

文章编号: 1673-193X(2006)06-0035-04

城市地区毒气扩散事故数值模拟^{*}

席学军, 邓云峰

(中国安全生产科学研究院, 北京 100029)

摘要: 在城市人口密集区域, 一旦发生重大危险气体泄露事故, 周围居民将处境危险。由于城市特殊的街道街谷影响, 用普通的方法难以精确计算出场的时空分布^[1], 大涡模拟(Large Eddy Simulation)虽然较为精确, 但对计算机计算能力要求较高。针对此, 可以通过一些方法, 例如贴体网格分析、卫星遥感技术, 局部网格加密技术, 改进大涡模型的计算条件, 考虑泄漏事故一旦发生时, 道路、房屋、气候对于气体扩散的影响, 对事故的致灾机理从动力学的角度进行研究。在算例中, 通过分析城市地区庙会时的一起事故, 模拟气体扩散浓度的时空分布, 得出城市地区各个地区的不同受灾程度。通过算例我们看到, 数值模拟能够为进一步安全规划、灾害预防、应急反应提供决策支持。

关键词: 大涡模拟; 贴体网格; 局部网格加密; 致灾机理

中图分类号: TE99

文献标识码: A

Numerical simulation on poison gas pollutant dispersion in urban area

XI Xue-jun, DENG Yun-feng

(China Academy of Safety Science and Technology, Beijing 100029, China)

Abstract: In the crowded city, once a fatal hazard gas leak accident comes on, the periphery inhabitant will face with danger. As we know, it is difficult to exactly count space and time distribution of field with the ordinary method, as a result of the city's special street canyons structure influence. Although LES (Large Eddy Simulation) is precise, it request high to the computer computation ability. In this article, we attempt to use some methods to improve LES computation technology such as body-fitted grid analysis, satellite remote sensing technology, 3D automated adaptive refinement of all element meshes. It is considered that how path, house, climate influence gas diffusion when leak accident occurs. The mechanism of disaster occurrence is studied by dynamics. In the example, the space and time gas distribution of field was processed by simulating a accident in Temple Fair of some city area. And different degrees of disaster was obtained everywhere in some city area. The conclusion can be drawn through the example that value simulation can goes a step further with policy-making support about safety planning, disaster prevention, Emergency response.

Key words: LES(large eddy simulation); body-fitted grid; refinement of meshes; mechanism of disaster occurrence

对于城市地区毒气泄露事故的预测研究方法主要包括^[2]: 外场观测、物理模拟和数值计算。外场观测是取得街谷扩散研究资料的较好方案^[3], 但是其观测计划设计需要很高的技巧, 另外该方法对规划项目失效。风洞实验^[4]能够对街谷扩散特征进行详

细研究, 成本较高是其缺点^[5]。数值模式的优点在于能够提供详细的流场以及污染物浓度场, 成本底^[6], 也不需要到现场, 完成的速度也比较快, 成为现在主流的事故模拟方案。大涡模拟由于其比较接近实际物理模型, 对于复杂下垫面具有独到的优势, 本文采用大涡模拟对城市街道进行模拟。

收稿日期: 2006-10-11

作者简介: 席学军, 硕士。

* 基金项目: 国家自然科学基金项目(编号: 70473018)资助

1 控制方程

1.1 过滤的 N-S 方程

LES 方程通过在傅立叶或空间域 N-S 方程滤

掉时间项得到方程,可以有效的滤掉比过滤网格小的漩涡,从而得到大涡的动量方程。

过滤的变量定义为:

$$\bar{\phi}(x) = \int_D \phi(x') G(x, x') dx' \quad (1)$$

其中, D 为流场区域, G 为决定过滤尺寸的函数, 离散化本身就提供了过滤操作

$$\bar{\phi}(x) = \frac{1}{V} \int_D \phi(x') dx', x' \in v \quad (2)$$

其中, V 为计算单元的体积, 过滤函数 $G(x, x')$ 定义为:

$$G(x, x') \begin{cases} 1/v, & x' \in v \\ 0, & x' \notin v \end{cases} \quad (3)$$

但是用 LES 去计算可压缩流体还不现实, 这个理论主要用于不可压缩流体, 可以认为, 只能采用 LES 模型来解决不可压缩流体。(本文所涉及算例扩散过程, 均可认为时不可压缩流体)

过滤不可压缩 N-S 方程, 将得到一下方程:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \bar{u}_i) = 0 \quad (4)$$

和

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \bar{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_i \bar{u}_j) = \\ \frac{\partial}{\partial x_j} (\mu \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}) - \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} - \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} \end{aligned} \quad (5)$$

其中, τ_{ij} 为亚网格张力, 定义为:

$$\tau_{ij} = \rho \bar{u}_i \bar{u}_j - \rho \bar{u}_i \bar{u}_j \quad (6)$$

这几个方程的不同之处在于所依赖的变量为过滤后的量, 而不是平均量, 同时张力表达式不同。

1.2 亚网格模型

过滤后得到的亚网格张力并不知道, 需要建模, 目前用的最广的漩涡粘性模型方程为:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = -2 \mu_t \bar{S}_{ij} \quad (7)$$

其中, μ_t 为亚网格湍流粘性力, \bar{S}_{ij} 是其张量旋率, 定义为:

$$\bar{S}_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (8)$$

目前有两个关于 μ_t 地模型, 本为采用 Smagorinsky - Lilly 模型。这个模型是亚网格模型的基础, 由 Smagorinsky 提出并由 Lilly 进一步完善, 此模型方程为:

$$\mu_t = \rho L_s^2 |\bar{S}| \quad (9)$$

其中, L_s 为网格的混合长度, 并且 $|\bar{S}| \equiv \sqrt{2 \bar{S}_{ij} \bar{S}_{ij}}$ 。

C_s 为 Samagorin 常数, 在实际计算中, L_s 计算公式为:

$$L_s = \min(\kappa d, C_s V^{1/3}) \quad (10)$$

其中, κ 为 von Kármán 常数, d 为到最近的壁面的距离, V 为计算单元的体积。

Lilly 通过在惯性区域的类似的湍流计算得到 C_s 值为 0.23。然而这个值在平均剪切力出现时或流场过渡区建引起很大的阻尼振动, $C_s = 0.1$ 对大部分流动来说是一个理想的值, 目前实际计算采用这个值。

有下面几个参数需要强调:

(1)湍流中的质量扩散

在湍流中, 实际计算以如下形式计算质量扩散:

$$\dot{J}_i = - \left(\rho D_{i,m} + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i \quad (11)$$

其中, Sc_t 是湍流施密特数:

$Sc_t = \frac{\mu_t}{\rho D_t}$, μ_t 为湍流粘性系数, D_t 为湍流扩散

系数。(缺省设置值为 0.7)。

(2)湍流的浮力方程

由于计算的气体为重气, 浮力与重力的影响一样重要。

浮力的方程为:

$$\begin{aligned} G_{ij} &= \beta \frac{\mu_t}{Pr_t} (g_i \frac{\partial T}{\partial x_j} + g_j \frac{\partial T}{\partial x_i}) \\ G_{ij} &= \beta \frac{\mu_t}{Pr_t} (g_i \frac{\partial T}{\partial x_j} + g_j \frac{\partial T}{\partial x_i}) \end{aligned} \quad (12)$$

其中, Pr_t 为湍流的普朗特数, 值为 0.85。 β 为热膨胀系数。

1.3 LES 模型的边界条件

由随机扰动理论, 在指定速度进口的边界处, 流动的速度组成可表示为:

$$\bar{u}_i = \langle \bar{u}_i \rangle + I \bar{\Psi} + \bar{u} \quad (13)$$

其中, I 为波动强度, $\bar{\Psi}$ 为 Gaussian 随机数, 定义为 $\bar{\Psi} = 0$ 和 $\sqrt{\bar{\Psi}^2} = 1$ 。

在网格划分得很好的情况下, 则可由薄壁面应力 - 张力间的关系得到如下的壁面剪切力方程:

$$\frac{\bar{u}}{u_T} = \frac{\rho u_T \bar{\Psi}}{\mu} \quad (14)$$

在网格划分很粗糙的情况下, 则不能解决薄壁面的流动情况, 可以假定与壁面相邻的网格单元的质心处于边界层的对流区域, 其方程可表达为:

$$\frac{\bar{u}}{u_T} = \frac{1}{\kappa} \ln E \left(\frac{\rho u_T \bar{\Psi}}{\mu} \right) \quad (15)$$

其中, κ 为 von Kármán 常数, $E = 9.793$ 。

壁面法则方程为:

$$T^* = \frac{(T_w - T_p) \rho c_p C_\mu^{1/4} \kappa_p^{1/2}}{q} \left(\begin{array}{l} \Pr \gamma^* + \frac{1}{2} \rho \Pr \frac{C_\mu^{1/4} \kappa_p^{1/2}}{q} U_p^2 \\ \Pr_t \left[\frac{1}{k} \ln(Ey^*) + P \right] + \\ \frac{1}{2} \rho \frac{C_\mu^{1/4} \kappa_p^{1/2}}{q} \{ \Pr_t U_p^2 + (\Pr - \Pr_t) U_c^2 \} \end{array} \right) \quad (16)$$

其中, P 用 Jayatilleke 给的公式计算:

$$P = 9.24 \left[\left(\frac{\sigma}{\sigma_t} \right)^{3/4} - 1 \right] [1 + 0.28 e^{-0.007 \sigma / \sigma_t}] \quad (17)$$

k_f = 流体的热传导率

ρ = 流体的密度

c_p = 流体的热容

q = 热流量

T_p = 近壁面网格的温度

T_w = 壁面的温度

\Pr = 分子普朗特数

\Pr_t = 端流普朗特数

$A = 26$ (Van Driest 常数)

$\kappa = 0.4187$ (von Kármán 常数)

$E = 9.793$ (壁面方程常数)

$U_c = y^* = y_T^*$ 处的平均速度

1.4 参数实验证

在默认条件下, 采用如上所述的默认参数, 在某一下垫面比较复杂的地区, 我们采用风洞实验和数值模拟分别对该地区进行危险气体扩散数值模拟, 分别进行了 8 个风向进行模拟。从实验结果来看, 均吻合比较好, 图中为 8 风向中东风情况(见图 1)。从实验结果来看, 大涡模拟默认参数鲁棒性比较强, 适合复杂下垫面的情况。

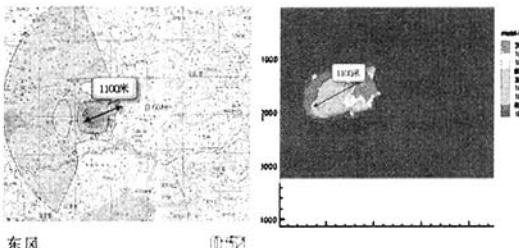


图 1 某地区的气体扩散实验和数值模拟对比

2 某地区城市三维模型

以某地区为例, 利用卫星影像图, 通过专门的软件, 利用阴影分析法得出每个房屋的高度信息, 再结合 gis 信息, 得出城市地区的房屋高程模型(见图 2)。

3 网格划分

通过建好的三维模型, 用采样点方法读取到网格划分程序中, 利用非结构网格和贴地网格技术, 可以很好的划出复杂场景的网格, 网格质量较高, 对于计算的收敛性帮助很大。在下垫面高度 10m 范围内采用自适应四面体网格, 10m 以上采用结构网格, 由于网格所在模型最小面为 $0.0269m^2$, 最大面为 $160m^2$, 差距巨大, 导致该网格最大尺寸 $96.7m^3$, 最小尺寸 $0.002m^3$, 采用在房屋角落和局部危险区进行加密, 总共为 1601223 个网格, 见图 3。



图 2 某城市地区三维模型

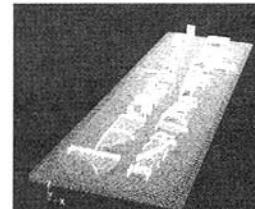


图 3 某城市地区地面网格图

4 风场计算

整个模拟过程如下:(1)首先通过数值模拟得到井喷前的基本风场分布, 经过约 1 个小时, 可得到稳定的基本风场;(2)计算时间步长: 大时间步长为 $0.1s$, 小时间步长为 $0.02s$;(3)四周采用了开边界条件, 顶部采用零梯度条件, 地面采用固壁条件。

取离地面 10m 高处 $1m/s$ 北风为初始风速, 在经过街谷地形以后, 由于房屋和道路的影响, 导致气流的流向发生变化, 通过模型的计算, 得出稳定情况的风场, 地表风场矢量图见图 4。

如图 4 所示, 风场已经加入爆炸事故点的气体

泄露的流场与地表风场的耦合影响。

5 扩散结果计算

模拟在城市地区发生事故,泄露大量的某毒气,毒气密度为 1.46kg/m^3 ,接触 1 小时有害浓度为 100ppm。



图 4 地面风场矢量图

在基本风场的基础上,开始浓度扩散的计算。浓度扩散的模拟分两种情况:(1)以得到的稳态的基本风场作为初始风场,不考虑气体射流对风场的影响,浓度场作为被动标量进行计算;(2)以得到的稳态的基本风场作为初始风场,考虑气体射流对风场的影响,并喷射流与风场耦合计算,浓度场作为被动

标量进行计算。

在泄露初始阶段,浓度扩散主要以第一种情况为主,在泄露逐渐产生作用后,扩散主要以后一种情况为主。综合考虑后,计算结果见如图 5~9 所示。所有计算的结果通过三维模型演示出来(图 5~9 均为地面 1m 高浓度)。

在 18 分钟以后,泄露停止,计算空气中弥散的危险气体的吹散过程。根据扩散结果(见图 5~9)我们可以得出以下结论:(1)由于街道峡谷的特殊性,气体主要在街谷中扩散的比较快(2)在街道背风处,由于风速比较慢,污染物很难消散,滞留时间比较长,在这个地方容易发生中毒事故。(3)在泄露点下风向处,如果正好是街谷的话,污染物虽然扩散的快,在选择撤离路线的时候,也应该考虑人员疏散的速度,在本算例,由下风向正好是比较宽阔的街道,人员撤离的比较快,相对是比较安全的。(4)接近泄露点的地方,由于街道人口比较狭窄,而气体疏散较快,这里都不是安全的撤离路线。(5)站在房屋高处会比较安全。重气在街谷地方聚集,在房屋高处,由于重力原因以及高处风速较快,气体很容易被稀释,所以,跑到比较高的楼层也比较安全。

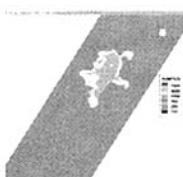


图 5 泄露后 1 分钟
的浓度分布

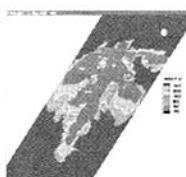


图 6 泄露后 6 分钟
的浓度分布



图 7 泄露后 18 分钟
的浓度分布

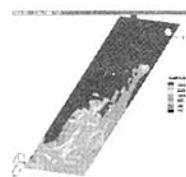


图 8 泄露后 42 分钟
的浓度分布

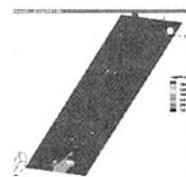


图 9 泄露后 63 分钟
的浓度分布

6 总结

通过城市地区的算例,可以看出,三维的大涡模拟可以反应危险气体扩散的不同时间、不同地点的浓度分布情况,在计算的结果中,可以判别出哪些地方属于比较危险,哪些地区危险比较小,哪些道路的设置有利于疏散。在紧急事态发生时,可以为具体的应急反应策略提供支持。

参考文献

- [1] C. Jayatilleke. The Influence of Prandtl Number and Surface Roughness on the Resistance of the Laminar Sublayer to Momentum and Heat Transfer. *Prog. Heat Mass Transfer* [M]. 1969, 1: 193~321
- [2] Huang H, Akutsu Y, Arai M, et al. An air quality model in urban street canyon : validation and sensitivity analysis [J]. *Atmos Environ*, 2000, 34: 687~696
- [3] Kastner - Klein P, Plate E J. Wind - tunnel study of concentration fields in street canyon [J]. *Atmos Environ*. 1999, 33: 3973~3979
- [4] Gerdes F, Olivari. Analysis of pollutant dispersion in an urban street canyon [J]. *Journal of Wind Engineering and Industrial aerodynamics*. 1999, 82: 105~124
- [5] 周洪昌, 吴晓玫. 街道峡谷湍流流动的风洞实验与数值计算 [J]. 空气动力学学报. 1998, 16(4): 411~418
- [6] 王嘉松, 黄 震. 应用不同湍流模式预测城市街道峡谷的大气环境 [J]. 上海交通大学学报. 2002, 36(10): 1496~1499
- [7] Riou Y. Comparison between mercure - gl code calculations, wind tunnel, measurements and thorney island field trials [J]. *Journal of Hazardous Materials*. 1987, (16): 247~265
- [8] Carr K K , Chatwin P C . Variability and heavy gas dispersion [J]. *Journal of Hazardous Materials*. 1985, (11): 281~300