диффузии $\mu_x = 2,5 \text{ м}^2/\text{с}$; скорость оседания капель нейтрализатора – 0,001 м/с; размеры расчетной области 130 x 130 x 60 м. Интенсивность подачи нейтрализатора – 2 кг/с.

В первом сценарии полагается, что подача нейтрализатора начинается в момент времени $t = 5$ с. Моменту времени $t = 0$ соответствует начало эмиссии токсичного газа.

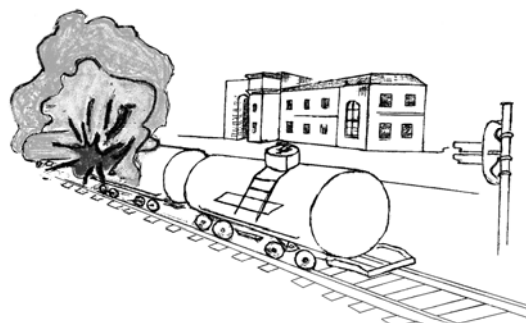


Рис. 1. Авария на станции при транспортировке химически опасного груза.

Исследуем эффективность локализации зоны загрязнения атмосферы при различной высоте подачи нейтрализатора над местом аварии.

На рис.3, 4 представлена зона загрязнения воздушной среды после аварии и при отсутствии подачи нейтрализатора, а на рис. 5–7 – зона загрязнения при подаче нейтрализатора. Из рис. 4 видно, что при отсутствии подачи нейтрализатора на объекте формируется обширная зона загрязнения, охватывающая оба здания. Между зданиями (застойные зоны) формируются подзоны загрязнения, создающие «препятствие» при эвакуации людей, а над здания-

ми проходит шлейф токсичного газа. Положение источника эмиссии токсичного газа характеризуется подзоной с большим градиентом концентрации загрязнителя. Видно, что ввиду увеличения скорости ветра с высотой происходит «снос» шлейфа токсичного газа (зона А на рис. 4).

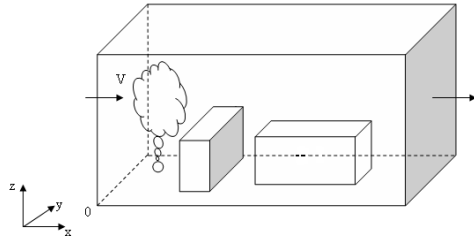


Рис. 2. Схема расчетной области

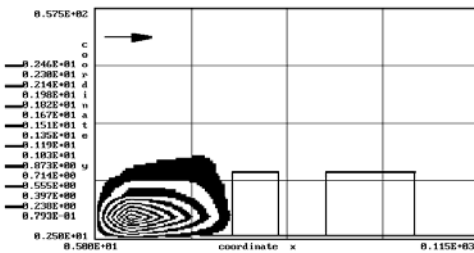


Рис. 3. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 5$ с (сечение $y = 65$ м). Нет подачи нейтрализатора

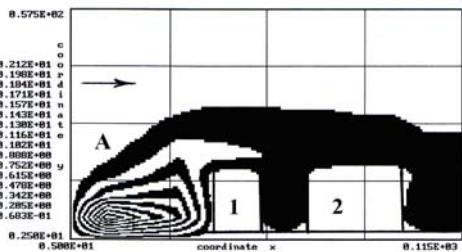


Рис. 4. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 63$ с (сечение $y = 65$ м). Нет подачи нейтрализатора

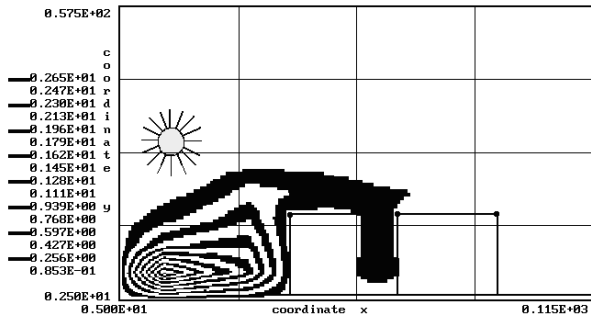


Рис. 5. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 50$ с, происходит подача нейтрализатора ($Q = 2$ кг/с) на высоте 30 м над местом аварийной утечки (сечение $y = 65$ м)

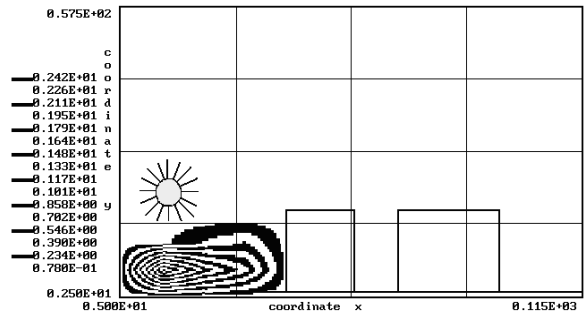


Рис. 6. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 50$ с, происходит подача нейтрализатора ($Q = 2$ кг/с) на высоте 10 м над местом аварийной утечки (сечение $y = 65$ м)

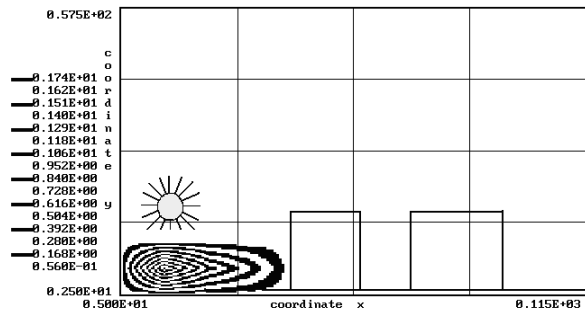


Рис. 7. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 50$ с, происходит подача нейтрализатора ($Q = 2$ кг/с) на высоте 5 м над местом аварийной утечки (сечение $y = 65$ м)

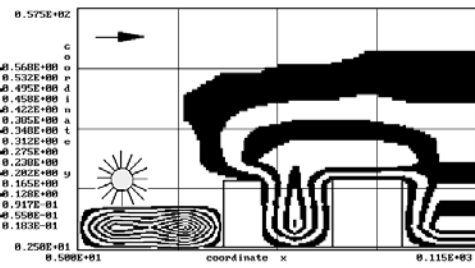


Рис. 8. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 70$ с, происходит подача нейтрализатора ($Q = 5$ кг/с) на высоте 5 м над местом аварийной утечки (сечение $y = 65$ м)

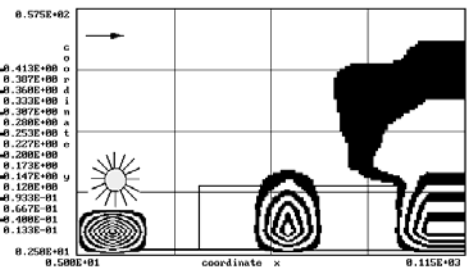


Рис. 9. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 76,5$ с, происходит подача нейтрализатора ($Q = 5$ кг/с) на высоте 5 м над местом аварийной утечки (сечение $y = 65$ м)

Таблица 1

**Количество нейтрализованного токсичного газа,
высота подачи нейтрализатора 30 м
(подача нейтрализатора $Q = 2$ кг/с)**

t, c	10	20	40
Масса, г	528	4110	14586

Таблица 2

**Количество нейтрализованного токсичного газа,
высота подачи нейтрализатора 10 м
(подача нейтрализатора $Q = 2$ кг/с)**

t, c	10	20	40
Масса, г	3217	11368	28321

Таблица 3

**Количество нейтрализованного токсичного газа,
высота подачи нейтрализатора 5 м
(подача нейтрализатора $Q = 2$ кг/с)**

t, c	10	20	40
Масса, г	4284	13923	32833

Во *втором* сценарии моделировалась ситуация, когда нейтрализатор начинает поступать в момент времени $t = 65$ с, т.е. в момент времени, когда сформировалась обширная зона загрязнения на территории, прилегающей к месту аварии (рис. 4). Для данного сценария принималось, что высота подачи нейтрализатора составляет 5 м, подача нейтрализатора $Q = 5$ кг/с.

Таблица 4

**Количество нейтрализованного токсичного газа,
высота подачи нейтрализатора 5 м
(подача нейтрализатора $Q = 5$ кг/с),
второй сценарий**

t, c	70	80	100
Масса, г	8218	21759	43129

На рис. 8–10 показана динамика изменения зоны загрязнения атмосферы после начала подачи нейтрализатора. Из этих рисунков видно, что примерно через 10 с после начала подачи нейтрализатора сформировавшаяся на объекте зона загрязнения (рис. 4) «разбивается» на несколько подзон, содержащих HCN. Эти подзоны расположены за зданиями и над зданиями. С течением времени данные подзоны исчезают и остается зона загрязнения атмосферы непосредственно вблизи места аварии. В длину эта зона мала (рис. 10) и, в отличие от рассмотренных выше вариантов подачи нейтрализатора, не доходит до первого здания, что гарантирует

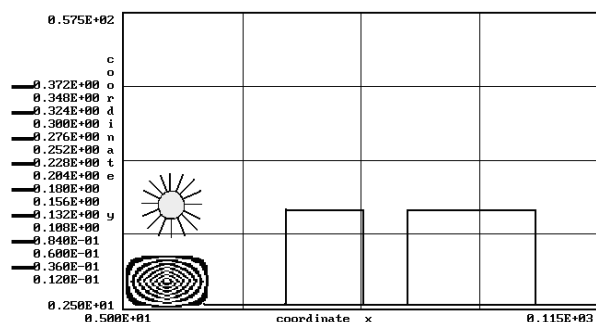


Рис. 10. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 90$ с, происходит подача нейтрализатора ($Q = 5$ кг/с) на высоте 5 м над местом аварийной утечки (сечение $y = 65$ м)

Проанализируем результаты моделирования для сценария, когда подача нейтрализатора составляла $Q = 2$ кг/с и варьировалась высота подачи его над местом аварии. Как видно из представленных рисунков, при подаче нейтрализатора на высоте 30 м зона загрязнения атмосферы едва уменьшилась по сравнению с ситуацией, когда нет подачи нейтрализатора (сравним рис. 5 и 4). Перед первым зданием продолжает существовать обширная зона загрязнения, хорошо видно, что не исчезла зона загрязнения между первым и вторым зданиями, что создает угрозу поступления токсичного газа в здания и крайне осложняет эвакуацию людей из первого здания. Таким образом, при данном варианте защиты задача по уменьшению размеров зоны загрязнения атмосферы не выполнена.

При подаче нейтрализатора на высоте 10 м над местом аварии зона загрязнения атмосферы существенно уменьшается (рис. 6). Однако в длину эта зона полностью доходит до первого здания, а по высоте практически равна высоте этого здания. Это значит, что также произойдет попадание токсичного газа в помещения данного здания.

При подаче нейтрализатора на высоте 5 м над местом аварии (рис. 7) происходит уменьшение зоны загрязнения атмосферы по высоте, но длина зоны загрязнения практически не меняется по сравнению с предыдущим вариантом.

Ниже в таблицах представлены данные, позволяющие количественно оценить эффективность процесса нейтрализации путем расчета массы нейтрализованного токсичного газа для различных моментов времени.

людям безопасную эвакуацию из здания или размещение бригад на этом участке.

Отметим, что расчет с использованием данной модели требует около 10 с для получения прогнозных данных с помощью разработанного кода.

Выводы

В работе разработана трехмерная численная модель, на основе которой построен метод расчета динамики загрязнения воздушной среды при аварийной эмиссии токсичного вещества с учетом влияния зданий и других объектов на процесс рассеивания. Модель позволяет рассчитать процесс нейтрализации токсичного газа, мигрирующего в атмосфере. Данная модель обладает рядом важных возможностей, необходимых для пользователя: это учет формы зданий, различного их расположения, места подачи нейтрализатора. Дальнейшее развитие данной модели должно быть направлено на создание численной модели для расчета рассеивания газов в условиях застройки и от движущегося источника эмиссии.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий [Текст]: учебн. пособие в 5 кн. / под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаева). – 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. 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 05.03.2009.