

УДК 533.27:519.63

Ю.А. СКОБ

Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ СМЕШЕНИЯ НЕРЕАГИРУЮЩИХ ГАЗОВ В АТМОСФЕРЕ

Представлены постановка задачи и алгоритм численного моделирования процессов выброса нереагирующих газов в атмосферу, смешения их с воздухом и дальнейшего распространения смеси в открытом пространстве со сложным рельефом местности. Рассмотрен ряд тестовых расчетов, моделирующих рассеяние газообразных пропана и водорода.

моделирование, смешение газов, турбулентность, атмосфера, выброс газов, истечение

Введение

Выбросы газообразных примесей в атмосферу, формирование газо-воздушных смесей и их дальнейшее распространение в окружающей среде под влиянием внешних факторов являются составной частью газодинамических процессов, возникающих в результате реализации производственных циклов или возникновения аварийных ситуаций на предприятиях авиационно-космической промышленности, которые используют, хранят или производят данные вещества. В случае выброса горючих и взрывоопасных газов возникает реальная угроза возгорания смеси, сопровождаемого детонационными взрывами, что может привести к значительному материальному ущербу и человеческим жертвам. В связи с этим возникают проблемы оценки возможных рисков в случае реализации определенного сценария выброса газообразной примеси, организации безопасного функционирования производственного предприятия. Вопросы смесеобразования являются также актуальными для обеспечения эффективной работы различных технических устройств, в которых газообразная примесь является рабочим телом (например, охлаждаемые лопатки авиационных газовых турбин, камеры сгорания и термообработки). Математическое моделирование вышеперечисленных физических явлений связано с построением и

сопряжением математических моделей таких физических процессов, как истечение струй, турбулентное смешение газов, движение газообразной смеси в трехмерном пространстве со сложным рельефом местности, теплопередача, горение и взрывы. Разработанные на основе математической модели эффективные информационные технологии позволяют анализировать и прогнозировать трехмерные поля концентрации примеси и другие термодинамические параметры смеси во времени и пространстве, оценивать риски возможных пожаров и разрушений от взрывов, формулировать рекомендации по организации и расположению опасных производств.

1. Математическая модель

Основные уравнения. Адекватное описание физических процессов смешения нереагирующих газов с воздухом и дальнейшего распространения смеси при истечении струи в открытое пространство или замкнутое помещение с принудительной (или естественной) вентиляцией возможно только с использованием системы нестационарных уравнений Навье-Стокса для сжимаемого газа. Ограниченные возможности нынешних компьютеров не позволяют эффективно осуществлять прямое численное решение этих уравнений. В настоящее время численное моделирование турбулентных течений

осуществляют путем решения осредненных по Рейнольдсу-Фавру уравнений Навье-Стокса, дополненной моделью турбулентности [1, 2]. Однако большинство моделей турбулентности не описывают с одинаковой степенью адекватности различные типы течений. Особенно это касается течений с интенсивными отрывами потока и/или большими градиентами давления температуры. Поэтому существует необходимость построения новых моделей и расчетных схем для численного моделирования такого рода течений e_S / ρ .

Целью данной работы является разработка упрощенной математической модели процесса смешения не реагирующих газов с воздухом и дальнейшего распространения смеси при истечении струи в открытое или замкнутое пространство с вентиляцией, а также алгоритма численного моделирования этого процесса.

В результате структурного анализа такого течения и декомпозиции полной математической модели газодинамического процесса принято в качестве предположения допущение о том, что основное влияние на процесс оказывает конвективный обмен массой, импульсом и энергией. Таким образом, для описания процессов смешения двухкомпонентного газа в рассматриваемом случае достаточно использовать усеченные уравнения Навье-Стокса, полученные путем отбрасывания вязких членов (приближение Эйлера с использованием источниковых членов).

Расчетной областью Ω является параллелепипед с прямолинейными образующими, расположенный в правой декартовой системе координат (X, Y, Z) с основанием в плоскости XOZ (ось Y ориентирована в направлении, противоположном действию сил тяжести Земли). Расчетная область разбивается на пространственные ячейки, причем размеры граней подбираются в соответствии с характерным размером особенностей расчетной области (шероховатости обтекаемой поверхности, размерностью обтекаемых объектов). Полная система уравнений, опи-

сывающая нестационарное трехмерное течение двухкомпонентной смеси газов в данной постановке имеет вид [3, 4]:

$$\frac{\partial \vec{a}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{b}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{c}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{d}}{\partial z} = \rho \vec{f}, \quad (1)$$

где \vec{a} , \vec{b} , \vec{c} , \vec{d} , \vec{f} – вектор-столбцы вида:

$$\vec{a} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, E]^T, \quad (2)$$

$$\vec{b} = [\rho u, P + \rho u^2, \rho uv, \rho uw, (E + P)u]^T, \quad (3)$$

$$\vec{c} = [\rho v, \rho vu, P + \rho v^2, \rho vw, (E + P)v]^T, \quad (4)$$

$$\vec{d} = [\rho w, \rho wu, \rho wv, P + \rho w^2, (E + P)w]^T, \quad (5)$$

$$\vec{f} = [0, 0, -g, 0, -gv]^T; \quad (6)$$

t – время; u , v , w – составляющие вектора скорости \vec{q} ; P , ρ – давление и плотность; E – полная энергия единицы объема смеси газов

$$E = \rho \left(e + \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) \right); \quad (7)$$

e – внутренняя энергия единицы массы газа; компоненты вектора \vec{f} – суть проекции распределенных объемных источников; g – ускорение свободного падения.

Закон переноса компоненты смеси с учетом скорости диффузии имеет вид [5]:

$$\frac{\partial(\rho Q)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Q)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v Q)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w Q)}{\partial z} = \rho Q, \quad (8)$$

где Q – относительная массовая плотность примеси (отношение плотности газообразного вещества примеси к плотности смеси); ρQ – интенсивность изменения плотности примеси вследствие диффузии в соответствии с законом Фика $\rho Q_t = \text{div}(\rho \mathfrak{D} \text{grad} Q)$ (коэффициент диффузии \mathfrak{D} определялся по методике, предложенной М.Е. Берляндом [6]).

Система уравнений (1 – 8) является незамкнутой. Дополним ее уравнениями, определяющими теплотехнические свойства компонент смеси [5]. Для идеального политропного газа величина e связана с P

и ρ смеси зависимостью: $e = \frac{P}{(k-1)\rho}$.

Граничные условия. При постановке граничных условий полагается, что расходная составляющая скорости не превосходит скорость звука. Граничные условия на входе будем задавать на поверхностях тех граней, примыкающих к границам расчетной области, через которые в расчетную область поступает атмосферный воздух. Набегающий поток на входе определяется величинами:

– полной энтальпии

$$I_{00} = \frac{k}{k-1} \frac{P}{\rho} + \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2}; \quad (9)$$

– функции энтропии

$$S_0 = \frac{P}{\rho^k}; \quad (10)$$

– направлением вектора скорости потока (углами $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$);

– относительной массовой плотностью примеси Q ($Q \leq 1$, если поступает газообразное вещество примеси, например, угарный газ CO).

Параметры потока на входе определяются из равенств (3, 4) с учетом заданных $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ с привлечением соотношения для “левого” инварианта Римана [4, 7]. На непроницаемых участках, ограничивающих расчетную область поверхностями, выполняются условия «непротекания»: $q_n = 0$, где \vec{n} – вектор нормали к рассматриваемой границе. Граничные условия на выходе будем задавать на поверхностях тех граней конечно-разностных ячеек, которые примыкают к границам расчетной области и через которые предполагается вытекание или втекание смеси. В выходных областях, кроме атмосферного давления P_A , задаваемого либо взятого из эксперимента, использовались соотношения для “правого” инварианта Римана [4, 7].

Начальные условия. В начальный момент времени во всех «газообразных» ячейках расчетной области принимаются параметры окружающей сре-

ды. В ячейках, занимаемых облаком газообразной примеси, которое образовалось в результате мгновенного выброса, относительная массовая концентрация примеси принимается равной $Q = 1$ (100%). В ячейках с испарением или истечением газа задается закон изменения расхода примеси.

Алгоритм численного решения. Векторное уравнение (1) является следствием законов сохранения массы, импульса и энергии, которые могут быть представлены в интегральной форме для каждой расчетной ячейки:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V a dV + \iint_{\sigma} \hat{A} d\sigma = \iiint_V \rho f dV, \quad (11)$$

где V – объем элементарной расчетной ячейки; σ – ограничивающая поверхность данной ячейки, которая имеет внешнюю нормаль \vec{n} ($\vec{\sigma} = \sigma \vec{n}$); \hat{A} – тензор плотности потока консервативных переменных a , столбцами которого являются векторы $\vec{b}, \vec{c}, \vec{d}$, соответственно.

Закон переноса компоненты смеси (8) может быть также представлен в интегральной форме для каждой расчетной ячейки:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho Q dV + \iint_{\sigma} \rho Q q d\sigma = \iiint_V \rho Q f dV. \quad (12)$$

Численное решение основных уравнений основывается на использовании схемы распада произвольного разрыва. Уравнения (11, 12) допускают возникновение и существование поверхностей разрыва двух видов: ударных волн и тангенциальных разрывов. Функции, удовлетворяющие уравнениям (11, 12), можно рассматривать в качестве обобщенных решений уравнений газовой динамики. Использование интегральных законов сохранения массы, импульса, энергии и концентрации газообразной примеси в качестве исходных для построения разрывных решений обеспечивает построение разрывных решений без выделения разрывов.

Совокупность газодинамических параметров во всех ячейках в момент времени t^n представляет

собой известное решение на временном слое с индексом n . Параметры в момент времени $t^{n+1} = t^n + \tau$ (на слое $n+1$) рассчитывались посредством применения явных разностных аппроксимаций для соотношений (5) в рамках интегроинтерполяционного метода С.К. Годунова [7]. На первом этапе непрерывное распределение параметров заменяется кусочно-постоянными среднеинтегральными значениями в каждой расчетной ячейке. При этом границы ячейки представляют собой неустойчивые поверхности произвольного разрыва, которые распадаются на устойчивые волновые элементы: ударную волну, контактную поверхность и волну разрежения. Для каждого такого разрыва определяются потоки массы, импульса и энергии через грани газовых ячеек. Устойчивость конечно-разностной схемы обеспечивается за счет выбора величины шага по времени τ .

На основе математической модели создана компьютерная система инженерного анализа газодинамических процессов истечения, смещения, рассеяния и взрыва, которая использована в исследовательском программном комплексе «Fige». Программа позволяет прогнозировать изменение концентрации примеси во времени и пространстве в расчетной области с использованием персональных компьютеров в практически приемлемое время.

2. Верификация математической модели

Для верификации модели для рассеяния примесей в атмосфере проводилось сравнение результатов расчета с экспериментальными данными [8] (рис. 1). Моделировалось испарение жидкого пропана с пятна пролива площадью 256 м^2 при атмосферных параметрах: давление 101325 Па , температура 291 К , скорость набегающего воздуха $5,4 \text{ м/с}$. Пропан испарялся с расходом $27,6 \text{ кг/с}$ и имел температуру 230 К в газообразном состоянии. Расчетные распре-

деления концентрации пропана на высотах $0,8, 1,4$ и $2,3 \text{ м}$ в момент времени 450 с по мере удаления от пятна пролива достаточно хорошо соответствуют экспериментальным данным [8].

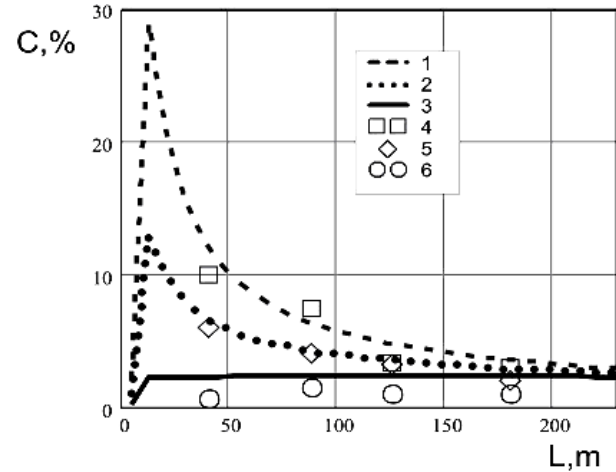


Рис. 1. Распределение концентрации пропана: 1, 2, 3 – расчет, 4, 5, 6 – экспериментальные данные на высотах $0,8 \text{ м}$, $1,4 \text{ м}$, $2,3 \text{ м}$

3. Расчеты выбросов водорода

Моделируется несколько возможных сценариев на станции заправки водородным топливом транспортных средств. Раздаточная станция имеет большую цистерну с жидким водородом ($5,7 \text{ м}^3$). Криогенная цистерна питает три пакета по 12 баллонов общим объемом $799,2 \text{ м}^3$, в которых хранится газообразный водород при температуре окружающей среды.

Наиболее опасными с точки зрения потенциальных катастрофических последствий, угрожающих оборудованию станции, персоналу и населению жилых построек являются следующие сценарии:

1) пролив из цистерны всего объема жидкого водорода, последовательное испарение жидкости, смешение газообразного водорода с движущимся воздухом и дальнейшее распространение смеси в сторону жилого квартала;

2) выброс всего объема сжатого под высоким давлением газообразного водорода из баллонов раздачи с образованием облака и дальнейшее его рас-

сеяние в потоке набегающего воздуха.

Пролив жидкого водорода. Численные расчеты рассеяния водорода при испарении из пролива всего объема жидкого водорода из криогенной цистерны с образованием пятна площадью 65,7 м² проводились при скоростях ветра 1, 3 и 10 м/с. Скорость испарения заохлажденного водорода, рассчитанная по методике [9], была равна 11,56 кг/с. Направление ветра принималось в сторону жилого квартала.

На рис. 2 приведены поля концентраций на поверхности земли (а – вид сверху) и в центральном сечении (б – вид сбоку) для скорости ветра 1 м/с.

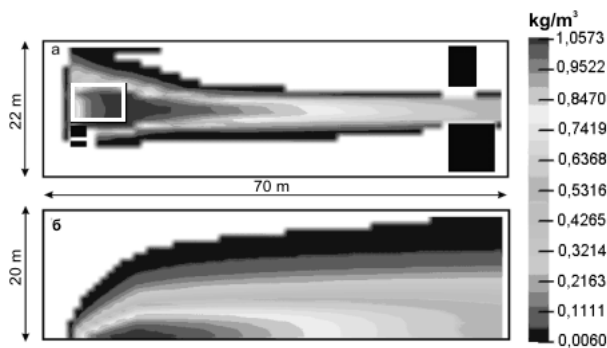


Рис. 2. Поле концентраций при рассеянии пролива жидкого водорода; скорость ветра 1 м/с.: а – вид сверху; б – вид сбоку

С увеличением скорости ветра скорость рассеяния увеличивается как для случая пролива жидкого водорода (рис. 3), так и для выброса газообразного водорода (рис. 4). Как показали сравнения изменения полей концентраций во времени для различных скоростей ветра при проливе сжиженного водорода его всплытие несущественно вследствие низкой температуры пара и, как следствие, малого отличия его плотности от плотности воздуха.

Рассеяние облака газообразного водорода. Моделировалось рассеяние при мгновенном выбросе всего объема сжатого под высоким давлением газообразного водорода из пакета баллонов раздачи (например, в случае их одновременного разрушения) с образованием облака объемом 799,2 м³.

Как показали результаты численных экспериментов, всплытие существенно лишь при низких

скоростях ветра (рис. 5). Увеличение скорости ветра прижимало облако к земле, препятствуя всплытию.

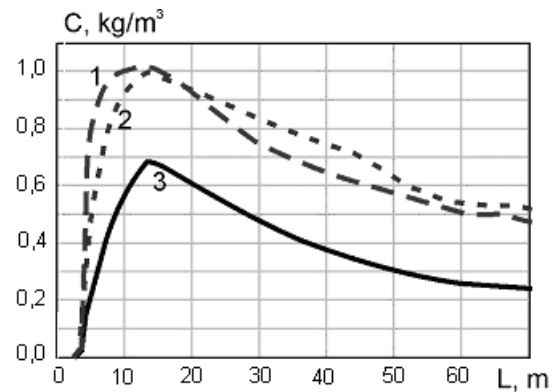


Рис. 3. Распределение концентрации водорода в смеси в зависимости от расстояния от места пролива. Скорость ветра: 1 – 1 м/с; 2 – 3 м/с; 3 – 10 м/с

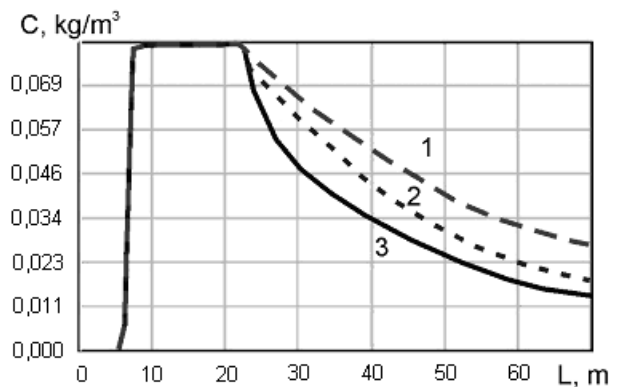


Рис. 4. Распределение максимальной концентрации водорода в смеси в зависимости от расстояния от места мгновенного выброса; скорость ветра: 1 – 1 м/с; 2 – 3 м/с; 3 – 10 м/с

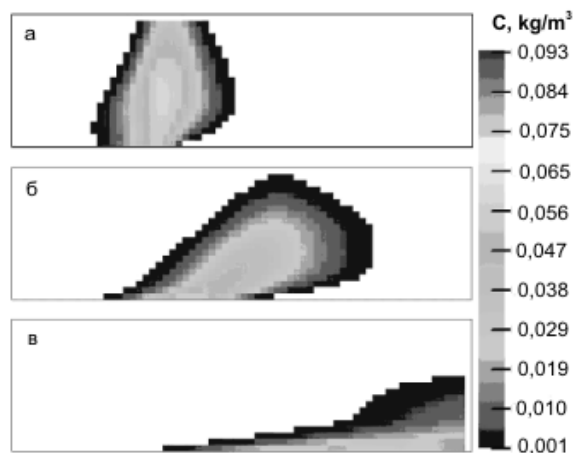


Рис. 5. Поле концентраций в облаке через 5 секунд после выброса (вид сбоку); скорость ветра: а – 1 м/с; б – 3 м/с; в – 10 м/с

Очевидно, что при некоторых скоростях ветра больше скорости всплытия водород начинает себя вести как нейтральный газ.

Видно, что наибольшая масса водорода, а соответственно, и энергия потенциального взрыва будет при меньшей скорости ветра (рис. 5), когда область, занятая взрывоопасной смесью, быстро перемещается на большую высоту, безопасную для жилых построек.

Заключение

Разработана математическая модель газодинамических процессов формирования двухкомпонентной газовой смеси и рассеяния ее в атмосфере. Развита конечно-разностная схема для случая трехмерной системы уравнений движения газовой динамики, дополненной законом сохранения массы примеси. Рассмотрен алгоритм численного решения полученной разностной схемы на основе метода С.К. Годунова. Разработана компьютерная система, реализующая различные сценарии возникновения, рассеяния и взрыва газовых примесей в атмосфере. Верификация численных расчетов показала их приемлемую сходимость с известными экспериментальными результатами.

Выполнены численные расчеты для рассеяния при проливе сжиженного и мгновенном выбросе газообразного водорода. Полученные результаты физически предсказуемы на качественном уровне, но численные расчеты позволили получить количественный прогноз.

Литература

1. Шенг Дж. С. Обзор численных методов решения уравнений Навье-Стокса для течений сжимаемого газа // *Аэрокосмическая техника*. – 1986. – № 2. – С. 65-92.

2. Андерсон Д., Таннехилл Дж., Плетчер Р. Вычислительная гидромеханика и теплообмен: В 2-х т. – М.: Мир, 1990. – 726 с.

3. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит.-ры, 1970. – 904 с.

4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: Учебное пособие. В 10 т. – Т. 6. Гидродинамика. – М.: Наука, гл. ред. физ.-мат. лит., 1986. – 736 с.

5. Митасов Ю.Д., Редько А.Ф., Скоб Ю.А., Угрюмов М.Л. Численное моделирование процесса распространения продуктов горения при пожаре в зданиях с атриумами // *Науковий вісник будівництва*. – 2001. – Вип. 14. – С. 258-262.

6. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Л.: Гидрометеиздат, 1975. – 448 с.

7. Численное решение многомерных задач газовой динамики / С.К. Годунов, А.В. Забродин, М.Я. Иванов, А.Н. Крайко, Г.П. Прокопов. – М.: Наука, гл. ред. физ.-мат. лит.-ры, 1976. – 400 с.

8. Puttock G.S., Colenbrander G.W., Blackmore D.R. Marlin Sands experiments 1980: Dispersion results from continuous releases of refrigerated liquid propane / S. Hartwig (ed) // *Heavy Gas and Risk Assessment*. – 1980. – No. 11. – P. 147-161.

9. Safety and Security Analysis: Investigative Report by NASA on Proposed EPA Hydrogen-Powered Vehicle Fueling Station. Assessment and Standards Division Office of Transportation and Air Quality U.S. Environment Protection Agency, EPA420-R-04-016 October 2004. – 45 p.

Поступила в редакцию 19.03.2007

Рецензент: д-р физ.-мат. наук, проф. А.В. Бастеев, Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Харьков.