

УДК 519.6

© Н.Н. Беляев, И.В. Калашников, П.Б. Машихина

ЧИСЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ РЕШЕНИЯ СОПРЯЖЕННЫХ ЗАДАЧ В ПРОБЛЕМЕ ЗАГРЯЗНЕНИЯ АТМОСФЕРНОГО ВОЗДУХА

© M. Biliaiev, I. Kalashnikov, P. Mashykhina

NUMERICAL MODEL TO SOLVE CONJUGATE PROBLEMS IN ATMOSPHERE POLLUTION

Цель. Целью работы является разработка численной модели для решения сопряженных задач в области загрязнения атмосферного воздуха при эмиссии химически опасных веществ в случае аварий или терактов. Модель ориентирована на экспресс оценку возможных зон размещения источника эмиссии, чтобы в заданной точке «интереса» концентрация не превышала порогового уровня.

Методика исследований состоит в применении метода численного интегрирования двухмерного дифференциального уравнения массопереноса, которое моделирует распространение в атмосферном воздухе химически опасного вещества. Рассматривается уравнение, которое является сопряженным к уравнению массопереноса. С помощью этого уравнения определяется зона, где размещение источника эмиссии может привести к возникновению опасных концентраций, для определенного момента времени, в точке «интереса». Эта информация дает возможность выявить подзоны, где эмиссия опасного вещества, в случае аварии, теракта приведет к нежелательным последствиям. Для решения сопряженной задачи используется подход, предложенный Г.И. Марчуком.

Результаты исследования. На основе разработанной численной модели имеется возможность выполнять решения как прямой задачи – расчет зон загрязнения в атмосфере при известном положении источника эмиссии, так и сопряженной задачи. Представлены результаты вычислительного эксперимента.

Научная новизна. Предложена новая численная модель, позволяющая решить сопряженную задачу в области загрязнения атмосферного воздуха при эмиссии химически опасных веществ – определить зоны, где выброс загрязняющего вещества может привести к нежелательным последствиям в точке «интереса». Модель может быть использована для проведения серийных расчетов при разработке ПЛАСа. Модель позволяет учесть влияние метеоусловий в данном регионе, атмосферной диффузии, мощности выброса при проведении вычислительного эксперимента.

Практическое значение. Предложена 2D численная модель для решения сопряженной задачи в области экологической безопасности: выбора зон, где эмиссия опасного вещества может привести к нежелательным результатам в точке «интереса». Модель позволяет выявить подзоны, где проведение теракта крайне опасно.

Ключевые слова: *сопряженная задача, загрязнение атмосферы, эмиссия химически опасных веществ.*

Вступление. В мире значительно усилился интерес к разработке математических моделей для оценки уровня загрязнения атмосферного воздуха при аварийных ситуациях на химически опасных производствах, транспорте, а также при эмиссии химических (биологических) агентов при терактах [1, 5, 6].

Оценка последствий таких выбросов – крайне ответственная задача при разработке ПЛАСа (план ликвидации аварийной ситуации). Это важная задача при разработке мер по минимизации последствий таких эмиссий. В настоящее время, в Украине для решения данного класса задач используются эмпирические модели, представленные в нормативных методиках ОНД-86 и в методике прогноза последствий аварий на химически опасных объектах и транспорте [2]. Данные методики имеют серьезные ограничения и не учитывают динамику изменения концентрации опасного вещества при аварийной эмиссии, не учитывают процессы атмосферной диффузии и т.д. Кроме указанных методик, для решения задач рассматриваемого класса, также используют модели Гаусса или математические модели, основанные на точном решении уравнения массопереноса. Область применения данных моделей также ограничена. В этой связи важной задачей является разработка научно обоснованных методов оценки уровня загрязнения атмосферного воздуха при аварийной (или иной) эмиссии химических агентов.

Целью данной работы является создание численной модели для решения сопряженных задач в области загрязнения атмосферного воздуха при эмиссии химически опасных веществ.

Постановка задачи. Рассматривается краткосрочная эмиссия химически опасного вещества. Ставится задача по определению территории, где выброс создаст в некоторой точке (область «интереса») неблагоприятное, по величине, загрязнение.

Расчет поля концентрации опасного вещества в атмосфере. Известно, что для определения поля концентрации опасного вещества в атмосфере при его эмиссии от некоторого источника, расположенного в точке с координатами x_i, y_i , используется уравнение массопереноса. Если рассматривается двухмерная задача (например, плановая задача), то моделирующее уравнение имеет вид [3, 4]:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \sigma C = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \\ & + \sum Q_i(t) \delta(x - x_0) \delta(y - y_0), \end{aligned} \quad (1)$$

где C – концентрация химического агента в атмосферном воздухе; σ – коэффициент, учитывающий распад агента и вымывание осадками; u, v – компоненты вектора скорости ветра; μ_x, μ_y – коэффициенты атмосферной турбулентной диффузии; w_s – скорость гравитационного оседания загрязнителя; $Q_i(t)$ – интенсивность эмиссии химического агента; $\delta(x - x_0) \delta(y - y_0)$ – обозначение дельта-функции Дирака; t – время.

Для моделирующего уравнения (1) ставятся следующие краевые условия [3]:

$$C = C_0 \quad \text{при } t = 0,$$

$$C = C_s \text{ на границах расчетной области,}$$

где C_0, C_s – известные величины.

Уравнение (1) является основой так называемых «diagnostic models», которые используются для оперативной оценки загрязнения атмосферного воздуха для различных видов источников и различных ситуаций (промышленные выбросы, аварийные, выбросы при терактах и т.п.). Применение численных моделей, основанных на уравнении (1) для решения ряда прикладных задач приведено, в частности в [1, 2, 6].

Для решения уравнения (1) задаются конкретные физические параметры, характерные для региона: скорость и направление ветра, класс устойчивости атмосферы. Применение уравнения (1) для оценки уровня загрязнения атмосферного воздуха называется «прямой задачей». При решении такой «прямой» задачи обязательно задается интенсивность Q источника эмиссии, режим его работы и его координаты. Результатом решения прямой задачи является поле концентрации химического агента для различных моментов времени. С помощью такого поля имеется возможность определить, когда в определенной точке $r_i = (x_i, y_i)$ (область «интереса»), в момент времени τ концентрация опасного вещества начинает превышать пороговое значение φ .

Однако, если рассматривается задача определения места расположения источника эмиссии (т.е., когда координаты x_i, y_i – заранее неизвестны), и с дополнительным условием, чтобы в определенной области влияния такого источника уровень загрязнения был минимальным, то решение такой задачи сводится к перебору различных мест расположения источника, с последующим решением уравнения (1). Иными словами, такое решение – это набор решения комплекса прямых задач. Данный подход не является рациональным, поскольку требуется решения большого числа прямых задач. Однако альтернативным подходом, является подход, предложенный Г.И. Марчуком [3]. Этот подход основывается на решении сопряженной задачи. В этом случае рассматривается не уравнение массопереноса (1), а иное уравнение, называемое сопряженным [3].

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial C^*}{\partial t} - \frac{\partial u C^*}{\partial x} - \frac{\partial v C^*}{\partial y} + \sigma C^* = \\ & = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C^*}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C^*}{\partial y} \right) + p \end{aligned} \quad (2)$$

где C^* – функция, сопряженная с функцией C , p – некоторая функция [3].

Краевые условия для сопряженной задачи записываются так: $C^* = C_T^*$ – концентрация химического агента в атмосферном воздухе при $t=T$; $C^* = 0$ – на границах расчетной области.

Выбор вида функции p определяется выбором функционала, для которого решается прямая (сопряженная) задача [3]. Отметим, что решение сопряженной задачи начинается с момента времени $t = T$.

В данной работе для решения сопряженной задачи вида (2) будет применяться следующий подход. Сначала, следуя [3], введем новые переменные:

$$u' = -u, \quad v' = -v, \quad t' = T - t.$$

С учетом этих новых переменных, уравнение (2) принимает вид уравнения (1). Далее осуществляем замену производных, согласно [4]. Здесь используем следующие зависимости. Аппроксимация производной по времени осуществляется так:

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} \approx \frac{C_{ij}^{*n+1} - C_{ij}^{*n}}{\Delta t}.$$

В дальнейшем, символ «*» будем опускать.

Первые производные представляются в виде [4]

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

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

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

На следующем этапе аппроксимируем первые производные так [4]:

$$\frac{\partial u^+C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j}^+ C_{ij}^{n+1} - u_{ij}^+ C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^+ C^{n+1}, \quad \frac{\partial v^+C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1}^+ C_{ij}^{n+1} - v_{i,j}^+ C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial u^-C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j}^- C_{i+1,j}^{n+1} - u_{ij}^- C_{ij}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^- C^{n+1}, \quad \frac{\partial v^-C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1}^- C_{i,j+1}^{n+1} - v_{ij}^- C_{ij}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^- C^{n+1}.$$

Для аппроксимации вторых производных используем такие зависимости [4]:

$$\frac{\partial}{\partial x} (\mu_x \frac{\partial C}{\partial x}) \approx \mu_x \frac{C_{i+1,j}^{n+1} - C_{ij}^{n+1}}{\Delta x^2} - \mu_x \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{i-1,j}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} (\mu_y \frac{\partial C}{\partial y}) \approx \mu_y \frac{C_{i,j+1}^{n+1} - C_{ij}^{n+1}}{\Delta x^2} - \mu_y \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{i,j-1}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1}.$$

С учетом приведенных аппроксимаций можно записать разностный аналог уравнения (1):

$$\begin{aligned} \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{ij}^n}{\Delta t} + L_x^+ C^{n+1} + L_x^- C^{n+1} + L_y^+ C^{n+1} + L_y^- C^{n+1} + \sigma C_{ij}^{n+1} = \\ = (M_{xx}^+ C^{n+1} + L_{xx}^- C^{n+1} + L_{yy}^+ C^{n+1} + L_{yy}^- C^{n+1}) + Q_{ij} \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (3)$$

Далее проводится расщепление этого разностного уравнения на четыре шага [4]. Уравнения расщепления на каждом шаге имеют следующий вид:

на первом шаге ($k = \frac{1}{4}$):

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j}^{n+k} - C_{i,j}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{i,j}^k = \\ = \frac{1}{4} (M_{xx}^+ C^k + M_{xx}^- C^n + M_{yy}^+ C^k + M_{yy}^- C^n), \end{aligned} \quad (4)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{C_{i,j}^k - C_{i,j}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- C^k + L_y^- C^k) + \frac{\sigma}{4} C_{i,j}^k = \\ = \frac{1}{4} (M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c) \end{aligned} \quad (5)$$

на третьем шаге ($k = n + \frac{3}{4}$; $c = n + \frac{1}{2}$) применяется зависимость (5);

на четвертом шаге ($k = n + 1$; $c = n + \frac{3}{4}$) применяется зависимость (4).

Неизвестное значение функции C на каждом шаге расщепления определяется по явной формуле «бегущего счета». Построенная разностная схема является попеременно – треугольной разностной схемой. На последнем расчетном шаге имеем уравнение

$$\frac{\partial C^*}{\partial t} = P.$$

Данное уравнение решаем методом Эйлера.

Рассмотренный алгоритм реализован в виде компьютерной программы «FIND-2». Ниже представлены результаты решения модельной задачи с помощью разработанной численной модели и компьютерной программы. Рассматривалась задача о поиске зон, где эмиссия химически опасного вещества (хлора) для определенного временного значения приведет к нежелательному загрязнению в некоторой точке $r_i = (x_i, y_i)$. Иными словами, требуется найти область размещения этого источника так, чтобы в определенной точке $r_i = (x_i, y_i)$ в момент времени τ концентрация опасного вещества не превышала некоторое заданное значение φ , т.е.

$$C(r_i, \tau) < \varphi.$$

Направление движения воздушных масс показано на рис.1 стрелкой. Известна интенсивность разового выброса загрязняющего вещества в количестве Q . Решение сопряженной задачи проводилось для функционала вида

$$I = Q \int_0^T C^*(r_0, t) dt,$$

Вид функции P будет таким: $P(x, y, t) = \delta(x - x_i)\delta(y - y_i)\delta(t - \tau)$.

На рис. 1 показаны изолинии данного функционала.

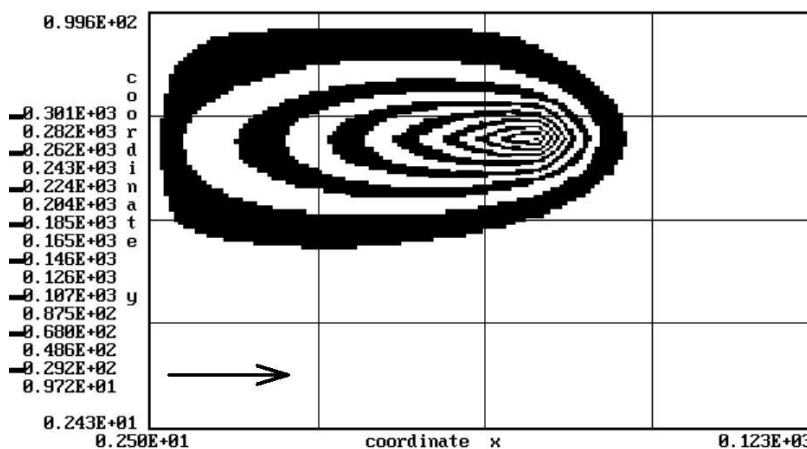


Рис. Изолинии функционала ($t=0,57$ – время безразмерное)

Представленные на рис. изолинии показывают область возможного размещения источника эмиссии, заданной интенсивности, чтобы к моменту времени $t=0,57$ в точке $x=63\text{м}$, $y=68\text{м}$ – концентрация хлора не превышала пороговое значение 30 мг/м^3 .

Выводы. Предложена численная модель для решения сопряженных задач в области загрязнения атмосферного воздуха при эмиссии химически опасных веществ. Решение задачи основывается на численном интегрировании уравнения, которое является сопряженным к двумерному уравнению переноса загрязняющих веществ в атмосфере. Численное интегрирование проводится с помощью неявной разностной схемы расщепления. На базе разработанной численной модели проводится расчет зон, где эмиссия химически опасного вещества приводит к появлению опасного уровня загрязнения атмосферного воздуха в области «интереса». Дальнейшее совершенствование данного направления следует проводить в направлении создания численной модели, позволяющей решать сопряженные задачи в случае эмиссии химически опасного вещества в условиях застройки.

List of reference links

1. Беляев, Н.Н., Гунько, Е.Ю., Росточило, Н.В. (2014). *Защита зданий от проникновения в них опасных веществ*. Монография. – Д.: Акцент ПП.
2. Беляев, Н.Н., Гунько, Е.Ю., Кириченко, П.С., Мунтян, Л.Я. (2017). *Оценка техногенного риска при эмиссии опасных веществ на железнодорожном транспорте*. Монография. – Кривой Рог: Изд. Р.А. Козлов.
3. Марчук, Г.И. (1982). *Математическое моделирование в проблеме окружающей среды*. Москва: Наука.
4. Згуровский, М.З., Скопецкий, В.В., Хрущ, В.К., Беляев Н.Н. (1997). *Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде*. Київ: Наук. думка.
5. Anthony, M.B. (2009). *Mathematical Modeling and Decision Analysis for Terrorism Defense. Assessing Chlorine Truck Attack Consequence and Countermeasure Cost Effectiveness*. Ph.D.

Department of Engineering and Public Policy, Carnegie Mellon University, Pittsburg, Pennsylvania.

6. Biliaiev, M. (2011). Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography. *NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security*, 87-91. http://dx.doi.org/10.1007/978-94-007-1359-8_15

АНОТАЦІЯ

Мета. Метою роботи є розробка чисельної моделі для розв'язання пов'язаних задач в області забруднення атмосферного повітря при емісії хімічно небезпечних речовин у разі аварій або терактів. Модель орієнтована на експрес оцінку можливих зон розміщення джерела емісії, щоб в заданій точці «інтересу» концентрація не перевищувала граничного рівня.

Методика досліджень складається в застосуванні методу чисельного інтегрування двомірного диференціального рівняння масопереносу, яке моделює поширення в атмосферному повітрі хімічно небезпечної речовини. Розглядається рівняння, яке є зв'язаним до рівняння масопереносу. За допомогою цього рівняння визначається зона, де розміщення джерела емісії може призвести до виникнення небезпечних концентрацій, для певного моменту часу, в точці «інтересу». Ця інформація дає можливість виявити підзони, де емісія небезпечної речовини, в разі аварії, теракту призведе до небажаних наслідків. Для розв'язання пов'язаної задачі використовується підхід, запропонований Г.І. Марчуком.

Результати дослідження. На основі розробленої чисельної моделі є можливість виконувати розв'язання як прямої задачі – розрахунок зон забруднення в атмосфері при відомому положенні джерела емісії, так і пов'язаної задачі. Представлені результати обчислювального експерименту.

Наукова новизна. Запропоновано нову чисельну модель, що дозволяє розв'язати пов'язану задачу в області забруднення атмосферного повітря при емісії хімічно небезпечних речовин – визначити зони, де викид забруднюючої речовини може призвести до небажаних наслідків у точці «інтересу». Модель може бути використана для проведення серійних розрахунків при розробці ПЛАС. Модель дозволяє врахувати вплив метеоумов в даному регіоні, атмосферної дифузії, потужності викиду при проведенні обчислювального експерименту.

Практичне значення. Запропоновано 2D чисельна модель для розв'язання пов'язаної задачі в області екологічної безпеки: вибору зон, де емісія небезпечної речовини може призвести до небажаних результатів в точці «інтересу». Модель дозволяє виявити підзони, де проведення теракту вкрай небезпечно.

Ключові слова: пов'язана задача, забруднення атмосфери, емісія хімічно небезпечних речовин.

ABSTRACT

Purpose. The purpose of the work is to develop a numerical model for solving associated problems in the field of atmospheric air pollution during the emission of chemically hazardous substances in the event of accidents or terrorist attacks. The model is oriented to the rapid assessment of possible emission source allocation zones, so that at a given point of "interest" the concentration does not exceed the threshold level.

Methodology. The research method consists in applying the method of numerical integration of the two-dimensional differential equation of mass transfer, which simulates the propagation of a chemi-

cally dangerous substance in the atmospheric air. An equation is considered that is conjugate to the mass transfer equation. With the help of this equation, a zone is determined where the location of the emission source can lead to the emergence of dangerous concentrations, for a certain time, at the point of "interest". This information makes it possible to identify subzones where the emission of a dangerous substance, in case of an accident, a terrorist act will lead to undesirable consequences. For the solution of the conjugate problem, the approach proposed by G.I. Marchuk.

Results. On the basis of the developed numerical model, it is possible to carry out solutions as a direct problem – the calculation of contamination zones in the atmosphere at a known position of the emission source and the associated problem. The results of a numerical experiment are presented.

Scientific novelty. A new numerical model is proposed that allows solving an associated problem in the field of atmospheric air pollution during the emission of chemically hazardous substances – to identify areas where the emission of a pollutant can lead to undesirable consequences at the point of "interest". The model can be used to perform serial calculations in developing a plan for eliminating a dangerous situation. The model makes it possible to take into account the influence of meteorological conditions in a given region, atmospheric diffusion, emission power during a computational experiment.

Practical significance. 2D numerical model is proposed for solving the related problem in the field of environmental safety: selecting zones where the emission of a hazardous substance can lead to undesirable results at the point of "interest". The model makes it possible to identify subzones where the conduct of an act of terrorism is extremely dangerous.

Keywords: conjugate task, atmosphere pollution, emission of chemically hazardous substances.

УДК 519.6

© М. Biliaiev, M. Lemesh, O. Savina, V. Tsurkan

BIOLOGICAL WASTEWATER TREATMENT IN AERATION TANKS

© М.М. Біляєв, М.В. Лемеш, О.П. Савіна, В.В. Цуркан

БІОЛОГІЧНЕ ОЧИЩЕННЯ СТИЧНИХ ВОД В АЕРОТЕНКАХ

Purpose. Development of mathematical model for prediction of output parameters of aeration tank with account of dissolved oxygen, oxygen, sludge, substrate transfer and biological treatment. The mathematical model may be used in predicting the effectiveness of aeration tank under different regimes of work.

Methodology. To simulate the process of biological wastewater treatment in aeration tank mathematical model was developed. This model is based on the set of differential equations which describe fluid dynamic process and biological process in aeration tank. The flow field in the aeration tank is simulated on the basis of potential flow model. This model allows to predict quickly flow pattern in the aeration tank. To simulate the process of sludge, substrate, oxygen, diluted oxygen transfer 2-D transport equations are used. To simulate the process of biological treatment simplified model is used which takes into account the process of sludge growth and substrate extinc-