

Математическое моделирование выброса и рассеяния в атмосфере газообразных примесей

Ю. А. Скоб

Национальный аэрокосмический университет им. Н.Е. Жуковского «ХАИ», Украина

Target setting, algorithm and the results of numerical modeling of the processes of releasing of no reactive gases into the atmosphere, mixing them with an air and dispersion of the mixture in open space are presented. The computer system which considers different scenarios of release and movement of gaseous mixtures in the atmosphere and allows defining mixture concentration according to time and space is developed. The results of computer tests of dispersion of propane and hydrogen gases and formation of underexpanded fluid jet are considered. Satisfactory qualitative and quantitative fit of computation and experimental results have been obtained.

1. Постановка проблемы и её актуальность

Газодинамические процессы струйного истечения газообразных примесей в атмосферу, формирования газовых смесей и их движения в окружающей среде часто возникают при реализации производственных циклов или в результате аварийных ситуаций на предприятиях промышленности, которые используют, хранят или производят данные вещества. Выбросы горючих и взрывоопасных газов создают потенциальную угрозу возгорания и взрыва смесей, материального ущерба и человеческих жертв. Поэтому численное моделирование вышеперечисленных явлений является актуальной и сложной задачей, связанной с построением и сопряжением математических моделей таких физических процессов, как истечение струй, турбулентное смешение газов, движение газообразной смеси в трехмерном пространстве.

Наиболее адекватное описание физических процессов смешения не реагирующих газов с воздухом и дальнейшего распространения смеси при истечении струи в открытое пространство возможно только с использованием системы нестационарных уравнений Навье-Стокса для сжимаемого газа. Ограниченные возможности вычислительной техники не позволяют эффективно осуществлять прямое численное решение этих уравнений. В настоящее время, численное моделирование турбулентных течений осуществляют путем решения осредненных по Рейнольдсу-Фавру уравнений Навье-Стокса, дополненных моделью турбулентности. Однако большинство моделей турбулентности не описывают с одинаковой степенью адекватности различные типы течений. Особенно это касается описания движения воздушных масс в приземном слое атмосферы [1, 2], где на рассматриваемые процессы влияют массовые силы, состояние атмосферы, сложный рельеф местности. Поэтому существует необходимость построения новых моделей и расчетных схем для численного моделирования такого рода течений.

Целью данной работы является разработка эффективной математической модели процессов выброса газов в атмосферу (истечение струи или испарение с

поверхности пролива), смешения их с воздухом и дальнейшего рассеяния смеси в открытом пространстве.

В данной работе для описания рассматриваемых газодинамических процессов предлагается использовать усеченные уравнения Навье-Стокса (приближение Эйлера с использованием источниковых членов) и алгебраическую модель атмосферной турбулентной диффузии, что позволяет адекватно учитывать свойства приземного слоя атмосферы и существенно уменьшить требуемые вычислительные ресурсы для решения практических задач. На основе предложенной математической модели разработана компьютерная программа, которая позволяет анализировать и прогнозировать трехмерные поля концентрации примеси и других газодинамических параметров смеси во времени и пространстве, оценивать масштабы последствий возможных техногенных аварий, формулировать рекомендации по организации и расположению опасных производств.

2. Общая постановка задачи

Рассматриваются процессы выброса (истечения струи или испарения с поверхности пролива) газообразных примесей в атмосферу. Известны параметры окружающей среды, химический состав примеси, граничные и начальные условия формирования смеси. Расчетной областью Ω является параллелепипед с прямолинейными образующими, расположенный в правой декартовой системе координат (X, Y, Z) с основанием в плоскости XOZ (ось Y ориентирована в направлении, противоположном действию сил тяжести Земли (рис. 1)). Расчетная область разбивается на пространственные ячейки, причем размеры граней подбираются в соответствии с характерным размером особенностей расчетной области (шероховатости обтекаемой поверхности, размерностью обтекаемых объектов).

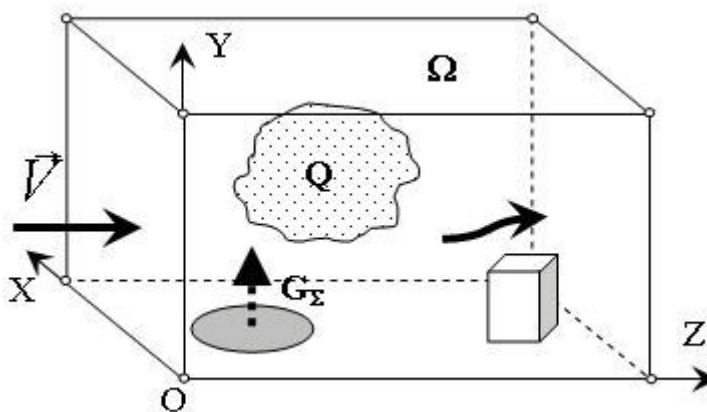


Рис.1. Расчетная схема

3. Математическая модель течения смеси газов

Полная система уравнений, описывающая нестационарное трехмерное течение двухкомпонентной смеси газов в данной постановке имеет вид [3]:

$$\frac{\partial \vec{a}}{\partial t} + \frac{\partial \vec{b}}{\partial x} + \frac{\partial \vec{c}}{\partial y} + \frac{\partial \vec{d}}{\partial z} = \rho \vec{f}, \quad (1)$$

где $\vec{a}, \vec{b}, \vec{c}, \vec{d}, \vec{f}$ – вектор-столбцы вида:

$$\vec{a} = [\rho, \rho u, \rho v, \rho w, E]^T, \quad (2)$$

$$\vec{b} = [\rho u, P + \rho u^2, \rho uv, \rho uw, (E + P)u]^T, \quad (3)$$

$$\vec{c} = [\rho v, \rho vu, P + \rho v^2, \rho vw, (E + P)v]^T, \quad (4)$$

$$\vec{d} = [\rho w, \rho wu, \rho wv, P + \rho w^2, (E + P)w]^T, \quad (5)$$

$$\vec{f} = [0, 0, -g, 0, -gv]^T; \quad (6)$$

t – время; u, v, w – составляющие вектора скорости \vec{q} ; P, ρ – давление и плотность; E – полная энергия единицы объема смеси газов

$$E = \rho \left(e + \frac{1}{2} (u^2 + v^2 + w^2) \right); \quad (7)$$

e – внутренняя энергия единицы массы газа; компоненты вектора \vec{f} – суть проекции распределенных объемных источников, g – ускорение свободного падения.

Закон переноса компоненты смеси с учетом скорости диффузии, имеет следующий вид [3, 4]:

$$\frac{\partial(\rho Q)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u Q)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v Q)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w Q)}{\partial z} = \rho Q, \quad (8)$$

где Q – относительная массовая плотность примеси (отношение плотности газообразного вещества примеси к плотности смеси), ρQ – интенсивность изменения плотности примеси вследствие диффузии в соответствии с законом Фика $\rho Q_t = \text{div}(\rho \mathcal{D}_D \text{grad} Q)$ (коэффициент диффузии \mathcal{D}_D определялся по методике, предложенной М.Е. Берляндом [5]).

Система уравнений (1-8) является незамкнутой. Дополним ее уравнениями, определяющими теплотизические свойства компонент смеси [3, 4]. Для идеального политропного газа величина e связана с P и ρ смеси

зависимостью:
$$e = \frac{P}{(k-1)\rho}.$$

При постановке граничных условий полагается, что расходная составляющая скорости не превосходит скорость звука. Граничные условия на входе будем задавать на поверхностях тех граней, примыкающих к границам расчетной области, через которые в расчетную область поступает атмосферный воздух. Набегающий поток на входе определяется величинами:

– полной энтальпии

$$I_{00} = \frac{k}{k-1} \frac{P}{\rho} + \frac{u^2 + v^2 + w^2}{2}; \quad (9)$$

– функции энтропии

$$S_0 = \frac{P}{\rho^k}; \quad (10)$$

– направлением вектора скорости потока (углами $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$);

– относительной массовой плотностью примеси Q ($Q \leq 1$, если поступает газообразное вещество примеси, например, угарный газ CO).

Параметры потока на входе определяются из равенств (3, 4) с учетом заданных $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ с привлечением соотношения для “левого” инварианта Римана [6]. На непроницаемых участках, ограничивающих расчетную область поверхностей, выполняются условия «непротекания»: $q_n = 0$, где \vec{n} – вектор нормали к рассматриваемой границе. Граничные условия на выходе будем задавать на поверхностях тех граней конечно-разностных ячеек, которые примыкают к границам расчетной области и через которые предполагается вытекание или втекание смеси. В выходных областях, кроме атмосферного давления P_A , задаваемого либо взятого из эксперимента, использовались соотношения для “правого” инварианта Римана [6].

В начальный момент времени во всех «газообразных» ячейках расчетной области принимаются параметры окружающей среды. В ячейках, занимаемых облаком газообразной примеси, которое образовалось в результате мгновенного выброса, относительная массовая концентрация примеси принимается равной $Q = 1$ (100%). В ячейках с испарением или истечением газа задается закон изменения расхода примеси.

4. Используемый метод решения и его программная реализация

Векторное уравнение (1) является следствием законов сохранения массы, импульса и энергии, которые могут быть представлены в интегральной форме для каждой расчетной ячейки:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V a dV + \iint_{\sigma} \mathcal{K} d\sigma = \iiint_V \rho f dV, \quad (11)$$

где V – объем элементарной расчетной ячейки; σ – ограничивающая поверхность данной ячейки, которая имеет внешнюю нормаль \vec{n} ($\sigma = \sigma \vec{n}$); \mathcal{K} – тензор плотности потока консервативных переменных a , столбцами которого являются векторы $\vec{b}, \vec{c}, \vec{d}$, соответственно.

Закон переноса компоненты смеси (8) может быть также представлен в интегральной форме для каждой расчетной ячейки:

$$\frac{\partial}{\partial t} \iiint_V \rho Q dV + \iint_{\sigma} \rho Q q d\sigma = \iiint_V \rho_Q dV \quad (12)$$

Численное решение основных уравнений основывается на использовании схемы распада произвольного разрыва. Уравнения (11, 12) допускают возникновение и существование поверхностей разрыва двух видов: ударных

волн и тангенциальных разрывов. Функции, удовлетворяющие уравнениям (11, 12), можно рассматривать в качестве обобщенных решений уравнений газовой динамики. Использование интегральных законов сохранения массы, импульса, энергии и концентрации газообразной примеси в качестве исходных для построения разностных уравнений обеспечивает построение разрывных решений без выделения разрывов.

Совокупность газодинамических параметров во всех ячейках в момент времени t^n представляет собой известное решение на временном слое с индексом n . Параметры в момент времени $t^{n+1} = t^n + \tau$ (на слое $n+1$) рассчитывались посредством применения явных разностных аппроксимаций для соотношений (5) в рамках метода С.К. Годунова [6]. На первом этапе непрерывное распределение параметров заменяется кусочно-постоянными средне-интегральными значениями в каждой расчетной ячейке. При этом границы ячейки представляют собой неустойчивые поверхности произвольного разрыва, которые распадаются на устойчивые волновые элементы: ударную волну, контактную поверхность и волну разрежения. Для каждого такого разрыва определяются потоки массы, импульса и энергии через грани газовых ячеек. Устойчивость конечно-разностной схемы обеспечивается за счет выбора величины шага по времени τ .

На основе математической модели создана компьютерная программа инженерного анализа газодинамических процессов истечения, смешения, рассеяния и взрыва, которая позволяет прогнозировать изменение концентрации примеси во времени и пространстве в расчетной области с использованием персональных компьютеров в практически приемлемое время.

5. Вычислительный эксперимент

Для верификации модели для рассеяния примесей в атмосфере проводилось сравнение результатов расчета с экспериментальными данными.

5.1. Пролив жидкого пропана

Рассматривалась задача о распространение газообразного пропана (в результате вскипания охлажденного жидкого пропана, проливаемого на водную поверхность при постоянно действующем источнике с заданным расходом) над поверхностью моря под воздействием воздушных потоков.

Моделировалось испарение жидкого пропана с пятна пролива площадью 256 м² при атмосферных параметрах: давление 101325 Па, температура 291 К, скорость набегающего воздуха 5,4 м/с. Пропан испарялся с постоянным расходом 27,16 кг/с в течение 450 с и имел температуру 260 К в газообразном состоянии. Исходные данные для расчета формировались в соответствии с экспериментальными данными пролива №46 [7] (рис. 2).

Моделировалось также испарение жидкого пропана с пятна пролива площадью 900 м² при атмосферных параметрах: давление 101325 Па, температура 291 К, скорость набегающего воздуха 2,53 м/с. Пропан испарялся с постоянным расходом 22,31 кг/с в течении 450 с и имел температуру 260 К в газообразном состоянии. Исходные данные для расчета формировались в соответствии с экспериментальными данными пролива №54 [7] (рис. 3).

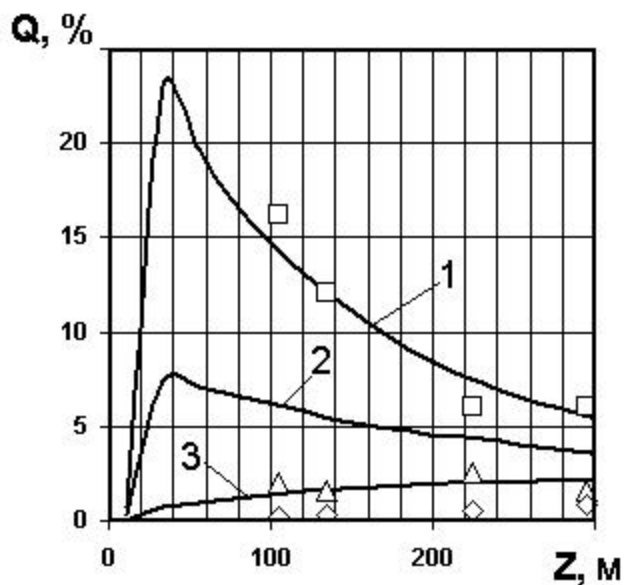


Рис.2. Распределение максимальной массовой концентрации пропана для пролива 46 (1, 2 и 3 – результаты расчетов; \square , Δ и \diamond – экспериментальные данные на высотах 0.9, 1.4 и 2.3 м, соответственно)

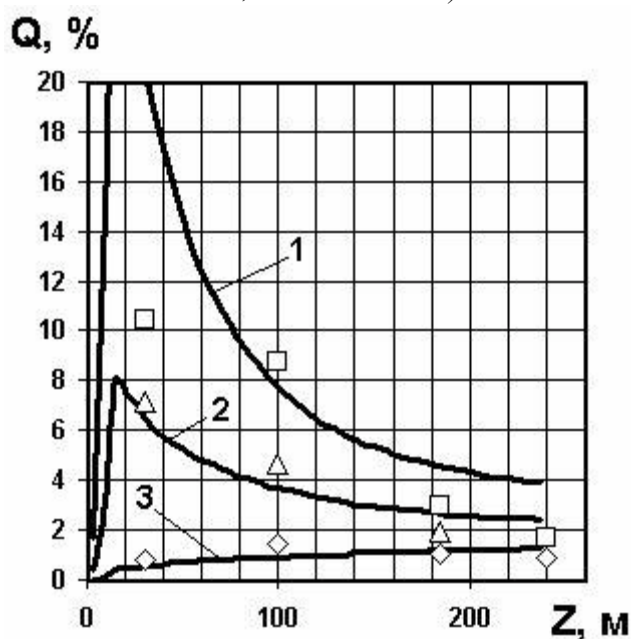


Рис.3. Распределение максимальной массовой концентрации пропана для пролива 54 (1, 2 и 3 – результаты расчетов; \square , Δ и \diamond – экспериментальные данные на высотах 0.6, 1.4 и 2.3 м, соответственно)

Расчетные распределения концентрации пропана на разных высотах от поверхности проливов качественно и количественно соответствуют экспериментальным данным.

5.2. Пролив жидкого водорода

Моделировалось испарение жидкого водорода с пятна пролива площадью 65 м^2 при атмосферных параметрах: давление 101325 Па , температура 288 К , скорость набегающего воздуха $2,2 \text{ м/с}$. Водород испарялся с постоянным расходом $11,56 \text{ кг/с}$ в течении 21 с и имел температуру 180 К в газообразном состоянии. Исходные данные для расчета формировались в соответствии с экспериментальными данными пролива №6 [8] (рис. 4, 5).

5.3. Рассеяние облака газообразного водорода

Моделируется возможная аварийная ситуация на станции заправки водородным топливом транспортных средств. Раздаточная станция имеет большую цистерну с жидким водородом ($5,7 \text{ м}^3$), 12 баллонов общим объемом $799,2 \text{ м}^3$ для хранения газообразного водорода при температуре окружающей среды [9].

Численные расчеты рассеяния облака водорода проводились при скоростях ветра $1, 3$ и 10 м/с . Направление ветра принималось в сторону жилого квартала.

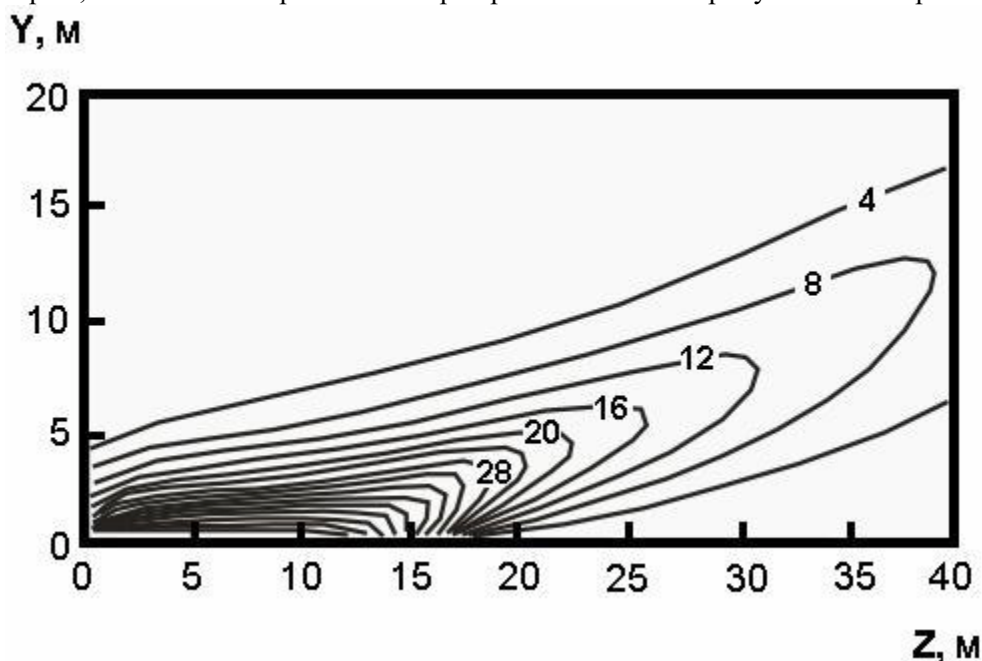


Рис.4. Изолинии равных значений объемной концентрации водорода для пролива б через 21с (результаты расчета)

С увеличением скорости ветра скорость рассеяния увеличивается как в расчете, так и в эксперименте (рис. 6, 7). Как показали сравнения изменения полей концентраций во времени для различных скоростей ветра всплытие водорода незначительно вследствие его низкой температуры.

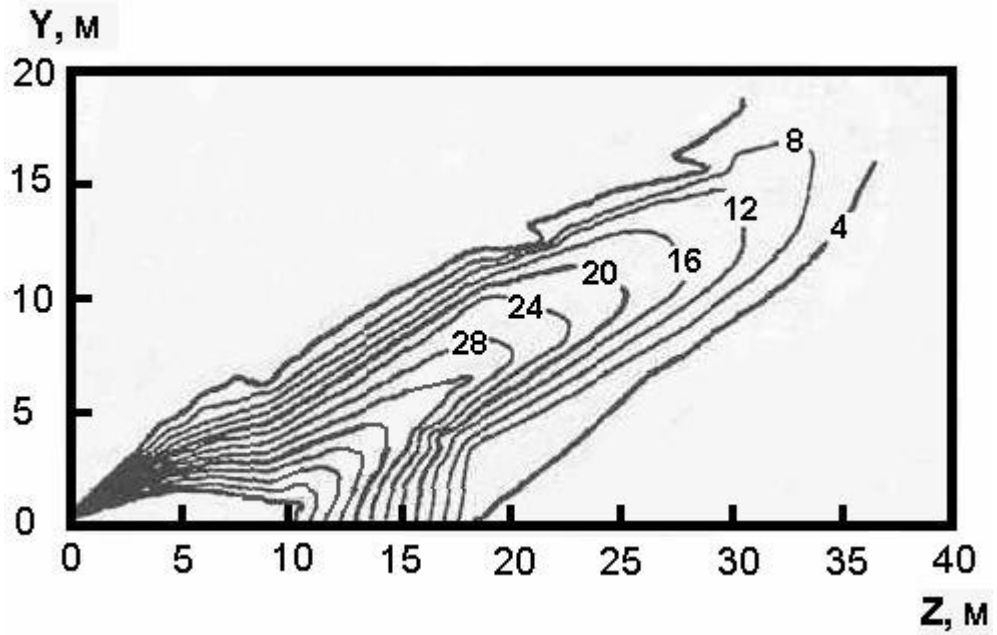


Рис.5. Распределение концентрации водорода для пролива б через 21с (эксперимент)

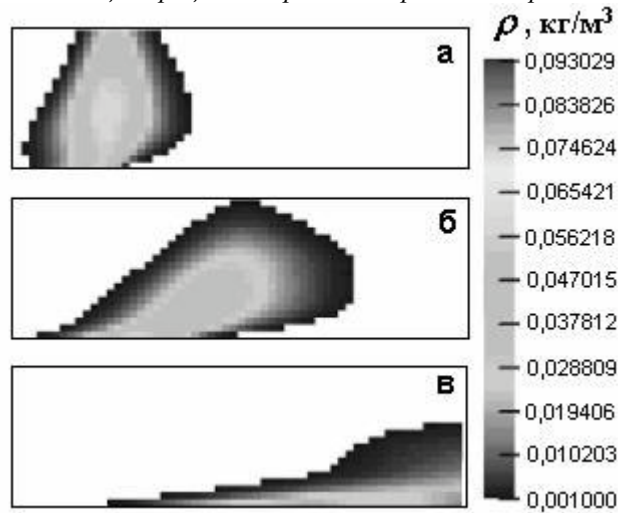


Рис.6. Влияние скорости ветра на рассеяние облака газообразного водорода (расчетные данные: а – 1 м/с, б – 3 м/с, в – 10 м/с)



Рис.7. Влияние скорости ветра на рассеяние газообразного водорода (экспериментальные данные: а – 1,6 м/с, б – 3,8 м/с, в – 6,3 м/с)

5.4. Формирования струи газовой примеси

Рассматривалось развитие ударной волны при выходе из детонационной трубы в неограниченное пространство, получаемое в режиме принудительного импульсного ускорения потока за волной, с целью определения условий, при которых обеспечивается поддержание интенсивности ударной волны со сферическим фронтом на период прохождения волной длины детонационной ячейки.

Результаты моделирования истечения струи при законе с возрастающим расходом газа представлены на рис. 8. Закон изменения скорости на срезе детонационной трубы задавался в виде:

$$U_1(t) = U_0 (50U_0 t + 1)^{\frac{3}{5}} \quad (13)$$

при $t \leq 40$ мкс и $U_1 = const$ при $t > 40$ мкс, а $U_0 = 800$ м/с.

При этом полагалось, что значение плотности газа на срезе сопла поддерживалось постоянным. Диаметр выходного сопла был равен 100 мм.

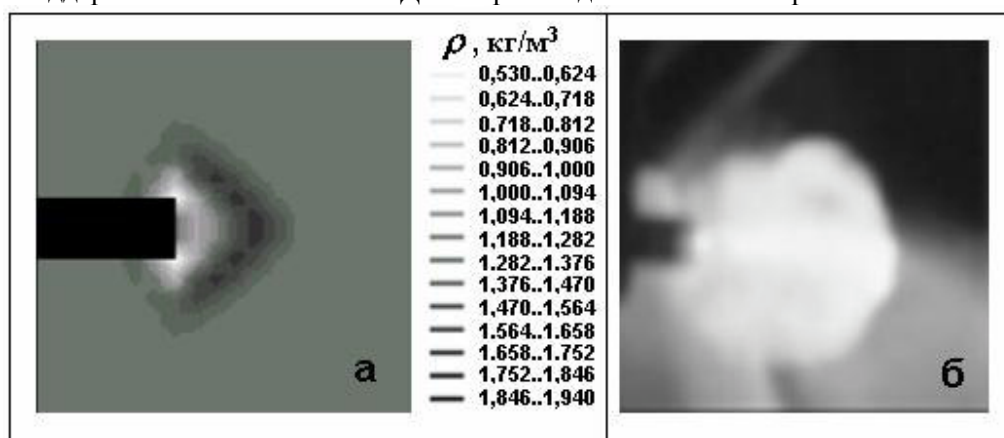


Рис.8. Распределение плотности газообразных продуктов сгорания при формировании недорасширенной струи через 96 мкс после выброса (а – результаты расчета, б – кадр фотосъемки)

Анализ параметров газа в процессе развития струи позволил установить, что форма возмущенных областей газа в расчете и эксперименте практически совпадает. Импульсный подпор газа за передним фронтом струи обеспечивает кратковременное «удержание» термодинамических параметров газа при сферическом фронте распространения возмущений. Скорость расширения области возмущения в случае ускорения потока возрастает незначительно. Это приводит к увеличению градиентов термодинамических параметров газа в области за сферическим фронтом ударной волны.

6. Выводы по результатам и направления дальнейших исследований

Впервые задача моделирования выбросов газообразных примесей в атмосферу рассмотрена в новой математической постановке, которая позволяет учесть взаимное влияние разных газодинамических процессов, возникающих при реализации производственных циклов или в результате аварийных ситуаций

на промышленных предприятиях. Эта математическая задача представляет собой систему уравнений газовой динамики, дополненную законом сохранения массы примеси и алгебраической моделью атмосферной турбулентной диффузии. Для неё построен и испытан вычислительным экспериментом новый эффективный алгоритм решения, разработанный на основе метода С.К.Годунова в сочетании с итеративной коррекцией граничных условий, позволяющий решать практические задачи с приемлемыми вычислительными затратами. Разработана компьютерная программа, реализующая различные сценарии возникновения и рассеяния газовых примесей в атмосфере. Полученные расчетные данные согласуются с известными экспериментальными результатами с приемлемой для практики точностью. Предложенное усовершенствование математических моделей данного класса может найти применение в задачах анализа трехмерных полей газодинамических параметров смеси во времени и пространстве при оценке масштабов последствий возможных техногенных аварий, формировании рекомендаций по организации и расположению опасных производств.

ЛИТЕРАТУРА

1. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М.З. Згуровский, В.В. Скопецкий, В.К. Хрущ, Н.Н. Беляев. – Киев: Наук. думка, 1997. – 319 с.
2. Акименко В.В. Математическое моделирование экологического состояния пограничного слоя атмосферы региона. – Луганск: Изд-во Восточноукр. гос. ун-та, 1998. – 192 с.
3. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. – М.: Наука, 1970. – 904 с.
4. Numerical Modeling of Hydrogen Release, Mixture and Dispersion in Atmosphere / E.A. Granovskiy, V.A. Lyfar, Yu.A. Skob, M.L. Ugrumov // Abstracts Book and CD-ROM Proceedings the International Conference on Hydrogen Safety. – Pisa (Italy). – 2005. – 10 p. (ICHS Paper No. 110021)
5. Берлянд М.Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы. – Ленинград: Гидрометеиздат, 1975. – 448 с.
6. Численное решение многомерных задач газовой динамики / С.К. Годунов, А.В. Забродин, М.Я. Иванов, А.Н. Крайко, Г.П. Прокопов. – М.: Наука, 1976. – 400 с.
7. Puttock G.S., Colenbrander G.W., Blackmore D.R. Marlin Sands experiments 1980: Dispersion results from continuous releases of refrigerated liquid propane // Heavy Gas and Risk Assessment. – 1980. – No. 11. – P. 147-161.
8. Witcofski R.D., Chirivella J.E. Experimental and Analytical Analyses of the Mechanisms Governing the Dispersion of Flammable Clods Formed by Liquid Hydrogen Spills // Int. J. Hydrogen Energy. – 1984. – Vol. 9, No. 5. – P. 425-435.
9. Safety and Security Analysis / Investigative Report by NASA on Proposed EPA Hydrogen-Powered Vehicle Fueling Station. Assessment and Standards Division Office of Transportation and Air Quality U.S. Environment Protection Agency, EPA420-R-04-016 October 2004. – 45 p.