

© Н.Н. Беляев¹, И.В. Калашников², В.А. Козачина¹, А.В. Берлов³

¹ Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, Днепр, Украина

² Харьковское отделение Филиала «Проектно-исследовательский институт железнодорожного транспорта» акционерного общества «Українська залізниця», Харьков, Украина

³ Приднепровская государственная академия строительства и архитектуры, Днепр, Украина

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ И ДИСКРЕТНЫЕ МОДЕЛИ В ЗАДАЧАХ АВАРИЙНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА

© M. Biliaiev¹, I. Kalashnikov², V. Kozachina¹, O. Berlov³

¹ Dnipro National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan, Dnipro, Ukraine

² Kharkiv Department of the Branch «Design and Research Institute of Railway Transport» of the joint stock company «Ukrainian Railway», Kharkiv, Ukraine

³ Pridneprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture», Dnipro, Ukraine

MATHEMATICAL AND DISCRETE MODELS IN THE TASKS OF EMERGENCY POLLUTION OF ATMOSPHERIC AIR

Цель. Целью работы является разработка математической модели для оценки динамики загрязнения атмосферного воздуха в случае нестационарной эмиссии химически опасного вещества на промышленном объекте.

Методика исследований. Для решения поставленной задачи использовано уравнение для потенциала скорости, на базе которого определено поле скорости воздушного потока, и уравнение конвективно-диффузионного рассеивания химически опасного агента в атмосферном воздухе. Уравнение конвективно-диффузионного рассеивания примеси позволяет учитывать поле скорости ветрового потока, атмосферную диффузию, интенсивность выброса химически опасного агента. При численном интегрировании уравнения для потенциала скорости использована локально-одномерная разностная схема. Неизвестное значение для потенциала скорости на каждом шаге расщепления определяется по методу бегущего счета. Для численного решения уравнения конвективно-диффузионного рассеивания примеси использованы две схемы расщепления. Особенностью применяемых схем является определение неизвестного значения концентрации химически опасного вещества методом бегущего счета.

Результаты исследования. На основе разработанных численных моделей создан специализированный пакет программ. Разработанный пакет программ применен для оценки уровня загрязнения атмосферного воздуха в случае эмиссии химически опасного вещества на железнодорожной станции. Разработанные численные модели могут быть реализованы на компьютерах малой и средней мощности, что позволяет широко использовать их для решения разнообразных задач в области аварийного загрязнения атмосферного воздуха.

Научная новизна. Рассмотрены эффективные численные модели для расчета зон химического заражения при эмиссии опасных веществ в атмосферу. Модели могут быть использованы для решения задач при разработке плана ликвидации аварийной ситуации на промышленном объекте или транспорте.

Практическое значение. Разработанные численные модели могут быть использованы для оценки риска токсичного поражения людей на открытой местности при аварийной эмиссии химически опасных веществ.

Ключевые слова: химическое загрязнение атмосферы; аварийные ситуации; численное моделирование.

Вступление. В последнее время повышенный интерес привлекают к себе задачи прогноза последствий аварийных ситуаций на промышленных объектах и транспорте. В круг этих задач входит задача оценки динамики загрязнения атмосферного воздуха при эмиссии химического агента. Наиболее эффективным методом решения задач данного класса является CFD-моделирование. На практике, для этого используются специализированные пакеты программ: «ANSYS Fluent», «FAST» и др. Данные пакеты программ представляют собой мощный инструмент решения разнообразных задач. Но стоимость лицензированных пакетов очень высока и поэтому доступ к таким пакетам ограничен. Для применения данных пакетов требуется использование мощных компьютеров. Кроме этого на решении задач уходит десятки часов. Это является препятствием для их широкого применения на практике.

В Украине для решения задач по оценке размеров зон химического заражения используется два подхода. Первый подход – это нормативная методика прогноза последствий аварий на химически опасных объектах и транспорте. К сожалению, данная методика не позволяет рассчитать концентрацию химически опасного агента в атмосфере, а дает только интегральную информацию о зонах химического заражения. Второй подход – это использование методики ОНД-86. Однако данная методика не позволяет рассчитать динамику загрязнения атмосферного воздуха. Она разработана исключительно для стационарного выброса. Поэтому указанные два подхода не позволяют получить адекватную информацию о формировании зон загрязнения на промышленных объектах и транспорте.

Целью данной работы является разработка численных моделей для оценки динамики загрязнения атмосферного воздуха при аварийной эмиссии химически опасных веществ.

Постановка задачи. Рассматривается эмиссия опасного вещества на железнодорожной станции. Необходимо выполнить прогноз динамики загрязнения атмосферного воздуха.

Уравнение массопереноса. Для математического моделирования рассеивания химического агента в атмосфере будем использовать следующее уравнение [1, 2, 4, 6]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \sigma C = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \\ & + \sum Q \delta(x - x_0) \delta(y - y_0), \end{aligned} \quad (1)$$

где C – осредненная концентрация химического агента в атмосферном воздухе; σ – коэффициент, учитывающий распад агента в атмосфере; u, v – компоненты вектора скорости воздушного потока; μ_x, μ_y – коэффициенты атмосферной турбулентной диффузии; Q – интенсивность эмиссии химического агента; $\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)$ – обозначение дельта-функция Дирака; x_0, y_0 – координаты источника эмиссии агента при теракте; t – время.

Данное уравнение является усредненным по высоте переноса примеси.

Краевые условия для уравнения (2) записывают так [1]: при $t=0$, $C=0$. На границах, где воздушный поток входит в расчетную область, $C=C_{in}$, здесь C_{in} – известная величина. Мы принимаем, что $C_{in}=0$. На участке, где воздушный поток выходит из расчетной области, в численной модели ставят «мягкое» граничное условие вида: $C_{i+1,j}=C_{i,j}$, здесь $C_{i+1,j}$ – концентрация загрязнителя в граничной (последней) ячейке.

Расчет поля скорости воздушного потока. Как известно, расчет рассеивания химических агентов в условиях застройки представляет собой сложную задачу. Для применения уравнения (1) в случае рассеивания химического агента при наличии зданий необходимо знать неравномерное поле скорости ветрового потока. Данное поле скорости можно рассчитать на базе уравнений Навье-Стокса, но при этом затраты компьютерного времени могут составлять несколько суток. Поэтому модель на базе уравнений Навье-Стокса не может быть использована в настоящее время для проведения серийных расчетов. Для определения поля скорости ветрового потока $u=f(x, y)$, $v=f(x, y)$ будем использовать модель безвихревого течения идеальной жидкости [1, 2, 4, 6]:

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = 0, \quad (2)$$

где P – потенциал скорости.

Компоненты вектора скорости воздушного потока определяем зависимостью вида:

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial P}{\partial y}. \quad (3)$$

Для уравнения (2) имеют место такие граничные условия:

– на твердых границах ставим условие вида: $\frac{\partial P}{\partial n} = 0$,

где n – единичный вектор внешней нормали к границе;

– на границе выхода воздушного потока из расчетной области ставим граничное условие $P = \text{const}$;

– на тех границах, где происходит втекание воздушного потока, ставим граничное условие вида: $\frac{\partial P}{\partial n} = V$, где V – известная скорость ветрового потока.

Решение задачи. Для численного интегрирования моделирующих уравнений будем использовать конечно-разностные методы решения.

Проведем аппроксимацию производных, следуя [1, 2, 4]. Аппроксимацию производной по времени осуществляем так:

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

Первые производные представим так:

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

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

где $u^+ = \frac{u + |u|}{2}$, $u^- = \frac{u - |u|}{2}$, $v^+ = \frac{v + |v|}{2}$, $v^- = \frac{v - |v|}{2}$.

Для аппроксимации первых производных используем формулы [1, 2, 4]:

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

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

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

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

Для аппроксимации вторых производных используем зависимости [4]:

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

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \approx \mu_y \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - C_{ij}^{n+1}}{\Delta x^2} - \mu_y \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1}.$$

С учетом приведенных обозначений разностных операторов записываем разностный аналог уравнения (1):

$$\begin{aligned} \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{ij}^n}{\Delta t} + L_x^+ C^{n+1} + L_x^- C^{n+1} + L_y^+ C^{n+1} + L_y^- C^{n+1} + \sigma C_{ij}^{n+1} = \\ = (M_{xx}^+ C^{n+1} + M_{xx}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1} + M_{yy}^- C^{n+1}) + Q_{ij} \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (4)$$

Проведем расщепление разностного уравнения (4). Уравнения расщепления на каждом шаге записывают так [4]:

– на первом шаге ($k = n + \frac{1}{4}$):

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j}^{n+k} - C_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{i,j}^k = \\ = \frac{1}{4} (M_{xx}^+ C^k + M_{xx}^- C^k + M_{yy}^+ C^k + M_{yy}^- C^k), \end{aligned} \quad (5)$$

– на втором шаге ($k = n + \frac{1}{2}; c = n + \frac{1}{4}$):

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j}^k - C_{i,j}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L_x^- C^k + L_y^- C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{i,j}^k = \\ = \frac{1}{4}(M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c), \end{aligned} \quad (6)$$

– на третьем шаге ($k = n + \frac{3}{4}; c = n + \frac{1}{2}$) применяем зависимость (6);

– на четвертом шаге ($k = n + 1; c = n + \frac{3}{4}$) применяем зависимость (5).

Искомое значение функции C на каждом дробном шаге (5), (6) определяем по формуле бегущего счета.

На последнем шаге решаем уравнение: $\frac{\partial C}{\partial t} = Q\delta(x - x_0)\delta(y - y_0)$.

Для решения данного уравнения применяют метод Эйлера.

Кроме рассмотренной выше разностной схемы для решения уравнения массопереноса был использован другой подход, а именно, расщепление исходного уравнения на систему одномерных уравнений вида

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right), \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial vC}{\partial y} &= \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right), \\ \frac{\partial C}{\partial t} + \sigma C &= \sum Q_i(t) \delta(x - x_i(t)) \delta(y - y_i(t)). \end{aligned}$$

Первые два уравнения описывают перенос примеси только в одном координатном направлении. Третье уравнение описывает изменение концентрации примеси под действием источников и стоков. Первые два уравнения из этой системы численно решались с помощью попеременно треугольной разностной схемы. Необходимо подчеркнуть, что такое расщепление соответствует так называемой локально-одномерной схеме. Третье уравнение из данной системы численно решалось с помощью метода Эйлера.

Для численного решения уравнения (2) используется локально - одномерная разностная схема. В этом случае уравнение Лапласа записывается в эволюционном виде и осуществляется геометрическое расщепление этого уравнения на два одномерных уравнения:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}.$$

Для аппроксимации каждого уравнения из данной системы будем использовать следующие разностные выражения:

$$\frac{P_{i,j}^{n+1/2} - P_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{P_{i-1,j}^{n+1/2} - P_{i,j}^{n+1/2}}{\Delta x}, \quad \frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1/2}}{\Delta t} = \frac{P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta x},$$

$$\frac{P_{i,j}^{n+1/2} - P_{i,j}^n}{\Delta t} = \frac{P_{i,j-1}^{n+1/2} - P_{i,j}^{n+1/2}}{\Delta y}, \quad \frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1/2}}{\Delta t} = \frac{P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta y}.$$

Неизвестное значение потенциала скорости находится методом бегущего счета из представленных зависимостей.

Для программной реализации разработанной математической модели был использован FORTRAN.

Результаты. Разработанная математическая модель была использована для решения следующей задачи. Рассматривался выброс хлора при аварии на железной дороге. Моделировалась ситуация когда состав с поврежденной цистерной остановился и началась эмиссия опасного вещества. При расчете полагалось, что интенсивность эмиссии составляет 12 кг/с, скорость ветра 5 м/с. Устойчивость атмосферы соответствует классу D. На последующих рисунках представлена зона загрязнения атмосферного воздуха для различных моментов времени после начала выброса.

Как видно из рис.1-3 при эмиссии хлора из цистерны формируется зона загрязнения в виде «языка». Эта зона загрязнения вытягивается в направлении движения воздушных масс и захватывает селитебную территорию (рис. 3). Это создает угрозу токсичного поражения людей.



Рис. 1. Зона загрознєння атмосфєри для моменту часу $t=3$ мин



Рис. 2. Зона загрознєння атмосфєри для моменту часу $t=8$ мин

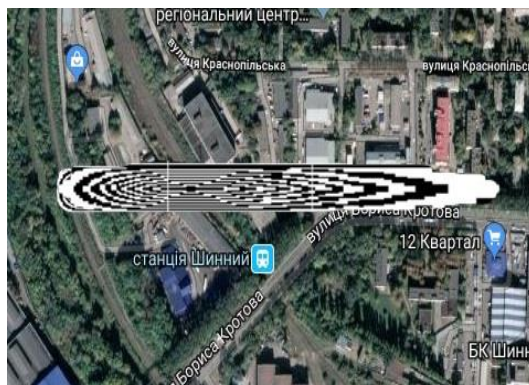


Рис. 3. Зона загрознення атмосфери для моменту часу $t=12$ мин

Для ілюстрації можливостей моделей по розрахунку зон загрознення між будівлями, на базі розроблених моделей, була розв'язана окрема задача. На Рис. 4. представлено розрахунок зони хімічного зараження з урахуванням наявності будівель на шляху міграції хімічно небезпечного речовини.

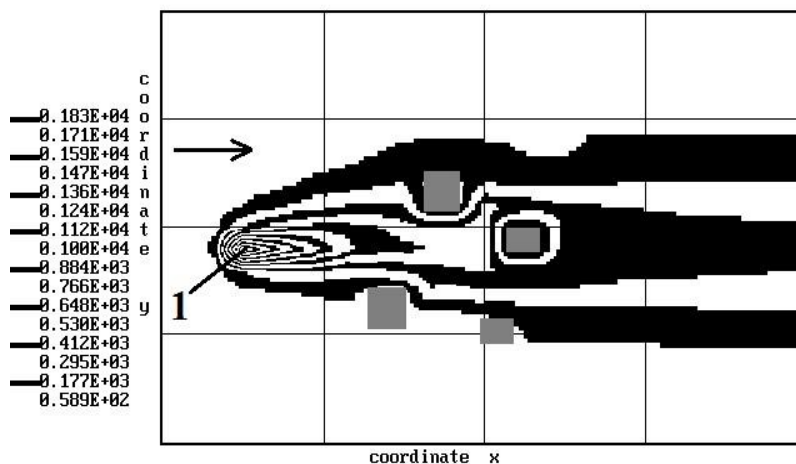


Рис. 4. Зона загрознення атмосфери для моменту часу $t=12$ мин (при наявності будівель): 1 – місце викиду хімічно небезпечного речовини

Як видно з Рис. 4. наявність будівель призводить до деформації шлейфу: найбільш помітно ця деформація проявляється в просторі між будівлями. Тому, при проведенні розрахунків необхідно враховувати вплив будівель на формування зон хімічного зараження, що дозволяє зробити розроблені чисельні моделі. Відзначимо, що витрати часу на розв'язання задачі становлять 5 сек.

Висновки. Розглянуті чисельні моделі для розрахунку динаміки загрознення атмосферного повітря при нестационарній емісії хімічно небезпечних речовин в атмосферу. Моделі можуть бути використані для розв'язання задач при розробці плану ліквідації аварійної ситуації на хімічно небезпечних об'єктах і транспорті.

Дальнє удосконалення слід проводити в напрямку розробки тривимірної чисельної моделі, орієнтованої на розв'язання задач даного класу з використанням рівнянь аеродинаміки в'язких потоків.

Перечень ссылок

1. Беляев, Н.Н., Гунько, Е.Ю., & Росточило, Н.В. (2014). *Защита зданий от проникновения в них опасных веществ*. Монография. Днепропетровск: Акцент ПП.
2. Біляєв, М.М., Берлов, О.В., & Кириченко, П.С. (2017). *Математичне моделювання в задачах промислової безпеки та охорони праці*. Монографія. – Кривий Ріг : Вид. Р.А. Козлов.
3. Марчук, Г.И. (1982). *Математическое моделирование в проблеме окружающей среды*. Москва: Наука.
4. Згуровский, М.З., Скопецкий, В.В., Хрущ, В.К., & Беляев Н.Н. (1997). *Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде*. Київ: Наук. думка.
5. Anthony, M.B. (2009). *Mathematical Modeling and Decision Analysis for Terrorism Defense. Assessing Chlorine Truck Attack Consequence and Countermeasure Cost Effectiveness*. *Ph.D. Department of Engineering and Public Policy, Carnegie Mellon University, Pittsburg, Pennsylvania*.
6. Biliaiev, M. M., & Kharytonov, M. M. (2011). Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography. *NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security*, 87–91.
doi:10.1007/978-94-007-1359-8_15

АНОТАЦІЯ

Мета. Метою роботи є розробка математичної моделі для оцінки динаміки забруднення атмосферного повітря у разі нестационарної емісії хімічно небезпечної речовини на промисловому об'єкті.

Методика досліджень. Для вирішення поставленої задачі використано рівняння для потенціалу швидкості, на базі якого визначено поле швидкості повітряного потоку, і рівняння конвективно-дифузійного розсіювання хімічно небезпечного агента в атмосферному повітрі. Рівняння конвективно-дифузійного розсіювання домішки дозволяє враховувати поле швидкості вітрового потоку, атмосферну дифузію, інтенсивність викиду хімічно небезпечного агента. При чисельному інтегруванні рівняння для потенціалу швидкості використана локально-одномірною різницева схема. Невідоме значення для потенціалу швидкості на кожному кроці розщеплення визначається за методом біжучого рахунку. Для чисельного рішення рівняння конвективно-дифузійного розсіювання домішки використані дві схеми розщеплення. Особливістю застосовуваних схем є визначення невідомого значення концентрації хімічно небезпечної речовини методом біжучого рахунку.

Результати дослідження. На основі розроблених чисельних моделей створено спеціалізований пакет програм. Розроблений пакет програм застосований для оцінки рівня забруднення атмосферного повітря в разі емісії хімічно небезпечної речовини на залізничній станції. Розроблені чисельні моделі можуть бути реалізовані на комп'ютерах малої і середньої потужності, що дозволяє широко використовувати їх для вирішення різноманітних завдань в області аварійного забруднення атмосферного повітря.

Наукова новизна. Розглянуто ефективні чисельні моделі для розрахунку зон хімічного зараження при емісії небезпечних речовин в атмосферу. Моделі можуть бути використані для вирішення завдань при розробці плану ліквідації аварійної ситуації на промисловому об'єкті або транспорті.

Практичне значення. Розроблені чисельні моделі можуть бути використані для оцінки ризику токсичного ураження людей на відкритій місцевості при аварійній емісії хімічно небезпечних речовин.

Ключові слова: хімічне забруднення атмосфери, аварійні ситуації, чисельне моделювання.

ABSTRACT

Purpose. The purpose of the work is to develop a mathematical model for assessing the dynamics of air pollution in the case of non-stationary emission of a chemically hazardous substance at an industrial facility.

Methodology. To solve the problem, we used the equation for the velocity potential, on the basis of which the velocity field of the air flow was determined, and the equation of convective-diffusion dispersion of a chemically dangerous agent in atmospheric air. The equation of convective-diffusion scattering of an impurity allows one to take into account the velocity field of the wind flow, atmospheric diffusion, and the intensity of the emission of a chemically dangerous agent. In the numerical integration of the equation for the velocity potential, a locally one-dimensional difference scheme is used. The unknown value for the velocity potential at each step of the splitting is determined by the running account method. For the numerical solution of the equation of convective-diffusion scattering of an impurity, two splitting schemes were used. A feature of the schemes used is the determination of the unknown value of the concentration of a chemically dangerous substance by means of a running account.

The results Based on the developed numerical models, a specialized software package has been created. The developed software package was applied to assess the level of air pollution in the event of emission of a chemically hazardous substance at a railway station. The developed numerical models can be implemented on computers of low and medium power, which allows them to be widely used for solving various problems in the field of emergency air pollution.

Scientific novelty. The effective numerical models for calculating the zones of chemical contamination during the emission of hazardous substances into the atmosphere are considered. Models can be used to solve problems when developing an emergency response plan at an industrial facility or transport.

Practical significance. The developed numerical models can be used to assess the risk of toxic damage to people in open areas in case of emergency emission of chemically hazardous substances.

Keywords: chemical pollution of the atmosphere, emergency situations, numerical simulation.