

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ЗАЩИТЫ ВОЗДУШНОЙ СРЕДЫ ОТ ПАРОВ АММИАКА С ПОМОЩЬЮ ЖИДКИХ ЗАВЕС

Розроблена комп'ютерна модель розрахунку процесу подачі в хмару аміаку води або кислоти за допомогою спринклерних установок. Модель базується на тривимірному рівнянні переносу домішки в атмосфері, яке записане як для аміаку, так і для нейтралізатора. Наведені результати обчислювального експерименту.

Разработана компьютерная модель расчета процесса подачи в облако аммиака воды или кислоты с помощью спринклерных установок. Модель основывается на трехмерном уравнении переноса примеси в атмосфере, записанного как для аммиака, так и для нейтрализатора. Приводятся результаты вычислительного эксперимента.

A computer model to simulate the ammonia cloud concentration reduction with sprinklers which used water or acid was developed. The model is based on 3D equation of admixture transfer written both for ammonia and neutralizer. The results of numerical experiment are presented.

### Введение

Известно, что железнодорожный транспорт перевозит значительные объемы жидких грузов. Аварийные разливы таких грузов, особенно тех, которые являются токсичными веществами, приводят не только к интенсивному загрязнению окружающей среды, но способны вызвать отравление людей, животных с летальным исходом. Одной из особенностей аварийных разливов является образование облака испаряющегося вещества над зоной разлива, которое, в зависимости от метеоусловий, может мигрировать, вызывая загрязнение подстилающей поверхности, атмосферы, водоемов [1; 3].

Одним из методов ликвидации этого облака и снижения его влияния на уровень загрязнения атмосферы является подача в него воды, нейтрализатора. Применение данного метода рассматривается в работах [1; 3; 4; 6]. Однако отсутствует научное «наполнение» данного метода: нет конкретных рекомендаций по количеству спринклерных установок, их интенсивности, режиму работы, схеме размещения. Отмечается только, что спринклерные установки должны располагаться по направлению ветра. В работе [4] дается рекомендация по размещению относительно друг друга спринклерных установок, их расхода, однако данные рекомендации носят частный характер и не могут быть прямо использованы для реальных, разнообразных сценариев. Изменение метеоусловий (направление ветра, инверсия и т. д.) вызывает изменение направления миграции облака, поэтому предварительная схема размещения струйных установок, спустя некоторое время может оказаться

нерациональной. Для выработки эффективной стратегии ликвидации облака над зоной разлива необходима методика расчета взаимодействия токсичного вещества с нейтрализатором, который подается в облако.

**Целью** настоящей работы является разработка математической/компьютерной модели, позволяющей прогнозировать динамику изменения концентрации вредного вещества (ВВ) в облаке с учетом подачи в него воды или другого нейтрализатора, от струйных установок.

### 1. Постановка задачи, математическая модель миграции облака загрязнения в атмосфере

Рассматривается процесс аварийного разлива аммиака, в результате которого образовалось первичное облако. Для уменьшения концентрации аммиака в мигрирующем облаке используется подача в облако воды или кислоты с помощью струйных установок (рис. 1).



Рис. 1. Схема подачи нейтрализатора от струйных агрегатов

Необходимо исследовать эффективность применения каждого вида нейтрализатора для снижения размеров облака.

Процесс миграции загрязнения в атмосфере моделью градиентного типа [5]

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} + \frac{\partial (w - w_s) \varphi}{\partial z} + \sigma \varphi = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu \frac{\partial \varphi}{\partial z} \right) + \sum q_i(t) \delta(r - r_i), \quad (1)$$

где  $\varphi$  – концентрация загрязняющего вещества;  $u, v, w$  – компоненты вектора скорости ветра;  $\mu_x, \mu_y, \mu_z$  – коэффициенты турбулентной диффузии;  $\delta$  – коэффициент, учитывающий химический распад загрязняющего вещества;  $\omega S$  – скорость гравитационного осаждения;  $\delta(r - r_i)$  – дельта-функция Дикара;  $t$  – время.

Процесс испарения ВВ поверхности разлива моделирует с точечными источниками интенсивности  $q_i$ , которая рассчитывается так, г/м<sup>2</sup>/час, [7]:

$$q_i = (5,38 + 4,1V) P_h \sqrt{M},$$

где  $V$  – скорость ветра;  $P_h$  – давление насыщенных паров ВВ при заданной температуре;  $M$  – молекулярный вес ВВ.

Интенсивность испарения  $q_i$  зависит от ряда других параметров (время суток, высота стояния солнца). Однако детализация этих условий во многих практических случаях может быть опущена. В то же время, необходимо учитывать, например, то, что когда вода попадает в зону загрязнения будет изменяться интенсивность испарения, т. е. величина  $q_i$  и это необходимо учитывать для разработки универсальной модели.

Постановка краевых условий для данного уравнения рассмотрена в работе [5]. Отметим, что для моделирования необходимо задать форму, размеры облака перед началом его обработки с помощью струйных агрегатов. Концентрация ВВ в этом облаке (что является самым главным) определяется путем предварительного расчета на основе данных о времени аварии, массе разлитого груза, метеоусловиях и т. д. или задается, исходя из имеющихся данных.

## 2. Математическая модель рассеивания воды, нейтрализатора в атмосфере

Процесс рассеивания капель воды или нейтрализатора от спринклерных установок моделируется, как и выше, уравнением градиентного типа, записанным относительно концентрации  $C$  воды или нейтрализатора:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial uc}{\partial x} + \frac{\partial vc}{\partial y} + \frac{\partial (w - w_s) c}{\partial z} + \delta_u e = \mu \Delta c + \sum Q_i(t) \delta(r - r_i), \quad (2)$$

где  $Q_i(t)$  – интенсивность струйной установки;  $r_i = (x_i, y_i, z_i)$  – координаты размещения струйной установки;  $\delta_u$  – коэффициент, учитывающий испарение капель воды, нейтрализатора.

Отметим, что в модели (2) учитывается возможность перемещение струйной установки и задание различного режима ее работы.

Если происходит взаимодействие ВВ с подаваемой в облако жидкостью, то необходимо уравнения модели (1), (2) дополнить моделью кинетики [6].

## 3. Метод решения

Численное интегрирование уравнений (1) и (2) осуществляется с помощью неявной схемы, предварительно исходное уравнение переноса расщепляется на 5 шагов:

$$\frac{\partial \varphi^1}{\partial t} + \frac{1}{2} \operatorname{div}(\tilde{V} + \varphi^1) + \frac{1}{4} \sigma \varphi^1 = \frac{1}{4} \left( \frac{\partial}{\partial x} (\tilde{\mu}_{1x} \frac{\partial \varphi^1}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\tilde{\mu}_{1y} \frac{\partial \varphi^1}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (\tilde{\mu}_{1z} \frac{\partial \varphi^1}{\partial z}) \right);$$

$$\frac{\partial \varphi^2}{\partial t} + \frac{1}{2} \operatorname{div}(\tilde{V} - \varphi^2) + \frac{1}{4} \sigma \varphi^2 = \frac{1}{4} \operatorname{div}(\mu \cdot \nabla \varphi^2);$$

$$\frac{\partial \varphi^3}{\partial t} + \frac{1}{2} \operatorname{div}(\tilde{V} - \varphi^3) + \frac{1}{4} \sigma \varphi^3 = \frac{1}{4} \operatorname{div}(\mu \cdot \nabla \varphi^3);$$

$$\frac{\partial \varphi^4}{\partial t} + \frac{1}{2} \operatorname{div}(\tilde{V} + \varphi^4) + \frac{1}{4} \sigma \varphi^4 = \frac{1}{4} \operatorname{div}(\mu \cdot \nabla \varphi^4);$$

$$\frac{\partial \varphi^5}{\partial t} = \sum_{i=1}^N q_i(t) \delta(r - r_i);$$

$$\varphi \Big|_{t=t^n} = \varphi(x, y, z, t^n); \quad \varphi \Big|_{t=t^n} = \varphi \Big|_{t=t^{n+1}};$$

$$\varphi(x, y, z, t^{n+1}) = \varphi \Big|_{t=t^{n+1}};$$

$$\tilde{V}^+ = [u^+, v^+, w^+]; \quad \tilde{V}^- = [u^-, v^-, w^-];$$

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

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

$$w^+ = \frac{w + |w|}{2}; w^- = \frac{w - |w|}{2}.$$

Разностные выражения на каждом шаге расщепления имеют вид:

- на первом шаге

$$\begin{aligned} & \frac{j^{n+1} - j^n}{\Delta t} + (L_x^+ + L_y^+ + L_z^+) \times \\ & \times \left( \varphi_{ijk}^1 \xi + \varphi_{ijk}^1 (1 - \xi) \right) + \frac{\sigma}{4} \varphi_{ijk}^{n+1/2} = \\ & = \frac{1}{4} \left[ (M_{xx}^+ + M_{yy}^+ + M_{zz}^+) \varphi_{ijk}^{n+1} \right]; \quad (3) \end{aligned}$$

где  $0 \leq \xi \leq 1$   $\varphi_{ijk}^{n+1/2} = \frac{\varphi_{ijk}^{n+1} + \varphi_{ijk}^n}{2}$ ;

- на втором шаге расщепления

$$\begin{aligned} & \frac{\varphi_{ijk}^{n+1} - \varphi_{ijk}^n}{\Delta t} + (L_x^- + L_y^- + L_z^-) \times \\ & \times \left( \varphi_{ijk}^{n+1} \xi + \varphi_{ijk}^n (1 - \xi) \right) + \frac{\sigma}{4} \varphi_{ijk}^{n+1/2} = \\ & = \frac{1}{4} \left[ (M_{xx}^- + M_{yy}^- + M_{zz}^-) \varphi_{ijk}^{n+1} + (M_{xx}^- + M_{yy}^- + M_{zz}^-) \varphi_{ijk}^n \right] + \\ & + (M_{xx}^- + M_{yy}^- + M_{zz}^-) \varphi_{ijk}^n; \quad (4) \end{aligned}$$

- на третьем шаге расщепления используется разностное уравнение (4);
- четвертый шаг расщепления – применяется разностное уравнение (3);
- пятый шаг расщепления имеет вид

$$\frac{\varphi_{ijk}^{n+1} - \varphi_{ijk}^n}{\Delta t} = \sum_{l=1}^N \frac{q_l(t^{n+1/2})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \delta_l.$$

В этих выражениях использованы следующие обозначения разностных операторов:

$$L_x^+ \varphi_{ijk} = \frac{u_{i+1,jk}^+ \varphi_{ijk} - u_{ijk}^+ \varphi_{i-1,jk}}{2\Delta x};$$

$$L_x^- \varphi_{ijk} = \frac{u_{i+1,jk}^- \varphi_{i+1,jk} - u_{ijk}^- \varphi_{ijk}}{2\Delta x};$$

$$L_y^+ \varphi_{ijk} = \frac{v_{i,j+1,k}^+ \varphi_{ijk} - u_{ijk}^+ \varphi_{i,j-1,k}}{2\Delta y};$$

$$L_y^- \varphi_{ijk} = \frac{v_{i,j+1,k}^- \varphi_{i,j+1,k} - v_{ijk}^- \varphi_{ijk}}{2\Delta y};$$

$$L_z^+ \varphi_{ijk} = \frac{w_{i,j,k+1}^+ \varphi_{ijk} - w_{ijk}^+ \varphi_{i,j,k-1}}{2\Delta z};$$

$$L_z^- \varphi_{ijk} = \frac{w_{i,j,k+1}^- \varphi_{i,j,k+1} - w_{ijk}^- \varphi_{ijk}}{2\Delta z};$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) & \approx \tilde{\mu}_x \frac{\varphi_{i+1,j}^{n+1} - \varphi_{ij}^{n+1}}{\Delta x^2} - \tilde{\mu}_x \frac{\varphi_{ij}^{n+1} - \varphi_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} = \\ & = M_{xx}^- \varphi^{n+1} + M_{xx}^+ \varphi^{n+1}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) & \approx \tilde{\mu}_y \frac{\varphi_{i,j+1}^{n+1} - \varphi_{ij}^{n+1}}{\Delta y^2} - \tilde{\mu}_y \frac{\varphi_{ij}^{n+1} - \varphi_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} = \\ & = M_{yy}^- \varphi^{n+1} + M_{yy}^+ \varphi^{n+1}. \end{aligned}$$

При расчете используется «возмущенный»

коэффициент диффузии  $\tilde{\mu}_{1x} = \frac{\mu}{1 + \frac{u^+ \Delta x}{\mu}}$  и т. д.

На каждом шаге расщепления расчет неизвестной величины осуществляется по явной формуле бегущего счета.

### Практическая реализация

На базе уравнений (1), (2) и на основе рассмотренных разностей схемы разработан пакет программ «СТРУЯ 3». Программы реализованы на алгоритмическом языке FORTRAN-IV. Для выполнения расчетов следует ввести следующую информацию:

- размеры расчетной области;
- размер и форму облака ВВ, образовавшегося на месте аварийного разлива (необходимо отметить, что разработанная программа позволяет задавать любую форму облака ВВ: в виде «гриба», сферы, эллипсоида и т. д., а также реализована возможность задавать два, три облака и т. д.);
- место аварийного разлива;
- концентрацию ВВ в облаке;
- направление, величина скорости ветра;
- количество и место размещения струйных установок, их расход;

- тип нейтрализатора.

Ввиду того, что в разностном алгоритме источник выброса воды или нейтрализатора «размазывается» по объему разностной ячейки, то в модели воспроизводится интегральный эффект работы спринклерных установок, которые размещены в данной ячейке.

Отметим, что для отработки стратегии проведения защитных мероприятий с использованием завес, можно воспользоваться двумерной моделью, представляющей осредненные по высоте переноса примеси  $N$  уравнения (1) и (2). Вид этих уравнений совпадает с уравнениями (1) и (2), но в них отсутствуют слагаемые по  $z$  [5]. Численное решение этих двухмерных уравнений осуществляется на основе рассмотренной выше разностной схемы, построенной для двумерного случая. На базе двумерной модели создан пакет программ «СТРУЯ 2».

Как отмечалось выше, для моделирования процесса взаимодействия аммиака с водой (или с другими веществом) необходимо, в модели наряду с уравнениями (1) и (2) дать количественную характеристику такого процесса взаимодействия. В данной работе ограничимся рассмотрением процесса подачи 20 % раствора кислоты  $H_3PO_4$  и воды в облако аммиака. Количество аммиака, связавшегося в каждой точке пространства с водой, определяется его концентрацией в этой точке и соответствующим ей давлением пара  $NH_3$  [7]. В связи с этим, в разработанной модели, на первом этапе, рассчитывается концентрация аммиака в конкретной точке пространства, определяется давление насыщенного пара и раствора аммиака и определяется какова будет концентрация водного раствора аммиака, соответствующая данному давлению. Далее, на втором этапе, зная концентрацию воды в выбранной точке и концентрацию водного раствора, рассчитывается, какое количество аммиака и воды прореагирует в этой точке. Расчет рассмотренного этапа взаимодействия «аммиак–вода» осуществляется в разработанной подпрограмме «REACT», которая входит в созданный авторами пакет прикладных программ. Процесс взаимодействия кислоты и аммиака [6] реализован в подпрограмме «REACT 1».

### Пример расчета

Ниже представлены результаты компьютерного моделирования процесса подачи кислоты и воды в облако аммиака, образовавшегося на месте аварии.

Результаты решения относятся к задаче с такими исходными данными: размеры облака  $NH_3$  –  $80 \times 80$  м; высота приземного слоя –  $H = 100$  м; концентрация  $NH_3$  в облаке –  $5-10$  г/м<sup>3</sup>; подача воды (кислоты, 20 %-й раствор)  $Q = 100$  л/с.

На рис. 2 показаны изолиния концентрации  $NH_3$  в атмосфере при работе одной спринклерной установки и подачи кислоты в зону загрязнения. Скорость ветра  $V = 0,2$  м/с; азимут –  $68^\circ$  (вектор воздушного потока на рисунках условно показан стрелкой). Поле загрязнения атмосферы приведено здесь и далее для момента времени  $t = 540$  с после начала ( $t = 0$ ) работы спринклерной установки (считалось что в момент времени  $t = 0$  появился направленный поток воздуха, который начал сносить облако  $NH_3$ ).

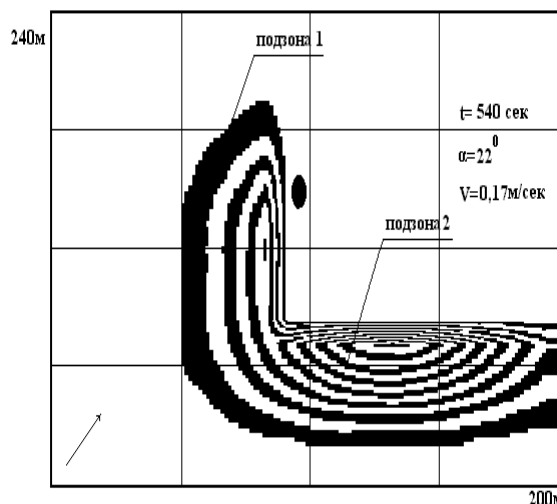


Рис. 2. Изолинии концентрации аммиака после начала работы спринклерной установки,  $t = 540$  (подача раствора кислоты)

На рис. 3 видно, что при работе одной спринклерной установки, зона загрязнения атмосферы разбивается на две подзоны:

– первая подзона располагается перед спринклерной установкой и имеет форму «полки»;

– вторая подзона – это шлейф  $NH_3$  который не попал в зону влияния спринклерной установки и сносится ветром, вызывая загрязнение атмосферы и различных объектов, расположенных на пути миграции облака. Обратим теперь внимание на рис. 3, где показана зона загрязнения атмосферы при работе двух спринклерных установок (подача кислоты). Отчетливо видно, что вторая подзона в этом случае отсутствует. Повышение эффективности защиты атмосферы в этом случае, по сравнению с предыдущим вариантом очевидно.

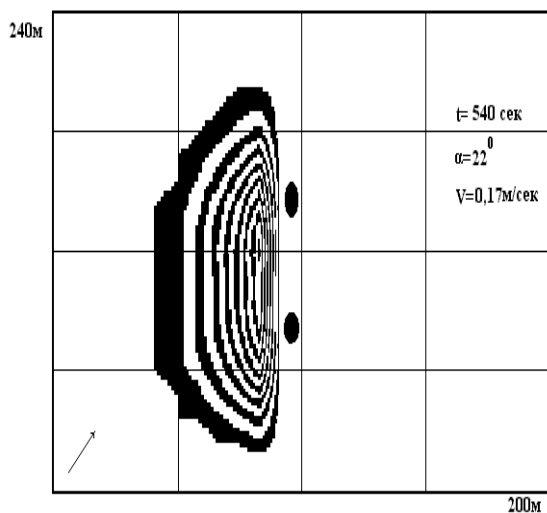


Рис. 3. Изолинии концентрации аммиака после начала работы спринклерной установки,  $t = 540$  (подача раствора кислоты)

Теперь рассмотрим случай когда в облако  $\text{NH}_3$  подается вода. Как известно, подача воды рекомендуется многими авторами [1; 4]. При этом авторы не приводят количественную оценку эффективности такого метода защиты атмосферы от загрязнения.

На рис. 4 показана зона загрязнения атмосферы при работе одной спринклерной установки, подающей воду. Как видно из рис. 4 зона загрязнения практически не «чувствует» влияния подачи в нее воды: облако  $\text{NH}_3$  свободно мигрирует через спринклерную установку, причем отсутствует явно видимая, как на рис. 2, зона нейтрализации аммиака. Таким образом, подача воды в облако аммиака, малоэффективный способ защиты атмосферы, особенно в случае формирования зоны загрязнения под влиянием ветрового потока.

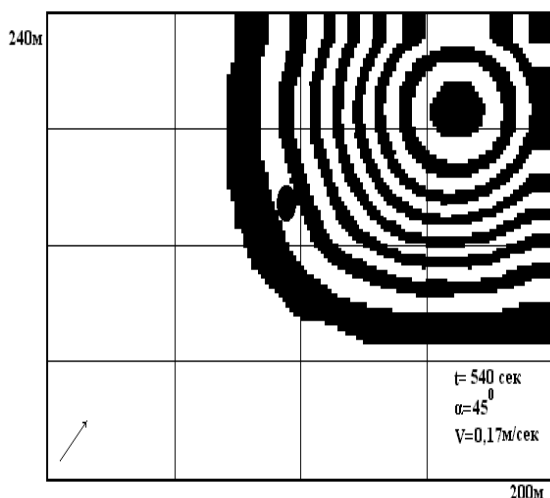


Рис. 4. Изолинии концентрации аммиака после начала работы спринклерной установки,  $t = 540$  (подача воды)

## Выводы

Разработана новая методика расчета процесса взаимодействия токсичного вещества в первичном облаке с нейтрализатором, который подается в облако. Методика позволяет выполнить расчет с учетом скорости миграции облака, его формы, количества струйных агрегатов и их режима работы. Реализация методики требует около 5...10 с при расчете на ПЭВМ.

В заключение отметим, что разработка данного научного направления в дальнейшем должна быть нацелена на исследование влияние оптимального расположения спринклерных установок для эффективной защиты от загрязнения аммиаком атмосферы и подстилающей поверхности.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий. Учебное пособие в 5-ти книгах / Под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаева. – М.: Изд-во АСВ, 2000. – 354 с.
2. Беляев Н. Н., Коренюк Е. Д., Хрущ В. К. Прогнозирование качества воздушной среды методом вычислительного эксперимента. – Д.: Наука и образование, 2000. – 208 с.
3. Гринин А. С., Новиков В. Н. Экологическая безопасность. Защита территории и населения при чрезвычайных ситуациях. – М.: ФАИР-ПРЕСС, 2000. – 336 с.
4. Иванов Ю. А., Стижевский И. И. Хранение и транспортировка жидкого аммиака. – М.: Химия, 1991. – 80 с.
5. Згуровский М. З., Скопецкий В. В., Хрущ В. К., Беляев Н. Н. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде. – К.: Наукова думка, 1997. – 368 с.
6. Плахотник В. Н., Ярышкина Л. А., Сираков В. И. и др. Природоохранная деятельность на железнодорожном транспорте Украины: проблемы и решения. – К.: Транспорт Украины, 2001. – 244 с.
7. Мацак В. Г., Хоцянов Л. К. Гигиеническое значение скорости испарения и давления пара токсических веществ, применяемых в производстве. – М.: Медгиз, 1959. – 231 с.

Поступила в редколлегию 28.05.03.