

content of rocks in order to clarify the gas-generating potential of the Donetsk Coal Basin.

**Keywords:** *depth of occurrence, methane content of rocks, method, degree of coal metamorphism, open porosity*

УДК 519.6

© Н.Н. Беляев, И.В. Калашников, А.В. Берлов

### **3D CFD МОДЕЛЬ ОЦЕНКИ ТЕРРИТОРИАЛЬНОГО РИСКА В УСЛОВИЯХ ЗАСТРОЙКИ**

© M. Biliaiev, I. Kalashnikov, O. Berlov

### **3D CFD MODEL TO ASSESS TERRITORIAL RISK IN URBAN AREA**

**Цель.** Целью работы является разработка трехмерной численной модели для оценки территориального риска при эмиссии химически опасного вещества в условиях застройки. Модель ориентирована на экспресс оценку риска при проведении серийных расчетов при разработке плана ликвидации аварийной ситуации (ПЛАС) на химически опасных объектах или при экстремальных ситуациях на урбанизированных территориях.

**Методика исследований** состоит в применении метода численного интегрирования трехмерного дифференциального уравнения, описывающего рассеивание в атмосферном воздухе химически опасного агента. С помощью этого уравнения определяется концентрационное поле химического агента для различных моментов времени. Эта информация составляет основу для оценки территориального риска при различных метеоситуациях. Оценка территориального риска осуществляется для урбанизированной территории, на которой происходит деформация поля скорости воздушного потока, вследствие влияния на поток зданий. Задача аэродинамики по определению поля скорости ветрового потока при наличии застройки решается на основе модели потенциального течения. Для численного интегрирования трехмерного уравнения Лапласа для потенциала скорости используется метод Либмана. Для численного интегрирования уравнения переноса в атмосферном воздухе химического агента используется неявная разностная схема расщепления. На основе разработанной численной модели создан специализированный пакет прикладных программ.

**Результаты исследования.** На основе разработанной трехмерной численной модели проведен вычислительный эксперимент по оценке территориального риска в случае эмиссии химического агента в условиях застройки. Вычислительный эксперимент проведен для различных вероятностных метеоситуаций.

**Научная новизна.** Предложена новая трехмерная численная модель, позволяющая оценить территориальный риск в случае эмиссии химического агента в условиях урбанизированной территории. Модель может быть использована для проведения серийных расчетов при разработке ПЛАСа. Модель позволяет учесть пространственно-временное распределение концентрации химического агента, атмосферную диффузию, скорость ветра, интенсивность эмиссии химического агента, наличие зданий на пути рассеивания токсичного вещества.

**Практическое значение.** Предложена 3D численная модель для оценки территориального риска в условиях застройки. Модель основывается на численном интегрировании уравнения массопереноса опасных веществ при наличии зданий.

**Ключевые слова:** оценка территориального риска, загрязнения воздуха, токсичная химическая эмиссия

**Вступление.** В настоящее время, в Украине отсутствуют научно обоснованные методики для оценки территориального риска с учетом влияния застройки на формирование зон поражения. Такие методики необходимы для декларирования уровня промышленной безопасности объектов [1-5]. Нормативная методика ОНД-86 и методика прогноза последствий аварий на химически опасных объектах и транспорте не могут быть применены для решения задачи по оценке уровня территориального риска при эмиссии химических агентов в условиях застройки. Данные методики не учитывают динамику изменения концентрации опасного вещества при аварийной эмиссии, не учитывают процессы атмосферной диффузии и т.д. Методики, основанные на применении модели Гаусса также малоэффективны, т.к. не позволяют учесть влияние зданий на процесс формирования зон поражения. Эти методики могут быть основаны только для экспресс оценки территориального риска. В этой связи актуальной задачей является разработка научно обоснованных методов оценки территориального риска при аварийной эмиссии химических агентов на промышленных объектах.

**Целью** данной работы является создание 3D CFD модели для оценки территориального риска при эмиссии химически опасных веществ в условиях застройки.

**Постановка задачи.** Рассматривается краткосрочная эмиссия химически опасного вещества в условиях застройки. Ставится задача по определению территориального риска на основе определения зон поражения при вероятных метеоусловиях. Вероятность реализации конкретных метеоусловий – известна и определяется на основе известных данных наблюдений для региона или прогноза погоды.

**Расчет поля концентрации опасного вещества в атмосфере.** Для определения поля концентрации опасного вещества в атмосфере в случае конкретной метеоситуации, используется уравнение массопереноса [1-5]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial uC}{\partial x} + \frac{\partial vC}{\partial y} + \frac{\partial (w - w_s)C}{\partial z} + \sigma C = \\ \frac{\partial}{\partial x} \left( \mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) + \\ + \sum Q_i(t) \delta(x - x_i(t)) \delta(y - y_i(t)) \delta(z - z_i) \end{aligned} \quad (1)$$

где  $C$  – концентрация химического агента в атмосферном воздухе;

$\sigma$  – коэффициент, учитывающий распад агента и вымывание осадками;

$u, v, w$  – компоненты вектора скорости ветра;  
 $\mu_x, \mu_y, \mu_z$  – коэффициенты атмосферной турбулентной диффузии;  
 $w_s$  – скорость гравитационного оседания загрязнителя;  
 $x_i, y_i, z_i$  – координаты источника эмиссии химического агента;

$Q_i(t)$  – интенсивность эмиссии химического агента;  
 $\delta(x - x_i)\delta(y - y_i)\delta(z - z_i)$  – обозначение дельта-функции Дирака;  
 $t$  – время.

Постановка краевых условий для моделирующего уравнения (1) рассмотрена в [2, 3, 5].

Отметим, что поле скорости, необходимое для интегрирования уравнения (1) определяется из решения аэродинамической задачи.

**Расчет поля скорости в условиях застройки.** Поле скорости ветрового потока возле зданий рассчитывается на базе модели идеальной жидкости:

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

где  $\varphi$  – потенциал скорости.

Значение компонент вектора скорости ветрового потока определяются на основе соотношений:

$$u = \frac{\partial \varphi}{\partial x}; \quad v = \frac{\partial \varphi}{\partial y}; \quad w = \frac{\partial \varphi}{\partial z}. \quad (3)$$

**Метод решения.** Численное интегрирование моделирующих уравнений осуществляется с помощью конечно-разностных методов. Для численного интегрирования уравнения массопереноса химического агента применяется неявная разностная схема расщепления [2, 5]. Для численного интегрирования уравнения аэродинамики (2) используется метод Либмана.

**Методология расчета территориального риска.** Основным фактором, влияющим на формирование размеров и интенсивности зон химического заражения, при заданной интенсивности эмиссии, является скорость ветра. Кроме этого, дополнительно, в большой степени на это будет влиять расположение зданий вблизи источника эмиссии химически опасного вещества. Будем считать, что каждому погодному состоянию  $P(W_i)$  отвечает конкретная зона загрязнения, характеризующаяся размерами и концентрацией опасного вещества. Вероятность реализации конкретной метеоситуации определяется по зависимости [1]:

$$P(W_i) = N_{\Pi} / T, \quad (4)$$

где  $N_{\Pi}$  – часов, соответствующих определенной метеоситуации;

$T$  – период наблюдений (прогноз метеоситуации).

Вероятность попадания человека под действие шлейфа опасного вещества определяется соотношением:

$$P(W)_{\Sigma} = \sum_{i=0}^n P(W_i), \quad (5)$$

где  $P(W)_{\Sigma}$  – суммарная вероятность всех рассматриваемых метеоситуаций, при которых человек попадает в зону влияния источника эмиссии и получает токсичное поражение.

Для расчета риска оказаться в зоне токсичного поражения при эмиссии опасного вещества необходимо, для конкретной точки расчетной области, выполнить расчеты по формуле (5).

Основой такого расчета является расчет концентрации опасного вещества в расчетной области и сравнение этой концентрации с пороговой. Далее определяются зоны, где концентрация превосходит пороговый уровень – это и есть зоны поражения. Для различных метеоусловий (вероятность – известна) – размер и форма зон поражения будет различной. Построенный алгоритм оценки территориального риска реализован в разработанном коде «CHEM-RISK-3». Для программирования был использован алгоритмический язык Fortran.

Разработанный код включает в себя набор подпрограмм типа «SUBROUTINE». Каждая подпрограмма осуществляет расчет определенного этапа задачи. Результатом моделирования является поле загрязнения атмосферы, изменяющееся во времени, поле территориального риска и концентрация опасного вещества в точке расположения рецептора (информация выдается на печать для различных моментов времени).

**Результаты.** Ниже представлены результаты решения модельной задачи с помощью разработанной численной модели.

На рис. 1, 2 представлена расчетная область. Рассматривается эмиссия хлора для двух сценариев. Первый сценарий – нет препятствия перед источником эмиссии, здания расположены по бокам. Вторым сценарием – перед источником эмиссии расположена преграда. Длительность эмиссии – 10 мин. Для региона вероятные значения скорости ветра составляют: 2 м/с (вероятность 34%) и 6 м/с (вероятность 66%). Ставится задача рассчитать величину территориального риска (масштаб «microscale») для этих метеоситуаций. Принимается, что токсичное поражение наступает, если концентрация хлора в расчетной точке превышает 3 мг/м<sup>3</sup>.

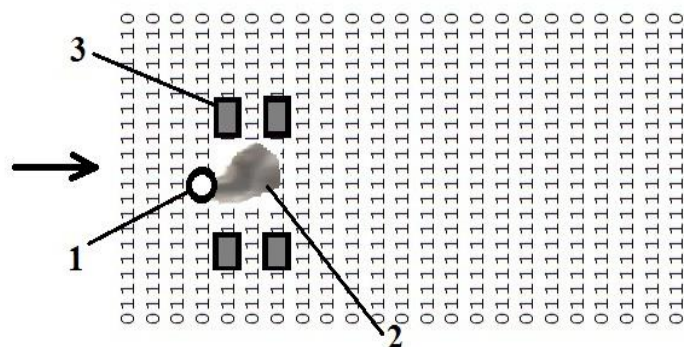


Рис. 1. Схема расчетной области для первого сценария: 1 – место эмиссии химического агента; 2 – шлейф токсичного газа; 3 – здания

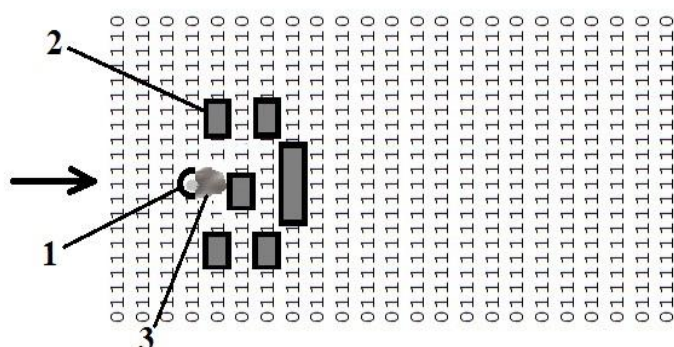


Рис. 2. Схема расчетной области для второго сценария (наличие препятствий на пути рассеивания химического агента): 1 – место эмиссии химического агента; 2 – здания; 3 –шлейф токсичного газа

На рисунке 3 показана зона загрязнения токсичным газом для момента времени 20 с, скорость ветра 2 м/с (уровень 3м от поверхности земли).

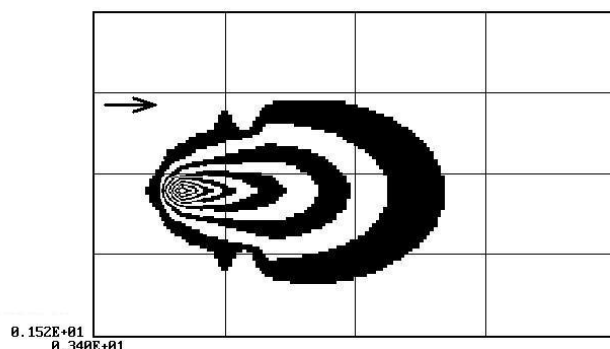


Рис. 3. Зона химического заражения при эмиссии опасного вещества (первый сценарий)

Из рис. 3 отчетливо видно положение источника эмиссии опасного вещества – возле него сформирована подзона с высоким градиентом концентрации примеси. Хорошо видна деформация поля концентрации опасного вещества, вызванная влиянием зданий.



**Выводы.** Предложена 3D CFD модель для оценки территориального риска в условиях застройки и в случае эмиссии химически опасного вещества. Оценка территориального риска основывается на базе численного моделирования рассеивания химически опасного вещества в условиях застройки. На базе такого расчета проводится оценка размеров зон, попадающих под влияние источника эмиссии химически опасного вещества. Дальнейшее совершенствование данного направления следует проводить в направлении создания численной модели, основанной на аэродинамической модели вихревых течений и позволяющей оценивать территориальный риск в случае эмиссии химически опасного вещества в условиях застройки.

#### Перечень ссылок

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. Стоецкий, В.Ф., Голинько, В.И., Дранишников, Л.В. (2014). Оценка риска при авариях техногенного характера. *Науковий вісник НГУ*, 3, 117-124.
4. 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.
5. 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](http://dx.doi.org/10.1007/978-94-007-1359-8_15)

#### АНОТАЦІЯ

**Мета.** Метою роботи є розробка тривимірної чисельної моделі для оцінки територіального ризику при емісії хімічно небезпечної речовини в умовах забудови. Модель орієнтована на експрес оцінку ризику при проведенні серійних розрахунків при розробці плану ліквідації аварійної ситуації (ПЛАС) на хімічно небезпечних об'єктах або при екстремальних ситуаціях на урбанізованих територіях.

**Методика досліджень** полягає в застосуванні методу чисельного інтегрування тривимірного диференціального рівняння, що описує розсіювання в атмосферному повітрі хімічно небезпечного агента. За допомогою цього рівняння визначається концентраційне поле хімічного агента для різних моментів часу. Ця інформація становить основу для оцінки територіального ризику при різних метеоситуаціях. Оцінка територіального ризику здійснюється для урбанізованої території, на якій відбувається деформація поля швидкості повітряного потоку, внаслідок впливу на потік будівель. Задача аеродинаміки за визначенням поля швидкості вітрового потоку при наявності забудови вирішується на основі моделі потенційної течії. Для чисельного інтегрування тривимірного рівняння Лапласа для потенціалу швидкості використовується метод Лібмана. Для чисельного інтегрування рівняння переносу в атмосферному повітрі хімічного агента використовується неявна різницева схема розщеплення. На основі розробленої чисельної моделі створений спеціалізований пакет прикладних програм.

**Результати дослідження.** На основі розробленої тривимірної чисельної моделі проведено обчислювальний експеримент по оцінці територіального ризику в разі емісії хімічного агента в умовах забудови. Обчислювальний експеримент проведений для різних імовірнісних метеоситуацій.

**Наукова новизна.** Запропонована нова тривимірна чисельна модель, що дозволяє оцінити територіальний ризик в разі емісії хімічного агента в умовах урбанізованої території. Модель може бути використана для проведення серійних розрахунків при розробки ПЛАС. Модель дозволяє врахувати просторово-часовий розподіл концентрації хімічного агента, атмосферну дифузію, швидкість вітру, інтенсивність емісії хімічного агента, наявність будівель на шляху розсіювання токсичної речовини.

**Практичне значення.** Запропонована 3D чисельна модель для оцінки територіального ризику в умовах забудови. Модель ґрунтується на чисельному інтегруванні рівняння масопереносу небезпечних речовин при наявності будівель.

*Ключові слова:* оцінка територіального ризику, забруднення повітря, токсична хімічна емісія

### ABSTRACT

**Purpose.** The purpose of the work is the development of a three-dimensional numerical model for assessing the territorial risk in the emission of a chemically hazardous substance in a building environment. The model is focused on rapid risk assessment during serial calculations when developing an emergency response plan at chemically hazardous sites or in extreme situations in urbanized areas.

**Methodology.** The research method consists in applying the method of numerical integration of a three-dimensional differential equation describing the dispersion in air of a chemically dangerous agent. Using this equation, the concentration field of the chemical agent is determined for different instants of time. This information is the basis for assessing the territorial risk in various meteorological situations. The territorial risk assessment is carried out for an urbanized area on which the air-flow velocity field deforms, due to the influence on the flow of buildings. The problem of aerodynamics in determining the velocity field of the wind flow in the presence of building is solved on the basis of the potential-flow model. For the numerical integration of the three-dimensional Laplace equation for the velocity potential, the Liebmann method is used. For numerical integration of the transport equation in the atmospheric air of a chemical agent, an implicit difference splitting scheme is used. Based on the developed numerical model, a specialized package of applied programs has been created.

**Results.** Based on the developed three-dimensional numerical model, a computational experiment was carried out to assess the territorial risk in the case of chemical agent emissions in the building environment. A computational experiment was carried out for various probabilistic meteorological situations.

**Scientific novelty.** A new three-dimensional numerical model is proposed that allows assessing the territorial risk in the case of the emission of a chemical agent in an urbanized area. The model can be used to perform serial calculations when developing the emergency response plan. The model allows to take into account the spatio-temporal distribution of chemical agent concentration, atmospheric diffusion, wind speed, chemical agent emission intensity, the presence of buildings on the way of dispersal of a toxic substance.



**Practical significance.** 3D numerical model is proposed for assessing the territorial risk in a building environment. The model is based on the numerical integration of the equation of mass transfer of hazardous substances in the presence of buildings.

**Keywords:** *territorial risk assessment, air pollution, toxic chemical emission.*

УДК 519.6

© Н.Н. Беляев, М.В. Лемеш, П.Б. Машихина

## УПРОЩЕННАЯ МОДЕЛЬ РАБОТЫ АЭРОТЕНКА

© M. Biliaiev, M. Lemesh, P. Mashykhina

### SIMPLIFIED MODEL TO SIMULATE THE AERATION TANK WORK

**Цель.** Целью работы является создание быстро считающей компьютерной модели для оценки эффективности работы аэротенка. Модель ориентирована на экспресс прогноз значения концентрации загрязняющего вещества, активного ила и кислородного режима в аэротенке.

**Методика исследований** состоит в применении метода численного интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений, которые описывают изменения концентрации загрязняющего вещества, активного ила и растворенного кислорода в аэротенке. Для численного интегрирования моделирующих уравнений используется метод Эйлера. Моделирующие уравнения включают в себя параметры, учитывающие рост бактерий активного ила, отмирание бактерий активного ила, изменение кислородного режима, за счет потребления кислорода бактериями активного ила.

**Результаты исследования.** Построена математическая модель, позволяющая в течение нескольких секунд оценить эффективность работы аэротенка с учетом влияния на процесс биологической очистки сточных вод следующих параметров: концентрация активного ила, растворенного в воде кислорода, концентрации загрязняющего вещества в сточной воде. Выполнена программная имплементация разработанной численной модели.

**Научная новизна.** Предложена новая эффективная численная модель для оценки эффективности биологической очистки сточных вод в аэротенке. Особенностью модели является достаточно полный учет основных физических факторов, влияющих на процесс биологической очистки. Основу модели составляют балансовые уравнения для концентрации загрязняющего вещества в сточной воде, активного ила и растворенного в воде кислорода.

**Практическое значение.** Разработана математическая модель для оценки эффективности работы аэротенка. Выполнена программная реализация модели в виде пакета прикладных программ. Модель позволяет оперативно проводить серийные расчеты по анализу и прогнозу эффективности биологической очистки сточных вод в аэротенках с учетом основных физических параметров, влияющих на работу аэротенка. Разработанная математическая модель может быть использована для анализа работы новых аэротенков или при реконструкции уже существующих аэротенков. Представлены результаты вычислительного эксперимента, проведенного на базе разработанной математической модели.

**Ключевые слова:** *аэротенк, сточные воды, математическое моделирование.*