

Michał LEWAK, Eugeniusz MOLGA

e-mail: michal.lewak@pw.edu.pl

Zakład Kinetyki i Termodynamiki Procesowej, Wydział Inżynierii Chemicznej i Procesowej, Politechnika Warszawska

Modelowanie matematyczne dyspersji zanieczyszczeń w atmosferze za pomocą metod CFD

Wprowadzenie

Modelowanie matematyczne dyspersji zanieczyszczeń w atmosferze wykorzystywane jest do tworzenia procedur bezpieczeństwa w przypadku wystąpienia nagłych i niekontrolowanych uwolnień substancji niebezpiecznych. W tym celu rozpatrywane są scenariusze uwolnienia substancji niebezpiecznych, których analiza pozwala na opracowanie procedur przeciwdziałania w sytuacji rzeczywistego uwolnienia substancji szkodliwej do atmosfery.

Modele matematyczne opisujące zjawisko dyspersji masy w atmosferze można podzielić na trzy grupy. Do pierwszej grupy zalicza się modele oparte na rozwiązaniach analitycznych. Jednym z najpopularniejszych modeli w tej grupie jest *model smugi Gaussa*. Jest to model matematyczny opisujący ustalony, dwuwymiarowy transport zanieczyszczeń w powietrzu. *Model smugi Gaussa* jest jednym z głównych modeli wykorzystywanych w programach symulujących transport zanieczyszczeń [Jones i in., 2013]. Mimo, że powstał on prawie sto lat temu [Roberts, 1923] jest nadal rozwijany o czym świadczą prace naukowe [Stockie, 2011]. Do drugiej grupy modeli matematycznych zalicza się eulerowskie modele siatek numerycznych. W modelach tej grupy za pomocą obliczeniowej mechaniki płynów (CFD) bilansuje się numerycznie pęd, masę i energię. Modele te są szeroko rozwijane i weryfikowane [Blocken i in., 2007; Tomimaga i Stathopoulos, 2012]. Modele CFD stanowią alternatywę dla zależności analitycznych. Do ostatniej grupy modeli matematycznych zalicza się modele hybrydowe. Są one połączeniem modeli eulerowskich z równaniami pozwalającymi określić ruch pseudocząstek zawieszonych w płynie. W modelach tych wykorzystuje się siatki numeryczne do obliczenia bilansu pędu masy i energii, tak jak w modelach eulerowskich, ale raz na kilka iteracji oblicza się ruch pseudocząstek zgodnie z podejściem *Lagrange'a*. Takie postępowanie pozwala na symulacje fazy dyskretniej, a więc ruch ciał stałych, kropli itp., które znajdują się w gazie emitowanym przez źródło zanieczyszczeń. W niniejszej pracy wykorzystano model siatkowy *Eulera*.

Model matematyczny

Opis matematyczny uwolnienia substancji niebezpiecznych oparty na modelu siatkowym *Eulera* wymaga spełnienia trzech warunków. Po pierwsze wymagane jest opracowanie odpowiednio *dobrej siatki numerycznej*, czyli takiej, którą cechuje odpowiednio duża rozdzielczość, a każdy z elementów siatki musi mieć wysoką jakość [Blocken i in., 2007]. Zwykle rozmiar przestrzeni jaką zawiera modelowany obszar jest rzędu dziesiątek metrów, dlatego spełnienie ww. warunków wymaga wykorzystania dużej mocy obliczeniowej. Wiąże się to z długim czasem potrzebnym na uzyskanie rozwiązania numerycznego. Po drugie – wymagane jest przyjęcie modelu matematycznego zamykającego bilans pędu w przepływach burzliwych (tzw. problem zamknięcia równań NS), a co za tym idzie określenie w jaki sposób modelowany będzie proces dyfuzji burzliwej. Trzeci warunek – dotyczy weryfikacji rozwiązania numerycznego w celu sprawdzenia poprawności otrzymanych rozwiązań. Z uwagi na bardzo duże obszary oraz sporą toksyczność uwalnianych substancji nie zawsze możliwa jest weryfikacja doświadczalna. Wobec tego należy walidować uzyskane wyniki porównując je z wynikami innych autorów lub przeprowadzić weryfikację numeryczną. W tym celu prowadzi się serie symulacji dla siatek o różnej rozdzielczości. Przegląd literatury prowadzony pod kątem opisu procesu transportu zanieczyszczeń za pomocą obliczeniowej mechaniki płynów pokazuje,

że większość autorów wykorzystuje modele RANS wraz z modelem *k-ε* lub rodzinę modeli wielkowirowych LES (Tab. 1).

Tab. 1. Modelowanie procesu dyfuzji burzliwej – przegląd literatury

Autor	Model burzliwości	Sc_T
Gousseau i in. [2011]	<i>k-ε</i> , LES	0,3; 0,5; 0,7
Karim i Nolan [2011]	<i>k-ε</i>	1,3
Steffens i Heist [2013]	<i>k-ε</i> , RSM, LES	nie podano
Tomimaga i Stathopoulos [2012]	<i>k-ε</i> , RNG, LES	0,2÷2 (0,7)

W niniejszej pracy przedstawiono symulację emisji zanieczyszczeń za pomocą modelu *k-ε Realizable*. Bilans masy i tego składnika emitowanego przez źródło ciągle został opisany za pomocą następującej zależności:

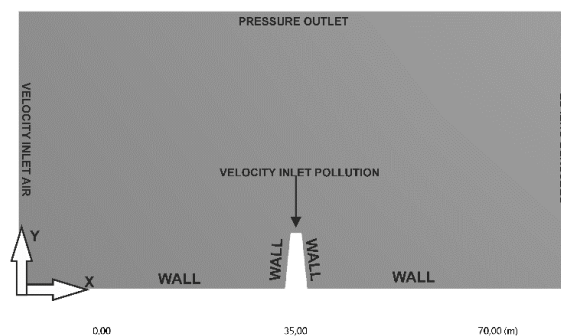
$$\frac{\partial \bar{C}_i}{\partial t} + u_i \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\nu_T}{Sc_T} \cdot \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_i} + D_{ij} \frac{\partial \bar{C}_i}{\partial x_j} \right) \quad (1)$$

Przyjęto model opisu dyfuzji burzliwej za pomocą turbulentnej liczby *Schmidta* Sc_T i lepkości burzliwej ν_T . Dzięki temu możliwe jest modelowanie zmian uśrednionego stężenia składnika \bar{C}_i . Analiza prac traktujących o tym zagadnieniu pokazuje, że ten sposób opisu zjawiska dyfuzji burzliwej jest dość często wykorzystywany. W tab. 1 zestawiono istotne warunki modelowania zjawiska stosowane w niektórych pracach. W pracach, których modele CFD zostały poddane weryfikacji doświadczalnej wartości turbulentnej liczby *Schmidta* mieszczą się w zakresie $<0,2 \div 2>$. Do symulacji wykonanych w tej pracy wybrano wartość liczby Sc_T równą 0,7 jako najczęściej wykorzystywaną do opisu dyspersji zanieczyszczeń w fazie gazowej.

Siatka numeryczna

Do modelowania zjawiska dyspersji zanieczyszczeń w atmosferze opracowana została dwuwymiarowa siatka numeryczna o wymiarach 100 m na 50 m. Jako źródło zanieczyszczeń wybrano komin o średnicy podstawy równej 4 m i wysokości równej 10 m (Rys.1). Średnica kolumny na wylocie wynosiła 2 m. Tak przygotowana siatka numeryczna składała się z ponad 4,35 mln komórek.

Parametr określający jakość komórek obliczeniowych przyjmował wartości powyżej 0,75 dla ponad 98% komórek. Najniższa wartość tego parametru dla komórek nie wchodzących w część warstwy przyściennej wynosiła 0,25. Z uwagi na burzliwy charakter przepływu warstwa przyścienna powinna być w miarę możliwości gęsto



Rys. 1. Schemat geometrii użytej do modelowania matematycznego

pokryta siatką numeryczną. W związku z tym nałożono gęstsza siatkę w obrębie hipotetycznej warstwy przyściennej tak, że całkowita liczba komórek w tej warstwie wyniosła około 500 000.

Warunki początkowe i brzegowe

W pracy zaproponowano profil prędkości powietrza u_x na wlocie w postaci funkcji potęgowej zależnej od zmiennej przestrzennej pionowej y :

$$u_x(y) = u_x(10\text{m}) \left(\frac{y}{10\text{m}} \right)^\alpha \quad (2)$$

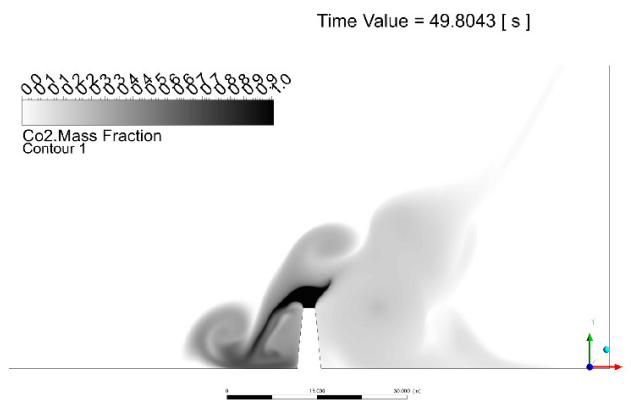
Parametr α zależy od ukształtowania terenu i do symulacji przyjęta została wartość dla terenu płaskiego, przy czym $u_x(10\text{m})$ oznacza wartość składowej prędkości na wysokości 10 metrów. Z badań przedstawionych w pracy *Strzelczyka i in.* [2015] wynika, że dla takich warunków $\alpha = 0,15$. Do symulacji przyjęto zatem tę wartość. Warunki brzegowe użyte w modelu przedstawiono na rys. 1.

Symulację zjawiska dyspersji masy przeprowadzono dla mieszaniny trójskładnikowej: powietrze, dwutlenek węgla i tlenek węgla. Parametry fizykochemiczne czystych składników aproksymowano z zależności zawartych w pracy [Coker, 2010]. Lepkość mieszaniny gazowej była obliczana za pomocą zależności *Wilke'go*. Stosunek mas molowych składników gazowych nie przekraczał wartości 4, wobec czego współczynnik przewodności cieplnej mieszaniny gazowej liczony był jako addytywna funkcja ułamka masowego. Ponadto do opisu gęstości gazu użyte zostało równanie stanu gazu doskonałego. Binarne współczynniki dyfuzji molekularnej D_{ij} dla temperatury 293,15 K zostały zaczerpnięte z prac *Marrero i Mason* [1972] oraz *Kestin i in.* [1984].

Wyniki symulacji CFD

Symulowano wpływ transportu pędu na transport masy w przepływie burzliwym. Na rys. 2 przedstawiono rozkład stężenia CO_2 w analizowanej przestrzeni po niecałej minucie od rozpoczęcia emisji. Założono, że prędkość gazu emitowanego przez komin na wlocie do układu przyjmuje wartość 2 m/s, co odpowiada liczbie *Reynoldsa* $Re = 422\ 860$. W przedstawionej symulacji założono, że ułamek masowy CO_2 w gazie opuszczającym komin wynosi 0,999, a pozostały gaz stanowi CO. Temperaturę gazów opuszczających komin przyjęto jako równą 97°C. Przyjęto również, że powietrze na wlocie do obszaru nie zawiera zanieczyszczeń i ma temperaturę równą 20°C.

Jak wynika z przedstawionego rozkładu ułamka masowego CO_2 w przestrzeni, mimo dużej prędkości na wlocie z komina cięższy gaz porusza się nie tylko zgodnie z kierunkiem wiatru, ale również pod wiatr. Ma to kluczowe znaczenie w procesie transportu masy w rozpatrywanym obszarze



Rys. 2. Rozkład ułamka masowego CO_2 w przestrzeni ($u_x(10\text{m}) = 2$ [m/s])

Podsumowanie

Modelowanie CFD pozwala na opis matematyczny rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w powietrzu z dużo większą dokładnością niż z wykorzystaniem modeli analitycznych.

Obliczeniowa mechanika płynów pozwala uwzględnić transport pędu, energii wraz z transportem masy. Modele te umożliwiają opis dyspersji w czasie i w przestrzeni.

Modelowanie dużych obszarów przestrzeni powoduje, że modele CFD wymagają siatki numerycznej o dużej liczbie komórek. Powoduje to ogromne zapotrzebowanie na moc obliczeniową komputerów wykorzystywanych do uzyskania rozwiązania rozpatrywanego problemu i stanowi jedną z głównych wad tego typu metod matematycznych. Wielkość siatki numerycznej jest zatem głównym ograniczeniem metod CFD. Jednak te modele mogą wspomóc proces opisu za pomocą modeli analitycznych poprzez opracowanie na podstawie symulacji CFD korelacji modelujących dyspersję masy w danym obszarze.

LITERATURA

- Blocken B., Stathopoulos T., Carmeliet J., (2007). CFD simulation of the atmospheric boundary layer: wall function problems. *Atmos. Environ.* 41, 238–252. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2006.08.019
- Coker A. (2010). *Ludwig's applied process design for chemical and petrochemical plants. 2. Distillation, packed towers, petroleum fractionation, gas processing and dehydration.* Gulf Prof. Publ.
- Gousseau P., Blocken B., Stathopoulos T., Van Heijst G.J.F., (2011). CFD simulation of near-field pollutant dispersion on a high-resolution grid: A case study by LES and RANS for building group in downtown Montreal. *Atm. Env.*, 45, 428–438. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2010.09.065
- IAEA, (1986). *Atmospheric dispersion models for application in relations to radionuclide releases.* IAEA-TECDOC-379, Vienna
- Jones R., Lehr W., Simecek-Beatty D., Reynolds R.M., (2013). *ALOHA® (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) 5.4.4: Technical Documentation.* U. S. Dept. of Commerce, NOAA Technical Memorandum NOS OR&R 43. Seattle, WA, Emergency Response Division, NOAA
- Karim A. A., Nolan P. F., (2011). Modelling reacting localized air pollution using Computational Fluid Dynamics (CFD), *Atmos. Environ.*, 45, 889–895. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2010.11.018
- Kestin J., Knierim K., Mason E.A., Najafi B., Ro S.T., Waldman M. (1984). Equilibrium and transport properties of the noble gases and their mixtures at low density. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 13(1), 229–303. DOI: 10.1063/1.555703
- Marrero T.R., Mason E.A. (1972). Gaseous diffusion coefficients. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1(1), 3–118. DOI: 10.1063/1.3253094
- Steffens J.T., Heist D.K., (2013). Modeling the effects of a solid barrier on pollutant dispersion under various atmospheric stability conditions, *Atmos. Environ.*, 69, 76–85. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2012.11.051
- Stockie J. M., (2011). The mathematical of atmospheric dispersion modeling. *SIAM Review*, 53, 349–372. DOI: 10.1137/10080991X
- Strzelczyk P., Szczerba Z., Woźniak A., (2015). Modelowanie pionowego profilu prędkości wiatru w tunelu aerodynamicznym. *JCEEA*, 32(62), 413–427. DOI: 10.7862/rb.2015.125
- Roberts O.F.T. (1923), The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere. *Proc. Roy. Soc.*, 104(728), 640–654
- Tauseef S.M., Rashtchian D., Abbasi S.A., (2011). CFD-based simulation of dense gas dispersion in presence of obstacles. *J. Loss Prev. Proc. Ind.*, 24, 371–376. DOI: 10.1016/j.jlp.2011.01.014
- Tominaga Y., Stathopoulos T., (2012). CFD Modeling of pollution dispersion in building array: Evaluation of turbulent scalar flux modeling in RANS model using LES results. *J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn.*, 104–106, 484–491. DOI: 10.1016/j.jweia.2012.02.004

Projekt finansowany ze środków Narodowego Centrum Badań i Rozwoju zgodnie z umową DOB-BIO7/09/03/2015. Projekt realizowany w ramach programu modelowania matematycznego rozprzestrzeniania się substancji niebezpiecznych – Evaris.