

ПРОГНОЗУВАННЯ РІВНЯ ЗАБРУДНЕННЯ АТМОСФЕРИ НА БАЗІ ЧИСЕЛЬНОЇ МОДЕЛІ

к.т.н., Берлов О. В.¹, к.т.н., Калашніков І. В.², к.т.н. Кіріченко П. С.³,
к.т.н. Козачина В. А.², к.т.н. Русакова Т. І.⁴

¹Україна, м. Дніпро, ДВНЗ «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури»

²Україна, м. Дніпро, Дніпровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна

³Україна, м. Кривий Ріг, Криворізький національний університет

⁴Україна, м. Дніпро, Дніпровський національний університет імені О. Гончара

Abstract. A mathematical model has been developed for the prediction of air pollution during the emission of chemically hazardous substances into the atmosphere. The model allows to take into account the profile of wind speed, atmospheric diffusion, toxic chemical emission. For the numerical integration of the pollutant transfer equation, the splitting of the mass transfer equation into a sequence of equations of a simpler structure is used. For the numerical integration of these equations, an alternating triangular implicit difference scheme is used. The results of the calculation of the dynamics of air pollution in the event of an accidental emission of chlorine near the residential area are presented. The model can be used in the Ministry of Emergency Situations for rapid analysis and prediction of the risk of toxic damage to people in emergency situations.

Keywords: numerical model, toxic chemical emission, pollution of the atmosphere

Вступ. Хлор використовують для хлорування питної води, відбілювання тканин і паперу, отримання хлорорганічних і хлорнеорганічних речовин, дезінфекції.

Хлор перевозять в контейнерах, залізничних цистернах, балонах, які є тимчасовим його сховищем. Зазвичай хлор зберігають у циліндричних (об'ємом 10-250 м³) і кульових (об'ємом 600-2000 м³) резервуарах під тиском власних парів 18 кгс/см². Максимальні обсяги зберігання складають 150 тонн. У разі розгерметизації відбувається різкий викид хлору з концентрацією, що перевищує смертельну в кілька разів. Нерідко транспортні коридори через які відбувається перевезення хлору в промислових обсягах 60 тонн і більше проходять поблизу і навіть через селітебні зони, тому в разі аварії можливий ризик токсичного ураження людей. У зв'язку з цим виникає важлива задача по оцінці ризику токсичного ураження населення в прилеглих до транспортного коридору районах. Така оцінка для різних ділянок транспортного коридору може бути виконана методом математичного моделювання, оскільки постановка і проведення натурних експериментів – виключається.

Аналіз літературних даних. Задачі, пов'язані з прогнозом забруднення атмосферного повітря при емісії хімічно небезпечних речовин привертають в даний час великий інтерес [4-6]. Для рішення задач такого класу в Україні використовується нормативна методика прогнозу наслідків аварій на хімічно небезпечних об'єктах і транспорті. Дана методика є основним методом прогнозу наслідків аварій при витоку хімічно небезпечних речовин, яку використовує міністерство надзвичайних ситуацій. Ця методика дає інтегральну оцінку площі хімічного зараження при викиді певної маси хімічного агента. Але недоліком методики є те, що вона не дозволяє розрахувати динаміку формування зон хімічного зараження і не дає можливості розрахувати концентрацію хімічного агента на різній відстані від джерела емісії. Для вирішення задач даного класу також використовується модель Сеттона, модель Гауса, модель Берлянда, аналітичні рішення моделі масопереносу [1, 2]. На базі цих моделей розроблено спеціалізовані пакети програм типу: «Токси», «Аміак», «SLAB», «ALONA» та ін.

Актуальним питанням є розробка ефективних математичних моделей, які б дозволяли оперативно розраховувати процес хімічного зараження територій, які прилягають до транспортного коридору, у якому перевозять небезпечні вантажі. За допомогою цих моделей можна прогнозувати ризик токсичного ураження людей при виникненні надзвичайних ситуацій на залізниці.

Мета і завдання дослідження. Метою роботи є розробка чисельної моделі для оперативного прогнозування динаміки забруднення атмосфери при аварійній емісії хлору на залізниці.

Математична модель поширення домішки в атмосфері. Для моделювання поширення хлору в атмосфері використовується рівняння Г.І. Марчука:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial (w-w_g)C}{\partial z} + \sigma C = \\ = \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} C) + \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(x-x_i) \delta(y-y_i) \delta(z-z_i), \end{aligned} \quad (1)$$

де C – концентрація хлору; u, v, w – компоненти швидкості вітрового потоку; $\delta(x-x_i)\delta(y-y_i)\delta(z-z_i)$ – дельта-функція Дірака; $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ – коефіцієнти атмосферної турбулентної дифузії; x_i, y_i, z_i – координати джерела емісії хлору; σ – коефіцієнт, що враховує хімічний розпад домішки, вимивання опадами; Q – інтенсивність викиду хлору; w_g – швидкість гравітаційного осідання домішки; t – час.

Постановка крайових умов для даного рівняння розглянута в роботі [3].

Для практики дуже важливо враховувати профіль швидкості вітру та змінне значення вертикального коефіцієнту дифузії. В розробленій математичній моделі використовувались такі залежності:

$$u = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^p, \quad \mu_z = k_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m, \quad \mu_x = \mu_y = k_0 u, \quad (2)$$

де $p = 0,15$; $m = 1$; $k_1 = 0,2$; $k_0 = 0,1 \div 1$.

При виконанні оціночних розрахунків можна прийняти що $\sigma = 0$.

Метод розв'язання. Для чисельного інтегрування рівняння (1) будемо використовувати кінцево-різницеві методи. Попередньо ми здійснили розщеплення рівняння (1) на послідовність рішення наступних рівнянь

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial vC}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right), \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (w-w_g)C}{\partial z} &= \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right), \end{aligned} \quad (3)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \sigma C = \sum Q_i(t) \delta(x-x_i(t)) \delta(y-y_i(t)).$$

Перші три рівняння з системи (3) описують рух небезпечної речовини тільки в одному напрямі. Таке розщеплення є базовим для побудови локально-одновимірної різницевої схеми. Для чисельного інтегрування перших трьох рівнянь використовується неявна поперемінно-трикутна різницева схема.

Розглянемо побудову цієї різницевої схеми. Поперше виконаємо наступне представлення:

$$\begin{aligned} \frac{\partial uC}{\partial x} &= \frac{\partial u^+C}{\partial x} + \frac{\partial u^-C}{\partial x}, \\ \frac{\partial vC}{\partial y} &= \frac{\partial v^+C}{\partial y} + \frac{\partial v^-C}{\partial y}, \\ \frac{\partial wC}{\partial z} &= \frac{\partial w^+C}{\partial z} + \frac{\partial w^-C}{\partial z}, \end{aligned}$$

$$\text{де } u^+ = \frac{u+|u|}{2}; u^- = \frac{u-|u|}{2}; v^+ = \frac{v+|v|}{2}; v^- = \frac{v-|v|}{2}; w^+ = \frac{w+|w|}{2}; w^- = \frac{w-|w|}{2}.$$

Далі виконаємо апроксимацію похідних за формулами [3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) &\approx \mu_x \frac{C_{i+1,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} - \mu_x \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1}, \\ \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) &\approx \mu_y \frac{C_{i,j+1,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta y^2} - \mu_y \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta y^2} = M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1}, \\ \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) &\approx \mu_z \frac{C_{i,j,k+1}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z^2} - \mu_z \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z^2} = M_{zz}^- C^{n+1} + M_{zz}^+ C^{n+1}. \end{aligned}$$

Для апроксимації конвективних похідних використовуємо вирази [3]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u^+ C}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1,j,k}^+ C_{i,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^+ C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^+ C^{n+1}, \\ \frac{\partial u^- C}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1,j,k}^- C_{i+1,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^- C^{n+1}, \\ \frac{\partial v^+ C}{\partial y} &\approx \frac{v_{i,j+1,k}^+ C_{i,j,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^+ C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^+ C^{n+1}, \\ \frac{\partial v^- C}{\partial y} &\approx \frac{v_{i,j+1,k}^- C_{i,j+1,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^- C^{n+1}, \\ \frac{\partial w^+ C}{\partial z} &\approx \frac{w_{i,j,k+1}^+ C_{i,j,k}^{n+1} - w_{i,j,k}^+ C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z} = L_z^+ C^{n+1}, \\ \frac{\partial w^- C}{\partial z} &\approx \frac{w_{i,j,k+1}^- C_{i,j,k+1}^{n+1} - w_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z} = L_z^- C^{n+1}. \end{aligned}$$

Різницеву схему за допомогою якої визначається концентрація хімічно небезпечної речовини розглянемо на прикладі тільки першого рівняння з системи (3), тому що друге та третє рівняння є аналогічними. Різницєва схема для першого рівняння переносу з системи (3) має вигляд: на першому кроці розщеплення:

$$\frac{C_{i,j,k}^k - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} + L_x^+ C^k = M_{xx}^+ C^k + M_{xx}^- C^n, \quad (4)$$

на другому кроці розщеплення:

$$\frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^k}{\Delta t} + L_x^- C^{n+1} = M_{xx}^+ C^n + M_{xx}^- C^{n+1}. \quad (5)$$

І так саме для другого та третього рівняння з системи (3).

Невідоме значення концентрації C на кожному кроці розщеплення (4), (5) знаходиться за явною формулою «розрахунку, що біжить». Останнє рівняння з системи (3) розв'язується за допомогою методу Ейлера.

Була створена комп'ютерна програма на базі розглянутих різницєвих рівнянь. Для кодування різницєвих рівнянь використовувався Фортран.

Результати дослідження. Побудована математична модель була використана для моделювання процесу забруднення атмосферного повітря у випадку імовірної аварії при транспортуванні хлору залізничним транспортом. Розглядалась аварія біля платформи 193 км (Україна, місто Дніпро). Грунтуючись на літературних даних, будемо вважати, що

інтенсивність емісії хлору була 33 кг/с. Швидкість вітрового потоку на рівні 10 м приймалася рівною 5 м/с, напрямок вітру – північно-східний, $\sigma = 0$, $w_g = 0,001$ м/с.

Динаміка формування зони забруднення атмосферного повітря показана на рис. 1-3. Зона забруднення атмосферного повітря представлена для рівня $z = 4$ м.



Рис. 1. Зона забруднення атмосферного повітря ($t = 43$ с)



Рис. 2. Зона забруднення атмосферного повітря ($t = 75$ с)



Рис. 3. Зона забруднення атмосферного повітря ($t = 115$ с)

Як ми бачимо з рис. 1-3 дуже швидко шлейф хімічно небезпечної речовини накриває селітебну зону, яка розташована поблизу транспортного коридору.

На рис. 4 представлена зміна концентрації хлору на різній відстані від джерела емісії (момент часу $t = 20$ хвилин, рівень $z = 3$ м).

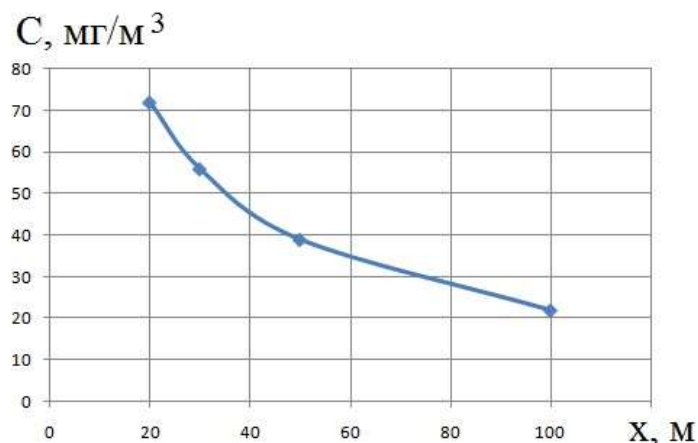


Рис. 4. Залежність зміни концентрації хлору від відстані

Якщо прийняти до уваги, що ГДК для хлору дорівнює 1 mg/m^3 , то ми бачимо з рис. 4, що концентрація хлору значно перевищує це порогове значення. Це означає, що має місце значний ризик токсичного ураження людей.

На закінчення відзначимо, що розрахунок задачі займає 7 секунд комп'ютерного часу.

Висновки.

1. Запропоновано математичну модель для прогнозування динаміки забруднення атмосферного повітря у випадку аварійної емісії хімічного агента.
2. Розроблена комп'ютерна програма для проведення розрахунків по визначенню інтенсивності забруднення повітряного середовища при аварійній емісії хімічно небезпечних речовин.
3. Виконано прогноз ризику токсичного ураження людей біля транспортного коридору по якому транспортується хлор.

ЛІТЕРАТУРА

1. Басманов, А.Е., Говаленков, С.С., & Васильев, М.В. (2011). Зонирование местности в районе непрерывно действующего источника опасного химического вещества. *Проблеми надзвичайних ситуацій*, 13, 20-33. Retrieved from <http://nuczu.edu.ua/ukr/science>
2. Заказнов, В.Ф., & Куршева, Л.А. (1985). Распространение аммиака при разгерметизации аммиакопровода, емкостей. *Исследования и разработки по созданию магистральных аммиакопроводов и складов жидкого аммиака: Труды ГИАП*, 57.
3. Згуровский, М.З., Скопецкий, В.В., Хрущ В.К., & Беляев Н.Н. (1997). *Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде*. Київ: Наук. думка.
4. Amelina, L.V., Biliaiev, M.M., & Mashykhina, P.B. (2017). Reducing ammonia concentrations in atmosphere after its unplanned release. *Наука та прогрес транспорту. Вісн. Дніпропетр. нац. ун-ту залізн. трансп. ім. акад. В. Лазаряна*, 70(4), 16-22. doi: <https://doi.org/10.15802/stp2017/109520>.
5. Amelina, L.V., & Biliaiev, M.M. (2017). Numerical simulation of air pollution in case of unplanned ammonia release. *Наука та прогрес транспорту. Вісн. Дніпропетр. нац. ун-ту залізн. трансп. ім. акад. В. Лазаряна*, 69(3), 7-14. doi: <https://doi.org/10.15802/stp2017/104142>.
6. Biliaiev, M., & Kharitonov, M. (2013). The Numeric Forecast of Air Pollution Caused by a Blasting Accident in the Enterprise Responsible for Rocket Fuel Utilization in Ukraine. *Disposal of Dangerous Chemicals in Urban Areas and Mega Cities. Proceedings of the NATO Advanced Research Workshop*. Springer, 120, 313-327. doi: https://doi.org/10.1007/978-94-007-5034-0_25.