

DOI:

УДК 519.6

**М.М. Біляєв**, д.т.н., професор, e-mail: water.supply.treatment@gmail.com

Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту ім. академіка  
В. Лазаряна, м. Дніпро

**В.В. Біляєва**, к.т.н., доцент, e-mail: gidravlika2013@mail.ru

Дніпровський національний університет ім. О. Гончара, м. Дніпро

**О.В. Берлов**, к.т.н., доцент, e-mail: berlov@mail.pgasa.dp.ua

ДВНЗ «Придніпровська державна академія будівництва та архітектури», м. Дніпро

**І.В. Калашніков**, к.т.н., e-mail: u\_z\_p@ukr.net

ДП «Проектно-вишукувальний інститут залізничного транспорту «Укрзалізничпроект», м. Харків

## МАТЕМАТИЧНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗАТІКАННЯ ТОКСИЧНОГО ГАЗУ У ПРИМІЩЕННЯ ПРИ АВАРІЇ НА ПРОМИСЛОВОМУ МАЙДАНЧИКУ

*Представлена чисельна модель для розрахунку динаміки забруднення повітряного середовища всередині приміщення при затіканні в нього через систему вентиляції забрудненого атмосферного повітря. Процес моделювання ґрунтується на використанні дво-і тривимірних рівнянь масопереносу. Аеродинаміка повітряних потоків моделюється на базі рівняння для потенціалу швидкості.*

**Ключові слова:** математичне моделювання, забруднення, різницеві схеми.

*A numerical model is presented for calculating the dynamics of air pollution inside the room when flowing into it, through the ventilation system, of polluted atmospheric air. The modeling process is based on the use of two- and three-dimensional equations of mass transfer. Aerodynamics of air flow is modeled on the basis of the equation for the velocity potential.*

**Keywords:** mathematical modelling, pollution, difference schemes.

### Постановка проблеми

Емісія хімічно небезпечних речовин на промислових об'єктах, залізничних сортувальних станціях може привести до небезпечного забруднення атмосферного повітря. Ризику хімічного ураження зазнають не тільки люди на відкритій місцевості, а й люди всередині приміщень, куди надходить токсичний газ через систему вентиляції. Така ж небезпека виникає у разі терористичних актів із застосуванням хімічних агентів [1—3, 7]. У зв'язку з цим, при розробці ПЛАС (план ліквідації аварійної ситуації) виникає важлива задача — прогнозування рівня забруднення повітряного середовища, як на відкритій місцевості, так і всередині приміщень. Для практики вкрай важливо мати методи прогнозу, які дозволяли б розрахувати динаміку забруднення повітряного середовища усередині приміщень і оцінити ризик токсичного ураження людей в цих приміщеннях.

### Аналіз останніх досліджень та публікацій

Для прогнозування рівня хімічного зараження на відкритій місцевості широко використовується модель Гауса, на базі якої розроблено ряд комерційних програм типу «Токси», «Ам-миак», «SLAB». Ці програми не дозволяють врахувати вплив будівель на формування зон забруднення, але враховують швидкість вітру, атмосферну дифузію, висоту викиду. Іншим підходом до моделювання хімічного зараження на відкритій місцевості є використання CFD моделей для розрахунку поля швидкості вітрового потоку з урахуванням впливу будівель або рельєфу і подальшим розрахунком зон забруднення. Але, застосування CFD моделей (комерційні пакети типу ANSYS і т.д.) вимагає використання дуже потужних комп'ютерів і великих витрат комп'ютерного часу. Тому актуальною задачею є розробка швидкорухуючих математичних моделей для оцінки рівня хімічного зараження території і повітряного середовища усередині будівель, при аварійній емісії хімічно небезпечних речовин.

### Формулювання мети дослідження

Розробка чисельної моделі для оцінки рівня хімічного зараження на відкритій місцевості та всередині приміщень при аварійній емісії хімічно небезпечних речовин в умовах забудови.

### Виклад основного матеріалу

Розглядатиметься формування зон хімічного зараження на відкритій місцевості в умовах забудови і формування зон хімічного зараження всередині приміщень, з урахуванням розміщення в них перешкод (меблі і т.п.). У зв'язку з цим розв'язання даної задачі необхідно розбити на два етапи: перший етап — розв'язання аеродинамічної задачі: визначення нерівномірного поля швидкості вітрового потоку на відкритій місцевості (при наявності будівель) та визначення нерівномірного поля швидкості повітряного потоку всередині приміщень при роботі вентиляції. Другий етап — розв'язання задачі масопереносу токсичного газу на відкритій місцевості і всередині приміщень. Розглянемо докладніше моделі аеродинаміки і масопереносу.

**Модель аеродинаміки.** Для розробки швидкорахуючої чисельної моделі аеродинаміки вітрового потоку на відкритій місцевості використовуємо модель безвихрових течій ідеальної рідини (модель потенційної течії):

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = 0, \quad (1)$$

де  $P$  — потенціал швидкості.

Компоненти вектора швидкості вітрового потоку визначаються співвідношеннями:

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial P}{\partial y}. \quad (2)$$

Рівняння (1) буде використовуватися для розрахунку нерівномірного поля швидкості вітрового потоку при наявності забудови.

Для математичного моделювання процесу поширення хімічно небезпечної речовини на відкритій місцевості, в умовах забудови, застосовується рівняння Марчука Г.І., осереднене по висоті перенесення домішки [3—6, 9]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \sigma C = \operatorname{div}(\mu \operatorname{grad} C) + \sum_{i=1}^N Q_i(t) \delta(x - x_i) \delta(y - y_i), \quad (3)$$

де  $C$  — концентрація хімічного агента в атмосферному повітрі;  $\sigma$  — коефіцієнт, що враховує розпад хімічного агента і осідання на поверхню землі;  $u, v$  — компоненти вектора швидкості повітряного потоку;  $\mu = (\mu_x, \mu_y)$  — коефіцієнти атмосферної турбулентної дифузії;  $Q$  — інтенсивність викиду хімічного агента;  $\delta(x - x_i) \delta(y - y_i)$  — дельта-функція Дірака;  $x_i, y_i$  — координати джерела емісії хімічного агента;  $t$  — час.

Поле швидкості вітрового потоку в умовах забудови, для моделюючого рівняння (3), визначається на основі розв'язання аеродинамічної задачі, тобто шляхом розв'язання рівняння (1). Постановка крайових умов для моделюючих рівнянь (1), (2) розглянута в [1, 2, 8].

**Моделювання динаміки забруднення повітряного середовища в приміщенні.** Забруднене атмосферне повітря надходить в приміщення через систему вентиляції або за рахунок інфільтрації повітря через нещільності. Процес моделювання хімічного зараження повітряного середовища усередині приміщень, при затіканні в них забрудненого атмосферного повітря, розбивається на два етапи. На першому етапі здійснюється розрахунок аеродинаміки повітряних потоків всередині приміщення (при роботі вентиляції) на базі тривимірного рівняння для потенціалу швидкості

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial z^2} = 0, \quad (4)$$

де  $P$  — потенціал швидкості.

Компоненти вектора швидкості повітряного середовища всередині приміщення розраховується по залежностях:

$$u = \frac{\partial P}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial P}{\partial y}, \quad w = \frac{\partial P}{\partial z}. \quad (5)$$

На другому етапі рішення задачі, моделюється поширення токсичного газу всередині приміщення при його надходженні через систему вентиляції.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial wC}{\partial z} = \text{div}(\mu \text{grad} C). \quad (6)$$

Позначення величин в рівнянні (6) збігається з позначеннями для величин в рівнянні (3).

Постановка граничних умов для рівнянь (4), (5) і крайових умов для рівняння (6) розглянуто в роботі [1].

При застосуванні моделі (6) вважалося, що концентрація забруднювача в приміщенні дорівнює  $C = 0$  для моменту часу  $t = 0$ .

Відзначимо важливий момент розробленої моделі: концентрація  $C_{np}$  в припливному повітрі визначається розрахунковим шляхом, на основі розв'язання рівнянь (1), (3). Ця величина змінюється з часом, тому що відбувається формування шлейфу від джерела забруднення. Тому, концентрація хімічно небезпечної речовини в приміщенні також буде залежати від часу. Метою даної роботи було саме моделювання динаміки зміни зон хімічного зараження всередині приміщення при затіканні токсичного газу. Можна сказати, що вирішується сполучена задача: розрахунок зон хімічного зараження на відкритій місцевості, при наявності будівель і + затікання токсичного газу в ці будівлі. Цілком очевидно, що інтенсивність надходження токсичного газу в будівлі буде залежати від ряду факторів, у тому числі, від того місця де знаходиться повітрозабірник системи вентиляції.

**Метод розв'язання аеродинамічної задачі.** Для чисельного інтегрування двомірного рівняння для потенціалу швидкості застосовується метод сумарної апроксимації. Рівняння для потенціалу швидкості попередньо записується в еволюційному вигляді:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2}, \quad (7)$$

де  $t$  — фіктивний час, с.

Відомо, що при  $t \rightarrow \infty$  розв'язання даного рівняння буде прагнути до розв'язання рівняння Лапласа для потенціалу швидкості. При чисельному розв'язанні рівняння (7) необхідно задати поле потенціалу при  $t = 0$ . Наприклад, перед початком розрахунку, можна прийняти  $P = 0$  у всій розрахунковій області для  $t = 0$ .

Чисельне розв'язання рівняння (7) здійснюється на прямокутній сітці, функція  $P$  — визначається в центрі різницевих комірок. Розв'язання даного рівняння розщеплюється на два кроки. Різницеві рівняння на кожному кроці розщеплення записуються так:

$$\frac{P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - P_{i,j}^n}{\Delta t} = \left[ \frac{-P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i-1,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta x^2} \right] + \left[ \frac{-P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + P_{i,j-1}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta y^2} \right],$$

$$\frac{P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\Delta t} = \left[ \frac{P_{i+1,j}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta x^2} \right] + \left[ \frac{P_{i,j+1}^{n+1} - P_{i,j}^{n+1}}{\Delta y^2} \right].$$

На кожному кроці розщеплення невідоме значення потенціалу швидкості визначається за явною формулою біжучого рахунку. Розрахунок припиняється при виконанні умови:

$$\left| P_{i,j}^{n+1} - P_{i,j}^n \right| \leq \varepsilon,$$

де  $\varepsilon$  — мале число;  $n$  — номер ітерації.

Після визначення поля потенціалу швидкості розраховуються компоненти вектора швидкості повітряного середовища по залежностям:  $u_{ij} = \frac{P_{i,j} - P_{i-1,j}}{\Delta x}$ ,  $v_{ij} = \frac{P_{i,j} - P_{i,j-1}}{\Delta y}$ .

Компоненти вектора швидкості повітряного середовища розраховуються на гранях різницьких комірок (контрольних об'ємів), що дозволяє побудувати консервативну різницьку схему для рівняння переносу хімічно небезпечної речовини.

Для чисельного розв'язання тривимірного рівняння для потенціалу швидкості (4) застосовувався поперемінно-трикутний метод А.А. Самарського [5].

Для чисельного інтегрування рівняння масопереносу (3), (6) використовувалася неявна поперемінно-трикутна різницька схема [1, 3]. Для кодування різницьких рівнянь була використана алгоритмічна мова FORTRAN.

**Результати.** Розроблена чисельна модель була використана для вирішення модельної задачі. Розглядався промисловий майданчик, де розташовані дві будівлі. Емісія аміаку відбувається біля першої будівлі (рис. 1), протягом 10 хвилин. Ставиться задача розрахувати зону хімічного зараження на відкритій місцевості, а також зону зараження всередині приміщення, в якій затікає токсичний газ через систему вентиляції.

На першому етапі розрахунку визначалася зона зараження на відкритій місцевості. На рис. 1 представлена ця зона для моменту часу  $t = 35$  секунд після початку емісії аміаку.

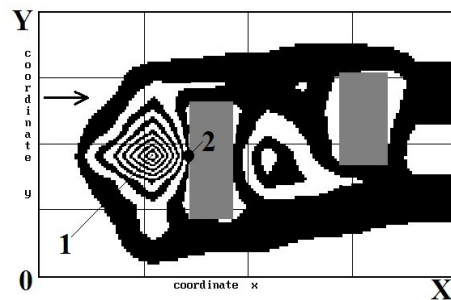


Рис. 1. Зона хімічного зараження ( $t = 35$  с): 1 — місце емісії хімічно небезпечної речовини; 2 — положення повітрязабірника системи вентиляції

Як видно з рис. 1 на промисловому майданчику досить швидко формується велика зона зараження. Шлейф токсичного газу охоплює обидві будівлі з усіх боків. Це означає, що при наявності евакуаційних виходів на всіх сторонах будівель, люди потрапляють в зону ураження, якщо скористаються цими виходами.

На рис. 2—5 представлена динаміка формування зони забруднення всередині приміщення при затіканні в нього токсичного газу з вулиці. Вважалося, що токсичний газ надходить через систему вентиляції, повітрязабірник якої розташований на першій будівлі (рис. 1, позиція 2). Всередині приміщення знаходиться три об'єкти — шафи, які створюють перешкоду на шляху руху токсичного газу.

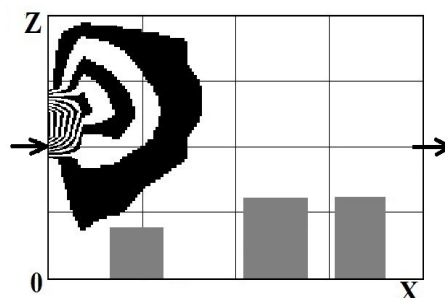


Рис. 2. Зона хімічного зараження в приміщенні, перетин  $Y = 3$  м ( $t = 2$  с)

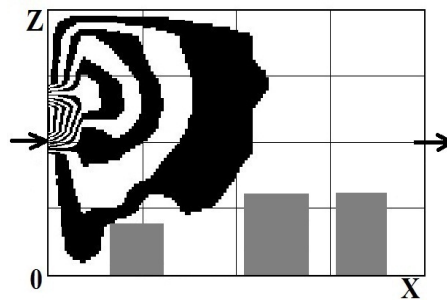


Рис. 3. Зона хімічного зараження в приміщенні, перетин  $Y = 3$  м ( $t = 3$  с)

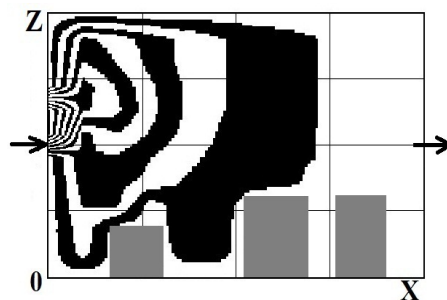


Рис. 4. Зона хімічного зараження в приміщенні, перетин  $Y = 3$  м ( $t = 4$  с)

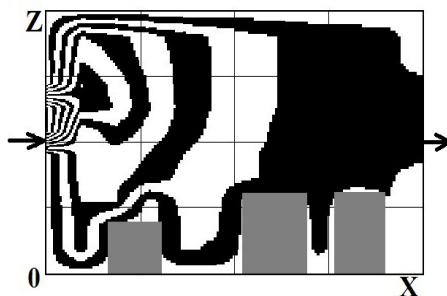


Рис. 5. Зона хімічного зараження в приміщенні, перетин  $Y = 3$  м ( $t = 5$  с)

Як видно з представлених рисунків, всередині приміщення швидко формується зона зараження. Шлейф токсичного газу надходить з системи вентиляції та формує підзони забруднення біля меблів розміщеної всередині приміщення. Видно, що через 5 с після початку надходження токсичного газу всередину приміщення, практично весь його обсяг є забрудненим. Це означає, що вкрай високий ризик токсичного ураження людей всередині приміщення, оскільки за такий короткий проміжок часу люди можуть не встигнути його покинути.

Відзначимо, що для вирішення задачі потрібно 15 с комп'ютерного часу. Таким чином, розроблену математичну модель можна використовувати для проведення серійних розрахунків при розробці ПЛАС.

#### Висновки та перспективи подальших досліджень

У статті розглянута математична модель, що дозволяє розв'язувати пов'язану задачу: поширення хмари токсичного газу в умовах забудови + затікання токсичного газу всередину приміщень через систему вентиляції. Для моделювання аеродинаміки вітрового потоку на відкритій місцевості використовується двовірне рівняння для потенціалу швидкості. Для моделювання аеродинаміки повітряних потоків всередині приміщень використовується тривимірне рівняння потенційного течії. Для моделювання формування зон хімічного зараження використовується рівняння масопереносу.

Подальше вдосконалення обраного наукового напрямку слід проводити в області створення 3D моделі для розрахунку хімічного зараження території з урахуванням трансформації хімічних агентів.

### Список використаної літератури

1. Беляев Н. Н. Защита зданий от проникновения в них опасных веществ : монография / Н. Н. Беляев, Е. Ю. Гулько, Н. В. Росточило. – Днепропетровск : Акцент ПП, 2014. – 136 с.
2. Беляев Н. Н. Прогнозирование уровня загрязнения воздушной среды в помещениях : монография / Н. Н. Беляев, В. В. Беляева, З. Н. Якубовская. – Днепропетровск : Акцент ПП, 2015. – 123 с.
3. Біляєв М. М. Математичне моделювання в задачах промислової безпеки та охорони праці : монографія / М. М. Біляєв, О. В. Берлов, П. С. Кіріченко. – Кривий Ріг : Вид. Р.А. Козлов, 2017. – 130 с.
4. Беляев Н. Н. Моделирование аварийного загрязнения атмосферы при чрезвычайной ситуации в хранилище твердого ракетного топлива / Н. Н. Беляев, А. В. Берлов, А. В. Шевченко // Наука та прогрес транспорту. – 2014. – №5. – С. 29–38.
5. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Марчук Г. И. – М. : Наука, 1982. – 320 с.
6. 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.
7. 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.
8. 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.
9. Effectiveness of Urban Shelter-in-Place. II / Chan W. R., Nazaroff W. W., Price P. N., Gadgil A. J. / Residential Districts, 2008. 31 p. Available at: <http://www.osti.gov/scitech/servlets/purl/928232>; doi: 10.1016/j.atmosenv.2007.04.059.

### MATHEMATICAL MODELING OF TOXIC GAS APPLICATION INDOORS ACCIDENTS AT INDUSTRIAL SITES

**Biliaiev M.M., Biliaieva V.V., Berlov O.V., Kalashnikov I.V.**

#### Abstract

A numerical model is presented for calculating the dynamics of air pollution inside the premises when it is sharpened, through a system of ventilation, contaminated with atmospheric air. The simulation process is based on the use of two- and three-dimensional levels of mass transfer. The aerodynamics of air flow in an open area, in the presence of buildings, is modeled on the basis of the two-dimensional equation of vortex-free flows of an ideal fluid — the Laplace equation for the velocity potential. To simulate the aerodynamics of indoor air flow, a three-dimensional equation is used for the velocity potentiality. To simulate the process of dispersion of a chemically hazardous substance in an open area, under the conditions of development, a two-dimensional equation of convective-diffusion dispersion of the pollutant is used. To simulate the process of dispersion of a chemically hazardous substance indoors, taking into account the placement in the room of furniture and other objects, the three-dimensional equation of convective-diffusion dispersion of the pollutant is used. The numerical solution of the two-dimensional Laplace equation for the velocity potential is found with the help of an implicit difference scheme for the total approximation. For the numerical

integration of the three-dimensional Laplace equation for the velocity potential, the alternating-triangular method is used. A.A. Samara. For the numerical integration of the two-dimensional and three-dimensional equations of pollutant transport in the atmosphere, an alternately triangular implicit difference scheme is used.

A computer program has been developed in the FORTRAN language. On the basis of the developed numerical models, a computational experiment was carried out. The process of short-term ammonia emission at the industrial site was simulated numerically. There were three buildings on the site. The process of toxic gas flowing inside the building, located frontally to the emission source, was investigated. On the basis of numerical modeling, the structure of pollution zones was determined, which were formed indoors and on the industrial site. The results of a computational experiment showed that the developed numerical model allows one to simulate the spread of chemically hazardous substances in areas with a complex geometric shape.

### References

- [1] Belyaev N.N., Gunko E.Yu. Rostochilo N.V. *Zashchita zdaniy ot proniknoveniya v nih opasnyh veshchestv : monografiya* [Protection of buildings against the entry of hazardous substances into them: monograph]. Dnepropetrovsk, 2014. 136 p.
- [2] Belyaev N.N., Belyaeva V.V., Yakubovskaya Z.N. *Prognozirovanie urovnya zagryazneniya vozduшной srede v pomeshcheniyah : monografiya* [Prediction of indoor air pollution levels: monograph]. Dnepropetrovsk, 2015. 123 p.
- [3] Belyaev M.M., Berlov O.V., Kirichenko P.S. *Matematychnе modelyuvannya v zadachax promyslovoyi bezpeky ta oxoronypraci : monografiya* [Mathematical modelling in the problems of industrial safety and labor protection : monograph]. Kryvyj Rig, 2017. 130 p.
- [4] Belyaev N.N., Berlov A.V., Shevchenko A.V. *Modelirovanie avariynogo zagryazneniya atmosfery pri chrezvychajnoj situatsii v hranilishche tverdogo raketnogo topliva* [Simulation of accidental air pollution in an emergency situation in the storage of solid rocket fuel]. *Nauka ta progres transportu*, 2014, no. 5(53), pp. 29-38 (in Russian).
- [5] Marchuk G.I. *Matematicheskoe modelirovanie v probleme okruzhayushchej srede a progres transportu* [Mathematical modelling in environmental issues]. Moscow, 1982. 320 p.
- [6] Zgurovskiy M.Z., Skopetskiy V.V., Khrushch V.K. and Belyaev N.N. *Chislennoye modelirovaniye rasprostraneniya zagryazneniya v okruzhayushchej srede* [Numerical modeling of pollution spreading in the environment]. Kyiv, 1997. 368 p. (in Russian).
- [7] Barret A.M. *Mathematical Modeling and Decision Analysis for Terrorism Defense: Assessing Chlorine Truck Attack Consequence and Countermeasure Cost Effectiveness*. Dissertation. Pittsburg, 2009. 123 p.
- [8] Biliaiev M.M., Kharytonov M.M. Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography “Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography” *Air Pollution Modeling and its Application XXI* (Springer), NATO Science for Peace and Security. Series C: Environmental Security, pp. 87–91, 2012. (*references*)
- [9] Chan W.R., Nazaroff W.W., Price P.N., Gadgil A.J. Effectiveness of Urban Shelter-in-Place. II *Residential Districts*, 2008. 31 p. doi: 10.1016/j.atmosenv.2007.04.059