

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)

О. А. Тарасенко, д.т.н., професор, нач. каф. (ORCID 0000-0002-1313-1072)

А. С. Мельниченко, викл. каф. (ORCID 0000-0002-7229-6926)

ПРОГНОЗУВАННЯ МАСШТАБІВ ХІМІЧНОГО УРАЖЕННЯ ЗА УМОВ ОСАДЖЕННЯ НЕБЕЗПЕЧНОЇ РЕЧОВИНИ

Розроблено математичну модель зони викиду газоподібних небезпечних речовин при різних умовах активного осадження небезпечної хмари. На основі диференційних рівнянь розповсюдження газу в просторі отримано поетапну модель розповсюдження хмари небезпечної хімічної речовини, яка описує етапи викиду речовини із аварійного технологічного обладнання, осадження небезпечного газу дрібнодисперсним рідинним потоком та вільне розповсюдження хмари в повітрі. 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. На базі пакету математичних програм MAPLE розроблено алгоритм вирішення математичної моделі з можливістю візуалізації результатів прогнозування. Автоматизація процесу прогнозування масштабів надзвичайної ситуації з візуалізацією результатів прогнозування підвищує ефективність роботи штабів з ліквідації надзвичайної ситуації та скорочує час прийняття управлінського рішення. За допомогою розробленого алгоритму проведено прогнозування масштабів хімічного ураження за різними параметрами викиду небезпечної речовини, кількістю зон осадження та інтенсивністю подачі дрібнодисперсного потоку на осадження. Проведено порівняльний аналіз результатів прогнозування умовної зони хімічного ураження при вільному розповсюдженні хмари та при активній локалізації зони викиду оперативно-рятувальними підрозділами. Результати порівняльного аналізу показали, що врахування процесів осадження хмари небезпечних хімічних речовин при прогнозуванні масштабів надзвичайної ситуації дозволяють суттєво підвищити точність визначення розмірів небезпечної зони, що впливає на коректність прийняття управлінського рішення при проведенні аварійно-рятувальних та евакуаційних робіт.

Ключові слова: небезпечні хімічні речовини, зона забруднення, осадження небезпечної речовини, прогнозування масштабів ураження, локалізація зони ураження

1. Вступ

Прогнозування розвитку надзвичайної ситуації (НС) є обов'язковим етапом для прийняття коректного управлінського рішення по ліквідації аварії. Особливо суттєвим процес прогнозування є при виникненні НС з викидом газоподібних небезпечних хімічних речовин (НХР). Такі аварії супроводжуються значними розмірами зони ураження, яка може досягати компактного розміщення цивільного населення. Ці фактори накладають особливі умови на розміщення сил та засобів в зоні НС та проведення евакуації населення та матеріальних цінностей.

Для забезпечення достатньої точності розрахунку розмірів зон хімічного забруднення необхідне врахування значної кількості факторів, які умовно можна розподілити на два блоки – метеорологічні умови та параметри викиду. До метеорологічних умов відносяться напрямок та швидкість вітру, температура та вологість повітря, атмосферний тиск. До параметрів викиду відносяться вид хімічної речовини, її температура, густина та тиск зберігання, інтенсивність викиду. За умов роботи оперативно-рятувальних підрозділів по локалізації зони викиду до цих факторів додається ще один блок, який включає інтенсивність подачі рідини на осадження, площа осадження, здатність рідини, що подається, до поглинання чи хімічної реакції з небезпечною хімічною речовиною та ін. Це все суттєво ускладнює роботу

штабу з ліквідації надзвичайної ситуації по прогнозуванню масштабів ураження, що може привести до прийняття запізнених та хибних управлінських рішень.

Виходячи з цього актуальною проблемою, є недосконалість результатів прогнозування розмірів зон надзвичайної ситуації з викидом небезпечних хімічних речовин.

2. Аналіз літературних даних та постановка проблеми

Процес організації оперативно-рятувальних робіт в зоні надзвичайної ситуації складається з декількох обов'язкових етапів – моніторингу зони НС, прогнозування розвитку НС, прийняття управлінського рішення та безпосередній вплив на НС [1]. Однак, кожний з цих етапів потребує окремої розробки методів їх реалізації. Методика прогнозування наслідків НС з викидом НХР для використання підрозділами Державної служби України з надзвичайних ситуацій затверджена Наказом МВС України № 1000 від 29.11.2019 року. Ця методика дозволяє спростити розрахунок розмірів зони розповсюдження хмари НХР за рахунок табулювання основних показників. Проте дана методика не дозволяє автоматично візуалізувати результати прогнозування. Можливість автоматичного нанесення зони хімічного забруднення передбачено в програмному комплексі WISER [2]. Однак недоліком цієї програми є визначення розмірів зон ураження за табличними довідниковими даними без процесу розрахунку та без врахування основних факторів. Суттєво збільшити точність прогнозування дозволяє використання програмного комплексу АЛОНА [3]. Дані програма проводить моделювання розповсюдження небезпечної речовини з використанням гаусової моделі розсіювання домішок [4] за введеними параметрами та дозволяє візуалізувати результати прогнозування. Однак всі перелічені вище підходи не враховують осадження хмари НХР оперативно-рятувальними підрозділами.

Осадження хмари газоподібної НХР дозволяє суттєво зменшити розміри зони забруднення та при певних умовах взагалі припинити розповсюдження НХР [5]. Однак в роботі [5] визначається лише вплив інтенсивності подачі води на осадження хмари без врахування дисперсності потоку. Проте оптимізація дисперсності водяного потоку дозволяє майже вдвічі скоротити час осадження небезпечної речовини [6]. Додаткового збільшення інтенсивності осадження НХР з повітря можна досягти за рахунок хімічних добавок до води, які збільшують швидкість сорбції газу та нейтралізують його [7]. Всі ці фактори необхідно врахувати при моделюванні процесів осадження НХР.

Процеси осадження газоподібних речовин з атмосфери засновані на процесах міжфазового масообміну. На сьогодні найбільш точне моделювання процесів сорбції газів рідиною дозволяють проводити моделі симуляції молекулярної динаміки (molecular dynamics (MD) simulations) [8]. Однак ці моделі потребують врахування великої кількості фізико-хімічних параметрів, які важко отримати під час НС. Дещо спрощений підхід до моделювання процесів осадження газів розпиленням струменем заснований на кінетичній багатопшаровій моделі (kinetic multilayer model for gas-particle (KM-GAP)) [9]. В цій моделі процес сорбції розділяється на окремі етапи. Однак розглянуті вище моделі не пристосовані для прогнозування розмірів зони викиду НХР.

Врахування процесів осадження газоподібних речовин з атмосфери при моделюванні розповсюдження небезпечних хімічних речовин проведено в роботі [10]. Розроблена модель дозволяє поетапно описувати розповсюдження газів при їх викиді із технологічного апарату, при осадження розпиленнями

струменями та при вільному розповсюдженні в атмосфері. Однак розв'язання даної моделі у явному вигляді неможливе.

Таким чином, невирішеною частиною проблеми є відсутність інструментів прогнозування зон хімічного ураження газоподібними речовинами при їх активному осадженні з можливістю візуалізації результатів.

3. Мета та завдання дослідження

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

Досягнення поставленої мети потребує вирішення наступних завдань:

1. Розробити математичну модель розповсюдження небезпечних хімічних речовин з врахуванням факторів їх активного осадження на шляху розповсюдження.

2. Перевірити працездатність запропонованої математичної моделі на прикладі прогнозування розмірів зони хімічного ураження при умовному викиді за різних умов осадження небезпечної хмари.

4. Розробка математичної моделі розповсюдження небезпечних хімічних речовин

В роботі розглядається задача точкового викиду газоподібної небезпечної хімічної речовини, що зберігається або транспортується в технологічному апараті під тиском. Хмара НХР розповсюджується за напрямком вітру. По ходу розповсюдження хмари може відбуватись її осадження дрібнодисперсним водяним потоком, який подається або стаціонарними приладами забезпечення безпеки на об'єкті або пересувними приладами оперативно-рятувальних підрозділів. Відповідно до цього кількість струменів для осадження, їх інтенсивність, площа покриття та розташування може бути довільним. У загальному вигляді схематично процес розповсюдження та осадження хмари НХР можна представити відповідно до рис. 1.

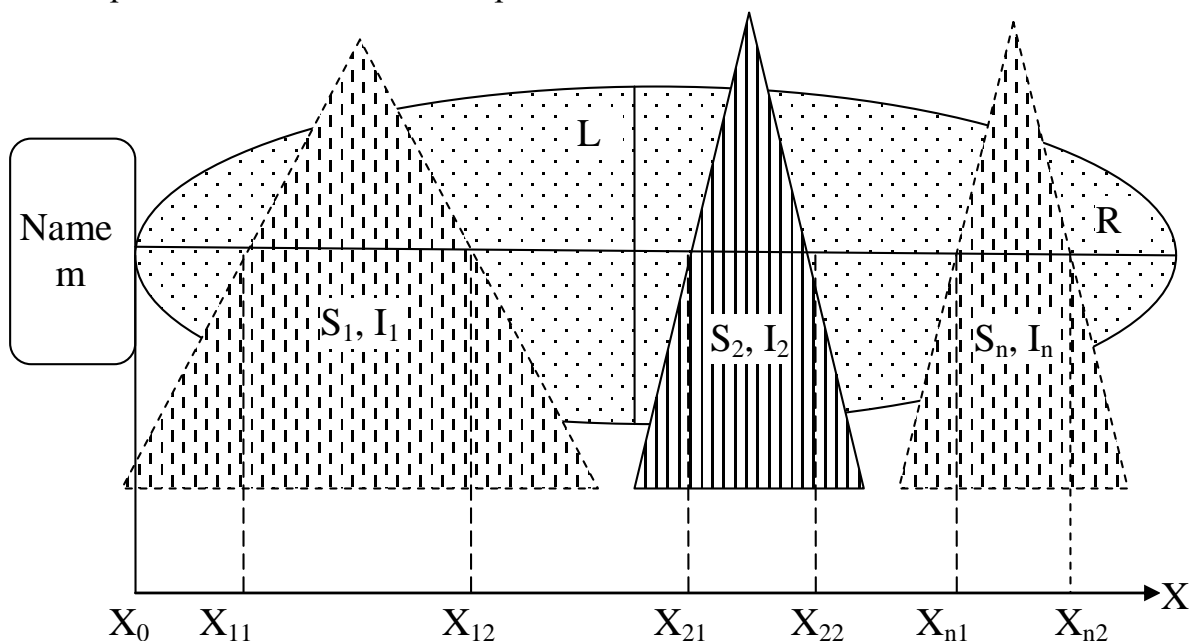


Рис. 1. Графічна інтерпретація задачі прогнозування розмірів (R, L) зони хімічного ураження при осадженні НХР дрібнодисперсним потоком різної інтенсивності (I) та площі (S)

При будь-яких параметрах струменів для осадження хмари небезпечної речовини процес розповсюдження хмари можна розділити на окремі ділянки. По-перше відбувається довільне розповсюдження небезпечного газу з точки викиду до зони осадження. В зоні осадження відбувається осадження НХР тієї концентрації, що надійшла до цієї зони. Далі відбувається довільне розповсюдження хмари з концентрацією НХР, що вийшла із зони осадження. Ці етапи можуть чергуватися, відповідно до вихідної ситуації.

Для спрощення процесу моделювання прийнято ряд припущень [10], які не вступають у протиріччя до реальних умов ліквідації аварії.

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

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

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 $x_{n1} \leq x \leq x_{n2}$ відбувається активне осадження НХР. Перенесемо початок координат у точку $(x_{n1}, 0, 0)$.

Швидкість осадження НХР можна представити у вигляді [11]

$$S = \beta q(x, y, z, \tau), \quad (5)$$

де

$$\beta = \frac{\alpha DCr}{HR_0 T}.$$

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

Тоді рівняння дифузії в області активного осадження набуде вигляду

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = D \left(\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial z^2} \right) - v_x \frac{\partial q}{\partial x} - v_y \frac{\partial q}{\partial y} - v_z \frac{\partial q}{\partial z} - \beta q(x, y, z, \tau) \quad (6)$$

з початковою умовою

$$q(x, y, z, 0) = 0, \quad (7)$$

крайовою умовою другого роду на поверхні землі

$$\left. \frac{\partial q}{\partial z} \right|_{z=0} = 0 \quad (8)$$

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

$$q(0, y, z, \tau) = q_1(x_1, y, z, \tau), \quad (9)$$

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

В задачі (6)–(9) зробимо заміну

$$q(x, y, z, \tau) = \exp(A_1 x + A_2 y + A_3 z + B\tau) u(x, y, z, \tau), \quad (10)$$

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

$$\frac{\partial u}{\partial \tau} = D \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right). \quad (11)$$

Початкова умова залишається незмінною

$$u(x, y, z, \tau) = 0, \quad (12)$$

а крайові набувають вигляду

$$u(0, y, z, \tau) = q_1(x_1, y, z, \tau) \exp(-A_2 y - A_3 z - B\tau); \quad (13)$$

$$\left(A_3 u + \frac{\partial u}{\partial z} \right) \Big|_{z=0} = 0. \quad (14)$$

Розв'язок крайової задачі (11)-(14) має вигляд

$$u = D \int_0^\tau dt \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \int_0^{\infty} d\zeta q_1(x_1, \eta, \zeta, t) \exp(-A_2 \eta - A_3 \zeta - Bt) \frac{\partial G}{\partial \xi}(x, y, z, \xi, \eta, \zeta, \tau - t) \Big|_{\xi=0}, \quad (15)$$

де G – функція Гріна задачі (11)–(14):

$$\begin{aligned} G(x, y, z, \xi, \eta, \zeta, \tau) = & \frac{1}{8(\pi D\tau)^{3/2}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4D\tau}\right] - \exp\left[-\frac{(x+\xi)^2}{4D\tau}\right] \right\} \times \\ & \times \left\{ \exp\left[-\frac{(y-\eta)^2}{4D\tau}\right] \right\} \times \left\{ \exp\left[-\frac{(z-\zeta)^2}{4D\tau}\right] + \exp\left[-\frac{(z+\zeta)^2}{4D\tau}\right] + \right. \\ & \left. + 2A_3 \sqrt{\pi D\tau} \exp[k^2 D\tau - A_3(z+\zeta)] \operatorname{erfc}\left(\frac{z+\zeta}{2\sqrt{D\tau}} - A_3 \sqrt{D\tau}\right) \right\}. \quad (16) \end{aligned}$$

Тоді концентрація НХР в області активного осадження буде визначатися виразами (10), (15), (16).

За смугою охолодження ($x > x_{n2}$) рівняння дифузії має вигляд

$$\frac{\partial q}{\partial \tau} = D \left(\frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 q}{\partial z^2} \right) - v_x \frac{\partial q}{\partial x} - v_y \frac{\partial q}{\partial y} - v_z \frac{\partial q}{\partial z}. \quad (17)$$

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

$$q(0, y, z, \tau) = q_2(x_2 - x_1, y, z, \tau), \quad (18)$$

де q_2 – концентрація речовини, отримана з виразів (10), (15), (16). Крайова умова на поверхні землі і початкова умова залишаються у вигляді (2) і (3) відповідно. Тоді розв'язок задачі (17), (18), (2), (3) буде мати вигляд аналогічний (10), (15), (16), де покладено $\beta = 0$:

$$q(x, y, z, \tau) = \exp(M_1 x + M_2 y + M_3 z + N\tau) w(x, y, z, \tau), \quad (19)$$

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

$$w = D \int_0^{\tau} dt \int_{-\infty}^{\infty} d\eta \int_0^{\infty} d\zeta q_2(x_1, \eta, \zeta, t) \exp(-M_2\eta - M_3\zeta - Bt) \times \left. \frac{\partial G}{\partial \xi}(x, y, z, \xi, \eta, \zeta, \tau - t) \right|_{\xi=0}; \quad (20)$$

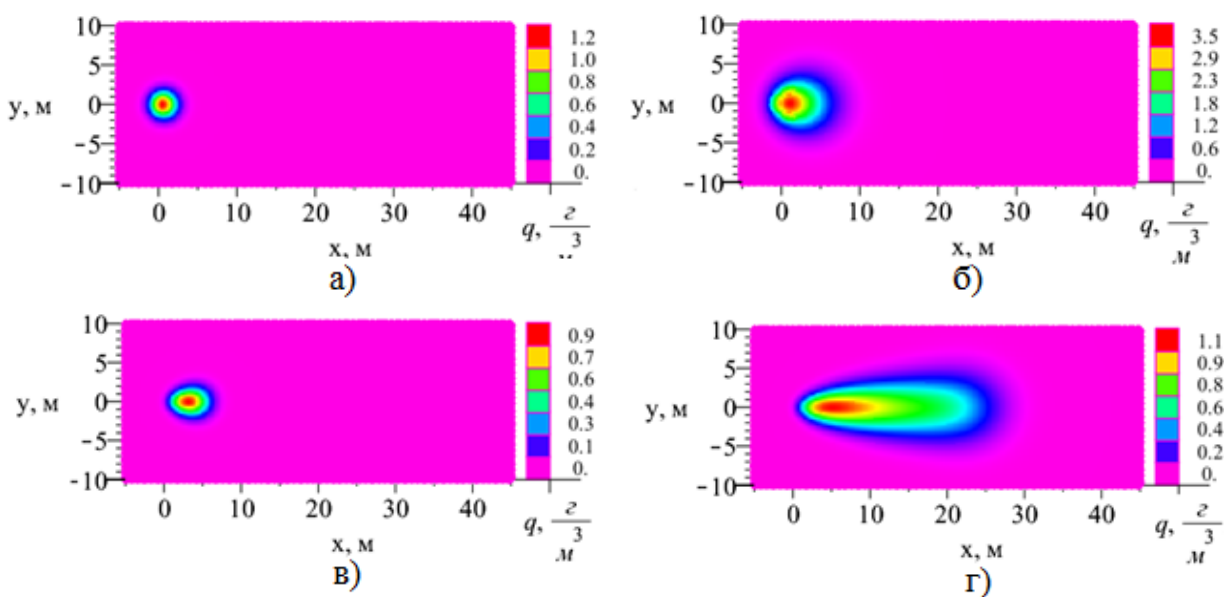
$$G(x, y, z, \xi, \eta, \zeta, \tau) = \frac{1}{8(\pi D\tau)^{3/2}} \left\{ \exp\left[-\frac{(x-\xi)^2}{4D\tau}\right] - \exp\left[-\frac{(x+\xi)^2}{4D\tau}\right] \right\} \times \left\{ \exp\left[-\frac{(y-\eta)^2}{4D\tau}\right] \right\} \times \left\{ \exp\left[-\frac{(z-\zeta)^2}{4D\tau}\right] + \exp\left[-\frac{(z+\zeta)^2}{4D\tau}\right] + 2M_3\sqrt{\pi D\tau} \exp[k^2 D\tau - M_3(z+\zeta)] \operatorname{erfc}\left(\frac{z+\zeta}{2\sqrt{D\tau}} - M_3\sqrt{D\tau}\right) \right\}. \quad (21)$$

Отримана система з рівнянь (4), (10) та (19) дозволяє визначити межі зон забруднення небезпечними хімічними речовинами при активному їх осадженні розпиленими струменями.

5. Перевірка працездатності запропонованої математичної моделі розповсюдження небезпечних хімічних речовин

Прогнозування розмірів зони хімічного ураження проводили за допомогою пакету математичних програм MAPLE. При цьому заздалегідь визначалась послідовність етапів вільного розповсюдження та осадження хмари НХР. При прогнозуванні приймалась умова, що результати розрахунку за попереднім етапом є вихідними даними для наступного етапу.

На рис. 2 представлено результати прогнозування для хмари небезпечного газу на висоті $z=2\text{м}$ в різні моменти часу.



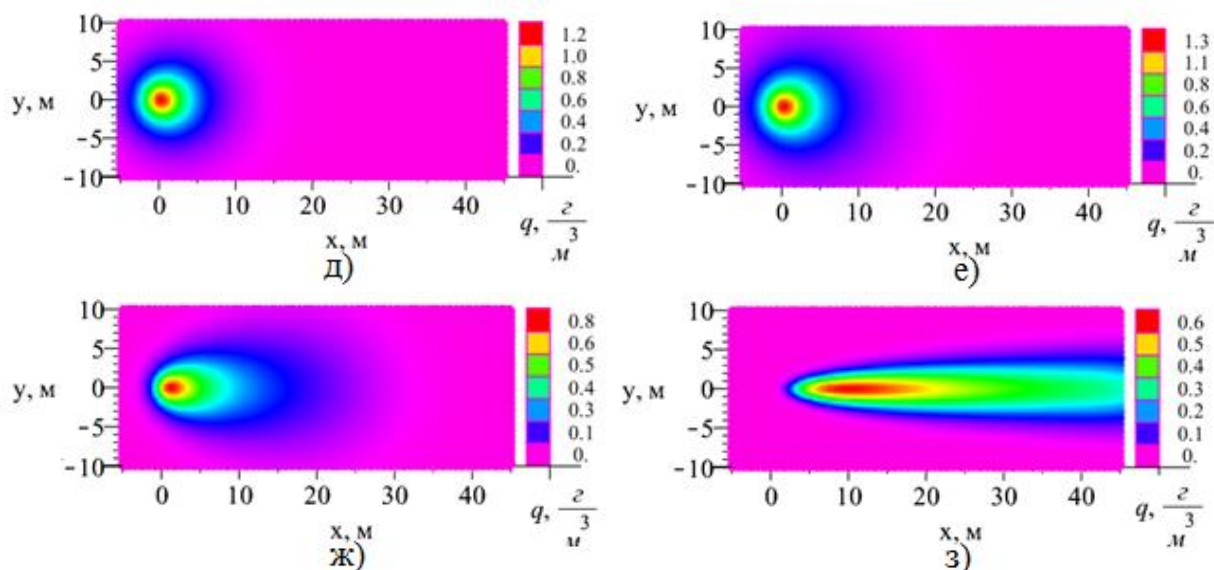


Рис. 2. Результати прогнозування розмірів зони розповсюдження небезпечних газів в повітрі при різних значеннях горизонтальної швидкості вітру v_x та коефіцієнту дифузії D : $D = 1 \text{ м}^2/\text{с}$ – а, б, в, г, з; $D = 5 \text{ м}^2/\text{с}$ – д, е, ж; $v_x = 1 \text{ м}/\text{с}$ – а, б, д, е; $v_x = 5 \text{ м}/\text{с}$ – в, г, ж; $v_x = 10 \text{ м}/\text{с}$ – з; $t = 1 \text{ с}$ – а, в; $t = 5 \text{ с}$ – б, г, ж, з; $t = 10 \text{ с}$ – е

В якості критерію належності до хмари обрано концентраційний розподіл речовини у повітрі. При цьому середня горизонтальна швидкість вітру v_x приймалась змінною; вертикальна складова $v_z = 0,005 \text{ м}/\text{с}$. Розрахунки проводились для двох значень коефіцієнтів турбулентної дифузії $D = 1$ та $5 \text{ м}^2/\text{с}$; висота джерела $z_0 = 2 \text{ м}$; інтенсивність джерела викиду $E = 0,1 \text{ кг}/\text{с}$.

Проведення прогнозування розмірів зони хімічного забруднення при постійному викиді небезпечної хімічної речовини з постійної інтенсивністю дозволило перевірити працездатність математичної моделі розповсюдження небезпечних хімічних речовин при їх активному осадженні. Можливість графічної візуалізації результатів розрахунку зон хімічного забруднення дозволяє спростити роботу штабу з ліквідації надзвичайної ситуації та пришвидшити побудову схем розташування сил та засобів та проведення евакуації населення.

6. Обговорення результатів прогнозування розмірів зони забруднення небезпечними речовинами за умови їх осадження

Розроблена поетапна модель загального процесу розповсюдження небезпечного газу та його осадження розпиленими струменями дозволяє проводити прогнозування границь зони ураження при надзвичайних ситуаціях. Використання пакету математичних програм Maple дозволяє візуалізувати результати прогнозування з відповідним кроком по часу. Однак слід зазначити, що проведення розрахунків за запропонованою моделлю, їх обробка та візуалізація можлива і за допомогою інших програмних комплексів, таких як: MatLab, MatCad, Delphi та інші. Вибір конкретного інструменту автоматизованого прогнозування залежить від конкретних задач та умов використання.

Результати прогнозування наочно показали, що окрім швидкості вітру на концентраційний розподіл небезпечного газу суттєво впливає коефіцієнт дифузії (рис. 2 д, е, ж). Так, при збільшенні коефіцієнту турбулентної дифузії з $1 \text{ м}^2/\text{с}$ до $5 \text{ м}^2/\text{с}$ для газів з малою молекулярною масою, до яких відноситься аміак, характерне швидке розповсюдження газу навіть при малих швидкостях вітру.

Також, як видно з рис. 2 е, особливістю таких газів є розповсюдження НХР у бік протилежний напрямку вітру та у вертикальному напрямку, що обов'язково необхідно враховувати при розташуванні оперативно-рятувальних підрозділів з навітряної сторони.

Результати моделювання (рис. 2 д, е,) показали, що на відміну від важких газів з малим значенням коефіцієнту дифузії, таких як хлор, зона забруднення легких газів має широкі зони перепаду концентрацій. Це дозволяє зробити висновок про додатковий фактор небезпеки при викиді хлору. При організації роботи рятувальників в зоні хімічного забруднення слід враховувати швидку зміну концентрації важких газів, тобто при вході в небезпечну зону рятувальники повинні бути готові до раптового зростання концентрації небезпечної речовини навіть при низькій швидкості вітру.

Порівняння максимальних концентрацій на рис. 2 б та рис. 2 з показує, що збільшення швидкості вітру в 10 разів з $v_x = 1$ м/с до $v_x = 10$ м/с не лише суттєво розтягує зону хімічного ураження, але й зменшує концентраційний розподіл небезпечної речовини від епіцентру викиду. Тобто, при низькій швидкості вітру відбувається накопичення небезпечного газу поблизу точки викиду.

Окремою перевагою запропонованого методу прогнозування є можливість визначенні критичних параметрів водяних завіс (інтенсивність подачі, розміри, дисперсність та ін.), які можуть забезпечити повну затримку розповсюдження хмари небезпечної речовини.

При проведенні прогнозування в роботі враховувалось окреме припущення щодо осадження небезпечної хмари по всій її висоті. Тобто, 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. Крім цього необхідно враховувати вид небезпечної хімічної речовини. Більшість небезпечних хімічних речовин мають молярну масу більшу за повітря, і тому їх розповсюдження відбувається у приземному шарі. Опис процесу осадження таких газів повністю відповідає запропонованій моделі. Однак при викиді деяких газів, таких як аміак, треба проводити постійну оцінку обстановки і враховувати, що при розповсюдженні хмари вище зони подачі розпиленних струменів результати прогнозування будуть давати дещо занижені значення розмірів зони ураження. В таких випадках керівник ліквідації аварії повинен організувати групу хімічної розвідки та контролю для уточнення межі небезпечної зони.

7. Висновки

1. Розроблена поетапна математична модель процесу розповсюдження газоподібної небезпечної речовини у повітрі та її осадження дисперсними рідинними потоками. Опис такого складного процесу по окремих етапах дозволив спростити та уніфікувати процес прогнозування з урахування змінних параметрів зони осадження, їх кількості та розташування. Зроблені при моделюванні припущення, а саме осадження хмари по всій її висоті, відповідає більшості реальних ситуацій ліквідації аварій з викидом небезпечних газів. При прогнозуванні слід враховувати декілька факторів: 1) співставлення висоти хмари з висотою подачі розпиленого струменя – ~ 10 м при використанні ручних стволів; ~ 20 м при використанні лафетних стволів; 50 м при використанні авто дробин та колінчатих підіймачів; 2) молярна маса небезпечної речовини ≤ 29 г/моль.

2.3 використанням програмного комплексу Maple Перевірена працездатність розробленої поетапної математичної моделі процесу розповсюдження газоподібної небезпечної речовини у повітрі. Проведено прогнозування розмірів зони хімічного ураження, обробку результатів та їх візуалізацію. Програмна реалізація в середовищі Maple дозволяє автоматизувати процес прогнозування, розглядати процес розповсюдження хмари небезпечної речовини в динаміці та запропонувати керівнику ліквідації надзвичайної ситуації декілька варіантів розвитку ситуації. Результати розрахунків показали суттєву відмінність при оцінці хімічної обстановки при викидах легких та важких небезпечних газів. При збільшенні коефіцієнту турбулентної дифузії з $1 \text{ м}^2/\text{с}$ до $5 \text{ м}^2/\text{с}$ для газів з малою молекулярною масою зона забруднення має широкі зони перепаду концентрацій. Зменшення швидкості вітру в 10 разів з $v_x = 10 \text{ м/с}$ до $v_x = 1 \text{ м/с}$ призводить до накопичення небезпечного газу поблизу точки викиду. Розроблена в роботі математична модель може бути використана, як основа методу прогнозування масштабів хімічного ураження за умов осадження небезпечної речовини. Це дозволить спростити керівнику ліквідації аварії процес прийняття управлінського рішення та визначати при проектуванні та оперативній роботі критичні параметри зони осадження для недопущення розповсюдження хмари небезпечної речовини.

Література

1. Bundy J., Pfarrer M. D., Short C. E., Coombs W. T. Crises and Crisis Management: Integration, Interpretation, and Research Development // *Journal of Management*. 2017. V. 43(6). P. 1661–1692. doi.org/10.1177/0149206316680030
2. Carol S. WISER and REMM: Resources for Disaster Response // *Journal of Electronic Resources in Medical Libraries*. 2009. V. 6. P. 253–259. doi.org/10.1080/15424060903167393
3. Polorecka M., Kubas J., Danihelka P., Petrova K., Repkova Stofkova K., Baganova K. Use of Software on Modeling Hazardous Substance Release as a Support Tool for Crisis Management // *Sustainability*. 2021. V. 13. P. 438–453. doi.org/10.3390/su13010438
4. Dahia A., Merrouche D., Merouani D. R. Rezoug T., Aguedal H. Numerical Study of Long-Term Radioactivity Impact on Foodstuff for Accidental Release Using Atmospheric Dispersion Model // *Arabian Journal for Science and Engineering*. 2019. V. 44. P. 5233–5244. doi.org/10.1007/s13369-018-3518-2
5. Loosmore G., Cederwall R. Precipitation scavenging of atmospheric aerosols for emergency response applications: testing an updated model with new real-time data // *Atmospheric Environment*. 2004. V. 38. P. 993–1003. doi.org/10.1016/j.atmosenv.2003.10.055
6. Elperin T., Fominykh A., Krasovitev B., Vikhansky A. Effect of rain scavenging on altitudinal distribution of soluble gaseous pollutants in the atmosphere // *Atmospheric Environment*. 2011. V. 45(14). P. 2427–2433. doi.org/10.1016/j.atmosenv.2011.02.008
7. Wei L. Research on Countermeasures and Methods of Disposing Incidents of Hazardous Chemicals Reacting with Water // *Procedia Engineering*. 2011. V. 26. P. 2278–2286. doi.org/10.1016/j.proeng.2011.11.2435
8. Hollingsworth S. A., Dror R. O. Molecular Dynamics Simulation for All // *Neuron*. 2018. V. 99. P. 1129–1143. doi.org/10.1016/j.neuron.2018.08.011

9. 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 // *Atmospheric Chemistry and Physics*. 2012. V. 12. P. 2777–2794. doi.org/10.5194/acp-12-2777-2012

10. Кустов М. В., Басманов О. Є., Мельниченко А. С. Моделювання зони хімічного ураження в умовах локалізації надзвичайної ситуації // *Проблеми надзвичайних ситуацій*. 2020. V. 32. P. 145–157. doi.org/10.5281/zenodo.4400185

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

M. Kustov, DSc, Associate Professor, Deputy Head of Department

O. Basmanov, DSc, Professor, Chief Researcher

O. Tarasenko, DSc, Professor, Head of Department

A. Melnichenko, Lecturer of the Department

National University of Civil Defence of Ukraine, Kharkiv, Ukraine

FORECAST THE SCALE OF CHEMICAL CONTAMINATION UNDER CONDITIONS OF A HAZARDOUS SUBSTANCE PRECIPITATION

Modeling of the emission zone of gaseous hazardous substances under different conditions of active deposition of hazardous clouds is carried out. Based on the differential equations of gas distribution in space, a step-by-step model of cloud distribution of hazardous chemical substance is obtained, which describes the stages of substance release from emergency process equipment, precipitation of hazardous gas by fine liquid flow and free cloud distribution in air. 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. Based on the MAPLE mathematical software package, an algorithm for solving a mathematical model with the ability to visualize forecasting results has been developed. Automating the process of forecasting the scale of the emergency situation with the visualization of forecasting results increases the efficiency of emergency response staffs and reduces the time to make management decisions. With the help of the developed algorithm the forecasting of scales of chemical damage on various parameters of emission of dangerous substance, number of zones of deposition and intensity of giving of a fine stream on deposition is carried out. A comparative analysis of the results of forecasting the conditional zone of chemical damage during the free spread of the cloud and the active localization of the emission zone by operational and rescue units. The results of the comparative analysis showed that taking into account the processes of cloud deposition of hazardous chemicals in forecasting the scale of the emergency can significantly improve the accuracy of determining the size of the hazardous area, which affects the correctness of management decisions in rescue and evacuation.

Keywords: hazardous chemicals, contamination zone, hazardous substance deposition, lesion scale forecasting, lesion zone localization

References

1. Bundy, J., Pfarrer, M. D., Short, C. E., Coombs, W. T. (2017). Crises and Crisis Management: Integration, Interpretation, and Research Development. *Journal of Management*, 43(6), 1661–1692. doi.org/10.1177/0149206316680030

2. Swain, C. (2009). WISER and REMM: Resources for Disaster Response. *Journal of Electronic Resources in Medical Libraries*, 6, 253–259. doi.org/10.1080/15424060903167393

3. Polorecka, M., Kubas, J., Danihelka, P., Petrlova, K., Repkova Stofkova, K., Buganova, K. (2021). Use of Software on Modeling Hazardous Substance Release as a

Support Tool for Crisis Management. *Sustainability*, 13, 438–453. doi.org/10.3390/su13010438

4. Dahia, A., Merrouche, D., Merouani, D. R. Rezoug, T., Aguedal, H. (2019). Numerical Study of Long-Term Radioactivity Impact on Foodstuff for Accidental Release Using Atmospheric Dispersion Model. *Arabian Journal for Science and Engineering*, 44, 5233–5244. doi.org/10.1007/s13369-018-3518-2

5. Loosmore, G., Cederwall, R. (2004). Precipitation scavenging of atmospheric aerosols for emergency response applications: testing an updated model with new real-time data // *Atmospheric Environment*, 38, 993–1003. doi.org/10.1016/j.atmosenv.2003.10.055

6. Elperin, T., Fominykh, A., Krasovitev, B., Vikhansky, A. (2011). Effect of rain scavenging on altitudinal distribution of soluble gaseous pollutants in the atmosphere. *Atmospheric Environment*, 45(14), 2427–2433. doi.org/10.1016/j.atmosenv.2011.02.008

7. Wei, L. (2011). Research on Countermeasures and Methods of Disposing Incidents of Hazardous Chemicals Reacting with Water. *Procedia Engineering*, 26, 2278–2286. doi.org/10.1016/j.proeng.2011.11.2435

8. Hollingsworth, S. A., Dror, R. O. (2018). Molecular Dynamics Simulation for All. *Neuron*, 99, 1129–1143. doi.org/10.1016/j.neuron.2018.08.011

9. 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 // *Atmospheric Chemistry and Physics*, 12, 2777–2794. doi.org/10.5194/acp-12-2777-2012

10. Kustov, M. V., Basmanov, O. Y., Melnichenko, A. S. (2020). Modeling the zone of chemistry in the minds of the localization of the supervised situation. *Problems of supervised situations*, 32, 145–157. doi.org/10.5281/zenodo.4400185

11. 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: 8.03.2021

Прийнята до друку: 12.04.2021