

УДК 519.6

NUMERICAL SIMULATION OF AIR POLLUTION IN WORKPLACES AFTER TOXIC CHEMICAL EMISSION

BILIAIEV M. M. ¹, *Dr. Sc. (Tech.), Prof.*,
 AMELINA L. V. ^{2*}, *postgraduate*,
 STEPANOVA Yu. O. ³, *stud.*,

¹ Department of «Hydraulics and Water Supply», Dnipropetrovsk National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan, 2, Lazaryan St., Dnipropetrovsk, 49010, Ukraine, tel. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID ID 0000-0002-1531-7882

^{2*} Department of «Hydraulics and Water Supply», Dnipropetrovsk National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan, 2, Lazaryan St., Dnipropetrovsk, 49010, Ukraine, tel. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID ID 0000-0002-8525-7096

³ Department of «Hydraulics and Water Supply», Dnipropetrovsk National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan, 2, Lazaryan St., Dnipropetrovsk, 49010, Ukraine, tel. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID ID 0000-0002-5793-5160

Purpose. Development of a numerical model to compute the dynamics of atmosphere pollution in workplaces after accidents which results in toxic chemical emission. **Methodology.** For the numerical simulation of atmosphere pollution in workplaces 3D equation of pollutant dispersion is used. This equation takes into account the convective and dispersion processes of pollutant transport, the rate of toxic chemical emission, position of source emission. For the numerical integration of the governing equation of pollutant dispersion in atmosphere the implicit finite-difference scheme is used. On the basis of the numerical model generic model was developed. FORTRAN language was used to develop the generic model. Computational experiments were carried out to calculate the dynamics of pollution after accident emission at ammonia pipeline which is situated at Dnepr River. **Findings.** The proposed model allows to simulate the atmosphere pollution in workplaces after accident emission of toxic chemicals. The model allows quickly obtain the information which can be used for response methods development. Results of numerical experiments are presented. **Originality.** 3D numerical model was developed allowing to calculate quickly atmosphere pollution after accidents which result in toxic chemical emission. **Practical value.** The developed model can be used for numerical simulation of air pollution in workplaces after toxic chemicals emissions. It can be used at the stage of PLAS (ПЛАС) development.

Keywords: atmosphere pollution, numerical simulation, accident emission of toxic chemical

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАГРЯЗНЕНИЯ ВОЗДУХА В РАБОЧИХ МЕСТАХ ПОСЛЕ ЭМИССИИ ТОКСИЧНЫХ ВЕЩЕСТВ

БЕЛЯЕВ Н. Н. ¹, *д.т.н, проф.*,
 АМЕЛИНА Л. В. ^{2*}, *соискатель*,
 СТЕПАНОВА Ю. О. ³, *студент*,

¹ Кафедра «Гидравлика и водоснабжение», Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, ул. Лазаряна, 2, 49010, Днепропетровск, Украина, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID ID 0000-0002-1531-7882

^{2*} Кафедра «Гидравлика и водоснабжение», Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, ул. Лазаряна, 2, 49010, Днепропетровск, Украина, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID ID 0000-0002-8525-7096

³ Кафедра «Гидравлика и водоснабжение», Днепропетровский национальный университет железнодорожного транспорта имени академика В. Лазаряна, ул. Лазаряна, 2, 49010, Днепропетровск, Украина, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID ID 0000-0002-5793-5160

Аннотация. Цель Разработка численной модели для расчета динамики загрязнения атмосферы на рабочих местах после аварий, что приводит к эмиссии токсичных химических веществ. **Методика.** Для численного моделирования загрязнения атмосферы на рабочих местах используется 3D уравнение дисперсии загрязняющего вещества. Это уравнение учитывает конвективные и дисперсионные процессы переноса загрязняющих веществ, скорость эмиссии токсичных химических веществ, положение источника эмиссии. Для численного интегрирования моделирующего уравнения рассеивания загрязняющих веществ в атмосфере используется неявная схема конечных разностей. На основе численной модели была разработана общая модель. Для разработки общей модели был использован FORTRAN. Численные эксперименты проводились для расчета динамики загрязнения после аварийного случая разлива на трубопроводе аммиака, который расположен на реке Днепр. **Результаты.** Предложенная модель позволяет моделировать загрязнения воздуха на рабочих местах после аварийной эмиссии токсичных химических веществ. Модель позволяет быстро получить информацию,

которая может быть использована для разработки методов реагирования. Представлены результаты численных экспериментов. **Научная новизна.** Была разработана 3D численная модель, что позволяет быстро рассчитать загрязнения атмосферы после аварий, которые приводят к токсичным химическим выбросам. **Практическая значимость.** Разработанная модель может быть использована для численного моделирования загрязнения воздуха на рабочих местах после выбросов токсичных химических веществ. Она может быть использована на стадии разработки PLAS (ПЛИАС).

Ключевые слова: загрязнения атмосферы, численное моделирование, аварийная эмиссия токсичных веществ.

ЧИСЕЛЬНЕ МОДЕЛЮВАННЯ ЗАБРУДНЕННЯ ПОВІТРЯ РОБОЧИХ МІСЦЬ ПІСЛЯ ЕМІСІЇ ТОКСИЧНИХ РЕЧОВИН

БІЛЯЄВ М. М. ¹, *д.т.н, проф.*,
АМЕЛІНА Л. В. ^{2*}, *здобувач*,
СТЕПАНОВА Ю. О. ³, *студент*,

¹ Кафедра «Гідравліка та водопостачання», Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, вул. Лазаряна, 2, 49010, Дніпропетровськ, Україна, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID ID 0000-0002-1531-7882

^{2*} Кафедра «Гідравліка та водопостачання», Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, вул. Лазаряна, 2, 49010, Дніпропетровськ, Україна, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID ID 0000-0002-8525-7096

³ Кафедра «Гідравліка та водопостачання», Дніпропетровський національний університет залізничного транспорту імені академіка В. Лазаряна, вул. Лазаряна, 2, 49010, Дніпропетровськ, Україна, тел. +38(056) 373-15-09, e-mail: gidravlika2013@mail.ru, ORCID ID 0000-0002-5793-5160

Анотація. Мета. Розробка чисельної моделі для розрахунку динаміки забруднення атмосфери на робочих місцях після аварій, що призводить до емісії токсичних хімічних речовин. **Методика.** Для чисельного моделювання забруднення атмосфери на робочих місцях використовується 3D рівняння дисперсії забруднюючої речовини. Це рівняння враховує конвективні і дисперсійні процеси переносу забруднюючих речовин, швидкість емісії токсичних хімічних речовин, положення джерела емісії. Для чисельного інтегрування керуючого рівняння розсіювання забруднюючих речовин в атмосфері використовується неявна схема кінцевих різниць. На основі чисельної моделі була розроблена загальна модель. Для розробки загальної моделі був використаний FORTRAN. Чисельні експерименти проводилися для розрахунку динаміки забруднення після аварійного випадку розливу на трубопроводі аміаку, який розташований на річці Дніпро. **Результати.** Запропонована модель дозволяє моделювати забруднення повітря на робочих місцях після аварійної емісії токсичних хімічних речовин. Модель дозволяє швидко отримати інформацію, яка може бути використана для розробки методів реагування. Представлені результати чисельних експериментів. **Наукова новизна.** Була розроблена 3D чисельна модель, що дозволяє швидко розрахувати забруднення атмосфери після аварій, які призводять до токсичних хімічних викидів. **Практична значимість.** Розроблена модель може бути використана для чисельного моделювання забруднення повітря на робочих місцях після викидів токсичних хімічних речовин. Вона може бути використана на стадії розробки PLAS (ПЛИАС).

Ключові слова: забруднення атмосфери, чисельне моделювання, аварійна емісія токсичних речовин.

Introduction

Emission of toxic chemicals can take place at different industrial enterprises or transport. Very dangerous are emissions as a result of terror acts at enterprises or transport [6, 9-12]. The huge amount of toxic chemicals can be emitted in to atmosphere during the short period of time. In such situations it is very important to have a tool for risk assessment and possible damage prediction. Such tools can be also used for prediction of damage for different scenario of accident emission. To solve this problem the mathematical models which are based on Gaussian dispersion models are used in practice [4, 5, 7, 8, 10]. These models are implemented in different codes such as "AERMOD" "CULPUF", "Токси", "Аммиак", etc. From the mathematical point of view the Gaussian models represent the analytical models which are supplied with some empirical coefficients. These models allow to predict quickly the

atmosphere pollution and risk assessment in cases of terror acts or accident emissions (See Fig.1).



Fig.1 Contamination area in Gdansk after toxic chemical emission (results of mathematical modeling) [11] /

Зона загрязнения подземных вод после эмиссии опасного вещества в г. Гданськ (результаты математического моделирования) [11]

Being the analytical models the Gaussian models are restricted enough. The models do not take into account a number of important physical factors. Numerical models represent more advanced approach to solve the problem of atmosphere pollution after accidents [2-4, 9, 11, 15]. Development of such models for emergency respond goals are still of great importance.

Purpose

The purpose of this work is development of 3-D numerical model to estimate the atmosphere pollution in workplaces after toxic chemical accident emission.

Methodology

Mathematical model. We consider toxic chemical emission from a point source. To predict the air pollution in workplaces we use 3D equation of pollutant dispersion in atmosphere [1-4, 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 C is toxic chemical concentration; u, v, w are the wind velocity components; σ is the parameter taking into account the process of toxic chemical decay; $\mu = (\mu_x, \mu_y, \mu_z)$ are the diffusion coefficients; Q is intensity of point source emission; $\delta(r - r_i)$ are Dirak's delta function; $r_i = (x_i, y_i, z_i)$ are the coordinates of the point source of emission.

This equation is used with the following boundary conditions:

- 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 on this plane);
- top boundary and ground surface $\frac{\partial C}{\partial n} = 0$.

In the numerical model developed the following approximations for wind speed and diffusion coefficient are used [4]:

$$u = u_1 \left(\frac{z}{z_1} \right)^n, \quad \mu_z = 0,11z, \quad \mu_y = k_0u, \quad \mu_x = \mu_x,$$

where u_1 is wind speed at the height $z_1=10m$; $n=0,15$; k_0 is parameter [4].

Numerical model. To solve the modeling equation (1) we use implicit difference scheme [1,2,9]. The main idea of this scheme is splitting of equation (1) [1,2,9]. As a result we obtain implicit difference equations which can be solved using explicit formulae. These formulae can be easily coded. FORTRAN language was used to code the developed numerical model.

Findings

The developed code was used to simulate the air pollution in workplaces which are situated at the right bank of river Dnepr near ammonia pipeline. The problem of accident ammonia emission at this ammonia pipeline (Fig. 2-4) is under consideration. This pipeline crosses Dnepr River not far from Zaporozhie city. Results of computer simulation in the case of accident emission at this pipeline are shown in Fig.5.



Fig.2. View of the ammonia pipeline at Dnepr River / Вид аммиакапровода на р. Днепр

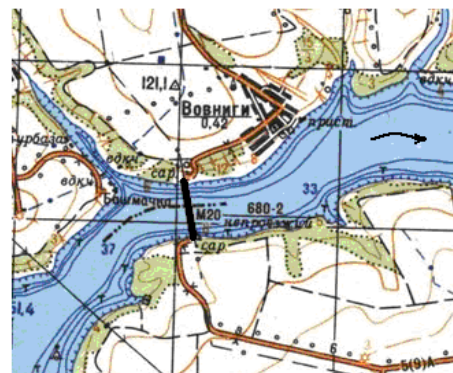


Fig.3 Position of the ammonia pipeline on map / Положение аммиакапровода на карте



Fig.4. Position of the ammonia pipeline / Положение аммиакапровода



Fig.5 Polluted area, $t = 45s$ /

Зона загрязнения, $t = 45c$

As we can see from this Figure the cloud of toxic gas quickly reaches the right bank of the river where the workplaces are situated. It means that the workers who serve this pipeline will be hit.

In Fig. 6 the results of numerical simulation of ammonia emission at pump station are presented. In this case we simulate the accident ammonia emission at pump station.



Fig.6 Polluted area at ammonia-pump station, $t = 15s$

/Зона загрязнения на насосной станции по перекачке аммиака, $t = 15c$

As we can see from Fig. 6 the plume of toxic gas quickly covers the territory of pump station. It means that the workers who serve this pipeline will be hit

Originality and practical value

A 3D numerical model to predict atmosphere pollution in workplaces after toxic chemicals emission was developed. The model is based on the 3D equation of pollutant dispersion. This model allows to compute the dynamics of the atmosphere pollution after accident.

Conclusions

The article contains description of 3-D numerical model and it's application to predict the air pollution in workplaces after accident with toxic chemical emission.

The developed numerical model takes into account the main physical factors which influence the process of toxic chemical dispersion in the atmosphere. The model allows to predict the air pollution in workplaces at different chemical enterprises and may be used as the tool for risk estimation. The future work in this field will be connected with development of mathematical model to simulate dynamics of air pollution on the base of Navier –Stokes equations.

LIST OF USED SOURCES

1. Беляев, Н. Н. Моделирование нестационарных процессов аварийного загрязнения атмосферы: монография [Текст] / Н. Н. Беляев, А. В. Берлов, П. Б. Машихина. – Д.: «Акцент ПП», 2014. – 127 с.
2. Беляев Н. Н. Защита зданий от проникновения в них опасных веществ: монография [Текст] / Н. Н. Беляев, Е. Ю. Гунько, Н. В. Росточило. – Д.: «Акцент ПП», 2013. – 136 с.
3. Беляев Н. Н. Экспресс метод оценки потенциального территориального риска при авариях на транспорте / Н. Н. Беляев, Л. Я. Мунтян // Вісн. Дніпропетр. нац. ун-ту залізн. трансп. ім. акад. В. Лазаряна «Наука та прогрес транспорту». – Д., 2016. – Вип. 1 (57). – С. 32-36.
4. Бруцкий Е. В. Теория атмосферной диффузии радиоактивных выбросов / Бруцкий Е. В. – К.: Институт гидромеханики НАН Украины, 2000. – 443 с.
5. Гусев Н. Г. Радиоактивные выбросы в биосфере / Гусев Н. Г., Беляев В. А. – М.: Энергоатомиздат, 1991. – 257 с.
6. Biliaiev M. Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography / M. Biliaiev // Air Pollution Modeling and its Application XXI, Springer, 2012. – P. 87–91.
7. Hanna S. Air Quality Modelling over Short Distances / S. Hanna – College on Atmospheric Boundary Layer and Air Pollution Modelling. – 16 May–3 June, 1994. – № SMR/760–2 – P. 712–743.
8. Maria de Lurdes Dinis. Simulation of liberation and dispersion of radon from a waste disposal // Maria de Lurdes Dinis, Antonia Fluzza. Advances in Air Pollution Modeling for Environment Security. NATO Science Series, Springer. – 2004. – Vol. 54. – P.133–142.

9. Biliaiev M. M. Numerical simulation of the atmosphere pollution after accident at the “Tolliaty-Odessa” ammonia pipe / M. M. Biliaiev, M. M. Kharitonov, L. V. Amelina // NATO Science for peace and security series C: Environmental security; Air pollution modeling and its application XXII, 2014. – pp. 391-395.
10. Dispersion Modeling of Hydrogen Sulfide at Cimarex Rands Butte Project Using ALOHA. Bureau of Land Management Pinedale Field Office. SWCA Environmental Consultants 1043 Coffeen Avenue, Suite D Sheridan, Wyoming 82801. January 2010. – 26 p. www.swca.com.
11. Vasilii V. Popovich, Manfred Schrenk, Christophe Claramunt, Kyrill V. Korolenko (Eds.). Information Fusion and Geographic Information Systems. Lecture Notes in Geoinformation and Cartography. Proceedings of the Fourth International Workshop, 17-20 May 2009. – 371 p.
12. Warner T., and Coauthors. The Pentagon SHIELD field program: Toward critical infrastructure protection. Bulletin of the American Meteorological Society, doi:10.1175/BAMS-88-2-167, 2007.

REFERENCES

1. Belyaev N.N., Berlov A.V., Mashikhina P.B. *Modelirovanie nestacionarnykh processov avarijnogo zagryazneniya atmosfery* [Simulation of non-stationary processes of emergency air pollution]. Dnepropetrovsk, Aktsent PP Publ., 2014, 127 p.
2. Belyaev N.N., Gunko E.Yu., Rostochilo N.V. *Zashchita zdaniy ot proniknoveniya v nih opasnykh veshchestv monografiya* [Protection of buildings from the penetration of dangerous substances into them: monograph]. Dnepropetrovsk, Aktsent PP Publ., 2013, 136 p.
3. Belyaev N.N., Muntyan L.Ya. *Ekspress metod otsenki potentsialnogo territorialnogo riska pri avariayah na transporte* [Express method for assessing potential territorial risk in case of transport accidents]. *Visnyk Dnipropetrovskoho natsionalnogo universytetu zaliznychnoho transportu imeni akademika V. Lazaryana* [Bulletin of the Dnipropetrovsk National University of Railway Transport named after Academician V. Lazaryan]. *Nauka ta prohres transport – Science and Transport Progress*, 2016, no. 1 (57), pp. 32-36.
4. Bruyatskiy Ye.V. *Teoriya atmosfernoï diffuzii radioaktivnykh vybrosov* [The theory of atmospheric diffusion of radioactive emissions]. Kiev, Institut gidromekhaniki NAN Ukrainy Publ., 2000. 443 p.
5. Gusev N.G., Belyaev V.A. *Radioaktivnye vybrosty v biosfere* [Radioactive emissions in the biosphere]. Moscow, Energoatomizdat Publ., 1991. 257 p.
6. Biliaiev, M. Numerical Simulation of Indoor Air Pollution and Atmosphere Pollution for Regions Having Complex Topography / M. Biliaiev // NATO Science for Peace and Security Series C: Environmental Security. – 2012. – P. 87–91. doi: 10.1007/978-94-007-1359-8_15.
7. Hanna S. Air Quality Modelling over Short Distances. College on Atmospheric Boundary Layer and Air Pollution Modelling. – 16 May–3 June, 1994. – № SMR/760–2 – P. 712–743.
8. Maria de Lurdes Dinis. Simulation of liberation and dispersion of radon from a waste disposal // Maria de Lurdes Dinis, Antonia Fluza. *Advances in Air Pollution Modeling for Environment Security*. NATO Science Series, Springer. – 2004. – Vol. 54. – P.133–142.
9. Biliaiev M.M., Kharitonov M.M., Amelina L.V. Numerical simulation of the atmosphere pollution after accident at the “Tolliaty-Odessa” ammonia pipe / M.M. Biliaiev, M.M. Kharitonov, L.V. Amelina // NATO Science for peace and security series C: Environmental security; Air pollution modeling and its application XXII, 2014. – pp. 391-395.
10. Dispersion Modeling of Hydrogen Sulfide at Cimarex Rands Butte Project Using ALOHA. Bureau of Land Management Pinedale Field Office. SWCA Environmental Consultants 1043 Coffeen Avenue, Suite D Sheridan, Wyoming 82801. January 2010. – 26 p. www.swca.com.
11. Vasilii V. Popovich, Manfred Schrenk, Christophe Claramunt, Kyrill V. Korolenko (Eds.). Information Fusion and Geographic Information Systems. Lecture Notes in Geoinformation and Cartography. Proceedings of the Fourth International Workshop, 17-20 May 2009. – 371 p.
12. Warner T., and Coauthors. The Pentagon SHIELD field program: Toward critical infrastructure protection. Bulletin of the American Meteorological Society, doi:10.1175/BAMS-88-2-167, 2007.

Стаття рекомендована до публікації д-ром техн. наук, проф. С.З. Поліщуком (Україна);

Стаття надійшла в редколегію 06.04.2017