

E. Gunko, Cand. of Techn. Sc., Do.

Dnepropetrovsk National University of Railway Engineering

Key words: *atmosphere pollution, numerical simulation, pollutant dispersion*

Introduction. The prediction of the concentration of the toxic gas in the atmosphere is the main information which is necessary to know in the case of toxic gas release after accidents. This information is very important to assess the danger level after the accident and to organize the protection or evacuation of the population. To solve this problem it is necessary to calculate the toxic gas dispersion in the atmosphere. The emergency service is in need nowadays of the effective tool to solve this problem.

Literature review. In Ukraine two models are widely used to predict the threat in the case with accidents with the toxic substance emissions. This the empirical model adopted by the Ukrainian authorities [7] and Gaussian plume model (in some case the analytical model of the instant ejection) [10; 11]. Both models allow to calculate the size of the hitting area but they can't take into account the different types of ejections [3; 10; 11]. Therefore, it is important to develop CFD models having more capabilities to simulate the process of the atmosphere pollution after toxic substances ejections [1; 4; 5].

The purpose. The main purpose of this work is the development of the effective numerical model which is more effective than the standard model and can be used for monitoring problems in the case of accidents with toxic substances.

Governing equations. To simulate the process of pollutant (toxic chemical substances) transfer in the atmosphere the transport equation is used [6]:

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

where u , v , w are the velocity components in x , y and z direction respectively;

C is the concentration of toxic substance;

σ is the parameter taking into account the process of toxic gas decay;

μ_x , μ_y , μ_z are the coefficients of turbulent diffusion in x , y and z direction respectively;

x_i , y_i , z_i are the coordinates of point source of emission;

$Q_i(t)$ is the intensity of pollutant emission;

$\delta(x - x_i) \delta(y - y_i) \delta(z - z_i)$ is Dirac's delta-function.

In the developed numerical model, the following profile of velocity component u and coefficient of diffusion μ_z is used [2]:

$$u = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n, \quad \mu_z = k_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^m, \quad (2)$$

where u_1 is the velocity at height z_1 ; $k_1 = 0,2$; $n = 0,16$; $m \approx 1$.

The transport equation is used with the following boundary conditions [6; 9]:

– inlet boundary: $C|_{inlet} = C_E$, where C_E is the known concentration (very often $C_E = 0$);

– outlet boundary: in numerical model the condition $C(i+1, j, k) = C(i, j, k)$ is used (this boundary condition means that we neglect the process of diffusion at this plane).

Numerical integration of the equations. To develop the numerical model the following splitting of equation (1) is carried out [1]:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial uc}{\partial x} + \frac{\partial vc}{\partial x} + \frac{\partial wc}{\partial z} + \sigma c = 0, \quad (3)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial c}{\partial z} \right), \quad (4)$$

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \sum Q_i(t) \delta(r - r_i). \quad (5)$$

The following approximation of the first order derivatives is fulfilled [9]:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \approx \frac{C_{ijk}^{n+1} - C_{ijk}^n}{\Delta t}, \quad (6)$$

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

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

$$\frac{\partial w C}{\partial z} = \frac{\partial w^+ C}{\partial z} + \frac{\partial w^- C}{\partial z},$$

$$\text{where: } u^+ = \frac{u + |u|}{2}; u^- = \frac{u - |u|}{2}; v^+ = \frac{v + |v|}{2}; v^- = \frac{v - |v|}{2}; w^+ = \frac{w + |w|}{2}; w^- = \frac{w - |w|}{2}.$$

$$\frac{\partial u^+ C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j,k}^+ C_{ijk}^{n+1} - u_{i,j,k}^+ C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial u^- C}{\partial x} \approx \frac{u_{i+1,j,k}^- C_{i+1,j,k}^{n+1} - u_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta x} = L_x^- C^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^+ C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1,k}^+ C_{ijk}^{n+1} - v_{i,j,k}^+ C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial v^- C}{\partial y} \approx \frac{v_{i,j+1,k}^- C_{i,j+1,k}^{n+1} - v_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta y} = L_y^- C^{n+1},$$

$$\frac{\partial w^+ C}{\partial z} \approx \frac{w_{i,j,k+1}^+ C_{ijk}^{n+1} - w_{i,j,k}^+ C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z} = L_z^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial w^- C}{\partial z} \approx \frac{w_{i,j,k+1}^- C_{i,j,k+1}^{n+1} - w_{i,j,k}^- C_{i,j,k}^{n+1}}{\Delta z} = L_z^- C^{n+1}.$$

The second order derivatives are approximated as following:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\mu_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \approx \tilde{\mu}_{x_1} \frac{C_{i+1,j,k}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta x^2} - \tilde{\mu}_{x_2} \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i-1,j,k}^{n+1}}{\Delta x^2} = M_{xx}^- C^{n+1} + M_{xx}^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\mu_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \approx \tilde{\mu}_{y_1} \frac{C_{i,j+1,k}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta y^2} - \tilde{\mu}_{y_2} \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j-1,k}^{n+1}}{\Delta y^2} = M_{yy}^- C^{n+1} + M_{yy}^+ C^{n+1},$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(\mu_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \approx \tilde{\mu}_{z_1} \frac{C_{i,j,k+1}^{n+1} - C_{ijk}^{n+1}}{\Delta z^2} - \tilde{\mu}_{z_2} \frac{C_{i,j,k}^{n+1} - C_{i,j,k-1}^{n+1}}{\Delta z^2} = M_{zz}^- C^{n+1} + M_{zz}^+ C^{n+1},$$

$$\text{where } \mu_{x_1} = \frac{2\mu_i \mu_{i+1}}{\mu_i + \mu_{i+1}}, \text{ etc.}$$

In these formulae $L_x^+, L_x^-, L_y^+, L_y^-, L_z^+, L_z^-, M_{xx}^+, M_{xx}^-$, etc. are the notations of the difference operators.

After the approximation the solution of the difference equation is splitted in 4 steps:

– at the first step $k = \frac{1}{4}$:

$$\frac{C_{ij}^{n+k} - C_{ij}^n}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^+ C^k + L_y^+ C^k + L_z^+ C^k) + \frac{\sigma}{2} C_{ijk}^n = 0;$$

– at the second step $k = n + \frac{1}{2}$; $c = n + \frac{1}{4}$:

$$\frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} + \frac{1}{2} (L_x^- C^k + L_y^- C^k + L_z^- C^k) + \frac{\sigma}{2} C_{ij}^k = 0;$$

– at the third step $k = n + \frac{3}{4}$; $c = n + \frac{1}{2}$:

$$\frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} = \frac{1}{2} (M_{xx}^- C^c + M_{xx}^+ C^k + M_{yy}^- C^c + M_{yy}^+ C^k + M_{zz}^- C^c + M_{zz}^+ C^k);$$

– at the fourth step $k = n + 1$; $c = n + \frac{3}{4}$:

$$\frac{C_{ijk}^k - C_{ijk}^c}{\Delta t} = \frac{1}{2} (M_{xx}^- C^k + M_{xx}^+ C^c + M_{yy}^- C^k + M_{yy}^+ C^c + M_{zz}^- C^k + M_{zz}^+ C^c).$$

At the fifth step the influence of the sources of toxic gas emission is taken into account [9]:

$$\frac{C_{i,j,k}^{5n+1} - C_{i,j,k}^{5n}}{\Delta t} = \sum_{l=1}^N \frac{Q_l(t^{n+1/2})}{\Delta x \Delta y \Delta z} \delta_l. \quad (7)$$

On the basis of the developed model the code was created using FORTRAN language.

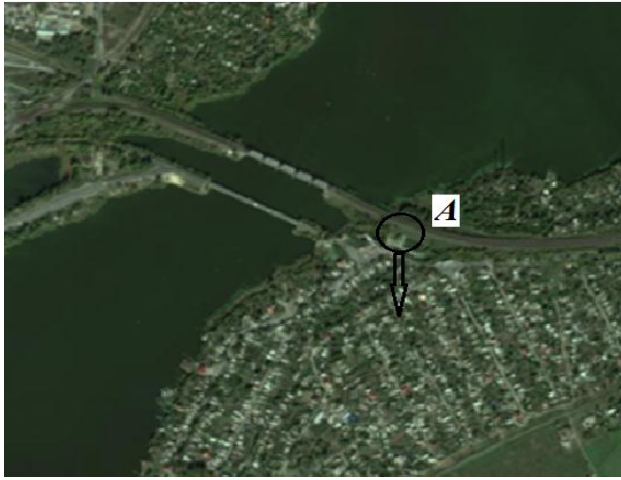


Fig. 1. Sketch of the computational domain:
(Railway bridge near settlement «Igren»
A – position of the toxic gas emission



Fig. 2. Concentration of NH_3 , $t = 11$ min (1
– $C = 24 \text{ mg/m}^3$; 2 – $C = 53 \text{ mg/m}^3$)



Fig. 3. Concentration of NH_3 , $t=32$ min (1 – $C=18$ mg/m^3 ; 2 – $C=43$ mg/m^3)

Results. The developed model was used to solve the following problem. It is suppose that the emission of NH_3 takes place as the result of the accident at the railway near the railway bridge «Samarskij» (Fig.1). The settlement «Igren» is situated near the railway bridge. That is why it is very important to predict the level of the atmosphere pollution after the accident.

The scenario of the problem was as following. At time $t = 0$ the short term emission, during 25 min of NH_3 takes place. The wind speed is 5 m/s. The aim of the calculation was to obtain the dimensions of the contaminated area near the settlement «Igren». The results of the numerical experiments are shown below.

As it is clear from figures 2 – 3 the toxic gas plume very quickly reaches the buildings of «Igren» settlement. The plume has the specific geometrical form as a result of the short term emission. The concentration in the plume is much higher than the hitting concentration which is equal to 20 mg/m^3 for NH_3 . It means that it is necessary to develop measures to protect the population in settlement «Igren».

The computational time to solve the problem was about 15 sec. So the developed model can be used to predict very quickly the concentration field in the case of accidents.

REFERENCES

1. Антошкина Л. И. Оценка экологического риска при авариях с химически опасными веществами / Л. И. Антошкина, Н. Н. Беляев, Е. Ю. Гунько. – Д. : Наука и образование, 2008. – 136 с.
2. Берлянд М. Е. Современные проблемы атмосферной диффузии и загрязнения атмосферы / М. Е. Берлянд. – Л. : Гидрометеоиздат, 1975. – 448 с.
3. Бруяцкий Е. В. Теория атмосферной диффузии радиоактивных выбросов / Е. В. Бруяцкий. – К. : Институт гидромеханики НАН Украины, 2000. – 443 с.
4. Гунько Е. Ю. Моделирование загрязнения атмосферы при испарении жидкости из грунта / Е. Ю. Гунько // Вісник Дніпропетр. нац. ун-ту залізн. трансп. ім. акад. В. Лазаряна. – 2007. – № 19. – С. 35 – 39.
5. Гунько Е. Ю. Оценка риска токсичного поражения людей при аварийном выбросе химически опасного вещества / Е. Ю. Гунько // Вісник Дніпропетр. нац. ун-ту залізн. трансп. ім. акад. В. Лазаряна. – 2008. – № 20. – С. 87 – 90.
6. Марчук Г. И. Математическое моделирование в проблеме окружающей среды / Г. И. Марчук. – М. : Наука, 1982. – 320 с.
7. Методика прогнозування наслідків вилливу (викиду) небезпечних хімічних речовин при аваріях на промислових об'єктах і транспорті – К. : 2001. – 33 с.
8. Самарский А. А. Теория разностных схем / А. А. Самарский. – М. : Наука, 1983. – 616 с.
9. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде / М. З. Згуровский, В. В. Скопецкий, В. К. Хрущ [и др.]. – К. : Наук. думка, 1997. – 368 с.

10. **Hanna S.** Hybrid Plume Dispersion Model (HPDM) Improvements and Testing / S. Hanna, J. Chang // College on Atmospheric Boundary Layer and Air Pollution Modelling: 16 May – 3 June 1994. – № SMR/760 – 4. P. 1491 – 1508.

11. **Tirabashi T.** Analytical Air Pollution Advection and Diffusion Models / T. Tirabashi // College on Atmospheric Boundary Layer and Air Pollution Modeling. – 16 May – 3 June 1994. – № SMR / 760 – 9.

SUMMARY

Постановка задачі. Внаслідок надзвичайних ситуацій техногенного характеру відбувається інтенсивне забруднення атмосфери. Прогнозування процесу розповсюдження забруднювача є важливим при прийнятті адекватних рішень під час локалізації зон забруднення та ліквідації наслідків аварійних ситуацій з хімічно небезпечними речовинами.

Аналіз проблеми дослідження. Аналіз сучасних методів прогнозування забруднення атмосфери після аварій з небезпечними речовинами показав наявність суттєвих недоліків, а саме: вони не враховують вплив будівель на процес переносу небезпечних речовин в атмосфері, параметри метеоситуації та потребують великих втрат часу на отримання результату прогнозування. Таким чином, постає необхідність у створенні чисельних моделей, що дозволяють комплексно врахувати перелічені вище чинники та швидко виконувати розрахунки.

Для практичного застосування вкрай важливо мати стійкі чисельні алгоритми, які дозволяли б розраховувати забруднення атмосфери для широкого кола аварійних ситуацій. Тому в даній роботі для прогнозу аварійного забруднення атмосфери застосовано неявну поперемінно-трикутну різницеву схему. Ця схема має особливість – вона є неявною за побудовою, але розрахунок значення концентрації здійснюється за явною схемою – метод «бегущего счета».

Мета дослідження. Метою дослідження є розробка нової ефективної 3-D чисельної моделі для розрахунку розсіювання токсичних газів в атмосфері, яка враховує вплив будівель на процес переносу забруднювача в атмосфері, параметри метеоситуації, легка в користуванні та для отримання результату прогнозування потребує 10 – 15 секунд.

Висновки. Розроблено ефективну чисельну модель для моделювання тривимірного процесу забруднення атмосфери у разі надзвичайних ситуацій на базі гідродинамічної моделі потенціальної течії і тривимірного рівняння переносу домішки, які враховують вплив вітрового потоку на перенос забруднювача і хімічний розпад забруднюючої речовини.

Розроблену модель було використано для розрахунку зони ураження в селітебній зоні у випадку аварії з викидом токсичних газів поблизу залізничного мосту. Представлено результати розрахунків, що ілюструють ефективність розробленої 3-D моделі прогнозування розсіювання забруднювача в атмосфері. На основі проведених розрахунків показано, що у випадку аварійної ситуації можливе швидке та небезпечне забруднення атмосфери в селітебній зоні.

REFERENCES

1. Antoshkina L. I. Otsenka ekologicheskogo riska pri avariayah s himicheskimi opasnyimi veschestvami / L. I. Antoshkina, N. N. Belyaev, E. Yu. Gunko. – D. : Nauka i obrazovanie, 2008. – 136 s.
2. Berlyand M. E. Sovremennyye problemyi atmosfernooy diffuzii i zagryazneniya atmosferyi / M. E. Berlyand. – L. : Gidrometeoizdat, 1975. – 448 s.
3. Bruyatskiy E. V. Teoriya atmosfernooy diffuzii radioaktivnyih vyibrosov / E. V. Bruyatskiy. – K. : Institut gidromekhaniki NAN Ukrainyi, 2000. – 443 s.
4. Gunko E. Yu. Modelirovanie zagryazneniya atmosferyi pri isparenii zhidkosti iz grunta / E. Yu. Gunko // Visnyk Dnipropetr. nats. un-tu zalozn. transp. im. akad. V. Lazaryana. – 2007. – № 19. – S. 35 – 39.
5. Gunko E. Yu. Otsenka riska toksichnogo porazheniya lyudey pri avariynom vyibrose himicheskimi opasnogo veschestva / E. Yu. Gunko // Visnyk Dnipropetr. nats. un-tu zalozn. transp. im. akad. V. Lazaryana.. – 2008. – № 20. – S. 87 – 90.
6. Marchuk G. I. Matematicheskoe modelirovanie v probleme okruzhayushey sredy / G. I. Marchuk. – M. : Nauka, 1982. – 320 s.

7. Metodika prognozuvannya naslidkiv vilivu (vikidu) nebezpechnih hlimichnih rechovin pri avariyah na promislovih ob'ekтах i transporti. – K. : 2001. – 33 s.
8. Samarskiy A. A. Teoriya raznostnyih shem / A. A. Samarskiy. – M. : Nauka, 1983. – 616 s.
9. Chislennoe modelirovanie rasprostraneniya zagryazneniya v okruzhayuschey srede / M. Z. Zgurovskiy, V. V. Skopetskiy, V. K. Hrusch, N. N. Belyaev. – K. : Nauk. dumka, 1997. – 368 s.
10. Hanna S. Hybrid Plume Dispersion Model (HPDM) Improvements and Testing / S. Hanna, J. Chang // College on Atmospheric Boundary Layer and Air Pollution Modelling: 16 May – 3 June 1994. – № SMR/760 – 4. P. 1491 – 1508.
11. Tirabashi T. Analytical Air Pollution Advection and Diffusion Models / T. Tirabashi // College on Atmospheric Boundary Layer and Air Pollution Modeling. – 16 May – 3 June 1994. – № SMR / 760 – 9.

UDC 519.6

Simulation of the atmosphere pollution in the case of accidents / E. Gunko // Visnyk of Pridneprovsk State Academy of Civil Engineering and Architecture. – D. : PSACEA, 2014. – № 1. – P. 40 – 45. – pic. 3. – Bibliogr. : (11 names).

A numerical model was developed to simulate the pollutant dispersion in the atmosphere after accidents. The model is based on the 3-D K-gradient model of pollutant dispersion. The implicit scheme is used for the numerical integration. Results of numerical experiment are presented.

Key words: *atmosphere pollution, numerical simulation, pollutant dispersion.*

Моделювання забруднення атмосфери у випадку надзвичайних ситуацій / О. Ю. Гунько // Вісник Придніпровської державної академії будівництва та архітектури. – Д. : ПДАБА, 2014. – № 1. – С. 40 – 45. – рис. 3. – Бібліогр. : (11 назв).

Розроблено числову модель для моделювання тривимірного процесу переносу забруднювача в атмосфері під час аварій. Модель базується на числовому інтегруванні тривимірного рівняння переносу домішки. Для числового інтегрування використовується неявна різницева схема. Наведено результати розрахунків на базі розробленої моделі.

Ключові слова: *забруднення атмосфери, числове моделювання, розсіювання домішки.*

Моделирование загрязнения атмосферы в случае чрезвычайных ситуаций / Е. Ю. Гунько // Вісник Придніпровської державної академії будівництва та архітектури. – Д. : ПГАСА, 2013. – №. – С. 40 – 45. – рис. 3. – Библиогр. : (11 назв.).

Разработана численная модель для моделирования трехмерного процесса переноса загрязнителя в атмосфере. Модель основывается на численном интегрировании трехмерного уравнения переноса примеси. Для численного интегрирования используется неявная разностная схема. Представлены результаты численного моделирования.

Ключевые слова: *загрязнение атмосферы, численное моделирование, рассеивание примеси.*