

Прогнозирование последствий возможных аварий требует использования надежных математических моделей, описывающих как поступление токсичных и взрывоопасных веществ, так и их распространение в атмосфере. Известные методики расчета интенсивности испарения с поверхности аварийных проливов весьма разноречивы и предназначены только для установившихся процессов испарения опасных веществ. При расчете последствий проливов многокомпонентных смесей и растворов необходимо также учитывать изменение состава пролива при испарении. Для многокомпонентных жидкостей потеря массы при испарении многокомпонентной жидкости не находится в прямо пропорциональной зависимости от времени из-за различной летучести компонентов. В зарубежной практике расчет испарения с поверхности пролива базируется на использовании полуэмпирического соотношения [1]. (1) где τ – время; k – коэффициент массоотдачи, м/с; m_i – масса испаряющегося компонента, отнесенная к единице поверхности жидкости, кг/м²; M_i – молекулярная масса i -го компонента, кг/моль; $P_{g,s}$ – давление насыщенных паров при начальной температуре; T_l – температура жидкой фазы, К; X_l – массовая доля испаряющегося компонента в жидкой фазе, кг/кг; K_{stlf} – коэффициент, учитывающий стефановский поток; R_0 – газовая постоянная; Коэффициент массоотдачи k принимаем: $k = 0,0048 \cdot \dots$, U_{10} – скорость ветра на высоте 10м, м/с; D – диаметр пролива, м; В отечественных методиках [2, 3] для расчета интенсивности испарения используется выражение: (2) В работах [5, 6] массовый расход от поверхности пролива определялся с помощью стандартных функций с учетом поправки на стефановский поток. (3) (4) (5) (6) (8) (9) E – константа в логарифмическом законе стенки для скорости, равная 9,1; $J_{g,s}$ – массовый поток компонента с поверхности аварийного пролива, кг/(м²×с); k_p – турбулентная кинетическая энергия в пристеночном узле, м²/с²; P_Y – функция, учитывающая сопротивление массопереносу ламинарного подслоя; q – тепловой поток, Вт/м²; Sc и S_{ct} – молекулярное и турбулентное числа Шмидта соответственно; Y – массовая доля компонента в газовой фазе, кг/кг; y_{C+} – безразмерная толщина диффузионного подслоя; y_P – расстояние по нормали от поверхности испарения (стенки) до соседнего узла расчетной сетки, м. Интенсивность поступления паров $J_{g,s}$, определяемая из уравнений (3) - (9), использовалась в качестве граничного условия в области источника в задаче распространения примеси в атмосфере, включающей численное решение полной системы трехмерных нестационарных уравнений Рейнольдса, переноса массы и энергии, замыкаемых Realizable k - ϵ моделью турбулентности Для проверки корректности определения интенсивности испарения с поверхности пролива по представленным выше моделям, получены экспериментальные по испарению аммиачной воды на открытой площадке. В металлический поддон размерами 0.6 м × 0.4 м × 0.035 м, установленный на весах, наливался водный раствор аммиака (25% масс), после чего начинался отсчет времени и регистрация значений массы

и температуры раствора. Эксперименты проводились при температуре воздуха 291 K и средней скорости ветра 2 м/с на высоте 2 м. Количество аммиачной воды, испарившейся за 30 минут, оставалось неизменным от одного эксперимента к другому. Рис. 1 - Динамика снижения массы водного раствора аммиака в процессе проведения натурного эксперимента и его моделирования. Рис. 2 - Динамика охлаждения водного раствора аммиака в процессе проведения натурного эксперимента и его моделирования. На рисунках (1-2) представлены опытные данные по изменению массы и температуры жидкости в сравнении с расчетными результатами, полученными на основе различных подходов к определению диффузионного потока с поверхности пролива. Дифференциальные уравнения (1) и (2) решались методом Рунге-Кутты в программном комплексе MathCad, причем парциальное давление компонентов задавалось в виде функции, зависящей от концентрации и температуры раствора. При моделировании натурного эксперимента с использованием разработанной методики расчет интенсивности испарения проводился методом контрольного объема с помощью пакета гидродинамического анализа. Изменение температуры жидкости определялось из уравнения теплового баланса: , (10) где m_{aq} – масса воды в растворе, отнесенная к единице поверхности пролива, кг/м². При расчете по разработанной модели, тепловой поток из атмосферы q_a вычислялся с помощью пристеночных функций: ; (11) ; (12) (13) где Pr и Pr_t — молекулярное и турбулентное числа Прандтля соответственно; (16) Pr_t — функция, учитывающая сопротивление теплопереносу ламинарного подслоя; δ_{T+} — безразмерная толщина теплового подслоя. При расчете интенсивности испарения с помощью уравнений (1) и (2), коэффициент теплоотдачи от атмосферы h определялся из известного критериального уравнения (7): , (14) где Nu – число Нуссельта; Re – число Рейнольдса; λ – коэффициент молекулярной теплопроводности, Вт/(м×К). Расчетные значения количества испарившегося вещества, полученные с помощью пристеночных функций, лучше согласуются с экспериментальными данными по сравнению с соотношениями (1) и (2). Различие экспериментальных значений температуры и результатов численного моделирования (рисунок 2) может объясняться переменной облачностью в ходе эксперимента, тогда как при численном моделировании тепловой поток от солнца задавался постоянным (303,6 Вт/м²) [1].