

**ЧИСЛЕННАЯ ГИДРОДИНАМИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ АТМОСФЕРНОЙ
ДИСПЕРСИИ ЗАГРЯЗНЕНИЙ ВОКРУГ ЗДАНИЙ**

Annotation. The computational fluid mechanics model of is atmospheric dispersion in the vicinity of buildings is developed. The validation of model against field experiment was performed. The application of model to problem of estimation of concentration near contaminated buildings located at the territory of Pridneprovsky Chemical Plant is presented.

Ключевые слова. Вычислительная гидродинамика, атмосферная дисперсия, метод конечных объемов, турбулентные течения

Вступление Численные гидродинамические модели все активнее используются для расчета атмосферного переноса загрязнений в условиях городской застройки. Несмотря на большое количество моделей и работ, посвященных этому вопросу [1] качество получаемых результатов до сих пор оставляет желать лучшего. Это обстоятельство связано со сложностью турбулентных течений в окрестности препятствий. Кроме того, применение одних и тех же исходных уравнений часто приводит к различным результатам вследствие сложностей численной аппроксимации исходных нелинейных уравнений. Поэтому, существует необходимость развития новых гидродинамических моделей таких течений как для решения практических задач, так и для выяснения влияния различных деталей моделирования сложных турбулентных течений на качество получаемых результатов и сравнения с другими моделями. В предыдущей работе автора [2] развита трехмерная численная гидродинамическая модель атмосферной дисперсии, применение которой до сих пор было ограничено задачами с плоской подстилающей поверхностью. Целью настоящей работы было модификация указанной модели для расчетов турбулентной дисперсии загрязнений вокруг кубических препятствий.

Постановка задачи. В работе используется та же исходная система уравнений, что и в [2], которая имеет вид:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \langle u_\alpha \rangle)}{\partial x_\alpha} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial t} + u_j \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho} \langle u_i u_j^* \rangle + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_j} = -\delta_{i3} g, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial t} + \langle u_\alpha \rangle \frac{\partial \bar{P}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \bar{\rho} \langle u_\alpha^* \Phi^* \rangle + \bar{\rho} \langle c_s^2 \rangle \frac{\partial \langle u_\alpha \rangle}{\partial x_\alpha} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \langle C \rangle}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \langle C \rangle \langle u_\alpha \rangle)}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \bar{\rho} \langle u_\alpha^* C^* \rangle = 0, \quad (4)$$

где треугольными скобками обозначено осреднение по Фавру, чертой сверху – осреднение по Рейнольдсу, двойными и одинарными верхними штрихами – пульсационные составляющие по Фавру и по Рейнольдсу соответственно, t – время, $x_i = (x, y, z)$ – координаты при $i=1,2,3$, ось z направлена вертикально вверх, ρ – плотность, $u_i = (u, v, w)$ – проекции вектора скорости на оси x, y, z , соответственно, P – давление, $c_s = (1/\rho)(\partial P/\partial \rho)_s$ – скорость звука, C – массовая концентрация газа, g – ускорение силы тяжести, $\Phi = P/\rho$. Одним штрихом обозначена пульсационная составляющая по Рейнольдсу, а двумя штрихами – пульсационная составляющая по Фавру. Система уравнений (1)-(4) дополняется уравнением состояния идеального газа: $\bar{P} = \bar{\rho} (R_a (1 - \langle C \rangle) + R_g \langle C \rangle) \langle T \rangle$, где R_a, R_g – газовые постоянные для воздуха и газа.

Для параметризации турбулентных напряжений и потоков здесь, как и в работе [2] используются градиентные соотношения, сохраняющие тензорную симметрию:

$$-\langle u_i^* \varphi^* \rangle = \frac{\nu_t}{\sigma_\varphi} \frac{\partial \langle \varphi \rangle}{\partial x_i}; \quad -\langle u_i^* u_j^* \rangle = \nu_t \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \left(k + \nu_t \frac{\partial \langle u_\alpha \rangle}{\partial x_\alpha} \right), \quad (6)$$

где φ – скалярная величина, σ_φ – турбулентное число Прандтля. Коэффициент турбулентности ν_t выражается через энергию турбулентности $k = 0.5 (\langle u^2 \rangle + \langle v^2 \rangle + \langle w^2 \rangle)$ и масштаб турбулентности l : $\nu_t = C_\mu \sqrt{k} l$, где C_μ – постоянная. Для замыкания системы уравнений (1)-(7) используется k модель с алгебраическим соотношением для масштаба турбулентности [2],[3]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} u_\alpha k}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\rho \nu_t}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_\alpha} = \bar{\rho} G_T - \bar{\rho} \varepsilon, \dots \dots \dots (1)$$

где скорость диссипации энергии турбулентности $\varepsilon = C_\mu^{3/4} k^{3/2} / l$, член $G_T = -\langle u_i^* u_j^* \rangle \partial \langle u_i \rangle / \partial x_j$ описывает порождение турбулентности за счет взаимодействия напряжений Рейнольдса и градиентов средней скорости (в рассматриваемых задачах изменения плотности малы и их влияние на порождение энергии турбулентности не учитывается). Алгебраический масштаб турбулентности определяется по формуле: $1/l = (1/\kappa z + 1/\kappa d_{\min})$. В которой z – расстояние до поверхности Земли, d_{\min} – расстояние до

ближайшей твердой стенки, $\kappa = 0.4$ - константа Кармана. Значения постоянных модели турбулентности общеприняты: $C_\mu = 0.5$, $\sigma_\varphi = 1$. В дальнейшем, где это не будет вызывать недоразумений осредненные величины будут обозначаться без подчеркиваний и треугольных скобок.

Рассмотрим граничные и начальные условия для системы уравнений (1)-(4), дополненной моделью турбулентности. На постановке граничных условий сказывается сложность подстилающей поверхности. Рассмотрим некоторый узел m , близкий к твердой поверхности. Пусть \bar{n} - единичный вектор нормали к данной поверхности. Обозначим вектор скорости в узле m через \bar{u}_m . Обозначим проекцию по нормали вектора \bar{u}_m на плоскость касательную к твердой поверхности через $\bar{U}_m = \bar{n} \times (\bar{u}_m \times \bar{n})$, и поскольку вектор нормали единичный, модуль проекции равен: $U_m = |\bar{u}_m \times \bar{n}|$. Выберем локальную систему координат (n, τ, ξ) такую, что точка отсчета расположена на твердой поверхности в месте проекции по нормали узла m на поверхность, ось On направлена вдоль вектора нормали, ось $O\tau$ направлена по касательной к поверхности вдоль проекции скорости \bar{U}_m . Будем считать, что распределение всех переменных между узлом m и твердой поверхностью (т.е., при $n < d_m$, где d_m - расстояние от узла m до твердой поверхности) соответствуют теории подобия Монино-Обухова [4]. Тогда вектор поток импульса через твердую поверхность равен: $\bar{j}_m = -\rho u_*^2 \bar{n}$, где динамическая скорость, определяется как для нейтральной стратификации: $u_* = \kappa U_m / \ln(d_m / z_0)$. Разложение вектора на составляющие направленные вдоль осей исходной системы координат: $\bar{j}_m = (j_{mx}, j_{my}, j_{mz})$ определяет граничные условия для каждой из компонент скорости. Граничные условия для энергии турбулентности вблизи твердой границы находятся из предположения о локальной равновесности развитой турбулентности у твердой поверхности, что приводит к условию: $\partial k / \partial n = 0$ при $n < d_m$. Для концентрации ставятся условия непротекания: $\partial C / \partial \bar{n} = 0$.

На верхней границе расчетной области распределение всех величин соответствует невозмущенному состоянию атмосферы. Характеристики турбулентности в приземном слое атмосферы могут быть определены с помощью теории подобия [4] по имеющимся данным наблюдений в районе выброса, либо с помощью диагностических или прогностических мезомасштабных моделей. Расчетная область ориентируется по направлению приземного ветра. Там, где поток втекает в область, задавались значения невозмущенных полей скорости, давления и нулевая концентрация газа. На остальных гранях принимались условия Неймана. В качестве начальных невозмущенных условий использовались одномерные распределения всех

метеорологических параметров, соответствующих заданному логарифмическому распределению ветра при нейтральной стратификации.

Метод решения. Для численного интегрирования системы уравнений (1)-(4) применяется метод расщепления по физическим процессам и пространственным направлениям (см. [2]). Дискретизация уравнений осуществляется на прямоугольной неравномерной сетке с узлами для скоростей смещенными на половину шага сетки вдоль соответствующей компоненты скорости относительно узлов для скалярных переменных ('шахматная' сетка). Аппроксимация оператора конвекции – диффузии в регулярных узлах сетки осуществляется с помощью конечно-разностной схемы Патанкара [5] первого порядка аппроксимации.

Для получения численной схемы аппроксимации вблизи твердой границы используется метод конечных объемов, в котором первоначально аппроксимируется интегральная форма исходных уравнений движения. Например, рассмотрим аппроксимацию уравнения неразрывности в узле (i, j, k) , контрольную ячейку которого частично пересекает твердая граница. Уравнение неразрывности в таком узле аппроксимируется следующим образом:

$$\rho^{n+1} \approx \rho^n - \left(\frac{\tau}{V_{ijk}} \right) \left\{ [u_{i+1/2, j, k}, 0] S_{i+1/2, j, k} \rho_{i, j, k} - [-u_{i+1/2, j, k}, 0] S_{i+1/2, j, k} \rho_{i+1, j, k} - [u_{i-1/2, j, k}, 0] S_{i-1/2, j, k} \rho_{i-1, j, k} + [-u_{i-1/2, j, k}, 0] S_{i-1/2, j, k} \rho_{i-1, j, k} + ADVY + ADVZ \right\}, \quad (9)$$

где $S_{i\pm 1/2, j, k}$ - площади граней между ячейками (i, j, k) и $(i \pm 1, j, k)$, V_{ijk} - объем контрольной ячейки, τ - шаг по времени, а $ADVY$, $ADVZ$ - символическая запись аппроксимации оператора переноса вдоль осей y , z совершенно аналогичная оператору переноса по оси x . Аналогичным образом с помощью теоремы Гаусса аппроксимируется оператор дивергенции в уравнении для давления (3).

Что касается диффузионных членов, то для вычисления диффузионных потоков требуется вычислить коэффициент диффузии на границах контрольных ячеек. Рассмотрим, например, границу $(i+1/2, j, k)$. Если узел регулярный, значение коэффициента диффузии рассчитывается с помощью так называемой "наилучшей" схемы [6], с 380: $K_{i+1/2} = 0.5K_i K_{i+1} / (K_i + K_{i+1})$ (индексы j, k опускаем). В основе вывода

наилучшей схемы лежит соотношение: $C_{i+1} - C_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx W / K \approx W_{i+1/2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx / K$,

где $W = -K \partial c / \partial x$ - плотность диффузионного потока вещества на единицу площади. Однако, в случае переменного поперечного сечения ячейки W может быстро меняться, и следовательно, вынос W из-под знака интегрирования может приводить к погрешности. Плавно меняющимся

можно считать суммарный диффузионный поток вещества через поперечное сечение ячейки: $\tilde{W} = WS$, где S- площадь поперечного сечения открытой части ячейки. Тогда вместо предыдущего соотношения имеем:

$$C_{i+1} - C_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx W / K \approx \tilde{W}_{i+1/2} \int_{x_i}^{x_{i+1}} dx / (KS), \text{ и для коэффициента диффузии:}$$

$$K_{i+1/2} = \frac{h_x}{S_{i+1/2} \left((1/K_i) \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} dx / S + (1/K_{i+1}) \int_{x_{i+1/2}}^{x_{i+1}} dx / S \right)}, \quad (10)$$

где h_x - шаг сетки вдоль оси x (в окрестности препятствия сетка равномерная), а интегралы вычисляются численно на основе геометрической информации. Соотношение (10) может применяться в стандартной схеме метода конечных объемов для получения окончательной дискретизации диффузионных членов.

Результаты расчетов. В целях верификации модели были проведены расчеты для условий натурального эксперимента [7] в котором изучался атмосферный перенос вещества вокруг кубического препятствия. Длина стороны куба равнялась $H = 1.15$ м. Принципиальная схема эксперимента показана на Рис 1. Источник находился на расстоянии $2.0 H$ от наветренной стороны куба на высоте 0.575 м,

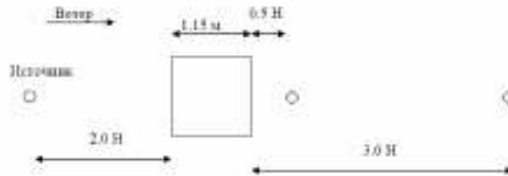


Рисунок 1 Схема эксперимента [7]. Вид сверху. Ромбами обозначены точки измерений.

Измерения проводились в двух точках – на расстояниях $0.5 H$ и $3 H$ от подветренной стенки куба, расположенных на высоте $0.5 H$. Таким образом первая точка измерения располагалась в рециркуляционной зоне, тогда как вторая – за ней. Категория устойчивости во всех экспериментах была нейтральная. Объемный расход в источнике был равен $Q = 0.00025 \text{ м}^3 / \text{с}$. Для моделирования этих экспериментов была выделена область $17 \times 17 \times 7$ м центрированная вокруг центра куба. Горизонтальный пространственный шаг возле препятствия был равен 0.115 м, а вертикальный шаг сетки в нижней части области был равен 0.05 м. Решалась задача на установление которое происходило приблизительно через 200 с модельного времени после начала расчетов. Временной шаг расчетов был 0.01 с. Результаты сравнения расчетов с данными измерений представлены в таблице 1. В таблице

представленные безразмерные концентрации $K = CUH^2/Q$, где U – скорость на высоте 1.15 м. Нумерация экспериментов в таблице соответствует [7].

Таблица 1.

Результаты сравнения измерений и результатов моделирования в эксперименте [7].

№	Скорость ветра м/с	Измеренное К (0.5Н)	Рассчитанное К (0.5Н)	Измеренное К (3Н)	Рассчитанное К (3Н)
5		0.715	0.54934	0.234	0.348712
4	4.515	0.834	0.536618	0.298	0.335386
3	6.34	0.891	0.542331	0.297	0.335174
2	4.4	0.758	0.530852	0.253	0.383393
E11	5.575	0.841	0.53	0.274	0.33
	6.3				

Как видно из представленных в таблице 1 данных модель занижает концентрации в рециркуляционной зоне (точка на расстоянии 0.5 Н), и несколько завышает концентрации в точке на расстоянии 3Н. Занижение концентраций в 1.5 раза в ближней точке связано с диссипативными свойствами вычислительной схемы

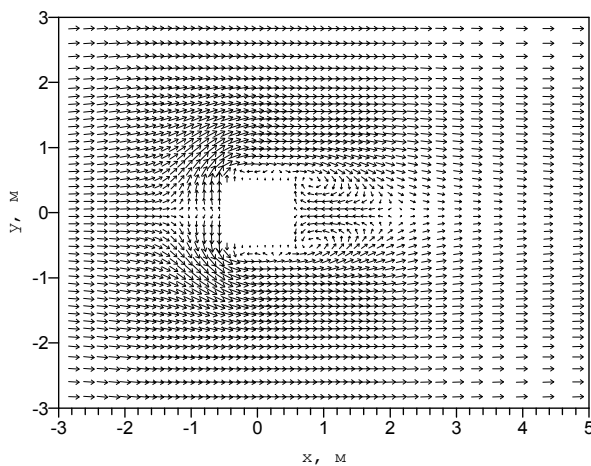


Рисунок 2. Рассчитанное поле скорости для условий эксперимента [7].

В работе [7] представленные результаты моделирования этого же эксперимента, трехмерной моделью ADREA. В этой работе погрешность рассчитанных концентраций в рециркуляционной зоне значительно меньше, чем в настоящей работе (всего 5%), однако ошибка рассчитанных концентраций на расстоянии 3Н значительно больше чем в настоящей работе – в 2-4 раза выше по сравнению с измерениями. Как видно из данных

таблицы, в среднем отношение C_{model}/C_{exp} находится в диапазоне 0.7-2, что соответствует уровню погрешности других современных моделей [7]. На Рис. 2 приводится горизонтальное распределение поля скорости у поверхности Земли, которое показывает, что модель хорошо воспроизводит размер рециркуляционной зоны.

В качестве примера практического применения разработанной модели представим результаты расчетов сценария аварийного выброса из загрязненного здания № 103 расположенного на территории Приднепровского химического завода (ПХЗ) [8]. По соседству (Рис. 3), в здании №102 располагается действующее предприятие. Рассчитывался гипотетический сценарий, в котором предполагалось, что в здании №103 разрушаются все окна и вещество, концентрация которого C_b внутри здания известна, выносится из здания за счет вентиляции воздуха. Поскольку важно получить консервативную оценку, площадь окон считалась равной площади всей стены дома. Поток вещества через открытые окна параметризовался как: $F = (\beta_h |u_h| + \beta_\perp |u_\perp|) C_b$, где β_h, β_\perp - коэффициенты эффективности вентиляции для горизонтальной и поперечной к окнам составляющей скорости ветра. Использовались типичные значения $\beta_h = 0.3, \beta_\perp = 0.8$.

Расчеты проводились с горизонтальным и вертикальным пространственным разрешением в окрестности зданий 1 м. Размеры области : 300x350x320 м. Коэффициент шероховатости $z_0 = 0.05$ м параметрически учитывает соседние здания (не показанные на Рис. 3), которые напрямую не учтены в модели. Скорость ветра на высоте 10 м задавалась равной 5 м/с, в положительном направлении оси x.

На рисунке 3 представлено приземное поле ветра, которое показывает, что за счет геометрической конфигурации расположения домов возле Земли существует существенный боковой поток, который выносит загрязнение и таким образом уменьшает концентрацию возле зданий. Как показывают расчеты описанного сценария, возле дома 102 безразмерные концентрации у поверхности Земли достигают значений $C / C_b = 0.05$.

Выводы. Численная гидродинамическая модель DETATOX усовершенствована для расчета атмосферной дисперсии загрязнений вокруг зданий кубической формы. Дискретизация исходных уравнений осуществляется с помощью метода конечных объемов. Верификация модели на данных натурального эксперимента показывает хорошее согласование расчетов и измерений. В частности, модель воспроизводит размер рециркуляционной зоны в окрестности кубического препятствия. Представлены результаты применения модели к задаче оценки аварийного сценария разрушения одного из загрязненных зданий на территории промплощадки Приднепровского химического завода.

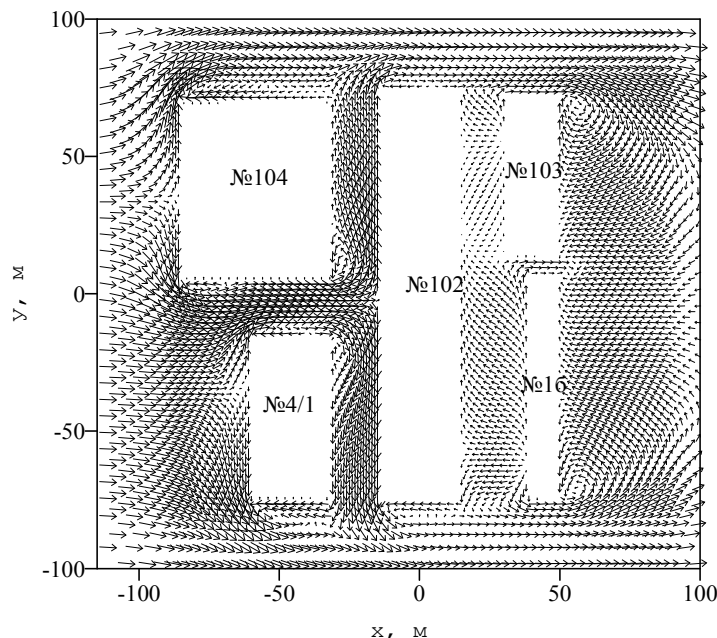


Рисунок 3. Рассчитанное приземное поле ветра вокруг зданий на промплощадке ПХЗ, розраховане моделлю DETATOX (показаны векторы в каждом шестом узле).

Ссылки

1. Fisher B., Kukkonen J., Schatzmann M., Meteorology applied to urban air pollution problems: COST 715. *International Journal of Environment and Pollution* 16 (1). - 2010. – P.560-570.
2. Kovalets I.V., Maderich V.S., Numerical simulation of the interaction of the heavy gas cloud with the atmospheric surface layer. *Environmental Fluid Mechanics* 6(4). 2006. – P. 313-340.
3. Venetsanos A.G., Andronopoulos S., Bartzis J.G., One-Equation Turbulence Modelling for Atmospheric and Engineering Applications. *Boundary Layer Meteorology* 113(3). – 2004. – 321-346.
4. Монин А.С., Яглом А.М., Статистическая гидромеханика, 1992. С. Петербург, Т.1.- 696 с.
5. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости, 1984. – М: Энергоатомиздат. – 150 с.
6. Калиткин Н.Н. Численные методы, 1978. – М:Наука.- 508 с.
7. Mavroidis I., Griffiths R.F., Hall D.J., Field and wind tunnel investigations of plume dispersion around single obstacles. *Atmospheric Environment* (37). – 2003. – P.2903-2918.
8. Voitsekhovich O., Lavrova T. Remediation Planning of Uranium Mining and Milling Facilities: The Pridneprovsky Chemical Plant Complex in Ukraine // *In Remediation of Contaminated Environments*, (G. Voigt, S. Fesenko, eds), Elsevier, Netherlands. – 2009. - P. 343-356.