

Інформаційні технології для запобігання та ліквідації надзвичайних ситуацій

УДК 658.382

DOI: 10.30748/soi.2018.152.22

М.І. Адаменко¹, М.Д. Кацман², Є.С. Білецька³

¹ Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна, Харків

² Головне управління воєнізованої охорони ПАТ «Укрзалізниця», Харків

³ Український державний університет залізничного транспорту, Харків

АНАЛІЗ ІСНУЮЧИХ МАТЕМАТИЧНИХ МОДЕЛЕЙ І КОМП'ЮТЕРНИХ ПРОГРАМ ДЛЯ ПРОГНОЗУВАННЯ РОЗПОВСЮДЖЕННЯ ЗАБРУДНЮЮЧИХ РЕЧОВИН В АТМОСФЕРІ

Метою даної статті є вирішення питання вибору моделі для прогнозування розвитку небезпечних чинників аварійних ситуацій з небезпечними вантажами. Предметом дослідження є моделі для прогнозування наслідків викидів небезпечних пожежо-вибухонебезпечних речовин. Темою статті є аналіз існуючих математичних моделей і комп'ютерних програм для прогнозування розповсюдження забруднюючих речовин в атмосфері. У результаті був проведений огляд різних методик оцінювання забруднення атмосфери, що засновані на різних математичних моделях турбулентного переносу і розсіювання домішків таких речовин для якісної оцінки обстановки, яка складається у результаті аварійної ситуації під час транспортування небезпечних вантажів, прогнозування розвитку небезпечних чинників аварійних ситуацій з небезпечними вантажами та прийняття рішень щодо реагування на аварійну ситуацію. Область застосування – залізничний транспорт.

Ключові слова: аварійна ситуація, небезпечні вантажі, моделювання якості атмосферного повітря, домішки забруднюючих речовин, процеси хімічної трансформації домішків.

Вступ

Постановка проблеми. Процес розповсюдження аварійних викидів пожежо-вибухонебезпечних і токсичних речовин вантажів другого і третього класів небезпеки при їхньому перевезенні залізничним транспортом характеризується параметрами зони ураження і швидкості переміщення у довкіллі небезпечної хмари. Таким чином, для прогнозування можливих наслідків таких небезпечних викидів і прийняття рішення щодо реагування на аварійну ситуацію, яка виникла, необхідна якісна оцінка цих параметрів.

Нині в багатьох країнах світу розроблені і отримали широке застосування різноманітні методики оцінювання забруднення атмосфери, які засновані на різних математичних моделях турбулентного переносу і розсіювання домішків таких речовин. На базі цих методик побудовані комп'ютерні програмні комплекси для моделювання процесів розповсюдження небезпечних речовин в атмосфері. Характер таких комп'ютерних моделей визначається колом завдань, які необхідно вирішувати, а також вимогами до точності моделювання. Зараз, з причин багатогранності і багатоаспектності підходів до моделювання, відсутня єдина класифікація комп'ютерних моделей розпо-

всюдження домішків від джерел викидів забруднень, що обумовлює актуальність вибраної теми.

Аналіз останніх досліджень і публікацій. В роботі [1] розглянуті найбільш поширені програмні комплекси, які побудовані на основі різних математичних моделей розповсюдження домішків забруднень в атмосфері, з точки зору використання для їхньої реалізації обчислювальних ресурсів і процесорних комп'ютерних систем. Робота [2] присвячена аналізу фізичних основ побудови математичних і комп'ютерних моделей розповсюдження домішок забруднюючих речовин в атмосфері. В роботах [3–4] розглянуті основні моделі, які застосовуються для оцінювання забруднення атмосфери: штатні моделі служб цивільного захисту; стандартні моделі забруднення атмосфери стаціонарними джерелами (зокрема ОНД-86); моделі МАТАТЕ (міжнародний стандарт) для розрахунків забруднень атмосфери стаціонарними джерелами; простіші нестационарні моделі для експрес аналізу розповсюдження хмари забруднювача; нестационарні моделі забруднення, які враховують неоднорідність підстилаючої поверхні; нестационарні моделі розповсюдження забруднень в атмосфері з урахуванням рельєфу місцевості; моделі

прогнозування забруднення атмосфери при штільних умовах різного типу; моделі, що враховують процеси хімічної трансформації домішків; спеціальні моделі для районування територій за імовірністю аварій та ступенів загрози населенню і промисловим об'єктам.

Виклад основного матеріалу досліджень

Для прогнозування наслідків викидів небезпечних пожежо-вибухонебезпечних речовин необхідним є моделювання розповсюдження таких речовин в атмосфері.

Нині для моделювання якості атмосферного повітря застосовуються два класи моделей розповсюдження домішків в атмосфері: моделі розсіювання домішків та моделі забруднення атмосферного повітря.

Для застосування таких моделей необхідно мати відповідну метеорологічну і географічну інформацію, а також дані про джерела забруднення і викиди.

Моделі розсіювання описують процеси турбулентної дифузії в атмосфері. Такі моделі містять [5–6]:

- Ейлерові моделі, які дозволяють чисельно розв'язувати рівняння атмосферної дифузії;

- Гауссові моделі, у відповідності з якими розподіл концентрацій характеризується як Гауссовий у горизонтальному і вертикальному напрямках;

- Лагранжеві моделі, у яких або відслідковуються процеси у масах повітря, що рухаються, або використовуються умовні частки для імітування процесів розсіювання.

До моделей забруднення атмосферного повітря також можна віднести:

- напівемпіричні моделі, які головним чином базуються на емпіричній параметризації;

- стохастичні моделі, які базуються на напівемпіричних чи статистичних методах та орієнтовані на проведення аналізу співвідношення між якістю атмосферного повітря та вимірюваннями атмосферних параметрів, або на прогнозуванні випадків підвищеного забруднення повітря;

- рецептурні моделі, які розглядають концентрації забруднювачів, що виміряні у рецепторній точці, й оцінюють відсотковий внесок різних джерел у цій концентрації.

Напівемпіричні моделі також можуть застосовуватися для опису процесів турбулентної дифузії в атмосфері у моделях розсіювання.

Моделі розсіювання можуть бути класифіковані за масштабами атмосферних процесів [7]:

- макромасштаб (протяжністю більше 1000 км), при якому атмосферний потік асоціюється з синоптичними явищами;

- мезомасштаб (протяжністю більше 1 км і менше 1000 км), при якому повітряний потік частково

знаходиться у залежності від синоптичних явищ, а частково від гідродинамічних ефектів (наприклад, від шорсткості підстилаючої поверхні й перешкод) і від неоднорідностей енергетичного балансу;

- мікромасштаб (протяжність менше 1 км), при якому повітряний потік в основному залежить від характеристик поверхні.

З іншого боку, за даними [8] класифікацію моделей розсіювання можна представити й іншим чином, розподіливши їх на локальні (тривалість менше декількох хвилин), від локальних до регіональних (декілька годин), від регіональних до континентальних (декілька днів) та від континентальних до глобальних (тиждень і більше).

Досвід побудови моделей розповсюдження різноманітних забруднювачів атмосфери свідчить про те, що розглянуті вище моделі є їхнім базисним математичним апаратом із різними доповненнями у вигляді математичних рівнянь, що описують турбулентність, осадження тощо.

Для фізичного моделювання атмосферних процесів використовуються рівняння неперервності та рівняння Нав'є – Стокса.

Рівняння неперервності є висновком закону збереження маси стосовно рідини, що протікає скрізь фіксований безмежно малий об'єм, і має вигляд [5; 9]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho(\nabla \cdot \mathbf{v}) = 0, \quad (1)$$

де ρ – густина рідини, \mathbf{v} – вектор швидкості.

Рівняння Нав'є – Стокса має описуватися рівнянням [1–2; 5]:

$$\rho \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \rho \mathbf{g} - \nabla \rho + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\mu \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right], \quad (2)$$

де δ_{ij} – символ Кронекера; x_i – координати; u_i – компоненти вектора швидкості; μ – коефіцієнт динамічної в'язкості; ρ – щільність середовища; \mathbf{g} – прискорення сили тяжіння.

За допомогою рівняння (2) можна описати весь спектр атмосферних процесів, але для розв'язання конкретних завдань необхідні спеціальні перетворення [2].

Зараз основний напрям застосування чисельних методів полягає у розв'язуванні усереднених рівнянь Нав'є – Стокса, що також мають назву рівнянь Рейнольдса.

Для переходу до рівнянь Рейнольдса поля метеоелементів подають у вигляді суми середніх значень, які описують великомасштабну течію, та флуктуацій, які є течією більш дрібного масштабу. При цьому враховують і сили Кориоліса, тобто обертання Землі.

Моделі обов'язково доповнюють диференціальними рівняннями припливу тепла виду [6; 9]:

$$c_p \frac{dT}{dt} \cdot \frac{ART}{p} \cdot \frac{dp}{dt} = \frac{\epsilon}{p}, \quad (3)$$

де T – абсолютна температура повітря; c_p – питома теплоємність повітря при постійному тиску; A – термічний коефіцієнт роботи; R – газова стала величина повітря; ϵ – приплив тепла до одиничного об'єму повітря за одиницю часу.

Розглянемо більш детально математичні моделі викидів небезпечних речовин.

Гауссова модель звичайно використовується для аналізування розповсюдження дрібнодисперсної суміші повітря із забруднювачем. Вона заснована на принципі того, що забруднювач буде розповсюджуватися у відповідності із нормальним розподілом. Гауссове рівняння має вигляд [1–2]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + U \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{d}{dy} \left(K_y \frac{dc}{dy} \right) + \frac{d}{dz} \left(K_z \frac{dc}{dz} \right) + s, \quad (4)$$

де x – координата, що виміряна від джерела вздовж напрямку вітру; y – координата, що виміряна від джерела перпендикулярно напрямку вітру; z – вертикальна координата від ґрунту; $C = C(x, y, z)$ – середня концентрація дисперсної речовини у точці (x, y, z) ; K_y, K_z – коефіцієнти турбулентності за напрямом вісей y та z ; U – середня швидкість вітру вздовж вісі x .

Під час реалізації моделі часто роблять деякі спрощення, а саме: концентрації забруднюючих речовин не впливають на розріджений потік (пасивна дисперсія); молекулярна дифузія і повздовжня дифузія (вздовж напрямку вітру) незначні; турбулентні потоки є лінійними; викид є постійним і рівномірним; напрям вітру і швидкість осідання домішок є постійними тощо.

Така модель частіше за інших використовується для прогнозування розповсюдження безперервних викидів, які починаються на рівні землі або надземних джерел. Між тим, вона може використовуватися й для розрахунку переривистих викидів [2].

Модель Ейлера має у своїй основі рівняння збереження маси для даного забруднювача. Рівняння має такий вираз [9–10]:

$$\frac{\partial(c_i)}{\partial t} = -U \nabla(C'_i) - \nabla(c'_i) + D \nabla^2 \langle C'_i \rangle + \langle S_i \rangle, \quad (5)$$

$$U = \bar{U} + U';$$

де U – вектор швидкості переміщення атмосферних мас $U(x, y, z)$; \bar{U} – вектор швидкості переміщення повітря; U' – вектор швидкості переміщення викиду; C – концентрація забруднюючої речовини, $C = \langle C \rangle + C'$; $\langle C \rangle$ – середня концентрація забруднювача в атмосфері; C' – концентрація забруднювача у викиді; D – молекулярний коефіцієнт дифузії; S_i – швидкість зміни концентрації у початковий момент часу.

Моделі Ейлера використовують фіксовану сітку (горизонтальну і вертикальну). Під час реалізації

моделей розв'язують відповідні рівняння одночасно у всіх чарунках сітки, при чому враховується обмін забруднювачами між чарунками і хімічні реакції.

Звичайно, кількість обчислень знижується при використанні різного масштабу сітки. Наприклад, у сільських районах, де концентрації речовин достатньо гомогенні, застосовують більш «грубі» сітки. На території міст із сильними градієнтами концентрацій речовин використовують більш тонкі та комбіновані сітки.

Модель Лагранжа дає можливість прогнозувати розповсюдження забруднюючих речовин, враховуючи зміни базової сітки, яка не прив'язана до географічних координат. Ці зміни в цілому залежать від того, наскільки напрям вітру є близьким до напрямку руху забруднюючої хмари.

Модель Лагранжа може бути подана таким чином [6; 10]:

$$\langle C(r, t) \rangle = \iint_{-\infty} p(r', t' | r, t) S(r', t') dr' dt', \quad (6)$$

де $\langle C(r, t) \rangle$ – середня концентрація забруднюючої речовини у точці з координатою r у момент часу t ; $S(r', t')$ – визначає джерело викиду; $p(r, t | r', t')$ – функція імовірності переходу від точки та часу (r', t') до точки та часу (r, t) .

Функція імовірності має бути визначеною як функція повних метеорологічних даних, близьких до джерел забруднення. Якщо джерело викидів містить у собі крім газу ще й механічний пил або аерозоль, то кількість рівнянь збільшується. Для кожного виду забруднення існує своє рівняння. Такий підхід дає ефективну обчислювальну систему. Проте важко певним чином описати фізичні і хімічні взаємодії великої кількості окремих видів забруднювачів між собою.

Фізичні рівняння побудовані таким чином, що дозволяють моделювати динаміку процесів у вузлах сітки. Урахування хімічних реакцій здійснюється шляхом додаткової зміни концентрації на кожному кроці розрахунку. Таким чином, модель Лагранжа дозволяє розглядати реакції у чарунці повітря, що переміщується. Цим вона відрізняється від моделі Ейлера, де нерухома сітка прив'язана до реальних географічних координат.

Оцінювання величини концентрації атмосферного забруднення здійснюється, як правило, у декілька етапів.

На першому етапі встановлюється сценарій розвитку аварійної ситуації і обирається відповідна математична модель із урахуванням особливостей рельєфу місцевості і висоти викиду.

Другий етап присвячений визначенню класу стійкості (турбулентності) для конкретних умов аварійної ситуації за допомогою відповідних вимірів або візуально отриманих параметрів.

Визначення швидкості вітру на рівні розповсюдження викиду здійснюється на третьому етапі.

На четвертому етапі визначається ефективна висота викиду.

Розрахунок коефіцієнтів турбулентності на визначеній відстані, концентрацій і коефіцієнтів дисперсії згідно з моделлю здійснюється на п'ятому і шостому етапах відповідно.

Практична програмна реалізація таких математичних моделей є складною системою, що проектується під конкретну задачу і враховує різні чинники. Наприклад такі як: динаміка турбулентних повітряних потоків; перенесення тепла, пилу і реагування газоподібних забруднювачів; перенесення сонячного і дифузного випромінювання; вплив випромінювання на теплові процеси та випаровування; поглинання (та вивільнення) газоподібних забруднювачів краплями.

Найбільш відомими реалізаціями моделей розсіювання «важкого газу» є методика Всесвітнього банку; зведення методик HGSYSTEM; методики, розроблені із підтримкою провідних закордонних дослідницьких організацій TNO – the Netherlands Organisation for Applied Scientific Research (Нідерланди), Det Norske Veritas (DNV Technica) (Норвегія); методики РД 03-26-2007 і програмні комплекси «ТОКСИ» різних версій, «ТОКСИ+», «ТОКСИ+Risk» (Російська федерація), ALOHA (США) [1; 11–14].

Розглянемо найбільш поширені моделі розповсюдження забруднюючих речовин у атмосфері.

Модель атмосферної дисперсії AERMOD (Канада, США) заснована на алгоритмі Гауссової моделі й призначена для моделювання стану атмосфери у радіусі до 50 км від стаціонарних промислових джерел забруднення [1].

Модель дозволяє прогнозувати неперервні плавучі викиди від рівня землі і дисперсії переривистих викидів. У моделі концентрація забруднюючих речовин не впливає на розряджений потік, при моделюванні турбулентні потоки є лінійними, бокова середня швидкість і вертикальна швидкість вітру дорівнюють нулю; модель приймає метеорологічні дані з декількох висот, дозволяє створювати профілі температури, вітру, турбулентності, враховувати будівельні ефекти, моделювати сухе та мокре осадження домішок. Така модель містить три основних модулі: AERMOD (модель стану атмосферної дисперсії); AERMET з інструментальним набором AERSURFACE для створення вхідних даних, пов'язаних зі станом атмосфери і рельєфом місцевості, розрахунку атмосферних параметрів, необхідних для дисперсійної моделі (турбулентна дифузія в атмосфері, швидкість розсіювання, довжини Моніна-Обухова і теплового поверхневого потоку тощо); AERMAR – програмні засоби, що призначені для прив'язки моделі до тримірних даних рельєфу місцевості та об'єктів.

Недоліками цієї моделі є суттєві витрати на підготовку вхідних даних, її застосування є доцільним для оцінювання екологічних ризиків від промислових джерел забруднення.

Модель CALPUFF, що прийнята Агентством з охорони довкілля США, заснована на основі «Керівництво щодо якості повітря» і є сучасною нестационарною метеорологічною й повітряною системою моделювання атмосферної дисперсії на базі інтегрованої Гауссової моделі. Вона є привілейованою моделлю для оцінювання дальнього переносу забруднювачів та їхнього впливу на федеральні області США, у тому числі й при складних метеоумовах [13].

Система моделювання складається з трьох основних компонентів і множинних програм постоброблення і попереднього оброблення даних.

CALMET – діагностичні тримірні метеорологічні моделі; CALPUFF – модель дисперсії якості повітря; CALPOST – пакет постоброблення. Кожний з цих компонентів має графічний інтерфейс. Додатково до цих пакетів програма містить багато інших процесорів, які використовуються для підготовки геофізичної статистики з використанням метеоданих.

Модель призначена для моделювання дисперсії неперервних плавучих викидів від точкових або лінійних джерел, містить також алгоритм для оброблення ефекту скошування на найближчі будівлі, що знаходяться на шляху розповсюдження забруднюючих речовин.

До основних переваг цієї моделі можна віднести: використання моделі Ейлера, яка імітує ефекти розповсюдження забруднювача у часі та просторі за різних метеоумов; можливість імітації добового циклу для кожного забруднювача; використання тримірних метеорологічних полів тощо.

До недоліків можна віднести те, що робота з моделлю потребує високої кваліфікації оператора, моделі «важких газів» не розглядаються, відсутній алгоритм обчислення температури джерела і не моделюється сухе осадження.

Програма AUSTAL 2000, яка призначена для моделювання дисперсії забруднювачів повітря, була розроблена у Німеччині за контрактом з Міністерством з питань охорони довкілля і безпеки ядерних реакторів. Вона є еталонною, бо базується на «Технічній інструкції щодо контролю за якістю повітря» [1].

Програма побудована на моделі Лагранжа, яка завбачає дисперсію забруднювача при відомих змінах базових показників. Модель описує перенос окремих повітряних потоків під дією атмосферних полів і розповсюдження домішок забруднювачів.

До переваг цієї програми можна віднести те, що: модель Лагранжа дає ефективну обчислювальну систему; має можливість моделювання розповсюдження забруднювачів при наявності на їхньому шляху будівель, складного рельєфу місцевості; здій-

сноє моделювання шлейфа забруднювача за сухим та мокрим осадженням у порядку хімічних реакцій.

Недоліки програми – важкість моделювання взаємодії великої кількості окремих джерел забруднення, що потребує використання нелінійної хімії.

Модель ADMS-3 є сучасною моделлю дисперсії для обчислення концентрації забруднювачів, що виділяються точковими, лінійними, об'ємними та площадними джерелами. Модель містить алгоритми, що враховують: ефекти основної ділянки забудови; складність рельєфу місцевості; вологе осадження; короткострокове коливання у концентрації; хімічні реакції; радіоактивний розпад і дозу гамма випромінювання; підвищення факела як функції відстані; потоки і спрямовані викиди; усереднення часу у межах від короткострокового до щорічного.

Модель CALINE3 є стаціонарною Гауссовою моделлю дисперсії, розробленою для визначення концентрації забруднювача повітря у відносно нескладній місцевості. Модель включена до більш досконалої моделі CAL3QHC і CAL3QHCR.

Модель CTDMPLUS є удосконаленим точковим джерелом Гауссової моделі якості повітря для використання в умовах складного ландшафту.

Модель OCD розроблена для визначення впливу емісії від точкових, площадних або лінійних джерел на якість повітря у прибережних районах.

Поряд з розглянутими вище моделями використовуються також моделі на основі розподілу Гаусса (наприклад, ADAM, ISC-3), Ейлерові моделі та моделі Нав'є – Стокса (CAMx, Chensi, PANACHE, REMSAD, WYNDVALLEY).

Іноді додатково застосовується Лагранжева модель для розрахунку переносу пилу (RAPTAD, PANACHE). Найбільш досконалі програми враховують фактори хімічної кінетики (ADAM, ADAM-3, CAMx, PANACHE, REMSAD, RPM-IV та інші), переносу тепла (ADAM, PANACHE), складності геометрії області (ADAM-3, ISC-3, PANACHE та інші), турбулентності (PANACHE). Аналогічні розрахунки можуть здійснюватися також й універсальними системами моделювання (Flow Vision, FLUENT, GAS DYNAMICSTOOL, PHOENIX, Star-CD та іншими) [1].

Висока густина речовини, що викидається, є дуже важливим чинником, у зв'язку з чим був введений спеціальний термін – «важкий газ», для опису поведінки якого були розроблені спеціальні моделі – «модель розсіювання важкого газу» [12].

Необхідність виділення у спеціальний клас моделей розрахунку процесів розсіювання «важкого газу» викликана тим, що більшість газових викидів при промислових аваріях у початковий момент мають більшу за повітря густину. Причини тому можуть бути різні [12]:

– висока молярна маса, більша за молекулярну масу повітря, яка дорівнює 29,5 г/моль, при норма-

льних умовах до «важких газів» відносяться пропан, бутан, пара нафти, бензину, хлор, сірковуглець і т.д.;

– низька температура (наприклад, метан при нормальних умовах має густину нижче за густину повітря, а при температурі, що дорівнює температурі кипіння ($-161,5^{\circ}\text{C}$), його густина стає вище за густину повітря, й тоді метан вже є «важким газом», тому процес розсіювання метану від його розливу необхідно розраховувати по моделі «важкого газу»);

– наявність аерозолів (наприклад, аміак й при нормальних умовах, й при температурі кипіння є легким газом, тому при змішанні з повітрям суміші, що утворюються. Мають густину меншу за густину повітря, однак у випадку наявності у суміші крапель, вона стає «важким газом»);

– протікання у викиді хімічних реакцій, які призводять до утворення «важкого газу».

Викиди «важкого газу», які схильні до осаджування під дією сили тяжіння, що утворюють невисокі, але протяжні хмари (висота таких хмар сягає до декількох метрів, а поперечний переріз – до декількох десятків і навіть сотень метрів). У результаті площа землі, що застилається хмарою, на порядок більша за площу, яка могла би бути, якщо б густина хмари не була би більше за густину повітря. Більш того, при викидах «важкого газу» має місце явище розповсюдження хмари проти вітру, що є неможливим, коли густина газу не відрізняється від густини повітря.

Хмари «важкого газу» мають велику поверхню обміну з атмосферою (поверхню, через яку здійснюється підмішування повітря у дрейфуючий викид). В результаті, незважаючи на те, що питома швидкість підмішування повітря зменшується із збільшенням густини хмари, загальна маса повітря, яка залучається у хмару, суттєво зростає в порівнянні з хмарою нейтральної плавучості.

Необхідність урахування розглянутих ефектів з метою суттєвого покращення прогностичних можливостей методичного апарата (на сотні і, навіть, на тисячі відсотків) і стала причиною масового переходу за кордоном від Гауссовських моделей до моделей «важкого газу».

Як і всі моделі, модель розсіювання «важкого газу» має ряд обмежень. Наприклад, це пов'язане із необхідністю урахування рельєфу місцевості та наявності забудови. В найбільшому ступені врахувати такі чинники дозволяють моделі, які побудовані на чисельному розв'язуванні повної системи рівнянь газодинаміки. Це складний, але найбільш перспективний підхід. Нині такий підхід реалізований у декількох програмних продуктах: наприклад, у обчислювальному комплексі PHOENIX.

Методики «ТОКСИ-3», РД03-26-2007 та АЛОНА дозволяють розрахувати характеристики хмари небезпечної речовини, що переміщується в атмосфері, у межах розсіювання «важкого газу», і які базуються на

інтегральних законах збереження. Суть цього підходу полягає в наступному. Обирається деякий об'єм, що являє собою простір, де розсіюється речовина (у газоподібному та крапельно-рідкому станах). При цьому, не намагаються детально описати картину течії всередині цього об'єму і, відповідно, отримати детальний розподіл параметрів цієї течії. У рамках такої моделі відслідковуються зміни інтегральних характеристик середовища у межах цього об'єму (маса, імпульс потоку, енергія тощо), тобто залишається невідомим, як зміниться, наприклад, густина у будь-якій точці, але можна розрахувати, як змінилася маса середовища всього об'єму, що розглядається. Невідомо, як змінилася енергія у будь-якій точці, але можна розрахувати, як змінилася вся енергія системи у об'ємі, що розглядається, і т.д. Зрозуміло, що відслідковувати зміни інтегральних величин значно простіше і для цього не потрібно розв'язувати складні системи рівнянь у частинних похідних, а необхідно розраховувати лише потоки відповідних величин (маси, енергії й інших) через межі об'єму, який розглядається.

З інтегральних характеристик (маса, імпульс, енергія) можна отримати деяку інформацію про те, як відповідні параметри розподілені всередині даного об'єму. Для цього априорі задається закон розподілу того чи іншого параметру всередині об'єму. Наприклад, можна припустити, що всі параметри розподілені рівномірно. У більш складному варіанті задається неоднорідний розподіл параметрів. Звичайно, у якості таких розподілів обирають Гауссові профілі, степеневі залежності тощо.

З метою опису c розподілу концентрації речовини всередині хмари з координатами x, y, z , яка утворюється при миттєвому викиді (залповий викид), у вибраних методиках використовуються рівняння [12]:

$$c(x, y, z, t) = c_c(t) \exp \left[- \left[\frac{z}{S_z(t)} \right]^\beta \right].$$

при

$$(x-x_c)^2 + y^2 < r^2; \quad (7)$$

$$c(x, y, z, t) = c_c(t) \exp \left[- \left[\frac{z}{S_z(t)} \right]^\beta \right].$$

$$\cdot \exp \left[- \frac{(x-x_c)^2 + y^2 - r^2(t)}{S_y^2(t)} \right]$$

при

$$(x-x_c)^2 + y^2 \geq r^2;$$

де x_c – місцезнаходження центра хмари, м; r – радіус центральної частини (ядра) хмари, м; c_c – концентрація речовини у центрі (на вісі) хмари, кг/м^3 ; t –

час, с; s_z, s_y – дисперсія, відповідно вертикальна і горизонтальна, м; $\beta = 1+\alpha$ (α – показник степеневі залежності швидкості вітру від висоти).

Характерною особливістю розподілу концентрації, що описується рівнянням (1), та принциповою відмінною від розподілу, який використовується у Гауссовій моделі, є наявність так званого ядра хмари. При залповому викиді всередині цього ядра у будь-якій горизонтальній площині концентрація речовини є постійною. Наявність ядра з постійною концентрацією визначає факт того, що розмиття хмари по краях здійснюється поступово, необхідний час для дифундування газу від бокової поверхні до центру хмари.

Радіус ядра хмари може збільшуватися під дією сили тяжіння, що спричиняє гравітаційне розтікання хмари з густиною більше за густину повітря. В іншому, цей розподіл відображає процеси, які притаманні Гауссовому розподілу: перенесення у полі вітру, розсіювання у горизонтальному (експоненційні співмножники з просторовими змінними x і y) і вертикальному (експоненційні співмножники з просторовою змінною z) напрямках.

Крім параметрів c_c, s_z, s_y, r, x_c хмара речовини, що розсіюється, характеризується також енергією у хмарі (Q_{eff} , Дж).

Знаючи ці параметри, та при припущенні того, що тиск у хмарі дорівнює тиску оточуючого середовища P_0 , можна, розв'язуючи термодинамічну задачу з відповідними рівняннями стану, визначити густину середовища у хмарі P_m (кг/м^3) або питомий об'єм середовища V_m ($\text{м}^3/\text{кг}$) і температуру цього середовища T_m (к).

Висновки

Виходячи з наведеного вище, можна зробити висновок про те, що існує велика кількість різнохарактерних моделей для розрахунку процесу розсіювання викидів небезпечних речовин – від простіших Гауссовських моделей із завищеними оцінками до детальних розрахунків за складними газодинамічними моделями.

Аналіз обстановки, що склалася у результаті аварійної ситуації під час транспортування небезпечних вантажів, потребує наявності точних і достатньо простих моделей для проведення розрахунків моделей розвитку небезпечних чинників таких ситуацій.

Тому актуальною задачею є вирішення питання вибору моделі для прогнозування розвитку небезпечних чинників аварійних ситуацій з небезпечними вантажами, аналіз якого був проведений у даній статті.

Список літератури

1. Бабков В.С. Анализ математических моделей распространения примесей от точечных источников / В.С. Бабков, Т.Ю. Ткаченко // Наукові праці ДонНТУ. Серія «Інформатика, кібернетика, обчислювальна техніка». Вип. 13(185). – 2011. – С. 147-155.

2. Белихов А.Б. Современные компьютерные модели распространения загрязняющих веществ в атмосфере / А.Б. Белихов, Д.Л. Лесотин, А.К. Сухов // Вестник Костромского государственного университета им. Н.А. Некрасова. – Кострома, 2013. – № 1. – С. 14-19.
3. Замай С.С. Модели оценки и прогноза загрязнения атмосферы промышленными выбросами в информационно-аналитической системе природоохранных служб крупного города / С.С. Замай, О.Э. Якубайлик. – Красноярск: Красноярск. гос. ун., 1998. – 104 с.
4. Techniques and decision making in the assessment off-site consequences of an accident in a nuclear facility // Safety series. – № 86. – International Atomic Energy Agency. – Vienna, 1987. – 185 p.
5. Берланд М.Е. Прогноз и регулирование загрязнений в атмосфере / М.Е. Берланд. – Л.: Гидрометеиздат, 1985. – 272 с.
6. Бызова Н.Л. Экспериментальные исследования атмосферной диффузии и расчет распространения примеси / Н.Л. Бызова, Е.К. Гарнер, В.Н. Иванов. – Л.: Гидрометеиздат, 1991. – 368 с.
7. Zannetti P. Numerical simulation modeling of air pollution: overview / P. Zannetti // Air pollution. Southampton, Computations Mechanics publications, 1993. – P. 3-14.
8. Moussiopoulos N. Ambient air quality, pollutant dispersion and transport models Copenhagen / N. Moussiopoulos. – European Environment Agency, and 1996 Topic Report № 19.
9. Бицадзе А.В. Уравнение математической физики / А.В. Бицадзе. – М.: Наука, 1976. – 296 с.
10. John H. Seinfeld. Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change / John H. Seinfeld. – New York, John Wiley and Sons, 1986.
11. Шило Ар.С. Сравнительный анализ программных средств исследования загрязнения атмосферы составляющими дымовых газов / Ар.С. Шило, Ан.С. Шило [Электронный ресурс] // Збірник наукових статей “ІІІ-го Всеукраїнського з’їзду екологів з міжнародною участю”. – Вінниця, 2011. – Том 1. – С. 136-139. – Режим доступу до ресурсу: <http://eco.com.ua/content/sravnitelnyi-analiz-programnykh-sredstv-dlya-issledovaniya-zagryazneniya-atmosfery-sostavly>.
12. Шаталов А.А. Методика расчета распространения аварийных выбросов, основанная на модели рассеивания тяжелого газа [Электронный ресурс] / А.А. Шаталов, М.В. Лисанов, А.С. Печеркин, А.В. Пчельников, С.И. Сумской // Вопросы безопасности в промышленности 2004. – С. 46-52. – Режим доступу до ресурсу: http://riskprom.ru/_ld/0/39_BTP_2004_9_toxi.pdf.
13. Official CALPUFF Modeling System [Электронный ресурс]. – Режим доступу до ресурсу: <http://o53xo.onzggldn5wq.nblz.ru/> (дата 13 грудня 2017).
14. ALOHA (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) [Электронный ресурс]. – Режим доступу до ресурсу: <https://response.restoration.noaa.gov/aloha> (дата 22 січня 2018).

References

1. Babkov, V.S. (2011), “Analiz matematicheskikh modeley rasprostraneniya primesey ot tochehnykh istochnikov” [Analysis of mathematical models for the realization of impurities from point sources], *Scientific works of DonNTU, Series "Informatics, Cybernetics, Computing Technology"*, No. 13(185), pp. 147-155.
2. Belihov, A.B., Lesotin, D.L. and Suhov, A.K. (2013), “Sovremenniye kompyuternie modeli raspostraneniya zagryaznyayushchih veshchestv v atmosfere” [Modern computer models of the distribution of pollutants in the atmosphere], *Bulletin of Kostroma State University Nekrasov N.A.*, No. 1, Kostroma, pp. 14-19.
3. Zamay, S.S. and Yakubailik, O.E. (1998), “Modeli ocenki i prognoza zagryazneniya atmosfery promishlennymi vibrosami v informacionno-analiticheskoy sisteme prirodoohrannih sluzhb krupnogo goroda” [Models for estimating and forecasting the pollution of the atmosphere by industrial emissions in the information-analytical system of nature conservation services of a large city], State University, Krasnoyarsk, 104 p.
4. (1987), Techniques and decision making in the assessment off-site consequences of an accident in a nuclear facility, *Safety series*, No. 86, International Atomic Energy Agency, Vienna, 185 p.
5. Berland, M.E. (1985), “Prognoz i regulirovanie zagryazneniy v atmosfere” [Forecast and regulation of atmospheric pollution], *Gidrometstandart*, Leningrad, 272 p.
6. Bizova, N.L., Garner, E.K. and Ivanov, V.N. (1991), “Eksperementalnye issledovaniya atmosfernoy diffuzii i raschet raspostraneniya primesey” [Experimental studies of atmospheric diffusion and calculation of impurity diffusion], *Gidrometstandart*, Leningrad, 272 p.
7. Zannetti, P. (1993), Numerical simulation modeling of air pollution: overview, *Air pollution. Southampton, Computations Mechanics publications*, pp. 3-14.
8. Moussiopoulos, N.(1996), Ambient air quality, pollutant dispersion and transport models Copenhagen, *European Environment Agency*, Topic Report No. 19.
9. Bitsadze, A.V. (1976), “Urvnenie matematicheskoy fisiki” [The equation of mathematical physics], Science, Moscow, 296 p.
10. Seinfeld, John H. (1986), *Atmospheric Chemistry and Physics: From Air Pollution to Climate Change*, New York, John Wiley and Sons.
11. Shilo, Ar.S. and Shilo, An.S. (2011), “Sravnitelnyy analiz programmnykh sredstv issledovaniya zagryazneniya atmosfery sostavlyayushchimi dimovih gazov” [Comparative analysis of software tools for studying atmospheric pollution by constituents of flue gases], *Collection of scientific articles of the III All-Ukrainian Congress of Ecologists with International Participation*, Vol. 1, pp. 136-139, www.eco.com.ua/content/sravnitelnyi-analiz-programnykh-sredstv-dlya-issledovaniya-zagryazneniya-atmosfery-sostavly.
12. Shatalov, A.A., Lisanov, M.V., Pecherkin, A.C., Pchilnikov A.V. and Sumskey, S.I. (2004), “Metodika rascheta raspostraneniya avariynih vibrosoy, osnovannaya na modeli rasseivaniya tazshelogo gaza” [The methodology for calculating the spread of accidental emissions, based on the model of heavy gas dispersion], www.riskprom.ru/_ld/0/39_BTP_2004_9_toxi.pdf.
13. Official CALPUFF Modeling System, www.o53xo.onzggldn5wq.nblz.ru/ (accessed 13 December 2017).
14. ALOHA (Areal Locations of Hazardous Atmospheres), <https://response.restoration.noaa.gov/aloha> (accessed 22 January 2018).

Відомості про авторів:

Адаменко Микола Ігоревич
 доктор технічних наук професор
 завідувач кафедри Харківського національного
 університету ім. В.Н. Каразіна,
 Харків, Україна
<https://orcid.org/0000-0001-6245-4786>
 email: nikolaj_adamenko@ukr.net

Кацман Михайло Давидович
 кандидат технічних наук доцент
 начальник відділу Головного управління
 воєнізованої охорони ПАТ «Укрзалізниця»,
 Харків, Україна
<https://orcid.org/0000-0002-1381-667X>
 email: katsman@uz.gov.ua

Білецька Євгенія Сергіївна
 старший викладач кафедри Українського державного
 університету залізничного транспорту,
 Харків, Україна
<https://orcid.org/0000-0002-9525-7399>
 email: 77beletskaya@gmail.com

Information about the authors:

Nikolaj Adamenko
 Doctor of Technical Sciences Professor
 Head of Department of Kharkiv National
 University named after VN Karazin,
 Kharkiv, Ukraine
<https://orcid.org/0000-0001-6245-4786>
 email: nikolaj_adamenko@ukr.net

Mikhail Katzman
 Candidate of Technical Science Senior Lecturer
 Chief of the Department of the Main Department
 of Paramilitary Protection PJSC «Ukrzaliznytsya»,
 Kharkiv, Ukraine
<https://orcid.org/0000-0002-1381-667X>
 email: katsman@uz.gov.ua

Yevheniia Biletska
 Senior Instructor of Department of
 Ukrainian State University of Railway Transport,
 Kharkiv, Ukraine
<https://orcid.org/0000-0002-9525-7399>
 email: 77beletskaya@gmail.com

АНАЛИЗ СУЩЕСТВУЮЩИХ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ И КОМПЬЮТЕРНЫХ ПРОГРАММ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ЗАГРЯЗНЯЮЩИХ ВЕЩЕСТВ В АТМОСФЕРЕ

Н.И. Адаменко, М.Д. Кацман, Е.С. Билецкая

Целью данной статьи является решение вопроса выбора модели для прогнозирования развития опасных факторов аварийных ситуаций с опасными грузами. Предметом исследования являются модели для прогнозирования последствий выбросов опасных пожаро- взрывоопасных веществ. Темой статьи является анализ существующих математических моделей и компьютерных программ для прогнозирования распространения загрязняющих веществ в атмосфере. В результате был проведен обзор различных методик оценки загрязнения атмосферы, основанных на различных математических моделях турбулентного переноса и рассеивания примесей таких веществ для качественной оценки обстановки, которая складывается в результате аварийной ситуации при транспортировке опасных грузов, прогнозирования развития опасных факторов аварийных ситуаций с опасными грузами и принятия решений по реагированию на аварийную ситуацию. Область применения – железнодорожный транспорт.

Ключевые слова: аварийная ситуация, опасные грузы, моделирование качества атмосферного воздуха, примеси загрязняющих веществ, процессы химической трансформации примесей.

ANALYSIS OF EXISTING MATHEMATICAL MODELS AND COMPUTER PROGRAMS FOR THE PREVENTION OF DISPOSAL OF POLLUTANTS IN THE ATMOSPHERE

M. Adamenko, M. Katzman, Ye. Biletska

The purpose of this article is to solve the question of choosing a model for predicting the development of dangerous factors of emergency situations with dangerous goods. The subject of the study is a model for predicting the effects of hazardous fire and explosive substances emissions. The subject of this article is an analysis of existing mathematical models and computer programs for predicting the distribution of pollutants in the atmosphere. As a result of the study, an overview of various methods of assessing atmospheric pollution based on various mathematical models of turbulent transfer and dispersion of impurities of such substances was carried out for qualitative assessment of the situation, which is formed as a result of an emergency situation during the transport of dangerous goods, forecasting the development of dangerous factors of emergency situations with dangerous cargoes and decision-making in response to an emergency. Namely, such methods as: calculation by means of scattering models describing the processes of turbulent diffusion in the atmosphere (Euler models, Gaussian models, Lagrangian models), as well as models of atmospheric air pollution (semiempirical models, stochastic models, recipe models); software components based on basic calculation models (The most well-known implementations of the heavy-gas dispersion models are the World Bank methodology, HGSYSTEM methodologies, techniques developed with the support of the leading foreign research organizations of the TNO - the Netherlands for the Applied Scientific Research (Netherlands), Det Norske Veritas (DNV Technica) (Norway); RD 03-26-2007 techniques and software systems TOKSY different versions, TOXI +, TOXI + RISK (Russian Federation), ALOHA (USA)). As a result of the research of various existing mathematical models and computer programs, it was concluded that they all have power and should be applied depending on the conditions of calculation, that is, the forecasting of pollutants in the atmosphere should be carried out not in one method, but in the chosen method of dependence on terms of calculation. Scope of application – rail transport.

Keywords: emergency situation, dangerous goods, modeling of the quality of atmospheric air, impurities of pollutants, processes of chemical transformation of impurities.