

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НЕЙТРАЛИЗАЦИИ ОБЛАКА ЦИАНИСТОГО ВОДОРОДА

Запропонована комп'ютерна модель та метод розрахунку нейтралізації хмари ціаністого водню. Модель базується на чисельному інтегруванні тривимірного рівняння міграції домішки в атмосфері. Наведені результати обчислювального експерименту.

Предложена компьютерная модель и метод расчета нейтрализации облака цианистого водорода. Модель основывается на численном интегрировании уравнения переноса примеси в атмосфере. Приводятся результаты вычислительного эксперимента.

A computer model to calculate the neutralization of HCN cloud is proposed. The model is based on the numerical integration of the 3-D gradient transport model. The results of numerical experiment are presented.

### Введение

В комплексе проблем, связанных с организацией аварийных работ при выбросе и разливе токсичных веществ особое место занимают задачи защиты атмосферы от загрязнения. Среди различных подходов, применяемых для решения данной задачи [1, 2, 3, 6, 7], можно выделить подход, основанный на подаче воды или нейтрализатора от летательных средств – вертолета. Обзор литературы показывает, что отсутствуют методики расчета данных подходов по защите атмосферы от загрязнения, а, значит, при применении этих подходов на практике нет научно обоснованной информации по выбору параметров нейтрализации, режима подачи нейтрализующего раствора и т.д. в зависимости от метеоусловий и других факторов. Целью настоящей работы явилась разработка метода расчета процесса нейтрализации облака токсичного газа (HCN) путем подачи воды. Предлагаемый метод позволяет оптимизировать процесс защиты атмосферы, исходя из имеющейся в распоряжении техники, ее характеристик, метеоусловий. Разработанный метод является универсальным, так как позволяет в рамках одной модели осуществлять расчет нейтрализации различных токсичных газов. Это обеспечивается применением уравнения миграции примеси в атмосфере (модель Г. И. Марчука), которая представляет закон сохранения массы для примеси в потоке газа.

### 1. Математическая модель миграции токсичного газа и воды в атмосфере

Для описания миграции облака HCN (а также воды) используется трехмерное уравнение переноса примеси [5]:

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

где  $\varphi$  – концентрация токсичного газа (воды) в единице объема воздуха;  $u, v, w$  – компоненты вектора скорости воздушной среды;  $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$  – коэффициенты турбулентной диффузии;  $t$  – время;  $\sigma$  – коэффициент, учитывающий испарение воды;  $r_i = (x_i, y_i, z_i)$  – координаты источника выброса воды;  $q_i$  – мощность выброса воды в атмосферу;  $\delta(r - r_i)$  – дельта-функция Дирака.

Уравнение (1) дополняется следующими граничными условиями: на поверхности земли  $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$  ( $n$  – вектор внешней нормали к поверхности); на боковых гранях расчётной области ставятся условия:  $\varphi = 0$  при  $(\vec{V} \cdot \vec{n}) \geq 0$ ;  $\frac{\partial \varphi}{\partial n} = 0$ ; при  $(\vec{V} \cdot \vec{n}) \leq 0$ ;

Начальное условие имеет вид  $\varphi = 0$  (для нейтрализатора), для токсичного газа задаётся его концентрация в облаке. В модели учитывается процесс осаждения капель воды под действием силы гравитации со скоростью  $w_s$  путём добавления слагаемого  $-w_s \varphi$  в модель (1) в слагаемое, учитывающее конвективный перенос со скоростью ветра  $w$ . Процесс нейтрализации реализуется в специальной подпрограмме, позволяющей рассчитывать не только про-

цесс растворения токсичного газа в воде, но и процесс химического взаимодействия «токсичный газ + нейтрализатор». Для расчета химического взаимодействия используется уравнение кинетики.

## 2. Метод решения

Численное интегрирование уравнения переноса токсичного газа или воды осуществляется с использованием неявной попеременно-треугольной разностной схемы расщепления [2]. На каждом дробном шаге расчёт неизвестного значения концентрации загрязняющего вещества выполняется по схеме бегущего счёта. Разностная схема является абсолютно устойчивой.

Выполним следующую аппроксимацию производных, входящих в уравнение (1):

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

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

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

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

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

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

где  $u^+ = \frac{u + |u|}{2}$ ;  $u^- = \frac{u - |u|}{2}$  и т.д.

Компоненты скорости потока будем задавать на гранях разностной ячейки. Вторые производные аппроксимируем следующим образом:

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

В используемых выражениях  $L_x^+$ ,  $L_x^-$ ,  $M_{xx}^+$ ,  $M_{xx}^-$  – обозначения разностных операторов. С учётом этих обозначений разностный аналог уравнения (1) будет иметь вид:

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

Решение данного разностного уравнения при интегрировании на временном интервале  $dt$  выполняется так:

на первом шаге  $k = \frac{1}{4}$ :

$$\begin{aligned} & \frac{C_{ij}^{n+k} - C_{ij}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} \left( L_x^+ C^k + L_y^+ C^k + L_z^+ C^k \right) + \frac{\sigma}{4} C_{ijk}^k = \\ & = \frac{1}{4} \left( M_{xx}^+ C^k + M_{xx}^- C^n + M_{yy}^+ C^k + M_{yy}^- C^n + \right. \\ & \left. + M_{zz}^+ C^k + M_{zz}^- C^n \right), \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} & \frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} \left( L_x^- C^k + L_y^- C^k + L_z^- C^k \right) + \\ & + \frac{\sigma}{4} C_{ij}^k = \frac{1}{4} \left( M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + \right. \\ & \left. + M_{yy}^+ C^c + M_{zz}^- C^k + M_{zz}^+ C^c \right), \end{aligned}$$

на третьем шаге  $k = n + \frac{3}{4}$ ;  $c = n + \frac{1}{2}$ :

$$\begin{aligned} & \frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} \left( L_x^+ C^k + L_y^+ C^k + L_z^+ C^k \right) + \\ & + \frac{\sigma}{4} C_{ijk}^k = \frac{1}{4} \left( M_{xx}^- C^c + M_{xx}^+ C^k + \right. \\ & \left. + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c + M_{zz}^- C^c + M_{zz}^+ C^k \right), \end{aligned}$$

на четвертом шаге  $k = n + 1$ ;  $c = n + \frac{3}{4}$ :

$$\begin{aligned} & \frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} \left( L_x^- C^k + L_y^- C^k + L_z^- C^k \right) + \\ & + \frac{\sigma}{4} C_{ijk}^k = \frac{1}{4} \left( M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + \right. \\ & \left. + M_{yy}^- C^c + M_{yy}^+ C^k + M_{zz}^- C^c + M_{zz}^+ C^k \right). \end{aligned}$$

В данные разностные соотношения входит «возмущённый» коэффициент диффузии  $\tilde{\mu}$  [5]. На пятом этапе расщепления осуществляется расчет изменения концентрации под действием источников [4].

На основе разработанной численной модели создан пакет прикладных программ. Практическое применение разработанного метода иллюстрируется ниже на примере решения прикладной задачи.

### Практическая реализация

Рассматривается процесс нейтрализации облака HCN. Облако имеет форму «гриба» (рис. 2). Размеры облака: длина шляпки – 100 м, ширина шляпки – 22 м, высота ножки – 38 м, ширина ножки – 22 м. В модели принимается неравномерное распределение концентрации токсичного вещества в «грибе», концентрация токсичного вещества в момент времени  $t = 0$  в «ножке» составляет  $C_0 = 0,07 \text{ кг/м}^3$ , а в «шляпке» гриба концентрация принимается в

два раза меньше, чем концентрация в ножке. В разработанной модели используются следующие зависимости скорости ветра и коэффициента диффузии от высоты:

$$u = u_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^n;$$

$$\mu_z = k_1 \left( \frac{z}{z_1} \right)^m,$$

где  $u_1$  – скорость ветра на высоте  $z_1$ ;  $k_1 = 0,2$ ;  $n = 0,16$ ;  $m \approx 1$ .

Скорость ветра на высоте 10 м составляет 5 м/с;  $\mu_x = \mu_y = 2,5 \text{ м}^2/\text{с}$ . Выброс нейтрализатора осуществляется с вертолета, в количестве  $Q = 78 \text{ кг/с}$ , в течение 20 с. Скорость оседания капель нейтрализатора (воды) – 0,01 м/с. Размеры расчетной области –  $500 \times 540 \times 100 \text{ м}$ .



Рис. 1. Схема нейтрализации облака

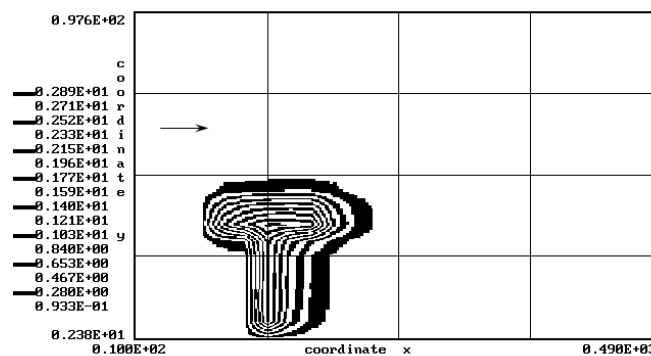


Рис. 2. Зона загрязнения атмосферы ( $t = 1 \text{ с}$ , сечение  $y = 240 \text{ м}$ )

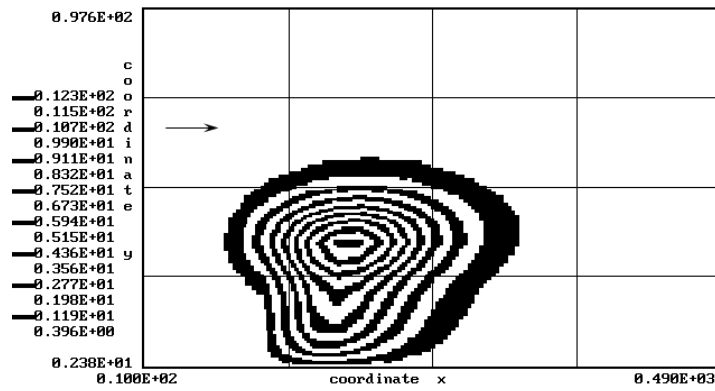


Рис. 3. Зона загрязнения атмосферы ( $t = 10$  с, сечение  $y = 240$  м)

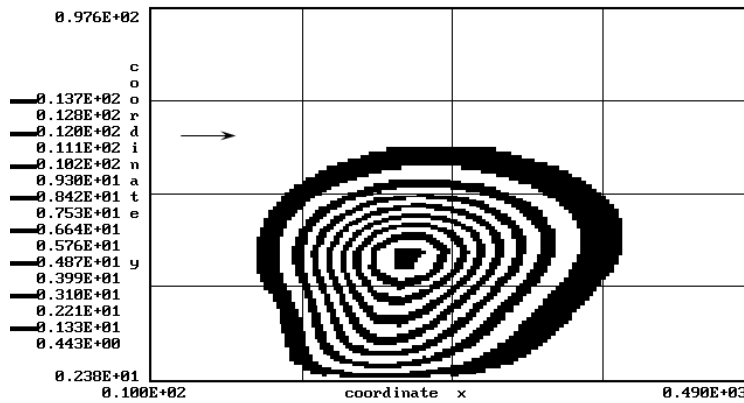


Рис. 4. Зона загрязнения атмосферы ( $t = 17$  с, сечение  $y = 240$  м)

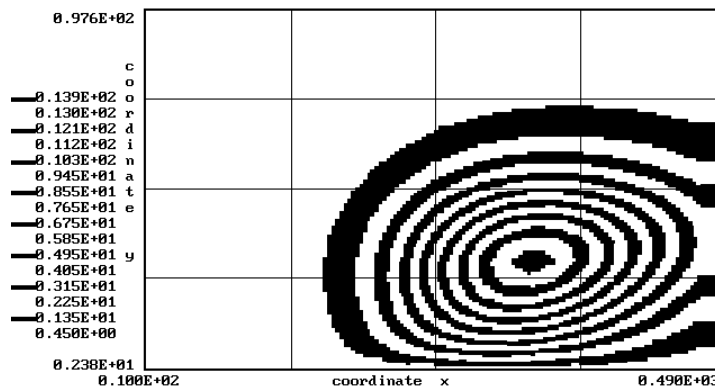


Рис. 5. Зона загрязнения атмосферы ( $t = 40$  с, сечение  $y = 240$  м, была подача нейтрализатора)

Отметим, что зона разлива имеет сложную геометрическую форму в плане (рис. 6).

Ниже представлены результаты по расчету количества нейтрализованного токсичного газа (выброс воды на высоте 45 м):

$t = 40$ с	$M = 308$ кг;
$t = 70$ с	$M = 413$ кг;
$t = 78$ с	$M = 416$ кг.

Отметим, что масса в облаке перед началом нейтрализации составляла около 2590 кг.

### Выводы

Разработан метод расчета процесса нейтрализации облака токсичного вещества (HCN), мигрирующего в атмосфере, путем подачи нейтрализатора с вертолета. Метод позволяет рассчитывать процесс нейтрализации для облака, имеющего сложную геометрию.

рическую форму. Практическая реализация метода показала его эффективность при решении прикладной задачи. Дальнейшее со-

вершенствование данного направления следует проводить в направлении адаптирования методов к проблеме миграции тяжелых газов.

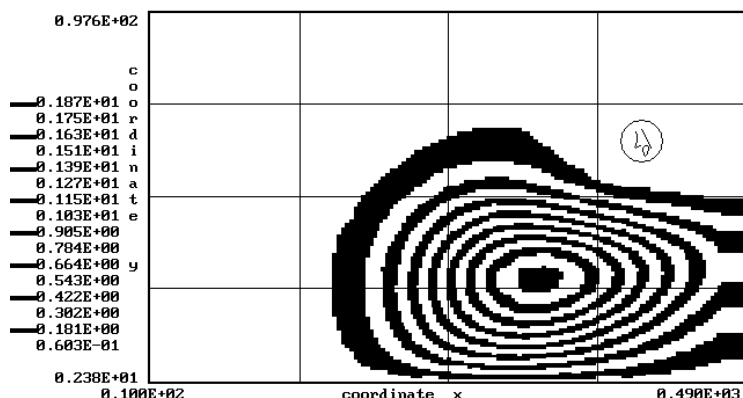


Рис. 6. Зона загрязнения атмосферы ( $t = 40$  с, сечение  $y = 240$  м, была подача нейтрализатора, начальная концентрация токсичного вещества  $C = 0,001 \text{ кг/м}^3$ )

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий: Учеб. пос. в 5 кн. [Текст] / под ред. В. А. Котляревского и А. В. Забегаева. – М.: Изд-во АСВ, 2001. – 200 с.
2. Экологическая безопасность. Защита территории и населения при чрезвычайных ситуациях [Текст] / Под ред. А. С. Гринина и В. Н. Новикова. – М.: ФАИР-ПРЕСС, 2000. – 336 с.
3. Иванов, Ю. А. Хранение и транспортировка жидкого аммиака [Текст] / Ю. А. Иванов, И. И. Стижевский. – М.: Химия, 1991. – 80 с.
4. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде [Текст] / под ред. М. З. Згуровского. – К.: Наук. думка, 1997. – 368 с.
5. Марчук, Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды [Текст] / Г. И. Марчук. – М.: Наука, 1982. – 320 с.
6. Природоохранная деятельность на железнодорожном транспорте Украины: проблемы и решения [Текст] / В. Н. Плахотник и др. – К.: Транспорт Украины, 2001. – 244 с.
7. Магистральные аммиакопроводы [Текст] // Тр. ГИАП. – Вып. 51. – М., 1978. – 48 с.

Поступила в редколлегию 01.07.2008.