

УДК 355.58

*М. В. Кустов, д.т.н., доцент, заст. нач. каф. (ORCID 0000-0002-6960-6399)**О. Є. Басманов, д.т.н., професор, головн. н.с. (ORCID 0000-0002-6434-6575)**А. С. Мельниченко, викл. каф. (ORCID 0000-0002-7229-6926)*

МОДЕЛЮВАННЯ ЗОНИ ХІМІЧНОГО УРАЖЕННЯ В УМОВАХ ЛОКАЛІЗАЦІЇ НАДЗВИЧАЙНОЇ СИТУАЦІЇ

Розроблено математичну модель розповсюдження газоподібних небезпечних хімічних речовин з врахуванням факторів їх активного осадження на шляху розповсюдження. Проаналізовано умови розповсюдження газоподібної небезпечної речовини при розгерметизації технологічного обладнання під час проведення локалізації аварії шляхом осадження небезпечної хімічної речовини розпиленими струменями. Для спрощення моделювання прийнято ряд припущень стосовно параметрів вітру, умов викиду та осадження, які дозволяють спростити процес прогнозування та входять до допустимих меж похибки. На основі гаусівського закону та з врахуванням параметрів джерела викиду небезпечної хімічної речовини та її осадження отримане диференційне рівняння розповсюдження небезпечної хімічної речовини за умов локалізації надзвичайної ситуації. Шляхом вирішення диференційного рівняння дифузії отримана математична модель розподілу газоподібної небезпечної речовини по зоні надзвичайної ситуації з урахуванням активного її осадження оперативно-рятувальними підрозділами. При моделюванні процес осадження небезпечних хімічних речовин дрібнодисперсним рідинним потоком розглядався як процес сорбції газу сферичними краплями потоку з урахуванням, як фізико-хімічної взаємодії газу та рідини, так і інтенсивності дрібнодисперсного потоку. Розроблена математична модель дозволяє проводити розрахунок розмірів зон хімічного забруднення з визначенням граничних умов безпеки з урахуванням напрямку та швидкості вітру, температури повітря, ступеня вертикальної стійкості повітря, ширини зони активного осадження та хімічних властивостей як газу так і рідини. Врахування процесу локалізації зони аварії при прогнозуванні розвитку надзвичайної ситуації дозволяє прийняти керівнику ліквідації надзвичайної ситуації правильне управлінське рішення, забезпечити безпечні умови роботі рятувальників та оптимізувати роботу по евакуації із зони ураження населення та матеріальних цінностей.

Ключові слова: викид речовин, небезпечні хімічні речовини, зона забруднення, осадження небезпечної речовини, інтенсивність розпиленого струменю

1. Вступ

Надзвичайні ситуації (НС) з викидом небезпечних хімічних речовин (НХР) характеризуються значними розмірами зони ураження, яка може досягати декількох квадратних кілометрів, знаходженням в зоні ураження великої кількості цивільного населення, складністю локалізації аварії та необхідністю залучення значних сил та засобів на ліквідацію наслідків такої НС.

З метою забезпечення безпеки праці оперативно-рятувальних підрозділів в зоні НС з викидом НХР та прийняття управлінського рішення по евакуації населення важливим є проведення коректного моніторингу та точного прогнозування розвитку надзвичайної ситуації. Для прогнозування розмірів зони викиду НХР та розподілу концентрації НХР необхідне врахування значної кількості факторів – метеорологічних умов, фізико-хімічних властивостей НХР, просторових характеристик об'єкту, де сталася аварія та інше. При цьому прийняття управлінського рішення по найнебезпечнішому варіанту прогнозу є недоцільним, так як це призведе до значних невиправданих збитків при організації евакуації населення та матеріальних цінностей.

Виходячи з цього актуальною проблемою, що вимагає вирішення є пошук нових підходів до прогнозування, локалізації та зменшення розмірів зони хімічного зараження.

2. Аналіз літературних даних та постановка проблем

За останні п'ять років в світі сталося більше 100 аварій на хімічно небезпечних підприємствах [1]. Однак в цій роботі не проаналізовано причини аварій, що сталися на хімічно-небезпечних об'єктах (ХНО). В роботі [2] встановлено, що вагомою причиною виникнення надзвичайних ситуацій на хімічно небезпечних об'єктах є розгерметизація різних ємностей для зберігання хімічно небезпечних речовин, що призводить до великих розмірів зони уражень і, як наслідок, значних людських жертв. Однак ці дані показують загальносвітові тенденції та не відображають особливостей надзвичайних ситуацій в Україні. На території України розміщено більше 700 підприємств, на яких обертаються хімічно небезпечні речовини [3], у разі виникнення аварій на яких може статися викид небезпечних хімічних речовин. Загальна кількість ХНР на цих підприємствах – більше 283 тис. тонн, більшу частину з яких становлять аміак, хлор та сірчана кислота. Крім того, аміак та хлор за нормальних умов перебувають у газоподібному стані та легко поширюються в атмосфері.

Ліквідація аварій на ХНО повинна включати в себе обов'язкові етапи кризового контуру управління – моніторинг, прогнозування, прийняття управлінського рішення та безпосередній вплив на аварію [4]. При цьому на правильність прийнятого управлінського рішення безпосередньо впливає точність прогнозування розвитку НС. Однак процедура прогнозування залежить від характеру надзвичайної ситуації та не може використовувати загальні моделі.

Для математичного моделювання розповсюдження небезпечних хімічних речовин в атмосфері використовують математичну модель дифузії деякої речовини в повітрі із застосуванням диференціального рівняння параболічного типу [5]. Однак, при цьому, не враховується інтенсивність джерела викиду.

Моделі розсіювання газу від точкового джерела відносяться до гаусівського класу основною з яких є модель Паскуїлла-Гіффорда [6]. На гаусовій моделі розсіювання домішок засновані методики МАГАТЕ [7], в яких викладено рекомендації для визначення дисперсій по вхідним метеорологічним параметрам і виконання розрахунків по розсіюванню викидів після аварій на АЕС. Модель характеризується прямолінійною траєкторією хмари і призначена для експрес оцінок аварій на відносно невеликих відстанях [8]. Однак викладені в цих роботах моделі не враховують верогіднісну флуктуацію напрямку та швидкості вітру.

В роботі [9] проведена модернізація моделей розповсюдження газу з урахуванням особливостей викиду за умов надзвичайної ситуації та розроблено апаратно-програмний комплекс прогнозування зони викиду. Однак в цій роботі не врахована робота оперативного-рятувальних підрозділів по осадженню ХНР з атмосфери, що дозволяє суттєво скоротити розміри зони забруднення.

Процеси осадження газоподібних речовин з атмосфери засновані на процесах міжфазового масообміну. Кінетика абсорбції газу рідкими аерозолями є досить складною та багатофакторною. На сьогодні існує декілька принципово різних підходів до вирішення цього завдання. Ці підходи різняться рівнем точності рішення, кількістю витраченого необхідного розрахункового часу, кількістю вхідних даних та необхідністю попередніх експериментальних досліджень. При цьому існує два різних підходи до побудови моделей – кінетична багатошарова модель (kinetic multilayer model for gas-particle (KM-GAP)) [10] та модель симуляції молекулярної динаміки (molecular dynamics (MD) simulations) [11]. Модель MD працює на спеціальній платформі комп'ютерного розрахунку

GROMACS з додатковою надбудовою для розрахунку абсорбції рідкими аерозолями TIP4P-Ew [12]. Однак загальної математичної моделі, що описує розповсюдження газоподібної НХР та її осадження при ліквідації надзвичайної ситуації не розроблено.

Таким чином, невирішеною частиною проблеми є відсутність моделей розповсюдження зон хімічного ураження газоподібними речовинами при локалізації викиду.

3. Мета та завдання дослідження

Метою даної роботи є розробка математичної моделі розповсюдження газоподібних небезпечних хімічних речовин з врахуванням факторів їх активного осадження на шляху розповсюдження.

Досягнення поставленої мети потребує вирішення наступних завдань:

1. Сформулювати задачу моделювання розповсюдження небезпечних хімічних речовин та визначити допущення.
2. Розв'язати рівняння розповсюдження небезпечної хімічної речовини у просторі при його активному осадженні.
3. Побудувати алгоритм прогнозування зони надзвичайної ситуації з викидом небезпечної хімічної речовини та їх активним осадженням.

4. Постановка задачі моделювання розповсюдження небезпечних хімічних речовин

Загальний процес розповсюдження НХР можна умовно розділити на два етапи, як зазначено на рис. 1.

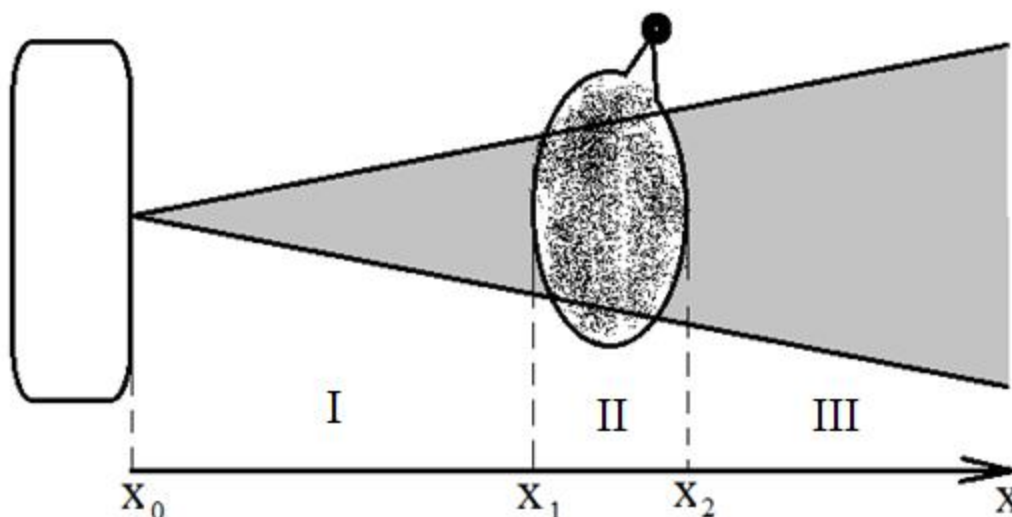


Рис. 1. Область розповсюдження НХР при локалізації НС оперативно-рятувальними підрозділами

На першому етапі відбувається вільний витік НХР з отвору ємності ($X=0$) до місця осадження хмари оперативно-рятувальними підрозділами ($X=x_1$). Під час проходження хмари НХР крізь другу дільницю ($X=(x_1; x_2)$) відбувається її осадження дисперсним водяним потоком. На третьому етапі продовжується довільне розповсюдження НХР.

При побудові моделі використано принцип етапності процесу, тому модель розповсюдження НХР та її активного осадження оперативно-рятувальними

підрозділами буде мати вигляд системи із трьох рівнянь для кожного етапу згідно до рис. 1. При цьому вихідні параметри моделі для одного етапу є вхідними параметрами моделі наступного етапу.

При побудові математичної моделі будемо виходити з наступних припущень:

1. Викид НХР відбувається з точкового отвору при розгерметизації технологічного апарату.
2. Розгерметизація технологічного апарату відбувається миттєво, тому інтенсивність викиду НХР у часі може бути описана ступінчастою функцією.
3. Розповсюдження НХР у повітрі відбувається шляхом дифузії і переносу вітром. При цьому коефіцієнт дифузії однаковий, як в горизонтальному, так і в вертикальному напрямках.
4. Флуктуації швидкості вітру у всіх напрямках незначні у порівнянні із масштабами викиду та точністю прогнозування та ними можна нехтувати.
5. Інтенсивність та дисперсність поданої на осадження води однакова у всіх точках об'єму осадження та не змінюється з часом.
6. Потік води для осадження НХР подається на усю глибину хмари та по всій висоті хмари.
7. Розміри молекул НХР нехтовно малі у порівнянні з розмірами водяних крапель.
8. Швидкість падіння водяних крапель нехтовно мала у порівнянні із швидкістю руху молекул НХР.
9. Під час прольоту крізь хмару НХР крапля води не встигає абсорбувати достатню кількість НХР для досягнення рівноваги, тому швидкість десорбції НХР буде нехтовно малою у порівнянні зі швидкістю абсорбції.

5. Розв'язання рівняння розповсюдження небезпечних хімічних речовин у просторі при його осадженні

При відсутності активного осадження НХР її концентрація в повітрі буде описуватися рівнянням дифузії [9]

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = D \left(\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial z^2} \right) - v_x \frac{\partial q}{\partial x} - v_y \frac{\partial q}{\partial y} - v_z \frac{\partial q}{\partial z} + E \delta(x) \delta(y) \delta(z - z_0), \quad (1)$$

де E – інтенсивність викиду речовини, кг/с, що відбувається у точці $(0,0,z_0)$; S – інтенсивність осадження НХР водяними завісами; $q(x,y,z,t)$ – концентрація НХР в повітрі, кг/м³; D – коефіцієнти дифузії в горизонтальному і вертикальному напрямках; v_x , v_y – горизонтальні складові вектору, що визначає напрямок і швидкість вітру, м/с; v_z – вертикальна складова швидкості вітру, обумовлена категорією стійкості атмосфери і густиною НХР.

На поверхні землі буде мати місце крайова умова другого роду:

$$\left. \frac{\partial q}{\partial z} \right|_{z=0} = 0, \quad (2)$$

а початкова умова

$$q(x, y, z, 0) = 0 \quad (3)$$

відповідає відсутності речовини у повітрі перед початком викиду.

При сталій величині викиду E розв'язок задачі (1)–(3) має вигляд

$$q_1(x, y, z, \tau) = \frac{E}{8\pi^{3/2}D^{3/2}} \cdot \int_0^\tau \frac{1}{(\tau-t)^{3/2}} \times \\ \times \exp\left[-\frac{(x-v_x(\tau-t))^2 + (y-v_y(\tau-t))^2}{4D(\tau-t)}\right] \times \\ \times \left\{ \exp\left[-\frac{(z-v_z(\tau-t)-z_0)^2}{4D(\tau-t)}\right] + \exp\left[-\frac{(z-v_z(\tau-t)+z_0)^2}{4D(\tau-t)}\right] \right\} dt, \quad (4)$$

Припустимо, що в смузі $x_1 \leq x \leq x_2$ відбувається активне осадження НХР. Перенесемо початок координат у точку $(x_1, 0, 0)$.

Швидкість осадження НХР, з урахуванням висловлених вище припущень, визначається як [13]:

$$S = \frac{\alpha \cdot D \cdot q(x, y, z) \cdot C \cdot r}{H \cdot R_0 \cdot T}, \quad (5)$$

де α – коефіцієнт акомодатії газу на поверхні рідини; C – об'ємна концентрація крапель води, m^{-3} ; r – середній радіус крапель води у струмені, m ; H – постійна Генрі, моль/(Па м); R_0 – універсальна газова стала, Дж/(моль·К); T – температура, К.

Параметри C та r визначаються через інтенсивність подачі дрібнодисперсної води на осадження:

$$I = \frac{4}{3} \pi \cdot r^3 \cdot \rho \cdot C \cdot V, \quad (6)$$

де ρ – густина рідини, що подається на осадження, kg/m^3 ; V – швидкість падіння краплі, m/s .

Відповідно

$$C \cdot r = \frac{3I}{4\pi \cdot r^2 \cdot \rho \cdot V}. \quad (7)$$

Для розрахунку швидкості падіння краплі можна використати рівняння:

$$V = \frac{2}{3} g \cdot r^2 \cdot \frac{\rho - \rho_a}{\theta}, \quad (8)$$

де ρ_a – густина повітря, kg/m^3 ; g – прискорення вільного падіння, m/s^2 ; θ – коефіцієнт кінематичної в'язкості повітря, m^2/s .

Тоді швидкість осадження НХР можна представити у вигляді

$$S = \beta q(x, y, z, \tau),$$

де

$$\beta = \frac{\alpha D C r}{H R_0 T}.$$

Тоді рівняння дифузії в області активного осадження набуде вигляду

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = D \left(\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial z^2} \right) - v_x \frac{\partial q}{\partial x} - v_y \frac{\partial q}{\partial y} - v_z \frac{\partial q}{\partial z} - \beta q(x, y, z, \tau) \quad (9)$$

з початковою умовою

$$q(x, y, z, 0) = 0, \quad (10)$$

крайовою умовою другого роду на поверхні землі

$$\left. \frac{\partial q}{\partial z} \right|_{z=0} = 0 \quad (11)$$

і крайовою умовою першого роду на межі, де починається охолодження:

$$q(0, y, z, \tau) = q_1(x_1, y, z, \tau), \quad (12)$$

де q_1 – концентрація речовини (4), отримана як розв'язок задачі (1)–(3).

В задачі (9)–(12) зробимо заміну

$$q(x, y, z, \tau) = \exp(A_1 x + A_2 y + A_3 z + B \tau) u(x, y, z, \tau), \quad (13)$$

де $A_1 = \frac{v_x}{2D}$; $A_2 = \frac{v_y}{2D}$; $A_3 = \frac{v_z}{2D}$; $B = -\beta - \frac{1}{4D} (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$. Тоді рівняння (3) перетворюється на

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = D \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right). \quad (14)$$

Початкова умова залишається незмінною

$$u(x, y, z, \tau) = 0, \quad (15)$$

а крайові набувають вигляду

$$u(0, y, z, \tau) = q_1(x_1, y, z, \tau) \exp(-A_2 y - A_3 z - B \tau); \quad (16)$$

$$\left(A_3 u + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = 0. \quad (17)$$

Розв'язок крайової задачі (14)-(17) має вигляд

$$u = D \int_0^{\tau} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \int_0^{\infty} d\zeta q_1(x_1, \eta, \zeta, t) \exp(-A_2\eta - A_3\zeta - Bt) \frac{\partial G}{\partial \xi}(x, y, z, \xi, \eta, \zeta, \tau - t) \Big|_{\xi=0}, \quad (18)$$

де G – функція Гріна задачі (14)–(17):

$$G(x, y, z, \xi, \eta, \zeta, \tau) = \frac{1}{8(\pi D\tau)^{3/2}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4D\tau}\right] - \exp\left[-\frac{(x+\xi)^2}{4D\tau}\right] \right\} \times \\ \times \left\{ \exp\left[-\frac{(y-\eta)^2}{4D\tau}\right] \right\} \times \left\{ \exp\left[-\frac{(z-\zeta)^2}{4D\tau}\right] + \exp\left[-\frac{(z+\zeta)^2}{4D\tau}\right] + \right. \\ \left. + 2A_3\sqrt{\pi D\tau} \exp[k^2 D\tau - A_3(z+\zeta)] \operatorname{erfc}\left(\frac{z+\zeta}{2\sqrt{D\tau}} - A_3\sqrt{D\tau}\right) \right\}. \quad (19)$$

Тоді концентрація НХР в області активного осадження буде визначатися виразами (13), (18), (19).

За смугою охолодження ($x_1 > x_2$) рівняння дифузії має вигляд

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = D \left(\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial z^2} \right) - v_x \frac{\partial q}{\partial x} - v_y \frac{\partial q}{\partial y} - v_z \frac{\partial q}{\partial z}. \quad (20)$$

Переносячи початок координат у точку $(x_2, 0, 0)$, запишемо крайову умову на межі зі смугою активного осадження у вигляді

$$q(0, y, z, \tau) = q_2(x_2 - x_1, y, z, \tau), \quad (21)$$

де q_2 – концентрація речовини, отримана з виразів (13), (18), (19). Крайова умова на поверхні землі і початкова умова залишаються у вигляді (2) і (3) відповідно. Тоді розв'язок задачі (20), (21), (2), (3) буде мати вигляд аналогічний (13), (18), (19), де покладено $\beta = 0$:

$$q(x, y, z, \tau) = \exp(M_1 x + M_2 y + M_3 z + N\tau) w(x, y, z, \tau), \quad (22)$$

де $M_1 = \frac{v_x}{2D}$; $M_2 = \frac{v_y}{2D}$; $M_3 = \frac{v_z}{2D}$; $N = -\frac{1}{4D}(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)$;

$$w = D \int_0^{\tau} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \int_0^{\infty} d\zeta q_2(x_1, \eta, \zeta, t) \exp(-M_2\eta - M_3\zeta - Bt) \times \\ \times \frac{\partial G}{\partial \xi}(x, y, z, \xi, \eta, \zeta, \tau - t) \Big|_{\xi=0}; \quad (23)$$

$$G(x, y, z, \xi, \eta, \zeta, \tau) = \frac{1}{8(\pi D\tau)^{3/2}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4D\tau}\right] - \exp\left[-\frac{(x+\xi)^2}{4D\tau}\right] \right\} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \left\{ \exp \left[-\frac{(y-\eta)^2}{4D\tau} \right] \right\} \times \left\{ \exp \left[-\frac{(z-\zeta)^2}{4D\tau} \right] + \exp \left[-\frac{(z+\zeta)^2}{4D\tau} \right] + \right. \\ & \left. + 2M_3 \sqrt{\pi D\tau} \exp \left[k^2 D\tau - M_3(z+\zeta) \right] \operatorname{erfc} \left(\frac{z+\zeta}{2\sqrt{D\tau}} - M_3 \sqrt{D\tau} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (24)$$

Отримана система з рівнянь (4), (13) та (22) дозволяє визначити межі зон забруднення небезпечними хімічними речовинами при активному їх осадженні розпиленними струменями.

6. Алгоритм прогнозування зони надзвичайної ситуації при осадженні небезпечної хімічно речовини

Алгоритм прогнозування розмірів зони ураження при викиді НХР за допомогою рівнянь (4), (13) та (22) представлено на рис. 2.

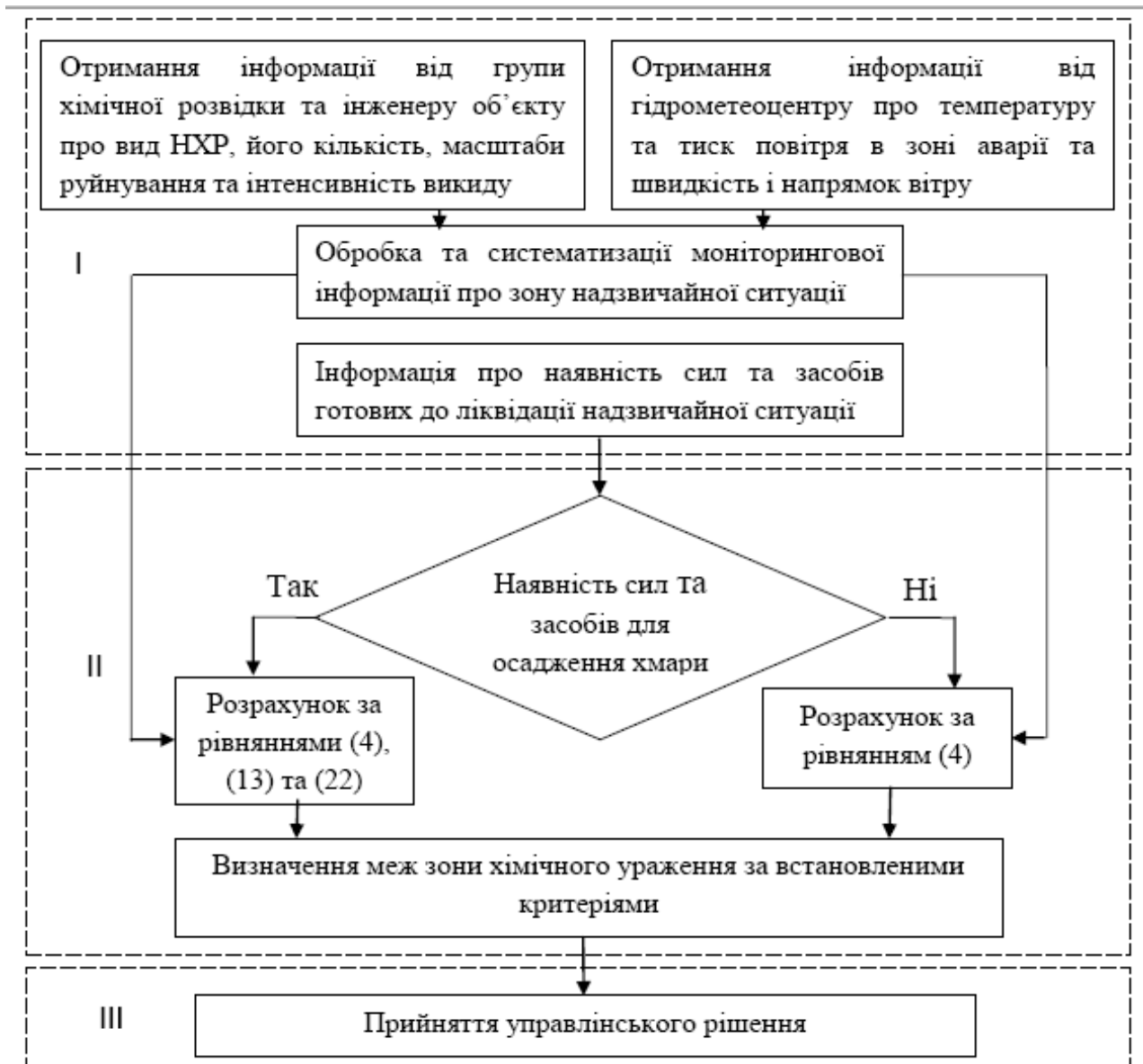


Рис. 2. Алгоритм прогнозування зони надзвичайної ситуації з викидом НХР та їх активним осадженням

7. Обговорення результатів моделювання розмірів зони забруднення НХР при надзвичайних ситуаціях за умови її локалізації оперативно-рятувальними підрозділами.

При залученні оперативно-рятувальних підрозділів на локалізацію НС визначаються такі параметри осадження, як інтенсивність подачі рідини, її дисперсність та можливі розміри зони осадження. При цьому прогнозування розмірів зони ураження проводиться за системою із трьох рівнянь (4), (13) та (22). У випадку відсутності достатньої кількості сил та засобів прогнозування проводиться по моделі (4).

Після розрахунку розмірів зони хімічного забруднення та нанесення границь небезпечної зони на карту керівник ліквідації НС приймає управлінське рішення про методи ліквідації аварії та необхідність евакуації населення та матеріальних цінностей.

Отримання одного суцільного рівняння при описі сукупних процесів з різною фізичною природою є недоцільним. В той же час поетапний опис загального процесу розповсюдження небезпечного газу та його осадження розпилюваними струменями дозволяє суттєво спростити процес моделювання без прийняття грубих припущень, що не тільки не знижує точність розрахунку, але і дозволяє врахувати більшу кількість вхідних параметрів.

Перевагою етапної моделі розповсюдження є можливість довільного комбінування кількості та місця розташування зон активного осадження. Тобто запропонована модель може бути використана при моделюванні процесу викиду хлору із хлораторної очисних комплексів. Згідно до будівельних вимог всі технологічні виходи з будівлі хлораторної облаштовуються автоматичними системами водного осадження хлору. Розпилювачі встановлені на межі технологічного виходу. Виходячи з цього може реалізовуватись декілька сценаріїв розвитку надзвичайної ситуації:

- довільне розповсюдження хмари хлору без активізації стаціонарних розпилювачів по причині їх руйнування;
- осадження хмари хлору стаціонарними розпилювачами при виході із будівлі хлораторної;
- осадження хмари хлору оперативно-рятувальними підрозділами;
- сукупне осадження хмари хлору стаціонарними розпилювачами та оперативно-рятувальними підрозділами.

Всі ці сценарії дозволяє змоделювати отримана в роботі сукупність із трьох рівнянь (4), (13) та (22).

Алгоритм (рис. 2) складається з 9 блоків, розміщених на трьох ієрархічних рівнях, зв'язаних прямими зв'язками. На першому ієрархічному рівні знаходиться 4 блоки. На першому етапі відбувається отримання та систематизація інформації про аварію від встановлених засобів автоматичної сигналізації, від чергової на об'єкті особи або від групи хімічної розвідки. Для проведення якісного прогнозування зон хімічного забруднення необхідно отримати точну інформацію про основні метеорологічні параметри від державного чи регіонального органу гідрометеослужби. Також керівник ліквідації надзвичайної ситуації повинен володіти даними про наявні у розпорядження сили та засоби цивільного захисту.

На другому етапі відбувається розрахунок розмірів зон хімічного забруднення. Для цього керівник ліквідації НС повинен визначитись з критерієм безпеки. При НС такого класу в якості критерію безпеки зазвичай обирають

гранично допустиму концентрацію (ГДК) НХР. Після оцінки наявних резервів оперативно-рятувальних сил, керівник ліквідації НС визначається з можливістю проведення осадження хмари НХР.

Одним з недоліків отриманої моделі є припущення, що осадження хмари НХР відбувається по всій глибині та висоті хмари. Тобто граничними умовами використання даної моделі є технічні можливості оперативно-рятувальних підрозділів для подавання розпиленої води. Технічні можливості по дальності подачі дрібнодисперсного струменю для лафетних стволів становить до 40 м в залежності від модифікації. Тобто при використанні двох лафетних стволів на протилежних сторонах хмари глибина зони осадження може складати до 80 м. Якщо розглядати технічні можливості по висоті подачі розпиленого струменю, то необхідно брати до уваги два варіанти подачі струменю – наземний та з використанням підіймачів. Наземний спосіб подачі розпиленого струменю здатен забезпечити висоту до 20 м. Використання механічних підіймачів дозволяє збільшити висоту подачі струменю до 50 м. Тобто розміри зони хімічного ураження для можливості використання розробленої моделі для прогнозування її розмірів повинні знаходитись в межах по ширині до 80 м та висоті до 50 м в залежності від технічної можливості оперативно-рятувальних підрозділів. Таким чином, використання даної моделі доцільне коли осадження проводиться на початковій стадії аварії або поблизу зони викиду. Це відповідає дійсності так як саме поряд із джерелом викиду оперативно-рятувальні підрозділи проводять роботи по рятуванню постраждалих та локалізації викиду НХР.

7. Висновки

1. В роботі сформульована задача моделювання процесу розповсюдження газоподібних небезпечних хімічних речовин при надзвичайних ситуаціях за умов активної локалізації зони викиду оперативно-рятувальними підрозділами. Запропоновано поетапний підхід до моделювання, який дозволяє суттєво спростити математичний опис процесу розповсюдження небезпечного газу та його осадження розпиленими струменями. Зроблено ряд припущень по метеорологічним умовам та умовам осадження, які дозволили суттєво спростити модель в межах прийнятної похибки. При цьому осадження повинне проводитись поблизу джерела викиду таким чином, щоб розміри зони осадження не були меншими ширини та висоти хмари небезпечної речовини. За умов існуючих на сьогодні технічних засобах розміри зони хімічного ураження повинні знаходитись в межах по ширині до 80 м та висоті до 50 м.

2. Поетапний підхід дозволив отримати модель розповсюдження небезпечної хімічної речовини при надзвичайних ситуаціях з умов активної локалізації зони викиду, яка складається із трьох рівнянь. Перше рівняння описує розповсюдження газоподібної небезпечної хімічної речовини у просторі при викиді з технологічного апарату при розгерметизації. Друге рівняння описує процес осадження небезпечного газу розпиленими струменями. Третє рівняння описує подальше довільне розповсюдження газу у просторі. Отримана математична модель розповсюдження газоподібних небезпечних речовин враховує інтенсивність викиду газоподібної небезпечної хімічної речовини, різні метеорологічні умови за яких відбувається викид та дозволяє варіювати розміри зони осадження газоподібної небезпечної хімічної речовини при зміні кількості сил та засобів оперативно-рятувальних підрозділів, що задіяні на локалізації зони викиду.

3. Розроблено алгоритм прогнозування зони хімічного ураження при активному осадженні небезпечної хімічної речовини розпиленими струменями. Алгоритм базується на послідовності трьох блоків – моніторингу зони надзвичайної ситуації, прогнозування наслідків надзвичайної ситуації та прийняття управлінського рішення. Моніторинг зони надзвичайної ситуації включає збір та обробку даних щодо метеорологічних умов в зоні аварії, характеру пошкодження технологічного обладнання, виду та кількості небезпечної хімічної речовини, наявних у розпорядження сил та засобів всіх служб цивільного захисту. Блок прогнозування включає введення отриманих вхідних параметрів та розрахунок розмірів зони хімічного ураження в залежності від кількості та послідовності етапів розповсюдження та осадження небезпечної речовини. Блок прийняття управлінського рішення включає визначення критерію безпеки, географічного розташування границь зони ураження та визначення заходів щодо ліквідації аварії та евакуації населення.

Література

1. Global Hazards Weekly Bulletin. Public Health England. London. 2020. Available at: <http://www.met.reading.ac.uk/~sgs02rpa/extreme.html>
2. Malmén Y., Nissila M., Virolainen K. and Repola P. Process chemicals – An ever present concern during plant shutdowns' // Journal of Loss Prevention in the Process Industries. 23. 2010. 249–252.
3. Аналітичний огляд стану техногенної та природної безпеки в Україні за 2018 рік. Київ. 2019. Available at: <https://www.dsns.gov.ua>
4. Андронов В. А., Дівізінюк М. М., Калугін В. Д., Тютюнник В. В. Науково-конструкторські основи створення комплексної системи моніторингу надзвичайних ситуацій в Україні: Монографія. Х.: НУЦЗУ. 2016. 319 с.
5. Ernst S., D. LaDue, and A. Gerard, 2018: Understanding emergency manager forecast use in severe weather events. J. Operational Meteor. 6 (9). 95–105,
6. Leelossy A., Jr F.M., Izsak F., Havasi A., Lagzi I., Meszaros R. Dispersion modeling of air pollutants in the atmosphere: a review // Central European Journal of Geosciences. 6. 2014: 257–278.
7. Dahia A., Merrouche D., Merouani D.R. et al. Numerical Study of Long-Term Radioactivity Impact on Foodstuff for Accidental Release Using Atmospheric Dispersion Model // Arab J Sci Eng. 44. 2019. 5233–5244.
8. Hoinaski L., Franco D., Lisboa H. Comparison of plume lateral dispersion coefficients schemes: Effect of averaging time // Atmospheric Pollution Research. 7. 2016. 134–141.
9. Говаленков С. С., Басманов А. Е. Оценка интенсивности истечения опасных химических веществ из источника выброса // Проблеми надзвичайних ситуацій. Харків. 11. 2010. 39–44.
10. Shiraiwa M., Pfrang C., Koop T., Pöschl U. Kinetic multi-layer model of gas-particle interactions in aerosols and clouds (KM-GAP): linking condensation, evaporation and chemical reactions of organics, oxidants and water // Atmos. Chem. Phys. 12. 2012. 2777–2794.
11. Hollingsworth S. A., Dror R. O. Molecular Dynamics Simulation for All // Neuron. 2018. 99. 1129–1143.
12. Julin J., Shiraiwa M., Miles R., Reid J.P., Pöschl U., Riipinen I. Mass Ac-

commodation of Water: Bridging the Gap Between Molecular Dynamics Simulations and Kinetic Condensation Models // *J. Phys. Chem. A*. 117. 2013. 410–420.

13. Kustov M., Kalugin V., Levterov A. Rain scavenging of a radioactive aerosol atmospheric precipitation // *Austrian Journal of Technical and Natural Sciences*, Vienne. 3–4. 2016. 73–76.

M. Kustov, DSc, Associate Professor, Deputy Head of Department
O. Basmanov, DSc, Professor, Chief Researcher
A. Melnichenko, Lecturer of the Department
National University of Civil Defence of Ukraine, Kharkiv, Ukraine

SIMULATION OF THE CHEMICAL DAMAGE ZONE IN THE CONDITIONS OF EMERGENCY LOCALIZATION

A mathematical model of the distribution of gaseous hazardous chemicals has been developed, taking into account the factors of their active deposition on the distribution path. The conditions of distribution of gaseous hazardous substance during depressurization of technological equipment during the localization of the accident by deposition of hazardous chemical substance by sprayed jets are analyzed. To simplify the modeling, a number of assumptions have been made regarding wind parameters, emission and deposition conditions, which simplify the forecasting process and are within the permissible error limits. Based on Gaussian law and taking into account the parameters of the source of emission of hazardous chemical substance and its deposition, the differential equation of distribution of hazardous chemical substance under the conditions of emergency localization is obtained. By solving the differential equation of diffusion, a mathematical model of the distribution of gaseous hazardous substances in the emergency zone is obtained, taking into account its active deposition by operational and rescue units. In modeling, the process of precipitation of hazardous chemicals by fine liquid flow was considered as the process of gas sorption by spherical flow droplets, taking into account both the physico-chemical interaction of gas and liquid and the intensity of fine flow. The developed mathematical model allows to calculate the size of chemical pollution zones with determination of boundary safety conditions taking into account wind direction and speed, air temperature, degree of vertical stability of air, width of active deposition zone and chemical properties of both gas and liquid. Taking into account the process of localization of the accident zone when forecasting the development of an emergency situation allows the emergency response manager to make the right management decision, ensure safe working conditions for rescuers and optimize evacuation work from the affected area and property.

Keywords: emissions, hazardous chemicals, contamination area, hazardous substance deposition, spray intensity

References

1. Global Hazards Weekly Bulletin. Public Health England. London. (2020). Available at: <http://www.met.reading.ac.uk/~sgs02rpa/extreme.html>
2. Malmén, Y., Nissila, M., Virolainen, K. and Repola, P. (2010). Process chemicals – An ever present concern during plant shutdowns', *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 23, 249–252.
3. Analytical review of the state of technogenic and natural security in Ukraine for 2018. Available at: <http://cn.dsns.gov.ua>
4. Andronov, V.A., Divizinyuk, M. M., Kalugin, V. D., Tiutiunik, V. V. (2016). Scientific and design bases of creation of complex system of monitoring of emergency situations in Ukraine: Monograph, Kharkiv, 319.
5. Ernst, S., LaDue, D., and Gerard, A. (2018). Understanding emergency manager forecast use in severe weather events. *J. Operational Meteor.*, 6 (9), 95–105,
6. Leelossy, A., Jr F.M., Izsak, F., Havasi, A., Lagzi, I., Meszaros, R. (2014). Dispersion modeling of air pollutants in the atmosphere: a review. *Central European*

Journal of Geosciences, 6, 257–278.

7. Dahia, A., Merrouche, D., Merouani, D.R. et al. (2019). Numerical Study of Long-Term Radioactivity Impact on Foodstuff for Accidental Release Using Atmospheric Dispersion Model. Arab J Sci Eng., 44, 5233–5244.

8. Hoinaski, L., Franco, D., Lisboa, H. (2016). Comparison of plume lateral dispersion coefficients schemes: Effect of averaging time. Atmospheric Pollution Research, 7, 134–141.

9. Govalenkov, S. S., Basmanov, A. E. (2010). Estimation of the intensity of leakage of hazardous chemicals from the emission source. Problems of emergencies. Kharkiv, 11, 39–44.

10. Shiraiwa, M., Pfrang, C., Koop, T., Pöschl, U. (2012). Kinetic multi-layer model of gas-particle interactions in aerosols and clouds (KM-GAP): linking condensation, evaporation and chemical reactions of organics, oxidants and water. Atmos. Chem. Phys., 12, 2777–2794.

11. Hollingsworth, S. A., Dror, R. O. (2018). Molecular Dynamics Simulation for All Neuron, 99, 1129–1143.

12. Julin, J., Shiraiwa, M., Miles, R., Reid, J.P., Pöschl, U., Riipinen, I. (2013). Mass Accommodation of Water: Bridging the Gap Between Molecular Dynamics Simulations and Kinetic Condensation Models. J. Phys. Chem. A., 117, 410–420.

13. Kustov, M., Kalugin, V., Levterov, A. (2016). Rain scavenging of a radioactive aerosol atmospheric precipitation. Austrian Journal of Technical and Natural Sciences, Vienne, 3–4, 73–76.

Надійшла до редколегії: 10.04.2020

Прийнята до друку: 23.04.2020