

17. Cherdancev S.V., Cherdancev N.V. *Prikladnaja mehanika i tehničeskaja fizika = Applied Mechanics and Technical Physics*. 2005. № 3. pp. 141–148.

18. Cherdancev N.V., Presler V.T., Anufriev V.E. *Voprosy metodičeskogo i instrumentalnogo obespečenija monitoringa gornyh vyrabotok* (Issues of Methodical and Instrumental Support of Mine Workings Monitoring). Kemerovo: IU SO RAN, 2012. 222 p.

19. Cherdancev N.V., Presler V.T., Izakson V.Ju. *Vestnik KuzGTU = Herald of KuzGTU*. 2006. № 5. pp. 3–7.

20. Cherdancev N.V. *Vestnik KuzGTU = Herald of KuzGTU*. 2012. № 1. pp. 15–19.

21. Cherdancev N.V. *Vestnik KuzGTU = Herald of KuzGTU*. 2012. № 4. pp. 3–7.

УДК 51-74:001.57:004.413.4

© Е.А. Агапова, С.И. Сумской, 2017

Аналитический обзор математических моделей распространения облаков тяжелых газов¹



Е.А. Агапова,
науч. сотрудник,
eagapova@safety.ru



С.И. Сумской,
канд. техн. наук,
ст. преподаватель

Автономная некоммерческая организация «Агентство исследований промышленных рисков», Москва, Россия

НИЯУ МИФИ, Москва,
Россия

Представлены обзор и анализ математических моделей распространения облаков тяжелых газов, а также соответствующих программных комплексов. Дана классификация моделей распространения облаков тяжелого газа по сложности и способу описания физико-химических процессов.

Ключевые слова: математическая модель, рассеяние, тяжелые газы, классификация, CFD-моделирование.

DOI: 10.24000/0409-2961-2017-5-23-31

Введение

Промышленные объекты, связанные с производством, хранением, использованием и транспортированием опасных веществ, всегда представляли потенциальную угрозу для людей, окружающей среды и имущества. Проявления таких угроз наблюдались при эксплуатации опасных производственных объектов (ОПО) на протяжении всей индустриальной истории [1]. В России и за рубежом разработаны специальные механизмы для минимизации таких угроз на ОПО. Среди прочего эти механизмы включают процедуры оценки возможных последствий выброса опасных веществ и их воздействия на

человека и окружающую среду. При оценке последствий выброса опасных веществ особое внимание уделяется оценке качества использованных моделей [2–5].

Высокую опасность для персонала ОПО и населения на прилегающей территории представляют выбросы опасных веществ, сопровождающиеся образованием облаков тяжелых газов, сред (чисто парогазовых, а также парогазовых сред с содержанием аэрозоля), плотность которых больше плотности воздуха, в котором происходит рассеяние. Облака тяжелых газов могут формироваться из веществ:

- с молекулярным весом больше молекулярного веса воздуха (например, хлор);

- более тяжелых, чем воздух, в условиях технологического процесса (например, сжиженный природный газ при низких температурах);

- с возможностью конденсации вещества выброса или паров воды из воздуха в аэрозольную взвесь;

- с возможностью химического превращения в процессе выброса и дрейфа с образованием более тяжелых продуктов, в том числе в реакциях с водяным паром, содержащимся в атмосфере (например, при выбросе фтористого водорода).

Распространение облаков тяжелых газов отличается от распространения нейтральных или легких газовых облаков (их плотность равна или меньше плотности атмосферного воздуха). Основные особенности процесса рассеяния облаков тяжелых газов:

- гравитационное растекание облака по подстилающей поверхности;

- изменение скорости ветра по высоте;

- изменение коэффициентов диффузии, прежде всего в вертикальном направлении из-за большей плотности в облаке тяжелого газа.

Кроме того, на дрейф облаков тяжелых газов влияют фазовые переходы опасного вещества в облаке («газ — жидкость» и «жидкость — газ») и теплообмен облака с подстилающей поверхностью.

Большинство методик моделирования распространения облаков тяжелых газов предполагают несколько стадий их рассеяния. Для приподнятых

¹ Данная работа выполнена при поддержке Российского научного фонда, грант № 16-19-00188.

над землей выбросов обычно выделяют следующие стадии:

выброс (истечение) опасного вещества (при выбросе жидкой фазы происходит диспергирование струи, в том числе из-за возможного перегрева жидкой фазы);

разбавление струи интенсивно подмешиваемым воздухом из атмосферы,

взаимодействие падающей струи с подстилающей поверхностью;

выпадение части жидкой фазы из струи на подстилающую поверхность и испарение этой жидкой фазы с поверхности;

гравитационное растекание облака и рассеяние тяжелого газа;

пассивное рассеяние за счет атмосферной турбулентности.

Эволюция облака может включать не все перечисленные стадии. Например, для выбросов опасных веществ на уровне земли (при испарении из пролива) отсутствуют стадии струевого разбавления и взаимодействия падающей струи с подстилающей поверхностью. Влияние плотности опасного вещества в облаке на процесс рассеяния характеризуется безразмерным параметром — числом Ричардсона:

$$Ri_* = g \frac{\rho_{эфф} - \rho_{возд}}{\rho_{возд}} \frac{H_{эфф}}{u_i^2}, \quad (1)$$

где g — ускорение свободного падения, м/с²; $\rho_{эфф}$ — эффективная плотность газа в облаке, кг/м³; $\rho_{возд}$ — плотность воздуха в окружающей среде, кг/м³; $H_{эфф}$ — эффективная высота, м; u_i — характерная скорость, м/с.

История моделирования распространения облаков тяжелых газов насчитывает более четырех десятилетий. За это время разработано значительное число моделей рассеяния тяжелых газов. Математические модели, описывающие рассеяние облаков тяжелых газов, различаются: сложностью методов описания физико-химических процессов, происходящих при распространении облаков тяжелых газов; типами выброса (истечения) опасного вещества; степенью полноты учета факторов, влияющих на процессы дрейфа и рассеяния; требованиями к вычислительным ресурсам и квалификации пользователей. В зависимости от возможностей и ограничений моделей различаются и области их применения на практике [6–11].

По подходу к построению можно выделить четыре основные группы моделей распространения облаков тяжелых газов: эмпирические, интегральные, лагранжевые и CFD-модели. Эта классификация является условной. Некоторые модели, описанные в литературе, не подпадают под какую-либо из перечисленных выше категорий. Существуют также компьютерные пакеты, для которых разработчиками используется термин «модель», однако они

включают в себя несколько модулей, каждый из которых можно рассматривать как независимую модель той или иной стадии распространения облака. В таких случаях модели различного типа могут использоваться друг за другом в последовательности, предусмотренной программным пакетом, позволяющей проследить эволюцию облака на различных стадиях. Следует отметить, что в некоторых обзорах [12] при классификации моделей рассеяния тяжелого газа выделяют отдельную группу так называемых моделей модифицированного гауссового шлейфа (Gaussian plume). Модели этой группы иллюстрируют попытки в 1970-х годах описать рассеяние тяжелых газов с использованием гауссовых моделей, разработанных для выбросов нейтральных плавучих газов, путем изменения значений параметров рассеивания в вертикальном направлении. Например, в одной из таких моделей [13] используется уравнение Гаусса в форме, представленной Паскуиллом — Гиффордом, с коэффициентом вертикальной дисперсии σ_z , равным $0,2\sigma_y$, где σ_y — коэффициент горизонтальной дисперсии. В модели Кланси [14] применяется уравнение Гаусса в форме, введенной Саттоном, с параметром диффузии в вертикальном направлении C_z , который принимается равным половине значения параметра диффузии в поперечном направлении C_y или в направлении ветра C_x ($C_y = C_x$). Эти подходы подверглись критике и с обнаружением достаточного объема экспериментальных данных вытеснены другими методами. В связи с этим в настоящее время подобные модели обычно не рассматриваются в числе моделей распространения тяжелого газа.

Простые эмпирические модели

В этой группе моделей распространение облаков описывается с помощью номограмм или простых зависимостей. Такие модели создавались в конце 1980-х годов по результатам полевых экспериментов, ограничивающихся условиями равнинной местности с нейтральным состоянием атмосферы. Измеряемые концентрации опасного вещества в облаке осреднялись по 3–10-минутным интервалам наблюдения. При этом влияние состояния атмосферы, шероховатости подстилающей поверхности и продолжительности интервала осреднения, как правило, не исследовалось. Примеры таких моделей можно обнаружить в руководствах: HSE по распространению тяжелых газов 1988 г. [15] и Ассоциации инженеров Германии 1990 г. VDI 3783 [16]. Причем модель VDI позволяла учитывать некоторые особенности ландшафта, поскольку основывалась на экспериментах, выполненных в различных конфигурациях окружающего пространства, моделирующих отдельные элементы городской застройки, некоторые виды помещений и простейшие комбинации геометрических поверхностей. На основе этих моделей созданы такие программные комплексы, как TSCREEN и STOER (nepis.epa.gov). Основным огра-

ничением таких моделей является то, что они могут использоваться для моделирования распространения облаков только в условиях, близких к условиям экспериментов, в которых они создавались.

Интегральные модели

В этой группе можно выделить следующие интегральные модели в соответствии с классификацией MEG (Major Evaluation Group) [17]: ВОХ-модели, одномерные модели шлейфа, модели стационарного шлейфа, обобщенные модели стационарного шлейфа.

Все эти модели исходят из рассмотрения интегральных характеристик распространяющихся облаков, т.е. рассматриваются только проинтегрированные по некоторому объему заранее оговоренной формы характеристики. В качестве таких характеристик обычно выбирают массу вещества, энергию, содержание аэрозолей в облаке и т.д. Для каждой из них записывают обыкновенное дифференциальное уравнение, описывающее ее изменение во времени. Детальная же картина распределения параметров в облаке восстанавливается по этим параметрам. К восстанавливаемым параметрам обычно относятся концентрации газов и аэрозолей, температура, скорость. При этом так называемые ВОХ-модели относятся к залповым (мгновенным) выбросам, а три модели шлейфа — к длительным. Причем интегральные модели шлейфа рассматривают выброс, скорость которого больше скорости ветра, и в общем случае направление скорости выброса не совпадает с направлением ветра. Это так называемые струйные выбросы, формирующиеся вблизи места истечения из аварийного оборудования под давлением. Скорость в такой струе определяется давлением в оборудовании. Модели стационарного шлейфа и обобщенные модели стационарного шлейфа применяются к ситуации, когда выброс утратил динамическую составляющую скорости, сообщенную ему на месте выброса, и движется только в поле ветра. Такие модели правомерно использовать либо на некотором расстоянии от точки выброса (при наличии вначале струйного участка), либо для выбросов без струйного участка вообще, например, для эмиссии с поверхности пролива.

ВОХ-модели залпового выброса

Для описания мгновенных выбросов с образованием низких облаков предназначены ВОХ-модели. Своим появлением они обязаны идеям, сформулированным в середине 1970-х годов Ван Ульденом [18]. Для этих моделей характерно то, что облако в них моделируется вертикальным цилиндром изменяющегося размера с однородным распределением выброшенного вещества по всему объему, т.е. во всем цилиндре концентрация постоянна. В основе модели лежат обыкновенные дифференциальные уравнения, описывающие горизонтальное перемещение облаков, подмешивание воздуха в облако и теплообмен между облаком и окружающей средой,

включая подстилающую поверхность. Эти уравнения интегрируются по времени в оговоренном выше приближении равенства параметров облака по объему цилиндра.

Данные модели позволяют рассматривать различные скорости ветра, классы устойчивости атмосферы и шероховатости подстилающей поверхности. Устойчивость атмосферы, а также уровень атмосферной турбулентности в таких моделях обычно описывают с помощью стандартных классов стабильности по Паскуиллу. Перемещение облака определяется скоростью ветра в атмосфере. Радиус облака изменяется при гравитационном растекании, скорость которого определяется эмпирическим соотношением

$$u_f = K \sqrt{gH_{эфф} \left(1 - \frac{\rho_{возд}}{\rho_{эфф}} \right)}, \quad (2)$$

где K — коэффициент, использующийся при расчете скорости гравитационного растекания, $K = 1,15$.

Подмешивание воздуха в облако происходит как сверху, так и через боковую поверхность облака, которое имеет форму цилиндра. Скорость такого подмешивания определяется с помощью эмпирических зависимостей, различных для горизонтальной и боковой поверхностей цилиндра. Существуют разновидности модели, где подмешивание через боковую поверхность не учитывается. Скорость подмешивания сверху — через горизонтальную поверхность «крышки» цилиндра — описывают зависимостью:

$$u_{\text{верх.подм}} = u_f f(Ri_*), \quad (3)$$

где $f(Ri_*)$ — функция Ri_* .

В качестве эффективной скорости обычно используют динамическую скорость или комбинацию динамической скорости и скорости конвекции. Функция $f(Ri_*)$ обычно задается уравнением

$$f(Ri_*) = a / (1 + b Ri_*), \quad (4)$$

где a и b — эмпирические константы.

Теплообмен с подстилающей поверхностью и окружающим воздухом в различных моделях может быть как стационарным, так и нестационарным. В некоторых моделях могут учитываться фазовые изменения внутри облака, наличие водяного пара и т.д. Отдельные модели позволяют описывать протекающие в облаке химические реакции с водой для таких веществ, как фтористый водород или аммиак. Для ВОХ-моделей характерно предположение распространения облака по плоскому однородному ландшафту, однако в некоторых случаях описывается и распространение по склонам или через преграды простейших форм. Считается, что ВОХ-модели хорошо воспроизводят результаты экспериментов, соответствующих в своей постановке формули-

ровке самих моделей. Также ВОХ-модели хорошо описывают такие параметры течения, как размеры облака и концентрации, достигаемые на оси выброса. Данные для использования ВОХ-моделей легко доступны, а вычислительные затраты относительно низкие. То же самое можно сказать и о требованиях к квалификации потенциальных пользователей. Это делает ВОХ-модели востребованным инженерным инструментом, получившим широкое распространение. Они используются при оценке воздействия на окружающую среду, при оценке риска, при планировании мероприятий во время аварий.

В нашей стране ВОХ-модели усовершенствованы за счет введения для концентрации более сложных, подобных гауссовым, профилей. На основе такого подхода разработана методика рассеяния тяжелого газа «Токси-2» [19, 20], в настоящее время закреплённая в Руководстве по безопасности «Методика моделирования распространения аварийных выбросов опасных веществ» [21].

Одномерные интегральные модели шлейфа

Одномерные интегральные модели шлейфа применяются для описания продолжительных выбросов, приподнятых над поверхностью земли. В отечественной литературе такие выбросы называются турбулентными струями. Первые примеры таких моделей встречаются в середине 1970-х годов в источниках [22, 23], в нашей стране описание подобных моделей дано в работах [24, 25]. Модели этой группы основываются на уравнениях сохранения массы, отдельных компонент, импульса и энергии, осреднённых по поперечному сечению шлейфа. При этом форма поперечного сечения шлейфа может полагаться кругом, эллипсом или прямоугольником (для целевого выброса). Приподнятые выбросы могут переходить в облако, описываемое моделью стационарного шлейфа, на некотором отдалении от источника, двигаясь как над поверхностью земли, так и предварительно коснувшись твердой поверхности земли и провзаимодействовав с ней. Интегральные модели шлейфа часто используют на стадии расчета, предшествующей применению моделей стационарного шлейфа. Результаты расчета по интегральной модели шлейфа дают входные данные (прежде всего размер облака и концентрация в нем) для моделей стационарного шлейфа.

Таким образом, существует сходство подходов в интегральной модели шлейфа с моделями стационарного шлейфа. Однако имеются и два существенных различия. Во-первых, в интегральной модели шлейфа необходимо учитывать наличие динамического импульса, сгенерированного при выбросе за счет избыточного давления. Это достигается путем рассмотрения собственной составляющей скорости у струи. Во-вторых, подмешивание воздуха в таких моделях происходит за счет турбулентности, сгенерированной на границе высокоскоростного потока

аварийного выброса и неподвижного воздуха. Это подмешивание за счет наведенного течения должно учитываться как струевую турбулизацию и генерируемые ею поперечные потоки массы, импульса и энергии, перпендикулярные оси шлейфа, так и атмосферную турбулентность. Струевая турбулентность (скорость, с которой воздух вовлекается в струю) обычно описывается уравнением

$$u_{ej} = c_1 |u_c - u_a \cos \theta|, \quad (5)$$

где c_1 — эмпирическая константа; u_c — средняя или осевая скорость струи, м/с; u_a — скорость ветра, м/с; θ — угол между осью струи и горизонтальной осью.

Поперечный поток, перпендикулярный оси шлейфа, описывается уравнением

$$u_{ec} = c_2 |u_a \sin \theta|, \quad (6)$$

где c_2 — эмпирическая константа.

В некоторых моделях правая часть формулы умножается на $|\cos \theta|$.

Для описания атмосферной турбулентности в области, непосредственно приближенной к источнику выброса, могут использоваться различные методы. В некоторых моделях атмосферной турбулентностью пренебрегают. В других случаях атмосферная турбулентность описывается формулой, предложенной Оомсом [22]:

$$u_{enf} = c_3 u', \quad (7)$$

где c_3 — эмпирическая константа; u' — интенсивность турбулентности атмосферы, м/с.

Когда скорость струи становится близка скорости ветра, а подмешивание воздуха в шлейф оказывается близким к атмосферной турбулентности, считается, что струевое рассеяние переходит в рассеяние облака, обусловленное только движением в атмосфере с учетом плотности в облаке. С этого момента движение облака может описываться моделями стационарного шлейфа (обобщенными моделями стационарного шлейфа).

Состав исходных данных, а также термодинамические эффекты и химические реакции, учитываемые в модели, в целом аналогичны другим интегральным моделям.

Интегральные модели стационарного шлейфа

Модели стационарного шлейфа используют для моделирования продолжительных выбросов в отсутствии динамической составляющей скорости у выброса. Такие модели часто называют SLAB-моделями (www.weblakes.com, www.epa.gov). Эти модели возникли и развивались совместно с ВОХ-моделями, по своей сути полностью им аналогичны в предположении только бокового гравитационного растекания облака, а не радиального, а также в пред-

положении не цилиндрической, а прямоугольной в поперечном сечении шлейфа формы облака. Процессы, сопровождающие выбросы тяжелого газа (горизонтальное распространение облака, теплообмен между облаком и окружающим пространством, подмешивание воздуха в облако в этих моделях), также описываются обыкновенными дифференциальными уравнениями. Все физические характеристики облака осредняются по поперечному сечению шлейфа. Метеорологические данные, учитываемые в этих моделях, — те же, что и для ВОХ-моделей: скорость ветра на определенной высоте, класс стабильности атмосферы, температура воздуха и подстилающей поверхности, атмосферное давление и влажность. Как правило, рельеф принимается плоским, его единственная характеристика — шероховатость поверхности. Шлейф распространяется по ветру со скоростью, определяемой скоростью ветра. Иногда при оценке скорости распространения шлейфа учитывается скорость струевого истечения, которая вычисляется исходя из закона сохранения импульса. Граничные условия, гравитационное растекание, а также термодинамика процесса описываются так же, как и в ВОХ-моделях. В некоторых моделях учитывается распространение шлейфа над простыми препятствиями и сквозь ограждения.

Обобщенные интегральные модели стационарного шлейфа

Обобщенные модели стационарного шлейфа являются развитием стационарных моделей шлейфа. В них, как и в стационарных моделях шлейфа, форма прямоугольного поперечного сечения шлейфа не изменяется с расстоянием, однако меняются его размеры, а сама форма профилей концентрации, в отличие от модели стационарного шлейфа, не является однородной. В этих моделях поперечное сечение шлейфа трактуется как прямоугольник с эффективными размерами, а на его краях профиль концентрации по вертикальной оси и в горизонтальной плоскости принимается гауссовым (или аналогичным гауссовому). Существуют обобщенные стационарные модели шлейфа, где сечение шлейфа имеет эллиптическую форму.

Модели HEGADAS (Heavy Gas Dispersion from Area Sources) [26] и DEGADIS (Dense Gas Dispersion) [27] — наиболее известные примеры моделей этой группы. Модель HEGADAS появилась в результате развития модели, первоначально предложенной Риле [28, 29]. Модель DEGADIS, в свою очередь, разработана на основе модели HEGADAS. Эта модель — основа популярного бесплатного программного комплекса ALOHA (www.epa.gov/sameo), а также комплекса HEGADAS SYSTEM (www.hgssystem.com). Термодинамика, химические реакции и метеорологические условия учитываются в этих моделях так же, как и в стационарных моделях шлейфа. Их требования к входным данным, компьютерным ресурсам и квалификации потен-

циальных пользователей схожи с требованиями к ВОХ-моделям.

Лагранжевые модели

Лагранжевые модели рассеяния облаков тяжелых газов произошли из уравнений, использованных для рассеяния веществ с нейтральной плавучестью [30]. Современные лагранжевые модели могут применяться для выбросов как из приподнятых источников, так и из источников на уровне земли. Эти модели рассматривают облако тяжелого газа в виде псевдочастиц, движение которых определяет дрейф и рассеяние облака. На каждом шаге по времени движение частицы определяется ветром, атмосферной турбулентностью и повышенной плотностью. Трехмерное поле ветра является исходными данными для модели. Это поле строится на основе метеорологической модели. Метеорологической моделью определяются характеристики турбулентного потока, такие как турбулентная кинетическая энергия, скорость ее диссипации и распределение скорости ветра.

Лагранжевые модели могут учитывать сложный рельеф (топографию местности и препятствия). Использование таких моделей совместно с метеорологическими дает хороший результат для задач обеспечения готовности к ликвидации последствий аварий в связи с их стабильностью и высокой вычислительной скоростью.

CFD-модели

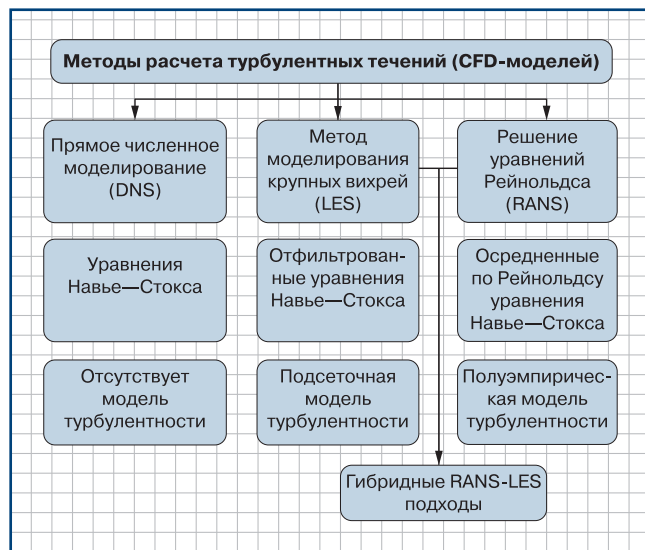
Данные модели (от английской аббревиатуры термина вычислительной газодинамики — Computational Fluid Dynamics) — трехмерные в общем случае нестационарные модели, в которых численно решается система дифференциальных уравнений газодинамики в частных производных, зависящих от времени и трех пространственных координат, описывающих законы сохранения компонент, массы, импульса и энергии. Эти модели могут применяться при моделировании распространения облаков при сценариях выбросов любого типа, при различных метеорологических условиях, а также в реальных условиях рельефа местности и застройки. В зависимости от степени детальности моделирования турбулентности существуют несколько вариантов CFD-моделей, для каждой из которых используют специфические уравнения. По этому принципу уравнения CFD-модели могут быть разделены на три группы [31, 32]:

RANS-модели (Reynolds Averaged Navier — Stokes — метод решения осредненных по Рейнольдсу уравнений Навье — Стокса). В них рассматриваются полностью осредненные параметры течения и решаются соответствующим образом осредненные уравнения (эти осредненные уравнения называют системой уравнений Рейнольдса, а осредняемые исходные уравнения — системой уравнений Навье — Стокса, которые описывают течение вязкой среды), действие турбулентности моделируется путем задания коэффициентов турбулентного переноса;

LES-модели (Large Eddy Simulation — метод моделирования крупных вихрей). В них напрямую (по уравнениям Навье — Стокса) просчитывают крупномасштабные турбулентные структуры (размером в несколько разностных ячеек), а турбулентность масштабом меньше размера разностной ячейки моделируют специальными моделями подсеточной турбулентности;

DNS-модели (Direct Numerical Simulation — метод прямого численного моделирования турбулентности). Течение напрямую просчитывают по уравнениям Навье — Стокса вплоть до малых пространственных масштабов, при которых происходит диссипация энергии турбулентности (до масштаба Колмогорова). Турбулентность таким образом возникает (и рассматривается) как конкретное решение уравнений Навье — Стокса. В этом подходе не требуются никакие специальные допущения относительно турбулентных пульсаций, поскольку эти пульсации просчитываются напрямую, они возникают в численном решении как его составная часть. Минус такого подхода — необходимость просчитывать малые пространственные масштабы, поскольку это требует существенных вычислительных затрат. Другое уязвимое место в результатах расчета по DNS-модели — получение единственного решения, необязательно реализующегося на практике. На самом деле на практике из-за незначительного отклонения в начальных данных картина течения может быть иной, поэтому заранее неизвестно, насколько сильно картина течения будет варьироваться за счет выбора начальных данных.

Структура методов расчета турбулентных течений представлена на рисунке.



▲ Структура методов расчета турбулентных течений (CFD-моделей)

Большинство CFD-моделей, способных описать распространение облаков тяжелых газов, представляют собой RANS-модели: FLACS (Flame

Acceleration Simulator), GEXCON (www.gexcon.com); FLUENT CFX (www.ansys.com); PHOENICS (Parabolic, Hyperbolic and Elliptic Numerical Integration Code Series) (www.cham.co.uk); FDS (Fire Dynamics Simulator) (www.nist.gov) и др.

В различных практических реализациях RANS-модель дополняется той или иной полуэмпирической моделью турбулентности. Широкое распространение использования RANS-моделей обусловлено тем, что данный подход позволяет достаточно точно моделировать турбулентные процессы при относительно небольших вычислительных затратах. Данные модели основаны на решении осредненных уравнений Навье — Стокса, которые выражают сохранение импульса вместе с уравнениями сохранения массы, энергии и компонент. Для упрощения осредненных уравнений модели используют приближение Буссинеска. В результате в этих уравнениях появляются коэффициенты турбулентного переноса — коэффициенты турбулентной диффузии, вязкости, теплопроводности. Значения этих коэффициентов определяют по той или иной модели турбулентности. В ранних RANS-моделях моделирование турбулентности было основано на К-модели, где коэффициенты турбулентности считались постоянными. В настоящее время коэффициенты турбулентности рассчитывают на основе $k-\epsilon$ -модели. В работах отечественных и зарубежных ученых также исследовались другие модели турбулентности: $k-l$ -модель, $k-\omega$ -модель, модель переноса касательных напряжений SST (Shear-Stress Transport) и модель SSG (Speziale Sarkar Gatski). Важно заметить, что все модели турбулентности предполагают наличие эмпирически определяемых коэффициентов. Это относится и к LES-моделям турбулентности.

Все описанные выше системы уравнений в рамках CFD-моделей не могут быть решены аналитически, поэтому для получения конкретных решений требуется применение численных методов. На практике используют следующие основные методы численного решения уравнений, описывающих распространение примеси:

- конечных разностей FDM (finite difference methods);
- конечных элементов FEM (finite element methods);
- конечных объемов FVM (finite volume methods);
- семейства Годунова;
- безосцилляционные TVD (Total Variation Diminishing methods), ENO (Essentially Non-Oscillatory), WENO (Weighted Essentially Non-Oscillatory methods);
- SPH (Smoothed Particle Hydrodynamics methods).

Рост ресурсов вычислительной техники, а также интерес к усовершенствованию существующих CFD-моделей привели к развитию подхода прямого численного моделирования (DNS) тур-

булентных течений на основе полных уравнений Навье — Стокса. Фундаментальная основа для использования уравнений Навье — Стокса — то обстоятельство, что пространственно-временные масштабы турбулентности существенно превосходят пространственно-временные масштабы молекулярных движений. В частности, DNS-модели решают точные уравнения на малых расчетных сетках с малым временным шагом без использования модели турбулентности. Они характеризуются высокой вычислительной сложностью и в настоящее время применяются на практике только для простых случаев при низких числах Рейнольдса. Из-за высоких технических требований к вычислительным ресурсам DNS-модели используют только в качестве исследовательских инструментов для частных случаев и, как правило, параллельно с экспериментальными исследованиями процесса.

Сложности DNS-моделей обусловили развитие другого направления — метода моделирования крупных вихрей (LES-модели). Данные модели предполагают моделирование вихрей масштабом меньше размера шага сетки посредством разделения крупных и мелких вихревых структур с помощью специальных операций (например, фильтрации). В качестве значения функции в точке берется среднее значение этой функции по объему ячейки расчетной сетки.

Оптимальными с точки зрения точности результатов и вычислительных затрат являются RANS-модели. Из-за высоких требований к квалификации пользователя, высокой стоимости программного обеспечения, больших вычислительных и временных затрат данные модели не предназначены для пакетного расчета большого числа сценариев. Однако, если топография местности достаточно сложна, такие модели могут быть единственным решением для адекватного моделирования процесса распространения облака.

Достоинства моделей RANS и LES сочетаются в комбинированном подходе, получившем название «модель отсоединенных вихрей» (DES — detached eddy simulation). В этой модели выбор подхода к описанию турбулентности (RANS или LES) осуществляется в зависимости от соотношения между размером вычислительной сетки и характерным линейным масштабом турбулентности в рассматриваемой точке потока. Использование уравнений Рейнольдса при описании течения позволяет снять ограничения на размеры ячеек сетки в пограничном слое.

В России в области методического обеспечения математическая CFD-модель вычислительной гидродинамики нашла свое отражение в Руководстве по безопасности «Методика оценки последствий аварий на взрывопожароопасных химических производствах» [33]. В настоящее время в рамках импортозамещения в ЗАО НТЦ ПБ (www.safety.ru)

ведутся работы по разработке отечественного программного комплекса TOXI+CFD для численного моделирования процессов рассеяния и взрывов опасных веществ в трехмерной постановке, не уступающего по функциональным возможностям и эффективности зарубежным аналогам [34].

Заключение

Анализ имеющихся подходов и практики их применения показал, что для выброса на ровном незагроможденном пространстве хорошее качество предсказаний может быть достигнуто в рамках интегральных моделей. При этом затраты вычислительных ресурсов на расчет одного варианта крайне незначительны. С учетом этого факта интегральные модели широко применяют при количественной оценке риска, т.е. там, где необходимы серии расчетов (до сотен тысяч вариантов расчетов).

Расчеты по простейшим эмпирическим моделям в настоящее время практически не проводят.

Для получения более точных результатов необходимо использовать CFD-модели. В рамках этих моделей можно получить наиболее точные и достоверные результаты, особенно при выбросах на сложном рельефе, в условиях загромождения, полной или частичной замкнутости пространства. Наибольшее распространение и опыт практического использования имеют модели, построенные на осредненных уравнениях Рейнольдса (RANS-модели), что может быть использовано при совершенствовании методик оценки риска аварий и разработке программного комплекса TOXI+CFD.

Несмотря на различные подходы к построению и способу описания физико-химических процессов, все математические модели должны проходить процедуру верификации путем сопоставления полученных результатов моделирования с данными натурных экспериментов.

Список литературы

1. *Гражданкин А.И.* Крупные промышленные аварии: из углепрома в постиндустрию// Безопасность труда в промышленности. — 2011. — № 8. — С. 58–62.
2. *Агапов А.А., Агапова Е.А.* Сертификация и верификация программных средств// Безопасность труда в промышленности. — 2015. — № 4. — С. 58–71.
3. *Верификация методик оценки последствий аварийных выбросов газа от источников продолжительного действия/ С.И. Сумской, А.В. Пчельников, М.В. Лисанов и др.*// Безопасность труда в промышленности. — 2005. — № 8. — С. 28–35.
4. *Hansen O.R., Ichard M., Davis S.G.* Validation of FLACS for Vapor Dispersion from LNG Spills: Model Evaluation Protocol// 12th Annual International Symposium of the Mary Kay O'Connor Process Safety Center. — Texas: Texas A&M University, 2009.
5. *Гражданкин А.И., Печеркин А.С., Сидоров В.И.* Исследование аварий в химической, нефтехимической и нефтеперерабатывающей промышленности США. Правовая

практика и уроки// Безопасность труда в промышленности. — 2013. — № 7. — С. 58–66.

6. *Сравнительный анализ российских и зарубежных методик и компьютерных программ по моделированию аварийных выбросов и оценке риска* / Е.А. Агапова, Д.В. Дегтярев, М.В. Лисанов и др.// Безопасность труда в промышленности. — 2015. — № 9. — С. 71–78.

7. *Сравнение результатов моделирования аварийных выбросов опасных веществ с фактами аварий* / С.И. Сумской, К.В. Ефремов, М.В. Лисанов, А.С. Софьин// Безопасность труда в промышленности. — 2008. — № 10. — С. 42–50.

8. *Сравнение результатов расчетов последствий аварийных выбросов опасных веществ по программным комплексам ТОХИ+ и PHAST* / М.В. Лисанов, К.В. Ефремов, С.И. Сумской, В.А. Пантелеев// Безопасность труда в промышленности. — 2011. — № 2. — С. 56–60.

9. *Сравнительный анализ результатов моделирования последствий химических аварий с использованием программного комплекса ТОКСИ+Risk* / Т.В. Савицкая, А.Ф. Егоров, Л.А. Запасная и др.// Безопасность труда в промышленности. — 2012. — № 8. — С. 78–83.

10. *Моделирование аварийных утечек на магистральных нефтепроводах* / С.И. Сумской, А.А. Агапов, А.С. Софьин и др.// Безопасность труда в промышленности. — 2014. — № 9. — С. 50–53.

11. *Markiewicz M. A Review of Mathematical Models for the Atmospheric Dispersion of Heavy Gases*// Ecological Chemistry and Engineering. — 2012. — Vol. 19. — № 3. — P. 297–314.

12. *Blackmore D.R., Herman M.N., Woodward J.L. Heavy gas dispersion models*// Journal of Hazardous Materials. — 1982. — Vol. 6. — Iss. 1–2. — P. 107–128.

13. *Burgess D.S., Zabetakis M.G. Detonation of a flammable cloud following a propane pipeline break: the December 9, 1970, explosion in Port Hudson*// US Department of the Interior. Bureau of Mines, Report of Investigations. — 1973. — № 7752. — 32 p.

14. *Clancey V.J. Liquid and vapour emission and dispersion*// Course on Loss prevention in the process industries. — 1976.

15. *Britter R.E., McQuaid J. Workbook on the dispersion of dense gases*// HSE Contract Research Report. — 1988. — № 17/88. — 128 p.

16. *VDI Guidelines 3783, Part II Environmental Meteorology, Dispersion of heavy gases*// The Association of German Engineers. — 1990 — 43 p.

17. *CEC Model Evaluation Group. Heavy Gas Dispersion Expert Group. Final report* / A. Mercer, C. Bartholome, B. Carissimo etc. — 1998. — 62 p.

18. *Van Ulden A.P. On the spreading of a heavy gas released near the ground*// 1st International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industry. — 1974. — P. 221–226.

19. *Методика оценки последствий химических аварий (Методика «Токси». Редакция 2.2)*// Методики оценки последствий аварий на опасных производственных объектах: сб. документов. — Сер. 27. — Вып. 2. — М.: ГУП «НТЦ «Промышленная безопасность», 2001. — С. 121–204.

20. *Методика расчета распространения аварийных выбросов, основанная на модели рассеивания тяжелого газа* / А.А. Шаталов, М.В. Лисанов, А.С. Печеркин и др.// Безопасность труда в промышленности. — 2004. — № 9. — С. 46–52.

21. *Методика моделирования распространения аварийных выбросов опасных веществ: рук. по безопасности: приказ Ростехнадзора от 20 апр. 2015 г. № 158.* — Сер. 27. — Вып. 11. — М.: ЗАО НТЦ ПБ, 2015. — 77 с.

22. *Ooms G., Mahiue A.P., Zelis F. The plume path of vent gases heavier than air*// 1st International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industry. — 1974. — P. 211–219.

23. *Hoot T.G., Meroney R.N., Peterka J.A. Wind tunnel tests of negatively buoyant plumes. Technical report*// Fluid Dynamics/Diffusion Laboratory. — 1973 — 104 p.

24. *Абрамович Г.Н. Теория турбулентных струй.* — М.: ЭКОЛИТ, 1960. — 720 с.

25. *Бруацкий Е.В. Турбулентные стратифицированные струйные течения.* — Киев: Наукова думка, 1986. — 295 с.

26. *Witlox H.W.M. The HEGADAS model for ground-level heavy-gas dispersion-I. Steady-state model*// Atmospheric Environment. — 1994. — Vol. 28. — Iss. 18. — P. 2917–2932.

27. *Spicer T.O., Havens J.A. User's Guide For The DEGADIS 2.1 Dense Gas Dispersion Model*// US Environmental Protection Agency. — 1989 — 431 p.

28. *Colenbrander G.W. A mathematical model for the transient behaviour of dense vapour clouds*// 3rd International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industry, Basle. — 1980. — P. 1104–1132.

29. *Te Riele P.H.M. The Atmospheric dispersion of heavy gases emitted at or near ground level*// 2nd International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industry. — 1977. — P. 347–357.

30. *Schreurs P., Mewis J. Development of a transport phenomena model for accidental (heavy gas) releases in an industrial environment*// Atmospheric Environment. — 1987. — Vol. 21. — P. 765–776.

31. *Britter R.E. A researcher's/consultant's view on advances in source and dispersion modelling*// International conference and Workshop on Modeling and Mitigating the Consequence of Accidental Releases of Hazardous Materials. — 1995. — P. 67–76.

32. *Волков К.Н., Емельянов В.Н., Зазимко В.М. Турбулентные струи — статистические модели и моделирование крупных вихрей.* — М.: Физматлит, 2014. — 360 с.

33. *Методика оценки последствий аварий на взрывопожароопасных химических производствах: рук. по безопасности: приказ Ростехнадзора от 20 апр. 2015 г. № 160.* — Сер. 09. — Вып. 43. — М.: ЗАО НТЦ ПБ, 2015. — 18 с.

34. *Методическое обеспечение и проблемы анализа риска аварий на опасных производственных объектах нефтегазового комплекса* / М.В. Лисанов, А.С. Печеркин, С.И. Сумской, А.А. Швыряев// Вести газовой науки. — 2017. — № 1. — С. 180–187.

eagapova@safety.ru

Материал поступил в редакцию 17 апреля 2017 г.

«Bezopasnost Truda v Promyshlennosti»/ «Occupational Safety in Industry», 2017, № 5, pp. 23–31.

DOI: 10.24000/0409-2961-2017-5-23-31

Analytical Review of the Mathematical Models of Heavy Gas Clouds Dispersion

Information about the Author

E.A. Agapova, Researcher, eagapova@safety.ru

Autonomous Noncommercial Organization «Industrial Risk Research Agency», Moscow, Russia

S.I. Sumskoj, Candidate of Technical Sciences, Senior Lecturer
NIYAU MEPhI, Moscow, Russia

Abstract

Review and analysis of mathematical models of heavy gas clouds dispersion, and the relevant software complexes are presented. Four main groups of models of heavy gas clouds dispersion are allocated: empirical, integral, Lagrangian and CFD-models. Use of empirical models is limited by the conditions close to the conditions of experiments in which they were created. Integrated models allow to ensure good coincidence with the results of experiments for emissions in the conditions of the flat area in the non-congested space. Within CFD-models it is possible to obtain the most precise and reliable results, especially at emissions on the complicated relief, in the conditions of, congestion, full or partially confined space. The conclusion is drawn on the need of conducting the procedure of verification of all the mathematical models by comparison of the obtained results of modeling with the data of full-scale experiments.

Key words: mathematical model, dispersion, heavy gases, classification, CFD-modeling.

References

1. Grazhdankin A.I. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2011. № 8. pp. 58–62.
2. Agapov A.A., Agapova E.A. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2015. № 4. pp. 58–71.
3. Sumskoj S.I., Pchelnikov A.V., Lisanov M.V., Pecherkin A.S., Shargatov V.A. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2005. № 8. pp. 28–35.
4. Hansen O.R., Ichard M., Davis S.G. 12th Annual International Symposium of the Mary Kay O'Connor Process Safety Center. Texas: Texas A&M University, 2009.
5. Grazhdankin A.I., Pecherkin A.S., Sidorov V.I. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2013. № 7. pp. 58–66.
6. Agapova E.A., Degtarev D.V., Lisanov M.V., Krjukov A.S., Kulberg S.B., Sumskoj S.I. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2015. № 9. pp. 71–78.
7. Sumskoj S.I., Efremov K.V., Lisanov M.V., Sofin A.S. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2008. № 10. pp. 42–50.
8. Lisanov M.V., Efremov K.V., Sumskoj S.I., Panteleev V.A. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2011. № 2. pp. 56–60.
9. Savickaja T.V., Egorov A.F., Zapasnaja L.A., Dementienko A.V., Karibova Ju.A. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2012. № 8. pp. 78–83.
10. Sumskoj S.I., Agapov A.A., Sofin A.S., Sverchkov A.M., Egorov A.F. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2014. № 9. pp. 50–53.
11. Markiewicz M. *Ecological Chemistry and Engineering*. 2012. Vol. 19. № 3. pp. 297–314.
12. Blackmore D.R., Herman M.N., Woodward J.L. *Journal of Hazardous Materials*. 1982. Vol. 6. Iss. 1–2. pp. 107–128.
13. Burgess D.S., Zabetakis M.G. Detonation of a flammable cloud following a propane pipeline break: the December 9, 1970, explosion in Port Hudson. US Department of the Interior. Bureau of Mines, Report of Investigations. 1973. № 7752. 32 p.

14. Clancey V.J. Liquid and vapour emission and dispersion. Course on Loss prevention in the process industries. 1976.
15. Britter R.E., McQuaid J. Workbook on the dispersion of dense gases. HSE Contract Research Report. 1988. № 17/88. 128 p.
16. VDI Guidelines 3783, Part II Environmental Meteorology, Dispersion of heavy gases. The Association of German Engineers. 1990. 43 p.
17. Mercer A., Bartholome C., Carissimo B., Duijm N.J., Giesbrecht H. CEC Model Evaluation Group. Heavy Gas Dispersion Expert Group. Final report. Luxembourg, 1998. p. 62.
18. Van Ulden A.P. 1st International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industry. 1974. pp. 221–226.
19. *Metodiki ocenki posledstvij avarij na opasnyh proizvodstvennyh obektah: sb. dokumentov* (Methods of Assessment of Accidents Consequences at Hazardous Production Facilities: Collection of Documents). Ser. 27. Iss. 2. Moscow: GUP «NTC «Promyshlennaja bezopasnost», 2001. pp. 121–204.
20. Shatalov A.A., Lisanov M.V., Pecherkin A.S., Pchelnikov A.V., Sumskoj S.I. *Bezopasnost truda v promyshlennosti = Occupational Safety in Industry*. 2004. № 9. pp. 46–52.
21. *Metodika modelirovaniya rasprostraneniya avariynyh vybrosov opasnyh veshhestv: ruk. po bezopasnosti: prikaz Rostehnadzora ot 20 apr. 2015 g. № 158* (Methods of Modeling of Dispersion of Hazardous Substances Emergency Discharge: Safety Guide: Order of Rostehnadzor of April 20, 2015 № 158.). Ser. 27. Iss. 11. Moscow: ZAO NTC PB, 2015. 77 p.
22. Ooms G., Mahiue A.P., Zelis F. 1st International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industry. 1974. pp. 211–219.
23. Hoot T.G., Meroney R.N., Peterka J.A. Wind tunnel tests of negatively buoyant plumes. Technical report. Fluid Dynamics/Diffusion Laboratory. 1973. 104 p.
24. Abramovich G.N. *Teoriya turbulentnyh struj* (Theory of Turbulent Jets). Moscow: JeKOLIT, 1960. 720 p.
25. Brujackij E.V. *Turbulentnye stratifirovannye strujnye techenija* (Turbulent, Stratified Jet Streams). Kiev: Naukova dumka, 1986. 295 p.
26. Witlox H.W.M. *Atmospheric Environment*. 1994. Vol. 28. Iss. 18. pp. 2917–2932.
27. Spicer T.O., Havens J.A. User's Guide For The DEGADIS 2.1 Dense Gas Dispersion Model. US Environmental Protection Agency. 1989. 431 p.
28. Colenbrander G.W. 3rd International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industry, Basle. 1980. pp. 1104–1132.
29. Te Riele P.H.M. 2nd International Symposium on Loss Prevention and Safety Promotion in the Process Industry. 1977. pp. 347–357.
30. Schreurs P., Mewis J. *Atmospheric Environment*. 1987. Vol. 21. pp. 765–776.
31. Britter R.E. International conference and Workshop on Modeling and Mitigating the Consequence of Accidental Releases of Hazardous Materials. 1995. pp. 67–76.
32. Volkov K.N., Emeljanov V.N., Zazimko V.M. *Turbulentnye strui — statisticheskie modeli i modelirovanie krupnyh vihrej* (Turbulent Jets — Statistical Models and Modeling of Large Vortexes). Moscow: Fizmatlit, 2014. 360 p.
33. *Metodika ocenki posledstvij avarij na vzryvopozharoopasnyh himicheskikh proizvodstvah: ruk. po bezopasnosti: prikaz Rostehnadzora ot 20 apr. 2015 g. № 160* (Methods of Assessment of Accidents Consequences at Explosion and Fire Hazardous Chemical Plants: Safety Guide: Order of Rostehnadzor of April 20, 2015 № 160). Ser. 09. Iss. 43. Moscow: ZAO NTC PB, 2015. 18 p.
34. Lisanov M.V., Pecherkin A.S., Sumskoj S.I., Shvyryaev A.A. *Vesti gazovoj nauki = News of Gas Science*. 2017. № 1. pp. 180–187.



Нормативные документы и периодические издания Ростехнадзора можно заказать по интернету.

Интернет-магазин shop.safety.ru

Будем рады сотрудничеству!

По всем вопросам обращайтесь:
тел/факсы: **(495) 620-47-53, 640-47-52.**
E-mail: **shop@safety.ru**

