

**Беляев Н.Н**

*Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта  
имени академика В. Лазаряна  
(ул. Лазаряна, 2, Днепр, 49010, Украина, e-mail: water.supply.treatment@gmail.com)*

**Калашников И.В**

*Государственное предприятие «Проектно-изыскательский институт железнодорожного транспорта Украины «Укрзалізничпроект»  
(ул. Е. Котляра, 7, Харьков, 61052, Украина, e-mail: uzr38@ukr.net)*

**Машихина П.Б.**

*Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта  
имени академика В. Лазаряна  
(ул. Лазаряна, 2, Днепр, 49010, Украина, e-mail: water.supply.treatment@gmail.com)*

**ПРИМЕНЕНИЕ СОПРЯЖЕННОГО УРАВНЕНИЯ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ  
В ПРОБЛЕМЕ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА**

Целью работы является разработка 2-D численной модели для решения задач, связанных с загрязнением атмосферы на базе сопряженного уравнения при эмиссии химически опасных веществ в случае аварий или терактов. Модель ориентирована на экспресс оценку возможных зон размещения источника эмиссии, чтобы в заданной точке «интереса» концентрация не превышала порогового уровня. Методика исследований состоит в применении метода численного интегрирования двухмерного дифференциального уравнения массопереноса, которое моделирует распространение в атмосферном воздухе химически опасного вещества. Рассматривается уравнение, которое является сопряженным к уравнению массопереноса. С помощью этого уравнения определяется зона, где размещение источника эмиссии может привести к возникновению опасных концентраций, для определенного момента времени, в точке «интереса». Эта информация дает возможность выявить подзоны, где эмиссия опасного вещества, в случае аварии, теракта приведет к нежелательным последствиям. Для решения сопряженной задачи используется подход, предложенный Г.И. Марчуком. На основе разработанной численной модели создан специализированный код, позволяющий решать задачу по определению места, где эмиссия опасного вещества в атмосферу создаст нежелательный уровень загрязнения в точке «интереса». Представлены результаты вычислительного эксперимента. Предложена 2-D численная модель, позволяющая решить сопряженную задачу в области загрязнения атмосферы при выбросе химически опасных веществ. Решение этой задачи дает возможность определить зоны, где выброс опасного вещества может привести к нежелательным последствиям в точке «интереса». Модель может быть использована для проведения серийных расчетов при разработке ПЛАСа. Разработанная численная модель учитывает наиболее существенные физические факторы: метеоусловия, атмосферную диффузию, мощности эмиссии опасного вещества.

**Ключевые слова:** загрязнение атмосферы, сопряженная задача, эмиссия химически опасных веществ.

**Вступление.** Интерес к оценке уровня загрязнения атмосферного воздуха при аварийных ситуациях или при терактах с применением химических (биологических) агентов, крайне возрос в последнее время [1-4, 7, 9-14]. Как правило, оценка последствий, при таких видах эмиссии, выполняется на базе специализированных математических моделей. В Украине такими специализированными моделями является методика ОНД-86 и методика прогноза последствий аварий на химически опасных объектах и транспорте. Как известно, эти

методики имеют ряд ограничений: методики не учитывают нестационарность формирования зон загрязнения в атмосфере, нет учета процессов атмосферной диффузии и т.д. Иным подходом, является применение моделей Гаусса или математических моделей, основанных на аналитическом решении уравнения массопереноса. Область применения этих моделей также ограничена. Поэтому, более эффективным подходом является создание численных моделей, позволяющих учитывать специфику тех

или иных выбросов опасных веществ в атмосферу. Разрабатываемые аналитические, численные модели основываются на решении уравнения конвективно-диффузионного рассеивания примеси. Такое решение этого уравнения, при заданных краевых условиях, называется решением «прямой задачей» [5-7, 11].

Однако, существует класс задач, для решения которых более эффективным является иной подход, который основывается на решении сопряженного уравнения. В данной работе рассмотрим этот подход, для решения задач, связанных с эмиссией опасных веществ при терактах.

**Целью** данной работы является разработка численной модели для решения задач в области прогнозирования загрязнения атмосферного воздуха на базе сопряженного уравнения. Будет рассматриваться проблема загрязнения атмосферного воздуха в случае теракта с применением химически опасных веществ.

**Постановка задачи.** Рассматривается выброс химически опасного вещества в случае теракта. Ставится задача по определению территории, где выброс создаст в некоторой точке (область «интереса») опасное по величине загрязнение в определенный момент времени. Зная эту территорию, можно эффективно организовать на ней защиту от теракта и минимизировать его последствия.

**Прогнозирование загрязнения атмосферы.** Если рассматривается задача по определению зон загрязнения в атмосфере в случае выброса примеси от некоторого источника, то необходимо решить «прямую» задачу массопереноса. При решении такой задачи используется уравнение массопереноса (1). При этом необходимо подчеркнуть, что в этом случае всегда известны координаты источника выброса (в двумерном случае - это координаты  $x_0, y_0$ ) [2, 4, 6, 10]:

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

где  $C$  – концентрация примеси в атмосферном воздухе;  $\sigma$  – коэффициент, учитывающий распад примеси и вымывание ее осадками;  $\mu_x, \mu_y$  – коэффициенты атмосферной турбулентной диффузии;  $u, v$  – компоненты вектора скорости воздушного потока;  $w_s$  – скорость гравитационного оседания примеси;  $Q_i(t)$  – интенсивность эмиссии химического агента;  $\delta(x-x_0)\delta(y-y_0)$  – обозначение дельта-функции Дирака;  $t$  – время.

Краевые условия для уравнения (1) записываются так [6]:

$$C=C_0 \text{ при } t=0,$$

$C=0$  на границах расчетной области, где  $C_0$  – известная величина.

Применение численных моделей, основанных на уравнении (1) для решения ряда прикладных задач (аварийное загрязнение атмосферы и т.д.) приведено, в частности в [2-4, 8].

Особенностью решения задач на базе уравнения (1) является задание физических параметров, характерных для региона: скорость, направление ветра, класс устойчивости атмосферы.

При решении «прямой» задачи обязательно задается интенсивность  $Q$  источника эмиссии, режим его работы и его координаты. Результатом решения прямой задачи является поле концентрации химического агента для различных моментов времени. С помощью такого поля имеется возможность определить, когда в определенной точке  $r_i = (x_i, y_i)$  (точка «интереса»), в момент времени  $\tau$  концентрация опасного вещества начинает превышать некоторое пороговое значение  $\varphi$ .

Если рассматривать задачи прогноза уровня загрязнения атмосферы при теракте, сопровождающемся выбросом химически опасных веществ, то это та ситуация, когда координаты источника эмиссии  $x_0, y_0$

– заранее неизвестны. Будем считать, то известны координаты точки «интереса»  $r_i = (x_i, y_i)$  - объекта атаки (например, важное административное здание и т.п.). Масса химически опасного вещества – также заранее неизвестна, но можно предположить, что она *не будет* превосходить некоторой величины  $M_{\max}$ , соответствующей той массе, которую можно максимально близко и «незаметно» доставить к объекту атаки («точка интереса»). Теперь, если поставить задачу по определению территории, где выброс опасных веществ при теракте приведет к появлению опасных концентраций в точке «интереса» в определенный момент времени. То есть, требуется найти область размещения источника выброса так, чтобы в определенной точке  $r_i = (x_i, y_i)$  в момент времени  $t$  концентрация опасного вещества не превышала некоторое заданное значение  $\phi$ , т.е.

$$C(r_i, \tau) < \phi.$$

Такое решение может быть найдено путем последовательного решения «прямой» задачи, т.е. решения уравнения (1) для различных точек эмиссии. Очевидно, что этот подход не является рациональным, поскольку требуется решение большого числа прямых задач. В качестве иного подхода, может быть подход, предложенный Г.И. Марчуком [6] – т.е. решение сопряженного уравнения

$$-\frac{\partial C^*}{\partial t} - \frac{\partial u C^*}{\partial x} - \frac{\partial v C^*}{\partial y} + \sigma C^* = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial C^*}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial C^*}{\partial y} \right) + p \quad (2)$$

где  $C^*$  – функция, сопряженная с функцией  $C$ ,  $p$  – некоторая функция [6].

Краевые условия для сопряженной задачи записываются так:

$C^* = C_T^*$  – концентрация химического агента в атмосферном воздухе при  $t=T$ ;  
 $C^*=0$  – на границах расчетной области.

Вид функции  $p$  - может быть крайне разнообразным [6]. В данной работе вид функции  $p$  будет следующим:

$$p(x, y, t) = \delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(t - \tau). \quad (3)$$

Также будем считать, что выброс при теракте является залповым. Если найдено решение сопряженного уравнения (2), на следующем этапе необходимо найти значение функционала вида [6]

$$I = Q \int_0^T C^*(r_0, t) dt. \quad (4)$$

Построив линии этого функционала, мы находим решение поставленной задачи.

Для решения сопряженной задачи, т.е. уравнения (2), следуя [6], введем новые переменные:

$$u' = -u, \quad v' = -v, \quad t' = T - t.$$

Отметим, что решение сопряженной задачи начинается с момента времени  $t=T$ .

При использовании новых переменных, уравнение (2) принимает вид уравнения (1). Далее, проведем аппроксимацию производных, следуя [2, 4, 8]. Аппроксимация производной по времени осуществляется так:

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

Далее, в формулах, символ «\*» будем опускать.

Первые производные аппроксимируются следующим образом [8]

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

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

где  $u^+ = \frac{u + |u|}{2}; \quad u^- = \frac{u - |u|}{2}; \quad v^+ = \frac{v + |v|}{2};$

$$v^- = \frac{v - |v|}{2}.$$

Далее, выполняем аппроксимацию первых производных [8]:

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

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

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

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

Для аппроксимации вторых производных применяем следующие формулы [8]:

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

$$- \mu_x \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1},$$

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

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

Используя приведенные формулы аппроксимации, записываем разностный аналог исходного уравнения (1):

$$\frac{C_{ij}^{n+1} - C_{ij}^n}{\Delta t} + L_x^+ C^{n+1} + L_x^- C^{n+1} + L_y^+ C^{n+1} + L_y^- C^{n+1} + \sigma C_{ij}^{n+1} =$$

$$= (M_{xx}^+ C^{n+1} + L_{xx}^- C^{n+1} + L_{yy}^+ C^{n+1} + L_{yy}^- C^{n+1}) + Q_{ij} \delta_{ij}.$$

Теперь проведем расщепление разностного уравнения (3) на четыре шага [8]. Уравнения расщепления на каждом шаге записываются так:

на первом шаге ( $k = \frac{1}{4}$ ):

$$\frac{C_{i,j}^{n+k} - C_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{i,j}^k =$$

$$= \frac{1}{4} (M_{xx}^+ C^k + M_{xx}^- C^n + M_{yy}^+ C^k + M_{yy}^- C^n),$$

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

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

$$= \frac{1}{4} (M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c),$$

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

применяется зависимость (5);

на четвертом шаге ( $k = n + 1$ ;

$c = n + \frac{3}{4}$ ) применяется зависимость (4).

Искомое значение функции  $C$  на каждом расчетном шаге определяется по формуле «бегущего счета». На последнем расчетном шаге имеем уравнение

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} = P.$$

Для решения данного уравнения применяется использовался метод Эйлера.

Для программной реализации разработанной численной модели использовался FORTRAN.

Ниже представлены результаты решения модельной задачи на базе разработанной численной модели. Рассматривался выброс хлора. Два различных направления ветра показано стрелкой на рис.1, 2. На этих рисунках представлены линии функционала (4), определенные после решения сопряженного уравнения (2).

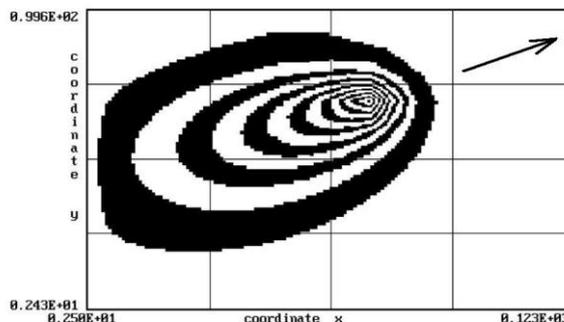


Рис. 1. Изолинии функционала ( $t=0,49$  – время безразмерное)

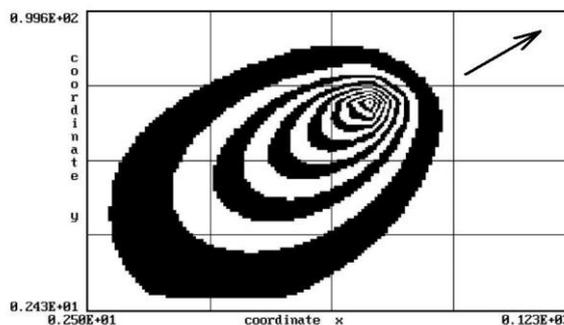


Рис. 2. Изолинии функционала ( $t=0,49$  – время безразмерное)

Представленные линии функционала позволяют выявить такую область размещения источника эмиссии, в которой, к моменту времени  $t=0,49$ , в точке «интереса»  $x=63$ ,  $y=78$  (координаты безразмерные) – концентрация хлора превысит заданное

значение  $\phi$ . Этому положению соответствует значение (изолиния) функционала (4), удовлетворяющая неравенству

$$I(r_i, \tau) < \phi$$

Отметим, что значение  $\phi$  - известно, например, это смертельная концентрация хлора.

Отметим, что на решение задачи требуется 2сек.

**Выводы.** Рассмотрена численная модель для решения сопряженных задач в области загрязнения атмосферного воздуха при залповом выбросе химически опасных веществ. Решение задачи основывается на численном интегрировании уравнения, которое является сопряженным к уравнению переноса примеси в атмосфере. Для численного интегрирования сопряженного уравнения применена неявная разностная схема. Дальнейшее совершенствование данного направления следует проводить в направлении создания 3-D численной модели, позволяющей решать сопряженные задачи в случае эмиссии химически опасного вещества в условиях застройки.

#### ЛІТЕРАТУРА:

1. Алымов, В. Т. Техногенный риск: Анализ и оценка: учеб. пособие для вузов / В. Т. Алымов, Н. П. Тарасова. – Москва: Академкнига, 2004. – 118 с.
2. Беляев, Н. Н. Защита зданий от проникновения в них опасных веществ: монография / Н. Н. Беляев, Е. Ю. Гунько, Н. В. Росточило. – Днепропетровск: Акцент ПП, 2014. – 136 с.
3. Оценка техногенного риска при эмиссии опасных веществ на железнодорожном транспорте / Н. Н. Беляев, Е. Ю. Гунько, П. С. Кириченко, Л. Я. Мунтян. – Кривой Рог: Р. А. Козлов, 2017. – 127 с.
4. Беляев Н.Н. Экспресс оценка территориального риска при выбросе химического агента в случае теракта / Н.Н. Беляев, В.А. Козачина, И.В. Калашников // Науковий вісник будівництва. – 2017. – Т.89, № 3. – С. 128-132.
5. Біляєв М.М. Оцінка стану атмосферного повітря в промисловій зоні / М.М. Біляєв, Т.І. Русакова // Науковий вісник будівництва. – 2017. – Т.89, № 3. – С. 136-141.
6. Марчук, Г.И. (1982). Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Г.И. Марчук. – М.: Наука. Главное издательство физико-математической литературы, 1982. – 320 с.
7. Стоецкий, В. Ф. Оценка риска при авариях техногенного характера / В. Ф. Стоецкий, В. И. Голинько, Л. В. Дранишников // Наук. вісн. НГУ. – 2014. – № 3. – С. 117–124.
8. 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.
9. Barret, A. M. Mathematical Modeling and Decision Analysis for Terrorism Defense: Assessing Chlorine Truck Attack Consequence and Countermeasure Cost Effectiveness: Degree of Doctor of Philosophy / Anthony Michael Barret. – Carnegie Mellon University. – Pittsburg, Pennsylvania, 2009. – 123 p.
10. Berlov, O. V. Atmosphere protection in case of emergency during transportation of dangerous cargo / O. V. Berlov // Наука та прогрес транспорту. – 2016. – № 1 (61). – С. 48–54.
11. Biliaiev, M.M. Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography / M.M. Biliaiev // NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security. – 2011. – P. 87-91.
12. Biliaiev, M. M. Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography / M. M. Biliaiev, M. M. Kharytonov // NATO Science for Peace and Security. Series C: Environmental Security. – Dordrecht, 2012. – P. 87–91.
13. Effect of barriers on the status of atmospheric pollution by mathematical modeling / Zahra Naserzadeh, Farideh Atabi, Faramarz Moattar and Naser Moharram Nejad // Biosci. Biotech. Res. Comm. – Vol. 10(1). – 2017. – P. 192-204.
14. The analysis of the use of mathematical modeling for emergency planning purposes / Ondrej Zavila, Pavel Dobes, Jakub Dlabka, Jan Bitta // Bezpecnostni vyzkum. The science for population protection. – №2. – 2015. – P. 1-9.

**Біляєв М.М., Калашніков І.В., Машихіна П.Б. ЗАСТОСУВАННЯ СПРЯЖЕНОГО РІВНЯННЯ ДЛЯ РОЗВ'ЯЗКУ ЗАДАЧ У ПРОБЛЕМІ ЗАБРУДНЕННЯ АТМОСФЕРНОГО ПОВІТРЯ.** Метою роботи є розробка чисельної моделі для розв'язання пов'язаних за-

дач в області забруднення атмосферного повітря при емісії хімічно небезпечних речовин у разі аварій або терактів. Модель орієнтована на експрес оцінку можливих зон розміщення джерела емісії, щоб в заданій точці «інтересу» концентрація не перевищувала граничного рівня. Методика досліджень складається в застосуванні методу чисельного інтегрування двомірного диференціального рівняння масопереносу, яке моделює поширення в атмосферному повітрі хімічно небезпечної речовини. Розглядається рівняння, яке є зв'язаним до рівняння масопереносу. За допомогою цього рівняння визначається зона, де розміщення джерела емісії може призвести до виникнення небезпечних концентрацій, для певного моменту часу, в точці «інтересу». Ця інформація дає можливість виявити підзони, де емісія небезпечної речовини, в разі аварії, теракту призведе до небажаних наслідків. Для розв'язання пов'язаної задачі використовується підхід, запропонований Г.І. Марчуком. На основі розробленої чисельної моделі є можливість виконувати розв'язання як прямої задачі – розрахунок зон забруднення в атмосфері при відомому положенні джерела емісії, так і пов'язаної задачі. Представлені результати обчислювального експерименту. Запропоновано нову чисельну модель, що дозволяє розв'язати пов'язану задачу в області забруднення атмосферного повітря при емісії хімічно небезпечних речовин – визначити зони, де викид забруднюючої речовини може призвести до небажаних наслідків у точці «інтересу». Модель може бути використана для проведення серійних розрахунків при розробці ПЛАС. Модель дозволяє врахувати вплив метеоумов в даному регіоні, атмосферної дифузії, потужності викиду при проведенні обчислювального експерименту.

**Ключові слова:** пов'язана задача, забруднення атмосфери, емісія хімічно небезпечних речовин.

**Biliaiev M. M., Kalashnikov I. V., Mashykhina P.B. TERRITORIAL RISK ASSESMENT IN URBAN REGION OF TERROR ACT WITH CHEMICAL AGENT.** The purpose of the work is to develop a numerical model for solving associated problems in the field of atmospheric air pollution during the emission of chemically hazardous substances in the event of accidents or terrorist attacks. The model is oriented to the rapid assessment of possible emission source allocation zones, so that at a given point of "interest" the concentration does not exceed the threshold level. The research method consists in applying the method of numerical integration of the two-dimensional differential equation of mass transfer, which simulates the propagation of a chemically dangerous substance in the atmospheric air. An equation is considered that is conjugate to the mass transfer equation. With the help of this equation, a zone is determined where the location of the emission source can lead to the emergence of dangerous concentrations, for a certain time, at the point of "interest". This information makes it possible to identify subzones where the emission of a dangerous substance, in case of an accident, a terrorist act will lead to undesirable consequences. For the solution of the conjugate problem, the approach proposed by G.I. Marchuk. On the basis of the developed numerical model, it is possible to carry out solutions as a direct problem – the calculation of contamination zones in the atmosphere at a known position of the emission source and the associated problem. The results of a numerical experiment are presented.

**Keywords:** conjugate task, atmosphere pollution, emission of chemically hazardous substances.