

УДК 502.36/.504.3.054:656.2

ОЦЕНКА УРОВНЯ ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ПРИ РАБОТЕ МАНЕВРОВОГО ТЕПЛОВОЗА

БЕЛЯЕВ Н.Н.¹, д.т.н., профессор**ГУНЬКО Е.Ю.², к.т.н., доцент****МУНТЯН Л.Я.³**

¹ Кафедра «Гидравлика и водоснабжение», Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, ул. Лазаряна, 2, 49010, Днепропетровск, Украина, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0002-1531-7882

² Кафедра «Гидравлика и водоснабжение», Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, ул. Лазаряна, 2, 49010, Днепропетровск, Украина, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0001-9257-763X

^{3*} Кафедра «Гидравлика и водоснабжение», Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, ул. Лазаряна, 2, 49010, Днепропетровск, Украина, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0002-1659-7740

Цель. Разработка метода оценки экологической безопасности при эксплуатации тепловозов, позволяющий учесть пространственный перенос примеси, метеорологические параметры атмосферы, процессы химической трансформации выбросов. **Методика.** Основу предложенного метода составляет численное моделирование процесса переноса химически опасного вещества в атмосфере. Основой численной модели является уравнение массопереноса химически опасных веществ. Данное уравнение учитывает рассеивание в атмосфере опасного вещества за счет ветра и атмосферной диффузии. Для численного интегрирования уравнения переноса химически опасного вещества в атмосфере применяется неявная разностная схема расщепления. На основе построенной численной модели разработан метод оценки потенциального территориального риска и создан код на алгоритмическом языке Фортран. Разработанная численная модель позволяет учитывать реальные параметры метеоситуации, режим эмиссии химически опасного вещества, мощность эмиссии, движение источника эмиссии. Проведен вычислительный эксперимент по оценке уровня загрязнения атмосферы на железнодорожной станции Днепропетровск-Грузовой при движении маневрового тепловоза ЧМЭЗ. **Результаты.** Предложенный метод позволяет оперативно рассчитать динамику формирования зоны загрязнения в приземном слое атмосферы и оценить влияние выбросов от тепловоза на загрязнение воздушной среды в селитебной зоне. Метод позволяет определить размеры зоны загрязнения при движении тепловоза. **Научная новизна.** Создан новый метод оценки уровня загрязнения приземного слоя атмосферы при движении тепловоза. Метод дает возможность оценить уровень экологической безопасности с учетом метеоситуации, маршрута движения тепловоза, интенсивности эмиссии загрязняющих веществ. При моделировании учитывается химическая трансформация в атмосфере выбросов от двигателя тепловоза. Расчет выполняется на базе трехмерных уравнений массопереноса. Выполнен расчет уровня загрязнения атмосферы при работе маневрового тепловоза на станции Днепропетровск-Грузовой. **Практическая значимость.** Разработанный метод оценки уровня экологической безопасности при движении тепловозов может быть использован для определения зон риска на примагистральной территории. Представлены результаты оценки уровня загрязнения приземного слоя атмосферы на станции Днепропетровск-Грузовой.

Ключевые слова: загрязнение атмосферы; химическая трансформация веществ в атмосфере; численное моделирование; экологическая безопасность

ASSESSMENT OF ENVIRONMENTAL SAFETY FOR LOCOMOTIVE

BILIAIEV M.M.¹, Dr. Sc. (Tech.), Prof.**GUNKO O.Yu.², Sc. (Tech.), associate Prof.****MUNTIAN L.Y.^{3*}**

¹Dep. «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: gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0001-9257-763X

³Dep. «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 0000-0002-1659-7740

Purpose. Development of a method of environmental safety assessment of the operation of locomotives, which allows to take into account the spatial transfer of impurities, meteorological parameters of the atmosphere, the chemical transformation processes emissions. **Methodology.** The basis of the proposed method of numerical simulation of the transport of dangerous chemical substances in the atmosphere. The basis of the numerical model is the equation of mass transfer of chemically hazardous substances. This equation takes into account the dispersion in the atmosphere of dangerous substances due to the wind and atmospheric diffusion. For numerical simulations of the transport of dangerous chemical substances in the atmosphere is used implicit finite-difference splitting scheme. Based on the constructed numerical model was developed method for the assessment of potential territorial risk and generated code in algorithmic language Fortran. The developed numerical model allows to take into account the real parameters of the meteorological situation, the mode of emission of chemically hazardous substances, power emission, the movement of the source emission. A computational experiment to assess the level of air pollution at the railway station Dnepropetrovsk-Gruzovoy when driving shunting locomotives ЧМЭЗ. **Findings.** The proposed method allows to calculate the dynamics of formation of zones of pollution in the atmospheric boundary layer and to assess the impact of emissions from locomotives on air pollution in the residential area. The method allows to determine the size of the zone of contamination during the movement of the locomotive. **Originality.** Created a new method of assessing the level of pollution ground atmospheric layer during the movement of the locomotive. The method makes it possible to assess the level of environmental safety with regard to meteorological conditions, the route of the locomotive, the intensity of the emission of pollutants. In the simulation is taken into account chemical transformation in the atmosphere emissions from the engine of the locomotive. The calculation is performed on the basis of three-dimensional equations of mass transfer. The calculation of the level of air pollution when working shunting locomotives at the station Dnepropetrovsk-Gruzovoy. **Practical value.** Developed method of estimation of level of ecological safety of diesel locomotives can be used to define risk areas on primary string site. Presents the results of assessing the level of pollution in the atmospheric surface layer at the station Dnepropetrovsk-Gruzovoy.

Keywords: air pollution; chemical transformation of substances in the atmosphere; numerical modeling; environmental safety

ОЦІНКА РІВНЯ ЕКОЛОГІЧНОЇ БЕЗПЕКИ ПІД ЧАС РОБОТИ МАНЕВРОВОГО ТЕПЛОВОЗУ

БІЛЯЄВ М.М.¹, д.т.н., професор
ГУНЬКО О.Ю.², к.т.н., доцент
МУНТЯН Л.Я.^{3*}

¹ Кафедра «Гідравліка та водопостачання», Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, вул. Лазаряна, 2, 49010, Дніпропетровськ, Україна, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0002-1531-7882

^{2*} Кафедра «Гідравліка та водопостачання», Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, вул. Лазаряна, 2, 49010, Дніпропетровськ, Україна, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0001-9257-763X

³ Кафедра «Гідравліка та водопостачання», Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, вул. Лазаряна, 2, 49010, Дніпропетровськ, Україна, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID 0000-0002-1659-7740

Мета. Розробка методу оцінки екологічної безпеки при експлуатації тепловозів, що дозволяє врахувати просторовий перенос домішки, метеорологічні параметри атмосфери, процеси хімічної трансформації викидів. **Методика.** Основу запропонованого методу становить чисельне моделювання процесу переносу хімічно небезпечної речовини в атмосфері. Основою чисельної моделі є рівняння масопереносу хімічно небезпечних речовин. Дане рівняння враховує розсіювання в атмосфері небезпечної речовини за рахунок вітру і атмосферної дифузії. Для чисельного інтегрування рівняння переносу хімічно небезпечної речовини в атмосфері застосовується неявна різницева схема розщеплення. На основі побудованої чисельної моделі розроблено метод оцінки потенційного територіального ризику і створений код алгоритмічною мовою Фортран. Розроблена чисельна модель дозволяє враховувати реальні параметри метеоситуації, режим емісії хімічно небезпечної речовини, потужність емісії, рух джерела емісії. Проведено обчислювальний експеримент по оцінці рівня забруднення атмосфери на залізничній станції Дніпропетровськ-Вантажний при русі маневрового тепловоза ЧМЕЗ. **Результати.** Запропонований метод дозволяє оперативного розрахувати динаміку формування зони забруднення в приземному шарі атмосфери і оцінити вплив викидів від тепловоза на забруднення повітряної середовища в селитебной зоні. Метод дозволяє визначити розміри зони забруднення при русі тепловоза. **Наукова новизна.** Створено новий метод оцінки рівня забруднення приземного шару атмосфери при русі тепловоза. Метод дає можливість оцінити рівень екологічної безпеки з урахуванням метеоситуації, маршруту руху тепловоза, інтенсивності емісії забруднюючих речовин. При моделюванні враховується хімічна трансформація в атмосфері викидів від двигуна тепловоза. Розрахунок виконується на базі тривимірних рівнянь масопереносу. Виконаний розрахунок рівня забруднення атмосфери при роботі маневрового тепловоза на станції Дніпропетровськ-Вантажний. **Практична значимість.** Розроблений метод оцінки рівня екологічної безпеки при русі тепловозів може бути використаний для визначення зон ризику на примігистральній території. Представлені результати оцінки рівня забруднення приземного шару атмосфери на станції Дніпропетровськ-Вантажний.

Ключові слова: забруднення атмосфери; хімічна трансформація речовин в атмосфері; чисельне моделювання; екологічна безпека

Вступление. При работе тепловозов происходит интенсивная эмиссия вредных веществ в атмосферу. Это приводит к загрязнению приземного слоя атмосферы не только на железнодорожной магистрали, но и в прилегающих к ней селитебных зонах. Это ставит важную задачу оценки уровня экологической безопасности при эксплуатации данного вида транспорта.

Анализ литературы. Как известно, в настоящее время, для оценки уровня загрязнения приземного слоя атмосферы при эксплуатации тепловозов используют нормативную методику ОНД-86 [2]. Иным подходом для решения такой задачи может быть использование аналитического решения уравнения переноса примеси [2,7,8] или модели Гаусса [3,6,10]. Полученные на базе этих моделей прогнозные данные могут быть использованы также для оценки риска [5,15]. Однако перечисленные модели не дают возможности при решении рассматриваемой задачи учитывать движение тепловоза и химическую трансформацию выбросов в атмосфере. Альтернативным методом прогноза является создание численных моделей для оценки уровня загрязнения атмосферы [1,4,9,11-13]. Однако, в настоящее время в Украине существует дефицит численных моделей, позволяющих прогнозировать уровень загрязнения атмосферы при эксплуатации тепловозов.



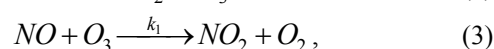
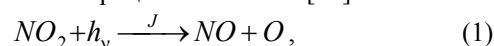
Рис. 1. Вид расчетной области (станция Днепропетровск–Грузовой): 1 – начальное положение тепловоза для момента времени $t=0$; 2 – положение рецептора; 3 – селитебная зона /

The computational area (Dnepropetrovsk Station – Gruzovoy): 1 – the initial position of the locomotive at time $t=0$; 2 – receptor position; 3 – residential area

Целью данной работы является разработка метода оценки экологической безопасности при эксплуатации тепловозов.

Моделирование химических трансформаций выбросов в атмосфере. Основой прогнозирования

уровня загрязнения атмосферы при эмиссии загрязняющих веществ является уравнение массопереноса [1,2,4,9,11]. Это уравнение учитывает скорость ветра, атмосферную диффузию, параметры эмиссии загрязняющего вещества. Следует отметить, что выбросы от тепловоза и других транспортных средств, использующих дизельное топливо, претерпевают химические трансформации в атмосфере. В настоящее время, этот процесс наиболее детально изучен, для ситуации, когда под воздействием солнечного света между веществами, поступающими с отработавшими газами, и оксидами азота идет фотохимическая реакция и образуется так называемый фотохимический смог. Основными реакциями в этом процессе являются [14]:



В данной работе будем рассматривать процесс химических превращений окиси азота и двуокиси азота, которые содержатся в выбросах от тепловоза. Для решения этой задачи необходимо численно проинтегрировать уравнение массопереноса для каждого загрязнителя, содержащегося в выбросах (NO , NO_2) и уравнение массопереноса для O_3 :

$$\frac{\partial[NO]}{\partial t} + \frac{\partial u[NO]}{\partial x} + \frac{\partial v[NO]}{\partial y} + \frac{\partial w[NO]}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(\mu_x \frac{\partial[NO]}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_y \frac{\partial[NO]}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mu_z \frac{\partial[NO]}{\partial z}) + \quad (4)$$

$$+ Q_{NO} \delta(x - x_0(t)) \delta(y - y_0(t)) \delta(z - z_0),$$

$$\frac{\partial[NO_2]}{\partial t} + \frac{\partial u[NO_2]}{\partial x} + \frac{\partial v[NO_2]}{\partial y} + \frac{\partial w[NO_2]}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(\mu_x \frac{\partial[NO_2]}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_y \frac{\partial[NO_2]}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mu_z \frac{\partial[NO_2]}{\partial z}) + \quad (5)$$

$$+ Q_{NO_2} \delta(x - x_0(t)) \delta(y - y_0(t)) \delta(z - z_0),$$

$$\frac{\partial[O_3]}{\partial t} + \frac{\partial u[O_3]}{\partial x} + \frac{\partial v[O_3]}{\partial y} + \frac{\partial w[O_3]}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}(\mu_x \frac{\partial[O_3]}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\mu_y \frac{\partial[O_3]}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\mu_z \frac{\partial[O_3]}{\partial z}), \quad (6)$$

где Q_{NO} – интенсивность эмиссии NO от тепловоза, Q_{NO_2} – интенсивность эмиссии NO_2 от тепловоза; u, v, w – компоненты вектора скорости воздушной среды; μ_x, μ_y, μ_z – коэффициенты турбулентной диффузии; $x_0(t), y_0(t), z_0$ координаты источника эмиссии загрязняющего вещества; $\delta(x - x_0(t)), \delta(y - y_0(t)) \delta(z - z_0)$ – дельта-функция Дирака.

Далее, необходимо выполнить расчет процесса химической трансформации указанных загрязнителей, в каждой разностной ячейке, на базе следующих уравнений [14]:

$$\frac{d[NO]}{dt} = -k_1[NO][O_3] + J[NO_2], \quad (7)$$

$$\frac{d[NO_2]}{dt} = k_1[NO][O_3] - J[NO_2], \quad (8)$$

$$\frac{d[O_3]}{dt} = -k_1[NO][O_3] + J[NO_2]. \quad (9)$$

где k_1 , J – константы скорости химической реакции.

Для решения уравнений (7) – (9) используется метод Эйлера.

Краевые условия для уравнений массопереноса рассмотрены в [4,9].

Изменение скорости ветра с высотой учитывается, в построенной модели, следующей зависимостью [2]:

$$\omega = \omega_1 \frac{\lg z/z_0}{\lg z_1/z_0},$$

где ω_1 – значение скорости ветра на высоте z_1 (высота флюгера); z_0 – шероховатость поверхности.

Шероховатость подстилающей поверхности определяется экспериментальным путем и ориентировочно составляет: для почвы без покрова $z_0 \approx 0,005$ м; для леса $z_0 \approx 1$ м; для травы $z_0 \approx 0,01$ м. Для зданий эта величина рассчитывается так:

$$z_0 = (1,0 - 1,4) \cdot H,$$

где H – высота здания.

Для расчета коэффициентов диффузии используются зависимости [2]:

$$\mu_y = k_0 \cdot u, \quad k_0 = 0,1, \quad \mu_z = k_1 \cdot \left(\frac{Z}{Z_1} \right)^m,$$

где Z – высота, на которой определяется величина коэффициента μ_z ; $m \approx 1$, $\mu_x = \mu_y$.

Для расчета массы примеси, попавшей на конкретный участок земной поверхности, при эмиссии примеси от источника загрязнения на транспорте используется зависимость:

$$G = (w_s + \mu_z \alpha) C(x, y, z = 0) T,$$

где S – рассматриваемый участок поверхности (лес, посеы и т.д.). T – промежуток времени; $\alpha > 0$ – коэффициент, который учитывает «захват» части примеси поверхностью земли.

Метод численного решения. В общем виде уравнение массопереноса конкретной примеси можно записать так:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial (wC)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \\ + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \sum Q_i(t) \delta(r - r_0), \end{aligned} \quad (10)$$

где C – концентрация примеси (окись азота и т.д.); $r_0 = (x_0(t), y_0(t), z_0)$ – координаты источника эмиссии.

Рассмотрим основные черты разностной схемы для решения уравнения массопереноса. Численно решение уравнения массопереноса осуществляется на прямоугольной разностной сетке.

Проведем следующую аппроксимацию производных, входящих в уравнение [1,9].

Для аппроксимации производной по времени будем использовать формулу:

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

Перед дискретизацией конвективных производных запишем их в виде суммы знакопостоянных величин:

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

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

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

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

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

Разностные аппроксимации первых производных имеют вид:

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

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

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

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

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

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

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

и т.д. – обозначение разностных операторов при аппроксимации конвективных производных, предложенные в работе [9].

Разностные аппроксимации вторых производных записываются так [9]:

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

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

Для сокращения записи разностных уравнений здесь, как и выше используются обозначения вида

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

и т.д.

Используя введенные обозначения разностных операторов можно представить исходное уравнение переноса в виде:

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

На следующем этапе построения разностной схемы осуществим расщепление данного разностного уравнения на четыре шаге при интегрировании на временном интервале dt так

– на первом шаге $k = \frac{1}{4}$:

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

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

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

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

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

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

– на четвертом шаге $k = n + 1; c = n + \frac{3}{4}$:

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

В дискретном виде дельта-функция Дирака «размазывается» на одну разностную ячейку так, чтобы сохранить суммарное количество q_i загрязняющего вещества, которое выбрасывается из ячейки.

Практическая реализация модели. На основе данной разностной схемы разработана компьютерная модель «Emission». Для программирования использовался язык FORTRAN. Данная модель ориентирована на решение таких задач:

1. Прогноз уровня загрязнения атмосферы от передвижных источников на железнодорожном транспорте (локомотивы, вагоны).
2. Прогноз уровня загрязнения атмосферы при аварийных выбросах, разливах на железнодорожном транспорте.
3. Проведение экологической экспертизы для оценки уровня загрязнения примыкающей территории.

В данной работе рассматривается решение задачи по оценке уровня экологической безопасности с учетом химической трансформации загрязнителей при работе маневрового тепловоза ЧМЭЗ. Рассматривается передвижение тепловоза на станции Днепропетровск – Грузовой (рис. 1). В непосредственной близости от магистрали располагается жилая застройка (позиция 3 на рис.1). Расчет выполнялся при следующих исходных данных: размеры расчетной области 500м * 500м; скорость ветра на высоте флюгера 4 м/с; ветер – восточный; интенсивность диоксида азота – 1.98 г/с. Скорость движения тепловоза 10 км/ч. В качестве начального условия задавалось, что фоновая концентрация NO и NO_2 в расчетной области равна нулю, а концентрация O_3 принята равной 0,15 мг/м³. Оценка уровня экологической безопасности проводится на базе численного интегрирования приведенных выше уравнений массопереноса и уравнений трансформации выбросов оксида азота и диоксида азота в атмосфере.

На рис.2, в качестве иллюстрации, представлены результаты расчета зоны загрязнения атмосферы (уровень $z = 6$ м) для определенного момента времени после начала движения тепловоза от позиции 1, указанной на рис.1.



Рис. 2. Зона загрязнения (NO_2) для момента времени $t=43c$ /

Contamination area (NO_2) for time $t=43 sec$

Как видно из рис.2, при движении тепловоза его выбросы покрывают селитебную зону. Для количественной оценки такого загрязнения в табл.1 представлены данные по значению концентрации NO_2 в точке расположения рецептора (здание в селитебной зоне, позиция 2 на рис.1).

Таблица 1

Динамика загрязнения воздушной среды (эмиссия NO_2) в точке расположения рецептора (уровень 6м)

время	32с	97с	137с
Концентрация (доли ПДК)	0,22 мг/м ³ (2,5 ПДК)	0,57 мг/м ³ (6,7 ПДК)	0,14 мг/м ³ (1,6 ПДК)

Как видно из табл.1 при движении тепловоза происходит существенное загрязнение атмосферы в точке расположения рецептора.

Выводы. В работе построена 3-D численная модель для оценки уровня экологической безопасности при эксплуатации тепловозов. Модель позволяет учесть процесс химической трансформации выбросов в атмосфере. Дальнейшее совершенствование данного направления следует проводить в направлении создания модели для расчета рассеивания примеси совместно с расчетом аэродинамики воздушного потока при обтекании зданий на примагистральной территории.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. 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.
2. Берлянд М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы / М. Е. Берлянд. – Ленинград : Гидрометеопиздат, 1985. – 273 с.
3. Гусев Н. Г. Радиоактивные выбросы в биосфере / Н. Г. Гусев, В. А. Беляев. – Москва : Энергоатомиздат, 1991. – 257 с.
4. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Марчук Г. И. – Москва : Наука, 1982. – 320 с.
5. Методика визначення ризиків та їх прийнятних рівнів для декларування безпеки об'єктів підвищеної небезпеки // Міністерство праці та соціальної політики України. Наказ №637 від 04.12.2002. – Київ, 2002. – 25 с.
6. Меньшиков В. В. Анализ риска при систематическом загрязнении атмосферного воздуха опасными химическими веществами / В. В. Меньшиков, А. А. Швыряев, Т. В. Захарова // Учебное пособие. – М.: Изд-во Химич. фак. Моск. ун-та, 2003.
7. Рудаков Д. В. Модель рассеивания примеси в приземном слое атмосферы над поверхностью со сложным рельефом / Д. В. Рудаков // Вісник ДНУ. Серія : Механіка. Вип. 8. – 2004. – № 6. – Т. 1. – С. 89–97.
8. Светличная С. Д. Оценка полученной токсодозы при распространении первичного облака токсического вещества / С. Д. Светличная // 36. наук. пр. «Проблеми надзвичайних ситуацій». – 2011. – Вип. 13. – С. 127–132.
9. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев. – Київ : Наук. думка, 1997. – 368 с.
10. Швыряев А. А. Оценка риска воздействия загрязнения атмосферы в исследуемом регионе / А. А. Швыряев, В. В. Меньшиков. – Москва : Изд-во МГУ. – 2004. – 124 с.
11. Biliaiev N. N. Expert system to predict the atmosphere pollution in the case of the accident at the solid rocket propellant storage / N. N. Biliaiev, A. V. Berlov // Сб. научн. тр. «Стр-во, материаловедение, машиностроение». – Дніпропетровськ : ПДАБА, 2014. – Вып. 76. – С. 57–61.
12. Belyaev M. Air Pollution Modelling of Technogenic Catastrophes caused by Terrorist Attacks on Rail Transport of Chemical Substances.// Simulation and Assessment of Chemical Processes in a Multiphase Environment . NATO Science for Peace and / Security Series. – C.: Environmental Security, Springer, 2007. P.327 – 336.
13. Biliaiev M. M. Numerical simulation of indoor air pollution and atmosphere pollution for regions having complex topography / M. M. Biliaiev, M. M. Kharytonov // Conference Abstracts of 31st NATO / SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and it's Application. – Torino, Italy, 2010. – № P1.7.
14. Ingo During. A new simplified NO/NO₂ conversion model under consideration of direct NO₂-emissions / Ingo During, W. Bachlin, M. Ketzel // Meteorologische Zeitschrift. – 2011. – Vol. 20, No. 1, 067-073, February. – P. 67-73.
15. Maximum Possible Risk Modelling / M. Schutz, M. Cohen, T. Whalen, T. Taylor // Proc. of the 11th Joint Conf. on Information Sciences. – Netherlands : Atlantis Press, 2008. – P. 1–6. doi: org/10.2991/jcis.2008.15.

REFERENCES

1. Belyaev N.N., Gunko Ye.Yu., Mashikhina P.B. *Matematicheskoye modelirovaniye v zadachakh ekologicheskoy bezopasnosti i monitoringa chrezvychaynykh situatsiy* [Mathematical modeling in problems of environmental safety and monitoring emergencies]. Dnepropetrovsk, Aktsent PP Publ., 2013, 159 p.
2. Berlyand M.Ye. *Prognoz i regulirovaniye zagryazneniya atmosfery* [Prediction and regulation of air pollution]. Leningrad, Gidrometeoizdat Publ., 1985. 273 p.
3. Gusev N.G., Belyaev V.A. *Radioaktivnyye vybrosty v biosfere* [Radioactive emissions in the biosphere]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 257 p.
4. Marchuk G.I. *Matematicheskoye modelirovaniye v probleme okruzhayushchey sredy* [Mathematical modeling in the environmental problem]. Moscow, Nauka Publ., 1982. 320 p.
5. *Metodyka vyznachennia ryzykiv ta yikh pryiniatnykh rivniv dlia deklaruvannya bezpeky obektiv pid-vyshchenoi nebezpeky* [Risks definition technique and their acceptable levels for the declaration of security high-risk facilities]. Kyiv, 2002. 25 p.
6. Menshikov V.V., Shvyryayev A.A., Zakharova T.V. *Analiz ryska pry systematicheskoy zahriazneniyi atmosfernoho vozdukh opasnymi khymicheskymy veshchestvamy* [Risk analysis the systematic pollution of hazardous chemicals]. *Uchebnoye posobyie*. Educational manual. Moscow, Izdatelstvo Khymicheskoho fakulteta MGU Publ., 2003.
7. Rudakov D.V. Model rasseivaniya primesi v prizemnom sloye atmosfery nad poverkhnostyu so slozhnym relefom [Model of impurity dispersion in the atmospheric surface layer over a surface with complex relief]. *Visnyk Dnipropetrovskoho natsionalnoho universytetu. Seriya: Mekhanika. Vypusk 8* [Bulletin of Oles Honchar Dnipropetrovsk National University. Series: Mechanics. Volume 8], 2004, no. 6, vol 1, pp. 89-97.
8. Svetlichnaya S.D. Otsenka poluchennoy toksodozy pri rasprostraneni pervaichnogo oblaka toksicheskogo veshchestva [Evaluation of the toxic dose received at the distribution of the primary cloud of toxic substances]. *Zbirnyk naukovykh prats «Problemy nadzvychnykh sytuatsii»* [Proc. «Problems of emergency situations»], 2011, issue 13, pp. 127-132.
9. Zgurovskiy M.Z., Skopetskiy V.V., Khrushch V.K., Belyaev N.N. *Chislennoye modelirovaniye rasprostraneniya zagryazneniya v okruzhayushchey srede* [Numerical modelling of pollution spreading in the environment]. Kyiv, Naukova dumka Publ., 1997. 368 p.
10. Shvyryayev A.A., Menshikov V.V. *Otsenka riska vozdeystviya zagryazneniya atmosfery v issleduyemom regione* [Risk assessment of pollution in the research area]. Moscow, Izdatelstvo MGU Publ., 2004. 124 p.
11. Biliaiev N.N., Berlov A.V. Expert system to predict the atmosphere pollution in the case of the accident at the solid rocket propellant storage. *Sbornik nauchnykh trudov «Stroitelstvo, materialovedeniye, mashinostroeniye»* [Proc. of «Construction, Material science, Mechanical engineering»]. Dnepropetrovsk, 2014, issue 76, pp. 57-61.
12. Belyaev M. Air Pollution Modelling of Technogenic Catastrophes caused by Terrorist Attacks on Rail Transport of Chemical Substances.// Simulation and Assessment of Chemical Processes in a Multiphase Environment . NATO Science for Peace and / Security Series. – C.: Environmental Security, Springer, 2007. P.327 – 336.
13. Biliaiev M. M. Numerical simulation of indoor air pollution and atmosphere pollution for regions having complex topography / M. M. Biliaiev, M. M. Kharytonov // Conference Abstracts of 31st NATO / SPS International Technical Meeting on Air Pollution Modelling and it's Application. – Torino, Italy, 2010. – № P1.7.
14. Ingo During. A new simplified NO/NO₂ conversion model under consideration of direct NO₂-emissions / Ingo During, W. Bachlin, M. Ketzel // Meteorologische Zeitschrift. – 2011. – Vol. 20, No. 1, 067-073, February. – P. 67-73.
15. Maximum Possible Risk Modelling / M. Schutz, M. Cohen, T. Whalen, T. Taylor // Proc. of the 11th Joint Conf. on Information Sciences. – Netherlands : Atlantis Press, 2008. – P. 1–6. doi: org/10.2991/jcis.2008.15.

Статья рекомендована к публикации д.физ.-мат.н., проф. С. А. Пичуговым (Украина), д.т.н., проф. С. З. Полищуком (Украина)

Поступила в редколлегию: 20.04.2016