

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

UDC 502.36/.504.3.054:656.2

M. M. BILIAIEV^{1*}, L. YA. MUNTIAN^{2*}

^{1*}Dep. «Hydraulics and Water Supply», Dnipropetrovsk National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan, Lazaryan St., 2, Dnipropetrovsk, Ukraine, 49010, tel. +38 (056) 273 15 09, e-mail gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0002-1531-7882

^{2*}Dep. «Hydraulics and Water Supply», Dnipropetrovsk National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan, Lazaryan St., 2, Dnipropetrovsk, Ukraine, 49010, tel. +38 (056) 273 15 09, e-mail lili.muntyan@gmail.com, ORCID 0000-0002-1659-7740

NUMERICAL SIMULATION OF TOXIC CHEMICAL DISPERSION AFTER ACCIDENT AT RAILWAY

Purpose. This research focuses on the development of an applied numerical model to calculate the dynamics of atmospheric pollution in the emission of dangerous chemical substances in the event of transportation by railway.

Methodology. For the numerical simulation of transport process of the dangerous chemical substance in the atmosphere the equation of convection-diffusion pollutant transport is used. This equation takes into account the effect of wind, atmospheric diffusion, the power of emission source, as well as the movement of the source of emission (depressurized tank) on the process of pollutant dispersion. When carrying out computing experiment one also takes into account the profile of the speed of the wind flow. For the numerical integration of pollutant transport in the atmosphere implicit finite-difference splitting scheme is used. The numerical calculation is divided into four steps of splitting and at each step of splitting the unknown value of the concentration of hazardous substance is determined by the explicit running account scheme. On the basis of the numerical model it was created the code using the algorithmic language FORTRAN. One conducted the computational experiments to assess the level of air pollution near the railway station «Illarionovo» in the event of a possible accident during transportation of ammonia.

Findings. The proposed model allows you to quickly calculate the air pollution after the emission of chemically hazardous substance, taking into account the motion of the emission source. The model makes it possible to determine the size of the land surface pollution zones and the amount of pollutants deposited on a specific area. Using the developed numerical model it was estimated the environmental damage near the railway station «Illarionovo». **Originality.** One can use the numerical model to calculate the size and intensity of the chemical contamination zones after accidents on transport. **Practical value.** The numerical model, developed by authors, can be used to estimate the size and intensity of the chemical contamination zones during emergency on transport. The developed numerical model solves the problem of assessing the impact of emergency emission of ammonia near the railway station «Illarionovo».

Keywords: railway transport accidents; air pollution; chemically dangerous substance; numerical simulation

Introduction

Many accidents at railways result in toxic chemicals emissions [1]. These emissions pose potential risk to human health and environment. To predict the damage after these emissions Government Instructions are used. These Instructions are

based on simple empirical formulae which do not take account many physical factors, such as, wind profile, diffusion, etc. For example, to predict the width of polluted area the following expression is used in these Instructions

$$D = 0,3 \cdot L^n,$$

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

where L is the length of polluted area (the L value is determined using the special Table), n is parameter which depends on the atmosphere condition (stable, neutral, etc.).

To obtain quick information about the atmosphere pollution Gauss model is used [5–7, 13, 16] or empirical model ОНД-86 [14].

In some cases CFD models are used [2–4, 9, 10, 12, 15] but these models are comprehensive for the regular users.

For a quick evaluation of toxic chemical concentrations in atmosphere fast hazard tools are very in need. It is very important for practice to have tools which take into account important details and, on the other hand, are not time consuming.

Purpose

The purpose of this work is the development of numerical model to predict the atmosphere pollution after accidents at railways.

Methodology

Mathematical model of pollutant dispersion. To simulate the toxic chemical dispersion in atmosphere 3-D transport equation is used [2, 8, 15]

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial (w - w_s)C}{\partial z} + kC + \sigma C = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \\ + \sum q_i(t) \delta(x - x_i(t)) \delta(y - y_i(t)) \delta(z - z_i), \quad (1) \end{aligned}$$

where C is air concentration of toxic chemical; u, v, w are the wind components in the x, y and z directions; w_s is gravitational settling velocity; σ is the chemical decay coefficient; k is the precipitation scavenging coefficient; $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ are the eddy diffusivities for the three coordinate directions; $q_i(t)$ is source terms; $\delta(x - x_i(t)) \delta(y - y_i(t)) \delta(z - z_i)$ are Dirac delta function; (x_i, y_i, z_i) are the coordinates of the point source.

This equation is numerically integrated using the following boundary conditions:

– at the entrance boundary:

$$C|_{\text{boundary}} = C_B,$$

where C_B is known concentration.

At the exit boundary (for example, this is the plane $x = L_x$, where L_x is distance from the entrance plane) the boundary condition is used in the following difference form

$$C(i+1, j, k) = C(i, j, k),$$

where $(i+1, j, k)$ is the last computational cell and (i, j, k) is the previous computational cell. At the ground ($z=0$ plane) the boundary condition is

$$\frac{\partial C}{\partial n} = \alpha C,$$

where n is normal to this plane, $\alpha > 0$ is coefficient which takes into account toxic chemical interaction with ground.

The initial condition (at time $t = 0$) can be written as $C = 0$ in the computational region or $C = C_0$, (where C_0 is the known concentration at the site where the instant emission took place and $C = 0$ in the other part of the computational region.

In the developed numerical model the following approximations for wind speed and diffusion coefficient are used:

$$u = u_1 \frac{\lg z/z_0}{\lg z_1/z_0}, \quad \mu_y = k_0 \cdot u, \quad \mu_z = k_1 \cdot \left(\frac{z}{z_1} \right)^m,$$

where u_1 is wind speed at height $z_1 = 10m$; $m \approx 1$; k_1, k_0 are parameters [Berlyand et al].

Numerical model. To solve transport equation (1) the implicit change – triangle scheme is used. The main features of this scheme are shown below.

According to the principles of this implicit scheme development the time dependent derivative is approximated as following:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_{ijk}^{n+1} - C_{ijk}^n}{\Delta t}.$$

At the first step of development the convective derivatives are represented as follows:

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

$$\frac{\partial u C}{\partial x} = \frac{\partial u^+ C}{\partial x} + \frac{\partial u^- C}{\partial x},$$

$$\frac{\partial v C}{\partial y} = \frac{\partial v^+ C}{\partial y} + \frac{\partial v^- C}{\partial y},$$

$$\frac{\partial w C}{\partial z} = \frac{\partial w^+ C}{\partial z} + \frac{\partial w^- C}{\partial z},$$

$$\text{where } u^+ = \frac{u + |u|}{2}, \quad u^- = \frac{u - |u|}{2}, \quad v^+ = \frac{v + |v|}{2}, \\ v^- = \frac{v - |v|}{2}, \quad w^+ = \frac{w + |w|}{2}, \quad w^- = \frac{w - |w|}{2}.$$

At the second step the convective derivatives are approximated as following:

$$\frac{\partial u^+ C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j,k}^+ C_{i,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^+ C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial u^- C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j,k}^- C_{i+1,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^- C^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^+ C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1,k}^+ C_{i,j,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^+ C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^- C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1,k}^- C_{i,j+1,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^- C^{n+1},$$

$$\frac{\partial w^+ C}{\partial z} \approx \frac{w_{i,j,k+1}^+ C_{i,j,k}^{n+1} - w_{i,j,k}^+ C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z} = L_z^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial w^- C}{\partial z} \approx \frac{w_{i,j,k+1}^- C_{i,j,k+1}^{n+1} - w_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z} = L_z^- C^{n+1}.$$

The second order derivatives are approximated as following:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \approx \mu_x \frac{C_{i+1,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} - \\ - \mu_x \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} = \\ = M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \approx \mu_y \frac{C_{i,j+1,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta y^2} -$$

$$- \mu_y \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta y^2} = \\ = M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \approx \mu_z \frac{C_{i,j,k+1}^{n+1} - C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z^2} -$$

$$- \mu_z \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z^2} = \\ = M_{zz}^- C^{n+1} + M_{zz}^+ C^{n+1}.$$

In these expressions $L_x^+, L_x^-, L_y^+, L_y^-, L_z^+, L_z^-$, M_{xx}^+, M_{xx}^- are the difference operators. Using these expressions the difference scheme for the transport equation can be written as follows:

$$\frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k}^n}{\Delta t} + L_x^+ C^{n+1} + L_x^- C^{n+1} + L_y^+ C^{n+1} + \\ + L_y^- C^{n+1} + L_z^+ C^{n+1} + L_z^- C^{n+1} + \sigma C_{i,j,k}^{n+1} = \\ = (M_{xx}^+ C^{n+1} + M_{xx}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1} + \\ + M_{yy}^- C^{n+1} + M_{zz}^+ C^{n+1} + M_{zz}^- C^{n+1}) + q(t) \delta.$$

Solution of this equation is split in four steps on the time step of integration dt :

– at the first step ($k = \frac{1}{4}$) the difference equation is:

$$\frac{C_{ijk}^{n+k} - C_{ijk}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k + L_z^+ C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ijk}^k = \\ = \frac{1}{4} (M_{xx}^+ C^k + M_{xx}^- C^k + M_{yy}^+ C^n + M_{yy}^- C^n + \\ M_{zz}^+ C^n + M_{zz}^- C^n) + \sum_{l=1}^N \frac{\bar{q}(t)_l}{4} \delta_l,$$

– at the second step ($k = n + \frac{1}{2}$, $c = n + \frac{1}{4}$): the difference equation is

$$\frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- C^k + L_y^- C^k + L_z^- C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ijk}^k =$$

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

$$= \frac{1}{4}(M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c + \\ + M_{zz}^- C^k + M_{zz}^+ C^c) + \sum_{l=1}^N \frac{\bar{q}(t)_l}{4} \delta_l,$$

– at the third step ($k = n + \frac{3}{4}$, $c = n + \frac{1}{2}$) the difference equation is

$$\frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L_x^+ C^k + L_y^- C^k + L_z^- C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ijk}^k = \\ = \frac{1}{4}(M_{xx}^- C^c + M_{xx}^+ C^k + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c + \\ + M_{zz}^- C^k + M_{zz}^+ C^c) + \sum_{l=1}^N \frac{\bar{q}(t)_l}{4} \delta_l,$$

– at the fourth step ($k = n + 1$, $c = n + \frac{3}{4}$) the difference equation is

$$\frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L_x^- C^k + L_y^+ C^k + L_z^+ C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{ijk}^k = \\ = \frac{1}{4}(M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^c + M_{yy}^+ C^k + \\ + M_{zz}^- C^c + M_{zz}^+ C^k) + \sum_{l=1}^N \frac{\bar{q}(t)_l}{4} \delta_l,$$

Function δ_l is equal to zero in all cells except the cells where the ‘ l ’ source of emission is situated.

This difference scheme is implicit and absolutely steady but the unknown concentration C is calculated using the explicit formulae at each step (so called «method of running calculation»).

The initial condition at each time step is written as following [11]:

$$C \Big|_{t=t^n}^1 = C(x, y, z, t^n), \\ C \Big|_{t=t^n}^k = C \Big|_{t=t^{k-1}}^{k-1}, \quad k = 2, 3, 4 \\ C(x, y, z, t^{n+1}) = C \Big|_{t=t^5}^5,$$

where C^1, C^k, C^5 – are concentrations at each time step.

FORTTRAN language was used to code the developed numerical model.

Findings

The developed generic code «*EMISSION*» was used to solve the following problem. A train with toxic chemical (NH₃) moves near Railway Station «*Illarionovo*» (Dnipropetrovsk Region, Ukraine) and at time $t=0$ the instant emission of NH₃ takes place. This emission results in NH₃ cloud formation (Fig.2). Position of this instant emission is schematically shown as «star» in Fig.1 and «arrow» indicates the direction of the train movement. The train keeps moving after the accident and long term emission of NH₃ ($q = 5 \text{ kg/sec}$) follows the instant emission. So we have scenario «*instant exhaust of toxic chemical + long term emission of it*».



Fig. 1. Satellite image near Railway Station «*Illarionovo*» :
1 – Site # 1 (farm field); 2 – Site #2 (farm field);
dots show the rail way track; «*star*» shows the initial point of emission

Results of numerical simulation of atmosphere pollution for this scenario are shown in Fig. 2–4.

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

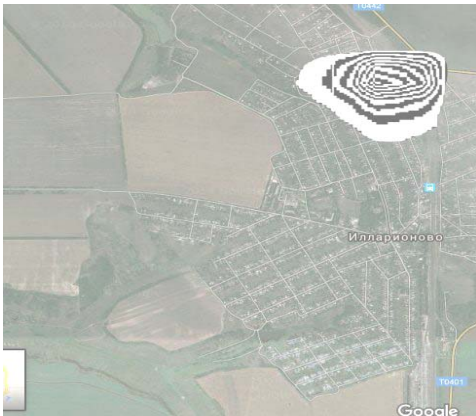


Fig. 2. Spatial distribution of NH3, (initial cloud), $t = 42 \text{ sec}$ (level $z = 10 \text{ m}$)



Fig. 3. Spatial distribution of NH3, $t = 70 \text{ sec}$ (level $z = 10 \text{ m}$)

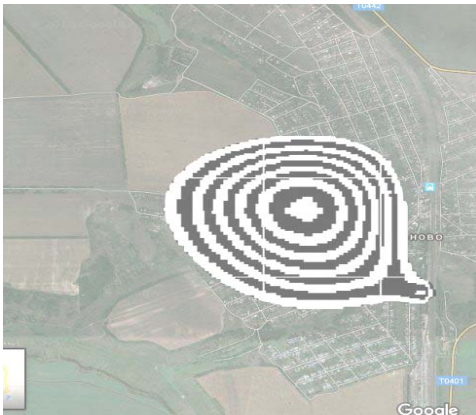


Fig. 4. Spatial distribution of NH3, $t = 169 \text{ sec}$ (level $z = 10 \text{ m}$)

It is clear from Fig. 2–4 that the contamination area is formed under the following factors: initial cloud appearance + long term emission from the moving train + atmosphere dispersion and wind.

From the practical point of view it is important

to evaluate the ground pollution intensity. To solve this problem the following expression was integrated

$$G = \int_0^T dt \iint_{S, z=0} (w_s + \mu\alpha) C(x, y, z=0, t) ds, \quad (2)$$

where G is mass of the pollutant which felt down the ground site S , t is time, T is period of integration. «Rectangular method» was used for the numerical integration of this expression. Results of soil pollution prediction after accident are shown in Tabl.1.

Table 1

Time	112 sec	169 sec	239 sec
Area	$4628 \cdot 10^3 \text{ m}^2$	$6222 \cdot 10^3 \text{ m}^2$	$6925 \cdot 10^3 \text{ m}^2$

Soil Pollution Dynamics. In the case of private owners demands to pay their losses after the accident it is important to know the toxic chemical felt down the different sites, for example, the private fields. At present to evaluate the ecological damage in Ukraine, in the case of ground pollution the following formulae is used

$$D = K \times \Pi, \quad (3)$$

where Π is polluted area [m^2], K is money coefficient (grivni, dollars) declared by Administration Regulations.

As it is clear from Eq. (3) to make the adequate evaluation of the ecological damage D it is necessary to obtain the correct information about Π . The developed generic code can solve this problem using formulae (2) which is calculated for marked cells of the computational region. These cells indicate the area, for example, of the farm fields (Fig.2, Site #1 and Site # 2). In Tabl.2 results about these sites pollution are presented.

Table 2

Mass of Toxic Chemical felt down the Different Sites

Time	Site #1 (See Fig.1)	Site #2 (See Fig.1)
154 sec	$0.41 \times 10^5 \text{ grams}$	723 grams
211 sec	$0.81 \times 10^5 \text{ grams}$	6 166 grams
267 sec	$0.10 \times 10^6 \text{ grams}$	$0.22 \times 10^5 \text{ grams}$

Results from Tabl.2 show that the most contaminated area is formed at Site #1 which is influenced by initial cloud and following emission from moving train.

Originality and practical value

A new numerical model to predict atmosphere pollution after accidents at railways was developed. The model is based on the 3-D transport equation. The developed model takes into account wind profile, diffusion, emission rate and source movement. This model allows to evaluate the ecological damage in the case of different emissions at railways. The model can be useful in the field of safety prediction of transport routes and risk assessment.

Conclusions

The article contains results of numerical simulation of air pollution near Illarionovo station after accident at railway. To simulate the process of air pollution the 3-D developed numerical model was used. The developed numerical model takes into account the main physical processes which influence the pollutant dispersion in atmosphere. The future work in this field will be connected with development of fluid dynamics model to simulate the pollutant dispersion over the complex terrain.

LIST OF REFERENCE LINKS

1. Авария и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий : учеб. пособие : в 5 кн. / под ред. В. А. Котляревского, А. В. Забегаева. – Москва : АСВ, 2001. – Кн. 5. – 416 с.
2. Беляев, Н. Н. Математическое моделирование в задачах экологической безопасности и мониторинга чрезвычайных ситуаций : монография / Н. Н. Беляев, Е. Ю. Гунько, П. Б. Машихина. – Днепропетровск : Акцент ПП, 2013. – 159 с.
3. Беляев, Н. Н. Прогнозирование загрязнения приземного слоя атмосферы при горении твердого ракетного топлива в хранилище / Н. Н. Беляев, А. В. Берлов // Зб. наук. пр. НГУ. – Дніпропетровськ, 2013. – № 42. – С. 160–167.
4. Берлов, А. В. Расчет загрязнения приземного слоя атмосферы при горении твердого ракетного топлива / А. В. Берлов // Наук. вісн. буд-ва : зб. наук. пр. / Харків. держ. техн. ун-т буд-ва та архіт. – Харків, 2014. – № 1 (75). – С. 185–189.
5. Берлянд, М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы / М. Е. Берлянд. – Ленинград : Гидрометеоздат, 1985. – 273 с.
6. Гусев, Н. Г. Радиоактивные выбросы в биосфере / Н. Г. Гусев, В. А. Беляев. – Москва : Энергоатомиздат, 1991. – 257 с.
7. Израэль, Ю. А. Экология и контроль состояния природной среды / Ю. А. Израэль. – Москва : Гидрометеоздат, 1984. – 560 с.
8. Марчук, Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Г. И. Марчук. – Москва : Наука, 1982. – 320 с.
9. Машихина, П. Б. Моделирование распространения примеси в атмосфере с учетом рельефа местности / П. Б. Машихина // Вісн. Дніпропетр. нац. ун-ту залізн. трансп. ім. акад. В. Лазаряна. – Дніпропетровськ, 2009. – Вип. 27. – С. 138–142.
10. Русакова, Т. И. Прогнозирование загрязнения воздушной среды от автотранспорта на улицах и в микрорайонах города / Т. И. Русакова // Наука та прогрес транспорту. – 2013. – № 6 (48). – С. 32–45. doi: 10.15802/stp2013/19675.
11. Самарский, А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – Москва : Наука, 1983. – 616 с.
12. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев. – Киев : Наук. думка, 1997. – 368 с.
13. Швыряев, А. А. Оценка риска воздействия загрязнения атмосферы в исследуемом регионе / А. А. Швыряев, В. В. Меньшиков. – Москва : Изд-во МГУ, 2004. – 124 с.
14. Эльтерман, В. М. Вентиляция химических производств / В. М. Эльтерман. – Москва : Химия, 1980. – 288 с.
15. Biliaiev, M. Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography / M. Biliaiev // NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security. – Springer : Netherlands, 2012. – P. 87–91. doi: 10.1007/978-94-007-1359-8_15.
16. Hanna, S. Air Quality Modelling over Short Distances / S. Hanna // College on Atmospheric Boundary Layer and Air Pollution Modelling. – 16 May–3 June, 1994. – № SMR/760–2. – P. 712–743.

М. М. БІЛЯЄВ^{1*}, Л. Я. МУНТЯН^{2*}

^{1*}Каф. «Гідравліка та водопостачання», Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, вул. Лазаряна, 2, Дніпропетровськ, Україна, 49010, тел. +38 (056) 273 15 09, ел. пошта gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0002-1531-7882

^{2*}Каф. «Гідравліка та водопостачання», Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, вул. Лазаряна, 2, Дніпропетровськ, Україна, 49010, тел. +38 (056) 273 15 09, ел. пошта lili.muntyan@gmail.com, ORCID 0000-0002-1659-7740

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ХІМІЧНО НЕБЕЗПЕЧНОЇ РЕЧОВИНИ ПРИ АВАРІЇ НА ЗАЛІЗНИЦІ

Мета. Дане дослідження спрямоване на розробку прикладної чисельної моделі для розрахунку динаміки забруднення атмосфери при емісії хімічно небезпечної речовини у разі його транспортування залізничним транспортом. **Методика.** Для чисельного моделювання процесу перенесення хімічно небезпечної речовини в атмосфері застосовується рівняння конвективно-дифузійного переносу домішки. Дане рівняння враховує вплив вітру, атмосферної дифузії, потужності джерела емісії, а також рух джерела емісії (розгерметизованої цистерни) на процес розсіювання забруднювача. При проведенні обчислювального експерименту також враховується профіль швидкості вітрового потоку. Для чисельного інтегрування рівняння переносу домішки в атмосфері застосовується неявна різницева схема розщеплення. Чисельний розрахунок розбивається на чотири кроки розщеплення, і на кожному кроці розщеплення невідоме значення концентрації небезпечної речовини визначається за явною схемою «біжучого» рахунку. На основі побудованої чисельної моделі створений код на алгоритмічній мові Фортран. Проведено обчислювальний експеримент із оцінки рівня забруднення атмосфери поблизу залізничної станції «Ларіонове» у разі можливої аварії при транспортуванні аміаку. **Результати.** Запропонована модель дозволяє оперативно розрахувати забруднення атмосфери при викиді хімічно небезпечної речовини з урахуванням руху джерела емісії. Модель дозволяє визначити розміри зони забруднення поверхні землі, а також кількість забруднювача, що осів на конкретну ділянку. За допомогою розробленої чисельної моделі виконана оцінка екологічного збитку поблизу залізничної станції «Ларіонове». **Наукова новизна.** Створена ефективна чисельна модель, що дозволяє оперативно розраховувати екологічний збиток при емісії небезпечних речовин на об'єктах залізничного транспорту. **Практична значимість.** Розроблена авторами чисельна модель може бути використана для оцінки розмірів та інтенсивності зон хімічного забруднення при надзвичайних ситуаціях на транспорті. За допомогою розробленої чисельної моделі розв'язана задача з оцінки наслідків аварійної емісії аміаку біля залізничної станції «Ларіонове».

Ключові слова: аварії на залізничному транспорті; забруднення атмосфери; хімічно небезпечна речовина; чисельне моделювання

Н. Н. БЕЛЯЕВ^{1*}, Л. Я. МУНТЯН^{2*}

^{1*}Каф. «Гидравлика и водоснабжение», Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, ул. Лазаряна, 2, Днепропетровск, Украина, 49010, тел. +38 (056) 273 15 09, эл. почта gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0002-1531-7882

^{2*}Каф. «Гидравлика и водоснабжение», Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, ул. Лазаряна, 2, Днепропетровск, Украина, 49010, тел. +38 (056) 273 15 09, эл. почта lili.muntyan@gmail.com, ORCID 0000-0002-1659-7740

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ХИМИЧЕСКИ ОПАСНОГО ВЕЩЕСТВА ПРИ АВАРИИ НА ЖЕЛЕЗНОЙ ДОРОГЕ

Цель. Данное исследование направлено на разработку прикладной численной модели для расчета динамики загрязнения атмосферы при эмиссии химически опасного вещества в случае его транспортировки железнодорожным транспортом. **Методика.** Для численного моделирования процесса переноса химически опасного вещества в атмосфере применяется уравнение конвективно-диффузионного переноса примеси.

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

Данное уравнение учитывает влияние ветра, атмосферной диффузии, мощности источника эмиссии, а также движение источника эмиссии (разгерметизированной цистерны) на процесс рассеивания загрязнителя. При проведении вычислительного эксперимента также учитывается профиль скорости ветрового потока. Для численного интегрирования уравнения переноса примеси в атмосфере применяется неявная разностная схема расщепления. Численный расчет разбивается на четыре шага расщепления, и на каждом шаге расщепления неизвестное значение концентрации опасного вещества определяется по явной схеме «бегущего» счета. На основе построенной численной модели создан код на алгоритмическом языке Фортран. Проведен вычислительный эксперимент по оценке уровня загрязнения атмосферы вблизи железнодорожной станции «Илларионово» в случае возможной аварии при транспортировке аммиака. **Результаты.** Предложенная модель позволяет оперативно рассчитать загрязнение атмосферы при выбросе химически опасного вещества с учетом движения источника эмиссии. Модель позволяет определить размеры зоны загрязнения поверхности земли, а также количество загрязнителя, осевшего на конкретный участок. С помощью разработанной численной модели выполнена оценка экологического ущерба вблизи железнодорожной станции «Илларионово». **Научная новизна.** Создана эффективная численная модель, позволяющая оперативно рассчитывать экологический ущерб при эмиссии опасных веществ на объектах железнодорожного транспорта. **Практическая значимость.** Разработанная учеными численная модель может быть использована для оценки размеров и интенсивности зон химического загрязнения при чрезвычайных ситуациях на транспорте. С помощью разработанной численной модели решена задача по оценке последствий аварийной эмиссии аммиака возле железнодорожной станции «Илларионово».

Ключевые слова: аварии на железнодорожном транспорте; загрязнение атмосферы; химически опасное вещество; численное моделирование

REFERENCES

1. Kotlyarevskiy V.A., Zabegayev A.V. *Avariya i katastrofy. Preduprezhdeniye i likvidatsiya posledstviy. Kn. 5.* [Accident and disasters. Warning and liquidation of consequences, Vol. 5]. Moscow, ACB Publ., 2001.
2. Belyayev N.N., Gunko Ye.Yu., Mashikhina P.B. *Matematicheskoye modelirovaniye v zadachakh ekologicheskoy bezopasnosti i monitoringa chrezvychaynykh situatsiy* [Mathematical design in the tasks of ecological safety and monitoring of emergencies]. Dnipropetrovsk, Aktsent PP Publ., 2013. 159 p.
3. Belyayev N.N., Berlov A.V. *Prognozirovaniye zagryazneniya prizemnogo sloya atmosfery pri gorenii tverdogo raketnogo topliva v khranilishche* [Prognostication of contamination of the ground layer of atmosphere at burning of solid rocket propellant in depository]. *Zbirnyk naukovykh prats natsionalnoho hirnychoho universytetu* [Proc. of the National Mining University], 2013, no. 42, pp. 160-167.
4. Berlov A.V. *Raschet zagryazneniya prizemnogo sloya atmosfery pri gorenii tverdogo raketnogo topliva* [Zbirnyk naukovykh prats natsionalnoho hirnychoho universytetu «Naukovyi visnyk budivnytstva»] [Proc. of the National Mining University «Scientific Bulletin of Building»], 2014, no. 1 (75), pp. 185-189.
5. Berlyand M.Ye. *Prognoz i regulirovaniye zagryazneniya atmosfery* [Prognosis and adjusting of contamination of atmosphere]. Leningrad, Gidrometeoizdat Publ., 1985. 273 p.
6. Gusev N.G., Belyayev V.A. *Radioaktivnyye vybrosy v biosfere* [Radioactive discharges in the biosphere]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 257 p.
7. Izrayel Yu.A. *Ekologiya i kontrol sostoyaniya prirodnoy sredy* [Ecology and control of the state of natural environment]. Moscow, Gidrometeoizdat Publ., 1984. 560 p.
8. Marchuk G.I. *Matematicheskoye modelirovaniye v probleme okruzhayushchey sredy* [Mathematical modeling in the environmental problem]. Moscow, Nauka Publ., 1982. 320 p.
9. Mashikhina P.B. *Modelirovaniye rasprostraneniya primesi v atmosfere s uchetom relyefa mestnosti* [The distribution modeling of impurities in the atmosphere taking into account of terrain]. *Visnyk Dnipropetrovskoho natsionalnoho universytetu zaliznychnoho transportu imeni akademika V. Lazaryana* [Bulletin of the Dnipropetrovsk National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan], 2009, issue 27, pp. 138-142.
10. Rusakova T.I. *Prognozirovaniye zagryazneniya vozdushnoy sredy ot avtotransporta na ulitsakh i v mikrorayonakh goroda* [Prediction of air pollution from autotransport in streets and districts of city]. *Nauka ta prohres transportu – Science and Transport Progress*, 2013, no. 6 (48), pp. 32-45. doi: 10.15802/stp2013/19675.
11. Samarskiy A.A. *Teoriya raznostnykh skhem* [The theory of difference schemes]. Moscow, Nauka Publ., 1983. 616 p.

ЕКОЛОГІЯ НА ТРАНСПОРТІ

12. Zgurovskiy M.Z., Skopetskiy V.V., Khrushch V.K., Belyayev N.N. *Chislennoye modelirovaniye rasprostraneniya zagryazneniya v okruzhayushchey srede* [Numerical modeling of pollution in the environment]. Kyiv, Naukova dumka Publ., 1997. 368 p.
13. Shvyryayev A.A., Menshikov V.V. *Otsenka riska vozdeystviya zagryazneniya atmosfery v issleduyemom regione* [Risk assessment of atmosphere pollution effect in the region under study]. Moscow, MGU Publ., 2004. 124 p.
14. Elterman V.M. *Ventilyatsiya khimicheskikh proizvodstv* [Ventilation of chemical productions]. Moscow, Khimiya Publ., 1980. 288 p.
15. Biliaiev M. Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography. NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security, 2012, pp.87-91.
16. Hanna S. Air Quality Modelling over Short Distances. College on Atmospheric Boundary Layer and Air Pollution Modelling. 16 May–3 June, 1994, no. SMR/760–2, pp. 712-743.

Prof. S. A. Pichugov, D. Sc. (Phys.-Math.); (Ukraine); Prof. V. D. Petrenko, D. Sc. (Tech.) (Ukraine) recommended this article to be published

Accessed: Nov. 16, 2015

Received: March 20, 2016