

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРЫ И ПОДСТИЛАЮЩЕЙ ПОВЕРХНОСТИ ПРИ АВАРИЯХ НА ЖЕЛЕЗНОДОРОЖНОМ ТРАНСПОРТЕ

Розроблено двомірну комп'ютерну модель прогнозу забруднення атмосфери після аварійного розливу зрідженого аміаку. Модель заснована на чисельному інтегруванні рівняння дифузії і конвективного переносу домішки. Розрахунок здійснюється по неявній різницевій схемі розщеплення. Наведено результати практичного застосування розробленої моделі.

Разработана двухмерная компьютерная модель прогноза загрязнения атмосферы после аварийного разлива сжиженного аммиака. Модель основана на численном интегрировании уравнения диффузии и конвективного переноса примеси. Расчет осуществляется по неявной разностной схеме расщепления. Приведены результаты практического применения разработанной модели.

A 2D computer model to simulate air pollution after liquid ammonia leakage accidents has been developed. The model is based on numeric integration of diffusion equation and convectional transfer of the impurity. The calculation has been performed according to subtractive scheme of decomposition. Results of practical application of the developed model are presented.

### Введение

Анализ современного состояния проблемы по охране окружающей среды показывает актуальность задачи прогноза состояния окружающей среды после аварий, терактов. Особый ущерб, на грани экологической катастрофы, может быть вызван аварией на производстве и, в частности, на железнодорожном транспорте, осуществляющем перевозку опасных грузов в больших объемах [1; 5; 8].

Рассматривая проблему прогноза ущерба после аварий, можно выделить два класса задач:

- оценка экологического ущерба, возможности поражения людей в случае возможной аварии.
- задачи оценочного прогноза (оценка ущерба, нанесенного окружающей среде, после аварии).

Для задач обоих классов характерна одна особенность – это неполнота исходной информации, которая используется для расчетов. Действительно, в случае задачи предупредительного прогноза – неизвестными являются место аварии, интенсивность выброса, метеофакторы и т. д. Исследователь сам «назначает» в модели, где и когда произойдет авария, основываясь на анализе существующих данных, оценки состояния железнодорожного полотна и даже интуиции. При решении задачи оценочного прогноза исследователь не обладает полной информацией о профиле ветра, атмосферной

стратификации (непосредственно на месте аварии), динамике формирования зоны разлива, с поверхности которой происходит испарение вредных веществ и т. п. Тем не менее, исследователю необходимо научно обоснованный прогноз последствий аварии для оценки ущерба. Решение данной проблемы может быть осуществлено только на базе математического – компьютерного моделирования [2; 6].

Как известно [6], современной тенденцией разработки компьютерных моделей прогноза качества окружающей среды, является создание моделей различного уровня для решения прогнозных задач. Это предоставляет пользователю возможность выбора инструмента для решения поставленной задачи в зависимости от наличия конкретной исходной информации, времени, необходимого для получения решения, и т. д.

Особую актуальность в настоящее время приобретает разработка универсальных моделей, позволяющих экономично, на основе достаточно ограниченного числа исходных данных (скорость ветра, параметры атмосферной диффузии) осуществлять прогноз воздействия аварии, теракта на окружающую среду, и при этом давать возможность расчета практически всех возможных сценариев нештатной ситуации. При этом очень важным является то, что для работы с такими моделями и созданными на их базе компьютерными технологиями, не требовалось бы дополнительной переподготовки пользователей, уже работающих в области прогнозирования состояния окружающей среды.

Аналитические методики расчета процессов загрязнения атмосферы после аварии рассмотрены в работах [2; 3]. Однако эти методики обладают определенной узостью. Оценка уровня загрязнения атмосферы на базе эмпирических моделей рассмотрена в работах [1; 4; 7]. В работе [5] представлены результаты экспериментального исследования, связанного с разлитием аммиака.

Авторами настоящей работы разработана компьютерная модель и на ее базе создан пакет программ расчета динамики загрязнения атмосферы, подстилающей поверхности после аварийных (залповых, полунепрерывных, циклических) выбросов токсичных веществ. Отличительной особенностью разработанного инструмента является возможность моделирования широкого спектра аварийных ситуаций, характерных для производства и, в частности, для объектов железнодорожного транспорта; например, аварийные разливы перегретых жидкостей. Для такого класса задач характерно: выброс массы токсичного вещества, которая образует первичное облако; формирование зоны загрязнения от испаряющегося на поверхности земли разлива.

### 1. Постановка задачи, математическая модель

Рассматриваются задачи оценки уровня загрязнения атмосферы, подстилающей поверхности после аварийного разлива перегретых жидкостей и, в частности, аммиака при его транспортировке железнодорожным транспортом.

Целью работы является:

1. Разработка методики расчета динамики изменения концентрации аммиака в атмосфере после аварии, на основе ограниченного числа исходных данных.

2. Разработка методики оценки количества аммиака, осевшего на конкретный объект (лес, сельскохозяйственные угодья, и т. д.), на основе которой может быть выполнен расчет эколого-экономического ущерба, нанесенного каждой экологически значимой зоне.

Поскольку аварии на железнодорожном транспорте, могут привести к выбросу и разливу значительного объема токсичных веществ, то зона загрязнения атмосферы может иметь большую протяженность. В США для оценки ущерба после возможной аварии при транспортировке железнодорожным транспортом химического оружия, расчет возможного ущерба проводится для зон протяженностью не менее 200 км. Таким образом, в том случае целесообразно использовать двухмерную, осреднен-

ную по высоте переноса  $H$ , модель градиентного типа

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} + \sigma \varphi = \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) + \left( \mu_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) + \sum q_i(t) \delta(r - r_i), \quad (1)$$

где  $\varphi$  – концентрация загрязняющего вещества в единице объема воздуха;  $u, v$  – компоненты вектора скорости воздушной среды в декартовой системе координат  $X, Y$ , плоскость  $XOY$  соответствует земле;  $\sigma$  – коэффициент, учитывающий процессы химического разложения загрязнения, гравитационное осаждение, аккумуляции загрязнения подстилающей поверхности;  $\mu = (\mu_x, \mu_y)$  – коэффициент турбулентной диффузии;  $q_i$  – интенсивность точечных источников загрязнения;  $r_i = (x_i, y_i)$  – месторасположение точечных источников загрязнения;  $\delta(r - r_i)$  – дельта-функция Дирака;  $t$  – время.

Выбор модели (1) для экспресс-оценки экологического ущерба обосновывается тем, что ее реализация возможна при использовании ограниченного числа исходных данных:

- направление и скорость ветра;
- класс стабильности атмосферы;
- метеоинформация об осадках, их интенсивности и зоны выпадения;
- размеры зоны разлива;
- масса разлитого груза при аварии.

Постановка краевых условий для уравнения (1) рассмотрена в работе [6]. Отметим, что при расчете залпового выброса загрязнителя, размеры первичного облака, образовавшегося при начальном быстром испарении аммиака, рассчитывается как объем первичного облака

$$V = \frac{22,4 \cdot \theta \cdot G}{\mu \cdot \varphi_{\text{стх}}},$$

где  $\theta = 0,5$  – коэффициент;  $\mu = 17$  – молекулярная масса аммиака;  $\varphi_{\text{стх}} = 19\%$  – объемная концентрация газовой смеси стехиометрического состава;  $G$  – быстро испарившаяся масса аммиака

$$G = K \cdot M,$$

где  $K$  – эмпирический коэффициент ( $K = 0,1$  при температуре  $t = 20$  °C);  $M$  – масса разлитого аммиака в результате аварии [1].

Интенсивность испарения аммиака с поверхности разлива  $S$  моделируется точечными источниками загрязнения:

$$q_i(t) = S_c \cdot Q_c,$$

где  $S_c$  – площадь разностной ячейки, входящей в зону разлива  $S$ ;  $Q_c$  – массовая скорость испарения аммиака, [г/м<sup>2</sup>/час].

Скорость испарения с поверхности зеркала разлива рассчитывается так [7]:

$$Q_c = (5,38 + 4,1v) P_{\text{нас}} \cdot \sqrt{\mu}. \quad (2)$$

Необходимо отметить, что в случае разлива на грунт, процесс испарения осуществляется не только с зеркала разлитой жидкости, но и с поверхности фильтрующегося аммиака, т. е. с границ раздела в грунте «жидкость – воздух в парах». Таким образом, для более точного учета количества испаряющегося аммиака в модели используется «корректированное» значение величины  $Q_c$ , которое примерно равно  $Q \approx 2Q_c$ .

Как отмечалось выше, рассматриваемый класс прикладных задач относится к задачам с «недоопределенными» исходными данными. Поэтому при выполнении предупредительного прогноза можно ограничиться зависимостью (2) для расчета величины аммиака, поступающего в атмосферу из зоны разлива. В случае решения задачи оценочного прогноза необходимо принимать во внимание доступную (если такая имеется) информацию о времени окончания испарения аммиака, количестве оставшегося аммиака на месте аварии.

## 2. Метод решения

Численное интегрирование уравнения (1) осуществляется на прямоугольной разностной сетке. Рассмотрим неявную разностную схему расщепления, которая положена в основу разработанного алгоритма.

Произведем следующую аппроксимацию производных, входящих в уравнение (1):

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} \approx \frac{\varphi_{ij}^{n+1} - \varphi_{ij}^n}{\Delta t},$$

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

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

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

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

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

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

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

Компоненты скорости потока  $u$  будем задавать на вертикальных гранях разностной ячейки, а компоненты скорости  $v$  – на горизонтальных гранях. Вторые производные аппроксимируем так:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right) \approx \tilde{\mu}_x \frac{\varphi_{i+1,j}^{n+1} - \varphi_{ij}^{n+1}}{\Delta x^2} - \\ - \tilde{\mu}_x \frac{\varphi_{ij}^{n+1} - \varphi_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- \varphi^{n+1} + M_{xx}^+ \varphi^{n+1};$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial \varphi}{\partial y} \right) \approx \tilde{\mu}_y \frac{\varphi_{i,j+1}^{n+1} - \varphi_{ij}^{n+1}}{\Delta y^2} - \\ - \tilde{\mu}_y \frac{\varphi_{ij}^{n+1} - \varphi_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y^2} = M_{yy}^- \varphi^{n+1} + M_{yy}^+ \varphi^{n+1},$$

где  $L_x^+$ ,  $L_x^-$ ,  $L_y^+$ ,  $L_y^-$ ,  $M_{xx}^+$ ,  $M_{xx}^-$ ,  $M_{yy}^+$ ,  $M_{yy}^-$  – условные обозначения разностных операторов.

С учетом этих обозначений разностный аналог уравнения (1) будет иметь вид

$$\frac{\varphi_{ij}^{n+1} - \varphi_{ij}^n}{\Delta t} + L_x^+ \varphi^{n+1} + L_x^- \varphi^{n+1} + L_y^+ \varphi^{n+1} + \\ + L_y^- \varphi^{n+1} + \sigma \varphi_{ij}^{n+1} = \left( M_{xx}^+ \varphi^{n+1} + M_{xx}^- \varphi^{n+1} + \right. \\ \left. + M_{yy}^+ \varphi^{n+1} + M_{yy}^- \varphi^{n+1} \right) + q_{ij} \delta_{ij}.$$

Обозначим через  $\delta_{ij}$  – число «1» или «0», в зависимости от того, расположен ли в данной ячейке источник загрязнения или нет. Значение  $q_{ij}$  равняется «размазанному» значению интенсивности источника загрязнения  $q_{ij} = q_k / \Delta x / \Delta y$ .

Расщепим решение данного разностного уравнения на 4 шага при интегрировании на временном интервале  $dt$ :

- на первом шаге  $k = \frac{1}{4}$  :

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

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

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

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

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

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

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

В данные разностные соотношения входит «возмущенный» коэффициент диффузии  $\tilde{\mu}$  [4].

На каждом шаге расщепления неизвестное значение определяется по методу бегущего счета.

В случае разлива, выброса в атмосферу токсичных веществ возникает необходимость расчета количества загрязнителя  $G$ , попавшего на тот или иной объект  $\Delta R$  (лес, поле и т. п.). Для оценки расчета этой величины, после оп-

ределения динамики поля концентрации загрязнителя, используется выражение

$$G = \int_{t_1}^{t_2} \iint_{\Delta R} \bar{\sigma} \varphi \, dx dy dt ,$$

где  $\bar{\sigma}$  – коэффициент, учитывающий аккумуляцию загрязняемым объектом [6; 2].

### 3. Результаты моделирования

На основе рассмотренной модели разностной схемы создан пакет программ «ВЫБРОС 2» (программы записаны на алгоритмическом языке FORTRAN-IV). Применение пакета программ для решения конкретной задачи рассматривается ниже.

**Пример.** Исходные данные: на участке железной дороги Днепродзержинск–Пятихатки произошла авария, в результате которой имел место аварийный разлив сниженного аммиака с образованием зоны разлива площадью  $S$ . Масса разлитого груза  $M = 120$  т. Аварийные бригады прибыли на место аварии только спустя 5 часов, т.е. когда аммиак полностью уже перешел в газообразное состояние. По имеющимся данным процесс испарения завершился примерно через 1 час после разлива. Класс стабильности атмосферы  $D$  (по шкале Гиффорда-Пасквила), высота приземного слоя  $H = 200$  м. По данным метеостанции – скорость ветра 2–3 м/с, направление ветра показано на рис. 1 стрелкой, азимут – 550. Осадков не было. Температура воздуха  $t = 20$  °С. Схема размещения экологически значимых объектах показана на рис. 1.

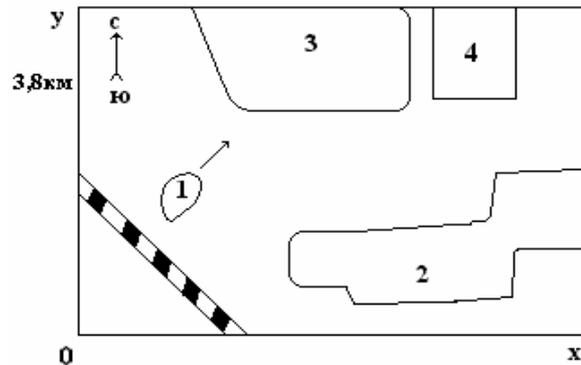


Рис. 1. Схема расчетной области:

1 – зона разлива аммиака; 2 – лес;

3 – сельскохозяйственные угодья (поле); 4 – сад

Требуется выполнить расчет динамики загрязнения атмосферы после аварии и оценить какое количество аммиака попало на конкретный экологически значимый объект. Результаты решения задачи показаны ниже.

На рис. 2–3 изображено поле концентрации аммиака в расчетной области для двух моментов времени после аварии, когда интенсивность загрязнения атмосферы и подстилающей поверхности обусловлены, в основном, миграцией первичного облака.

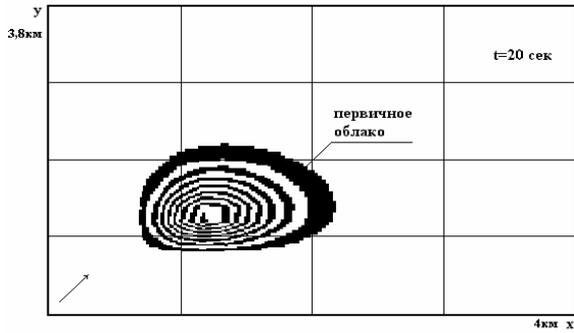


Рис. 2. Зона загрязнения атмосферы ( $z = 50$  м) после аварийного разлива аммиака,  $t = 20$  с

Из рис. 4 хорошо видно, что к моменту времени  $t = 2880$  с после аварии, первичное облако уже ушло из расчетной области, а над поверхностью земли начинает активно формироваться зона загрязнения от разлитого на грунт аммиака.

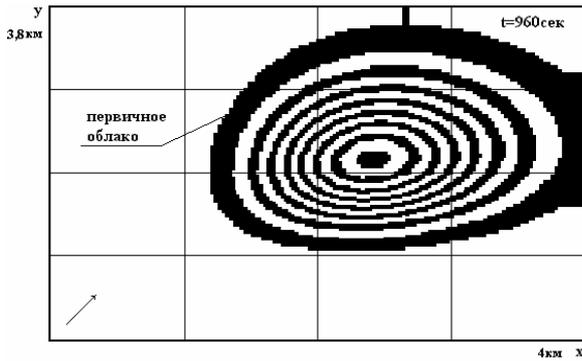


Рис. 3. Зона загрязнения атмосферы ( $z = 50$  м) после аварийного разлива аммиака,  $t = 960$  с

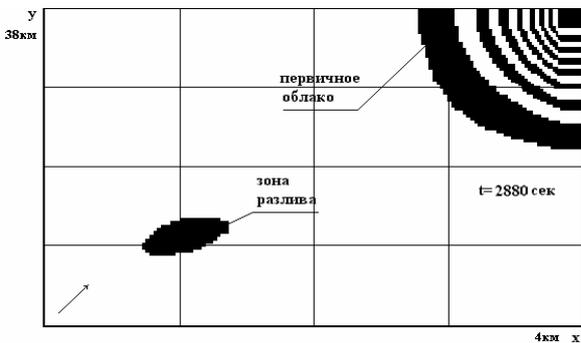


Рис.4. Зона загрязнения атмосферы ( $z = 50$  м) после аварийного разлива аммиака,  $t = 2880$  с

На рис. 5 показана зона загрязнения для момента времени  $t = 3600$  с, что соответствует моменту когда заканчивается испарение аммиака от зоны

разлива на поверхности грунта. Видно, что зона загрязнения представляет собой шлейф, ориентированный по направлению ветра. Это приводит к интенсивному загрязнению сада и леса (см. рис. 1). Более четко это видно из табл., где в безразмерном виде показано, какое количество аммиака попало на конкретный экологически значимый объект, за определенный промежуток времени.

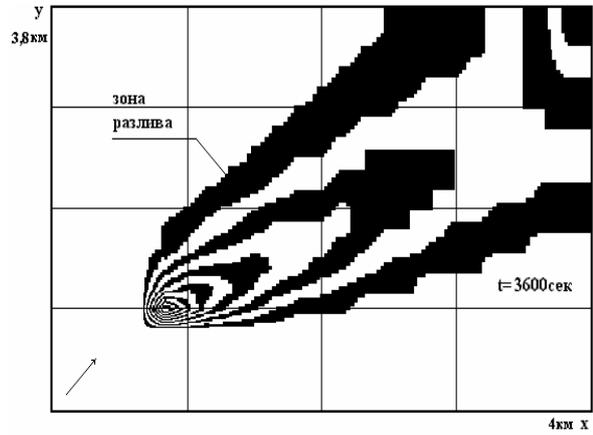


Рис. 5. Зона загрязнения атмосферы ( $z = 50$  м) после аварийного разлива аммиака,  $t = 3600$  с

Таблица

Безразмерное значение количества аммиака, попавшего на объект после аварии

$t, \text{с}$	480	1200	3600
поле	42	644	780
лес	58	$0,1 \cdot 10^5$	$0,3 \cdot 10^5$
сад	$0,2 \cdot 10^5$	$0,9 \cdot 10^5$	$0,1 \cdot 10^6$

Изолинии концентрации аммиака на рис. 6 соответствуют моменту времени  $t = 4560$  с, т. е. периоду, когда испарение с поверхности земли прекратилось и облако аммиака, образовавшееся над зоной разлива, сносится ветровым потоком.

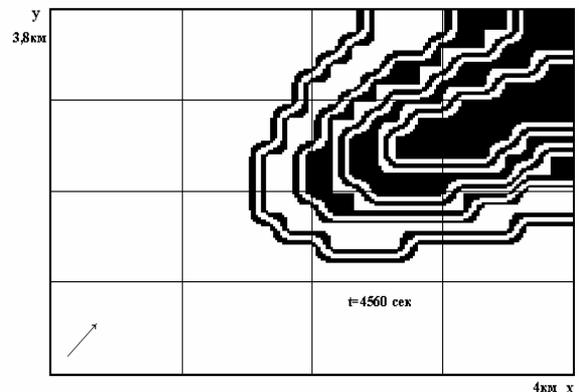


Рис. 6. Зона загрязнения атмосферы ( $z = 50$  м) после аварийного разлива аммиака,  $t = 4560$  с

На основе расчета данных, которые отражают количество аммиака, попавшего на конкретный объект (табл.) предлагается осуществить денежную оценку размера ущерба, нанесенного аварией. В этом случае денежная оценка ущерба может быть выражена соотношением (грн)

$$D = a \cdot K \cdot G ,$$

где  $G$  – общее количество загрязнителя, попавшего на объект за время  $T$ , после аварийного выброса;  $K$  – коэффициент (грн), учитывающий экологическую значимость объекта;  $a$  – коэффициент, учитывающий опасность загрязнителя.

Таким образом, величина ущерба для каждого объекта может быть дифференцирована и научно обосновано определена.

### Выводы

Разработанная компьютерная модель позволяет выполнить экспресс – расчет нестационарного процесса загрязнения атмосферы, подстилающей поверхности в случае разлива токсичных веществ, в том числе – и в случае перегретых жидкостей. Модель и созданная на ее базе методика позволяют оценить уровень загрязнения примыкающих объектов после аварии и на основе этой оценки выполнить расчет эколого-экономического ущерба. Время расчета составляет 3...5 с. Дальнейшее совершенствование модели необходимо осуществлять в направлении разработки универсального алгоритма, позволяющего учитывать влияние разнообразных метеорологических ситуаций (дождь, смена направления ветра) на процесс рассеивания токсичных веществ в атмосфере.

### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. Аварии и катастрофы. Предупреждение и ликвидация последствий. Учебное пособие в 5-ти книгах / Под редакцией В. А. Котляревского и А. В. Забегаева. – М.: Изд-во АСВ, 2001. – 200 с.
2. Беляев Н. Н. Прогнозирование качества воздушной среды методом вычислительного эксперимента / Н. Н. Беляев, Е. Д. Коренюк, В. К. Хрущ – Д.: Наука и образование, 2000. – 208 с.
3. Бруязцкий Е. В. Теория атмосферной диффузии радиоактивных выбросов. – К.: Институт гидромеханики НАН Украины, 2000. – 443 с.
4. Гринин А. С. Экологическая безопасность. Защита территории и населения при чрезвычайных ситуациях / А. С. Гринин, В. Н. Новиков. – М.: ФАИР-ПРЕСС, 2000. – 336 с.
5. Иванов Ю. А. Хранение и транспортировка жидкого аммиака / Ю. А. Иванов, И. И. Стижевский. – М.: Химия, 1991. – 80 с.
6. Згуровский М. З. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ, Н. Н. Беляев. – К.: Наукова думка, 1997. – 368 с.
7. Мацак В. Г. Гигиеническое значение скорости испарения и давления пара токсических веществ, применяемых в производстве / В. Г. Мацак, Л. К. Хоцянов. – М.: Медгиз, 1959. – 231 с.
8. Плахотник В. Н. Природоохранная деятельность на железнодорожном транспорте Украины: проблемы и решения / В. Н. Плахотник, Л. А. Ярышкина, В. И. Сираков и др. – К.: Транспорт Украины, 2001.

Поступила в редколлегию 28.05.03.