© «Вестник ИГЭУ» Вып. 3 2007 г.

УДК 004.942:504.3.054

МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ И РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТВЕРДЫХ, ЖИДКИХ И ГАЗООБРАЗНЫХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ В ВОЗДУШНОЙ СРЕДЕ

ПЕКУНОВ В.В., канд. техн. наук

Предлагается новая многофазная многокомпонентная модель образования и распространения загрязнений, учитывающая наиболее значимые факторы: турбулентность, перенос излучения, тепла, пыли и реагирующих газов, динамику водяного пара и капель, конденсацию и испарение капель, поглощение газов каплями. Применен новый подход к моделированию капельных фаз.

Ключевые слова: моделирование процессов, локально-одномерное расщепление, метод моделирования капель.

THE FORMATION AND SPREADING MODELING OF SOLID, LIQUID AND GASEOUS POLLUTANTS IN ATMOSPHERE

PEKUNOV V.V., Ph.D.

The article deals with multiphase many-component model of formation and spreading of pollutants, it takes into account the most significant factors: turbulence, radioactive, heat, dust and reacting gases transport, water steam and drop dynamics, drop condensation and evaporation, the absorption of gases by drops. The article contains a new approach to drop phase simulation.

Key words: process simulation, locally one-dimensional fission, drop simulation method.

Проблема моделирования образования и распространения загрязнений в воздушной среде является актуальной. Известные нам работы, посвященные этой проблеме, не учитывают должным образом наиболее значимые факторы: а) первичное загрязнение при выбросе и переносе твердых, жидких и газообразных веществ в турбулентных воздушных потоках; б) вторичное загрязнение в результате проходящих химических реакций; в) распространение прямого и рассеянного излучения, оказывающего влияние на процессы тепло- и массообмена, инициирующего фотохимические реакции; г) поглощение газообразных загрязнителей каплями атмосферной воды и выпадение кислотных осадков. Нами предлагается модель, в достаточно полной мере учитывающая эти и другие факторы.

Введем правую систему координат (x_1, x_2, x_3) с вертикальной осью Ox_3:

$$\nabla^2\psi_j = -\omega_j; \qquad j = 1, 2, 3;$$

$$\frac{\partial\omega_j}{\partial t} + U\nabla\omega_j = \nabla^2\left(\left(\nu_{мол} + \nu_{турб}\right)\omega_j\right) + \omega\nabla U_j + \tilde{F}_j;$$

$$\tilde{F} = \left(bg\frac{\partial T}{\partial x_2};\ -bg\frac{\partial T}{\partial x_1};\ 0\right);$$

$$U = \nabla\times\psi;$$

$$\omega = \nabla\times U;$$

$$\frac{\partial T}{\partial t} + U\nabla T = \nabla\left(\left(\frac{\lambda_0}{c\rho} + \alpha_T\nu_{турб}\right)\nabla T\right) + \frac{W_l^{дифф} + W_l^{пр}}{c\rho},$$

где ψ – векторный потенциал; ω – вектор вихря; U – вектор скорости основной фазы; $\nu_{мол}$ и $\nu_{турб}$ – молекулярная и турбулентная вязкости; T – температура; λ_0, c, ρ, b – теплопроводность, удельная теплоемкость, плотность и термический коэффициент расширения воздуха, соответственно; α – коэффициенты.

Используем *модель турбулентности Абрамовича-Секундова*:

$$\frac{\partial\nu_{турб}}{\partial t} + U\nabla\nu_{турб} = \nabla\left(\left(\nu_{мол} + \kappa\nu_{турб}\right)\nabla\nu_{турб}\right) + \nu_{турб}f\left(\frac{\nu_{турб}}{8\nu_{мол}}\right)D - \gamma\, S;$$

$$S = \frac{\nu_{турб}\left(\nu_{мол} + \beta\nu_{турб}\right)}{L_{min}^2};$$

$$D = \sqrt{\sum_{i=1}^{3}\sum_{j=1}^{3}\frac{\partial U_i}{\partial x_j}\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i}\right)};$$

$$f(z) = 0{,}2\frac{z^2 + 1{,}47z + 0{,}2}{z^2 - 1{,}47z + 1},$$

где κ = 2,0; γ = 50,0; β = 0,06; L_{min} – кратчайшее расстояние до стенки;

$$\frac{\partial C_j}{\partial t} + \left(U + W_j\right)\nabla C_j = \nabla\left(\left(D_{C_j} + \alpha_{C_j}\nu_{турб}\right)\nabla C_j\right) - \Delta C_j + \frac{d\,C_j}{d\,t};$$

$$j = \overline{1,N};$$

$$\Delta C_j = \sum_{i=1}^{Z}\tilde{\Phi}_{j,i}^{0} + \sum_{i=1}^{Z-1}\tilde{\Phi}_{j,i+1}^{-} + \sum_{i=2}^{Z}\tilde{\Phi}_{j,i-1}^{+};$$

$$\frac{dC_i}{d\,t} = \sum_{k=1}^{q}R_{ik}A_k\prod_{m=1}^{N}C_m^{L_{mk}} - \sum_{k=1}^{q}L_{ik}A_k\prod_{m=1}^{N}C_m^{L_{mk}};$$

$$i = \overline{1,N},$$

где C – вектор концентраций веществ (газов и переносимых воздухом пылевых частиц); W_j, D_{C_j} – скорость витания и коэффициент диффузии j-го вещества; N – число веществ; q – число химических реакций; R_{ik} и L_{ik} – стехиометрические коэффициенты при i-м веществе в правой и левой частях k-й реакции; $A_k = A_k(T)$ – константа скорости k-й реакции (для фотохимических реакций A_k отлична от нуля лишь в случае, если суммарная освещенность превышает заданный стартовый порог).

Особо выделим уравнение диффузии пара с концентрацией $C_п = C_{i=п}$:

$$\frac{\partial C_п}{\partial t} + (U + W_п)\nabla C_п = \nabla\left(\left(D_п^0 + \alpha_{C_п}\nu_{турб}\right)\nabla C_п\right) - \Delta C_п + \frac{dC_п}{dt};$$

$$\Delta C_п = \frac{1}{M_k}\left(\sum_{i=1}^{Z}\Phi_i^0 + \sum_{i=1}^{Z-1}\Phi_{i+1}^- + \sum_{i=2}^{Z}\Phi_{i-1}^+\right),$$

где $D_п^0$ – коэффициент диффузии пара; M_k – молярная масса воды.

Запишем уравнение переноса диффузного излучения в N_{rad} диапазонах (в последнем диапазоне – тепловое инфракрасное излучение) по *модели K.N.Liou*:

$$\nabla^2 I_0^{0,j} = \beta_t^j\left[3\alpha_t^j I_0^{0,j} - F_t^j\right];$$

$$j = \overline{1, N_{rad}};$$

$$F_t^j = \begin{cases} \dfrac{3\beta_s^j F_0^j}{4\pi}, & \text{если } j < N_{rad}, \\ 3\alpha_t^{N_{rad}} \displaystyle\int_{\lambda_2^{N_{rad}}}^{\lambda_2^{N_{rad}}} B(T)\,d\lambda, & \text{если } j = N_{rad}; \end{cases}$$

$$W_l^{дифф} = \sum_{j=1}^{N_{rad}}\left[4\pi\alpha_t^j I_0^{0,j} - \frac{4}{3}\pi F_t^j\right];$$

$$W_l^{пр} = \sum_{j=1}^{N_{rad}-1}\beta_e^j F_0^j,$$

где $I_0^{0,j}$ – первый компонент разложения интенсивности излучения в j-м диапазоне (метод сферических гармоник); F_0^j – интегральная освещенность (прямое солнечное излучение) (находится обратной трассировкой луча, что существенно упрощает вычисления, особенно в областях сложной формы); λ_1^j и λ_2^j – начальная и конечная длины волн, соответственно; B(T) – функция Планка; β_e^j, α_t^j, β_s^j – коэффициенты ослабления, поглощения и рассеивания, соответственно.

Запишем уравнения для *фазы тяжелых пылевых частиц*:

$$\frac{\partial U_{p\,j}}{\partial t} + U_p\nabla U_{p\,j} = \nabla\left(\left(\nu_{рмол} + \alpha\nu_{турб}\right)\nabla U_{p\,j}\right) - g_j + \left[F_p\left\langle U - U_p\right\rangle\right]_j;$$

j = 1, 2, 3;

$$\frac{\partial\rho_p}{\partial t} + U_p\nabla\rho_p = \nabla\left(\left(D_\rho + \alpha_\rho\nu_{турб}\right)\nabla\rho_p\right) - \rho_p\left(\nabla U_p\right),$$

где U_p – вектор скорости пылевой фазы; $\nu_{рмол}$ – кинематическая вязкость пылевой фазы; $g_1 = 0$, $g_2 = 0$, $g_3 = g$; $F_p\left\langle\Delta U\right\rangle$ – сила сопротивления частицы потоку; ρ_p – плотность пыли; D_p и α_p – коэффициенты.

Предлагаем *новый подход для моделирования фазы капель* из Z компонентов. Основные уравнения имеют следующий вид:

$$\frac{\partial\rho_k^i}{\partial t} + \left(U + W_k^i\right)\nabla\rho_k^i = \nabla\left(\left(D_{\rho k}^i + \alpha_{\rho k}\nu_{турб}\right)\nabla\rho_k^i\right) - \rho_k^i\left(\nabla\left(U + W_k^i\right)\right) + \Delta\rho_k^i;$$

$$\frac{\partial N_k^i}{\partial t} + \left(U + W_k^i\right)\nabla N_k^i = \nabla\left(\left(D_{Nk}^i + \alpha_{Nk}\nu_{турб}\right)\nabla N_k^i\right) - N_k^i\left(\nabla\left(U + W_k^i\right)\right) + \Delta N_k^i;$$

$$W_k^i = \left(0;\ 0;\ -\Delta^i U\right);$$

$$F_k^i\left\langle\Delta^i U\right\rangle - g = 0;$$

$$i = \overline{1, Z};$$

$$\Delta\rho_k^i = \Phi_i^0 + \Phi_{i+1}^- + \Phi_{i-1}^+ + \frac{1}{\tau}\left[-\Delta^+\rho_k^i - \Delta^-\rho_k^i + \Delta^+\rho_k^{i-1} + \Delta^-\rho_k^{i+1}\right];$$

$$\Delta N_k^i = \frac{1}{\tau}\left[-\Delta^+ N_k^i - \Delta^- N_k^i + \Delta^+ N_k^{i-1} + \Delta^- N_k^{i+1}\right];$$

$$\Delta^- N_k^i = \int_{x_i}^{d_i^{**}} n_i(D)\,dD;$$

$$\Delta^+ N_k^i = \int_{d_i^*}^{y_i} n_i(D)\,dD;$$

$$\Phi_i^0 = \pi\int_{d_i^{**}}^{d_i^*} n_i(D)\,D L_i(D)\,dD;$$

$$\Phi_i^- = \pi\int_{x_i}^{d_i^{**}} n_i(D)\,D L_i(D)\,dD;$$

$$\Phi_i^+ = \pi\int_{d_i^*}^{y_i} n_i(D)\,D L_i(D)\,dD;$$

$$\Delta^-\rho_k^i = \frac{\pi}{6}\bar{\rho}_k^i\int_{x_i}^{d_i^{**}} n_i(D)\,D^3\,dD;$$

$$\Delta^+\rho_k^i = \frac{\pi}{6}\bar{\rho}_k^i\int_{d_i^*}^{y_i} n_i(D)\,D^3\,dD;$$

$$n_i(D) = a_i d + b_i;$$

$$\frac{\partial\gamma_j^i}{\partial t} + \left(U + W_k^i\right)\nabla\gamma_j^i = \nabla\left(\left(D_{\gamma j}^i + \alpha_\gamma\nu_{турб}\right)\nabla\gamma_j^i\right) + \Delta\gamma_j^i;$$

$$j = \overline{1, N};$$

$$\Delta\gamma_j^i = \tilde{\Phi}_{j,i}^0 + \tilde{\Phi}_{j,i+1}^- + \tilde{\Phi}_{j,i-1}^+ + \frac{1}{\tau}\left[-\Delta^+\rho_k^i\frac{\gamma_j^i}{\bar{\rho}_k^i} - \Delta^-\rho_k^i\frac{\gamma_j^i}{\bar{\rho}_k^i} + \Delta^+\rho_k^{i-1}\frac{\gamma_j^{i-1}}{\bar{\rho}_k^{i-1}} + \Delta^-\rho_k^{i+1}\frac{\gamma_j^{i+1}}{\bar{\rho}_k^{i+1}}\right];$$

$$\tilde{\Phi}_{j,i}^0 = \pi\int_{d_i^{**}}^{d_i^*} n_i(D)\,D\tilde{L}_j^i(D)\,dD;$$

$$\tilde{\Phi}_{j,i}^- = \pi\int_{x_i}^{d_i^{**}} n_i(D)\,D\tilde{L}_j^i(D)\,dD;$$

$$\tilde{\Phi}^{+}_{j,i} = \pi \int_{d_i^*}^{y_i} n_i(D) D \tilde{L}^i_j(D) dD;$$

$$d_i^* = \begin{cases} y_i, & \text{если } i = Z+1 \text{ или } C_п < C^i_{пов}(y_i), \\ y_i - \tau \dfrac{2L_i(y_i)}{\bar{\rho}^i_k y_i}, & \text{иначе;} \end{cases}$$

$$d_i^{**} = \begin{cases} x_i - \tau \dfrac{2L_i(x_i)}{\bar{\rho}^i_k x_i}, & \text{если } C_п < C^i_{пов}(x_i), \\ x_i, & \text{иначе,} \end{cases}$$

где ρ^i_k, N^i_k, U^i_k – плотность, концентрация и вектор скорости i-го компонента, соответственно; $D^i_{\rho k}$, D^i_{Nk}, $D^i_{\gamma j}$ и α – коэффициенты; $F^i_k\langle\Delta U\rangle$ – сила сопротивления потоку с учетом деформации; τ – шаг интегрирования по времени; $L_i(D)$ и $\tilde{L}^i_j(D)$ – потоки пара и j-го газа между i-м компонентом и средой; $\bar{\rho}^i_k$ – плотность воды; γ^i_j – концентрация j-го газа в каплях i-го компонента; $C^i_{пов}(d)$ – концентрация пара на поверхности капли (с поправками Кельвина и Кехлера).

Предложенный ранее [4] алгоритм расчета параметров a_i и b_i кусочных распределений (линейных при полном заполнении (капли с диаметрами от d_i до d_{i+1}) и равномерных при частичном заполнении (с поиском начала x_i или конца y_i заполнения)) путем интерполяции по значениям ρ^i_k и N^i_k работает даже с разрывными распределениями, которые могут недостаточно корректно обрабатываться при использовании традиционных подходов [1, 2, 3].

Для численного интегрирования уравнений переноса используется локально-одномерное расщепление (неявная разностная схема), для уравнений Пуассона и Гельмгольца – верхняя релаксация (с «шахматным» порядком обхода узлов и чебышевским ускорением), для уравнений химической кинетики предложена компромиссная разностная схема [5] (синтез схем Рожкова и Адамса-Моултона), обладающая хорошей устойчивостью и приемлемой точностью при невысокой трудоемкости, а также применяется метод Гира.

Таким образом, предложенная трехмерная многофазная многокомпонентная модель образования и распространения загрязнений учитывает наиболее значимые факторы и включает нестандартную подсистему уравнений, описывающих динамику и кинетику капельной фазы и работающую даже с разрывными распределениями капель. Сравнение результатов экспериментов с использованием данных уравнений и с применением лагранжевого подхода показало, что наш метод моделирования капель имеет крайне низкие трудозатраты (в 540 раз меньше, чем при прямом моделировании 1000 капель), относительную погрешность до 18 % для плотности и до 35 % по поглощенным загрязнителям. Модель апробирована в численных экспериментах [6] на многопроцессорных системах МВС-1000, в том числе, на реальных данных. Предложенная модель может применяться для прогнозирования концентраций загрязнителей в воздушном бассейне большого города и в окрестности энергетических предприятий. На базе этой модели разработана программа параллельного численного моделирования образования и распространения твердых, жидких и газообразных загрязнителей AirEcology-P (зарегистрирована в РОСПАТЕНТ, свидетельство №2006611068, 21.03.2006).

Работа была выполнена при финансовой поддержке Минобразования и науки (грант РНП.2.2.1.1.7280).

Список литературы

1. **Aloyan A.E., Arutyunyan V.O., Louzan P.I.** Numerical modeling of the gas-aerosol interaction in the atmoshpere // Измерения, моделирование и информационные системы как средства снижения загрязнений на городском и региональном уровне: Тр. Междунар. науч. конф. «ENVIROMIS 2002». – Томск, 2002. – Т.1. – С. 158–164.

2. **Zhang M., Lin W., Bretherton C.S., Hack J.J., Rasch P.J.** A Modified Formulation of Fractional Stratiform Condensation Rate in the NCAR Community Atmospheric Model (CAM2) // J. Geophys. Res. – 2003. – Vol. 108. – No. D1. – P. ACL 10-1.

3. **FLUENT** 6 User's Guide. – Fluent Inc., 2001.

4. **Пекунов В.В., Ясинский Ф.Н.** Математическая модель микроклимата в производственных помещениях с повышенной влажностью // Изв. вузов. Технология текстильной промышленности. – 2006. – №2. – С. 128–133.

5. **Пекунов В.В**. Компромиссная разностная схема для уравнений химической кинетики на основе схем Адамса-Моултона и Рожкова // Вестник ИГЭУ. – Иваново, 2005. – Вып. 4. – С. 92–95.

6. **Пекунов В.В., Ясинский Ф.Н.** Параллельное решение задачи численного моделирования распространения загрязнений в воздушном бассейне большого города и в окрестности предприятия: Препринт № 36 / Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН. – М., 2003.

Пекунов Владимир Викторович,
ГОУВПО «Ивановский государственный энергетический университет имени В.И. Ленина»,
кандидат технических наук, доцент кафедры высокопроизводительных вычислительных систем,
телефон (4932) 26-98-29.