

УДК 517.4:533.7

## ЧИСЛЕННАЯ ТРЕХМЕРНАЯ МОДЕЛЬ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ТЯЖЕЛОГО ГАЗА В АТМОСФЕРЕ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ КОНСЕРВАТИВНЫХ СХЕМ РАСЩЕПЛЕНИЯ

И. В. КОВАЛЕЦ, В. С. МАДЕРИЧ

*Институт проблем математических машин и систем НАН Украины, Киев*

*Получено 05.12.2000*

Представлена численная трехмерная модель распространения тяжелого газа в турбулентном приземном слое атмосферы. Для численного решения системы уравнений модели применена консервативная (по массе) схема расщепления с использованием уравнения для давления вместо уравнения для температуры. Приведено сопоставление результатов моделирования с данными лабораторных экспериментов. Результаты расчетов также сопоставлены с расчетами неконсервативной схемой.

Наведена чисельна тривимірна модель розповсюдження важкого газу у турбулентному приземному шарі. Для чисельного розв'язку системи рівнянь моделі застосована консервативна (по масі) схема розщеплення з використанням рівняння для тиску замість рівняння для температури. Наведено співставлення результатів моделювання з даними лабораторних експериментів. Результати розрахунків співставлені також із розрахунками неконсервативною схемою.

The numerical three-dimensional model of the dense gas dispersion is considered. The conservative (upon mass) splitting method was used, solving pressure equation instead of the equation for temperature. The simulations results compared with the laboratory experiments data. The comparison of the results against of calculations by the non-conservative splitting method is presented.

### ВВЕДЕНИЕ

Во многих случаях аварийных выбросов токсичных или воспламеняющихся газообразных веществ формируются облака с плотностью большей, чем у атмосферного воздуха [1]. Эволюция таких облаков существенно отличается от облаков газа нейтральной плавучести. Коллапсируя под действием сил плавучести у поверхности Земли, облако вытесняет воздух и заметно меняет аэродинамические условия обтекания поверхности. Сильная устойчивая стратификация в облаке подавляет турбулентность и уменьшает скорость разбавления газа воздухом. Ввиду этого аэротермодинамика процессов дисперсии тяжелых газов достаточно сложна и требует для ее описания моделей, в которых бы учитывалось взаимодействие облаков тяжелого газа и турбулентного приземного слоя атмосферы. Для описания дисперсии тяжелого газа в атмосфере, наряду с упрощенными нуль-мерными (интегральными), одномерными и двумерными моделями, разработан ряд трехмерных моделей. Классификация и краткий обзор моделей приведен в [2]. Там же описана разработанная ИПММС НАНУ трехмерная численная модель турбулентной динамики тяжелого газа с большими изменениями плотности с использованием осреднения Фавра-Рейнольдса, которое для

таких течений приводит к более простой форме уравнений, чем осреднение по Рейнольдсу. Для расчета турбулентных напряжений и потоков использовалась изотропная модель турбулентности первого порядка. Численное решение трехмерной системы уравнений динамики сжимаемого газа с неотфильтрованными звуковыми волнами представляет собой сложную задачу, требующую использования больших вычислительных ресурсов. В работе [2] использовалась экономичная неявная конечно-разностная схема [3], основанная на применении метода конечного объема в сочетании в методом расщепления по физическим процессам и пространственным переменным. В настоящей работе рассматривается дальнейшее усовершенствование модели [2] и метода численного решения задачи. В отличие от других моделей распространения тяжелых газов, задача сформулирована в переменных плотность-скорость-давление-концентрация газа, что позволило построить более эффективные консервативные по массе численные схемы. Кроме того, вместо модели турбулентности первого порядка, использованной в [2], в настоящей статье применена  $k-\epsilon$  модель, лучше учитывающая нестационарные эффекты на начальной стадии распространения облака газа. Проведено сопоставление моделей и численных схем между собой и дано сравнение с экспериментами.

## 1. ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ

Известно, что в зависимости от выбора иско-  
мых функций уравнения газовой динамики могут  
быть представлены в различных формах. Как пра-  
вило, в задачах распространения тяжелых газов  
в качестве зависимых переменных используются  
плотность, скорость, температура (энтальпия) и  
концентрация газа. Трехмерная нестационарная  
система осредненных по Фавру-Рейнольдса урав-  
нений, записанных в декартовых координатах при  
больших числах Рейнольдса, имеет вид [2]:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{p} \langle u_i \rangle}{\partial x_i} = 0, \quad (1)$$

$$\frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho} \langle u_i'' u_j'' \rangle + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = -\delta_{i3} g, \quad (2)$$

$$\frac{\partial \langle T \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial x_j} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho} \langle u_j'' T \rangle + \frac{\bar{p}}{\bar{\rho} c_v} \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_j} = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x_j} + \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho} \langle u_j'' C'' \rangle = 0, \quad (4)$$

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;  $g$  – ускорение силы тяжести;  $c_v$  – удельная теплоемкость при постоянном объеме. Чертой сверху обозначено осреднение по Рейнольдсу, тогда как угловые скобки означают осреднение по Фавру. Величины со штрихом суть пульсационные составляющие соответствующих переменных по Рейнольдсу, тогда как двойные штрихи соответствуют пульсационным составляющим по Фавру. Детали осреднения см. в [2]. Система уравнений дополняется уравнением состояния идеального газа:

$$\bar{p} = \bar{p} \langle T \rangle (\langle C \rangle R_g + (1 - \langle C \rangle) R_a), \quad (5)$$

где  $R_a, R_g$  – газовые константы для воздуха и га-  
за. Представление уравнения внутренней энергии  
в виде уравнения для температуры удобно для опи-  
сания химических процессов, идущих с выделени-  
ем теплоты, однако при численном решении си-  
стемы уравнений (1)-(5) возникает необходимость  
выражать градиенты давления в уравнениях дви-  
жения через плотность, концентрацию и темпера-

туру:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = a \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + b \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x_i} + \epsilon \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial x_i}, \quad (6)$$

где

$$a = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial \rho}, b = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial C}, \epsilon = \frac{1}{\bar{\rho}} \frac{\partial \bar{p}}{\partial T}. \quad (7)$$

Естественно, это может приводить к неточно-  
стям, связанным как с неточностью самого пред-  
ставления (6) в случае слабых разрывов плотно-  
сти, концентрации и температуры, так и с необ-  
ходимостью использовать значения  $a, b, \epsilon$  при чи-  
сленных расчетах на  $n$ -м слое. Также неудобство  
представляет необходимость интерполяции значе-  
ний  $a, b, \epsilon$  между узлами сетки и т. д. В то же  
время Ковеня и Яненко [3] отметили, что наиболее  
простой вид уравнения газовой динамики прини-  
мают в переменных плотность, скорость и давле-  
ние. Такая форма уравнений позволяет, в отличие  
от системы уравнений (1)-(5), строить разност-  
ные схемы отдельно для уравнений движения и  
энергии (в переменной давления) и для уравнений  
неразрывности и концентрации. Чтобы использо-  
вать эти свойства в задаче распространения тя-  
желого газа, выведем уравнение для давления из  
уравнения для удельной внутренней энергии, ко-  
торое в неосредненных переменных и в пренебре-  
жении молекулярными потоками имеет вид [4]

$$\frac{\partial E}{\partial t} + u_\alpha \frac{\partial}{\partial x_\alpha} E = -\frac{p}{\rho} \frac{\partial u_\alpha}{\partial x_\alpha}. \quad (8)$$

Сначала получим уравнение для функции  $\Phi = p/\rho$ ,  
которая, с учетом уравнения состояния идеаль-  
ного газа (4), является функцией только концен-  
трации и температуры,  $\Phi = \Phi(C, T)$ , а  $E = E(\Phi, C)$ .  
Осредненное по Фавру-Рейнольдсу уравнение для  
 $\Phi$  имеет вид

$$\frac{\partial \bar{p} \langle \Phi \rangle}{\partial t} + \frac{\partial \bar{p} \langle u_\alpha \rangle \langle \Phi \rangle}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \bar{\rho} \langle u_\alpha'' \Phi'' \rangle + \frac{\bar{p} \langle \Phi \rangle}{(\partial E / \partial \Phi)} \frac{\partial \langle u_\alpha \rangle}{\partial x_\alpha} = 0. \quad (9)$$

Отсюда нетрудно получить уравнение для давле-  
ния:

$$\frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \langle u_\alpha \rangle \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \bar{\rho} \langle u_\alpha'' \Phi'' \rangle + \bar{p} \langle c_s^2 \rangle \frac{\partial \langle u_\alpha \rangle}{\partial x_\alpha} = 0, \quad (10)$$

где  $c_s = (\partial p / \partial \rho)_s$  – скорость звука. Для турбулент-  
ных напряжений и потоков, так же, как и в [2],  
используются градиентные соотношения [5]:

$$\langle u_i'' u_j'' \rangle = -\nu_T \left( \frac{\partial \langle u_i \rangle}{\partial x_j} + \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_i} \right) + \nu_T \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial \langle u_j \rangle}{\partial x_j} + \frac{2}{3} \delta_{ij} k, \quad (11)$$

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

сохраняющие тензорную симметрию, где  $\phi$  – скалярная величина;  $\nu_T$  – коэффициент турбулентного переноса импульса;  $\sigma_\phi$  – турбулентное число Прандтля. В [2] коэффициент  $\nu_T$  определялся по известной формуле Колмогорова-Прандтля  $\nu_T = c_\lambda k^{1/2} l$ , где  $k$  – кинетическая энергия турбулентности;  $l$  – линейный масштаб турбулентности, зависящий от расстояния до подстилающей поверхности и стратификации;  $c_\lambda$  – константа. В настоящей работе  $\nu_T$  выражается через  $k$  и скорость диссипации энергии турбулентности  $\varepsilon$ :

$$\nu_T = C_\mu \frac{\langle k \rangle^2}{\langle \varepsilon \rangle}, \quad (13)$$

где  $C_\mu$  – константа. Для замыкания системы уравнений используется  $k - \varepsilon$  модель:

$$\frac{\partial \bar{\rho} k}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \langle u_\alpha \rangle k}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \frac{\bar{\rho} \nu_T}{\sigma_k} \frac{\partial k}{\partial x_\alpha} = \bar{\rho} G_T - \bar{\rho} \varepsilon, \quad (14)$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \varepsilon}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \langle u_\alpha \rangle \varepsilon}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_\alpha} = \frac{\bar{\rho} \varepsilon}{k} [C_{1\varepsilon} G_T - C_{2\varepsilon} \varepsilon], \quad (15)$$

где

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

описывает генерацию турбулентности, вызванную взаимодействием напряжений Рейнольдса и градиентов средней скорости (первый член), и генерацию или диссипацию турбулентности за счет взаимодействия потоков плотности и градиентов среднего давления (второй член). В приближении Буссинеска второй член описывает переход кинетической энергии турбулентности в потенциальную и наоборот. Турбулентный поток плотности также рассчитывался по градиентной формуле [5]

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

где  $C_\rho$  – постоянная. Значения постоянных модели общеприняты:  $c_\mu = 0.09$ ,  $\sigma_k = 1$ ,  $\sigma_\rho = \sigma_\phi = 0.9$ ,  $\sigma_\varepsilon = 1.2$ ,  $C_{1\varepsilon} = 1.44$ ,  $C_{2\varepsilon} = 1.92$ .

Рассмотрим теперь граничные и начальные условия для системы уравнений (1)-(2), (4), (9), дополненной моделью турбулентности (11)-(16). В последующем изложении эту модифицированную модель распространения газа будем называть моделью II в отличие от изложенной в [2] модели I. У поверхности Земли при  $z = z_0$  принимались условия прилипания для скоростей и отсутствия потока газа, за исключением его источника. Здесь  $z_0$  – параметр шероховатости. Граничные условия для переменных  $\bar{p}$  и  $\bar{\rho}$  следуют из уравнения теплообмена с подстилающей поверхностью:

$$\frac{\nu_T}{\sigma_T} \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial z} = -\lambda (\langle T \rangle - T_g), \quad (18)$$

где  $\lambda$  – коэффициент теплоотдачи на поверхности земли;  $T_g$  – температура подстилающей поверхности. Уравнение для вертикальной составляющей скорости на поверхности Земли вырождается в уравнение гидростатики:

$$\frac{\partial \bar{P}}{\partial z} = -\bar{\rho} g. \quad (19)$$

Для определения плотности на нижней границе уравнение гидростатики записывается как

$$(R_a(1 - \langle C \rangle) + R_g \langle C \rangle) \left( \frac{\partial \bar{P}}{\partial z} \langle T \rangle + \bar{P} \frac{\partial \langle T \rangle}{\partial z} \right) = -\bar{\rho} g. \quad (20)$$

Градиент температуры в (20) исключается с помощью уравнения теплообмена с поверхностью (17), а температура вычисляется из уравнения состояния по известным давлению, плотности и концентрации. После нахождения граничного значения плотности, граничное значение для давления находится из уравнения (19).

Граничные условия для энергии турбулентности и скорости диссипации находятся из предположения о локальной равновесности развитой турбулентности у Земли. На  $z = z_0$ :

$$\frac{\partial k}{\partial z} = 0, \quad \varepsilon = \frac{C_\mu^{3/4} k^{3/2}}{\kappa z_0}. \quad (21)$$

Здесь  $\kappa = 0.4$  – постоянная Кармана. В случае гладких стенок  $z_0$  представляет собой высоту вязкого подслоя:

$$z_0 = \frac{1}{E_0} \frac{\nu}{u_*},$$

где  $E_0 = 10$  для гидравлически гладких стенок,  $\nu$  – кинематическая молекулярная вязкость воздуха,  $u_*$  – динамическая скорость, которая находится из соотношения

$$\frac{k}{u_*^2} = \frac{1}{\sqrt{C_\mu}},$$

полученного из условия равенства генерации и диссипации турбулентной энергии. На верхней границе области распределение всех величин соответствует невозмущенному выбросом состоянию атмосферы. Расчетная область ориентирована по направлению приземного ветра. На боковых гранях, где поток втекает в область, задавались значения невозмущенных полей скорости, давления и нулевая концентрация газа. На остальных гранях принимались условия Неймана. В начальный момент времени все метеорологические параметры были заданы в соответствии с логарифмическим распределением ветра и стратификацией. Начальные условия и условия на поверхности земли в источнике зависели от типа выброса.

## 2. ЧИСЛЕННАЯ СХЕМА

Для численного решения системы уравнений (1)–(2), (4), (10), (14)–(15) был применен подход, первоначально предложенный Ковеней и Яненко в [3] для решения системы уравнений движения невязкого газа. В рассматриваемой здесь конечно-разностной схеме расщепления переход на временной  $n+1$  слой осуществляется в два этапа. На первом этапе на  $n+1$  слой переводятся скорости и давление. На втором – рассчитываются остальные характеристики: плотность, концентрация, турбулентная энергия и скорость диссипации. Благодаря такому подходу, на втором этапе скорости в уравнениях неразрывности и переноса примеси берутся уже на  $n+1$  слое, что позволяет с большой точностью сохранять массу и повышает устойчивость схемы. Рассмотрим процедуру решения более подробно. На первом этапе вычислительного процесса один шаг по времени  $\tau$  расщепляется на шесть дробных шагов (по физическим процессам и направлениям). Соответствующая система уравнений (2), (10) в векторной форме имеет вид

$$\frac{\partial \mathbf{f}}{\partial t} + \sum_{j=1}^6 \Omega_j \cdot \mathbf{f} = \mathbf{G}, \quad (22)$$

$$\text{где } \mathbf{f} = \begin{bmatrix} u \\ v \\ w \\ P \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\Omega_j = u_j \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{1}{\rho^{1-m}} \mathbf{E} \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \nu_T \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{1}{\rho} \right)^m \right),$$

(по  $j$  не суммировать!)

$$\Omega_4 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial x} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \rho c_s^2 \frac{\partial}{\partial x} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\Omega_5 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial y} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \rho c_s^2 \frac{\partial}{\partial y} & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$\Omega_6 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial z} \\ 0 & 0 & \rho c_s^2 \frac{\partial}{\partial z} & 0 \end{bmatrix}.$$

Здесь

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} 4/3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 4/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 4/3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix},$$

$$d_1 = -\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} (\rho k) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho \nu_T \left( \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho \nu_T \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho \nu_T \frac{\partial w}{\partial x} \right),$$

$$d_2 = -\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial y} (\rho k) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho \nu_T \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho \nu_T \frac{\partial u}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho \nu_T \frac{\partial w}{\partial y} \right),$$

$$d_3 = -\frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} (\rho k) - \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left( \rho \nu_T \left( \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left( \rho \nu_T \frac{\partial u}{\partial z} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \rho \nu_T \frac{\partial v}{\partial z} \right) - g.$$

Параметр  $m = 0$  за исключением уравнения для давления, где  $m = 1$ . Конечно-разностная схема записывается в виде

$$\frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^n}{\tau} + \sum_{j=1}^6 \Omega_{jh}^k (\gamma \mathbf{f}^{n+1} + (1 - \gamma) \mathbf{f}^n) = \mathbf{G}^n, \quad (23)$$

где  $\gamma$  - весовой множитель;  $\Omega_{jh}^k$  - разностный аналог дифференциального оператора в (22), который аппроксимирует исходную систему уравнений с порядком  $O(\tau + h^k)$ . Все коэффициенты в операторах  $\Omega_{jh}^k$  берутся с предыдущего шага. Приводя уравнение (23) к каноническому виду

$$(\mathbf{E}_1 + \tau \gamma \sum_{j=1}^6 \Omega_{jh}^k) \frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^n}{\tau} = - \sum_{j=1}^6 \Omega_{jh}^k \mathbf{f}^n + \mathbf{G}^n \quad (24)$$

и используя факторизацию оператора [3]:

$$\left( \mathbf{E}_1 + \tau \gamma \sum_{j=1}^6 \Omega_{jh}^k \right) \approx \prod_{j=1}^6 (\mathbf{E}_1 + \tau \gamma \Omega_{jh}^k), \quad (25)$$

переходим на  $n + 1$  временной слой с помощью последовательности дробных шагов:

$$\begin{aligned} (\mathbf{E}_1 + \tau \gamma \Omega_{1h}^k) \xi^{n+1/6} &= - \sum_{j=1}^6 \Omega_{jh}^k \mathbf{f}^n + \mathbf{G}^n, \\ (\mathbf{E}_1 + \tau \gamma \Omega_{2h}^k) \xi^{n+2/6} &= \xi^{n+1/6}, \\ (\mathbf{E}_1 + \tau \gamma \Omega_{3h}^k) \xi^{n+3/6} &= \xi^{n+2/6}, \\ (\mathbf{E}_1 + \tau \gamma \Omega_{4h}^k) \xi^{n+4/6} &= \xi^{n+3/6}, \\ (\mathbf{E}_1 + \tau \gamma \Omega_{5h}^k) \xi^{n+5/6} &= \xi^{n+4/6}, \\ (\mathbf{E}_1 + \tau \gamma \Omega_{6h}^k) \xi^{n+1} &= \xi^{n+5/6}, \\ \mathbf{f}^{n+1} &= \mathbf{f}^n + \tau \xi^{n+1}. \end{aligned} \quad (26)$$

Вектор  $\xi^{n+j/6}$  в системе уравнений (26) определяется как  $\xi^{n+j/6} = (\mathbf{f}^{n+j/6} - \mathbf{f}^n)/\tau$ . На первых трех дробных шагах системы уравнений (26) решаются скалярными прогонками. Выпишем для каждой компоненты вектора  $\xi^{n+j/6}$  разностное уравнение на 4-м дробном шаге:

$$\xi_u^{n+4/6} + \tau \gamma \frac{1}{\rho} \Lambda_x^k \xi_p^{n+4/6} = \xi_u^{n+3/6}, \quad (27)$$

$$\xi_v^{n+4/6} = \xi_w^{n+4/6} = 0, \quad (28)$$

$$\xi_p^{n+4/6} + \tau \gamma \rho^n c_s^2 \Lambda_x^k \xi_u^{n+4/6} = \xi_p^{n+3/6}. \quad (29)$$

Здесь  $\Lambda_x^k$  - конечно-разностный аналог порядка  $k$  производной  $\partial/\partial x$ . Комбинируя уравнения (27) и (29), получаем уравнение для нахождения  $\xi_u^{n+4/6}$ :

$$\begin{aligned} \left[ \mathbf{E}_1 - \tau^2 \gamma^2 \frac{1}{\rho^n} \Lambda_x^k [\rho^n c_s^2 \Lambda_x^k] \right] \xi_u^{n+4/6} &= \\ = \xi_u^{n+3/6} - \tau \gamma \frac{1}{\rho^n} \Lambda_x^k \xi_p^{n+3/6} \end{aligned} \quad (30)$$

Это уравнение также решается относительно  $\xi_u^{n+4/6}$  скалярной прогонкой. Подставляя полученные значения  $\xi_u^{n+4/6}$  в уравнение (29), получаем  $\xi_p^{n+4/6}$ . Аналогичная процедура имеет место на 5-м и 6-м дробных шагах для компонент  $\xi_v^{n+5/6}$  и  $\xi_w^{n+5/6}$  соответственно.

На втором этапе численного решения исходной системы уравнений производится расщепление по направлениям уравнений для концентрации, плотности, энергии турбулентности и скорости диссипации. Уравнения при этом имеют вид

$$\frac{\mathbf{f}^{n+1} - \mathbf{f}^n}{\tau} + \sum_{j=1}^3 \Omega_j (\gamma \mathbf{f}^{n+1} + (1 - \gamma) \mathbf{f}^n) = \mathbf{G}^n, \quad (31)$$

$$\text{где } \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho C \\ \rho k \\ \rho \varepsilon \end{bmatrix}, \quad \mathbf{G}^n = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \overline{\rho} G_T - \overline{\rho} \varepsilon \\ \frac{\overline{\rho} \varepsilon}{k} [C_{1\varepsilon} G_T - C_{2\varepsilon} \varepsilon] \end{bmatrix},$$

$$\Omega_j = \begin{bmatrix} \frac{\partial u_j^{n+1}}{\partial x_j} \\ \frac{\partial u_j^{n+1}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho \nu_T \frac{\partial 1}{\partial x_j} \right) \\ \frac{\partial u_j^{n+1}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \\ \frac{\partial u_j^{n+1}}{\partial x_j} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \rho^{n+1} \nu_T^n \frac{\partial}{\partial x_j} \right) \end{bmatrix}. \quad (32)$$

Разбиение на дробные шаги для системы уравнений (31) аналогично первым трем шагам (26) и поэтому не приводится.

Отметим преимущество такой схемы перед схемой [6] для системы уравнений в переменных скорость, плотность, энтальпия и концентрация (схема I), в которой уравнения для скалярных переменных должны решаться одновременно с уравнениями для скорости. Это приводит к тому, что скорости в адвективных членах уравнения неразрывности и концентрации берутся с предыдущего слоя, что приводит к ограничению по временному шагу. Предложенная в данной работе процедура позволяет, во-первых, решать уравнения для массы и концентрации, а также уравнения для энергии турбулентности и скорости диссипации, записанные в консервативной форме и, во-вторых, позволяет для уравнений, решаемых на втором этапе, аппроксимировать адвективные члены полностью неявной схемой. Кроме описанных выше, следует отметить еще одно преимущество схемы

II перед схемой I. Как отмечено в [6], аппроксимация градиентов давления в схеме I соотношением (6), где коэффициенты  $a, b, \epsilon$  берутся с предыдущего слоя, приводит к возникновению больших неточностей, нефизических осцилляций на 4-м, 5-м, и 6-м дробных шагах, в которых должно присутствовать адаптированное поле давления к изменившимся на первых трех дробных шагах полям концентрации, плотности и температуры. С целью устранения этой проблемы в [6] вводится специальная модификация классического алгоритма расщепления на 4, 5, 6 дробных шагах, с помощью которой более точно вычисляются члены  $\xi_p^{n+3/6}$ ,  $\xi_p^{n+4/6}$ ,  $\xi_p^{n+5/6}$  соответственно. Как отмечено в [6], это приводит к существенному увеличению шага по времени (приблизительно на порядок). Однако как показано нашими расчетами, приведенными в следующем разделе, это не снимает полностью проблем, связанных с использованием коэффициентов  $a, b, \epsilon$ , взятых с предыдущего временного слоя и необходимостью их интерполяции между узлами сетки. Предлагаемый в нашей работе подход снимает эту проблему, так как члены  $\xi_p^{n+j/6}$  рассчитываются непосредственно. Для аппроксимации пространственных производных в дифференциальных матричных операторах использовалась схема со степенным законом [7], которая является схемой 2-го порядка точности по пространственным переменным, а при больших числах Пекле переходит в схему направленных разностей.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

Результаты расчетов с помощью моделей I и II были сопоставлены с данными лабораторного эксперимента [8]. В эксперименте изучалось изотермическое распространение тяжелого газа в покоящейся атмосфере над плоской гладкой поверхностью. В начальный момент времени создавался цилиндрический объем газа с высотой, равной диаметру. Отношение плотности газа (хладон 12) к плотности воздуха  $\rho_0/\rho_a$  изменялось от 2.2 до 4.2, а объем - от 0.034 до 0.134 м<sup>3</sup>. Измерения точечных концентраций на различных расстояниях от источника осуществлялись на высоте  $z = 0.006$  м. Расчеты проводились на последовательности сеток с равномерным шагом. При приближении облака к границе размер области увеличивался, что позволило существенно уменьшить затраты машинного времени. Начальное разрешение области по горизонтали  $25 \times 25$  увеличилось к концу расчетов до  $61 \times 61$ . Вертикальное разре-

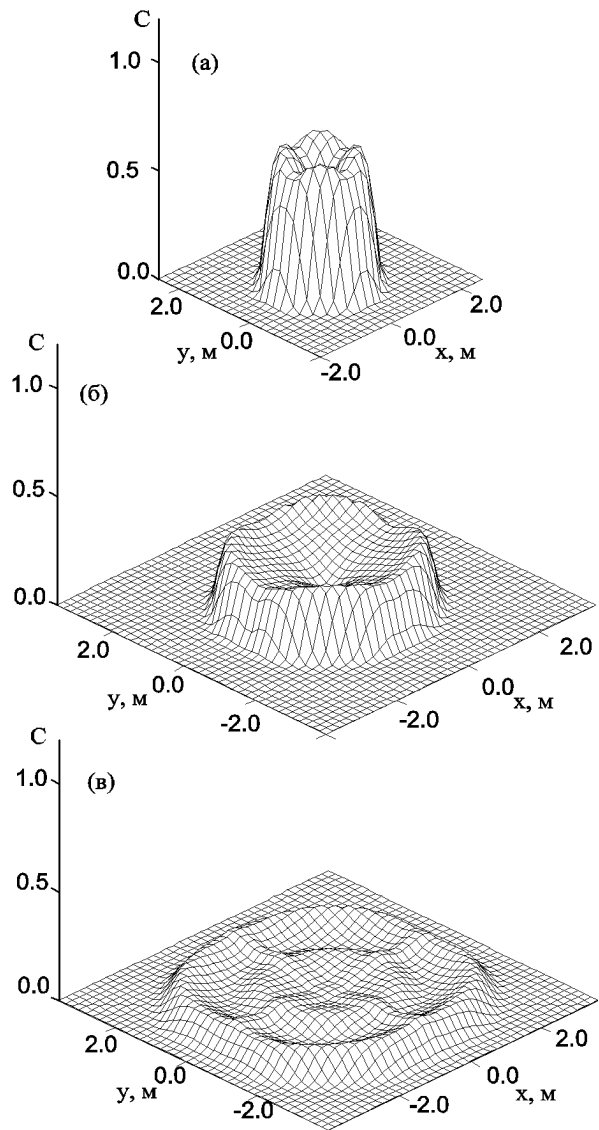


Рис. 1. Горизонтальное распределение приземной концентрации для трех моментов времени: а -  $t = 1$  с; б -  $t = 2$  с; в -  $t = 7$  с

шение было 40 точек с шагом, переменным по высоте. Ниже приведены результаты расчетов для отношения плотностей  $\rho_0/\rho_a = 2.9$  и начального объема  $V_0 = 0.054$  м<sup>3</sup>.

На рис. 1 изображены поля приземной концентрации для моментов времени  $t = 1; 2; 7$  с. Как видно из рис. 1, в, коллапсирующее облако распространяется в виде вихревого кольца. Внутри кольца распространяются гравитационные волны, которые, как отмечено [2], возможно являются вол-

нами, отраженными от края облака, замедляющего свое движение. Рис. 1 показывает также некоторые нефизические неоднородности поля концентрации, которые возникают на относительно грубой сетке вследствие применения схемы расщепления по направлениям.

На рис. 2 приведено сравнение результатов расчетов по схеме II с данными эксперимента на различных безразмерных расстояниях ( $R_* = R/V_0^{1/3}$  от источника). В целом, как следует из этого рисунка, модель показывает неплохое совпадение с экспериментом. Результаты расчетов концентрации по схеме расщепления I, описанной в [2, 6], на начальной стадии заметно не отличаются от приведенных на рис. 1. Однако время прихода максимальной концентрации к наиболее удаленному датчику предсказывается моделью I с некоторым запаздыванием. Подробнее причина этого запаздывания будет рассмотрена ниже. Невязка массы, возникающая при расчете по схеме I - 0.1%, тогда как для схемы II она составляет 0.0001%. Как видно из рис. 2, а, на экспериментальной кривой концентрации есть провал, обусловленный, повидимому, вовлечением воздуха в тыловую часть "головы" облака. Модель не предсказывает таких коротковолновых процессов из-за низкого разрешения по горизонтали. Однако время прихода максимальной концентрации предсказывается схемой II верно. Высота пика, предсказываемая моделью на рис. 2, а, занижена. Это может быть связано как с численной диссипацией, свойственной схеме Патанкара при больших числах Пекле, используемой при аппроксимации конвективных членов, так и с относительно грубым разрешением по вертикали. При увеличении разрешения вдвое высота пика несколько увеличивается (на 5%).

На рис. 3 представлены вертикальные сечения энергии турбулентности  $k$  и скорости диссипации  $\varepsilon$  для двух моделей турбулентности:  $k - \varepsilon$  и модели с алгебраическими соотношениями для масштаба турбулентности  $l$  [2]. Момент времени, для которого представлены эти сечения ( $t = 2$  с), приблизительно соответствует максимуму развития турбулентности в облаке. Как видно из рис. 3, а, распределение энергии турбулентности, рассчитанное обеими моделями, очень близко. Максимальные значения турбулентной энергии на рис. 3, а и б одинаковы и равны  $0.022 \text{ м}^2/\text{с}^2$ . В то же время максимальные значения скорости диссипации на рис. 3, в и г над вязким подслоем равны  $1200$  и  $2200 \text{ м}^2/\text{с}^3$  соответственно, т. е. максимальная скорость диссипации, рассчитанная  $k - \varepsilon$  моделью, почти в 2 раза меньше полученной по ре-

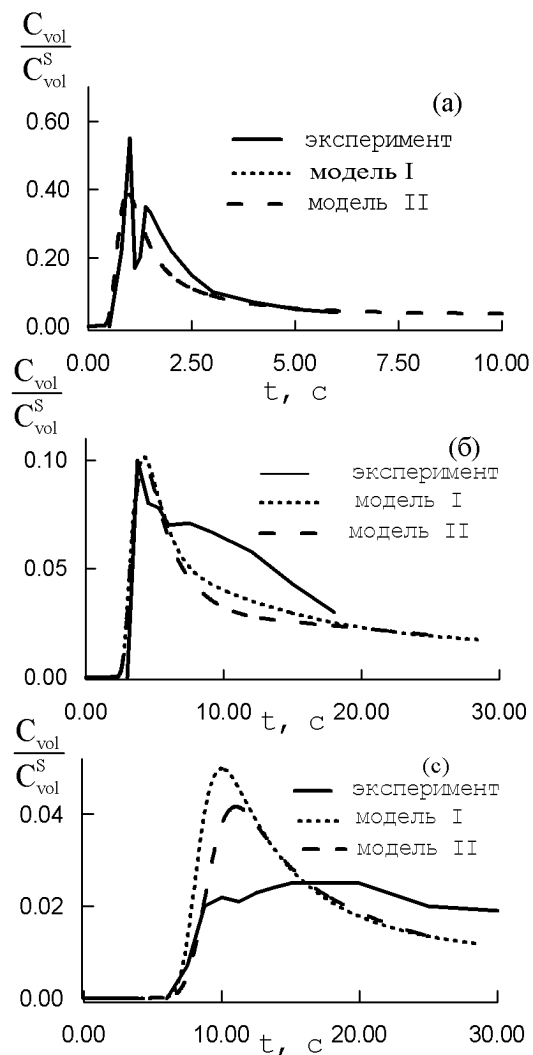


Рис. 2. Сравнение результатов моделирования с точечными приземными концентрациями, измеренными в эксперименте [8] для различных безразмерных расстояний от источника: а -  $R_* = 2.6$ , б -  $R_* = 5.8$ , в -  $R_* = 9.2$

зультатам  $k - l$  модели. Это обусловлено тем, что турбулентность в облаке далека от равновесного состояния.

На рис. 4 представлено изменение во времени максимальной (по области) разности температуры, полученной при расчетах изотермического эксперимента [2] схемами I и II. Как видно из рис. 4, схема с давлением (II) дает максимальное отклонение температуры от результатов расчетов схемой с температурой или энтальпией (I) около  $2^\circ K$ , при этом разность со временем затухает. Следует ожидать, что схема с температурой (I) лучше рассчитывает температуру, в то время как

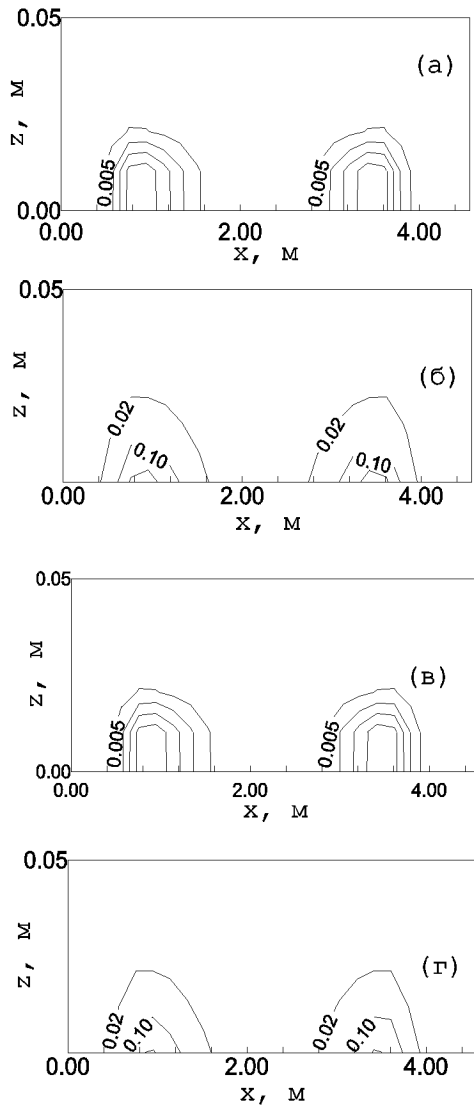


Рис. 3. Сравнение вертикальных сечений турбулентной энергии и скорости диссипации для  $t=2$  с, рассчитанных по  $k-\epsilon$  модели (а, в) и по  $k-l$  модели с алгебраическими соотношениями для масштаба турбулентности (б, г)

схема с давлением (II) дает более правильные значения давления (а значит и скоростей). Подтверждением этого предположения является тот факт, что рассчитанные по схеме I поля температуры в изотермическом эксперименте более однородны, разность между максимальным и минимальным значением составляет около  $0.01^\circ K$ , в то время как разность между максимальной и минимальной температурой, рассчитанной по схеме II, достига-

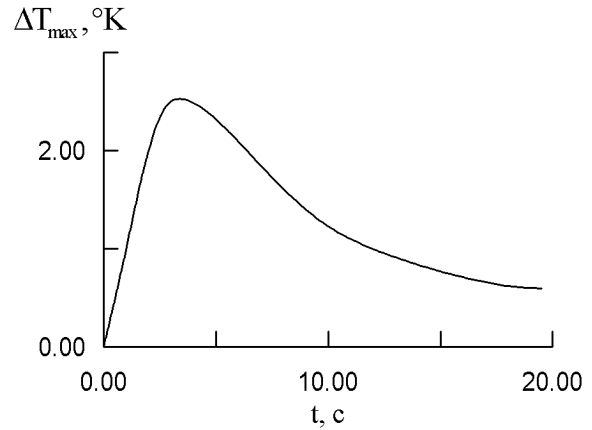


Рис. 4. Максимальная разность температуры между расчетами по схемам I и II

ет  $2^\circ K$ . Поэтому график на рис. 4 может служить мерой точности предсказаний температуры схемой II.

На рис. 5 представлен график максимального отличия скоростей в "голове" (т.е. наиболее активно двигающейся части) облака,  $(\Delta u_H)_{\max}$  рассчитанных по схемам I и II соответственно. Разности скоростей нормируются на максимальную скорость в облаке. Как правило, наиболее сильно отличаются скорости у поверхности Земли. Как мы уже отмечали, предполагается, что схема с давлением позволяет более точно предсказывать скорости. Как видно из рисунка 5, максимальное отличие скоростей в "голове" облака достигает 15 % и не убывает со временем. Тот факт, что наиболее сильно отличаются скорости у поверхности земли, является косвенным подтверждением того, что наблюдаемые отличия связаны с аппроксимацией давления выражением (6) в схеме I, поскольку наиболее сильные горизонтальные градиенты давления существуют у поверхности.

Основное ограничение на шаг при решении по обеим схемам связано со звуковыми волнами, которые возникают в сжимаемой среде, описываемой системой уравнений (1)-(5), (10). Поэтому при использовании численной схемы II естественно решать систему уравнений (23) на первом этапе (скорости и давление) с существенно меньшим шагом, чем уравнения (31), решаемые на втором этапе (плотность, концентрация и турбулентная энергия). Может возникнуть трудность с уравнением для неразрывности, в котором член  $\partial \rho / \partial t$  определяет генерацию звуковых волн. Предполагая, что для интересующих нас характеристик влияние акустических процессов не существенно, мы



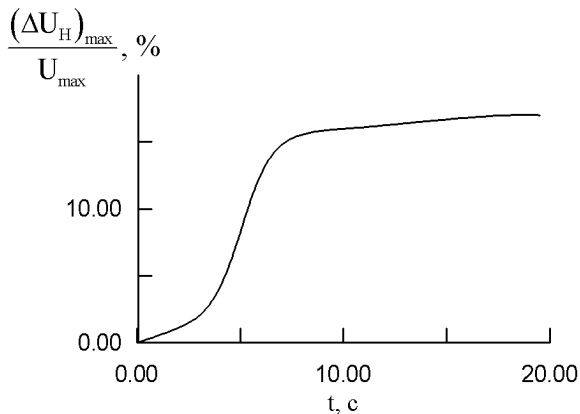


Рис. 5. Максимальна різниця швидкостей в "голові" хмари, нормована на максимальну швидкість в хмарі, по розрахункам по схемі I і II

решили вторую группу уравнений (31) с шагом в 10 раз большим, чем для первой группы уравнений (23). Получаемые при этом результаты совпадают с представленными на рис. 2. Процедура разделения шагов дает выигрыш во времени счета в 1.7 раза при сопоставимой точности. При записи численной схемы в переменных с температурой вместо давления такое разделение произвести невозможно, так как при такой записи уравнения для скалярных характеристик должны решаться одновременно с уравнениями движения.

#### 4. ВЫВОДЫ

В работе представлена численная трехмерная модель распространения тяжелого газа в турбулентном приземном слое атмосферы в переменных скорость-давление-плотность-концентрация.

Для численного решения системы уравнений модели применена консервативная (по массе) схема расщепления с использованием уравнения для давления вместо уравнения для температуры. Проведенные расчеты показывают, что схема дает неплохое совпадение с данными лабораторного эксперимента и лучше сохраняет массу воздуха и концентрацию газа, чем в переменных скорость-плотность-температура (энтальпия)-концентрация газа. Кроме того, благодаря специфике записи этой схемы, для нее существует механизм увеличения скорости счета из-за решения двух групп уравнений (23) и (31) с различными шагами по времени.

1. Britter R. E. Atmospheric dispersion of dense gases // Ann. Rev. Fluid Mech.—21.— Palo Alto, 1989.— P. 317–344.
2. Ковалец И. В., Мадерич В. С. Динамика и энергетика распространения тяжелого газа в приземном слое атмосферы // Прикладная гидромеханика.— 1999.— 2, N 4.— С. 12–20.
3. Ковеня В. М., Яненко Н. Н. Метод расщепления в задачах газовой динамики.— Новосибирск: Наука, 1981.— 376 с.
4. Бетчелор Дж. Введение в динамику жидкости.— М.: Мир, 1973.— 758 с.
5. Джонс У. Модели турбулентных течений с переменной плотностью и горением // Методы расчета турбулентных течений.— М.: Мир, 1984.— С. 349–398.
6. Едигаров А. С. Численный расчет турбулентного течения холодного тяжелого газа в атмосфере // ЖВММФ.— 1990.— 31, N 9.— С. 1369–1380.
7. Патанкар С. Численные методы решения задач теплообмена и динамики жидкости.— М.: Энергоатомиздат, 1984.— 376 с.
8. Spicer T. O., Havens J. A. Modeling the Phase 1 Thorney Island experiments // J. Hazardous Materials.— 1982.— 11.— P. 237–260.