

УДК 517.4:533.7

ДИНАМИКА И ЭНЕРГЕТИКА РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЯЖЕЛОГО ГАЗА В ПРИЗЕМНОМ СЛОЕ АТМОСФЕРЫ

И. В. КОВАЛЕЦ, В. С. МАДЕРИЧ

Институт проблем математических машин и систем НАН Украины, Киев

Получено 21.09.99

Приведены результаты моделирования распространения облака тяжелого газа в атмосферном пограничном слое. Описана модель турбулентной динамики тяжелого газа с большими изменениями плотности с использованием осреднения по Фавру-Рейнольдсу, которое для таких течений приводит к более простой форме уравнений, чем осреднение по Рейнольдсу. Для расчета турбулентных потоков и напряжений использована модель турбулентности первого порядка. Кратко изложен численный алгоритм решения задачи с применением консервативной неявной конечно-разностной схемы. Используется метод расщепления по физическим процессам и пространственным переменным. Результаты расчетов сопоставлены с натурными и лабораторными экспериментами. Приведен анализ энергетики процессов распространения тяжелого газа.

Наведено результати моделювання розповсюдження хмари важкого газу в атмосферному пограничному шарі. Описано модель турбулентної динаміки важкого газу з великими змінами густини з використанням осереднення по Фавру-Рейнольдсу, що для таких течій приводить до більш простої форми рівнянь, чим осереднення по Рейнольдсу. Для розрахунку турбулентних потоків і напруг використана модель турбулентності першого порядку. Коротко викладено чисельний алгоритм розв'язування задачі за допомогою консервативної неявної скінченно-різницевої схеми. Використано метод розщеплення по фізичним процесам і просторовим змінним. Результати розрахунків зпівставлені з натурними і лабораторними експериментами. Приведено аналіз енергетики процесів розповсюдження важкого газу.

The results of simulation of the dense cloud dispersion in the atmospheric boundary layer are presented. The model of the turbulent dynamics of the dense cloud is described. The Favre-Reynolds averaging procedure is used, that results in the less complicated form of the equations than the Reynolds averaging procedure. The first-order turbulence model is applied for the calculation of the turbulent fluxes and stresses. The numerical algorithm of the problem solution is briefly described with use of the conservative implicit finite-difference scheme. The splitting method upon the space directions and physical processes is used. The results of calculations are compared with the results of laboratory and field experiments. The analysis of the energetics of the dense gas dispersion processes is given.

ВВЕДЕНИЕ

Производство, хранение и транспортировка больших количеств химически опасных веществ в газообразном или сжиженном виде приводит к тому, что возникающие в результате аварий облака газа имеют большую плотность, чем воздух. Распространяясь под действием сил плавучести и ветра у поверхности Земли тяжелые токсичные или огнеопасные газы представляют исключительную опасность для населения. Примерами крупнейших аварий такого рода являются утечки диоксида в Севезо (Италия, 1976), метилового изоцианата в Бхопале (Индия, 1984) и взрыв газа на продуктопроводе в Башкирии в 1989 году. Эти трагические инциденты, сопровождавшиеся многими сотнями жертв, показали необходимость детальных исследований гидротермодинамики аварий, вызванных утечкой опасных газообразных или сжиженных веществ, с целью оценки возможных последствий аварий, прогнозирования распространения облака тяжелого газа и разработки необходимых контрмер. Такие исследования последние 25 лет проводились в трех взаимодополняющих направлениях (см. обзоры [1–4]):

- а) разработка математических моделей гидротермодинамики этих процессов;
- б) проведение натурных экспериментов;
- в) проведение лабораторных экспериментов.

Было показано, что гидротермодинамика распространения облаков тяжелых газов обусловлена рядом факторов, среди которых важнейшими являются: особенности веществ попадающих в атмосферу, характер утечки и условия в окружающей среде. Вещества, попадающие в атмосферу в результате утечки могут иметь большую плотность, чем окружающий воздух вследствие того, что (а) вещество хранилось в охлажденном виде либо охлаждалось при испарении, (б) молекулярный вес газа больше, чем воздуха, (в) вещество находилось при повышенном давлении и превратилось в смесь аэрозоля и пара при утечке и (г) химических реакций [3].

В дальнейшем, определяющими факторами дисперсии облака являются турбулентность в атмосферном пограничном слое и силы плавучести, вызванные разностью плотностей газа и воздуха. Силы плавучести подавляют турбулентный обмен в облаке, вызывают растекание облака по горизонтали в виде гравитационного течения. Ветер и

рельеф местности существенно меняют характер движения облака. В конце концов силы плавучести в облаке уменьшаются под влиянием турбулентного перемешивания и воздействия подстилающей поверхности. На последней стадии эволюции оно переносится как облако пассивной примеси.

Эти особенности делают проблему моделирования и прогнозирования распространения тяжелых газов трудной и все еще далекой от решения. К настоящему времени разработан ряд моделей этих процессов, которые можно разделить на три класса:

1. Интегральные модели, в которых все скалярные характеристики осреднены по объему. Перемешивание моделируется как процесс вовлечения. К этому классу принадлежат модели [5–6].

2. Модели, в которых профили характеристик предполагаются подобными, позволяют более реалистично воспроизводить поля концентрации примеси. На больших расстояниях от источника уравнения моделей сводятся к известным гауссовым моделям дисперсии примесей. Модели DE-GADIS [7] и SLAB [8] являются примером такого типа подходов.

3. Трехмерные модели, в которых используются, после тех или иных упрощений, полные уравнения гидротермодинамики. К этому классу моделей принадлежат SIGMET-N [9], ZEPHYR [10], MARIAN-II [11], FEM3 [12–13], ADPIC [14], ADREA-HF [15]. Тогда как модели первых двух классов предназначены для оценки в реальном масштабе времени последствий утечки токсичных газов, наиболее трудоемкие трехмерные модели используются для планирования контрмер при авариях. Трехмерные модели в основном различаются методами параметризации турбулентного обмена и численными схемами. Так, в моделях ZEPHYR и ADPIC используется метод частиц в ячейках, причем в ADPIC эйлеровы уравнения динамики осреднены по толщине облака газа. Метод конечных элементов применялся в моделях FEM3 и ADREA-HF, тогда как в SIGMET-N и MARIAN-II использовались конечные-разности. Почти во всех моделях, кроме MARIAN-II, используются явные схемы. Во всех перечисленных моделях, кроме ZEPHYR, применяются варианты приближения Буссинеска или "неупругое приближение" [16], позволяющие отфильтровать звуковые волны. Однако, как отмечено [17], при больших разностях плотности пренебрежение производной по времени в уравнении неразрывности приводит к несохранению массы воздуха и примеси. Этим недостатком лишен подход, предложенный в [18], в котором для решения нефильТРованных

уравнений используется консервативная неявная конечно-разностная схема, основанная на использовании метода расщепления по физическим процессам и пространственным переменным. В моделях, как правило, используется осреднение по Рейнольдсу и, за исключением [13,15], модели турбулентности нулевого порядка (К-модели).

В настоящей работе приведены результаты моделирования распространения облака тяжелого газа в атмосферном пограничном слое. Описана модель турбулентной динамики тяжелого газа с большими изменениями плотности с использованием осреднения по Фавру-Рейнольдсу [19], которое для таких течений приводит к более простой форме уравнений, чем осреднение по Рейнольдсу. Для расчета турбулентных потоков и напряжений использована модель турбулентности первого порядка. Кратко изложен численный алгоритм решения задачи, основанный на подходе [18]. Результаты расчетов сопоставлены с натурными и лабораторными экспериментами. Приведен анализ энергетики процессов распространения тяжелого газа.

1. МОДЕЛЬ

Рассмотрим турбулентное движение тяжелого газа с большими отклонениями плотности от окружающего воздуха в пограничном слое атмосферы. Используем уравнения неразрывности, движения, переноса энтальпии, концентрации газа и уравнение состояния идеального газа. Для простоты изложения здесь не рассматриваются фазовые переходы в системе. Для осреднения зависимых переменных (плотности ρ , скорости u_i , энтальпии H и концентрации газа C) применяется осреднение по Фавру-Рейнольдсу [19]. Обозначим чертой сверху осреднение переменной ϕ по Рейнольдсу, тогда как осреднение по Фавру, в котором в качестве весовой функции используется плотность, обозначим угловыми скобками

$$\langle \phi \rangle = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}}. \quad (1)$$

Разложение на средние и пульсационные составляющие по Рейнольдсу и Фавру, соответственно, имеет вид:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi', \quad \bar{\phi}' = 0, \quad (2)$$

$$\phi = \langle \phi \rangle + \phi'', \quad \langle \phi'' \rangle = 0, \quad \overline{\phi''} = \bar{\phi} - \langle \phi \rangle. \quad (3)$$

При этом давление и плотность осредняются без весов. Нестационарная трехмерная система осредненных по Фавру-Рейнольдсу уравнений

выглядит в декартовых координатах следующим образом:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{p} \langle u_i \rangle}{\partial x_i} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho} \langle u_i'' u_j'' \rangle + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = -\delta_{iz} g, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial x_j} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho} \langle u_j'' H \rangle + ab \bar{\rho}^2 \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_j} = -ac \bar{\rho}^2 \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho} \langle u_j'' C'' \rangle, \quad (6)$$

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x_j} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho} \langle u_j'' C'' \rangle = 0, \quad (7)$$

$$\bar{p} = \bar{\rho} \langle T \rangle (\langle C \rangle R_g + (1 - \langle C \rangle) R_a), \quad (8)$$

где t – время; $x_i = (x, y, z)$ – координаты при $i = 1, 2, 3$; ось z направлена вертикально вверх; $u_i = (u, v, w)$ – проекции вектора скорости \mathbf{U} на оси x, y, z , соответственно; p – давление; T – абсолютная температура; R_a, R_g – газовые константы для воздуха и газа, соответственно; g – ускорение силы тяжести. Энтальпия смеси без учета фазовых переходов для идеального газа вычисляется по формуле

$$\langle H \rangle = (c_{pa}(1 - \langle C \rangle) + c_{pg} \langle C \rangle) \langle T \rangle. \quad (9)$$

где c_{pa}, c_{pg} – теплоемкости атмосферы и газа, соответственно. Давление исключается с помощью уравнения (8):

$$\frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = b \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + c \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x_i} + d \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial x_i}. \quad (10)$$

В уравнениях (6), (10) используются обозначения:

$$a = \frac{1}{\bar{\rho} \left(1 - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial H}\right)}, \quad b = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \rho},$$

$$c = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial C}, \quad d = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial H}.$$

В отличие от течений с малыми изменениями плотности, к которым применимо приближение Буссинеска, разработка моделей турбулентности для трехмерных течений с большими изменениями плотности все еще далека от удовлетворительных практических результатов [20-23]. Поэтому для напряжений и турбулентных потоков применяются простейшие градиентные соотношения [21]:

$$\langle u_i'' u_j'' \rangle = -\nu_T \left(\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right) +$$

$$+\nu_T \delta_{ij} \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_j} + \frac{2}{3} \delta_{ij} k, \quad (11)$$

$$\langle u_j'' H'' \rangle = -\frac{\nu_T}{\sigma_H} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial x_j}, \quad (12)$$

$$\langle u_j'' C'' \rangle = -\frac{\nu_C}{\sigma_C} \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x_j}, \quad (13)$$

сохраняющие тензорную симметрию. Коэффициент турбулентного переноса импульса ν_T определяется из соотношения

$$\nu_T = c_\mu \sqrt{k} l, \quad (14)$$

где $k = \langle u_i'' u_i'' \rangle / 2$ – энергия турбулентности; l – интегральный масштаб турбулентности; c_μ – постоянная, а σ_H и σ_C – турбулентные числа Прандтля и Шмидта для энтальпии и примеси соответственно. Масштаб турбулентности определяется с помощью соотношения

$$\frac{1}{l} = \frac{1}{l_g} + \frac{1}{l_s}, \quad (15)$$

позволяющего учесть влияние как твердой поверхности (l_g), так и стратификации (l_s). Масштаб $l_g = \kappa l_{min}$, где l_{min} – минимальное расстояние до твердой поверхности, κ – постоянная Кармана. Масштаб l_s определяется из соотношений:

$$l_s = 0.5 \frac{\sqrt{k}}{N} \quad \text{при} \quad N^2 > 0,$$

$$l_s = \infty \quad \text{при} \quad N^2 \leq 0.$$

Здесь

$$N = \left[-\frac{g}{\bar{\rho}} \left(\frac{\partial \bar{p}}{\partial z} + \frac{c_v \bar{\rho}^2}{c_p \bar{p}} g \right) \right]^{1/2},$$

– частота Брента-Вяйсяля; c_v и c_p – удельные теплоемкости при постоянном объеме и давлении соответственно.

Энергия турбулентности определяется из уравнения

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial k}{\partial x_j} - \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial k}{\partial x_j} =$$

$$= -\langle u_i'' u_j'' \rangle \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{1}{\bar{\rho}^2} \langle u_j'' \rho' \rangle \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} - \varepsilon, \quad (16)$$

в котором диффузия турбулентности аппроксимирована также с помощью градиентной формулы. Первый член в правой части уравнения представляет генерацию энергии турбулентности средними течениями, второй – эффекты переменной плотности и третий – диссипацию энергии турбулентности. Отметим, что для малых отклонений плотности от невозмущенного значения $\rho_0(z)$

при использовании приближения Буссинеска второй член совпадает с традиционным выражением $g w' \rho' \rho_0^{-1}$ для средней работы сил плавучести при турбулентных перемещениях элементов смеси. Турбулентный поток плотности также рассчитывается по градиентной формуле [21-22]:

$$\overline{u'_j \rho'} = -\frac{\nu_T}{\sigma_\rho} \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x_j}, \quad (17)$$

где σ_ρ – соответствующее число Прандтля-Шмидта, а скорость диссипации выражается через k и l :

$$\varepsilon = C_D \frac{k^{3/2}}{l}, \quad (18)$$

где C_D – постоянная. Предполагается, что турбулентные числа Прандтля-Шмидта равны ($\sigma_H = \sigma_C = \sigma_\rho = \sigma$). Были приняты следующие значения постоянных модели турбулентности: $c_\mu = 0.1887, \kappa = 0.4, c_D = 0.3, \sigma = 1$. На горизонтальной поверхности земли при $z = 0$ принимались условия прилипания для скоростей и отсутствия потока газа. Теплообмен с подстилающей поверхностью рассчитывался по формуле

$$\bar{\rho} \frac{\nu_T}{\sigma} \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial z} = -\lambda (\langle T \rangle - T_g), \quad (19)$$

где λ – коэффициент теплоотдачи на поверхности земли; T_g – температура подстилающей поверхности. На верхней границе области распределение всех величин соответствует невозмущенному выбросом газа состоянию атмосферы. Расчетная область ориентирована по направлению приземного ветра. На боковых гранях, где поток втекает в область, задавались значения невозмущенных полей скорости, энтальпии 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 и стратификации. Начальные условия для газа зависели от условий выброса.

2. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СХЕМА

В векторной форме исходная система (4)-(7), (16) может быть записана в виде:

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} + \Omega \cdot \mathbf{f} = \mathbf{G}. \quad (20)$$

$$\text{Здесь } \mathbf{f} = \begin{pmatrix} \bar{\rho} \\ \langle C \rangle \\ \langle u \rangle \\ \langle v \rangle \\ \langle w \rangle \\ \langle H \rangle \\ k \end{pmatrix}, \quad \Omega = \sum_{j=1}^6 \Omega_j.$$

Операторы $\Omega_1 - \Omega_3$ описывают конвекцию и диффузию в трех измерениях, операторы $\Omega_4 - \Omega_6$ соответствуют членам с градиентами давления в уравнениях движения и дивергенции скорости в уравнениях неразрывности и переноса энтальпии.

Конечно-разностная схема [18], реализованная здесь, основана на использовании метода расщепления [24] в сочетании с методом контрольного объема. Расчетная область делится на конечное число непересекающихся контрольных объемов, в центре каждого из которых находилось по одному узлу, а их грани располагались посередине между узлами. Конечно-разностная схема записывается в следующем виде:

$$\frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^n}{\Delta t} + \Omega_h^j [\gamma \mathbf{f}^{n+1} + (1 - \gamma) \mathbf{f}^n] = \mathbf{G}^n, \quad (21)$$

где γ – весовой множитель;

$$\Omega_h^k = \sum_{k=1}^6 \Omega_{jh}^k,$$

здесь Ω_{jh}^k – конечно-разностный аналог дифференциального оператора Ω , который аппроксимирует исходную систему с порядком $\Delta t + h^k$. Порядок аппроксимации $k = 2$ определен выбором дифференциального оператора для аппроксимации пространственных производных. Представим схему (21) в каноническом виде [24]:

$$(E_1 + \Delta t \gamma \Omega_h^k) \frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^n}{\Delta t} = -\Omega_h^k \mathbf{f}^n - \mathbf{G}^n, \quad (22)$$

где E_1 – единичная матрица. Используя факторизацию оператора:

$$(E_1 + \Delta t \gamma \sum_{j=1}^6 \Omega_{jh}^k) \approx \prod_{j=1}^6 (E_1 + \Delta t \gamma \Omega_{jh}^k), \quad (23)$$

переход с n на $n + 1$ временной слой аппроксимируется последовательностью дробных шагов:

$$\begin{aligned} (E_1 + \Delta t \gamma \Omega_{1h}^k) \xi^{n+1/6} &= -\Omega_h^k \mathbf{f}^n + \mathbf{G}^n, \\ (E_1 + \Delta t \gamma \Omega_{2h}^k) \xi^{n+2/6} &= -\xi^{n+1/6}, \\ (E_1 + \Delta t \gamma \Omega_{3h}^k) \xi^{n+3/6} &= -\xi^{n+2/6}, \\ (E_1 + \Delta t \gamma \Omega_{4h}^k) \xi^{n+4/6} &= -\xi^{n+3/6}, \\ (E_1 + \Delta t \gamma \Omega_{5h}^k) \xi^{n+5/6} &= -\xi^{n+4/6}, \\ (E_1 + \Delta t \gamma \Omega_{6h}^k) \xi^{n+1} &= -\xi^{n+5/6}, \\ \mathbf{f}^{n+1} &= \mathbf{f}^n + \Delta t \xi^{n+1} \end{aligned} \quad (24)$$

. На первых трех дробных шагах система уравнений (24) линейна относительно функций на слое $n + j/6$, $j = 1, 2, 3$. Ее решение может быть получено скалярными прогонками для каждой компоненты $\xi^{n+j/6}$, так как оператор $\Omega_{j,h}^k$, $j = 1, 3$ – диагональный. На последующих дробных шагах используется модификация метода расщепления, предложенная [18], для более точного представления члена, связанного с градиентом давления на 4–6 дробных шагах. Система (24) приводится к диагональному виду, после чего уравнения для каждой компоненты вектора $\xi^{n+j/6}$ также решаются скалярными прогонками.

Для аппроксимации пространственных производных в дифференциальных матричных операторах $\Omega_1, \dots, \Omega_6$ использовалась схема со степенным законом [25], которая является схемой 2-го порядка точности по пространственным переменным, и, при достаточно больших числах Пекле, переходит в схему направленных разностей. Более детально численный метод решения задачи описан в [26].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Известно значительное число натуральных экспериментов, проводившихся для ряда веществ на различной местности для разных метеорологических условий (см. обзоры [1-4]). Для сравнения с расчетами были выбраны хорошо документированные эксперименты в Портон-Дауне (Англия) [27]. Экспериментально исследовалась изотермическая дисперсия тяжелого газа (хладон-12) в результате мгновенного выброса. Куб объемом 40 м^3 со стенками из синтетической пленки заполнялся смесью хладон-воздух. Растекание газа начиналось после мгновенного опадания боковых стенок. Облако, подкрашенное дымом, фотографировалось сверху и сбоку. Измерения концентрации проводились с помощью датчиков и пробоотборников, расположенных на пяти горизонтах в нескольких точках на различном расстоянии от источника. Результаты сравнения приведены для эксперимента Porton N 8. Он проводился на ровной местности при малых скоростях ветра (до 0.5 м/с) и категории устойчивости F по Паскуиллу-Тернеру. Плотность смеси в начальный момент составляла 2.5 кг/м^3 , а объемная концентрация – 29% .

В расчетах скорость ветра принималась равной нулю, а стратификация нейтральной. Вычисления проводились на последовательности сеток. На начальной стадии расчеты проводились для области размерами $31 \times 31 \times 12 \text{ м}$. Использовалась сетка

$19 \times 19 \times 45$ с равномерным шагом по горизонтали и неравномерным (логарифмическим) по вертикали. На боковых границах были приняты условия Неймана. При приближении возмущений к боковым границам горизонтальный размер области и шаг по горизонтали удваивались. Такой прием позволил существенно уменьшить затраты машинного времени на расчеты.

На рис. 1 представлено сравнение рассчитанных горизонтальных размеров облака с результатами фотографирования. Нужно иметь в виду, что видимая граница облака соответствует некоторой граничной концентрации, зависящей от толщины фотографируемого слоя, поглощающей способности дыма и характера фона. При сопоставлении размеров граничная концентрация в расчетах принималась постоянной и равной 1% от начальной концентрации. На рисунке видно, что наблюдаемое облако на начальной стадии сохраняет почти круговую форму, близкую к рассчитанной, что свидетельствует о малости ветровых эффектов.

На рис. 2 сопоставлены измеренные и рассчитанные размеры облака. Как следует из рис. 2,а, рассчитанная полуширина области неплохо согласуется с наблюдаемой [27]. Данные расчетов можно также сопоставить с результатам лабораторных экспериментов [28]. В них исследовалось растекание облака тяжелого газа, имевшего в начальный момент форму цилиндра с диаметром, равным высоте. Это дает возможность сопоставления с натурным экспериментом Porton N 8 и расчетами, используя безразмерные переменные. Следуя [28] на рис.2,б радиус R облака нормализован на линейный масштаб $L = V_0^{1/3}$, где V_0 – начальный объем облака, а время на $T_0 = V_0^{1/6} (g\Delta\rho/\rho_a)^{-1/2}$. Здесь $\Delta\rho = \rho - \rho_a$ – разность плотности газа и воздуха. Радиус облака по данным расчетов оценивался по концентрации 1% от максимального значения в облаке в данный момент времени. Как следует из рисунка, результаты расчетов неплохо согласуются с лабораторными экспериментами, имея в виду различия в форме начального распределения плотности, и с экспериментом Porton N 8. Отклонение кривой Porton N 8 от лабораторных экспериментов и расчетов объясняется способом определения границы облака. При $t > 20$ расчеты и эксперименты хорошо аппроксимируются прямой $R^{*2} - R_0^{*2} \sim t$. Она соответствует инерционной стадии гравитационного растекания осесимметричной интрузии, когда эффектами вовлечения и трения о подстилающую поверхность можно пренебречь [29]. Скорость ра-

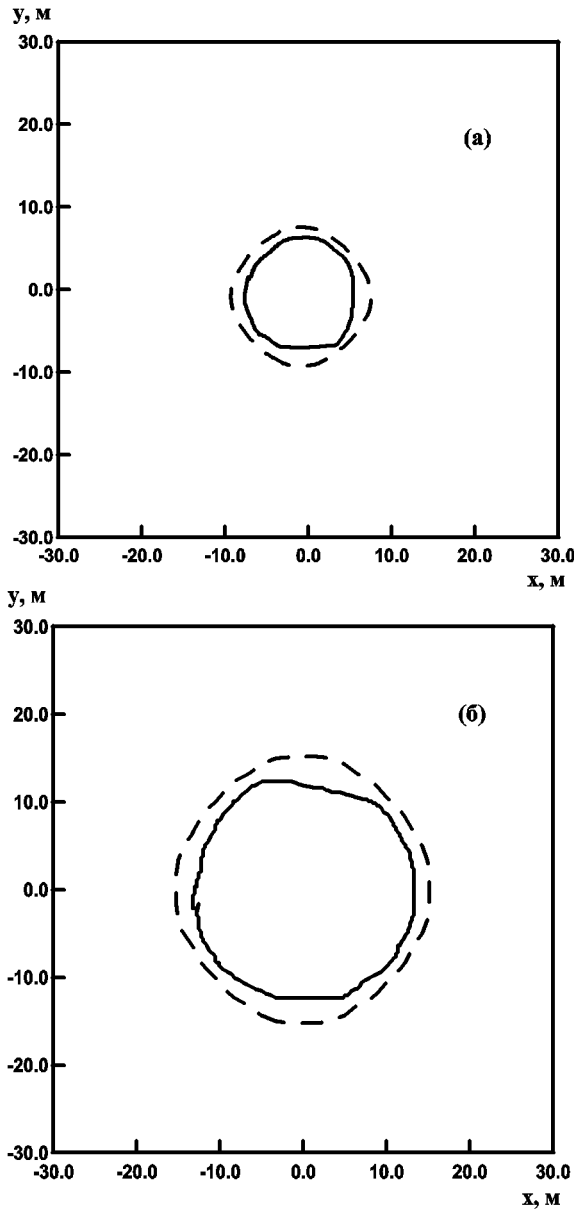


Рис. 1. Наблюдаемая [27] (сплошная линия) и рассчитанная (штриховая линия) граница облака для $t = 2$ с (а) $t = 8$ с (б)

стекания определяется из соотношения:

$$\frac{dR}{dt} = C_E \sqrt{\frac{gH\Delta\rho}{\rho_a}}, \quad (25)$$

Эмпирическая постоянная $C_E = 1.16$, что сравнимо с теоретическим значением [29].

На рис. 3 представлена картина поля скоростей в вертикальном сечении для трех моментов времени: $t=3$; 13 и 300 с после начала растекания. На начальной стадии коллапс облака тяжелого газа

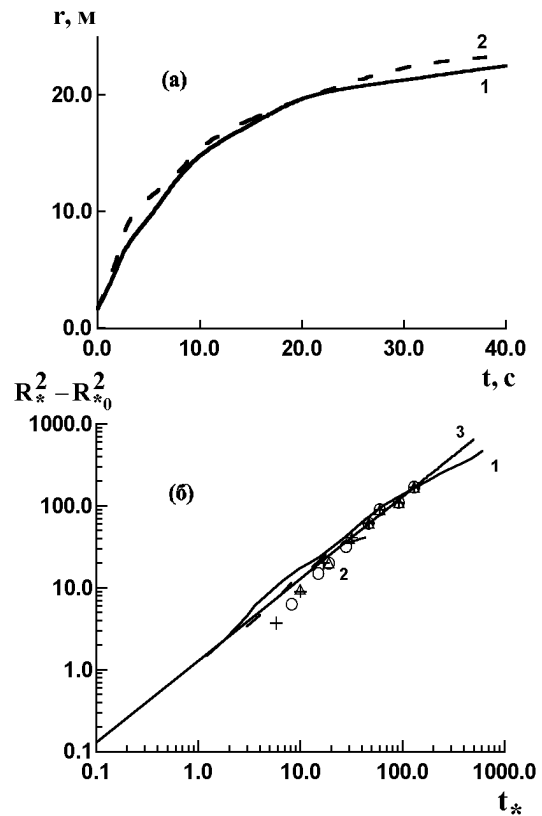


Рис. 2. Радиус облака в зависимости от времени (а) по данным эксперимента [27] (1) расчетов (2); зависимость от времени безразмерного радиуса (б) по данным расчетов (1), натурного [27] (3) и лабораторных [28] экспериментов (значки); зависимости (25) (прямая 2).

приводит к формированию кольцевого вихря, распространяющегося у поверхности земли. Затем в области внутри кольца формируется внутренняя область завихренности противоположного знака с восходящими движениями вдоль оси облака (см. рис.3,б). Возможное объяснение этого явления – суперпозиция наблюдаемых экспериментально [28] гравитационных волн в центре, отраженных от границы облака. Для этого необходимо, чтобы их фазовая скорость была больше скорости движения границы облака. На рис. 3,в видно, что со временем возникает третий вихрь и вертикальные скорости на оси снова направлены вниз.

На рис. 4 показаны вертикальные сечения турбулентной энергии и концентрации для $t = 5$ с. Видно, что область максимума турбулентной энергии совпадает с областью вихревого кольца на рис.3,а и рис. 4,б.

Источником энергии распространения облака является доступная потенциальная энергия, кото-

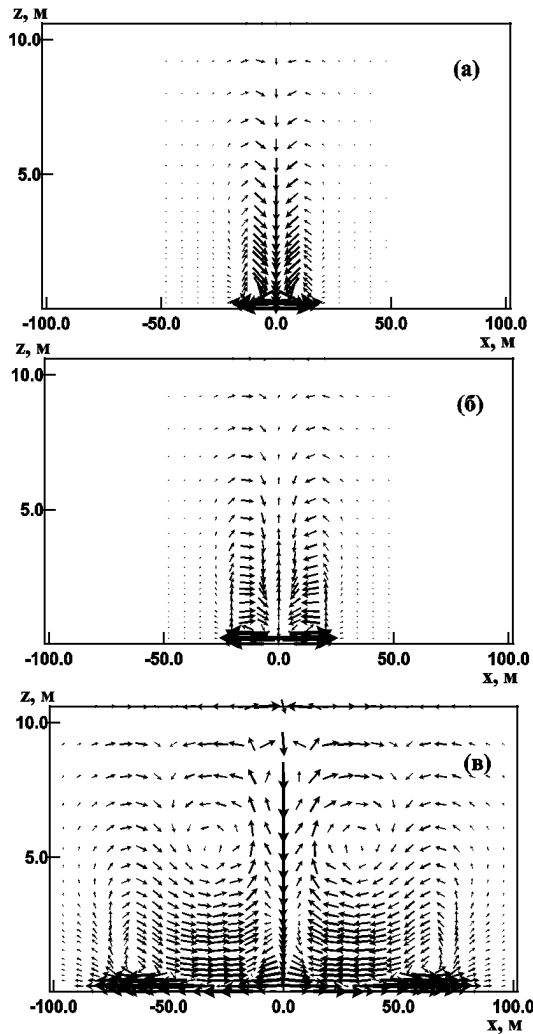


Рис. 3. Рассчитанное вертикальное сечение поля скорости для $t = 3$ с (а), $t = 13$ с (б) и $t = 300$ с (в). Модули скорости нормализованы на максимальные значения

рая для замкнутой области приближенно может быть представлена в виде

$$\Pi = \int \int \int_V (\bar{\rho} - \bar{\rho}_o(z)) z dx dy dz, \quad (26)$$

где $\rho_0(z)$ – стратификация атмосферы в невозмущенном состоянии. Потенциальная энергия переходит в энергию средних движений:

$$K_S = \frac{1}{2} \int \int \int_V \bar{\rho} (\langle u \rangle^2 + \langle v \rangle^2 + \langle w \rangle^2) dx dy dz. \quad (27)$$

Неустойчивость средних течений приводит к гене-

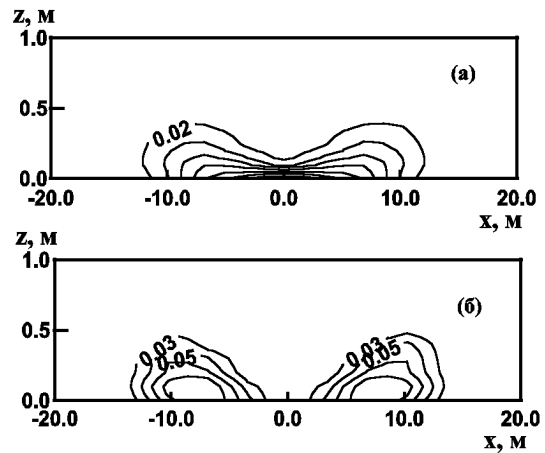


Рис. 4. Рассчитанные вертикальные сечения концентрации газа (а) и энергии турбулентности (б) при $t = 5$ с

рации турбулентности:

$$K_T = \int \int \int_V \bar{\rho} k dx dy dz. \quad (28)$$

Как следует из рис. 5 сначала потенциальная энергия переходит в кинетическую энергию средних течений, а затем в энергию турбулентности. Последняя затухает быстрее, чем потенциальная энергия и кинетическая энергия средних движений за счет диссипации и обратного перехода в потенциальную энергию при турбулентном вовлечении.

Применение предложенной в [18] неявной конечно-разностной схемы позволило эффективно решать нефильтрованные уравнения, когда уравнение неразрывности аппроксимируется без пренебрежения членом $\partial \bar{\rho} / \partial t$. Оценим параметр

$$\beta = \max \left(\left| \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} \right| \right) / \max \left(\left| \frac{\partial \bar{\rho} \langle u_j \rangle}{\partial x_j} \right| \right), \quad (29)$$

(по $j = 1, 2, 3$ не суммировать!), который характеризует максимальное в области отношение члена $|\partial \bar{\rho} / \partial t|$ к максимальному по модулю из трех компонент соответствующего дивергентного члена $|\partial \bar{\rho} \langle u_j \rangle / \partial x_j|$. Очевидно, что максимально возможным для этого параметра является значение $\beta = 3$, когда все три компоненты $\partial \bar{\rho} \langle u_j \rangle / \partial x_j$ равны между собой и имеют один знак.

На рис. 6 представлена нижняя огибающая значений этого параметра в зависимости от времени. Видно, что на интервале времени до 100 с, значение β остается больше 0.3, т.е. погрешность расчета уравнения неразрывности в “неупругом

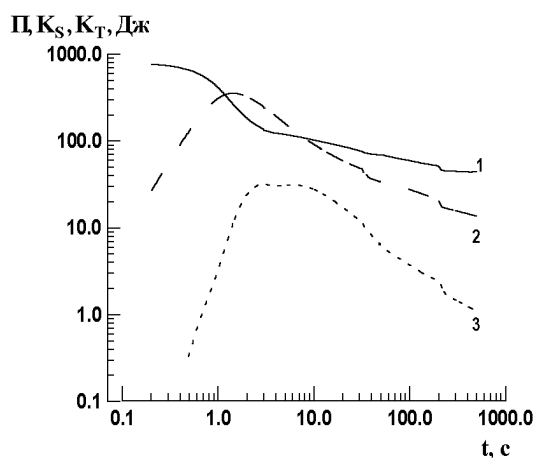


Рис. 5. Зависимость потенциальной Π (1), кинетической K_s (2) и турбулентной K_T (3) энергии от времени

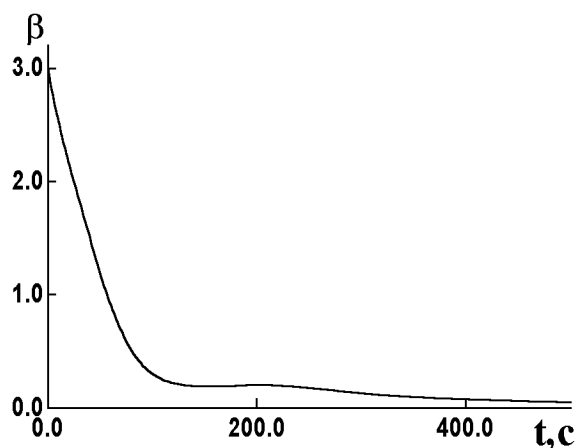


Рис. 6. Зависимость от времени параметра β .

приближении" составляет более 10%. Это объясняет причину утечки газа и атмосферного воздуха в расчетах [17], составляющую около 30% без принятия специальных мер. В настоящих расчетах, несмотря на довольно грубую сетку и потери при переходе с сетки на сетку, масса газа и воздуха на протяжении 500 с сохранялись с точностью 3%. Конечно, нужно иметь в виду, что наличие внешней ветровой турбулентности в приземном слое ускоряет процессы перемешивания газа с воздухом и тем самым уменьшает перепады плотности и значения параметра β .

4. ВЫВОДЫ

В настоящей работе описана модель турбулентной динамики тяжелого газа с большими изменениями плотности с использованием осреднения по

Фавру, которое для таких течений приводит к более простой форме уравнений, чем осреднение по Рейнольдсу. Для напряжений и турбулентных потоков применяются простейшие градиентные соотношения, сохраняющие тензорную симметрию для сжимаемой жидкости. Для замыкания использована модель турбулентности первого порядка. Кратко изложена неявная конечно-разностная схема, основанная на использовании метода расщепления в сочетании с методом контрольного объема. Эта схема позволяет эффективно решать систему нефильТРованных уравнений, которые обеспечивают сохранение массы газа и атмосферного воздуха. Результаты расчетов показали неплохое согласование с натурными и лабораторными экспериментами. Анализ энергетике процессов распространения тяжелого газа показал, что сначала потенциальная энергия облака газа переходит в кинетическую энергию средних течений, а затем в энергию турбулентности. Последняя затухает быстрее, чем потенциальная энергия и энергия средних движений за счет диссипации и обратного перехода в потенциальную энергию при турбулентном вовлечении.

1. *Shinh J. H., Ermak D. L., Koopman R. P.* Heavy gas releases: recent dispersion research.— Preprint UCRL-86583: LLNL, Livermore, USA, 1981.— 12 p.
2. *Woodward J.L., Havens J. A., McBride W.C., Taft J. R.* A comparison with experimental data of several models for dispersion of heavy vapor clouds // *J. Hazardous Materials.*— 1982.— **6**.— P. 161–180.
3. *Koopman R. P., Ermak D. I., Chan S. T.* A review of recent field tests and mathematical modelling of atmospheric dispersion of large spills of denser-than-air gases // *Atmos. Environment.*— 1989.— **23**.— P. 731–756.
4. *Britter R. E.* Atmospheric dispersion of dense gases // *Ann. Rev. Fluid Mech.*—**21**.— Palo Alto, 1989.— P. 317–344.
5. *Eidsvik K. J.* A model for heavy gas dispersion in the atmosphere // *Atmos. Environment.*— 1980.— **14**.— P. 769–777.
6. *Chatwin P. C.* Towards a box model of all stages of heavy gas cloud dispersion // *Turbulence and diffusion in stable environments.*— 1985, Oxford, Clarendon Press.— P. 259–292.
7. *Spicer T. O., Havens J. A.* Field test validation of the DEGADIS model // *J. Hazardous Materials.*— 1987.— **16**.— P. 231–245.
8. *Ermak D. L.* Description of the SLAB model.— Preprint UCRL-100028: LLNL, Livermore, USA, 1989.— 9 p.
9. *Havens J.A., Schneurs P.J., Spicer T.O.* Analysis and simulation of Thorney Island Trial 34 // *J. Hazardous Materials.*— 1987.— **16**.— P. 139–148.
10. *Hertel J., Teuscher L.* Advances in heavier than vapor cloud dispersion modeling // *Proc. AGA Transmission Conference.*— 1982, AGA, Chicago, IL, (May 1982).— P. T66-T80.

11. Taft J.R., Ryne M.S., Weston D.A. A dispersion model for evaluating realistic heavy gas scenarios // Proc. AGA Transmission Conference.– 1982, AGA, Seattle, Washington, (May 1983).– P. T356-T360.
12. Chan S. T FEM3 - A finite element model for the simulation of heavy gas dispersion and incompressible flow: User's manual.– Preprint UCRL-53397: LLNL, Livermore, USA, 1983.– 90 p.
13. Chan S. T A three-dimensional model for simulating atmospheric dispersion of heavy-gases over complex terrain.– Preprint UCRL-JC-127475: LLNL, Livermore, USA, 1997.– 7 p.
14. Ermak D.L. Dense-gas dispersion advection-diffusion model.– Preprint UCRL-JC 109697: LLNL, Livermore, USA, 1992.– 10 p.
15. Bartzis J. A three dimensional finite volume transport code for vapor cloud dispersion in complex terrain. Model Description and User's Manual.– DEMO Report: NCSR "Demokritos", Athens, Greece, 1995.– 210 p.
16. Ogura Y., Phillips N. Scale analysis of deep and shallow convection in the atmosphere // J. Atmos. Sci.– 1962.– 19.– P. 173-179.
17. Chan S. T., Gresho P. M. Ensuring mass conservation in a heavy-gas dispersion model using the generalized anelastic equations.– Preprint UCRL-JC-107535: LLNL, Livermore, USA, 1991.– 16 p.
18. Едигаров А. С. Численный расчет турбулентного течения холодного тяжелого газа в атмосфере // ЖВММФ.– 1990.– 31, N 9.– С. 1369-1380.
19. Favre A. Statistical equations of turbulent gases // Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics.– 1969, Philadelphia, SIAM.– P. 37-44.
20. Ha Minh H., Launder B. E., McInnes J. M. The turbulence modelling of variable density flows – a mixed-weighted decomposition // Turbulent Shear flows 3.– 1982, Berlin, Springer Verlag.– P. 291-308.
21. Джонс У. Модели турбулентных течений с переменной плотностью и горением // Методы расчета турбулентных течений.– М.: Мир, 1984.– С. 349-398.
22. Sarkar S., Lakshmanan B. Application of a Reynolds stress turbulence model to the compressible shear layer // AIAA J.– 1991.– 29.– P. 743-749.
23. Adumitroaie V., Ristorcelli J. R., Taulbee D. B. Progress in Favre-Reynolds closures for compressible flows // Phys. Fluids.– 1999.– 11.– P. 2896-2719.
24. Ковеня В. М., Яненко Н. Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики.– Новосибирск: Наука, 1981.– 376 с.
25. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости.– М.: Энергоатомиздат, 1984.– 376 с.
26. Ковалец И. В., Мадерич В. С. Моделирование распространения тяжелых газов в приземном слое атмосферы // Математические машины и системы.– 1999.– 2, N 4.– С. 12-20.
27. Picknett R. G. Dispersion of dense gas puffs released in the atmosphere at ground level // Atmos. Environment.– 1981.– 18.– P. 509-525.
28. Spicer T. O., Havens J. A. Modeling the Phase 1 Thorney Island experiments // J. Hazardous Materials.– 1982.– 11.– P. 237-260.
29. Тернер Дж. Эффекты плавучести в жидкостях.– М.: Мир, 1977.– 431 с.