

*Н. П. Савенкова¹, Ф. И. Высикайло², А. В. Кашилинов³,
А. В. Василенко⁴*

ЧИСЛЕННЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТЫ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ОБЛАКА CO₂ В НИЖНЕЙ АТМОСФЕРЕ ПО ДВУМ БЫСТРОДЕЙСТВУЮЩИМ МОДЕЛЯМ

Введение

По классификации парниковых газов, предложенной в рамках Парижских [1] и Киотских [2] соглашений, все парниковые газы делятся на три группы: первая группа – газы, плотность которых намного больше плотности воздуха (фреоны); вторая группа – газы, плотность которых существенно меньше плотности воздуха (метан), а третья группа включает в себя газы, плотность которых не значительно отличается от плотности воздуха (больше или меньше). Плотность углекислого газа в 1,5 раза превышает плотность воздуха.

Распространение в воздухе любого парникового газа ведет к ухудшению экологии и отрицательно влияет на здоровье человека. Поэтому так важно своевременно прогнозировать последствия промышленных аварий, сопровождающихся истечением газа в реальных условиях его распространения.

Простейшая нестационарная трехмерная математическая модель газовой динамики имеет вид [3]:

$$\frac{\partial \mathbf{U}}{\partial t} + \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial x} + \frac{\partial \mathbf{G}}{\partial y} + \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial z} = \mathbf{F}, \quad (1)$$

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho v \\ \rho w \\ \rho \\ \rho C \end{bmatrix}, \mathbf{E} = \begin{bmatrix} \rho u^2 \\ \rho uv \\ \rho uw \\ \rho u \\ \rho u C \end{bmatrix}, \mathbf{G} = \begin{bmatrix} \rho uv \\ \rho v^2 \\ \rho vw \\ \rho v \\ \rho v C \end{bmatrix}, \mathbf{H} = \begin{bmatrix} \rho uw \\ \rho vw \\ \rho w^2 \\ \rho w \\ \rho w C \end{bmatrix}, \mathbf{F} = \begin{bmatrix} F_u \\ F_v \\ F_w \\ F_\rho \\ F_C \end{bmatrix},$$

¹В.н.с. д.ф.-м.н. факультета ВМК МГУ имени М.В.Ломоносова, e-mail: mknandrew@mail.ru.

²Профессор МГОУ, e-mail: filvys@yandex.ru.

³МГУ имени М.В.Ломоносова, управление академической политики и организации учебного процесса, e-mail: kaschlinoff2011@yandex.ru.

⁴Студентка магистратуры ВМК МГУ имени М.В.Ломоносова, e-mail: ann.v.vasilenko@mail.ru.

где

$\rho = \rho(T, C)$ — плотность распространяющегося вещества;

$T = T_0 (= const)$ — температура;

C — концентрация;

$V = (u, v, w)$ — скорость;

F_u, F_v, F_w, F_p, F_C — внешние силы, действующие на систему и источники и стоки.

Однако численные реализации системы (1) требуют больших вычислительных мощностей, что не совместимо с требованиями мониторинга промышленной аварии. В настоящей работе исследуются результаты расчетов двух быстродействующих математических моделей, примененных для моделирования растекания углекислого газа.

Математическая постановка первой модели (однородной по высоте) сводится к решению нестационарной однородной по высоте двумерной системы в частных производных [4,5]. В ней учитываются рельеф местности, по которой происходит распространение углекислого газа; оседание газа под действием силы тяжести; смешение с атмосферой; трение газа о подстилающую поверхность и состояние атмосферы (ветер). Как будет показано в работе, такую модель эффективно использовать в случае наличия наземного источника углекислого газа. Все характеристики распространения аварии при этом соответствуют некоторому среднему по высоте слою облака газа. В этой модели расчеты существенно сокращаются по сравнению с трехмерной пространственной моделью (1).

Вторая математическая модель (неоднородная по высоте) является нестационарной и трехмерной по пространству. Ее математическая постановка сводится к решению только одного транспортного уравнения (уравнение переноса) [6,7] для концентрации углекислого газа. Эта модель эффективна для исследования динамики аварии с источником истечения газа, расположенном над поверхностью земли, хотя ее можно использовать и для наземного источника углекислого газа. Кроме ветра модель позволяет учитывать рельеф местности, трение и возможные химико-физические процессы, сопровождающие аварию.

Численные расчеты по обоим моделям были проведены на персональном компьютере. Использовался разностный метод решения второго порядка точности по времени и по пространству [8,9], позволяющий проводить расщепление шага по времени и по пространственным переменным, что очень важно для моделирования последствий аварий в условиях вытянутого рельефа и рельефа с особенностями.

Однородная по высоте математическая модель распространения углекислого газа

В данной математической модели CO_2 рассматривается в качестве тяжелого газа. В предположении, что изменение скорости частиц по вертикали незначительно, проинтегрируем уравнения системы (1) по высоте от рельефа местности до верхней границы облака.

Получим следующую осредненную по высоте систему уравнений [10]:

$$\begin{cases} \frac{\partial \rho u \delta}{\partial t} + \frac{\partial \rho u^2 \delta}{\partial x} + \frac{\partial \rho u v \delta}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + F_{D_u} + F_{u_{z_0}} + F_{u_H}, \\ \frac{\partial \rho v \delta}{\partial t} + \frac{\partial \rho u v \delta}{\partial x} + \frac{\partial \rho v^2 \delta}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + F_{D_v} + F_{v_{z_0}} + F_{v_H}, \\ \frac{\partial \rho \delta}{\partial t} + \frac{\partial \rho u \delta}{\partial x} + \frac{\partial \rho v \delta}{\partial y} = Q, \\ \frac{\partial \rho C \delta}{\partial t} + \frac{\partial \rho u C \delta}{\partial x} + \frac{\partial \rho v C \delta}{\partial y} = Q_C + F_{D_C} + F_{C_H}, \\ \rho = \frac{\rho_0}{1 + (\frac{M_0}{M} - 1)C}, \end{cases} \quad (2)$$

где

$H(x, y, t)$ — верхняя граница облака вещества,

$z_0(x, y)$ — нижняя граница облака;

$\delta(x, y, t) = H(x, y, t) - z_0(x, y)$ — толщина облака;

$\mathbf{V} = (u, v)$ — скорость облака;

$u = u(x, y, t), \quad v = v(x, y, t) \quad \forall z \in [z_0, H]$ — компоненты скорости;

$\rho = \rho(x, y, t)$ — плотность распространяющегося вещества,

$T \equiv T_0(= const)$ — температура;

ρ_0 — плотность окружающей среды;

$C = C(x, y, t)$ — относительная массовая концентрация вещества облака;

M, M_0 — молярная масса вещества и окружающей среды, соответственно;

$Q = \rho w|_{z=z_0 \in S_0}$ — массовая скорость поступления вещества источника;

$Q_C = \rho w C|_{z=z_0 \in S_0}$ — массовая скорость обмена облака с подстилающей поверхностью;

w — мощность источника.

Формулы градиента давления [11]:

$$\begin{cases} \frac{\partial p}{\partial x} = \frac{g}{2} \frac{\partial(\rho - \rho_0) \delta^2}{\partial x} + g(\rho - \rho_0) \delta \frac{\partial z_0}{\partial x}, \\ \frac{\partial p}{\partial y} = \frac{g}{2} \frac{\partial(\rho - \rho_0) \delta^2}{\partial y} + g(\rho - \rho_0) \delta \frac{\partial z_0}{\partial y}, \end{cases}$$

g — ускорение свободного падения.

$F_{D_u}, F_{D_v}, F_{D_C}$ — осредненные диффузионные члены для u, v и C определяются формулой [12]:

$$F_* = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho \mu \frac{\partial *}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho \mu \frac{\partial *}{\partial y} \right),$$

μ — коэффициент турбулентной диффузии.

$F_{z_0} = (F_{u_{z_0}}, F_{v_{z_0}})$ — сила трения вещества о подстилающую поверхность:

$$\begin{bmatrix} F_{u_{z_0}} \\ F_{v_{z_0}} \end{bmatrix} = -\xi_H \rho \sqrt{u^2 + v^2} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix},$$

ξ_H — коэффициент трения о подстилающую поверхность.

$F_H = (F_{u_H}, F_{v_H}, F_{C_H})$ — сила трения вещества с окружающей средой на верхней границе облака при наличии движения окружающей среды со скоростью $V_0 = (u_0, v_0)$:

$$\begin{bmatrix} F_{u_H} \\ F_{v_H} \\ F_{C_H} \end{bmatrix} = -\xi \rho_0 \sqrt{(u - u_0)^2 + (v - v_0)^2} \begin{bmatrix} u - u_0 \\ v - v_0 \\ C \end{bmatrix},$$

ξ — коэффициент трения вещества с окружающей средой.

Задача (2) решалась методом расщепления по физическим процессам [6].

Смысл данного метода заключается в том, что на каждом временном шаге система разбивается на этапы. Каждый этап учитывает одно из указанных ниже физических явлений, оказывающих воздействие на распространяющийся газ. На каждом из выделенных этапов решается подсистема исходной системы. В качестве начальных данных на последующих этапах используются решения, полученные на предыдущем этапе. В системе уравнений (2) учитываются следующие внешние факторы: неоднородность рельефа, диффузия, трение о подстилающую поверхность, трение на верхней границе облака, влияние ветра и наличие источника.

Рассматривается задача со свободной границей. Начальные условия считаются заданными (например, константы δ_0, C_0, u_0, v_0). Ниже обсуждаются результаты двух численных экспериментов, проведенных при помощи рассмотренной модели.

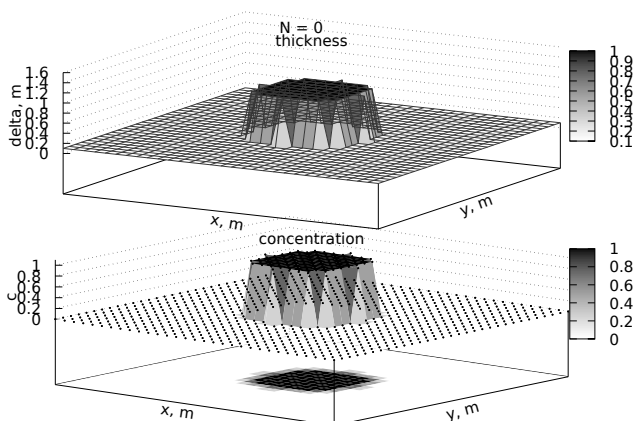


Рис. 1. Начальные условия для обоих экспериментов. Количество узлов по обеим осям = 31; шаги по пространству = 1,0 м

Начальные условия ($N = 0$) для толщины (верхний график) и концентрации (нижний) облака представлены на рисунке 1. Начальные скорости считаются нулевыми. Рассматривается область 30,0 на 30,0 м. Центр облака расположен в точке с координатами $x = 15,0$ и $y = 15,0$ м. Сетка имеет по каждому направлению 31 узел и шаги по обеим осям равны 1,0 м. Радиус облака равен 5,0 м, а высота равна 1,0 м.

Результаты численного расчета первого эксперимента через 62 шага по времени ($N = 62$) представлены на рисунке 2. Растекание происходит на ровной поверхности при отсутствии ветра.

Результаты второго численного эксперимента через 68 шагов представлены на рисунке 3. Данный эксперимент проводился при наличии ветра на местности с рельефом. Центр препятствия расположен в точке с координатами 6,0 и 12,0 м. Высота равна 1,5 м. В основании преграды лежит круг с радиусом равным 1,2 м (см. темный цилиндр). Ветер сонаправлен с вектором, соединяющим центр облака и начало координат. Его модуль приблизительно равен 0,5 м/с.

Во время первого эксперимента происходит полное растекание облака по местности. Во втором эксперименте также наблюдается полное растекание, но при этом осуществляется огибание препятствия облаком газа и последующее смыкание облака CO_2 за преградой. Концентрация под преградой остается равной нулю (белый цвет). Далее рукава газа смыкаются, что наглядно видно на рисунке 3. Из-за того, что ветер сдувает CO_2 в сторону начала координат, то можно наблюдать, что в противоположном углу области относительно начала координат концентрация CO_2 также приближена к нулю.

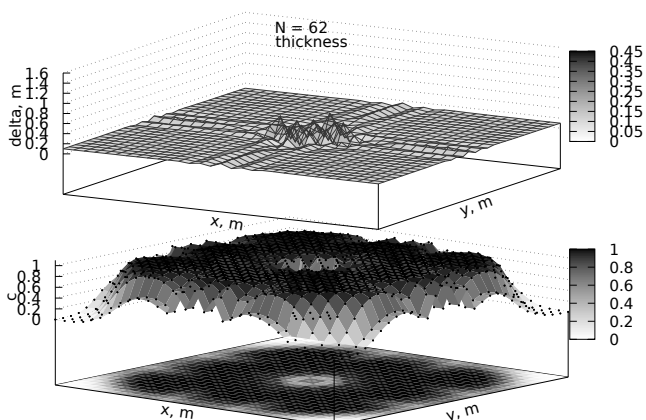


Рис. 2. Изменение толщины и концентрации облака газа под собственной силой тяжести на 62 шаге по времени. Количество узлов по обеим осям = 31; шаги по пространству = 1,0 м

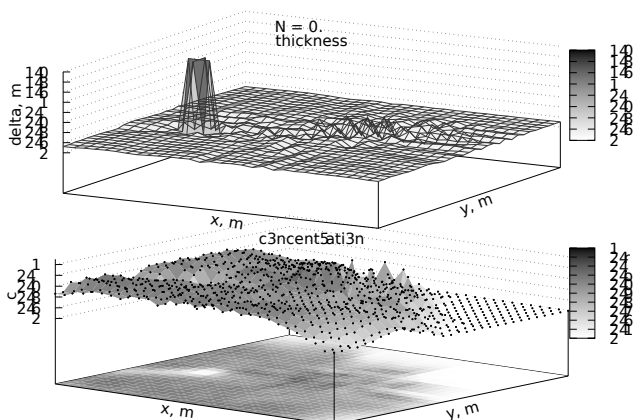


Рис. 3. Изменение толщины и концентрации облака газа при наличии препятствия и ветра на 68 шаге по времени. Количество узлов по обеим осям = 31; шаги по пространству = 1,0 м

Неоднородная по высоте математическая модель распространения углекислого газа

Математическая постановка второй модели сводится к решению нестационарного трехмерного уравнения в частных производных (3), в котором учитывается смешение углекислого газа с атмосферой, трение газа о рельеф, состояние атмосферы (ветер), действующий источник поступления газа [6]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + ((\mathbf{W} - \mathbf{W}_g), \text{grad}C) - \text{div}(K \text{grad}C) = Q + F_s + F_h, \quad (3)$$

Рассматривается задача со свободной перемещающейся в пространстве границей:

$$C|_{\Gamma}(x, y, z, t) = 0.$$

Начальные условия считаются заданными.

Здесь:

$C = C(x, y, z, t)$ — безразмерная концентрация углекислого газа;

$\mathbf{W}$ — скорость ветра;

$\mathbf{W}_g = (0, 0, w_g)$ — скорость осаждения газа под действием силы тяжести;

$K = \text{diag}(K_x, K_y, K_z)$ — линейный оператор, характеризующий интенсивность диффузии газа по направлениям, в том числе и турбулентной диффузии;

F_s — сила трения о подстилающую поверхность;

F_h — функция смешения облака газа с атмосферой.

Уравнение (3) решается методом разбиения по физическим процессам. На первом этапе решается уравнение конвекции-диффузии при помощи разностного метода второго порядка по пространству и по времени. На всех последующих этапах последовательно учитываются влияние трения, смешение с атмосферой и т.д. При этом решаются задачи Коши с помощью метода Рунге-Кутты 4-го порядка точности. Ниже приводятся результаты расчетов двух численных экспериментов.

В обоих численных экспериментах расчетная область имела размер $30,0 \times 30,0 \times 30,0$ м. Шаг расчетной сетки по каждому направлению пространства — 0,25 м. Численные эксперименты проводятся при наличии ветра. Рельеф выбираем плоским, трением и смешением облака с атмосферой пренебрегаем. Вертикальная скорость осаждения облака под действием силы тяжести — 50 м/с. Коэффициент диффузии углекислого газа в воздухе — $1,5 \cdot 10^{-4}$ м²/с, коэффициент турбулентной диффузии выбран равным $1,5 \cdot 10^{-3}$ м²/с.

В первом численном эксперименте в начальный момент времени происходит мгновенный выброс углекислого газа в центре области, в результате которого образуется облако газа, имеющее форму шара с радиусом 5,0 м, расположенное вблизи земной поверхности. Центр облака находится на высоте 5,0 м. Например, моделируется выброс газа из трубы на поверхности Земли. В начальный момент времени

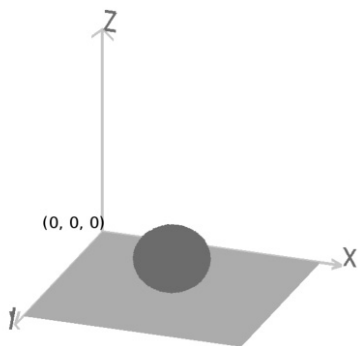


Рис. 4. Начальная форма облака в момент времени $t = 0$

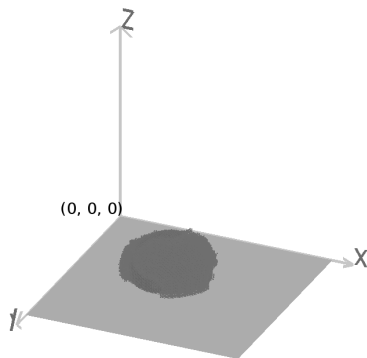


Рис. 5. Форма облака спустя 60 вычислительных шагов

обезразмеренная концентрация газа в облаке выбирается равной единице. Перемещение облака газа происходит под действием турбулентной диффузии и постоянно действующего ветра 10,0 м/с. Направление ветра сонаправленно радиус-вектору $(-1, -1, 0)$ параллельно поверхности Земли.

На рисунке 4 изображено облако углекислого газа в начальный момент времени. На поверхности, в центре области, расположено облако, образовавшееся в результате выброса. Облако начинает распространяться в пространстве под действием процессов диффузии и ветра.

На рисунке 5 представлено это же облако газа спустя 60 вычислительных шагов по времени. Наблюдается расширение облака под действием процессов диффузии, смещение к точке начала координат под действием ветра и растекание по орографически неоднородной поверхности под действием силы тяжести и диффузии. При этом максимальная высота облака 1,0 м, а ширина 15,0 м. Центр облака переместился на 10,0 м в направлении ветра от начального положения.

На рисунке 6 представлены концентрации углекислого газа на фиксированной высоте (5,0 м) в различные моменты времени. Изначально на данной высоте располагался центр облака. Демонстрируется изменение величины концентрации газа в облаке в точках, расположенных на прямой, параллельной диагонали расчетной области.

Со временем облако газа опускается вниз, при этом наблюдаемая ширина облака на высоте 5,0 м уменьшается. Спустя 60 вычислительных шагов, концентрация газа на данной высоте практически равна нулю. Заметим, что сила тяжести в данных экспериментах оказывает на облако гораздо большее влияние, чем ветер.

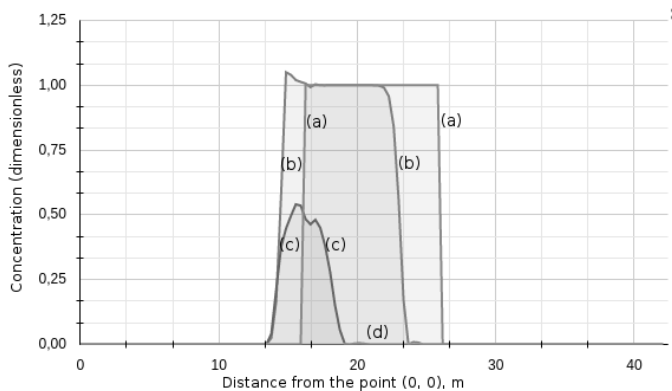


Рис. 6. Концентрации CO_2 по диагонали расчетной области на высоте 5,0 м в зависимости от времени: (a) — расчет при $t = 0$; (b) — расчет спустя 20 вычислительных шагов; (c) — спустя 40 вычислительных шагов; (d) — спустя 60 вычислительных шагов

Во втором численном эксперименте по данной математической модели исследуется выброс углекислого газа, при котором образуется облако на некотором удалении от поверхности (в середине расчетной области). В представленном эксперименте центр облака расположен на высоте 15,0 м от поверхности (например, моделируется выброс газа из вертикальной трубы). Состояние атмосферы соответствует первому численному эксперименту. Перемещение облака газа происходит под действием диффузии и постоянно действующего ветра 10,0 м/с, сонаправленного радиус-вектору $(-1, -1, 0)$.

На рисунке 7 изображено облако углекислого газа в начальный момент времени. В центре области расположено облако углекислого газа, образовавшееся в результате выброса. Облако начинает распространяться в пространстве под действием процессов диффузии и ветра.

На рисунке 8 представлено это же облако газа спустя 60 вычислительных шагов по времени. Наблюдается расширение облака под действием процессов диффузии. Смещение центра облака к точке начала отсчета происходит под действием ветра, а опускание вниз происходит под действием силы тяжести. В этот момент времени нижняя граница облака достигла поверхности. Максимальная концентрация углекислого газа наблюдается в окрестности центра облака.

На рисунке 9 представлены величина концентрации углекислого газа в облаке, на прямой, параллельной диагонали расчетной области, на высоте локализации центра облака h в разные моменты времени. Наблюдается расширение размера облака с течением времени на высоте

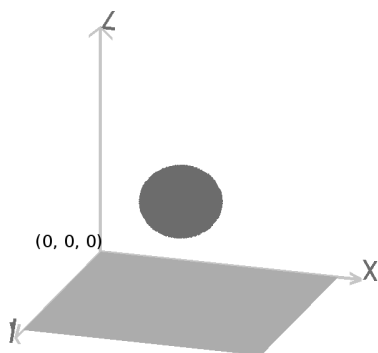


Рис. 7. Начальная форма облака в момент времени $t = 0$

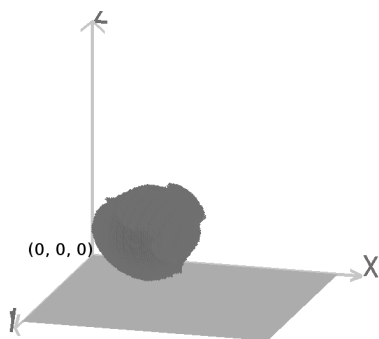


Рис. 8. Форма облака спустя 60 вычислительных шагов

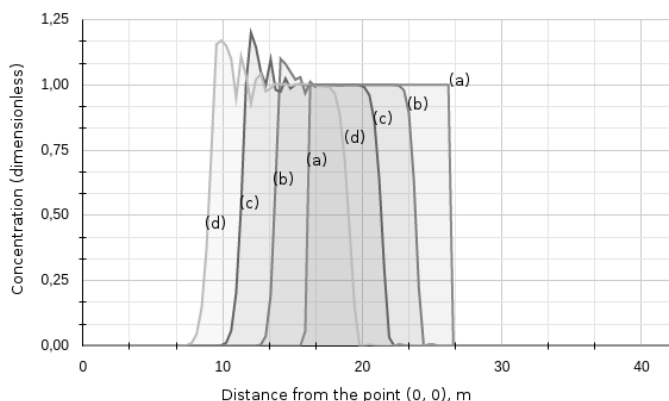


Рис. 9. Концентрация облака CO_2 по диагонали расчетной области. Здесь h — высота центра облака относительно поверхности; (a) — результат расчета при $t = 0, h = 15,0$ м; (b) — результат расчета спустя 20 вычислительных шагов, $h = 12,5$ м; (c) — результат расчета спустя 40 вычислительных шагов, $h = 10,0$ м; (d) — результат расчета спустя 60 вычислительных шагов, $h = 7,5$ м

его центра по диагонали расчетной области (в соответствующий момент времени ширина равна 10,0 м, спустя 60 вычислительных шагов — 15,0 м), сопровождающееся смещением облака к точке начала координат. При этом значение концентрации уменьшается в направлении от центра к краю облака.

Выводы

Численные эксперименты, проведенные по представленным в работе быстродействующим моделям, показывают, что эти модели могут быть эффективны на практике при мониторинге промышленных аварий, сопровождающихся выбросами и утечкой углекислого газа с учетом рельефа и застройки местности, а также розы ветров. В зависимости от вида аварии быстрый мониторинг можно проводить по первой или по второй модели. Из анализа проведенных численных экспериментов следует, что первая математическая модель ориентирована на расположение источника газа на поверхности и позволяет определять скорость распространения газа в горизонтальных направлениях, а также конфигурацию облака газа и его концентрацию. Вторая математическая модель применима для любого вида локализации источника газа (на поверхности земли, надземного) и позволяет определять только концентрацию газа в любой точке трехмерного пространства и конфигурацию облака газа.

Представляется целесообразным проводить не только мониторинг случившихся аварий с целью принятия управляющего решения, но и предварительное моделирование последствий возможных аварий для выработки упреждающих мероприятий.

Литература

1. *Текст проекта соглашения, принятого в Париже*
<http://unfccc.int/resource/docs/2015/cop21/rus/109r.pdf>
2. *Киотский протокол к Рамочной конвенции Организации Объединенных Наций об изменении климата*
<http://unfccc.int/resource/docs/convkp/kprus.pdf>
3. Самарский А. А., Попов Ю. П. Разностные методы решения задач газовой динамики: Учеб. пособие. — 3-е изд., доп. М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1992. — 424 с.
4. Доброчеев А. А., Кулешов А. А., Леякин А. Л., Скакун А. Е. Двумерная модель распространения облака тяжелого газа при промышленных авариях // Организация научных исследований и разработок индустриальный риск. 1990.
5. Доброчеев О. В., Кулешов А. А., Савенкова Н. П., Филиппова С. В. Двумерная модель рассеяния тяжелых газов на топографически

- неоднородной поверхности Земли // Матем. моделирование. 1996. Т. 8 № 5. С. 91–105
6. *Марчук Г. И.* Математические модели в проблеме окружающей среды. — М.: Наука, 1982.
 7. *Starchenko A. V. et al* A Supercomputer-Based Modeling System for Short-Term Prediction of Urban Surface Air Quality // *Supercomputing Frontiers and Innovations*. 2022. Т. 9 № 1. С. 17-31.
 8. *Андерсон Д., Таннехилл Д., Плетчер Р.* Вычислительная гидромеханика и теплообмен: В 2-х т.: Пер. с англ.: Мир, 1990.
 9. *Самарский А. А., Гулин А. В.* Численные методы математической физики. — М.: Научный мир, 2003.
 10. *Кулешов А. А.* Математическое моделирование в задачах промышленной безопасности и экологии // *Информационные технологии и вычислительные системы*. 2003.
 11. *Савенкова Н. П.* Численные исследования устойчивости некоторых физико-технических систем: дис. д-р. ф.-м. наук: 2004.
 12. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Гидродинамика. М.: Наука, 1986.