TÍNH TOÁN BẰNG PHƯỜNG PHÁP SỐ LAN TRUYỀN KHÓI BỤI TRÊN ĐỊA HÌNH PHỨC TẠP

Lê Song Giang, Nguyễn Thị Phương Trường Đại học Bách khoa, ĐHQG-HCM

1. GIỚI THIỆU

Hiện nay trên thế giới cũng như ở Việt nam, nguy cơ xảy ra thảm họa môi trường không khí là rất lớn. Do vậy vấn đề kiểm soát nó cũng rất được quan tâm nghiên cứu và xây dựng các công cụ trợ giúp tính toán quá trình phát tán ô nhiễm là một nội dung quan trọng. Bài báo nhằm giới thiệu một mô hình toán số 3 chiều tính toán sự lan truyền khói bụi trong không khí. Trong mô hình chuyển động của không khí được giải từ các phương trình khí – nhiệt động lực học và là cơ sở cho phương trình vận tải khói bụi lơ lửng trong không khí. Các phương trình được giải theo phương pháp thể tích hữu hạn và sơ đồ ADI của Douglas – Gunn được sử dụng cho các phương trình diễn tiến theo thời gian. Để gia tăng độ chính xác của lời giải vùng gần mặt đất, các phương trình được đưa về toạ độ "sigma" và điều kiện biên mặt đất của phương trình vận tải khói bụi được sử dụng một cách thích hợp.

Mô hình được kiểm chứng với lời giải giải tích. Bài báo cũng trình bày một số mô phỏng ban đầu sự lan truyền khói bụi ở khu vực thành phố Vũng Tàu. Kết quả cho thấy mô hình có độ chính xác khá tốt và có thể đáp ứng cho các địa hình phức tạp.

2. MÔ HÌNH 3 CHIỀU LAN TRUYỀN KHÓI BỤI

2.1 Phương trình cơ bản

Chuyển động của không khí có đặc trưng của chuyển động lớp biên, trong đó trên phương vuông góc với mặt đất áp suất phân bố theo quy luật thủy tĩnh. Trong hệ tọa độ Descartes vuông góc với trục z hướng lên, chuyển động này cùng với quá trình lan truyền khói bụi được mô tả bởi các phương trình sau:

$$\frac{\partial V}{\partial t} + \frac{\mathbf{r}}{V} \frac{\mathbf{r}}{z} \frac{\mathbf{r}}{V} + W \frac{\partial V}{\partial z} - f \cdot \frac{\mathbf{r}}{k} \times V = -\frac{1}{r} \nabla_z p + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_M \frac{\partial V}{\partial z} \right) + \frac{\mathbf{r}}{F_V}$$
(1)

$$\frac{1}{r}\frac{\partial p}{\partial z} = -g \tag{2}$$

$$\nabla_z V + \frac{\partial W}{\partial z} = 0 \tag{3}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\mathbf{r}}{V\nabla_z}C + \left(W - W_s\right)\frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}\left(K_H \frac{\partial C}{\partial z}\right) + F_C \tag{4}$$

Trong đó:

 $\vec{V} = U.\vec{i} + V.\vec{j} - \text{vector thanh phần vận tốc gió trên phương ngang;}$ W - thành phần vận tốc gió trên phương thẳng đứng; C - nồng độ khói bụi lơ lửng; $\nabla_z = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} - \text{toán tử vi phân trên mặt phẳng z=const;}$ p - áp suất;

r - khối lượng riêng của không khí (được coi là không đổi do các tính toán được thực hiện cho vùng gần mặt đất);

$$f = 2\Omega \sin j$$
 - hệ sô Coriolis (Ω - tốc độ quay trái đất; φ - vĩ độ)

 $K_{\text{M}},\,K_{\text{H}}$ - độ nhớt rối và hệ số khuếch tán rối theo phương thẳng đứng;

 \mathbf{F}_V , \mathbf{F}_C - số hạng mô tả sự trao đổi động lượng và sự lan truyền bụi khói theo phương ngang do chuyển động dưới mắt lưới.

Miền tính được lấy là hình chữ nhật có cạnh song song với hướng gió và từ mặt đất, $z=z_b$, lên tới độ cao z=h. Độ cao này được lấy đủ lớn để địa hình không còn ảnh hưởng tới chuyển động. Về mặt tính toán, mặt trên của miền tính là tương tự mặt thoáng của dòng chảy hở của chất lỏng và trên đó cũng có một áp suất "p_a" nào đó. Để đơn giản trong cách viết ta cũng dùng chữ "mặt thoáng" cho nó. Với miền tính như trên, điều kiện biên cho (1) - (4) được xác định như sau.

Tại mặt thoáng:

$$W(h) = \frac{\partial h}{\partial t} + U_s \frac{\partial h}{\partial x} + V_s \frac{\partial h}{\partial y}$$
(5)

$$K_{M} \left[\frac{\partial U}{\partial z}, \frac{\partial V}{\partial z} \right]_{h} = 0$$
(6)

$$\left[\left(W - W_s \right) C - K_H \frac{\partial C}{\partial z} \right]_{\eta} = 0$$
⁽⁷⁾

Với U_s, V_s là vận tốc tại cao độ h=h(x,y,t). Trên mặt đất, các điều kiện biên là:

$$W(z_b) = 0 \tag{8}$$

$$K_{M}\left[\frac{\partial U}{\partial z}, \frac{\partial V}{\partial z}\right]_{z_{b}} = C_{D}\left(U_{b}^{2} + V_{b}^{2}\right)^{1/2}\left(U_{b}, V_{b}\right)$$

$$\tag{9}$$

$$\left[\left(W - W_s \right) C - K_H \frac{\partial C}{\partial z} \right]_{z_b + a} = E_b - D_b$$
⁽¹⁰⁾

Trong đó U_b, V_b - vận tốc tại mắt lưới sát đáy; C_D - hệ số ma sát; D_b , E_b - lưu lượng bụi lắng xuống mặt đất và bị cuốn lên ngang qua bề mặt cách mặt đất một khoảng bằng a. Ở đây điều kiện biên mặt đất đối với bụi khói được xử lý theo cách thức tương tự như ở các mô hình vận tải bùn cát lơ lửng [1]. Trong trường hợp bụi có sẵn trên mặt đất, thông lượng bụi sẽ được tính theo Van Rijn [2]:

$$E_{b} - D_{b} = W_{s} \left(C_{b^{*}} - C_{b} \right)$$
(11a)

Với C_b và C_b^* là nồng độ bụi tính toán và nồng độ bụi bão hoà tại bề mặt này. Tuy nhiên trong tính toán thông thường khói bụi không có tức thì trên mặt đất mà từ trên trời rơi xuống. Do đó trong pha thời gian đầu (khi khói bụi còn chưa tích trên mặt đất) và pha thời gian cuối (khi khói bụi tích trên mặt đất đã bị cuốn bay hết), thay cho (11a) sẽ là:

$$E_b - D_b = -W_s C_b \tag{11b}$$

Trên biên xung quanh vận tốc và nồng độ khói bụi được cho tại nơi không khí chuyển động vào và áp suất cùng điều kiện không có gradient nồng độ khói bụi được cho tại nơi không khí chuyển động ra. Trên 2 biên song song với hướng gió, vận tốc theo phương vuông góc với biên và gradient của vận tốc trượt trên phương này cùng bằng không.

2.2 Mô hình rối

Số hạng trao đổi động lượng cũng như lan truyền chất theo phương ngang do chuyển động dưới mắt lưới ở các phương trình (1) và (4) được tính theo mô hình độ nhớt rối:

$$F_{U} = \frac{\partial}{\partial x} \left(2A_{M} \frac{\partial U}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left[A_{M} \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) \right]$$
(12a)

$$F_{V} = \frac{\partial}{\partial y} \left(2A_{M} \frac{\partial V}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left[A_{M} \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right) \right]$$
(12b)

Và

$$F_{C} = \frac{\partial}{\partial x} \left[A_{H} \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[A_{H} \frac{\partial C}{\partial y} \right]$$
(12c)

Trong đó A_M là độ nhớt rối ngang và được tính theo Smagorinsky [3]:

$$A_{M} = C\Delta x \Delta y \left[\left(\frac{\partial U}{\partial x} \right)^{2} + \left(\frac{\partial V}{\partial y} \right)^{2} + \frac{1}{2} \left(\frac{\partial U}{\partial y} + \frac{\partial V}{\partial x} \right)^{2} \right]$$
(13)

Hệ số khuếch tán rối A_H được lấy bằng độ nhớt rối A_M . Hệ số C ở trong khoảng 0.01 - 0.5 và trong tính toán này được lấy bằng 0,5. Độ nhớt rối và hệ số khuếch tán rối theo phương đứng, K_M và K_H , được tính theo mô hình rối bậc 2-1/2 của Mellor - Yamada [4]:

$$K_M = qlS_M; \quad K_H = qlS_H \tag{14}$$

Với S_M và S_H – các hàm ổn định. Thực chất, theo Mellor-Yamada, K_H tính theo (14) là hệ số khuếch tán rối của nhiệt độ. Trong nghiên cứu này chúng tôi chấp nhận hệ số khuếch tán rối của khói bụi cũng được lấy theo giá trị trên. Các biến q^2 (2 lần động năng rối) và l (chiều dài đặc trưng rối) được giải từ các phương trình vận tải:

$$\frac{\partial q^2}{\partial t} + \frac{\mathbf{r}}{V\nabla_z} q^2 + W \frac{\partial q^2}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_q \frac{\partial q^2}{\partial z} \right) + 2G_q - 2\frac{q^3}{B_1 l} + F_q$$
(15)

$$\frac{\partial q^2 l}{\partial t} + V \nabla_z \left(q^2 l \right) + W \frac{\partial q^2 l}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K_q \frac{\partial q^2 l}{\partial z} \right) + E_1 l G_q - \frac{q^3}{B_1} \hat{W} + F_l$$
(16)

Trong đó $K_q = 0.2ql - hệ số khuếch tán rối của động năng rối; <math>G_q - số hạng nguồn rối; - \dot{W}$ hàm giảm trên tường; E_I và B_I - các hằng số mô hình; F_q và F_I - thành phần khuếch tán của động năng rối và của chiếu dài đặc trưng, được tính tương tự (12c). Trên mặt đất ($z=z_b$) và tại bề mặt bên trên ($z=\eta$), điều kiện biên cho (15) và (16) là:

$$(q^2, q^2 l)_{z_b} = (B_1^{2/3} u_{tB}^2, 0)$$
(17a)

$$(q^2, q^2 l)_h = (0, 0)$$
(17b)

Với u_{tB} là vận tốc ma sát tại mặt đất. Xem chi tiết mô hình rối trong tài liệu trích dẫn.



Hình 2 Các biến trên lưới tính.

2.3 Phương pháp giải

Các phương trình (1) - (4) và (15) – (16) cùng các điều kiện biên được giải theo phương pháp thể tích hữu hạn trong tọa độ σ theo sơ đồ giải đã được chúng tôi phát triển trong thời gian gần đây [5 - 7]. Trong hệ tọa độ σ với phép biến đổi:

$$S = \frac{z - h}{h + h} \tag{18}$$

miền tính với mặt thoáng và mặt đất cong trở thành miền chữ nhật có chiều cao bằng 1 (hình H.1). Phép biến đổi này cho phép tính toán chính xác hơn chuyển động cũng như quá trình vận tải chất ở khu vực sát đáy và khu vực gần mặt trên. Trong tọa độ này phương trình (3) được viết:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial q_U}{\partial x} + \frac{\partial q_V}{\partial y} + \frac{\partial wH}{\partial s} = 0$$
(19)

còn các phương trình (1), (4) và (15) – (16) cùng được viết dưới dạng chung:

$$\frac{\partial q_i}{\partial t} + \frac{\partial U q_i}{\partial x} + \frac{\partial V q_i}{\partial y} + \frac{\partial (w - w_s) q_i}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial s} \left[\frac{K_i}{H^2} \frac{\partial q_i}{\partial s} \right] + HF_i + S_i$$
(20)

Trong đó:

$$[q]^T = \begin{bmatrix} HU & HV & HC & Hq^2 & Hq^2l \end{bmatrix}^T$$

$$[S] = \begin{bmatrix} -gH\frac{\partial h}{\partial x} + fHV - \frac{gH^2}{r}\frac{\partial}{\partial x}\int_{s}^{0}rds + \frac{gH}{r}\frac{\partial}{\partial x}\int_{s}^{0}s\frac{\partial r}{\partial s}ds \\ -gH\frac{\partial h}{\partial y} - fHU - \frac{gH^2}{r}\frac{\partial}{\partial y}\int_{s}^{0}rds + \frac{gH}{r}\frac{\partial}{\partial y}\int_{s}^{0}s\frac{\partial r}{\partial s}ds \\ 0 \\ 2H\left(G_q - \frac{q^3}{B_1l}\right) \\ H\left(E_1lG_q - \frac{q^3}{B_1}\hat{W}\right) \end{bmatrix}$$

$$H = H + h$$

$$W = \frac{W}{H} - U\left(s\frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial x}\right) - V\left(s\frac{\partial H}{\partial y} + \frac{\partial h}{\partial y}\right) - \left(s\frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial h}{\partial t}\right)$$

$$W_s = W_s / H$$

Các điều kiện biên cũng được biến đổi sang toạ độ mới một cách tương ứng. Ngoài ra nếu tích phân phương trình (19) từ mặt đất lên tới mặt thoáng, sẽ được phương trình cho mặt thoáng:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \int_{-1}^{0} q_U d\mathbf{s} + \frac{\partial}{\partial y} \int_{-1}^{0} q_V d\mathbf{s} = 0$$
(21)

Các phương trình (19) – (21) được giải trên lưới so le vuông góc (xem hình H.2), trong đó bước lưới theo phương đứng là không đều.

Trước tiên mặt thoáng tại thời điểm n+1/2 được xác định theo (21):

$$\boldsymbol{h}_{i,j}^{n+1/2} = \boldsymbol{h}_{i,j}^{n-1/2} - \Delta t \sum_{k} \Delta \boldsymbol{s}_{i+1/2} \left[\frac{q_{U_{i,j,k}}^{n} - q_{U_{i-1,j,k}}^{n}}{\Delta x} + \frac{q_{V_{i,j,k}}^{n} - q_{V_{i,j-1,k}}^{n}}{\Delta y} \right]$$
(22)

Sau khi xác định mặt thoáng, các thành phần vận tốc và nồng độ các chất tải sẽ được tính toán từ các phương trình (20) theo sơ đồ ADI của Douglas - Gunn [8]. Số hạng đối lưu của các phương trình động lượng được nội suy theo sơ đồ trung tâm còn của phương trình vận tải các chất - theo sơ đồ Upwind. Do đặc tính truyền sóng khác nhau nên bước thời gian giải các phương trình vận tải được lấy lớn hơn nhiều lần so với các phương trình động lượng.

3. KẾT QUẢ TÍNH TOÁN VÀ PHÂN TÍCH

3.1 Kiểm tra mô hình với lời giải giải tích

Trong trường gió với các thành phần vận tốc V=W=0 và U=const và bỏ qua khuếch tán theo phương trục x, lời giải chính xác của (4) cho nguồn điểm liên tục với công suất M đặt tại tọa độ (x=0, y=0, z=H) là:

$$C(x, y, z) = \frac{M}{2pUs_{y}s_{z}} EXP\left(-\frac{y^{2}}{2s_{y}^{2}}\right) EXP\left[-\frac{(z-H+W_{s}x/U)^{2}}{2s_{z}^{2}}\right]$$
(23)

Lời giải trên có tên là mô hình Gauss (xem [9], trg. 100) trong đó σ_y và σ_z là các hệ số tính từ hệ số khuếch tán và chỉ biến thiên theo trục x:

$$s_{y}^{2} = \frac{2A_{H}}{U}x; \quad s_{z}^{2} = \frac{2K_{H}}{U}x$$
 (24)

Hình H.3 là phân bố nồng độ khói bụi trên mặt phẳng đứng đi qua nguồn theo chiều gió trong trường hợp điểm nguồn ở tọa độ (x=100m, y=300m, z=302.5m) có công suất M=314kg/s, U=1m/s, A_H =2,0m²/s và K_H =0.5m²/s. Các đường đồng mức ở đơn vị g/lít. Phân bố nồng độ khói bụi trên mặt phẳng đứng vuông góc với hướng gió ở tọa độ x=800m cho trên hình H.4. Nhìn chung lời giải số phù hợp với lời giải (23). Điểm khác biệt lớn nhất là luồng khói bụi của lời giải số hạ thấp hơn so với lời giải (23) và đó là do lời giải (23) đã không tính tới khuếch tán trên phương x.



Hình 3 Phân bố nồng độ khói bụi trên mặt phẳng đứng đi qua nguồn



Hình 4 Phân bố nồng độ khói bụi trên mặt phẳng đứng vuông góc với hướng gió

3.2 Mô phỏng lan truyền khói bụi tại Vũng Tàu

Mô hình đã được áp dụng thử cho khu vực bán đảo Vũng Tàu. Miền tính (hình H.5) có kích thớc 10000m×600m x600m được chia lưới vuông 100m×100m theo phương ngang và 41 lớp theo phương đứng với chiều cao các bước lưới tăng dần theo quy luật $\Delta s_{i+1} = 1.02\Delta s_i$. Riêng ô lưới sát mặt đất cao bằng 1/2 ô lưới gần đó. Bước thời gian tính được chọn $\Delta t=0.9$ s cho phép giải mặt thoáng và phương trình động lượng để đảm bảo độ ổn định của chương trình, còn bước thời gian tính của các phương trình tải chất lớn hơn 10 lần. Việc chọn bước thời gian khác nhau giúp tiết kiệm thời gian tính toán.



Tính toán được thực hiện ở điều kiện gió Đông có vận tốc ở độ cao 10m và 600m là $V_{10}=1,4$ m/s và $V_{600}=2,7$ m/s. Giả định rằng trong 6 phút có 180 tấn bụi bị tung lên trời trong một vùng có bán kính 100m và cao 50m ở độ cao 390m so với mặt biển và cách đỉnh núi lớn khoảng 3,4km về phía Đông. Cũng giả thiết rằng hạt bụi có đường kính 0,025mm và có khối lượng riêng 2.10³kg/m³. Hạt bụi này có vận tốc rơi là W_s=2,2cm/s.

Hình H.6 mô tả trường vận tốc và phân bố nồng độ bụi trên mặt phẳng thẳng đứng qua tâm đám bụi dọc theo chiều gió. Dấu ngôi sao chỉ nơi xuất phát của đám mây bụi. Đường đồng mức nồng độ bụi nhỏ nhất là 0,4g/m³ và các đường cách nhau 0,4g/m³. Kết quả tính cho thấy đám mây bụi hình thành quanh điểm bùng phát, vừa chuyển động về phía núi Lớn vừa phát tán rộng ra và vượt qua núi ra biển. Thành phố Vũng Tàu không bị ảnh hưởng bởi đám mây bụi này.

Trường hợp hạt bụi có đường kính 0,065mm (W_s =15,0cm/s), đám mây bụi sau khi hình thành đã xà thấp xuống đỉnh núi Lớn. Tuy nhiên nó cũng đã kịp vượt qua núi và chỉ rơi xuống ở núi bên kia. Diễn tiến của đám mây bụi được trình bày trên hình H.7. Hình H.8 là hình ảnh của đám mây bụi nhìn từ trên trời xuống ở 2 thời điểm khác nhau (3 và 27 phút sau khi bắt đầu có bụi). Đường đồng mức nồng độ bụi nhỏ nhất là 40g/m² và các đường cách nhau 40g/m².



Hình 6 Diễn tiến đám mây bụi trường hợp W_s=2,2cm/s





Hình 8 Hình ảnh đám mây bụi nhìn từ trên trời xuống

4. KÉT LUÂN

Bài báo đã trình bày một mô hình tính toán lan truyền khói bụi vùng gần mặt đất. Mô hình giải các phương trình chuyển động của không khí cũng như vận tải chất bằng phương pháp thể tích hữu hạn. Kiểm chứng với lời giải giải tích cho thấy mô hình có độ chính xác khá tốt. Mặc dù không có số liệu để so sánh nhưng kết quả mô phỏng lan truyền khói bụi tại bán đảo Vũng Tàu cũng cho thấy mô hình cho phép mô phỏng được quá trình lan truyền khói bụi trong điều kiện địa hình phức tạp.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1]. Gessler D., Hall B., Spasojevic M., Holly F., Pourtaheri H. and Raphelt N. *Application of 3D Mobile Bed, Hydrodynamic Model*, J. Hydralic Eng., ASCE, Vol. 125 (7), pp. 737-749. (1999).
- [2]. Van Rijn. Mathematical Modelling of Morphological Processes in the Case of Suspended Sediment Transport, Delft Hydraulics Communication No. 382. (1987)
- [3]. Smagorinsky, J. General Circulation Experiments with the Primitive Equations. I: The Basic Experiment. Monthly Weather Rev., 91, pp. 99 164. (1963)
- [4]. Mellor, G. L. and Yamada, T. Development of a Turbulence Closure Model for Geophysical Fluid Problems. Rev. of Geophys. And Space Phys. 20(4), pp. 851 875. (1982)
- [5]. Lê Song Giang. Mô hình số cho dòng chảy 3 chiều nước nông. Tuyển tập Công trình Hội nghị Khoa học Cơ học thủy khí và Công nghệ mới, Lăng cô 24 - 25/7/2001, tr. 124 -129. (2002)
- [6]. Lê Song Giang, Nguyễn Văn Nghiệp và Nguyễn Cửu Tuệ. Mô hình số cho dòng chảy 3 chiều trong đoạn sông cong, Tuyển tập Công trình khoa học Hội nghị Cơ học toàn quốc lần thứ VII, Hà nội, 12/2002. Tập IV, trg. 127-133. (2003)
- [7]. Lê Song Giang, Nguyễn Thị Phương. Nghiên cứu bằng phương pháp số trường gió Vũng Tàu. Hội nghị KH Cơ học Thủy khí toàn quốc năm 2004, Hà Tiên, 21-23/7/2004. (2004)
- [8]. Douglas, J. J. and Gunn, J. E. A General Formulation of Alternating Direction Methods - Part I. Parabolic and Hyperbolic Problems, Num. Math., Vol. 6, pp. 428-453. (1964)
- [9]. Trần Ngọc Chấn. Ô nhiễm không khí và xử lý khí thải, Tập 1. NXB Khoa học và Kỹ thuật, Hà nội, 216 trg. (2000)