

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ ПРИ АВАРИЙНОМ ВЫБРОСЕ ХИМИЧЕСКИ ОПАСНОГО ВЕЩЕСТВА

Розглянута чисельна модель забруднення атмосфери при аварійних викидах. Наводяться результати обчислювального експерименту.

Рассмотрена численная модель загрязнения атмосферы при аварийных выбросах. Приводятся результаты вычислительного эксперимента.

A numerical model to simulate the atmosphere pollution after accident ejections is considered. The model is based on the K-gradient transport model and equation of potential flow. The results of numerical experiment are presented.

**Введение.** В настоящее время, в области экологической безопасности, особое внимание привлекают задачи прогноза аварийного загрязнения атмосферы химически опасными веществами [1]. Особую опасность представляют залповые выбросы, когда в атмосферу за малый промежуток времени поступают токсичные газы. Актуальность данной задачи связана с тем, что даже при небольших объемах эмиссии опасных веществ, в атмосфере может образоваться достаточно обширная зона загрязнения и создается риск токсичного поражения людей. Поэтому получение научно – обоснованной информации о размерах и интенсивности зоны химического заражения при разработке ПЛАСа (план ликвидации аварийной ситуации) – остается важной прикладной задачей. На практике для решения этой задачи применяют нормативную методику [5], но эта методика имеет ряд существенных недостатков: в ней нет учета атмосферных процессов рассеивания – конвекции и диффузии, методика не позволяет рассчитать динамику загрязнения атмосферы и выявить изменение формы зоны химического загрязнения с течением времени и т.д. Поэтому для оценки масштаба угрозы при аварии следует использовать более адекватные математические модели. Целью данной работы является построение численной модели аварийного загрязнения атмосферы, которая дает возможность рассчитывать процесс рассеивания химически опасных веществ в атмосфере с учетом основных физических факторов, влияющих на этот процесс.

**Математическая модель.** Для моделирования динамики загрязнения атмосферы при аварийном выбросе химически опасного вещества используется двухмерное уравнение переноса [2–4]

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u\varphi}{\partial x} + \frac{\partial v\varphi}{\partial y} + \bar{\sigma}\varphi = \mu\Delta\varphi + \sum_{i=1}^N q_i(t)\delta(r - r_i),$$

где  $u, v$  – компоненты вектора скорости воздушного потока;  $r_i$  – координаты точечного источника выброса,  $r_i = (x_i, y_i)$ ;  $\varphi$  – усредненное по высоте переноса значение концентрации токсичного газа;  $\mu$  – турбулентный коэффициент атмосферной диффузии;  $\bar{\sigma}$  – коэффициент, учитывающий изменение concentra-

ции токсичного газа в атмосфере за счет химических реакций, вымывания осадками;  $q_i$  – усредненное значение мощности эмиссии токсичного газа;  $\delta(x - x_i), \delta(y - y_i)$  – дельта-функция Дирака;  $x_i, y_i$  – координаты расположения точечного источника эмиссии;  $t$  – время.

Процесс выброса опасного вещества при аварии моделируется действием точечного источника интенсивности  $q$ , который осуществляет эмиссию химически опасного вещества в течении заданного времени  $t$ . При малых значениях времени  $t$  уравнение (1) моделирует рассеивание загрязняющего вещества в атмосфере при аварийных выбросах типа «разрыв газопровода» и т.п.

Постановка краевых условий для уравнения переноса рассмотрено в работах [3,4]

**Метод решения.** Для численного интегрирования уравнения рассеивания опасного вещества в атмосфере (1) применяется неявная разностная схема, разработанная в работе [3]. Расчет проводится на равномерной разностной сетке. Рассмотрим основные принципы построения данной схемы

Производную за временем аппроксимируем разделенной разностью «назад»:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = \frac{\varphi_{i,j}^{n+1} - \varphi_{i,j}^n}{\Delta t}.$$

Конвективные производные запишем в виде

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial u \varphi}{\partial x} &= \frac{\partial u^+ \varphi}{\partial x} + \frac{\partial u^- \varphi}{\partial x}, \\ \frac{\partial v \varphi}{\partial y} &= \frac{\partial v^+ \varphi}{\partial y} + \frac{\partial v^- \varphi}{\partial y}, \end{aligned} \right\}$$

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

Аппроксимируем конвективные производные разделенными разностями «против потока» на верхнем временном слое следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial u^+ \varphi}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1,j}^+ \varphi_{i,j}^{n+1} - u_{i,j}^+ \varphi_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} & L_x^+ \varphi^{n+1}, \\ \frac{\partial u^- \varphi}{\partial x} &\approx \frac{u_{i+1,j}^- \varphi_{i+1,j}^{n+1} - u_{i,j}^- \varphi_{i,j}^{n+1}}{\Delta x} & L_x^- \varphi^{n+1}, \\ \frac{\partial v^+ \varphi}{\partial y} &\approx \frac{v_{i,j+1}^+ \varphi_{i,j}^{n+1} - v_{i,j}^+ \varphi_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} & L_y^+ \varphi^{n+1}, \\ \frac{\partial v^- \varphi}{\partial y} &\approx \frac{v_{i,j+1}^- \varphi_{i,j+1}^{n+1} - v_{i,j}^- \varphi_{i,j}^{n+1}}{\Delta y} & L_y^- \varphi^{n+1}. \end{aligned} \right\}$$

Компоненты скорости  $u$  будем определять на вертикальных гранях разно-

стных ячеек, а компоненты скорости  $v$  - на горизонтальных гранях.

Вторые производные аппроксимируем так:

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x}(\mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x}) &\approx \tilde{\mu}_x \frac{\varphi_{i+1,j}^{n+1} - \varphi_{i,j}^{n+1}}{\Delta x^2} - \tilde{\mu}_x \frac{\varphi_{i,j}^{n+1} - \varphi_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} & M_{xx}^- \varphi^{n+1} + M_{xx}^+ \varphi^{n+1}, \\ \frac{\partial}{\partial y}(\mu_y \frac{\partial \varphi}{\partial y}) &\approx \tilde{\mu}_y \frac{\varphi_{i,j+1}^{n+1} - \varphi_{i,j}^{n+1}}{\Delta y^2} - \tilde{\mu}_y \frac{\varphi_{i,j}^{n+1} - \varphi_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} & M_{yy}^- \varphi^{n+1} + M_{yy}^+ \varphi^{n+1}. \end{aligned} \right\}$$

Здесь  $L_x^+, L_x^-, L_y^+, L_y^-, M_{xx}^+, M_{xx}^-, M_{yy}^+, M_{yy}^-$  - условные обозначения разностных операторов [3]. С учетом приведенных выше обозначений запишем разностный аналог уравнения переноса

$$\begin{aligned} &\frac{\varphi_{i,j}^{n+1} - \varphi_{i,j}^n}{\Delta t} + L_x^+ \varphi^{n+1} + L_x^- \varphi^{n+1} + L_y^+ \varphi^{n+1} + L_y^- \varphi^{n+1} + \sigma \varphi_{i,j}^{n+1} = \\ &= (M_{xx}^+ \varphi^{n+1} + M_{xx}^- \varphi^{n+1} + M_{yy}^+ \varphi^{n+1} + M_{yy}^- \varphi^{n+1}) + q_{i,j} \delta_{i,j}. \end{aligned}$$

Расщепим данное разностное уравнение на четыре разностных уравнения так, чтобы на каждом шаге учитывалось лишь одно направление переноса примеси, обусловленное знаком при конвективных производных. В этом случае разностные уравнения имеют вид [3]:

на первом шаге расщепления  $k = \frac{1}{4} + n$ :

$$\begin{aligned} &\frac{\varphi_{i,j}^k - \varphi_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L_x^+ \varphi^k + L_y^+ \varphi^k) + \frac{\sigma}{4} \varphi_{i,j}^k = \\ &= \frac{1}{4}(M_{xx}^+ \varphi^k + M_{xx}^- \varphi^k + M_{yy}^+ \varphi^n + M_{yy}^- \varphi^n) + \sum_{l=1}^N \frac{\bar{q}_l}{4} \delta_l, \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} &\frac{\varphi_{i,j}^k - \varphi_{i,j}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L_x^- \varphi^k + L_y^- \varphi^k) + \frac{\sigma}{4} \varphi_{i,j}^k = \\ &= \frac{1}{4}(M_{xx}^- \varphi^k + M_{xx}^+ \varphi^c + M_{yy}^- \varphi^k + M_{yy}^+ \varphi^c) + \sum_{l=1}^N \frac{\bar{q}_l}{4} \delta_l, \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} &\frac{\varphi_{i,j}^k - \varphi_{i,j}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L_x^+ \varphi^k + L_y^- \varphi^k) + \frac{\sigma}{4} \varphi_{i,j}^k = \\ &= \frac{1}{4}(M_{xx}^- \varphi^{\tilde{n}} + M_{xx}^+ \varphi^k + M_{yy}^- \varphi^k + M_{yy}^+ \varphi^c) + \sum_{l=1}^N \frac{\bar{q}_l}{4} \delta_l, \end{aligned}$$

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

$$\frac{\varphi_{i,j}^k - \varphi_{i,j}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2}(L_x^- \varphi^k + L_y^+ \varphi^k) + \frac{\sigma}{4} \varphi_{i,j}^k = \frac{1}{4}(M_{xx}^- \varphi^k + M_{xx}^+ \varphi^c + M_{yy}^- \varphi^c + M_{yy}^+ \varphi^k) + \sum_{l=1}^N \frac{\bar{q}_l}{4} \delta_l.$$

Расчет неизвестного значения концентрации токсичного газа определяется по явной схеме на каждом дробном шаге.

**Реализация модели.** На основе рассмотренной математической модели разработана программа расчета уровня загрязнения атмосферы при аварийных выбросах химически опасных веществ. Для реализации модели необходимо ввести следующую информацию:

1. размеры расчетной области.
2. скорость и направление ветра, значение коэффициента турбулентной диффузии.
3. координаты места аварийного выброса химически опасного вещества.
4. промежуток времени, в течение которого действовал источник выброса.
5. интенсивность выброса химически опасного вещества при аварии.

Разработанная модель применена для решения следующей задачи. Рассматривается аварийный выброс аммиака на промышленном объекте. На промплощадке располагается несколько зданий, где находится производственный персонал. Вблизи объекта расположена жилая застройка.

Параметры задачи: размеры расчетной области: 500 м x 500 м; высота осреднения – 50 м; интенсивность выброса – 6000 г/с;  $u = 3$  м/с; значения коэффициента диффузии  $1 \text{ м}^2/\text{с}$ ; аварийный выброс происходит в течении 10 с;  $\sigma = 0$ .

Результаты решения задачи показаны на рис. 1, 2, где представлена зона загрязнения атмосферы на промплощадке для двух моментов времени.



Рис. 1. Зона загрязнения атмосферы для момента времени  $t = 27$  с после аварии



Рис. 2. Зона загрязнения атмосферы для момента времени  $t = 61\text{с}$  после аварии

Из данных рисунков видно, что зона загрязнения имеет вид близкий к окружности, но видно вытягивание этой зоны в направлении ветра. Видно, что за достаточно короткий промежуток времени зона загрязнения накрыла значительную часть расположенных вблизи места аварии. Очевидно, что за такой короткий промежуток времени люди не смогут покинуть здания. Поэтому в случае возможной аварии на объекте создаётся большой риск токсичного поражения людей.

**Выводы.** В работе рассмотрено численное решение задачи о загрязнении атмосферы при аварийном выбросе химически опасного вещества. Проведенный вычислительный эксперимент показал эффективность построенной численной модели. Дальнейшее совершенствование данного направления необходимо вести по созданию гидродинамической модели переноса загрязнителя в атмосфере.

#### Список литературы

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий. Учебное пособие в 6-ти книгах / Под редакцией В. А. Котляревского и А. В. Забегаева). – М.: Из-во АСВ, 2001 – 200 с.
2. Берлянд М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы / Берлянд М. Е. – Л. : Гидрометеоздат, 1985. – 273 с.
3. Згуровский М. З. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев. – К.: Наук. думка. – 1997. – 368 с.
4. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды. – М.: Наука. – 1982. – 320 с.
5. Методика прогнозування наслідків впливу (викиду) небезпечних хімічних речовин при аваріях на промислових об'єктах і транспорті. – К., 2001. – 33 с.

*Рекомендовано до публікації д.т.н. Голіньком В.І.  
Надійшла до редакції 20.04.2012*