

УДК 551.556.42.001.57

© В. М. Колодкин

## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РАССЕЯНИЯ ВЫБРОСОВ ТОКСИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ В АТМОСФЕРЕ

Рассмотрены математические модели, лежащие в основе прогнозирования последствий химических аварий. Математические модели составляют основу параллельной компьютерной системы для проведения расчетов аварийного риска на параллельных компьютерах с распределенной памятью.

*Ключевые слова:* рассеяние токсичных веществ в атмосфере, аварийный риск, последствия химических аварий.

### Введение

Количественная оценка риска для людей и окружающей природной среды от потенциально опасного объекта при химической аварии предполагает:

- выявление совокупности потенциально возможных аварийных сценариев, связанных с деятельностью объекта, а также выделение сценариев, которые по предварительной оценке, приводят к существенному воздействию на человека, на окружающую природную среду;
- прогноз последствий аварий для жизнедеятельности человека и окружающей природной среды при неблагоприятных сценариях развития аварий.

Прогноз последствий аварий и их количественная оценка в виде категорий аварийного риска, в свою очередь, базируется на математическом моделировании аварийных процессов.

В настоящей работе кратко рассмотрены некоторые математические модели и методы, использованные для оценки уровня опасности от потенциально опасного объекта при химической аварии.

### Математические модели

Определяющее соотношение для прогнозирования оценок аварийного риска может быть представлено в виде [1]:

$$\boxed{\begin{array}{c} \text{Оценка} \\ \text{аварийного} \\ \text{риска} \end{array}} = \sum_z \boxed{\begin{array}{c} \text{Частота } z\text{-го} \\ \text{аварийного} \\ \text{процесса} \end{array}} \times \boxed{\begin{array}{c} \text{Ущерб (потери)} \\ \text{при } z\text{-ом} \\ \text{аварийном} \\ \text{процессе} \end{array}}. \quad (0.1)$$

Суммирование в (0.1) производится по всей совокупности аварийных событий, которые могут иметь место на объекте. Количественная оценка уровня опасности, выраженная в оценке риска, представляется относительно конкретного объекта воздействия и меры ущерба. В качестве объекта воздействия выбран человек.

Характерной особенностью многих опасных техногенных объектов является относительная удаленность населения, проживающего в районе размещения объекта. Поэтому можно полагать, что наибольшую опасность для населения представляют аварии, связанные с попаданием в атмосферу токсичных веществ.

Последствия (ущерб) от наиболее опасных аварий — так называемых химических аварий, при которых в атмосферу попадают токсичные вещества, определяются функциональной зависимостью между дозой вещества (токсической нагрузкой), полученной организмом, и реакцией

организма («эффектом»). Экспериментально установлено [2], что эта зависимость выражается  $S$ -образной кривой зависимости ущерба  $U$  от токсической нагрузки  $D$ , которая выражается в виде —

$$D(x, y) = \int_0^{t_0} c^n(x, y, t) dt, \quad (0.2)$$

где  $t_0$  — время воздействия,  $n$  — характеристика воздействия токсичного химического вещества (ТХВ).

В свою очередь, динамика концентрационного поля ТХВ после аварии может быть определена путем компьютерного моделирования формирования токсичного выброса и последующего турбулентного рассеивания в атмосфере.

### § 1. Модель формирования токсичного выброса

Рассмотрим ситуацию при которой в атмосферу мгновенно поступает большой объем нагретой газовой фазы. Будем называть выброс облаком, имея в виду, что облако отличается от окружающей атмосферы составом и температурой.

В предположении сферичности облака и пропорциональности потоков массы поверхности облака записываются балансы для массы, импульса и теплосодержания облака [3]:

$$dM/dt = F_1 - F_2, \quad F_1 = k_1 \rho_a S |\mathbf{u} - \mathbf{u}_a|, \quad F_2 = k_2 \rho S |\mathbf{u} - \mathbf{u}_a|, \quad (1.1)$$

$$(1 + 1/\xi) d\mathbf{u}/dt = F_1/M(\mathbf{u}_a - \mathbf{u}) + (1 - 1/\xi)\mathbf{g}, \quad (1.2)$$

$$C_p dT/dt = V dp_a/dt + c_{pa}(T_a - T)F_1 + Q, \quad (1.3)$$

где  $M$  — масса,  $T$  — температура,  $\mathbf{u}$  — скорость,  $\rho$  — плотность,  $\xi$  — относительная плотность облака. Индекс «а» соответствует параметрам окружающей среды. В выражениях (1.1)–(1.3):  $F_1, F_2$  — потоки массы от среды к облаку и от облака к среде, соответственно,  $S$  — площадь поверхности облака,  $Q$  — скорость выделения теплоты фазовых превращений воды в облаке.

Численное решение системы уравнений (1.1)–(1.3) с соответствующими начальными условиями позволяет определить динамику подъема облака, а также динамику загрязнения пограничного слоя атмосферы. Численные эксперименты показывают, что положение облака стабилизируется на некоторой высоте (пренебрегая пульсациями, сопоставимыми с диаметром облака). Временной интервал стабилизации облака — несколько минут. Поэтому облако можно рассматривать как объемный источник токсичной примеси. При подъеме облака образуется так называемый след облака — остающиеся в атмосфере при подъеме облака токсичные вещества. Этот след облака рассматривается как неоднородный по высоте нестационарный объемный источник примеси.

### § 2. Модель распространения токсической опасности

Для расчета рассеивания примеси в вертикально неоднородном пограничном слое атмосферы использовалось численное решение нестационарного трехмерного уравнения турбулентной диффузии [4]:

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \sum_{\alpha=1}^3 U_\alpha \frac{\partial c_i}{\partial x_\alpha} = \sum_{\alpha=1}^3 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} K_\alpha \frac{\partial c_i}{\partial x_\alpha} + R_s(c_1, c_2, \dots, c_N) + E_s - (k_{1s} + k_{2s})c_i, \quad (2.1)$$

где  $c_i$  — концентрация  $i$ -го компонента примеси,  $x_\alpha$  — декартовы прямоугольные координаты,  $U_\alpha$  и  $K_\alpha$  — скорости потока и коэффициенты обмена среды,  $E_s$  — описывает распределение источников и стоков,  $R_s$  — вклад химических реакций,  $k_{1s}$  и  $k_{2s}$  — коэффициенты, описывающие поглощение частиц по высоте. В качестве начального условия для уравнения (2.1) служит, поле концентраций, которое сформировано на основе модели формирования токсичного

выброса. Граничные условия на удалении от источников эмиссии выставляются в соответствии с предположением об отсутствии загрязнения.

Параметризация пограничного слоя атмосферы (ПСА) основана на результатах работы [5], в которой был предложен метод восстановления профилей скорости и направления ветра, коэффициентов турбулентного обмена по данным стандартных наземных метеорологических наблюдений. Модель ПСА была дополнена параметризацией низкочастотных флуктуаций направления ветра на базе стохастического уравнения Ланжевена, учет которых необходим для адекватного описания рассеяния примеси при штилевых условиях и инверсии.

При численном решении уравнение (2.1) аппроксимировалось неявной консервативной разностной схемой, заданной на неравномерной прямоугольной разностной сетке. При построении разностной схемы использовали расщепление по физическим процессам и координатным направлениям в сочетании с методом контрольного объема. Использованы контрольные объемы прямоугольной формы. Выражения для потоков на гранях контрольных объемов получены при помощи полиномиальной аппроксимации экспоненциальной схемы.

Процесс численного решения был распараллелен. Алгоритм распараллеливания основан на одномерном разбиении пространства на подобласти вдоль направления преобладающего потока и использовании схемы конвейерного типа с последовательной загрузкой процессоров.

### § 3. Модели прогноза аварийного риска

Модели прогноза аварийного риска призваны представить количественные критерии уровня опасности, которые позволяют сопоставлять по уровню опасности как различные аварийные ситуации на одном объекте, так уровни опасности, порождаемые различными объектами.

Введем обозначения:  $P_z$  - частота (интенсивность) появления  $z$ -го аварийного процесса,  $U_k^z$  - ущерб от аварии. В принятых обозначениях выражение для оценки аварийного риска  $R$  может быть представлено в виде:

$$R(r, \phi) = \sum_z P_z \cdot W^z(r, \phi), \quad (3.1)$$

где оценка условного аварийного риска  $W^z(r, \phi)$ , связанная с  $z$ -ой аварией,

$$W^z(r, \phi) = \sum_k \nu_k \cdot U_k^z(r, \phi). \quad (3.2)$$

Оценка условного аварийного риска характеризует последствия аварии при условии, что авария является достоверным событием. По смыслу величина условного риска отвечает величине возможных потерь в выделенной точке при условии, что авария имела место. Таким образом, оперируя условными оценками риска можно исключить достаточно неопределенный частотный фактор  $P_z$  и сконцентрировать внимание на имманентных характеристиках объекта и территории, где объект размещен. Эти характеристики отвечают значениям  $\nu_k, U_k^z$ . Отметим, что упомянутые характеристики, как правило, являются детерминированными и определяются набором климатических факторов, технологией работ на объекте и так далее.

Оценка условного аварийного группового риска в точке  $(r, \phi) \in \Omega$

$$W_g^z(r, \phi) = \psi(r, \phi) \cdot W^z(r, \phi), \quad (3.3)$$

где  $\psi(r, \phi)$  - плотность распределения людей в зоне поражения  $\Omega, (r, \phi) \in \Omega$ , отвечающая условию нормировки -  $M = \int_{\Omega} \psi(r, \phi) d\Omega$ ,  $M$  - общая численность людей в области  $\Omega$ .

Оценки аварийного риска в той форме, в какой они были введены выше, являются двумерными полями. Для сопоставления различных объектов или аварий по уровню опасности удобно ввести скалярные величины. Такими величинами являются интегральные по зоне поражения условные оценки риска:

$$W_L^z(\Omega) = \int_{\Omega} W^z(r, \phi) d\Omega, \quad W_G^z(\Omega) = \int_{\Omega} W_g^z(r, \phi) d\Omega. \quad (3.4)$$

### Заключение

Рассмотренные модели представляют собой теоретическую базу для оценки уровня опасности от потенциально опасного объекта при химической аварии.

Математические модели составляют основу параллельной компьютерной системы "ChemRisk", использованной для проведения расчетов аварийного риска. Система "ChemRisk" предназначена для поддержки вычислительно сложных частей анализа аварийного риска и ориентирована для выполнения на параллельных компьютерах с распределенной памятью.

### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Колодкин В. М., Мурин А. В., Петров А. К., Горский В. Г. Количественная оценка риска химических аварий. — Ижевск: Изд-во Удм. ун-та 2001. — 227 с.
2. Бельский М. Л. Элементы количественной оценки фармакологического эффекта. — Л.: Медгиз, 1963. — 152 с.
3. Сивков А. М. Движение изолированного термика. — Т39. Материалы 5-ой Российской университетско-академической научно-практической конференции. / Отв. ред. В. А. Журавлев, С. С. Савинский. Ижевск, 2001. — с. 147–149.
4. Берлянд М. Е. Прогноз и регулирование загрязнения атмосферы. — Л.: Гидрометеиздат, 1985. — 272 с.
5. Бызова Н. Л., Шнайман В. А., Бондаренко В. Н. Расчет вертикального профиля ветра в пограничном слое атмосферы по наземным данным. // Метеорология и гидрология. — 1987. № 11. — с. 75–83.

Поступила в редакцию 01.05.08

**V. M. Kolodkin**

#### Mathematical modeling of the dispersion of toxic substances in the atmosphere

Mathematical models are considered for the prediction of the consequences of chemical accidents. Mathematical models form the basis of parallel computer system for risk assessment on parallel computers with distributed memory.

*Keywords:* dispersion of toxic substances in the atmosphere, accident risk, the consequences of chemical accidents.

Mathematical Subject Classifications: 65Q10

Колодкин Владимир Михайлович, д.т.н. профессор кафедры математического моделирования и прогнозирования Удмуртского государственного университета, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, д.1, т. (3412) 916-085, E-mail: Kolodkin@wing.uni.udm.ru