

УДК 519.63, 536.46

Л.Ю. Катаева^{1,2}, С.А. Тарнаева¹, И.В.Кольчик¹

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗАГРЯЗНЕНИЙ В РЕЗУЛЬТАТЕ РАЗГЕРМЕТИЗАЦИИ ЦИСТЕРНЫ С ЯДОВИТЫМИ ХИМИЧЕСКИМИ ВЕЩЕСТВАМИ

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева¹,
Нижегородский филиал МИИТ, г. Москва²

Излагаются результаты численного моделирования динамики термика, образующегося в результате разгерметизации железнодорожной цистерны с испаряющимися ядовитыми веществами на местности заданной геометрии под воздействием внешнего поля скоростей. Проведены анализ полученных результатов и их сопоставление с известными экспериментальными и теоретическими данными.

Ключевые слова: математическое моделирование, подстилающая поверхность, численное моделирование, рельеф, термик, ядовитые вещества.

Введение

Эксплуатация сложных технических систем, к которым относится железнодорожный транспорт, происходит в условиях динамического взаимодействия с окружающей средой. Техногенные катастрофы, случающиеся на железнодорожном транспорте, как и природные катастрофы, часто инициируют последовательную цепь взаимосвязанных катастрофических явлений. Такие катастрофы называются синергетическими (от греч. *synergetikos* – согласованно действующие). Поскольку выработка проектного ресурса основных фондов, в том числе и на железнодорожном транспорте, в Российской Федерации приближается к критической величине 50-80%, то опасность синергетических бедствий в РФ, вызванных техногенными катастрофами, неуклонно возрастает [1]. Потери от техногенных аварий и катастроф (взрывы, пожары, разрушения, выбросы радиоактивных и отравляющих веществ, крушения и др.) и природных катаклизмов (землетрясения, ураганы, сели, обвалы, оползни, наводнения и др.) ежегодно возрастают на 10-30%. Суммарная величина ежегодного материального ущерба от природных катастроф в РФ, как показывают экспертные оценки, составляет не менее 22–27 млрд долл. США.

Особенностью моделирования катастроф как природных, так и техногенных является то, что, как правило, механизм явления и исходные данные, используемые для математического моделирования, известны со значительной погрешностью. Поэтому в данной работе используются простые математические модели, которые получаются путем упрощения более точных, но в то же время более сложных математических моделей. Например, для прогноза лесной пожарной опасности в данной работе используется общая математическая модель лесных пожаров [2], которая значительно упрощается с помощью физически содержательных допущений.

Постановка задачи и особенности численного моделирования динамики лесного пожара

Предположим, что в результате аварии произошла разгерметизация железнодорожной цистерны с испаряющимися ядовитыми веществами. Под разгерметизацией будем подразумевать образование трещины или разрыв контейнера. Если в контейнере образовалась трещина, то в результате взаимодействия с окружающей средой внутри контейнера в ядовитом

веществе начинает образовываться каверна, а в окружающую среду попадают газообразные и дисперсные продукты химических реакций, т.е. образуется термик содержащий:

- 1) газообразные компоненты;
- 2) пары воды;
- 3) ядовитые вещества в жидко-капельном состоянии;
- 4) кислород;
- 5) азот;
- 6), 7) два вида дисперсных частицы ядовитого вещества.

Основной силой, влияющей на движение термика, считается подъемная сила. Перемещение термика происходит настолько медленно, что давление внутри термика остается равным давлению окружающей среды P_e и в то же время настолько быстро, что остальные характеристики – температура, плотность – не успевают выравняться с их значениями в окружающей среде. Температура и плотность одинаковы во всех точках термика и меняются только с течением времени, т.е. термик моделируется материальной точкой переменной массы. Коэффициент вовлечения берут обратно пропорциональным радиусу термика, равным $(0.6/R_T)$, где R_T – радиус термика.

Математическая модель данной задачи [1, 2] включает в себя две системы уравнений: для каверны и для термика. Математическая модель для разгерметизации контейнера включает в себя уравнение термохимического разрушения границы раздела сред внутри образовавшейся полости (каверны) после разгерметизации, уравнений выражающих законы сохранения массы отдельных компонентов в дифференциальной форме, уравнение сохранения энергии, уравнение состояния идеального газа, а также алгебраических выражений

$$\rho_s \frac{dr}{dt} = (1 - \varphi)R_w + \varphi R_{1w}, \quad r(0) = r_H, \quad (1)$$

$$\frac{dm_j}{dt} = S_6 v_j R_{1w} + I_j S_0 + c_j Q_j + f_j R_w, \quad j=1,2,3, \quad m_j(0) = m_{jH}, \quad i=1, \dots, 6, \quad (2)$$

$$mc_p \frac{dT}{dt} = V \frac{dP}{dt} + Q_j c_p T - I_T S_0 + S_6 q_1 R_{1w} - q_w (1 - \varphi)(S - S_0) R_w, \quad T(0) = T_H, \quad (3)$$

$$P = \frac{\rho_\Gamma RT}{M}, \quad (4)$$

$$m = \sum_{\alpha=1}^6 m_\alpha, \quad p_\alpha = P x_\alpha, \quad x_\alpha = \frac{c_{\alpha\Gamma}}{M_\alpha \sum_{\alpha=1}^5 c_{\alpha\Gamma} / M_\alpha}, \quad \frac{1}{M} = \sum_{\alpha=1}^5 \frac{c_{\alpha\Gamma}}{M_\alpha}, \quad c_{\alpha\Gamma} = \frac{m_\alpha}{\sum_{i=1}^5 m_i}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, 5. \quad (5)$$

Для контроля точности расчетов использовалось для объема каверны интегральное уравнение, а для массы выброса вредных веществ – дифференциальное:

$$V = V_H + \frac{1}{3\rho_s} (6\sqrt{\pi})^{2/3} \int_0^t [(1 - \varphi)R_w + \varphi R_{1w}] dt. \quad (6)$$

$$\frac{dm}{dt} = (S - S_0)(1 - \varphi)R_w + Q_j, \quad j=1,2,3, \quad m(0)=m_H, \quad (7)$$

здесь ρ_s – плотность кристаллического ядовитого вещества; r – радиус сферической каверны внутри контейнера в любой момент времени; t – время, R_w – массовая скорость гетерогенного процесса, $\text{кг}/\text{м}^2\text{с}$; V_w – линейная скорость термохимического и механического разрушения кристаллического вещества; k_s – коэффициент механического диспергирования; Cp_s – удельная теплоемкость кристаллического реагирующего вещества; $m_\alpha = \rho_\alpha V$ – масса химических компонентов внутри каверны; V – объем каверны; $S - S_0$ – площадь внутренней поверхности каверны; S_0 – площадь выходного отверстия каверны; I_α ($\alpha=1, 2, \dots, 6$) – скорость поступления (исчезновения) α – компонента в каверну в результате процессов диффузии; $-c_\alpha = \rho_\alpha / \rho$ – массовая концентрация α – компонента в каверне; ρ_α – парциальная плотность α – компонен-

та в каверне; $\rho = \sum_{\alpha=1}^7 m_{\alpha} / V$ – плотность газодисперсной смеси в каверне; $c_{\alpha T}$ – массовая концентрация газов в каверне; $x_{\alpha T}$ – молекулярная концентрация газов; p_{α} – парциальное давление α -компонента в каверне; P – общее давление газов в каверне; M_{α} – моли (граммолекулы газов); M – средневзвешенное значение моля смеси газов в каверне; n_6 и n_7 – число частиц соответствующих веществ; ρ_{06} и ρ_{07} – истинные плотности частиц; S_6 – площадь поверхности всех частиц; S_7 – площадь поверхности всех частиц дисперсированного вещества; I_T – плотность теплового потока на границе, разделяющей газ в каверне с окружающей средой; V_0 – объем каверны в контейнере в начальный момент времени; Q_j – скорости истечения (втекания) газодисперсной смеси из каверны через отверстие в стенке контейнера; d_0 – диаметр отверстия; $P, \rho_{\Gamma} = \sum_{\alpha=1}^5 m_{\alpha} / V$ – давление и плотность смеси газов в каверне; P_e, ρ_e – давление и плотность смеси газов в окружающей среде; $\gamma = c_p / c_v$ – отношение удельных теплоемкостей газа в каверне при постоянном объеме и давлении; H – энтальпия газа в каверне; h_{α} – удельная энтальпия газа в каверне; $\nu_{\alpha} (\alpha = 2, 3, 6)$ – удельные стехиометрические коэффициенты химической реакции; индекс «н» приписывается начальным данным.

Кроме того, считалось, что выполняется равенство $Q_{je} = 0$ при $P = P_e$, где P – давление в каверне, а P_e – внешнее атмосферное давление, а тепло и массообмен с окружающей средой осуществляется только в результате процессов теплопроводности и диффузии.

Если начальное давление в каверне превышает атмосферное P_e , то газ из нее вытекает. Существует режим дозвукового вытекания газа из каверны, для которого имеет место следующее выражение для секундного расхода массы $Q_1 = F_1(\rho, P, P_e), P_e < P < P_{*1}$.

Следует отметить, что при некоторых давлениях P в каверне скорость истечения может стать равной критической скорости звука $a_{3\phi}$, секунднй расход $Q = Q_{*}$ газа сравняется

с критическим значением $Q_{*} = F_1(\rho, a_{*}), a_{3\phi} = a \sqrt{\frac{2}{\gamma + 1}}, \rho_{*} = \rho \left(\frac{2}{\gamma + 1} \right)^{\frac{1}{\gamma - 1}}$, где $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ – отношение теплоемкостей; a, ρ – скорость звука и плотность газа в каверне.

Наряду с режимом дозвукового и звукового истечения, имеет место режим дозвукового втекания газа в каверну со скоростью, в предположении втекании только чистого воздуха $Q_2 = F_2(\rho_e, P, P_e), P_e > P$. Если давление в каверне P значительно меньше P_e , то величина Q_2 может достигнуть своего критического значения. Здесь $\rho_e = 1.4$ – отношение теплоемкостей для воздуха, $a_e = \sqrt{2\gamma RT_e / M_e}$ – плотность и скорость звука в воздухе, окружающем контейнер; M_e – молярная масса воздуха; R – универсальная газовая постоянная.

Опишем подробно модель для распространения в атмосфере образующегося ядовитого облака. Выброс веществ, образующихся в каверне, может носить пульсирующий характер, поэтому в приземном слое атмосферы может быть несколько термик, которые можно объединить в один “эффективный” термик, центр массы которого определяется с использованием

координат и масс каждого термика: $\vec{r}_{\text{эф}} = \frac{\sum m_e^{(i)} \vec{r}_i}{M_{\text{эф}}}, M_{\text{эф}} = \sum_{i=1}^{N_T} m_e^{(i)}$, где $\vec{r}_i, m_e^{(i)}$ – радиус-вектор центра масс и масса i -го термика; $\vec{r}_{\text{эф}}, M_{\text{эф}}$ – радиус-вектор центра масс и масса суммарного («эффективного») термика).

Уравнения сохранения массы газообразных веществ имеют вид

$$\frac{dm_{ie}}{dt} = \alpha_{Bi} |v| m_{ie} - I_i S_0 - c_i Q_j - \nu_i S_{6e} R_{1w}, m_i(0) = m_{ie}, i = 1, 6.$$

где $I_i S_0 + c_i Q_j$ – массовые скорости выброса соответствующих веществ в атмосферу из контейнера в результате конвекции и диффузии; v_i – стехиометрические коэффициенты; R_{1w} – массовая скорость реакции гидролиза в термике; S_{6e} – суммарная поверхность частиц, на которых имеет место реакция; αB – коэффициент вовлечения воздуха в термик; $I_i S_0 + c_i Q_j$ – массовая скорость выброса веществ из каверны; $|v|$ – модуль скорости движения термика в атмосфере; α_B – коэффициент вовлечения газообразных веществ в термик; h_n – высота расположения отверстия, через которое происходит выброс вредных веществ в атмосферу; z – вертикальная координата центра масс термика; $v_{z6} = \frac{18g\mu}{\rho_6^{(0)}d_6}$ – вертикальная скорость оседания (седментации) частиц по Стоксу; g – ускорение силы тяжести; d_6 – диаметр частиц; $\rho_6^{(0)}$ – истинная плотность частиц.

Будем использовать уравнение для общей массы всех компонентов двухфазного термика. Помимо m_α , необходимо определить выражения для текущего $V_I(t)$ и начального V_{1n} объемов. Для малых значений времени предполагается, что термик имеет форму шара, объем которого определяется по формулам

$$V_1 = \frac{4}{3}\pi r^3, r(t) = \left(\frac{3m_e}{4\pi\rho_e}\right)^{1/3}, V_1 = \frac{m_e}{\rho_e},$$

где $r(t)$ – радиус шара-термика; ρ – плотность газа и дисперсных частиц в термике.

Для определения плотности газодисперсной смеси ρ целесообразно использовать уравнение состояния по формуле Клапейрона-Менделеева и принцип аддитивности:

$$\rho_\Gamma = \frac{P_e M}{RT_1}, \frac{1}{M} = \sum_{\alpha=1}^5 \frac{c_{\alpha\Gamma}}{M_\alpha}, c_\alpha = \frac{m_\alpha}{m_\Gamma}, \rho_e = \rho_{\Gamma e} + \rho_{6e},$$

где M – молекулярная масса смеси газов; $c_{\alpha\Gamma}$ – массовая концентрация каждого компонента газовой фазы; R – универсальная газовая постоянная, $\rho_6 = \frac{m_6}{V_1}$ – плотность дисперсных частиц в облаке; $P = P_e(z)$ – атмосферное давление, которое считается известным из метеоданных.

Закон сохранения энергии

$$C_p \frac{dT_1}{dt} = \frac{1}{m_e} \left[q_1 S_{6e} R_{1w} - C_{pe} (T - T_1) S_0 Q + C_p (T_e - T_1) \frac{dm_e}{dt} \right] - g v_z \frac{T_1}{T_e}, T_1(0) = T_{1n}.$$

где v_z – проекция скорости движения центра масс термика на ось z ,

$C_{pe} = \sum_{\alpha=1}^N C_{p\alpha} c_{\alpha e}, c_{\alpha e} = \frac{m_{\alpha e}}{m}$ – массовая концентрация α – компонента в термике; S_{6e} – общая поверхность частиц; T_{1n} – начальная температура термика.

В последнем уравнении первый член в квадратной скобке представляет приток тепловой энергии вследствие экзотермической гетерогенной реакции на частицах, второй – характеризует приток энергии из каверны, наконец, последний член в квадратной скобке характеризует приток (отток) энергии вследствие разбавления вещества термика при его растворении в окружающей среде.

Результаты численного моделирования динамики облака ядовитых веществ и их анализ

Следует отметить, что данная система уравнений решалась с использованием модификации метода Кранка-Николсона. В данной работе представлены расчеты для одного из типов веществ, однако методика и разработанный программный продукт позволяют делать расчеты и для других химических веществ при условии, что известны скорости химических реакций.

Рассмотрим результаты расчетов при начальном давлении в каверне, совпадающим с давлением окружающей среды. В этом случае нет перетока массы из каверны в атмосферу, обусловленного движением газа, но тепло- и массообмен, благодаря теплопроводности и диффузии, компонентов имеет место. Начальные значения масс компонентов в первой серии расчетов, начального радиуса каверны r_n и радиуса отверстия в каверне a не варьировались и использовались следующие величины: $m_{1н}= 0$ кг, $m_{2н}=0.02 V_{нрe}$ кг, $m_{3н}= 0$ кг, $m_{4н}= 0.23 V_{нрe}$ кг, $m_{5н}= 0.75 V_{нрe}$ кг, $m_{6н}=0$, $\rho_e =1,29$ кг/м³, $rH=0.05$ м, $a=0.02$ м, $V_H = \frac{4}{3}\pi r_H^3 - \frac{\pi}{3}r_H^2(1-\cos\alpha)^2(3r_H - r_H(1-\cos\alpha))$, $\alpha = \arcsin\left(\frac{a}{r_H}\right)$.

Предполагаем, что начальная температура в каверне также совпадала с температурой окружающей среды T_e , которая принимала следующее значение: $T_e=209^\circ\text{K}$, $T_e=309^\circ\text{K}$ и $T_e=800^\circ\text{K}$.

Из анализа кривых (рис. 1) следует, что установление температуры происходит как для зимних погодных условий ($T_e= -218^\circ\text{K}$, т.е. -55°C), так и для летних погодных условий ($T_e=318^\circ\text{K}$), а также в условиях пожара, когда в окружающей среде температура достигает 800°K . Время установления составляет несколько миллисекунд, причем с ростом T_e время установления растет. Малость значений этой величины объясняется ограниченностью выражения для скорости химической реакции и свойствами рассматриваемого химического вещества. Величина R_{1w} не зависит от температуры и поэтому описывает только диффузионный режим гетерогенной реакции. Любопытным является тот факт, что в условиях пожара температура внутри каверны растет, что может быть объяснено притоком тепла от реакции. Результаты расчетов показали, что приток тепла в результате реакций может спровоцировать повторное загрязнение в результате взрыва.

Из рис. 2 видно, что при температуре окружающей среды 800 К кривая для m_2 практически сливается с осью ординат, и в итоге величины m_2 и m_3 принимают стационарные значения, причем значение m_3 малы, что обусловливается малостью начальной массы паров воды в каверне. На рис. 3 и рис. 4 даны графики $m_4(t)$, $m_5(t)$ для различных температур.

Расчеты показали, что при пожаре может иметь место бурный рост массы газообразного ядовитого вещества, что обусловлено взрывным характером рассматриваемого процесса.

Представляют интерес результаты расчетов движения облака, образовавшегося при выбросе газообразных и дисперсных продуктов химических реакций. При расчете скорость ветра в атмосфере полагалось $z_0=0.1$ м; $v_1=2$ м/с (кривые 1) и $v_1=3.2$ м/с (кривые 2), что соответствует всем рисункам данного подраздела.

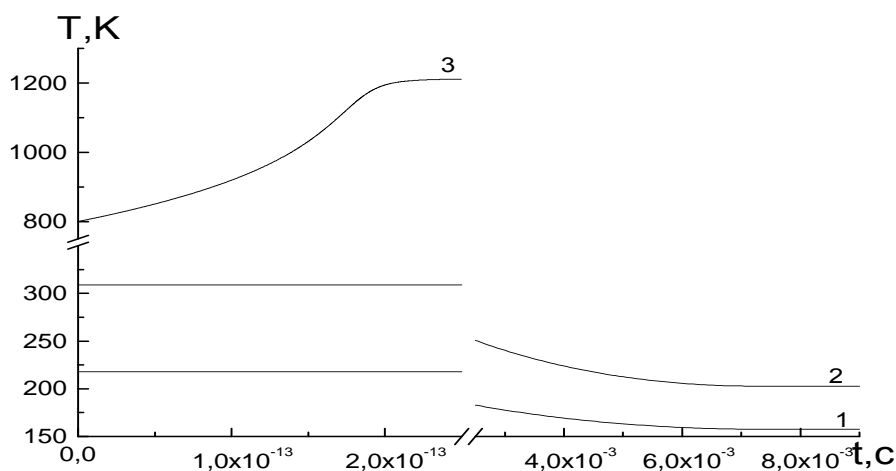


Рис. 1. Изменение температуры в каверне от температуры окружающей среды: кривая 1 соответствует температуре окружающей среды 218°K ; 2 - при температуре окружающей среды 309°K ; 3 - при температуре окружающей среды 800°K

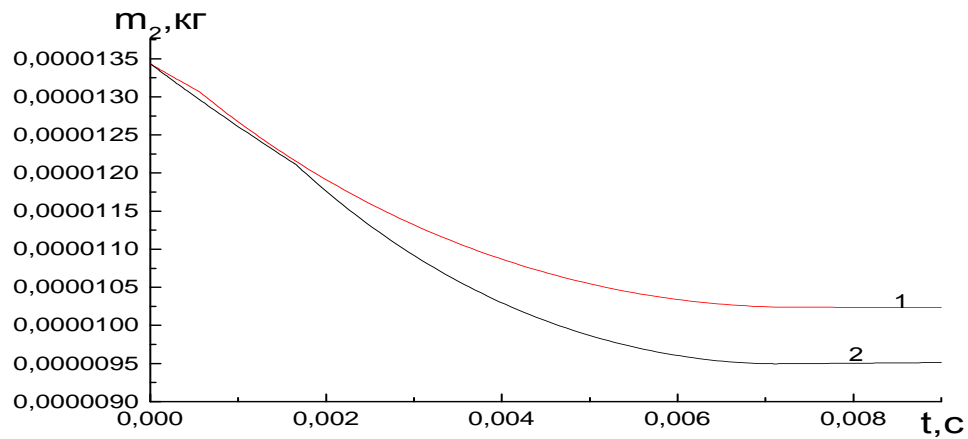


Рис. 2. Изменение массы паров воды в каверне при различных значениях окружающей среды:
 1 - при температуре 218 К; 2 - при температуре 309 К

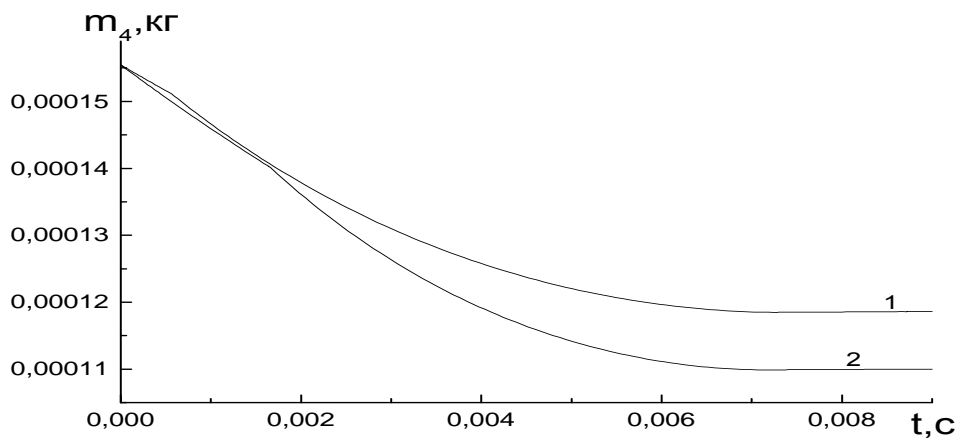


Рис. 3. Изменение массы кислорода в каверне при различных значениях окружающей среды:
 1 - при температуре 218 К; 2 - при температуре 309 К

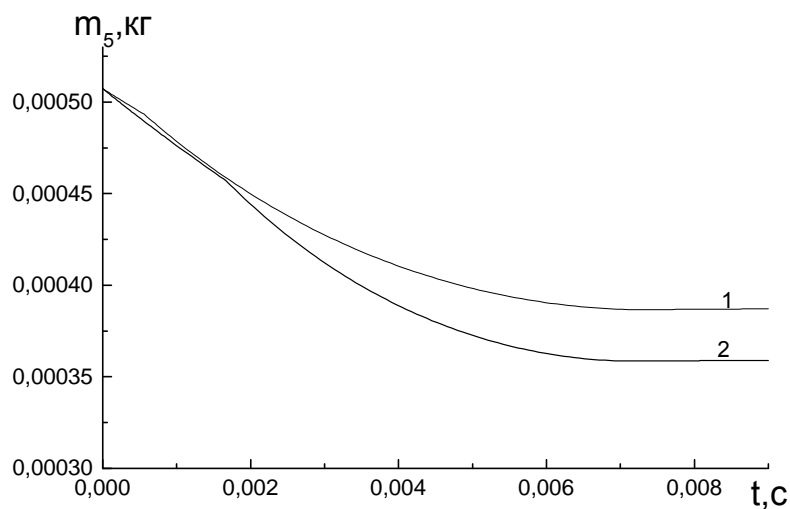


Рис. 4. Изменение массы азота в каверне при различных значениях окружающей среды:
 1 - при температуре 218 К; 2 - при температуре 309 К

Использовались следующие значения параметров, определяющих решение задачи: $r_0=0.05$ м, радиус отверстия в каверне $a=0.02$ м, $P_e=101360$ Па, $q_{1w}=599,4 \cdot 10^3$ Дж/кг, $q_{1w}=15,179 \cdot 10$ Дж/кг, $\mu_e=17,3$ кг/м·с, $\varphi=0.01$, $\theta=350$, $\Omega=1.157 \cdot 10^{-5}$ с⁻¹, высота расположения отверстия из каверны $h^*=1,65$ м.

Рис. 5 общая (суммарная) масса термика в зависимости от времени: при ($v_1=2$ м/с (кривая 1) и при ($v_1=3.2$ м/с (кривая 2). Видно, что общая масса термика растет с ростом времени вследствие вовлечения в термик компонентов воздуха. Однако значения скорости ветра практически не влияют на изменение массы термика, что согласуется с априорными физическими соображениями.

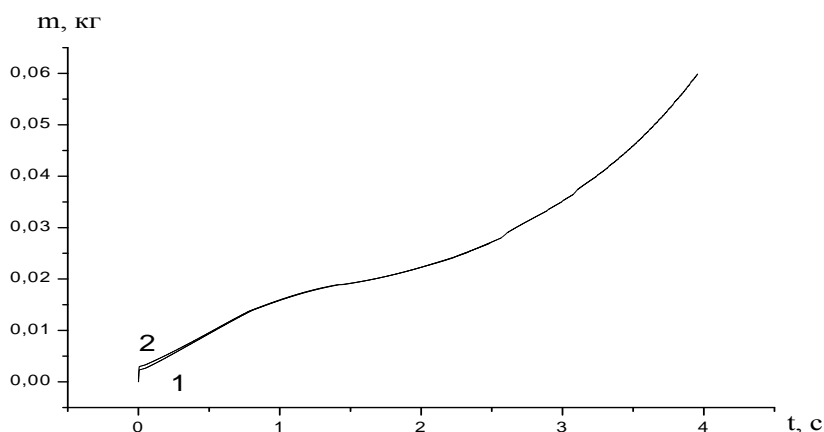


Рис. 5. Изменение суммарной масса термика в зависимости от времени:

1 – $v_1=2$ м/с; 2 – $v_1=3.2$ м/с

Таким образом, знание траектории полета позволяет определить территорию, зараженную вредными веществами после аварии. Проектируя траекторию полета термика на эту поверхность земли и, учитывая текущий радиус облака вредных веществ, найдем площадь зоны заражения вредными веществами в любой момент времени.

Следует отметить, что в данной работе рассматривались вещества с большой плотностью, сосредоточенные в термике, именно этот факт определял малость высоты его подъема и характеризовал параметры его полета.

Таким образом, было получено, что термик, скорее, течет вблизи подстилающей поверхности, чем летит. Эта особенность полета облака рассматриваемых вредных веществ усиливает негативные экологические последствия, возникающие при разгерметизации контейнеров с такими ядовитыми веществами.

Библиографический список

1. Новая парадигма развития России (комплексные проблемы исследования проблем устойчивого развития) / под ред. В.А. Коптюга, В.М.Матросова, В.К.Левашова. – М.: «Академия», Иркутск: РИЦ ГП «Облформпечать», 2000.
2. Катаева, Л.Ю. Исследование влияния окружающей среды и слоя инверсии на параметры движения односкоростного, однотемпературного и однофазного термика / Л.Ю. Катаева, Е.М. Алексеев // Сопряженные задачи механики и экологии: сб. избранные доклады международной конференции. – Томск, 2000. С. 175-189.
3. Гришин, А.М. Отчет о НИР по х/д №306/1 / А.М. Гришин [и др.] // Математическое моделирование негативных экологических последствий аварий при хранении отвалного гексафторида урана на открытой площадке СХК. Кн.1. Номер госрегистрации У82674. Томск. 1999.

4. **Гришин, А.М.** Отчет о НИР по х/д №306/1 / А.М. Гришин [и др.] // Математическое моделирование негативных экологических последствий аварий при хранении отвального гексафторида урана на открытой площадке СХК. Кн. 2. Номер госрегистрации У82674. Томск. 1999.
5. **Холл, Дж.** Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений / Дж. Холл, Дж. Уайт. – М.: Мир, 1979.
6. **Катаева, Л.Ю.** О прогнозе безопасных расстояний от фронта лесного пожара // Пожары в лесу и на объектах лесохимического комплекса: возникновение, тушение и экологические последствия: мат. международной конференции. – Томск: ТГУ, 1999. С. 78-84.
7. **Гришин, А.М.** Математическое моделирование распространения вредных примесей в атмосфере при разгерметизации контейнеров с гексафторидом урана / А.М. Гришин [и др.] // Сопряженные задачи механики и экологии: сб. тезисов международной конференции. Томск, 2000. С. 85-87.
8. **Гришин, А.М.** Исследование процесса образования и распространения выброса вредных веществ в атмосфере при разгерметизации контейнеров / А.М. Гришин [и др.] // Четвертый Сибирский конгресс по прикладной и индустриальной математике. – Новосибирск: ИМ СО РАН, 2000.

*Дата поступления
в редакцию 15.05.2013*

L.Yu. Kataeva, S.A. Tarnaeva, I.V.Kolchik

FEATURES OF RADIATION OF FOREST FIRES

Nizhny Novgorod state technical university n.a. R.E. Alexeev

Purpose: Numerical modeling of the dynamics buoyant thermal formed as a result of leaks from the rail tank evaporating toxic substances in the terrain given geometry under external velocity field. The analysis of the results and their comparison with known experimental and theoretical data.

Design/methodology/approach: The approach based on numeric solution of equations of motion of a reactive body of variable mass.

Findings: High density substances contained in a buoyant thermal cause it to flow over the surface of the ground

Research limitations/implications: Given calculations are relevant for buoyant thermal containing heavy particulates.

Originality/value : Developed a method evaluation of pollution as a result of leaks on the basis of solving this problem.

Key words: underlying surface, numerical modeling, terrain, thermals, toxic substances.