

Беляев Н.Н., Росточило Н.В.

Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта
им. академика В. Лазаряна

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА НЕЙТРАЛИЗАЦИИ ТОКСИЧНОГО ВЕЩЕСТВА ПРИ АВАРИИ НА ХИМИЧЕСКИ ОПАСНОМ ОБЪЕКТЕ

Вступление. Аварии на химически - опасных объектах (ХОО), сопровождающиеся эмиссией токсичных веществ в атмосферу способны вызвать не только загрязнение окружающей среды, но и поражение людей. Поэтому, первоочередной задачей при такой аварии на ХОО возникает необходимость быстрой локализации и ликвидации зоны химического загрязнения. Одним из эффективных способов решения данной задачи является применение метода нейтрализации, т.е. подачи реагента для понижения концентрации опасного вещества в атмосфере (рис. 1).



Рис. 1 - Подача воды для локализации зоны загрязнения с помощью специального подъемника.

При применении такого способа защиты необходимо предопределять его эффективность. Решение задачи по оценке эффективности метода нейтрализации может быть получено только на основе метода математического моделирования. Поэтому разработка математических моделей, служащих для поддержки принятия решений по проведению этого или иного защитного мероприятия является важной задачей в области экологической и промышленной безопасности. Анализ литературных источников показывает, что существует ограниченное количество работ, посвященных решению этой про-

блемы. Так можно выделить работы [1,2], где рассматривается подача реагента для нейтрализации облака токсичного газа, но без учета влияния застройки. В работе [3] рассмотрена задача о подаче реагента от неподвижного вертолета в зону загрязнения, в условиях застройки, но для модельной ситуации – «точечный выброс», т.е. без учета гидродинамики процесса вытекания реагента.

Целью данной работы является разработка численной модели для расчета нейтрализации токсичного газа в атмосфере, которая проводится в условиях застройки при подаче реагента от специального подъемника (рис. 1).

Постановка задачи. Пусть на территории ХОО произошла авария внутри здания (рис.2) и из помещения наружу стал поступать токсичный газ. Для ликвидации зоны загрязнения в атмосфере, используется подача в облако токсичного газа реагента от струйной установки, расположенной на специальном подъемнике.

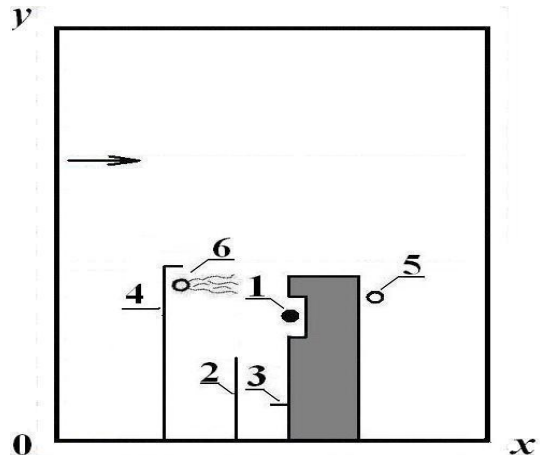


Рис. 2 - Схема расчетной области:
1 – место эмиссии опасного вещества;
2 – забор перед зданием; 3 – козырек;
4 – стрела подъемника; 5 – положение репетора; 6 – место подачи струи нейтрализатора.

Требуется оценить эффективность нейтрализации при заданной метеоситуации и параметрах эмиссии реагента и токсичного газа.

Моделирующие уравнения. Для расчета концентрации опасного вещества в атмосфере используется осредненное по ширине переноса примеси (профильная задача) уравнение [2,4,5]

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial (v-w)C}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \sum Q_c(t) \delta(x-x_c(t)) \delta(y-y_c(t)) \quad (1)$$

где C – концентрация примеси (опасное вещество); u, v, w – компоненты вектора скорости движения ветрового потока; w – скорость гравитационного оседания примеси; $\mu=(\mu_x, \mu_y)$ – коэффициенты атмосферной диффузии; t – время; Q_{ci} – осредненное значение интенсивности точечного источника эмиссии примеси, размещенного в точке x_c, y_c ; $\delta(x-x_c)\delta(y-y_c)$ – дельта-функция Дирака. Ось Y направлена вертикально вверх.

Аналогичное уравнение применяется для моделирования рассеивания реагента в атмосфере. В этом случае C – концентрация реагента.

Постановка краевых условий для данного уравнения рассмотрена в работе [5].

Для расчета профиля скорости ветра на входе в расчетную область и коэффициентов атмосферной диффузии используются такие зависимости [4]

$$u = u_1 \left(\frac{y}{y_1} \right)^n; \quad \mu_y = 0,11u;$$

$$\mu_x = 0,2u,$$

где u_1 – скорость ветра на высоте y_1 , y – текущее значение высоты, $n=0.15$ – параметр.

Решение уравнения (1) можно получить, если известно поле скорости ветрового потока, которое формируется под влиянием застройки или других препятствий. Это поле скорости определяет конвективный перенос, как токсичного газа, так и реагента в атмосфере. Для расчета поля скорости ветрового потока в условиях застройки и для учета локаль-

ного влияния на это поле скорости выхода потока реагента из емкости используется модель потенциального течения. Для решения задачи в такой постановке необходимо проинтегрировать уравнение [8, 11]

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

где P – потенциал скорости, ось Y , как отмечалось ранее – направлена вертикально вверх.

Постановка граничных условий для данного уравнения рассмотрена в [2,3,5]. Компоненты вектора скорости воздушной среды рассчитываются на основе зависимостей [8,11]

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

Численное интегрирование моделирующих уравнений. Для численного интегрирования уравнений гидродинамики и массопереноса используется прямоугольная разностная сетка. Формирование вида расчетной области (место расположения зданий на промплощадке) осуществляется с помощью технологии «porosity technique» [3,5]. Кроме этого, данная технология используется для задания места подачи реагента и места эмиссии опасного вещества. Для численного интегрирования уравнения (2) используется метод Ричардсона, а численное интегрирование уравнения (1) проводится с помощью попеременно-треугольной разностной схемы [2,3,5].

Практическая реализация модели. На основе построенной модели создан код «*Jet-2D*», реализованный на алгоритмическом языке *FORTRAN*. Код применен для моделирования процесса нейтрализации токсичного газа – HCN (рис. 2). При проведении вычислительного эксперимента учитывается:

1. форма здания;
2. наличие перед зданием забора;
3. наличие на здании козырька;
4. наличие стрелы струйной установки;
5. учет выброса токсичного газа в атмосферу непосредственно из помещения;
6. метеоусловия;

7. параметры эмиссии токсичного газа и нейтрализатора;
8. скорость и направление выходящей из установки струи нейтрализатора.

Такой учет в модели деталей процесса нейтрализации позволяет говорить о «прямом численном моделировании» (*direct numerical simulation*) на основе построенной CFD модели. Моделирование проведено для следующих параметров задачи: интенсивность эмиссии токсичного вещества составляет 150 г/с; размеры расчетной области 100м·42 м; скорость невозмущенного ветрового потока – 5м/с (скорость потока u_1); высота здания – 16м; ширина здания 12м. Рецептор – воздухозаборник располагается возле крыши на подветренной стороне здания (рис. 2), его координаты $x=66м$, $y=13м$.

Рассмотрим результаты моделирования на базе разработанной модели. На рис. 3-5 представлено распределение концентрации опасного вещества до начала подачи струи нейтрализатора. Значение концентрации на этих рисунках представлено в безразмерном виде: каждое число – это величина концентрации в процентах от величины максимальной концентрации на данный момент времени. Вывод на печать чисел осуществлен по формату «целое число». Для удобства анализа результатов моделирования зона загрязнения обведена линией на рисунках.

Видно, что шлейф токсичного вещества, уже через 10с после аварии охватывает обе стороны здания, что создает прямую угрозу затекания его внутрь помещений. В этот момент времени, на уровне козырька здания, концентрация опасного вещества составляет величину порядка 2 -5% от концентрации вблизи источника эмиссии (в размерном виде это – порядка 2.2 г/м³). На следующих рисунках показана зона загрязнения для момента времени 18с после аварии для двух случаев: при наличии козырька на здании и без него. Хорошо видно, что козырек на здании выполняет защитную функцию по снижению уровня загрязне-

ния воздушной среды возле здания на уровне первого этажа и входной двери. Так при его отсутствии концентрация токсичного газа, по высоте здания, уровень $z=0-4м$, составляет величину порядка 4% (в размерном виде около 7 г/м³) от концентрации возле источника эмиссии, а при наличии козырька – здесь концентрация в два раза меньше, порядка 2%.

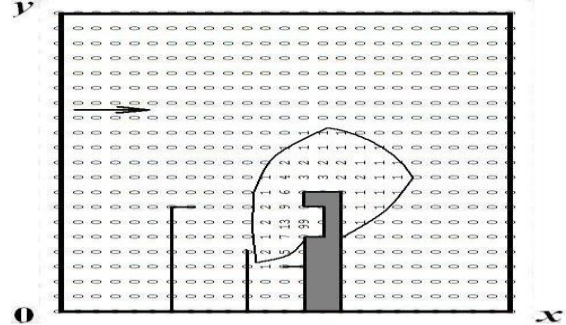


Рис. 3 - Распределение концентрации HCN для момента времени $t=10с$ (нет подачи нейтрализатора, $C_{max}=125г/м^3$).

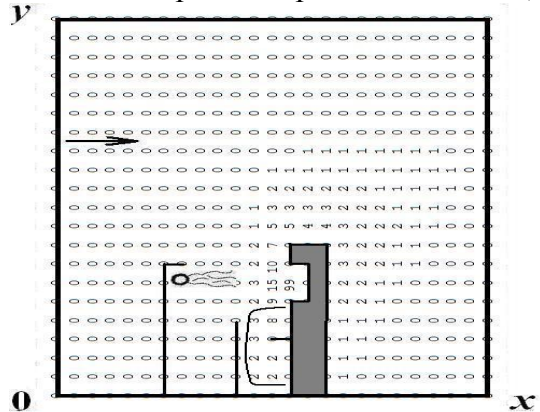


Рис. 4 - Распределение концентрации HCN для момента времени $t=18с$ (нет подачи нейтрализатора, $C_{max}=175г/м^3$).

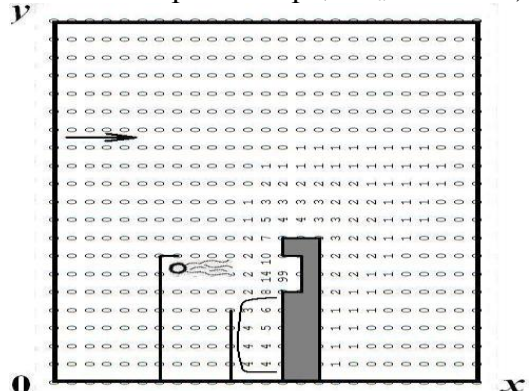
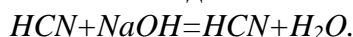


Рис. 5 - Распределение концентрации HCN для момента времени $t=18с$, нет козырька на здании (нет подачи нейтрализатора, $C_{max}=175г/м^3$).

На втором этапе решения задачи рассматривалась подача реагента в зону загрязнения. Подача начинается в момент времени $t=11\text{c}$; угол подачи струи реагента составляет -0° , скорость струи нейтрализатора -15м/с . Для нейтрализации опасного вещества используется подача 10 % раствора NaOH . Уравнение кинетики записывается в виде



Расчет процесса химического взаимодействия осуществляется в отдельной подпрограмме. Для моделирования взаимодействия другого опасного вещества с другим нейтрализатором необходимо внести изменения только файл исходных данных.

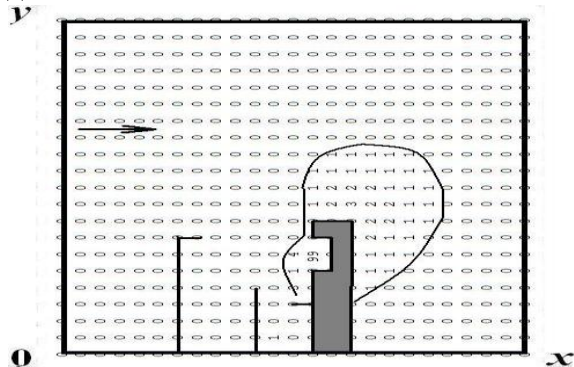


Рис. 6 - Распределение концентрации HCN для момента времени $t=13\text{c}$ (происходит подача нейтрализатора, $C_{\text{max}}=145\text{г/м}^3$).

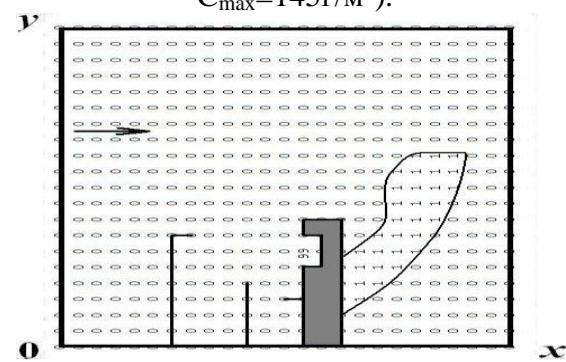


Рис. 7 - Распределение концентрации HCN для момента времени $t=15\text{c}$ (происходит подача нейтрализатора, $C_{\text{max}}=136\text{г/м}^3$).

После начала подачи реагента картина загрязнения воздушной среды возле здания меняется: струя нейтрализатора быстро ликвидирует зону загрязнения возле наветренной стороны здания и загрязненным остается узкая область вбли-

зи источника эмиссии. Область загрязнения за зданием дрейфует под действием ветра и атмосферной диффузии. В табл. 1 представлены значения концентрации опасного вещества в точке расположения рецептора, позволяющие оценить темп ее возрастания и ее снижения с течением времени.

Таблица 1 - Значение концентрации токсичного вещества в точке расположения рецептора

t, c	9	12	13	14	15	16
C, г/м ³	1.64	2.97	3.40	3.29	0.44	0

Если проанализировать данные из табл. 1, то видно, что в точке расположения рецептора концентрация токсичного газа очень быстро превысит величину смертельной концентрации, которая для HCN составляет 1мг/л . Максимум концентрации достигается в момент времени 13c после аварии. Тем не менее, подача нейтрализатора позволяет быстро уменьшить уровень загрязнения воздушной среды возле рецептора и к моменту времени $t=16\text{c}$ оно уже равно нулю.

В заключение отметим, что расчет задачи на базе разработанной модели составляет 10c компьютерного времени.

Выводы. В работе представлена эффективная CFD модель для расчета эффективности нейтрализации токсичного газа в атмосфере. Для практической реализации на ПК разработанной модели требуется несколько секунд времени, что является крайне важным для ее практического применения, особенно при проведении серийных расчетов. Модель может быть использована при разработке ПЛА-Са (план ликвидации аварийной ситуации) для химически опасных объектов. Дальнейшее развитие данной тематики следует вести в направлении построения модели подачи реагента (нейтрализатора) от самолета.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Беляев Н.Н. Защита атмосферы от загрязнения при аварийных выбросах и разливах токсичных веществ / Н.Н. Беляев, В.М. Лисняк // Проблемы обчислювальної меха-

- ніки і міцності конструкцій: Зб. наук. пр. - Донецьк: Норд-Прес, 2004. – Вип. 8. – С.32-40.
2. Беляев Н. Н. Защита атмосферы от загрязнения при миграции токсичных веществ: Монография / Н.Н. Беляев, В.М. Лисняк. Д.: ООО «Инновация», 2006. 150с.
 3. Беляев Н.Н., Гунько Е.Ю., Машихина П.Б. Математическое моделирование в задачах экологической безопасности и мониторинга чрезвычайных ситуаций: Монография. / Н.Н. Беляев, Е.Ю. Гунько, П.Б. Машихина. Д.: «Акцент ПП», 2013. – 159 с.
 4. Берлянд М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы / Берлянд М. Е. – Л. : Гидрометеоиздат, 1985. – 273 с.
 5. Згуровский М. З. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М.З. Згуровский, В.В. Скопец-кий, В.К. Хрущ, Н.Н. Беляев. – К.: Наук. думка, 1997. – 368 с.
 6. Belayev N. N. Computer simulation of the pollutant dispersion among buildings / N. N. Belayev, M. I. Kazakevitch, V. K. Khutch // Wind Engineering into 21st Century: Proceedings of the Tenth Intern. Conf. on Wind Engineering, Copenhagen (Denmark) A. A. BALKEMA / Rotterdam - BROOKFIELD, 1999. - P. 1217-1220.
 7. Biliaiev M.M. Numerical simulation of indoor air pollution and atmosphere pollution for regions having complex topography /Biliaiev M.M., Kharytonov M.M. / Conference Abstracts of 31st NATO / SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and it's Application, 27 September – 01 October, Torino, Italy, 2010. № P1.7.

УДК 519.6:504.3.054

Берлов А.В.

*Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта
им. академика В. Лазаряна*

РАСЧЕТ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ПРИЗЕМНОГО СЛОЯ АТМОСФЕРЫ ПРИ ГОРЕНИИ ТВЕРДОГО РАКЕТНОГО ТОПЛИВА

Введение. Известно, что для прогноза уровня загрязнения атмосферы при чрезвычайных ситуациях связанных с эмиссией химически опасных веществ широко используется метод математического моделирования [2,5,7,6,14,15]. В настоящее время применяется несколько классов математических моделей для решения задачи прогноза загрязнения атмосферы при чрезвычайных ситуациях на химических опасных объектах, в частности эмпирические модели [9] или аналитические модели [7].

Аналитические модели – это расчетные зависимости, основанные на точном решении уравнения переноса примеси в атмосфере для точечного, постоянно действующего источника выброса или для модельной ситуации – «мгновенный выброс». Другой вид аналитических моделей – это различные модификации модели Гаусса, также разработанные для точечного, постоянно действующего источника или для модельной ситуации –

«мгновенный выброс» [7,12,13]. Аналитические модели позволяют быстро рассчитать формирующуюся зону загрязнения. Но недостатком этих моделей является то, что они не учитывают влияние зданий и рельефа на процесс формирования зоны загрязнения. Для получения адекватных прогнозных данных необходимо применение численных моделей, учитывающих существенные факторы, влияющие на процесс рассеивания загрязняющих веществ в атмосфере и формирование зоны загрязнения [4,6]. Известно, что для практики необходимо создание численных моделей, позволяющих максимально учитывать специфические особенности конкретных задач. Например, твердое ракетное топливо ракетной системы РС-22 (рис.1) храниться в специальных ангарах, возле которых располагается вал (рис.2). Этот вал обеспечивает определенную защитную функцию в случае чрезвычайной ситуации в хранилище. Поэтому при моделировании