

УДК 622.012: 502.3

Н. Н. БЕЛЯЕВ – д. т. н., профессор, Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, кафедра «Гидравлика и водоснабжение», gidravlika2013@mail.ru

А. В. БЕРЛОВ – инженер, Днепропетровского национального университета имени Олеся Гончара, кафедра «Аэрогидромеханика и энергомассоперенос»

З. Н. ЯКУБОВСКАЯ – к. т. н., доцент, Украинский государственный химико-технологический университет, кафедра «Физика»

## КОМПЬЮТЕРНАЯ МОДЕЛЬ РАСЧЕТА ЛОКАЛЬНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ ПРИ АВАРИЙНОМ ВЫБРОСЕ ОПАСНОГО ВЕЩЕСТВА

*Статью представил приват-проф. Л. Ф. Долина*

### Постановка проблемы

К числу наиболее опасных источников возможного химического загрязнения окружающей среды относится Павлоградский химический завод, где в специальных хранилищах размещено твердое ракетное топливо (ТРТ) ракетной системы РС-22 (рис. 1). Твердое топливо находится внутри специально оборудованных хранилищ, возле которых располагается защитный вал (рис. 2). Этот вал обеспечивает определенную защитную функцию в случае чрезвычайной ситуации в хранилище. Поэтому при моделировании локального загрязнения атмосферы, вблизи хранилища необходимо при прогнозе учесть этот вал, истечение струи продуктов сгорания из здания и, по существу, процесс гидродинамического взаимодействия этой струи с ветровым потоком. Для практики важно иметь численную модель, позволяющую учесть эти особенности.

### Анализ последних исследований и публикаций

В Украине оценка последствий аварийных выбросов на химически опасных объектах и транспорте осуществляется с по-

мощью нормативной методики, методики ОНД-86 или методики РД 52.04.253-90 [8].

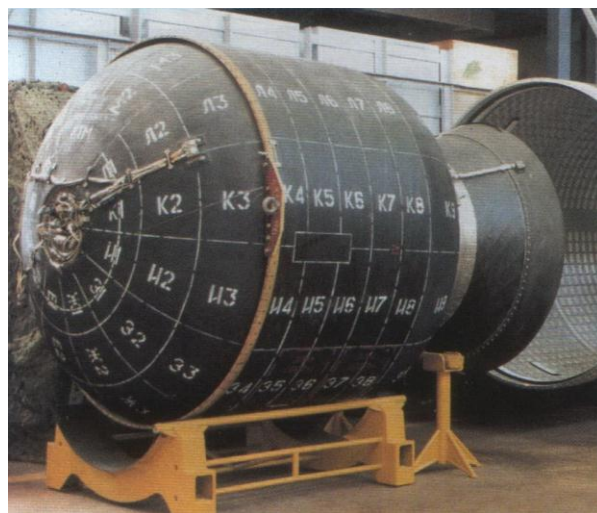


Рис. 1. Вид снаряженного ракетного твердотопливного двигателя РС-22

Данные методики не учитывают скорость ветра, атмосферную диффузию на процесс формирования зоны загрязнения. Для решения задач данного класса также применяются различные аналитические модели и модель Гаусса [6]. Данные модели позволяют оперативно рассчитать зону загрязнения, но для упрощенных ситуаций типа точечный постоянно действующий источник выброса или точечный мгновенный выброс [6].



Рис. 2. Общий вид зоны размещения хранилищ твердого ракетного топлива:  
 1 – хранилище твердого ракетного топлива,  
 2 – защитный вал

Для применения модели Гаусса необходимо научное обоснование значений коэффициентов дисперсии для территории Украины, которое в настоящее время отсутствует. Сейчас осуществляется активная разработка CFD моделей для решения задач прогноза аварийного загрязнения атмосферы. Это связано с тем, что модели данного класса позволяют максимально учитывать те физические факторы, которые оказывают влияющее значение на формирование зон загрязнения [1, 2-5, 7, 11, 12].

### Цель

Целью данной работы является разработка CFD (Computational Fluid Dynamics) модели для прогноза загрязнения атмосферы при горении твердого ракетного топлива в хранилище. Основное требование к данной модели – учет основных физических факторов при моделировании и малые затраты компьютерного времени при практической реализации модели.

### Методика

При расчете процесса загрязнения атмосферы, в масштабе «microscale» в случае аварийной ситуации в хранилище твердого ракетного топлива (рис.2) решение задачи разбивается на два шага. На первом шаге решается задача по определению поля скорости воздушного потока с учетом взаимодействия выходящего из хранилища газового потока с ветровым потоком. Для решения этой задачи применяются уравнения Навье-Стокса, записанные в переменных Гельмгольда

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial u \omega}{\partial x} + \frac{\partial v \omega}{\partial y} = \nu \left( \frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right), \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega, \quad (2)$$

где  $\omega = \frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y}$  – завихренность;  $\psi$  – функция тока;  $\nu$  – коэффициент турбулентной вязкости. Ось  $Y$  направлена вертикально вверх.

Компоненты вектора скорости воздушного потока рассчитываются по зависимостям

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \quad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}.$$

Постановка краевых условий для данной системы уравнений приведена в [8].

После определения поля скорости воздушного потока решается задача о переносе загрязняющих веществ (продуктов горения твердого ракетного топлива) в атмосфере. Для моделирования этого процесса используется уравнение переноса примеси в атмосфере [1, 9, 11, 12]

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u C}{\partial x} + \frac{\partial v C}{\partial y} + \sigma C = \text{div}(\mu \text{grad} C) + \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(x - x_i) \delta(y - y_i), \quad (3)$$

где  $C$  – концентрация загрязняющего вещества;  $u, v$  – компоненты вектора скорости

сти воздушного потока;  $\mu = (\mu_x, \mu_y)$  – коэффициенты атмосферной турбулентной диффузии;  $Q$  – интенсивность выброса загрязнителя;  $\delta(x-x_i)\delta(y-y_i)$  – дельта-функция Дирака;  $x_i, y_i$  – координаты источника выброса;  $\sigma$  – коэффициент, учитывающий химический распад загрязнителя;  $t$  – время.

Постановка краевых условий для данного уравнения рассмотрена в работах [1, 11].

В разработанной численной модели используются следующие зависимости для задания профиля ветра и вертикального коэффициента атмосферной диффузии:

$$u = u_1 \left( \frac{y}{y_1} \right)^p, \quad \mu_y = k_1 \left( \frac{y}{y_1} \right)^m, \quad \mu_x = k_0 u,$$

где  $u_1$  – скорость ветра на высоте  $y_1$  (принимается  $z_1 = 10$  м);  $k_1 = 0,2$ ;  $k_0 = 0,1$ ;  $p = 0,16$ ;  $m \approx 1$ .

Численное интегрирование уравнений модели выполняется на прямоугольной разностной сетке. При формировании расчетной области используется метод маркирования [1]. С помощью маркеров задается положение здания – хранилища твердого ракетного топлива, форма и местоположение защитного вала возле хранилища.

### Численное интегрирование моделирующих уравнений

Для численного интегрирования уравнений Навье – Стокса используются неявные разностные схемы [1,10]. Для численного интегрирования уравнения переноса примеси используется попеременно - треугольная неявная разностная схема расщепления [1,11].

### Алгоритм решения

Построенная численная модель относится к классу «diagnostic models». Это модели, которые учитывают основные физиче-

ские факторы, влияющие на развитие чрезвычайной ситуации, но требуют небольших затрат компьютерного времени при практической реализации на компьютерах малой и средней мощности (время расчета порядка нескольких минут). Назначение таких моделей – быстрый серийный расчет разнообразных сценариев чрезвычайной ситуации и диагностика интенсивности загрязнения окружающей среды. Модели данного класса обеспечивают оперативное определение зон загрязнения и социального риска для моделирующей чрезвычайной ситуации.

Разработанная в данной работе модель реализована в виде прикладных программ (кодов) для проведения вычислительного эксперимента на персональном компьютере.

На базе рассмотренной CFD модели был создан пакет прикладных программ «WALL-2». Для программирования использовался FORTRAN. Разработанная модель ориентирована на решение следующей задачи. Рассматривается здание – хранилище твердого ракетного топлива РС-22. Возле здания размещается защитный вал (см. рис.2). Ставится задача по оценке уровня загрязнения приземного слоя атмосферы при чрезвычайной ситуации в хранилище, когда произойдет возгорание топлива внутри хранилища и струя газа – продуктов горения будет выходить из хранилища наружу, приводя к загрязнению воздушной среды.

Пакет программ включает в себя следующие подпрограммы:

1. ТВ2 – численный расчет рассеивания опасного вещества в атмосфере на первом шаге расщепления;
2. ТВ3 – численный расчет рассеивания опасного вещества в атмосфере на втором шаге расщепления;

3. TB4 – численный расчет рассеивания опасного вещества в атмосфере на третьем шаге расщепления;
4. TB5 – численный расчет рассеивания опасного вещества в атмосфере на четвертом шаге расщепления;
5. TB6 – реализация граничных условий;
6. ZNS – решение уравнения переноса завихренности;
7. GFNS – реализация граничных условий для уравнения переноса завихренности;
8. ZNSPS – решение уравнения для функций тока;
9. ZKL – реализация граничных условий для уравнения для функции тока;
10. TB1.dat – файл ввода данных, необходимых для проведения вычислительного эксперимента. Это следующие данные:
  - размеры расчетной области;
  - координаты расположения источника эмиссии опасного вещества;
  - время в течении которого происходит эмиссия опасного вещества;
  - интенсивность эмиссии тепла при горении ТРТ;
  - скорость и направление ветра;
  - положение рецептора;
  - форма здания (хранилища с ТРТ);
  - форма защитного вала.

Основные этапы алгоритма решения задачи с помощью данного пакета программ показаны на рис. 3.

*Функциональные особенности* пакета программ «WALL-2»:

1. Возможность учета различных классов стабильности атмосферы.

2. Возможность учета истекания струи продуктов горения ракетного топлива из здания хранилища и взаимодействия этой струи с защитным валом (экраном).

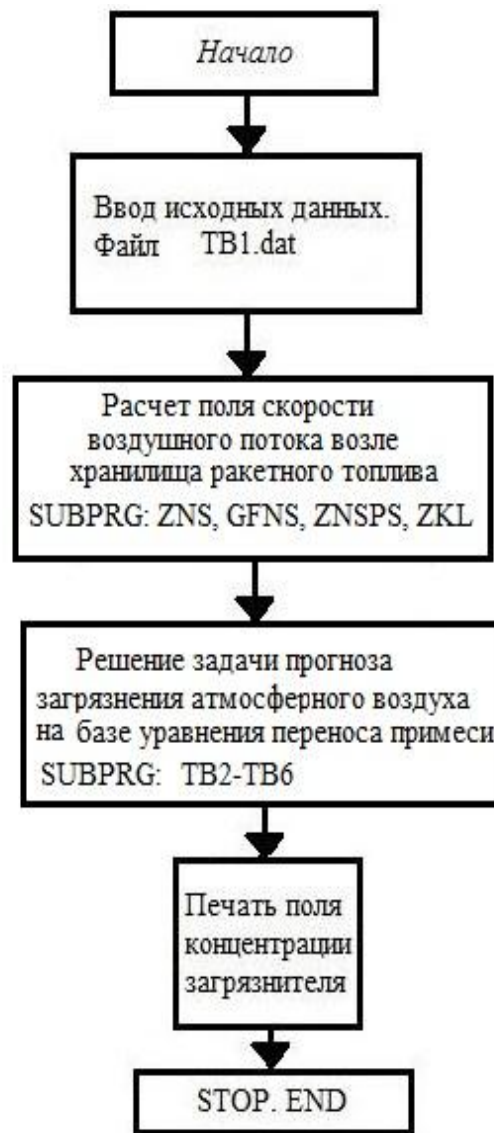


Рис. 3. Основные этапы алгоритма решения задачи с помощью пакета программ «WALL-2»

3. Возможность учета распространения опасного вещества внутри здания хранилища.

4. Возможность учета вымывания примеси осадками.

5. Учет неравномерного по высоте профиля скорости ветра.

6. Быстрота расчета (5 минут).



### Практическая реализация численной модели

Расчет выполнялся при следующих исходных данных: значение скорости ветра на фиксированной высоте  $Y_1$  равна 5 м/с. Размеры расчетной области 41.6 м x 42 м; высота вала – 12 м; высота хранилища – 12 м;  $\sigma = 0$ .



Рис. 4. Хранилище твердого ракетного топлива:

1 – здание хранилища; 2 – защитный вал

Внутри хранилища (рис.4) располагается горящий корпус ракетного двигателя РС-22 из которого выходит струя газа, содержащая продукты горения. Этот процесс моделируется следующим образом. Внутри здания задается разностная ячейка, из которой выходит поток со скоростью  $V_{gas}$ , содержащий загрязнитель ( $Al_2O_3$ ) с концентрацией 100 ед. (в безразмерном виде). Скорость струи выходящего из хранилища газового потока – продуктов сгорания принята равной  $V_{gas} = 20 м/с$ . Расчет переноса загрязнителя осуществляется как внутри здания, так и снаружи.

Скорость переноса загрязнителя внутри здания определяется скоростью газового потока  $V_{gas}$  и диффузией, а снаружи здания – скоростью переноса, которая формирует-

ся в процессе взаимодействия выходящего из здания газового потока и ветрового потока плюс атмосферная диффузия. Коэффициенты диффузии по обоим направлениям внутри здания рассчитываются по зависимости  $\mu \approx k \cdot u$ , где  $u = V_{gas}$  – скорость газового потока,  $k = 0.1$ ,  $Re = 15.89 \cdot 10^6$ . При расчете числа Рейнольдса в качестве масштабов выбиралось скорость газового потока, высота здания и кинематический коэффициент вязкости при температуре 20°C.

### Результаты

На последующих рисунках показана зона загрязнения возле хранилища для трех различных сценариев:

1. При наличии защитного вала (рис. 5, 6).
2. При наличии частично разрушенного вала (рис.7).
3. При наличии экрана, установленного на валу (рис.8).

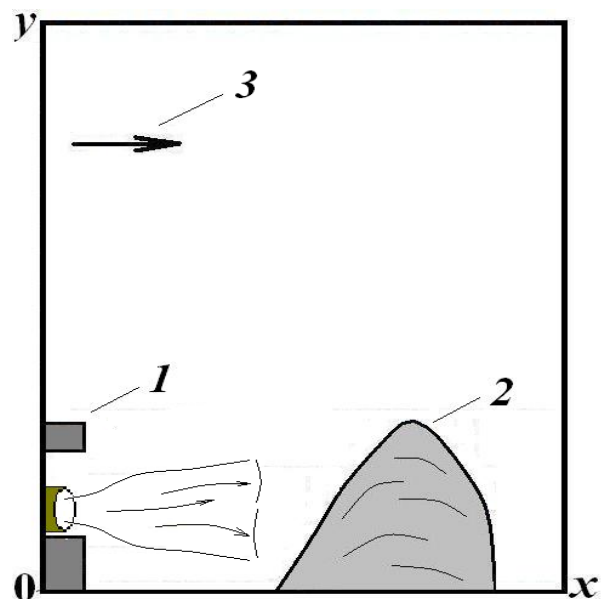


Рис. 5. Схема расчетной области:

1 – хранилище твердого ракетного топлива; 2 – защитный вал; 3 – направление ветра

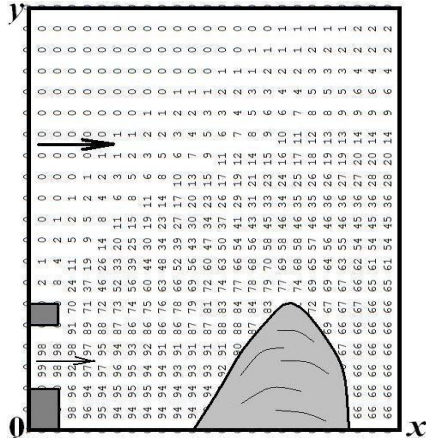


Рис. 6. Зона загрязнення приземного слоя атмосферы для момента времени  $t=48$  с (скорость ветра на высоте  $Y_1$  равна 5м/с)

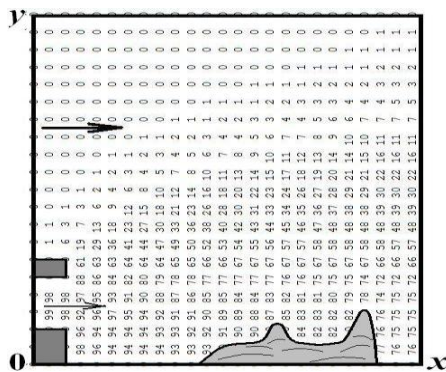


Рис. 7. Зона загрязнення приземного слоя атмосферы для момента времени  $t=48$ с (разрушенный защитный вал, скорость ветра на высоте  $Y_1$  равна 5м/с)

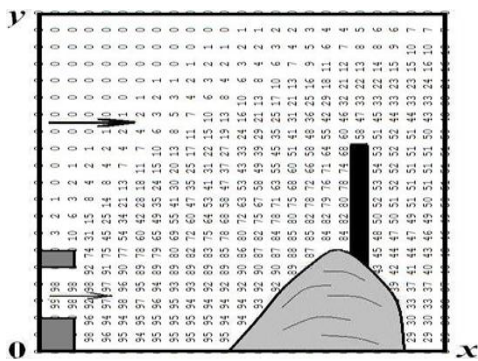


Рис. 8. Зона загрязнення приземного слоя атмосферы для момента времени  $t=48$ с

Как видно из представленных рисунков концентрация опасного вещества ( $Al_2O_3$ ) за валом в первом случае составляет 66% от

концентрации внутри хранилища, во втором случае – 76 %, в третьем – 33 %. Т.е. совершенно очевидно, что вал играет определенную защитную функцию, и эффективность защиты может быть повышена при установке экрана на существующем валу.

*Проверка адекватности модели аэродинамики.*

Для проверки адекватности численной модели, основанной на уравнениях движения Навье-Стокса, был проведен физический эксперимент по измерению скорости потока в аэродинамической трубе. Эксперимент проводился в аэродинамической трубе Т5, которая находится в лаборатории аэродинамики Днепропетровского национального университета имени Олеся Гончара. Вид трубы приведен на рис.9.

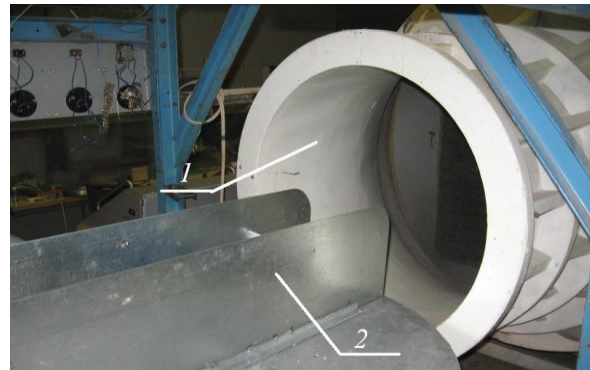


Рис. 9. Вид рабочей части аэродинамической трубы Т5: 1 – аэродинамическая труба; 2 – ограничительные шайбы (лаборатория аэродинамики Днепропетровского национального университета имени Олеся Гончара)

Схема экспериментальной установки приведена на рис.10.

Размещение моделей в рабочей части трубы показано на рис. 11. Рабочая часть аэродинамической трубы Т5 выполнена открытой. Длина рабочей части равна 1115 мм, диаметр выходного сечения сопла  $D = 750$  мм. Скорость потока измерялась с

помощью трубки Пито  $d = 8$  мм, давление 745 мм. рт. ст., температура воздуха 22 °С.

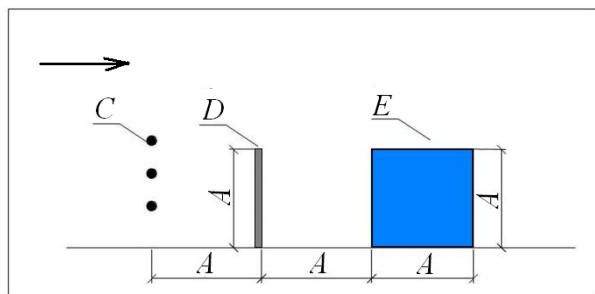


Рис. 10. Схема моделируемой области: D – пластина; E – модель здания; C – точки измерения ( $A=100$ мм)

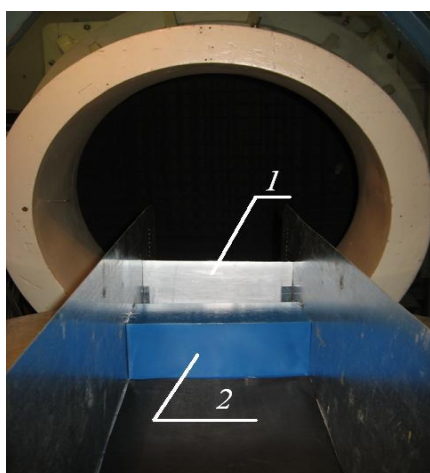


Рис. 11. Размещение моделей в аэродинамической трубе: 1 – пластина; 2 – модель здания

При проведении эксперимента проводилось измерение скорости перед пластиной (см. рис.10). Результаты сравнения измеренных значений скорости и расчета скорости по разработанной численной модели показаны в табл. 1.

Таблица 1

Скорость воздушного потока перед пластиной

Высота от основания	Расчет	Эксперимент
10 мм	11.38 м/с	11.43 – 11.55 м/с
30 мм	11.66 м/с	11.71 – 11.79 м/с
50 мм	12.23 м/с	12.37 – 12.46 м/с
70 мм	13.05 м/с	13.11 – 13.16 м/с
90 мм	14.07 м/с	14.13 – 14.26 м/с

Как видно из представленных данных наблюдается удовлетворительное согласование расчетных и экспериментальных данных. К сожалению, в виду отсутствия оборудования для точечного измерения концентрации примеси, не было возможности для проведения эксперимента по моделированию рассеивания примеси в условиях застройки в аэродинамической трубе.

### Выводы

Рассмотрена эффективная численная модель (diagnostic model) для экспресс расчета уровня загрязнения атмосферы при аварийной ситуации в хранилище ТРТ. Предложенная модель позволяет рассчитать гидродинамику ветрового потока с учетом его взаимодействия с газовым потоком – продуктом горения ракетного топлива. Разработанная модель была использована для локального прогноза загрязнения атмосферного воздуха при чрезвычайной ситуации в хранилище с ТРТ. Проведено сравнение расчетов по разработанной модели с данными эксперимента. Дальнейшее совершенствование модели следует проводить в направлении ее развития для расчета 3-D переноса примеси в атмосфере.

### Библиографический список

1. Антошкина, Л. И. Моделирование аварийных ситуаций на промышленных объектах и безопасность жизнедеятельности [Текст] / Л. И. Антошкина, Н. Н. Беляев, Л. Ф. Долина, Е. Д. Коренюк. – Дніпропетровськ: Нова ідеологія, 2011. – 123 с.
2. Беляев, Н. Н. Моделирование процесса загрязнения атмосферы при горении твердого ракетного топлива [Текст] / Н. Н. Беляев, А. В. Берлов // Вісник Дніпропетр. ун-ту. Серія «Механіка». – Дніпропетровськ, 2013. – Вип. 17, т. 1. – С. 179-184.
3. Беляев, Н. Н. Математическое моделирование прогрева корпуса первой ступени ракеты РС-22 при иницировании

- ном воздействию [Текст] / Н. Н. Беляев, А. В. Берлов, А. И. Губин // Збірник наукових праць НГУ. – Дніпропетровськ: Національний гірничий університет, 2012. – № 38. – С. 192-201.
4. Беляев, Н. Н. Численное моделирования загрязнения воздушной среды на промышленных площадках [Текст] / Н. Н. Беляев, Е. Ю. Гунько, П. Б. Машихина // Вісник Дніпропетровського національного університету залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна. – Вип. 16. – Дніпропетровськ, 2007. – С. 18-20.
  5. Беляев, Н. Н. Математическое моделирование в задачах экологической безопасности и мониторинга чрезвычайных ситуаций: Монография.[Текст] / Н. Н. Беляев, Е. Ю. Гунько, П. Б. Машихина. – Днепропетровск: «Акцент ПП», 2013. – 159 с.
  6. Бруязцкий, Е. В. Теория атмосферной диффузии радиоактивных выбросов [Текст] / Е. В. Бруязцкий. – Киев: Институт гидромеханики НАН Украины, 2000. – 443 с.
  7. Згуровский, М. З. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде [Текст] / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев. – Киев: Наукова думка, 1997. – 368 с.
  8. Методика прогнозування наслідків вилливу (викиду) небезпечних хімічних речовин при аваріях на промислових об'єктах і транспорті [Текст]: – Київ, 2001. – 33 с.
  9. Марчук, Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды [Текст] / Г. И. Марчук. – Москва: Наука, 1982. – 320 с.
  10. Самарский, А. А. Теория разностных схем [Текст] / А. А. Самарский. – Москва: Наука, 1983. – 616 с.
  11. Belyaev, M. Air Pollution Modelling of Technogenic Catastrophes caused by Terrorist Attacks on Rail Transport of Chemical Substances [Text] / M. Belyaev // Simulation and Assessment of Chemical Processes in a Multiphase Environment. NATO Science for Peace and Security Series. – С.: Environmental Security, Springer, 2007. – P. 327-336.
  12. Biliaiev, M. M. Numerical simulation of indoor air pollution and atmosphere pollution for regions having complex topography [Text] / M. M. Biliaiev, M. M. Kharytonov // Conference Abstracts of 31st NATO / SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and it's Application. – Torino, Italy, 2010. – № P1.7.

**Ключові слова:** забруднення атмосфери, чисельне моделювання, надзвичайні ситуації

**Ключевые слова:** загрязнение атмосферы, численное моделирование, чрезвычайные ситуации

**Keywords:** contamination of atmosphere, numeral modeling, emergencies

Поступила в редколлегию 02.01.2014