P.J., Caines P.E. A globally convergent adaptive predictor/ / Automatica. 1981. №1. P.135–140.

Поступила в редколлегию 20.05.2002

Рецензент: д-р техн. наук, проф. Любчик Л.М.

Плисс Ирина Павловна, канд. техн. наук, ст. науч. сотр., вед. науч. сотр ПНИЛ АСУ ХНУРЭ, член IEEE. Научные интересы: адаптивные системы, искусственные нейронные сети. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел.: 40-98-90. E-mail: pliss@ieee.org

Чапланов Алексей Павлович, аспирант кафедры искусственного интеллекта, мл. науч. сотр. ПНИЛ АСУ ХНУРЭ. Научные интересы: искусственные нейронные сети. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел.: 40-98-90. E-mail: asd@white.kharkov.com

Чепенко Татьяна Евгеньевна, аспирантка кафедры искусственного интеллекта, науч. сотр. ПНИЛ АСУ ХНУРЭ. Научные интересы: искусственные нейронные сети. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14, тел.: 40-98-90.

УДК 519.673

МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕИВАНИЯ ПРИМЕСИ НИЗКОТЕМПЕРАТУРНЫХ ВЕЩЕСТВ В ПРИЗЕМНОМ СЛОЕ АТМОСФЕРЫ

ТЕВЯШЕВ А.Д., ВЫХОДЦЕВ Е.И.

Рассматривается модель рассеивания примеси, образующейся в результате аварийного выброса, в приземном слое атмосферы по законам турбулентной диффузии и эффективный метод ее решения.

1. Введение

Низкотемпературные вещества (хлор, аммиак, сжиженный природный газ и т.п.) относятся к числу крупнотоннажных химических продуктов. Связанные с ними отрасли промышленности характеризуются большими затратами энергии, высокой степенью концентрации производственных мощностей, что определяет необходимость транспортировки этих веществ на значительные расстояния, а также организации складов и хранилищ на местах производства, потребления и переработки.

Развитая структура и значительные объемы производства, транспорта и хранения низкотемпературных веществ представляют повышенную опасность для окружающей среды и человека в связи с тем, что они являются сильнодействующими ядовитыми веществами (СДЯВ) и относятся к вредным веществам согласно общепринятой классификации. Существующие методики расчета последствий аварийных ситуаций, связанных с разливами, выбросами и утечками низкотемпературных веществ в окружающую среду, дают сильно завышенные результаты, что приводит к дополнительным затратам при составлении плана ликвидации последствий аварии. Поэтому разработка методик, которые давали бы более точные решения, а также позволяли проводить прогностические расчеты для более полного класса внешних условий, является актуальной [1].

В данной работе рассматривается моделирование рассеивания примеси, которая образовалась в результате аварийного выброса, в приземном слое атмосферы по законам турбулентной диффузии с использованием уравнения *K*-теории атмосферной диффузии [2,3].

2. Модель

Прогноз загрязнения атмосферы в результате аварийного выброса или утечки низкотемпературного вещества основывается на использовании решения дифференциального уравнения турбулентной диффузии [2]:

$$\frac{\partial q}{\partial t}+u_x\frac{\partial q}{\partial x}+u_y\frac{\partial q}{\partial y}+u_z\frac{\partial q}{\partial z}=$$

$$=\frac{\partial}{\partial x}k_x\frac{\partial q}{\partial x}+\frac{\partial}{\partial y}k_y\frac{\partial q}{\partial y}+\frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial q}{\partial z}-\alpha q+f\,, \quad (1)$$

где q – концентрация примеси в атмосфере; t – время; x, y, z – координаты; u_x, u_y, u_z – составляющие средней скорости перемещения примеси вдоль осей $0X$, $0Y$, $0Z$ соответственно; k_x, k_y, k_z – составляющие коэффициента обмена; α – коэффициент, определяющий изменение концентрации за счет превращения примеси; f – функция, описывающая источники примеси. Рассмотрим случай, когда $\alpha=0$, т.е. инертное поведение примеси.

При прогнозе загрязнения воздуха основной интерес представляет определение ожидаемых концентраций у земной поверхности. Для приземного слоя характерно значительное изменение с высотой скорости ветра, температуры и турбулентности. Для наиболее часто наблюдаемых метеорологических условий распределение коэффициентов турбулентного обмена k_x, k_y, k_z и скорости ветра u с высотой z носят степенной характер. Эта степенная зависимость определяется путем аппроксимации реального профиля k_x, k_y, k_z и u. Для расчета реального профиля используется зависимость [3]:

$$k_z=\begin{cases} D+k_1\dfrac{z}{z_1}\ \text{при}\ z\le h, \\ D+k_1\dfrac{h}{z_1}\ \text{при}\ z>h, \end{cases} \quad (2)$$

где z_1 – высота измерения скорости ветра; D – коэффициент молекулярной диффузии. Чтобы установить этот коэффициент, воспользуемся формулой для определения коэффициента диффузии бинарной смеси [4]:

$$[D_{12}]_1^0 = 0.002628 \frac{\sqrt{T^3(M_1+M_2)/2M_1M_2}}{p\sigma_{12}^2 \Omega_{12}^{(1,1)*}(T_{12}^*)}, \quad (3)$$

здесь p – давление, атм.; T – температура, K; $T_{12}^* = \frac{kT}{\varepsilon_{12}}$; M_1, M_2 – молекулярные веса компонентов; $\sigma_{12}, \varepsilon_{12}/k$ – параметры потенциальной энергии молекулы; $\sigma_{12} = \frac{\sigma_1+\sigma_2}{2}$; $\varepsilon_{12} = \sqrt{\varepsilon_1\varepsilon_2}$.

Коэффициент диффузии для плотных газов рассчитывается по формуле:

$$D_{12} = \frac{D_{12}^0}{Y_{12}}, \quad (4)$$

где

$$Y_{12} = 1 + \frac{2}{3}\pi n_1 \sigma_1^3 \left(\frac{\sigma_1 + 4\sigma_2}{4\sigma_1 + 4\sigma_2}\right) +$$

$$+ \frac{2}{3}\pi n_2 \sigma_2^3 \left(\frac{4\sigma_1 + \sigma_2}{4\sigma_1 + 4\sigma_2}\right) + \ldots$$

Величина

$$\Omega^{(l,s)*}(T^*) = \frac{2}{(s+1)!\,T^{*s+2}} \int_0^\infty e^{-\frac{g^{*2}}{T^*}} g^{*2s+3} Q^{(l)*}(g^*)\,dg^*$$

задается табличными значениями, зависящими от параметров l, s, T^* [4]. На основании этих табличных данных была построена апроксимационная функция для $\Omega^{(1,1)*}(T^*)$ при $0.3 < T^* < 400$, которая имеет следующий вид:

$$\Omega^{(1,1)*}(x) = 1.33277 - 0.0854794\, ln\, 161.87x +$$

$$+ 0.000077778\, x + \frac{0.420577}{x} - \frac{0.404464}{x^2} +$$

$$+ \frac{2.48342}{x^3} - \frac{4.90945}{x^4} + \frac{5.46147}{x^5} - \frac{3.78737}{x^6} +$$

$$+ \frac{1.66069}{x^7} - \frac{0.446515}{x^8} + \frac{0.0670726}{x^9} - \frac{0.00430381}{x^{10}}.$$

Для определения k_1 используется следующее выражение, которое справедливо в пределах приземного слоя [3]:

$$k_1 = \frac{\chi^2 u_1}{\ln \frac{z_1}{z_0}} L' J\left(\frac{z_1}{L'}\right). \quad (5)$$

Здесь c – постоянная Кармана (c=0.38); z_0 – эффективная шерховатость подстилающей поверхности; L' – масштаб Монина - Обухова, определяемый по степени вертикальной устойчивости; функция J определяется следующим образом:

$$J(x) = \begin{cases} x\left(1 + 0.54|x|^{0.8}\right), \; x < 0 \\ \frac{x}{1+0.9x}, 0 < x < 1 \\ 0.53x, \; x > 1. \end{cases} \quad (6)$$

Расчет профиля скорости ветра с учетом высоты основывается на зависимости

$$u = u_1 \frac{\ln\left(\frac{z}{z_0}\right)}{\ln\left(\frac{z_1}{z_0}\right)}. \quad (7)$$

Выражение (2) для k_z отражает то обстоятельство, что с увеличением высоты размеры вихрей, обуславливающих турбулентный обмен, возрастают в приземном слое ($z \le h$) и сравнительно мало изменяются при $z > h$, принимая некоторые характерные масштабы. Для вихрей этого масштаба можно полагать, что атмосферная турбулентность, выше приземного слоя, имеет примерно изотропный характер, вследствие чего здесь $k_x \approx k_y \approx k_z$. На наиболее низких уровнях k_x и k_y примерно равны между собой, естественно, изменяются с высотой, так как на подстилающей поверхности они должны быть равны нулю. Однако степень возрастания с высотой для k_x и k_y меньше, чем для k_z, поскольку влияние подстилающей поверхности на вертикальную компоненту коэффициента обмена должно быть большим, чем на горизонтальную. Этому условию приближенно удовлетворяет соотношение, предложенное Берляндом [3]:

$$k_y = k_0 u, \quad (8)$$

так как в приземном слое u растет примерно логарифмически с высотой z, а $k_z \sim z$. Принимая, что при $z = h$ имеет место равенство $k_0 u_h = k_h$, можно найти k_0 по u_h и k_h.

С поверхностью почвы примеси обычно слабо взаимодействуют. Попав на нее, примеси здесь не накапливаются, а с турбулентными вихрями снова уносятся в атмосферу. Поэтому с достаточной точностью принимается, что средний турбулентный поток примеси у земной поверхности мал, т.е.

$$k_z \frac{\partial q}{\partial z}\bigg|_{z=0} = 0. \quad (9)$$

При аварийных выбросах (разливах) время действия источника ограничено, т.е. $\exists l : f|_{t>l} = 0$. Кроме этого, на практике представляет интерес определение области, внутри которой уровень концентрации превышает предельно допустимую концентрацию. Исходя из этих предпосылок, можно рассматривать распределение концентрации в конечной области Ω. Чтобы установить границы этой области, можно воспользоваться стандартной методикой МЧС для определений возможной зоны загрязнения СДЯВ. Согласно этой методике, область Ω можно представить в виде цилиндра с основанием радиуса R и высотой H.

Выберем направление оси $0X$ так, чтобы оно совпало с направлением скорости ветра. Таким образом, окончательное уравнение имеет вид:

$$\frac{\partial q}{\partial t}+u\frac{\partial q}{\partial x}=k_x\frac{\partial^2 q}{\partial x^2}+k_y\frac{\partial^2 q}{\partial y^2}+\frac{\partial}{\partial z}k_z\frac{\partial q}{\partial z}+f \quad (10)$$

со следующими краевыми:

$$\begin{aligned} &q\big|_{\partial\Omega}=0 \\ &k_z\frac{\partial q}{\partial z}\bigg|_{z=0,z=H}=0 \end{aligned} \quad (11)$$

и начальными условиями:

$$q\big|_{t=0}=0\,. \quad (12)$$

3. Метод решения

Задачу (10)-(12) можно записать в виде:

$$\frac{\partial q}{\partial t}+Cu=f(t) \quad (13)$$

с начальными условиями:

$$q\big|_{t=0}=0\,, \quad (14)$$

где C – дифференциальный оператор в некотором сепарабельном гильбертовом пространстве H с областью определения $D(C)=D_C$, которая линейна и плотна в гильбертовом пространстве H; $q=q(t)$ и $f=f(t)$ – функции от t, значения которых суть элементы пространства H. Будем считать, что функция $f(t)$ непрерывна в промежутке $0\le t\le l$, где l некоторое положительное число.

Применим к задаче (13), (14) метод Бубнова–Галеркина [5]. Выберем координатную систему:

$$\varphi_1,\varphi_2,\ldots,\varphi_n,\ldots \quad (15)$$

подчиняющуюся следующим условиям: 1) $\varphi_n\in D_C,(n=1,2,\ldots)$; 2) элементы $\varphi_1,\varphi_2,\ldots,\varphi_n,\ldots$ линейно-независимы при любом n; 3) система (15) полна в D_C.

Будем искать приближенное решение задачи (13), (14) в виде

$$q_n(t)=\sum_{k=1}^{n}a_k^n(t)\varphi_k\,. \quad (16)$$

Входящие в формулу (16) неизвестные функции $a_k^n(t)$ будем определять из системы дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} &\rho_n\dot{a}^n(t)+R_n a^{(n)}(t)=f^{(n)}(t), \\ &a^{(n)}(0)=\alpha^{(n)}, \end{aligned} \quad (17)$$

где $R_n=\left\|\left[\varphi_k,\varphi_j\right]_C\right\|_{j,k=1}^{j,k=n}$, $\rho=\left\|\left(\varphi_k,\varphi_j\right)\right\|_{j,k=1}^{j,k=n}$,

$$a^{(n)}(t)=\left\{a_1^n(t),\ldots,a_n^n(t)\right\},$$

$$f^{(n)}(t)=\left\{(f(t),\varphi_1),\ldots,(f(t),\varphi_n)\right\},$$

$$\left(\varphi_k,\varphi_j\right)=\int_\Omega\varphi_k\varphi_j d\Omega\,,$$

$$\left[\varphi_k\varphi_j\right]_C=\left(C\varphi_k,\varphi_j\right).$$

Для определения вектора $\alpha^{(n)}$ нужно решить систему

$$\sum_{k=1}^{n}\left[\varphi_k,\varphi_j\right]_C\alpha_k^{(n)}=0\,. \quad (18)$$

Вопросы устойчивости и сходимости данного метода рассмотрены в работах [5,6].

Литература: 1.*Цыкало А.Л.* Методика расчета концентраций экологически опасных веществ в атмосфере при авариях и утечках. М.: ГССCД МР 96-92, 1992.32с. 2. Атмосферная турбулентность и моделирование распространения примесей // Под ред. *Ф.Т.М. Ньюстадта и Х. Ван Допа. Л.*: Гидрометеоиздат, 1985. 351с. 3.*Берлянд М.Е.* Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы. Л.: Гидрометеоиздат, 1985. 277 с. 4.*Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: Изд-во иностр. лит., 1961. 930с. 5. *Михлин С.Г.* Численная реализация вариационных методов. М.: Наука, 1966. 432с. 6.*Вишик М.И.* Задача Коши для уравнений с операторными коэффициентами, смешанная краевая задача для систем дифференциальных уравнений и приближенный метод их решения // Матем. сб. 1956. №39(81) Ч.1. С.51-148.

Поступила в редколлегию 21.12.2001

Рецензент: д-р техн. наук, проф. Петров Э.Г.

Тевяшев Андрей Дмитриевич, д-р техн. наук, профессор, зав. каф. ПМ ХНУРЭ. Научные интересы: системный анализ и теория оптимального стохастического управления. Адрес: Украина, 61166, Харьков, пр. Ленина, 14.

Выходцев Евгений Иванович, аспирант кафедры ПМ ХНУРЭ. Научные интересы: математическая физика, теория R-функций, компьютерное моделирование. Адрес: Украина, 61058, Харьков, ул. Данилевского, 8, кв. 130, тел. 43-87-84.