

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЙВАНИЯ ТОКСИЧНОГО ГАЗА В АТМОСФЕРЕ С УЧЕТОМ РЕЛЬЕФА МЕСТНОСТИ

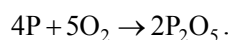
Розроблено тривимірну чисельну модель розрахунку процесу поширення токсичної речовини при горінні фосфору. Модель базується на чисельному інтегруванні рівняння конвективно-дифузійного переносу домішки. Наводяться результати обчислювального експерименту.

Разработана трехмерная численная модель распространения оксида фосфора в атмосфере при горении фосфора. Модель основывается на численном интегрировании уравнения конвективно-диффузионного переноса примеси, приводятся результаты вычислительного эксперимента.

The 3D numerical model to simulate the toxic gas dispersion during phosphorus combustion is developed. The model is based on the K-gradient transport model. The results of numerical experiment are presented.

Введение. Нормативная методика, используемая для прогноза последствий при авариях с опасными веществами, дает возможность только оценить размеры (площадь) зоны загрязнения и только до высоты 10 м от уровня земли и не позволяет рассчитать концентрацию токсичного газа на различном расстоянии от места аварии [4]. Особую актуальность приобретает вопрос разработки эффективных методов прогноза уровня загрязнения атмосферы при авариях, связанных с эмиссией токсичных веществ с целью оперативного получения научно обоснованной информации об уровне загрязнения воздушной среды, подстилающей поверхности для организации эффективной защиты населения от химического поражения [1]. Важно отметить, что используемые на практике методики не позволяют также учесть рельеф местности. Целью настоящей работы является создание регуляторной математической модели, ориентированной на использование экологами в повседневной практике для экспресс-прогноза загрязнения атмосферы при миграции токсичного газа и позволяющей выполнить прогноз с учетом рельефа.

Постановка задачи. Построение модели выполним для задачи о загрязнении атмосферы при горении фосфора. Будем считать, что произошла разгерметизация цистерны с фосфором, в результате которой имело место испарение воды, находящейся в цистерне. Это привело к тому, что фосфор вступил в контакт с воздушной средой и начался процесс его горения:



В результате горения от цистерны начинает распространяться шлейф оксида фосфора, представляющего угрозу для окружающей среды.

Для моделирования процесса переноса оксида фосфора в атмосфере будем использовать трехмерное уравнение миграции примеси [2, 3]

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

где C – концентрация загрязняющего вещества (P_2O_5), попадающего в атмосферу при горении фосфора; u, v, w – компоненты вектора скорости воздушной среды; w_s – скорость оседания примеси; $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ – коэффициент турбулентной диффузии; Q – интенсивность выброса токсичного вещества; $\delta(r - r_i)$ – дельта-функция Дирака; $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ – координаты источника выброса (цистерны).

В данной модели имеется возможность задавать несколько источников выделения оксида фосфора, т.е. моделировать поступление оксида фосфора в атмосферу при горении от нескольких цистерн.

В разработанной математической 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 ; $k_1 = 0.2$; $n = 0,16$; $m \approx 1$.

Метод решения. Рассмотрим построение попеременно-треугольной разностной схемы для численного интегрирования уравнения переноса. Заменяем производную по времени раздѐленной разностью «назад»:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_{ijk}^{n+1} - C_{ijk}^n}{\Delta t}.$$

Конвективные производные представим в виде:

$$\frac{\partial u C}{\partial x} = \frac{\partial u^+ C}{\partial x} + \frac{\partial u^- C}{\partial x},$$

$$\frac{\partial v C}{\partial y} = \frac{\partial v^+ C}{\partial y} + \frac{\partial v^- C}{\partial y},$$

$$\frac{\partial w C}{\partial z} = \frac{\partial w^+ C}{\partial z} + \frac{\partial w^- C}{\partial z},$$

где $u^+ = \frac{u+|u|}{2}$; $u^- = \frac{u-|u|}{2}$, $v^+ = \frac{v+|v|}{2}$; $v^- = \frac{v-|v|}{2}$,
 $w^+ = \frac{w+|w|}{2}$; $w^- = \frac{w-|w|}{2}$.

Для аппроксимации конвективных производных используем выражения:

$$\frac{\partial u^+ C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j,k}^+ C_{ijk}^{n+1} - u_{ijk}^+ C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^+ C^{n+1};$$

$$\frac{\partial u^- C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j,k}^- C_{i+1,j,k}^{n+1} - u_{ijk}^- C_{ijk}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^- C^{n+1};$$

$$\frac{\partial v^+ C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1,k}^+ C_{ijk}^{n+1} - v_{ijk}^+ C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^+ C^{n+1};$$

$$\frac{\partial v^- C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1,k}^- C_{i,j+1,k}^{n+1} - v_{ijk}^- C_{ijk}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^- C^{n+1};$$

$$\frac{\partial w^+ C}{\partial z} \approx \frac{w_{i,j,k+1}^+ C_{ijk}^{n+1} - w_{ijk}^+ C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z} = L_z^+ C^{n+1};$$

$$\frac{\partial w^- C}{\partial z} \approx \frac{w_{i,j,k+1}^- C_{i,j,k+1}^{n+1} - w_{ijk}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z} = L_z^- C^{n+1}.$$

Компоненты скорости потока будем задавать на гранях разностной ячейки (контрольно-го объема). Вторые производные аппроксимируем следующими выражениями:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \approx \tilde{\mu}_x \frac{C_{i+1,j,k}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta x^2} - \tilde{\mu}_x \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \approx \tilde{\mu}_y \frac{C_{i,j+1,k}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta y^2} - \tilde{\mu}_y \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta y^2} = M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \approx \tilde{\mu}_z \frac{C_{i,j,k+1}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta z^2} - \tilde{\mu}_z \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z^2} = M_{zz}^- C^{n+1} + M_{zz}^+ C^{n+1}.$$

В данных выражениях L_x^+ , L_x^- , L_y^+ , L_y^- , L_z^+ , L_z^- , M_{xx}^+ , M_{xx}^- и т.д. – обозначения разностных операторов. С учетом этих обозначений разностный аналог трехмерного уравнения переноса примеси будет иметь вид:

$$\frac{C_{ijk}^{n+1} - C_{ijk}^n}{\Delta t} + L_x^+ C^{n+1} + L_x^- C^{n+1} + L_y^+ C^{n+1} + L_y^- C^{n+1} + L_z^+ C^{n+1} + L_z^- C^{n+1} + \sigma C_{ijk}^{n+1} = (M_{xx}^+ C^{n+1} + M_{xx}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1} + M_{yy}^- C^{n+1} + M_{zz}^+ C^{n+1} + M_{zz}^- C^{n+1}).$$

Расщепим решение данного разностного уравнения при интегрировании на временном интервале dt так:

на первом шаге $k = \frac{1}{4}$:

$$\frac{C_{ij}^{n+k} - C_{ij}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k + L_z^+ C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ijk}^k = \frac{1}{4} (M_{xx}^+ C^k + M_{xx}^- C^k + M_{yy}^+ C^k + M_{yy}^- C^k + M_{zz}^+ C^k + M_{zz}^- C^k); \quad (3)$$

на втором шаге $k = n + \frac{1}{2}$; $c = n + \frac{1}{4}$:

$$\frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- C^k + L_y^- C^k + L_z^- C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ijk}^k = \frac{1}{4} (M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^k + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^k + M_{zz}^- C^k + M_{zz}^+ C^k); \quad (4)$$

на третьем шаге $k = n + \frac{3}{4}$; $c = n + \frac{1}{2}$ используется формула (4);

на четвертом шаге $k = n + 1$; $c = n + \frac{3}{4}$ используется формула (3).

В данные разностные соотношения входит «возмущенный» коэффициент диффузии $\tilde{\mu}$:

$$\mu_{1x} = \frac{\mu_x}{1 + \frac{u^+ \Delta x}{\mu}}, \quad \mu_{2x} = \frac{\mu_x}{1 - \frac{u^- \Delta x}{\mu}}$$

и т.д.

На пятом шаге расщепления учитывается влияние источников на изменение концентрации примеси, и расчетная зависимость на этом шаге имеет вид:

$$\frac{C_{i,j,k}^{5n+1} - C_{i,j,k}^{5n}}{\Delta t} = \sum_{l=1}^N \frac{q_l(t^{n+1/2})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \delta_l.$$

В дискретном виде дельта-функция Дирака «размазывается» по объему разностной ячейки с учётом сбережения суммарного количества выбрасываемого загрязнения. Функции δ_l тождественно равняются нулю, кроме ячеек, где расположен l -й источник загрязнения. На каждом шаге расщепления расчет неизвестной концентрации оксида фосфора осуществляется по явной формуле бегущего счета.

Для организации расчета переноса токсичного газа с учетом рельефа местности, т.е. в области сложной геометрической формы, используется метод маркирования, позволяющий выделить разностные ячейки, которые относятся к области течения и к твердым границам (рельеф). Применение метода маркирования дает возможность построить алгоритм расчета, при котором можно задавать любую форму рельефа – насыпи, впадины и т.п.

Практическая реализация. Разработанная численная модель была применена для решения задачи о загрязнении атмосферы при поступлении оксида фосфора от железнодорожной цистерны, которая упала с насыпи (рис.1). Численное моделирование выполнено при следующих параметрах: размеры расчетной области $120 \times 120 \times 60$ м, коэффициент диффузии в направлении осей $x, y - 2 \text{ м}^2/\text{с}$, вертикальный коэффициент диффузии изменяется по приведенной выше модели; скорость ветра – $2,5 \text{ м/с}$ (на высоте 10 м), профиль ветра – неравномерный; интенсивность выделения оксида фосфора в атмосферу – 500 г/с .

На рис. 2...6 показана зона загрязнения атмосферы для моментов времени, когда происходит процесс горения фосфора. Как видно из данных рисунков, над местом горения образуется шлейф, который поднимается вверх по насыпи. Из рис.6 хорошо видно, что происходит загрязнение воздушной среды на подветренной стороне насыпи. Таким образом, здесь формируется зона, где возможно токсичное пораже-

ние людей. На последующих рисунках показана динамика загрязнения атмосферы, когда процесс горения прекратился.

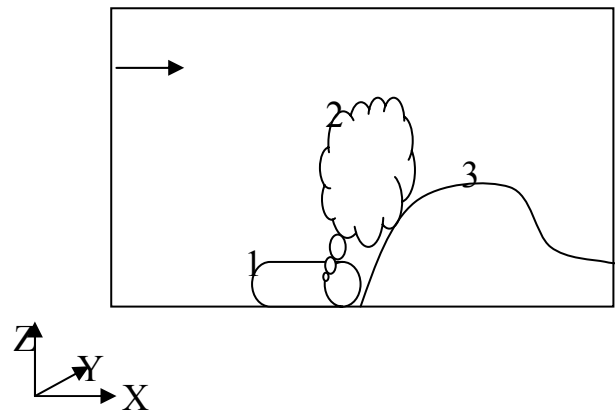


Рис. 1 – Выход оксида фосфора из цистерны: 1 – цистерна; 2 – шлейф; 3 – насыпь

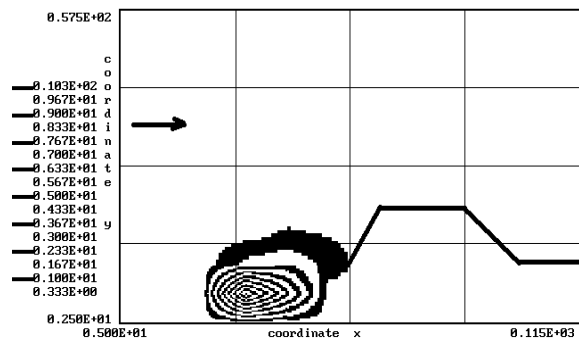


Рис. 2. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора $t = 10 \text{ с}$ (сечение $y = 60 \text{ м}$)

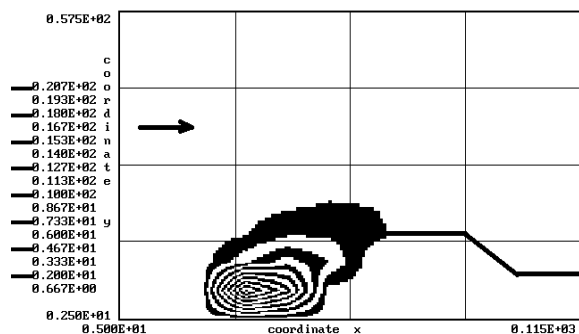


Рис. 3. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора $t = 20 \text{ с}$ (сечение $y = 60 \text{ м}$)

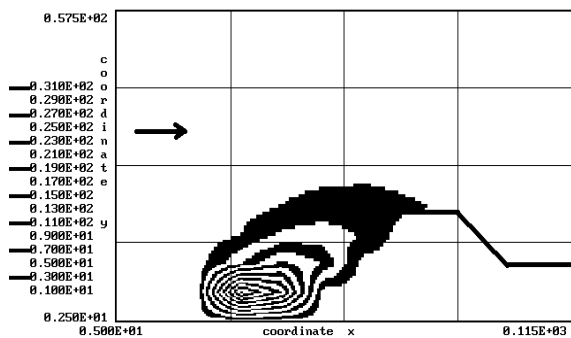


Рис. 4. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора $t = 30$ с (сечение $y = 60$ м)

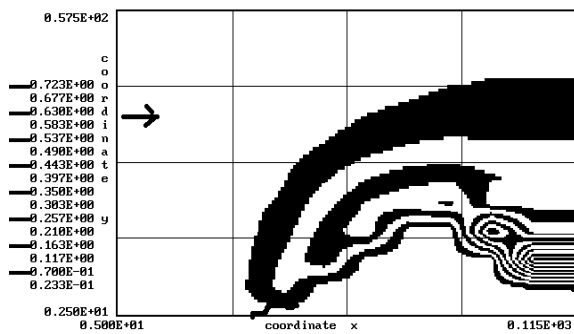


Рис. 8. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора, $t = 30$ с после прекращения горения (сечение $y = 60$ м)

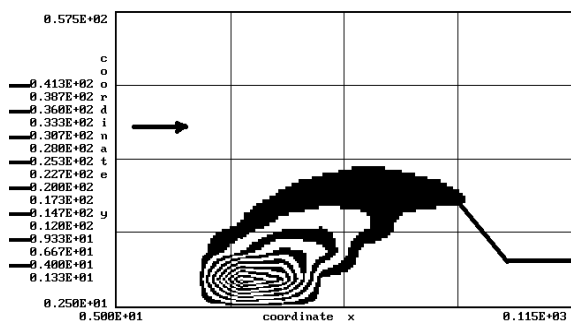


Рис. 5. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора $t = 45$ с (сечение $y = 60$ м)

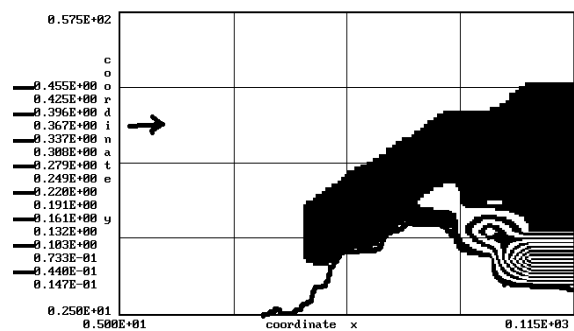


Рис. 9. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора, $t = 45$ с после прекращения горения (сечение $y = 60$ м)

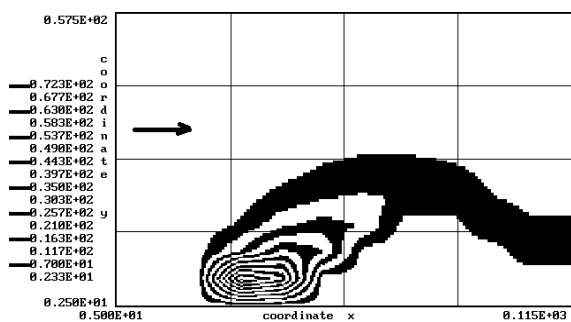


Рис. 6. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора $t = 70$ с (сечение $y = 60$ м)

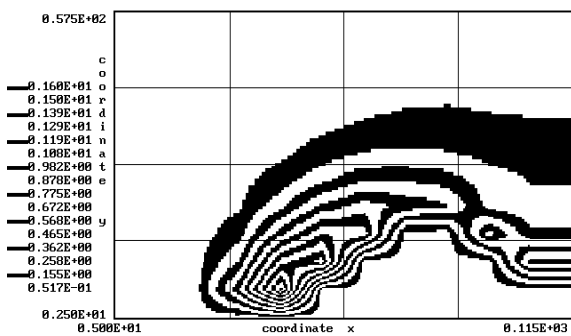


Рис. 7. Зона загрязнения атмосферы при выбросе оксида фосфора, $t = 10$ с после прекращения горения (сечение $y = 60$ м)

На практике представляет интерес определение зоны поражения возле горящих цистерн. Для рассматриваемого случая значение концентрации оксида фосфора на различном расстоянии от горячей цистерны представлены в табл. 1 и 2. Точка 0.0 соответствует положению горячей цистерны, координаты со знаком «-» соответствуют подветренному расстоянию от цистерны, а координата «+» соответствует расстоянию в направлении ветра. Кроме этого, в данных таблицах представлены значения концентрации токсичного вещества на вершине насыпи (позиция 3 на рис. 1). Знание концентрации в этом месте необходимо, поскольку здесь может располагаться оборудование аварийно-спасательных бригад. Знание концентрации оксида фосфора возле горящих цистерн дает возможность оценить безопасное расположение спасателей.

Таблица 1

Величина концентрации оксида фосфора на различном расстоянии от цистерны (идет процесс горения), г/м³

Расстояние, м	10 с	20 с	60 с
-20	0.0012	0.0025	0.0032
-10	0.074	0.104	0.113
0.0	3.644	4.063	4.153
10	2.157	3.241	3.615
холм	0.169	0.172	0.553

Таблица 2

Величина концентрации оксида фосфора на различном расстоянии от цистерны (время прекращения процесса горения), г/м³

Расстояние, м	10 с	30 с	65 с
-20	0.0021	0.0002	0.0
-10	0.042	0.0020	0.0
0.0	0.563	0.017	0.0001
10	1.552	0.094	0.0006
холм	0.541	0.192	0.0038

Если учесть, что ПДК для данного токсиканта составляет 0.05 мг/м³, то очевидно, что в рассматриваемой зоне будет крайне высокая концентрация оксида фосфора.

Выводы. В работе построена трехмерная численная модель расчета загрязнения воздушной среды токсичным газом. Модель основывается на численном интегрировании уравнения переноса примеси в атмосфере. Разработанная модель дает возможность расчета рассеивания газа с учетом рельефа местности. Расчет по предложенной модели требует около 5 с на получение прогнозной информации об уровне загрязнения атмосферы. Для практической реализации модели необходима стандартная метеорологическая информация. Дальнейшее совершенствование модели необходимо проводить в направлении ее адаптации к моделированию процесса нейтрализации оксида фосфора с учетом фильтрации продукта реакции в грунт.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий: Уч. пос. в 5-ти кн. / Под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаева / М.: Изд-во АСВ, 2001. – 200 с.
2. Згуровский М. З. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев. – К.: Наук. думка, 1997. – 368 с.
3. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука, 1982. – 320 с.
4. Методика прогнозування наслідків впливу (викиду) небезпечних хімічних речовин при аваріях на промислових об'єктах і транспорті. – К., 2001. – 33 с.

Поступила в редколлегию 14.02.2008.