

© М.М. Біляєв¹, О.В. Берлов², В.А. Козачина¹, В.В. Цуркан¹

¹ Український державний університет науки і технологій, Дніпро, Україна

² Придніпровська державна академія будівництва та архітектури, Дніпро, Україна

МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗАБРУДНЕННЯ ПОВІТРЯ В РОБОЧОМУ ПРИМІЩЕННІ

© M. Biliaiev¹, O. Berlov², V. Kozachyna¹, V. Tsurkan¹

¹ Ukrainian State University of Science and Technologies, Dnipro, Ukraine

² Prydniprovaska State Academy of Civil Engineering and Architecture, Dnipro, Ukraine

MATHEMATICAL MODELING OF AIR POLLUTION IN WORKING ROOM

Мета. Розробка CFD моделі та комп'ютерного коду для аналізу та прогнозу процесу формування областей хімічного забруднення в робочому приміщенні при аварійному витоку небезпечної речовини, що дозволяють врахувати вплив перешкод та роботи вентиляційної системи на цей процес.

Методика. Для розрахунку процесу формування з часом областей хімічного забруднення в робочому приміщенні використовується рівняння масопереносу. Для розв'язання задачі аеродинаміки – визначення поля швидкості повітряного потоку в приміщенні – використовуються рівняння Нав'є-Стокса. Для чисельного рішення моделюючих рівнянь використовуються кінцево-різницеві схеми розщеплення. На базі розробленої чисельної моделі створено комп'ютерний код для проведення обчислювальних експериментів.

Результати. Створено ефективну CFD модель та комп'ютерний код, що дозволяють швидко аналізувати рівень хімічного забруднення робочих приміщень при можливих аварійних ситуаціях, що супроводжуються емісією небезпечних речовин. Представлено результати обчислювального експерименту.

Наукова новизна. Розроблено ефективну CFD модель, що дозволяє розрахувати динаміку формування областей хімічного забруднення повітря в робочому приміщенні при аварійному витоку хімічно небезпечної речовини.

Практична значимість. На базі запропонованої CFD моделі розроблено комп'ютерний код, що дозволяє визначати динаміку формування областей забруднення в робочому приміщенні при аварійній емісії небезпечних речовин. Модель може бути використана для аналізу ризику токсичного ураження персоналу в робочих приміщеннях.

Ключові слова: забруднення повітря в робочому приміщенні, чисельне моделювання, аварійний викид, робоча зона.

Вступ. Прогнозування рівня хімічного, пилового забруднення повітря в приміщеннях є дуже важливою та відповідальною проблемою. Дана проблема включає низку класів задач – це прогнозування якості повітря в приміщеннях при аварійних викидах хімічно небезпечних речовин або емісія токсичних речовин при пожежах (рис. 1), прогнозування рівня хімічного забруднення повітря в офісах, прогнозування аероіонного режиму в робочих приміщеннях та таке інше [1-8].

Найбільш поширеним інструментом розв'язку задач даного класу є математичні методи прогнозування якості повітря. Це пов'язано з тим, що постановка фізичного експерименту [6] потребує дорогого обладнання та значного часу на проведення експерименту, обробку даних вимірів. Слід також приймати до уваги проблему «переносу» даних лабораторних вимірів на «натуру», якщо на моделі не виконуються критерії подібності.



Рис. 1. Аварія в робочому приміщенні

Теоретичне рішення задачі прогнозування якості повітря в приміщеннях має суттєву складність – це необхідність врахування впливу стінок, обладнання в приміщенні на формування полів забруднення. Це є суттєвою перепорою для використання методу математичного моделювання. Формування полів забруднення в робочих приміщеннях здійснюється внаслідок зміни аеродинаміки повітряних потоків, появи застійних зон, прискорення потоків в деяких областях приміщень. Тому аналітичні моделі, емпіричні моделі [5] були розроблені лише для оцінювання рівня забруднення повітря на відстані порядку 1 м від джерела забруднення, коли впливом перешкод, стінок можна нехтувати. Можна стверджувати, що побудувати емпіричні та аналітичні моделі для оцінювання якості повітря в масштабі усього приміщення неможливо. У зв'язку з цим вкрай важливим є створення CFD моделей, що дозволяють швидко аналізувати зміну якості повітря в робочих приміщеннях при дії різних джерел забруднення [1, 6-8].

Мета статті. Розробка CFD моделі для оцінювання рівня забруднення повітря в робочому приміщенні при аварійному витoku хімічно небезпечної речовини.

Методика. Для аналізу зон хімічного забруднення повітря в приміщенні потрібно розрахувати поле швидкості повітряного потоку та розрахувати поле концентрації домішки. Для моделювання руху повітряного потоку в приміщенні використовується модель в'язкої рідини. Моделюючі рівняння мають вигляд (рівняння Нав'є-Стокса, що записані в змінних Гельмгольца) [2]:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial u\omega}{\partial x} + \frac{\partial v\omega}{\partial y} = \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = -\omega \quad (2)$$

де $\omega = \partial v / \partial x - \partial u / \partial y$ – вихор; $\text{Re} = V_0 L / \nu$ – число Рейнольдса; L – характерний розмір; V_0 – характерна швидкість; ν – кінематичний коефіцієнт в'язкості; ψ – функція току; $u = \partial \psi / \partial y$, $v = -\partial \psi / \partial x$ – компоненти вектору швидкості повітряного потоку.

Граничні умови для рівнянь (1) та (2) розглянути в [2].

Для моделювання процесу поширення домішки в повітрі приміщення використовується рівняння Г. Марчука [1-3]:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial uS}{\partial x} + \frac{\partial vS}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) + \sum_{i=1}^n Q_{Si}(t) \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \quad (3)$$

де S – концентрація домішки; u, v – компоненти вектору швидкості; $\mu = (\mu_x, \mu_y)$ – коефіцієнти турбулентної дифузії; Q_{Si} – інтенсивність емісії домішки; $\delta(x - x_i) \delta(y - y_i)$ – дельта-функція Дірака; (x_i, y_i) – координати розташування джерела емісії в приміщенні; t – час.

Таким чином, положення джерела викиду домішки в приміщенні моделюється за допомогою дельта-функції Дірака. Це дає можливість задавати положення аварійного витoku хімічно небезпечної речовини в будь-якій точці приміщення.

Крайові умови для рівняння (3) розглянуто в [1, 2].

Чисельна модель. Для чисельного інтегрування моделюючих рівнянь (1)–(3) використовується прямокутна різницеву сітка.

Для побудови кінцево-різницевої моделі, що базується на рівнянні масопереносу (3), виконується наступне його розщеплення:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial uS}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial S}{\partial x} \right) \quad (4)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial vS}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial S}{\partial y} \right) \quad (5)$$

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \sum_{i=1}^n Q_{Si}(t) \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \quad (6)$$

Для розв'язання рівняння (4) застосовується наступна двокрокова схема розщеплення:

– на першому кроці розщеплення розрахункова залежність має вигляд:

$$S_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = S_{i,j}^n - \Delta t \frac{u_{i+1,j}^+ S_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - u_{i,j}^+ S_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x} + \Delta t \mu_x \frac{-S_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta x^2} + \Delta t \mu_x \frac{-S_{i,j}^n + S_{i+1,j}^n}{2\Delta x^2};$$

– на другому кроці розщеплення розрахункова залежність має вигляд:

$$S_{i,j}^{n+1} = S_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \Delta t \frac{u_{i+1,j}^- S_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^- S_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} + \Delta t \mu_x \frac{-S_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta x^2} + \Delta t \mu_x \frac{-S_{i,j}^{n+1} + S_{i+1,j}^{n+1}}{2\Delta x^2},$$

де $u^+ = \frac{u + |u|}{2}$, $u^- = \frac{u - |u|}{2}$.

Для чисельного розв'язку рівняння (5) така схема розщеплення:

– на першому кроці використовується залежність:

$$S_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = S_{i,j}^n - \Delta t \frac{v_{i,j+1}^+ S_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - v_{i,j}^+ S_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y} + \Delta t \mu_y \frac{-S_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta y^2} + \Delta t \mu_y \frac{-S_{i,j}^n + S_{i,j+1}^n}{2\Delta y^2};$$

– на другому кроці використовується залежність:

$$S_{i,j}^{n+1} = S_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \Delta t \frac{v_{i,j+1}^- S_{i,j+1}^{n+1} - v_{i,j}^- S_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} + \Delta t \mu_y \frac{-S_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + S_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{2\Delta y^2} + \Delta t \mu_y \frac{-S_{i,j}^{n+1} + S_{i,j+1}^{n+1}}{2\Delta y^2},$$

де $v^+ = \frac{v + |v|}{2}$, $v^- = \frac{v - |v|}{2}$.

Для розв'язку рівняння (6) використовується метод Ейлера [4].

Для розв'язку рівняння (1) виконаємо таке фізичне розщеплення:

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} + \frac{\partial u \omega}{\partial x} + \frac{\partial v \omega}{\partial y} = 0 \quad (7)$$

$$\frac{\partial \omega}{\partial t} = \frac{1}{\text{Re}} \left(\frac{\partial^2 \omega}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \omega}{\partial y^2} \right) \quad (8)$$

Рівняння (7) описує перенос вихору конвективним потоком, а рівняння (8) описує зміну значення вихору за рахунок дифузії.

Схема розщеплення для чисельного інтегрування рівняння (7) має вигляд [2]:

– на першому кроці:

$$\frac{\omega_{i,j}^k - \omega_{i,j}^n}{\Delta t} + L_x^+ \omega^k + L_y^+ \omega^k = 0;$$

– на другому кроці:

$$\frac{\omega_{i,j}^{n+1} - \omega_{i,j}^k}{\Delta t} + L_x^- \omega^{n+1} + L_y^- \omega^{n+1} = 0.$$

В даних залежностях використано такі позначення [2]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u \omega}{\partial x} &= \frac{\partial u^+ \omega}{\partial x} + \frac{\partial u^- \omega}{\partial x}, \\ \frac{\partial v \omega}{\partial y} &= \frac{\partial v^+ \omega}{\partial y} + \frac{\partial v^- \omega}{\partial y}, \\ u^+ &= \frac{u + |u|}{2}, \quad u^- = \frac{u - |u|}{2}, \\ v^+ &= \frac{v + |v|}{2}, \quad v^- = \frac{v - |v|}{2}, \\ \frac{\partial u^+ \omega}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1,j}^+ \omega_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^+ \omega_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^+ \omega^{n+1}, \\ \frac{\partial u^- \omega}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1,j}^- \omega_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^- \omega_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^- \omega^{n+1}, \\ \frac{\partial v^+ \omega}{\partial y} &\approx \frac{v_{i,j+1}^+ \omega_{i,j}^{n+1} - v_{i,j}^+ \omega_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^+ \omega^{n+1}, \\ \frac{\partial v^- \omega}{\partial y} &\approx \frac{v_{i,j+1}^- \omega_{i,j+1}^{n+1} - v_{i,j}^- \omega_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^- \omega^{n+1}. \end{aligned}$$

Для визначення значення функції ω на кожному кроці розщеплення використовується явна формула.

Схема розщеплення для чисельного інтегрування рівняння дифузії (8) така [4]:

$$\frac{\omega_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \omega_{i,j}^n}{\Delta t} = \left[\frac{-\omega_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \omega_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\text{Re } \Delta x^2} \right] + \left[\frac{-\omega_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \omega_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\text{Re } \Delta y^2} \right],$$

$$\frac{\omega_{i,j}^{n+1} - \omega_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \left[\frac{\omega_{i+1,j}^{n+1} - \omega_{i,j}^{n+1}}{\Delta x^2 \text{ Re}} \right] + \left[\frac{\omega_{i,j+1}^{n+1} - \omega_{i,j}^{n+1}}{\Delta y^2 \text{ Re}} \right].$$

Значення функції ω на кожному кроці розщеплення визначається за явною формулою.

Здійснено програмну реалізацію розробленої чисельної моделі за допомогою алгоритмічної мови FORTRAN.

Результати. Далі представлено результати розв'язку модельної задачі. Розглядається робоче приміщення, де є устаткування, та біля кожного устаткування розташовано робоче місце (рис. 2). Надходження повітря в приміщення відбувається зверху (стеля), вихід повітря з робочого приміщення – на правій стінці зверху. В початковий момент часу $t=0$ внаслідок аварії відбувається миттєвий викид CO над першим устаткуванням та формується хмара забрудненого повітря. Форма хмари та її розмір задаються, як початкові умови. Концентрація CO в хмарі прийнята 1 од. (безрозмірне значення).

Потрібно дослідити, як формується область хімічного забруднення в робочому приміщенні з часом після аварійного викиду CO .

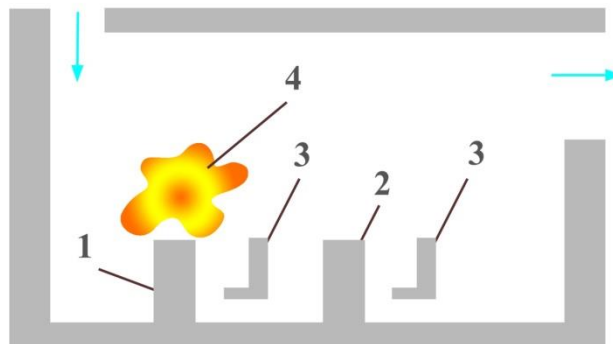


Рис. 2. Розрахункова схема:

1, 2 – устаткування; 3 – робоче місце; 4 – хмара небезпечної речовини

Далі на рисунках показано, як змінюється форма області забруднення в робочому приміщенні для різних моментів часу після аварії. На рисунках показано поле концентрації CO в безрозмірному вигляді. Кожне число на рисунку показує значення концентрації у відсотках від максимального її значення на даний момент часу.

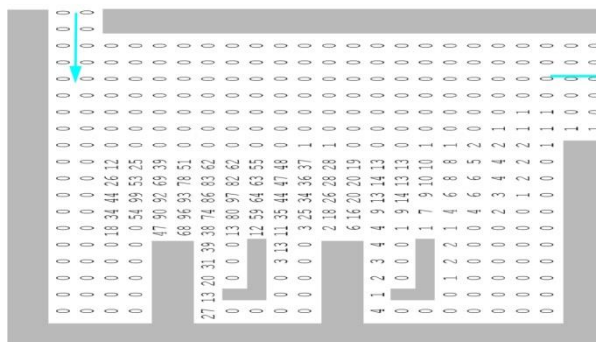


Рис. 3. Область забруднення в робочому приміщенні, $t = 2$ с

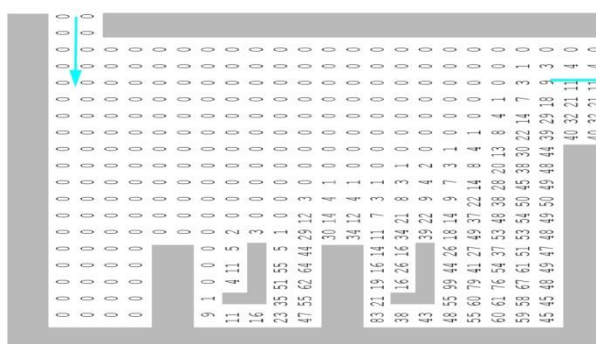


Рис. 4. Область забруднення в робочому приміщенні, $t = 9$ с

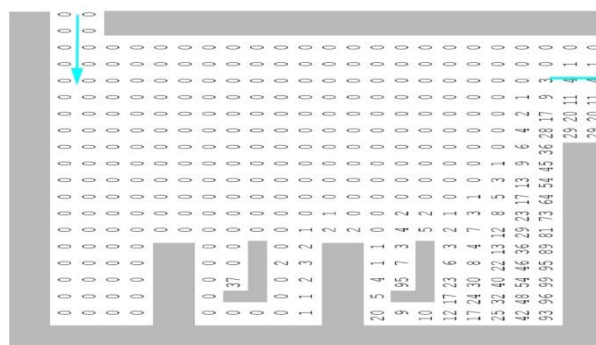


Рис. 5. Область забруднення в робочому приміщенні, $t = 21$ с

Як можна бачити з наведених рисунків, з часом має місце деформація області хімічного забруднення внаслідок складної картини течії повітря в приміщенні. Внаслідок руху повітря в робочому приміщенні при роботі вентиляційної системи область забруднення більш швидко розвивається в горизонтальному напрямку (див. рис. 3). Також можна бачити, що з часом формується область забруднення в нижній частині робочого приміщення та біля правої стінки. Це пов'язано з виникненням застійних зон у даній частині приміщення.

В таблиці показана зміна максимальної концентрації безрозмірної концентрації CO в приміщенні для різних моментів часу після аварії.

Таблиця

Зміна максимальної концентрації CO в приміщенні для різних моментів часу після аварії

Час	Максимальна концентрація CO (в безрозмірному вигляді)
3с	0.45
5с	0.31
8с	0.19
16	0.05
24	0.01

Як можна бачити з таблиці, з часом має місце падіння концентрації CO в приміщенні внаслідок роботи аварійної вентиляції.

Відзначимо, що час розрахунку процесу хімічного забруднення повітря в робочому приміщенні складає 5с.

Наукова новизна та практична цінність. Наведено CFD модель та експрес оцінювання динаміки забруднення повітря в робочому приміщенні при аварійному витоку хімічно небезпечної речовини. Поле швидкості повітряного потоку розраховується на базі моделі в'язкої рідини. Процес формування областей хімічного забруднення в приміщенні моделюється на базі рівняння конвективно-дифузійного переносу домішки. Модель дозволяє протягом робочого дня здійснити серію прогнозних розрахунків для визначення небезпеки токсичного ураження персоналу в робочих приміщеннях у випадку можливих екстремальних ситуацій.

Висновки. Запропоновано CFD модель, що дозволяє швидко розрахувати динаміку забруднення повітря в робочому приміщенні при аварійному викиді хімічно небезпечної речовини. Розроблено математичну модель, що дозволяє врахувати при проведенні обчислювального експерименту різні перешкоди, що знаходяться всередині робочого приміщення та впливають на формування поля швидкості повітряного потоку та форму області забруднення. Запропонована CFD модель буде корисна при розробці ПЛАСа (план ліквідації аварійної ситуації) так як інструмент оперативного отримання прогнозних даних.

Перелік посилань

1. Беляев, Н. Н., Беляева, В. В., & Якубовская, З. Н. (2015). *Прогнозирование уровня загрязнения воздушной среды в помещениях: монография*. Акцент ПП.
2. Згуровский, М. З., Скопецкий, В. В., Хрущ, В. К., & Беляев, Н. Н. (1997). *Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде*. Наукова думка.
3. Марчук, Г. И. (1982). *Математическое моделирование в проблеме окружающей среды*. Наука.
4. Самарский, А. А. (1983). *Теория разностных схем*. Наука.
5. Эльтерман, В. М. (1980). *Вентиляция химических производств*. Химия.
6. Huang Shuguang (2011). *Experimental and numerical study on personalized ventilation coupled with displacement ventilation*: M.Sc. Thesis. National University of Singapore.
7. Min Zhang, & Bin Zhao (2016). Numerical simulation of air distribution's impact on indoor air quality. *Chemical Engineering Transactions*, 51, 1–6.
<https://doi.org/10.3303/CET1651001>.

8. Yang Li (2012). Numerical simulation and analysis for indoor air quality in different ventilation. *Health*, 4 (12), 1352–1361.
<https://doi.org/10.4236/health.2012.412197>.
9. *Отключены все энергоблоки: глава Запорожской ОГА рассказал, что произошло на ТЭС в Энергодаре* (2021). ТСН <https://tsn.ua/ru/ukrayina/otklyucheny-vse-energobloki-glava-zaporozhskoy-oga-rasskazal-cto-proizoshlo-na-tes-v-energodare-1719259.html>

ABSTRACT

Purpose. Development of CFD model and computer code for the analysis and forecasting of the process of formation of areas of chemical contamination in the workplace in the event of an emergency leak of a hazardous substance, allowing to take into account the influence of obstacles and the operation of the ventilation system on this process.

The methods. The mass transfer equation is used to calculate the process of formation of areas of chemical contamination in the workplace over time. Navier-Stokes equations are used to solve the problem of aerodynamics – determination of the air flow velocity field in the room. For the numerical solution of modeling equations, finite-difference splitting schemes are used. On the basis of the developed numerical model, a computer code was created for conducting computational experiments

Findings. An effective CFD model and computer code were created, which allow to quickly analyze the level of chemical pollution of working areas in possible emergency situations accompanied by the emission of dangerous substances. The results of the computational experiment are presented.

The originality. An effective CFD model has been developed, which allows to calculate the dynamics of the formation of areas of chemical air pollution in the workplace in the event of an emergency leak of a chemically hazardous substance

Practical implementation. On the basis of the proposed CFD model, a computer code has been developed that allows determining the dynamics of the formation of areas of contamination in the workplace during the emergency emission of hazardous substances. The model can be used to analyze the risk of toxic damage to personnel in the workplace

Keywords: *air contamination in working area, numerical modeling, emergency emission, working zone.*