

## РАСЧЕТ ОБРАЗОВАНИЯ ВЗРЫВООПАСНОЙ КОНЦЕНТРАЦИИ В ПОМЕЩЕНИИ ПРИ АВАРИЙНОЙ УТЕЧКЕ ГАЗА

Розроблено тривимірну чисельну модель розрахунку процесу розповсюдження забруднюючих речовин у виробничому приміщенні при аварійному викиді токсичного газу. Модель базується на чисельному інтегруванні рівняння конвективно-дифузійного переносу домішки та моделі течії нестислої рідини. Модель дозволяє розрахувати час утворення вибухонебезпечної концентрації у приміщенні при аварійному викиді газу. Наводяться результати обчислювального експерименту по прогнозу рівня забруднення повітряного середовища у виробничому приміщенні.

Разработана трехмерная численная модель расчета процесса распространения загрязняющих веществ в производственном помещении при аварийном выбросе токсичного газа. Модель основывается на численном интегрировании уравнения конвективно-диффузионного переноса примеси и на модели невязкой несжимаемой жидкости. Модель позволяет рассчитывать время образования взрывоопасной концентрации в помещении при аварийной утечке газа. Приводятся результаты вычислительного эксперимента по прогнозу уровня загазованности воздушной среды производственного помещения.

The 3D numerical model to simulate the toxic gas dispersion in industrial room after accident ejections was developed. The model is based on the K-gradient transport model and equation of potential flow. The model permits to calculate the time of appearance of concentration when the blast can take place. The results of numerical experiment of air pollution in industrial room are presented.

### Введение

Одной из важных задач в области экологической безопасности является повышение качества прогнозной информации при распространении токсичных веществ в производственных помещениях после аварии с целью оценки масштабов возможных последствий аварий, выявления в производственном помещении зон взрывоопасных концентраций. Используемые на практике инженерные методики прогноза уровня загрязнения воздушной среды в производственных помещениях основываются, как правило, на аналитическом решении одномерного уравнения переноса примеси либо на применении балансового соотношения «приток – отток – накопление массы» для помещения (нульмерная модель).

На практике расчет динамики изменения уровня загазованности помещения при работе аварийной вентиляции осуществляют на базе зависимости [6]

$$C = C_{\text{пр}} + \frac{\bar{G}}{K_p} + \left[ \left( C_1 - C_{\text{пр}} - \frac{\bar{G}}{K_p} \right) \right] \cdot \exp(-tK_p), \quad (1)$$

где  $C_{\text{пр}}$  – концентрация загрязнителя в приточном воздухе, мг/м<sup>3</sup>;

$K_p$  – кратность воздухообмена;

$C$  – концентрация загрязнителя, мг/м<sup>3</sup>;

$t$  – время, ч;

$\bar{G} = \frac{G}{V}$  – удельное, часовое выделение загрязнителя;

$V$  – объем помещения, м<sup>3</sup>;

$G$  – интенсивность выделения загрязнителя в воздушную среду помещения, мг/ч;

$C_1$  – начальная концентрация загрязнителя, мг/м<sup>3</sup>.

Данная зависимость представляет собой аналитическое решение уравнения материального баланса загрязнителя в помещении (нульмерная модель) [6]

$$V \frac{dC}{dt} = LC_{\text{пр}} + G - LC,$$

где  $L$  – воздухообмен, м<sup>3</sup>/ч.

Относительно приведенной выше расчетной зависимости, следует отметить следующее:

- модель определяет концентрацию загрязнителя  $C$  (токсичного газа) не в помещении, где произошла авария, а в удаляемом воздухе. Это не дает возможности проектировщику оценить степень загазованности воздуха в различных местах помещения, особенно в плохо проветриваемых местах (за технологическим оборудованием) и тем самым дезориентирует проектировщика относительно возможности возникновения вторичной аварии;

- модель не позволяет учесть влияние положения приточных и вытяжных отверстий на организацию движения воздушного потока внутри помещения и, следовательно, на динамику формирования зоны загрязнения в помещении, где произошла авария;

- модель не дает возможности учесть влияние технологического оборудования на процесс рассеивания токсичного газа в помещении.

Отметим, что указанная расчетная зависимость используется на практике как для прогноза уровня загазованности производственных помещений при аварии (при отсутствии работы аварийной вентиляции), так и при работе аварийной вентиляции.

На практике одним из важнейших вопросов является, в частности, расчет времени, когда будет достигнута взрывоопасная концентрация в помещении при аварийной утечке. Для решения этой задачи обычно используются эмпирические зависимости и расчетные формулы, основанные на балансовых соотношениях. Например, время образования взрывоопасной концентрации в помещении при неработающей вентиляции определяется по зависимости [3]

$$\tau = \frac{0.5C_n V}{g_0},$$

где  $g_0$  – величина утечки газа;  $V$  – объем помещения;  $C_n$  – нижний концентрационный предел воспламенения.

Очевидно, что данная зависимость представляет собой балансовое соотношение и дает оценку времени, когда величина нижнего предела взрывоопасной концентрации будет достигнута в половине объема помещения. Данная зависимость не позволяет выявить зоны в помещении, где может быть достигнута взрывоопасная концентрация (например, в застойных зонах за технологическим оборудованием). При наличии вентиляции время образования взрывоопасной концентрации в помещении рассчитывается по зависимости [3]:

$$\tau = \frac{3600}{n} \ln \left( \frac{g_0}{g_0 - \frac{C_n n V}{72 \cdot 10^4}} \right),$$

где  $n$  – кратность воздухообмена.

Данная зависимость также дает лишь приближенную оценку для определения такой важной, с точки зрения экологической безопасности, величины, как  $\tau$ .

В этой связи особую актуальность приобретает разработка теоретических методов прогноза распространения токсичных веществ в производственных помещениях химически опасных объектов, позволяющих учесть те существенные факторы, которые влияют на данный процесс и многочисленные сценарии аварийных выбросов (утечки, разливы и т.д.). Применение таких методов на практике позволит существенно повысить качество прогнозов и может служить научным обоснованием для принятия инженерных решений, направленных на минимизацию экологического ущерба и последствий аварий в производственных помещениях химически опасных объектов.

**1. Математическая модель.** Для моделирования процесса миграции загрязняющего вещества в производственном помещении будем использовать трехмерное уравнение переноса примеси [3, 4]

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial (w-w_s)C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} (\mu_x \frac{\partial C}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (\mu_y \frac{\partial C}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (\mu_z \frac{\partial C}{\partial z}) + \sum Q_i(t) \delta(r-r_i), \quad (2)$$

где  $C$  – концентрация загрязняющего вещества в помещении;  $u, v, w$  – 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 в помещении;  $\delta(r-r_i)$  – дельта-функция Дирака;  $r_i = (x_i, y_i, z_i)$  – координаты источника выброса.

Для расчета поля скорости воздушного потока в помещении, индуцированного работой вентиляции, делается допущение, что движение воздушной среды в помещении – потенциальное. В этом случае 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

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = 0. \quad (3)$$

Постановка краевых условий для уравнения (1) рассмотрена в работе [3]. Для уравнения (3) 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 в помещение)  $\frac{\partial P}{\partial n} = V_n$ , где  $V_n$  – известное значение скорости;
- на выходной границе  $P = P^*(x = const, y) + const$ . (условия Дирихле).

**2. Метод решения.** Численное интегрирование уравнения (2) осуществляется с использованием неявной поперечно-треугольной разностной схемы расщепления [3]. Для численного интегрирования уравнения (3) 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  $\tau$  – фиктивное время.

Численное интегрирование данного уравнения проводится с использованием неявной разностной схемы условной аппроксимации. В разработанном пакете программ осуществляется также численное интегрирование уравнения (3) с помощью метода Либмана. Расчет поля потенциала проводится одновременно с использованием указанных методов с целью контроля результатов расчета.

**3. Практическая реализация.** Как уже отмечалось, одним из опасных последствий аварий может быть вторичная авария – взрыв, пожар в помещении, если в нем образовались зоны, где концентрации паров находится в определенных пределах и есть источник воспламенения [2]. Рассмотрим применение разработанной трехмерной численной модели для решения этой задачи. Параметры задачи: размеры помещения 10 м × 10 м × 10 м; воздухообмен – 2.77 м<sup>3</sup>/с; коэффициент диффузии – 0.1 м<sup>2</sup>/с; интенсивность выброса аммиака –  $G=97$  г/с, выброс осуществляется на временном интервале [0...5 с]; координаты источника выброса:  $x = 4.5$  м;  $y = 4.5$  м;  $z = 2.5$  м; шаг по времени  $dt = 0.005$  с; подача воздуха и отвод его из помещения осуществляется через одно приточное и одно вытяжное отверстие, расположенное на противоположных стенках; концентрация аммиака в приточном воздухе  $C_{пр} = 0$ . Расчет выполняется на «грубой» (реальной) разностной сетке 12×12×12 узлов.

Результаты решения данной задачи представлены в табл. 1. Здесь же показаны результаты расчета величины концентрации аммиака в помещении, полученные по аналитической модели (нульмерная модель) (1).

Таблица 1

**Динамика загрязнения воздушной среды в помещении при аварийной утечке токсичного газа**

$t, c$	$C_{\max}, г/м^3$ (расчет по разработанной трехмерной численной модели)	$C, г/м^3$ (расчет по аналитической модели)
2	98.97	0.19
3	107.30	0.29
4	112.90	0.38
5	115.57	0.48

Как видно из анализа данных, представленных в табл. 1, динамика загрязнения воздушной среды в помещении при аварийной утечке токсичного газа характеризуется ростом концентрации аммиака на рассматриваемом временном интервале. Обращает на себя внимание существенное различие значения concentra-

ции, определенной на базе аналитической модели и с помощью трехмерной численной модели. Этот факт объясняется тем, что в применяемой на практике аналитической модели, расчет выполняется не по реальной мощности источника выделения токсичного газа  $G$ , а по усредненной по объему помещения величине выброса. Таким образом, применение аналитической модели дает заниженное прогнозное значение концентрации токсичного газа в помещении при аварии. Отметим, например, что взрывоопасная концентрация для аммиака находится в диапазоне 107...200 г/м<sup>3</sup>, таким образом, этот предел уже будет достигнут через 3 с после аварии. Как видно, аналитическая модель не дает этого результата, что может дезориентировать проектировщика.

**Выводы.** В работе предложена трехмерная численная модель, на основе которой построен метод расчета динамики загрязнения воздушной среды в помещении при аварийной утечке токсичного газа.

Данная модель обладает рядом преимуществ, крайне важных для проектировщика: возможность учета влияния расположения технологического оборудования в помещении, положения приточных и вытяжных отверстий вентиляции, возможность моделирования различной формы облака токсичного газа, которое формируется на месте аварии; возможность моделирования выброса, утечки токсичного газа в любом месте помещения. Предложенная модель позволила впервые решить важную задачу в области экологической безопасности – прогнозирование процесса распространения загрязняющих веществ в производственных помещениях при авариях. Дальнейшее развитие данной модели должно быть направлено на создание численной модели для расчета рассеивания тяжелых газов в производственных помещениях.

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий. Уч. пос. в 5 кн. / Под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегалева. – 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. Крикунов Г. Н. Безопасность жизнедеятельности / Г. Н. Крикунов, А. С. Беликов, В. Ф. Залунин, В. Н. Довгаль. – Д.: УкО ИМА-пресс, 1995. – 196 с.
4. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука, 1982. – 320 с.
5. Самарский А. А. Теория разностных схем / 2-е изд., испр. – М.: Наука, 1983. – 616 с.
6. Эльтерман В. М. Вентиляция химических производств / 3-е изд., перераб. – М.: Химия, 1980. – 288 с.

Поступила в редколлегия 05.02.2008.