

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА РАССЕЙВАНИЯ ТОКСИЧНОГО ГАЗА В УСЛОВИЯХ ЗАСТРОЙКИ

Запропоновано чисельну модель та на її базі розроблено метод розрахунку процесу розповсюдження важкого газу у 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 is developed. The numerical simulation is carried out using 3D models of pollutant transfer and potential flow. The implicit finite difference schemes are used. The results of numerical simulation of air pollution are presented.

Введение

Одной из важных задач в области экологической безопасности является прогноз динамики загрязнения атмосферы при авариях с химически опасными веществами [1]. Результаты такого прогноза являются основой для разработки защитных мероприятий. В настоящее время для прогноза в случае аварии с химически опасными веществами на предприятиях, транспорте используются нормативная методика. Эта методика не позволяет оценить динамику загрязнения воздушной среды при аварии. Другим ее существенным недостатком является то, что она не дает возможности учесть влияние зданий на процесс рассеивания токсиканта. Актуальной задачей является разработка эффективных моделей для прогноза динамики загрязнения воздушной среды при авариях, позволяющих учесть основные физические факторы, влияющие на процесс переноса загрязнителя, а с другой стороны требующие небольших затрат машинного времени при компьютерной реализации. В настоящей работе рассматривается построение эффективной математической модели, которая может быть использована для решения широкого класса прикладных задач, связанных с прогнозом загрязнения воздушной среды при авариях.

1. Математическая модель

Рассматривается задача о загрязнении атмосферы при аварийном разливе опасного вещества (ацетон). Для моделирования процесса переноса паров токсиканта в атмосфере будем использовать трехмерное уравнение миграции примеси [2, 6]

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

где C – концентрация паров токсичного вещества; u , v , w – компоненты вектора скорости воздушной среды; w_s – скорость оседания; $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ – коэффициент турбулентной диффузии; Q – интенсивность выброса токсичного вещества в атмосферу; $\delta(r - r_i)$ – дельта-функция Дирака; $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ – координаты источника выброса (разлива). Постановка краевых условий для данного уравнения рассматривается в работах [6, 4].

Для расчета поля скорости воздушного потока с учетом зданий 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 [2, 6]. 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 ; $k_1 = 0,1$ м/с; $n = 0,15$; $m \approx 1$.

2. Метод решения

Численное интегрирование уравнения (1) осуществляется с использованием неявной попеременно-треугольной разностной схемы расщепления [2]. 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 попеременно-треугольного метода Самарского [7].

3. Алгоритм расчета скорости w_S

Если рассматривается перенос в атмосфере тяжелого газа, то для расчета оседания газа (паров) предлагается использовать величину w_S , которая входит в уравнение (1). 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} . Далее алгоритм расчета величины w_S состоит в следующем:

1. Используя уравнение состояния идеального газа рассчитывается парциальное давление токсичного газа в каждом контрольном объеме [5]

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

где R_u – универсальная газовая постоянная; T – температура; M – молекулярная масса токсичного газа.

2. Рассчитывается парциальный объем токсичного газа в каждой разностной ячейке.

3. Рассчитывается газовая постоянная смеси в каждой разностной ячейке.

4. Рассчитывается плотность смеси ρ в каждой разностной ячейке.

5. Из балансового соотношения [3]

$\frac{\rho w_S^2}{2} = g \Delta z (\rho - \rho_a)$, определяется величина w_S в каждом контрольном объеме (здесь ρ_a – плотность воздуха; $g = 9,81$ м/с²).

6. В каждом контрольном объеме интегрируется уравнение

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \frac{\partial C w_S}{\partial z} = 0,$$

из которого определяется новое значение концентрации токсиканта в каждом контрольном объеме.

4. Практическая реализация

Рассмотрим применение разработанной численной модели и построенного метода расчета загрязнения атмосферы при разливе ацетона. Решение задачи находится при таких данных: размеры расчетной области: 150м × 150м × 30м. Скорость ветра на высоте 10 м – 3 м/с; температура воздуха – 20 °С, атмосферное давление – 1 бар. Разлив происходит перед первым зданием и за ним (рис. 1, 2).

Площадь первой зоны разлива – 50 м², площадь второй зоны разлива – 25 м². Форма расчетной области формируется с помощью маркеров, которые позволяют выделить те разностные ячейки, которые относятся к области течения, и выделить разностные ячейки, которые относятся к зданиям. Местоположение зон разлива в дискретной модели также определяется маркерами.

На рис.1, 2 показана зона загрязнения воздушной среды в расчетной области для различных моментов времени. Из данных рисунков хорошо видно, где расположены зоны разлива – эти участки характеризуются подобластями с большим градиентом концентрации. Отчетливо видно, что над каждой зоной разлива формируется шлейф токсичного газа. Оба шлейфа сливаются в атмосфере, образуя зону загрязнения над зданиями, которая имеет сложную геометрическую форму.

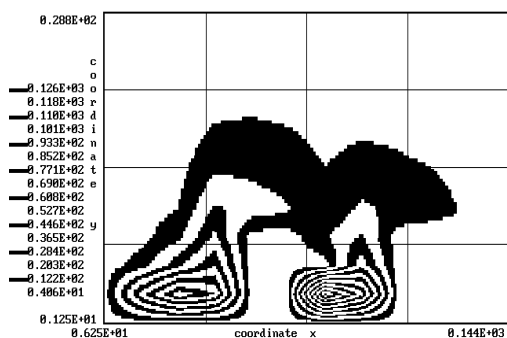


Рис. 1. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 25$ с (сечение $y = 75$ м)

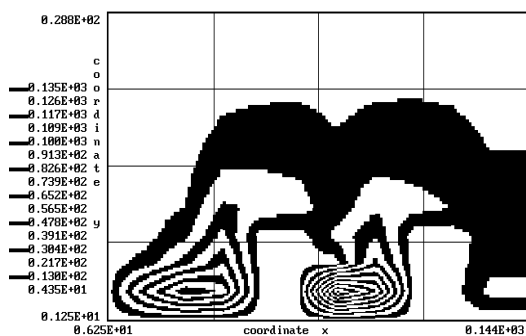


Рис. 2. Зона загрязнения атмосферы для момента времени $t = 40$ с (сечение $y = 75$ м)

Из данных рисунков также можно заметить, как часть шлейфа, образовавшегося над первой зоной разлива после огибания первого здания, поступает в пространство между двумя зданиями. Таким образом, между двумя зданиями имеется восходящий шлейф от второй зоны разлива и нисходящий шлейф от первой зоны разлива.

Выводы

В работе разработана трехмерная численная модель, которая позволяет рассчитывать динамику загрязнения воздушной среды в условиях застройки. Модель позволяет выполнить прогноз за 10...20 секунд, т.е. расчет практически осуществляется в режиме реального времени. Дальнейшее совершенствование данного направления необходимо вести по созданию банка данных для различных химически опасных веществ.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий [Текст] : учеб. пособие в 5 кн. / под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаева. – М.: Изд-во АСВ, 2001. – 200 с.
2. Антошкина, Л. И. Оценка экологического риска при авариях с химически опасными веществами [Текст] / Л. И. Антошкина, Н. Н. Беляев, Е. Ю. Гунько. – Д.: Наука и образование, 2008. – 132 с.
3. Беляев, Н. Н. Основы теплопередачи [Текст] / Н. Н. Беляев. – К.: Вища шк. Головне вид-во, 1989. – 343 с.
4. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде [Текст] / М. З. Згуровский и др. – К.: Наук. думка, 1997. – 368 с.
5. Крейт, Ф. Основы теплопередачи [Текст]; пер. с англ. / Ф. Крейт, У. Блэк. – М.: Мир, 1983. – 512 с.
6. Марчук, Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды [Текст] / Г. И. Марчук. – М.: Наука, 1982. – 320 с.
7. Самарский, А. А. Теория разностных схем [Текст] – 2-е изд., испр. / А. А. Самарский. – М.: Наука, 1983. – 616 с.

Поступила в редколлегию 25.03.2009.