

## MÔ HÌNH TÍNH TOÁN PHÁT TÁN HÓA CHẤT ĐỘC TRONG KHÔNG KHÍ

Nguyễn Xuân Trường<sup>1\*</sup>, Phùng Kim Phương<sup>1</sup>, Phạm Minh Kha<sup>1</sup>,  
Nguyễn Khánh Hưng<sup>2</sup>, Vũ Văn Hiếu<sup>2</sup>, Phạm Minh Tuấn<sup>3</sup>

**Tóm tắt:** Bài báo trình bày việc đề xuất một mô hình tính toán phát tán hóa chất độc (trên cơ sở phân bố Gauss) trong không khí. Một phần mềm máy tính (đặt tên là: ChemCode) cũng được phát triển bằng ngôn ngữ lập trình C/C++ (dựa trên các công cụ Visual Studio 2013/2017, Spyder với Python và các thư viện NumPy, Matplotlib,...), cho phép tính toán nhanh nồng độ hóa chất độc phát tán theo không gian và thời gian xảy ra trong các sự cố. Phần mềm ChemCode được kiểm nghiệm thông qua việc so sánh thời gian tính toán, độ chính xác của kết quả tính toán nồng độ hóa chất độc với phần mềm thương mại quốc tế ALOHA (của Mỹ). Phần mềm ChemCode được phát triển với mục đích hỗ trợ lập kế hoạch chỉ huy và ứng phó với các sự cố hóa học của lực lượng quân sự.

**Từ khóa:** Hóa chất độc; Sự cố hóa chất; Phát tán; ALOHA; ChemCode.

### 1. GIỚI THIỆU

Các mô hình phát tán chất ô nhiễm trong không khí và các nghiên cứu liên quan đã được nghiên cứu tại Việt Nam, cụ thể: mô hình hóa môi trường tính toán lan truyền, phát tán chất ô nhiễm trong không khí [1], xây dựng mô hình lan truyền và khuếch tán chất bẩn trong bài toán thiết lập hệ thống quan trắc sự nhiễm bẩn trong môi trường không khí [2], mô hình hóa ô nhiễm không khí trong điều kiện địa hình phức tạp từ các nguồn thải điểm [3]. Trên thế giới, đã có nhiều công trình nghiên cứu về các mô hình phát thải và phát tán khí độc trong các trường hợp khác nhau như: phát tán khí độc từ các thiết bị di động trong tầng đối lưu [4], phân tích các thảm họa hóa học do giải phóng khí tự nhiên chứa Hydro Sunfua [5], đặc điểm phát tán khí độc và đánh giá rủi ro phơi nhiễm trong môi trường tòa nhà [6]. Có thể thấy rằng, các nghiên cứu này có thể được chia thành hai nhóm: (i) xây dựng mô hình tính toán, dựa trên ứng dụng mô hình thống kê kinh nghiệm dạng Gauss-Pasquill [7, 8]; (ii) phát triển phần mềm máy tính, để tự động hóa tính toán quá trình lan truyền ô nhiễm không khí (thường sử dụng công nghệ hệ thống thông tin địa lý - GIS). Tuy nhiên, chưa có nhiều nghiên cứu liên quan đến việc mô hình hóa sự phát tán chất độc trong các sự cố hóa học (do cháy, nổ,...).

Bài báo trình bày việc xây dựng mô hình tính toán phát tán và phát triển phần mềm máy tính dùng để xác định nồng độ hóa chất độc (sinh ra từ các sự cố hóa chất) phát tán trong không khí theo không gian và thời gian. Việc tính toán nồng độ hóa chất độc được thực hiện trong các điều kiện khí tượng và địa hình khác nhau. Chương trình máy tính và mô hình phát tán được xây dựng trên giả thiết: nồng độ hóa chất phát tán trong không khí tuân theo phân bố Gauss. Mô hình tính toán này có thể áp dụng cho một nguồn phát thải, phù hợp cho dự báo ngắn hạn và dài hạn. Các kết quả tính toán của phần mềm được so sánh với kết quả từ phần mềm ALOHA (của Hoa Kỳ, được sử dụng rộng rãi để lập kế hoạch và ứng phó các trường hợp hóa học khẩn cấp. Bài báo này cũng trình bày việc xây dựng phần mềm máy tính có giao diện thân thiện với người dùng, thông qua ba quá trình cơ bản: (i) người dùng nhập các tham số đầu vào; (ii) phần mềm máy tính sẽ tính toán các tham số phát tán; và (iii) các tham số phát tán sẽ được hiển thị trên nền bản đồ địa hình số. Mô hình và phần mềm máy tính phát triển trong nghiên cứu này với mục đích hỗ trợ chỉ huy, điều hành quá trình ứng phó sự cố hóa chất độc trong quân sự.

### 2. CÔNG CỤ VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

#### 2.1. Mô hình tính toán nồng độ hóa chất độc phát tán trong không khí

Nồng độ hóa chất độc phát tán trong không khí  $C(x, y, z, t)$  tại điểm có tọa độ  $(x, y, z)$  trong

không gian, vào thời điểm (t) được xác định theo công thức (1) [1, 9].

$$C(x, y, z, t) = \begin{cases} \chi \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{x}{\sigma_x \sqrt{2}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{x - Ut}{\sigma_x \sqrt{2}} \right) \right] & (t \leq t_r) \\ \chi \left[ \operatorname{erf} \left( \frac{x - U(t - t_r)}{\sigma_x \sqrt{2}} \right) - \operatorname{erf} \left( \frac{x - Ut}{\sigma_x \sqrt{2}} \right) \right] & (t_r < t < \infty) \end{cases} \quad (1)$$

Trong đó:

- +  $\sigma_x$  là tham số phát tán theo chiều gió  $x$ , phụ thuộc vào khoảng cách và lớp ổn định khí quyển;
- +  $t_r$  là khoảng thời gian phát tán;
- +  $U$  là vận tốc gió tại độ cao  $z$ ;
- +  $\chi$  là hàm đặc trưng cho phân bố Gauss từ một nguồn phát thải có trạng thái ổn định liên tục, được xác định theo công thức (2).

$$\chi(x, y, z, t) = \left( \frac{Q_e(t)}{U} \right) g_y(x, y) g_z(x, z), \quad (2)$$

Với  $g_y(x, y)$  và  $g_z(x, z)$  được tính theo công thức (3) và (4) khi không có sự đổi lưu. Các giá trị này phụ thuộc vào chiều cao của nguồn phát tán  $h_s$ , khối lượng của hóa chất độc phát thải vào không khí theo thời gian  $Q_e(t)$  và các tham số phát tán  $\sigma_y, \sigma_z$  theo chiều  $y$  và  $z$ .

$$g_y(x, y) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_y(x)} \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{y}{\sigma_y(x)} \right)^2 \right] \quad (3)$$

$$g_z(x, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_z(x)} \left\{ \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{z - h_s}{\sigma_z(x)} \right)^2 \right] + \exp \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{z + h_s}{\sigma_z(x)} \right)^2 \right] \right\} \quad (4)$$

Các tham số  $\sigma_x, \sigma_y$  và  $\sigma_z$  cho mỗi lớp ổn định khí quyển Pasquill – Gifford và điều kiện địa hình [7, 9] được ước tính theo công thức (5).

$$\sigma_x = s_{x1} x_0^{s_{x2}}; \quad \sigma_y(x) = \frac{s_{y1} x}{\sqrt{1 + s_{y2} x}} \quad \text{và} \quad \sigma_z(x) = s_{z1} x (1 + s_{z2} x)^{s_{z3}} \quad (5)$$

Giá trị của các hệ số  $s_x, s_y, s_z$  phụ thuộc vào độ nhám bề mặt địa hình, tương ứng với các lớp ổn định khí quyển [7] được liệt kê lại trong bảng 1.

**Bảng 1.** Hệ số phát tán  $s_x, s_y, s_z$  theo độ nhám bề mặt và lớp ổn định Pasquill – Gifford [7].

| Độ nhám bề mặt                         | Hệ số    | Lớp ổn định khí quyển Pasquill – Gifford |       |        |        |        |        |
|----------------------------------------|----------|------------------------------------------|-------|--------|--------|--------|--------|
|                                        |          | A                                        | B     | C      | D      | E      | F      |
| <b>Khu vực nông thôn (vùng thoáng)</b> | $s_{z1}$ | 0,2                                      | 0,12  | 0,08   | 0,06   | 0,03   | 0,016  |
|                                        | $s_{z2}$ | 0                                        | 0     | 0,0002 | 0,0015 | 0,0003 | 0,0003 |
|                                        | $s_{z3}$ | 0                                        | 0     | -0,5   | -0,5   | -1     | -1     |
| <b>Khu vực thành thị</b>               | $s_{z1}$ | 0,24                                     | 0,24  | 0,2    | 0,14   | 0,08   | 0,08   |
|                                        | $s_{z2}$ | 0,001                                    | 0,001 | 0      | 0,0003 | 0,0015 | 0,0015 |
|                                        | $s_{z3}$ | 0,5                                      | 0,5   | 0      | -0,5   | -0,5   | -0,5   |

|                                                                                                                                                                                                                            |          |        |        |        |        |        |        |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|
| <b>Cả hai Khu vực</b>                                                                                                                                                                                                      | $s_{x1}$ | 0,02   | 0,02   | 0,02   | 0,04   | 0,17   | 0,17   |
|                                                                                                                                                                                                                            | $s_{x2}$ | 1,22   | 1,22   | 1,22   | 1,14   | 0,97   | 0,97   |
|                                                                                                                                                                                                                            | $s_{y1}$ | 0,22   | 0,16   | 0,11   | 0,08   | 0,06   | 0,04   |
|                                                                                                                                                                                                                            | $s_{y2}$ | 0,0001 | 0,0001 | 0,0001 | 0,0001 | 0,0001 | 0,0001 |
| <b>Ghi chú:</b><br><b>Các lớp ổn định khí quyển Pasquill – Gifford</b><br><i>A – Rất không ổn định; B – Không ổn định vừa phải; C – Không ổn định nhẹ;</i><br><i>D – Trung tính; E - Ổn định nhẹ; F - Ổn định vừa phải</i> |          |        |        |        |        |        |        |

Trong bài báo này, giả định rằng sự cố xảy ra đối với trường hợp hóa chất độc được giải phóng từ một thùng chứa một loại hóa chất bị vỡ do tác động của ngoại lực. Hóa chất trong thùng chứa ở dạng lỏng, sau khi giải phóng khỏi thùng lập tức bay vào không khí và phát tán theo chiều gió, hoặc bị bốc cháy để tạo thành khí độc. Khi đó,  $Q_e(t)$  trong công thức (2) sẽ phụ thuộc vào khối lượng hóa chất thoát ra từ thùng chứa  $Q_T$ , khối lượng riêng của hóa chất dạng lỏng trong thùng  $\rho_l$ , khối lượng riêng của hóa chất lỏng thoát ra  $\rho_x$  và khối lượng riêng của hóa chất dạng khí thoát ra  $\rho_g$ , được tính bằng công thức (6).

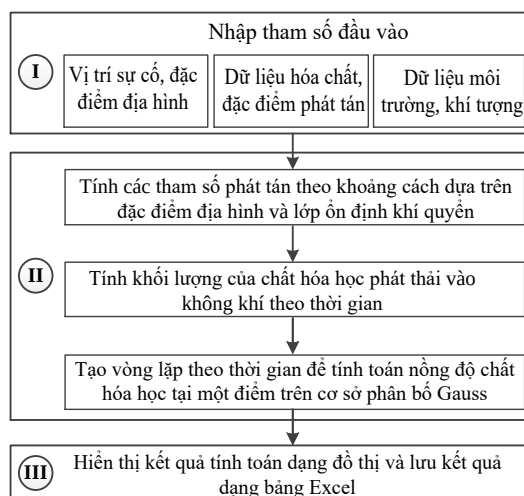
$$Q_e(t) = \frac{Q_T}{\rho_x} \left( \frac{\rho_l \rho_g}{\rho_l - \rho_g} \right) \quad (6)$$

## 2.2. Xây dựng phần mềm tính toán và hiển thị số liệu

Hình 1 trình bày mô hình tính toán các tham số phát tán hóa chất độc với 03 bước cơ bản: (I) – nhập tham số đầu vào; (II) – tính toán các tham số phát tán; và (III) – hiển thị kết quả tính toán các tham số phát tán [9]. Để tích hợp mô hình trong một phần mềm máy tính, bộ công cụ lập trình Spyder được sử dụng cùng với ngôn ngữ lập trình Python và thư viện dữ liệu NumPy. Trong đó, Spyder là một môi trường phát triển tích hợp mã nguồn mở (hỗ trợ lập trình Python), được phát triển dùng cho các mục đích phân tích dữ liệu. Spyder hỗ trợ tự động hóa quá trình chỉnh sửa, biên dịch, kiểm thử mã nguồn, gỡ rối một cách dễ dàng trong lập trình. Spyder cũng hỗ trợ cung cấp các mô đun khoa học tính toán, xử lý dữ liệu thông qua các thư viện như: NumPy, SciPy, Matplotlib, Pandas,... Ngôn ngữ lập trình C/C++ được sử dụng để xây dựng giao diện phần mềm nhập dữ liệu tham số đầu vào, tính toán và hiển thị kết quả tính toán lan truyền hóa chất độc trên nền bản đồ địa hình số (được đặt tên là: ChemCode).

Các mô đun của phần mềm ChemCode được xây dựng tuân theo các bước của mô hình trong hình 1, bao gồm:

- Mô đun tạo giao diện thay đổi tham số đầu vào của sự cố: tọa độ (kinh độ, vĩ độ) xảy ra sự cố; đặc điểm địa hình khu vực sự cố; đặc tính hóa chất phát tán vào môi trường (dạng hóa học: lỏng, khí, sol khí; khối lượng riêng; khối lượng mol; nhiệt độ bay hơi,...); tham số môi trường và khí tượng (nhiệt độ, hướng gió, tốc độ gió, độ ổn định khí quyển); thiết lập thời gian và độ phân giải tính toán phát tán;
- Mô đun tính toán các tham số phát tán theo khoảng cách - giá trị  $\sigma_y$  và  $\sigma_z$  trong công thức (5), dựa trên đặc điểm địa hình và độ ổn định của khí quyển - bảng 1;
- Mô đun tính toán nồng độ hóa chất độc tại một vị trí, ở một thời điểm nhất định - công thức (2), (3), (4), dựa trên lý thuyết phân bố Gauss;
- Mô đun tạo vòng lặp để tính nồng độ chất hóa học tại một vị trí theo thời gian (đã thiết lập ở mục (i) thông qua việc gọi giá trị hàm Gauss trong mục (iii)).
- Mô đun hiển thị kết quả tính toán bằng đồ thị 2D với các màu sắc khác nhau đặc trưng cho sự thay đổi nồng độ của hóa chất độc phát tán. Mô đun này tự động lưu kết quả tính toán vào bảng số liệu Excel, phục vụ cho việc tra cứu.



**Hình 1.** Mô hình tính toán các tham số phát tán hóa chất độc trong các sự cố, với 03 quá trình:

I - Nhập các tham số đầu vào; II - Tính toán các tham số phát tán;

III - Hiển thị kết quả tính toán các tham số phát tán.

Phần mềm ChemCode được giao diện hóa sử dụng môi trường lập trình phát triển Visual Studio 2013/2017 với ngôn ngữ lập trình C++. ChemCode được xây dựng có bảng giao diện thiết lập tham số sự cố hóa chất, cho phép thiết lập và thay đổi các tham số sự cố, bao gồm: loại hóa chất, cường độ và độ cao phát thải; tham số môi trường và độ ổn định của khí quyển; thời gian tính toán. Kết quả tính toán nồng độ hóa chất phát tán trong không khí được hiển thị trên nền bản đồ địa hình số tại vị trí khu vực mong muốn.

Ngoài các chức năng tính toán, hiển thị các thông số về sự cố hóa chất độc, phần mềm còn cung cấp các chức năng khác như: đưa ra gợi ý về các phương án ứng phó sự cố (thông qua việc hiển thị trên các loại bản đồ số các thông tin như: khu vực sự cố, vùng ảnh hưởng); các hình vẽ công cụ (la bàn, vòng cực ly, lưới tọa độ, thước tỉ lệ); các dữ liệu hình học (hình chữ nhật, hình dẻ quạt, đa giác); các loại biểu tượng đơn vị quân sự. Với các chức năng này, phần mềm đáp ứng khả năng ứng dụng trong chỉ huy – điều hành ứng phó sự cố hóa chất độc của lực lượng hóa học trong quân sự.

### 2.3. Kiểm nghiệm phần mềm ChemCode

Để kiểm nghiệm thời gian tính toán của mô hình trong phần mềm ChemCode, nhóm nghiên cứu đã sử dụng một máy tính cá nhân (đặt tên là: TestPC) với cấu hình như sau: Intel(R) Core(TM)i5-5200U CPU @ 2.20GHz 2.20 GHz, RAM 8GB, hệ điều hành Windows 10 Pro. Để kiểm nghiệm độ tin cậy của phần mềm ChemCode, một sự cố giả định với các thông tin như bảng 2 được lấy làm đối tượng nghiên cứu. Giả định rằng, sự cố xảy ra đối với trường hợp hóa chất độc được giải phóng từ một thùng chứa khi đang vận chuyển trên đường. Hóa chất trong thùng chứa là Hidro xyanua (HCN) ở dạng lỏng, sau khi giải phóng khỏi thùng chứa lập tức bay vào không khí và phát tán theo chiều gió, hoặc bị bốc cháy để tạo thành khí độc.

**Bảng 2.** Thông tin đầu vào về sự cố giả định.

| Tham số đầu vào/ tính toán |                         | Giá trị và đơn vị đo của dữ liệu                |
|----------------------------|-------------------------|-------------------------------------------------|
| Vị trí, đặc điểm sự cố     | Tọa độ (kinh độ, vĩ độ) | Kinh độ: 105:32:24 Đông,<br>Vĩ Độ: 21:00:14 Bắc |
|                            | Đặc điểm địa hình       | khu vực thành thị                               |
|                            | Độ cao so với mặt đất   | 10 (m)                                          |
| Đặc điểm hóa chất          | Loại hóa chất           | Hydro xyanua (HCN)                              |

|                      |                      |                            |
|----------------------|----------------------|----------------------------|
|                      | Dạng tồn tại         | dạng lỏng trong thùng chứa |
|                      | Khối lượng hóa chất  | 150 (kg)                   |
|                      | Thời gian phát thải  | 60 phút                    |
|                      | Nhiệt độ             | 25 °C                      |
| Thông tin môi trường | Tốc độ gió           | 6,5 (m/s)                  |
|                      | Hướng gió            | từ hướng 225°              |
|                      | Độ ổn định khí quyển | lớp C – không ổn định nhẹ  |

Một số lưu ý với hóa chất độc Hidro xyanua: là chất kịch độc, thường được sử dụng như một loại vũ khí hóa học. Ngoài các đường hô hấp và tiêu hóa, HCN có thể đi vào cơ thể người ta bằng cách thấm qua da. Khi bị nhiễm độc nhẹ, người cảm thấy nhức đầu, nôn mửa, tim đập mạnh. Khi bị nhiễm độc nặng, người mất cảm giác, bị ngạt thở, có thể đi đến ngừng hô hấp và chết vì tim ngừng đập. Chất độc HCN [10] có khối lượng mol là 27,0253 g/mol, ở thể khan là chất lỏng linh động, không màu, rất dễ tan trong nước, rượu và dễ hóa rắn, dễ bay hơi (nhiệt độ nóng chảy là -15 °C, nhiệt độ sôi là 25,6 °C), khối lượng riêng 0,696 g/cm<sup>3</sup>. Theo WHO (2004), khi tiếp xúc với khí HCN có nồng độ trong khoảng 120-150 mg/m<sup>3</sup> có thể gây tử vong sau 0,5-1,0 giờ, với nồng độ 150 mg/m<sup>3</sup> có thể gây tử vong trong vòng 30 phút, với nồng độ 200 mg/m<sup>3</sup> có thể gây tử vong sau 10 phút, và với nồng độ 300 mg/m<sup>3</sup> có thể gây tử vong ngay lập tức [10].

Quá trình tính toán nồng độ hóa chất độc HCN phát tán trong không khí sẽ được thực hiện đồng thời bởi phần mềm ChemCode và bởi phần mềm ALOHA. Phần mềm ALOHA được phát triển bởi Văn phòng quản lý khẩn cấp, Cơ quan Bảo vệ môi trường Hoa Kỳ [11]. Phần mềm này được sử dụng rộng rãi trên thế giới để tính toán và lập kế hoạch ứng phó với các trường hợp khẩn cấp về hóa chất, nó cho phép nhập các thông tin chi tiết về việc phát thải hóa chất và ước tính các khu vực ảnh hưởng với các mức nguy hiểm khác nhau (vùng màu đỏ ứng với mức độ nguy hiểm nhất, các vùng màu cam và màu vàng thể hiện mức độ nguy hiểm giảm dần). Các kết quả tính toán của ALOHA và ChemCode sẽ được so sánh với nhau, làm căn cứ khẳng định độ tin cậy của phần mềm ChemCode.

### 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

#### 3.1. Nồng độ hóa chất độc HCN phát tán trong không khí

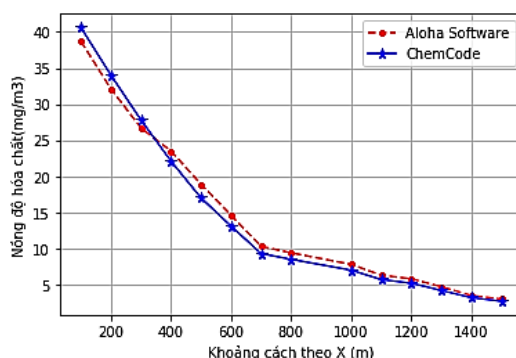
Nồng độ chất độc hóa học (HCN) tại các vị trí khác nhau tính từ điểm xảy ra sự cố (phát tán theo chiều gió) được tính bằng phần mềm ChemCode ( $C_{HCN}^{ChemCode}$ ) và ALOHA ( $C_{HCN}^{ALOHA}$ ) được trình bày trong hình 2. Sự khác nhau giữa  $C_{HCN}^{ChemCode}$  và  $C_{HCN}^{ALOHA}$  trong khoảng 10%, cho thấy: kết quả tính toán nồng độ hóa chất độc bởi phần mềm ChemCode là đủ tin cậy (trên cơ sở lấy kết quả tính toán từ phần mềm ALOHA làm tham chiếu). Do đó, có thể sử dụng ChemCode như một giải pháp cho tính toán nồng độ phát tán hóa chất độc trong các sự cố hóa chất công nghiệp, quân sự khi có sự cố xảy ra.

Các yếu tố ảnh hưởng đến kết quả tính toán là: các tham số trong sự cố giả định, sự phù hợp của mô hình với điều kiện thực tế, những biến đổi bất thường của điều kiện khí tượng.... Để đánh giá chi tiết độ không đảm bảo đo của các yếu tố này là một vấn đề phức tạp, đòi hỏi những nghiên cứu thêm nữa. Tuy nhiên, kết quả của phần mềm ChemCode trong nghiên cứu này cũng có cơ sở tin cậy (do có kết quả khá phù hợp với một phần mềm thương mại quốc tế đã được tin dùng, ALOHA).

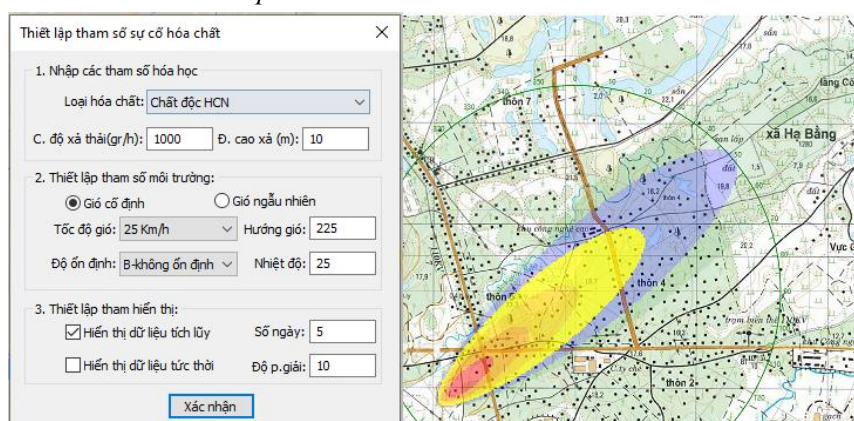
#### 3.2. Vùng phát tán chất độc HCN

Phần mềm ChemCode được chạy trên máy tính TestPC và đã tính toán được vùng phát tán chất độc HCN trong sự cố giả định, kết quả được chỉ ra như trên hình 3. Trong hình vẽ này, các

vùng phát tán màu đỏ, màu cam đậm, màu cam nhạt, màu vàng, và màu xanh đậm, màu xanh nhạt lần lượt tương ứng với giá trị  $C_{HCN}^{ChemCode} \geq 40 \text{ mg/m}^3$ , từ 30 đến 40  $\text{mg/m}^3$ , từ 20 đến 30  $\text{mg/m}^3$ , từ 10 đến 20  $\text{mg/m}^3$ , từ 5 đến 10  $\text{mg/m}^3$ , và từ 0 đến 5  $\text{mg/m}^3$ . Với các thông số sự cố và yêu cầu tính toán đối với sự cố giả định (xem bảng 2), thời gian chạy của máy tính TestPC (đối với phần mềm ChemCode) là trong vòng 02 phút và hiển thị kết quả tính toán trên nền bản đồ địa hình số. Thời gian này của máy tính TestPC (đối với phần mềm ALOHA) là  $\geq 01$  phút do không có chức năng hiển thị kết quả tính toán trên bản đồ số. Điều này cho thấy: đáp ứng thời gian của phần mềm ChemCode và mô hình tính toán đề xuất là hoàn toàn có thể đáp ứng được cho công tác lập kế hoạch chỉ huy và đưa ra các phương án ứng phó với các sự cố hóa học xảy ra với lực lượng quân sự.



**Hình 2.** Nồng độ hóa chất độc ( $\text{mg/m}^3$ ) phát tán trong không khí theo chiều gió (giả định trên trục x) tại các khoảng cách khác nhau từ vị trí xảy ra sự cố được tính toán bởi phần mềm ChemCode và ALOHA.



**Hình 3.** Giao diện thiết lập tham số sự cố hóa chất độc và hiển thị kết quả tính toán phát tán trên nền bản đồ địa hình số bởi phần mềm ChemCode.

#### 4. KẾT LUẬN

Mô hình tính toán phát tán hóa chất độc đã được đề xuất bởi nhóm nghiên cứu (dựa trên cơ sở của phân bố Gauss). Một phần mềm máy tính (được đặt tên là: ChemCode) đã được phát triển bằng ngôn ngữ lập trình C/C++ (dựa trên các công cụ Visual Studio 2013/2017, Spyder với Python và các thư viện NumPy, Matplotlib). Phần mềm ChemCode đã được kiểm nghiệm hiệu suất tính toán và độ tin cậy thông qua việc so sánh thời gian tính toán và kết quả tính toán nồng độ hóa chất độc với phần mềm thương mại quốc tế ALOHA (Mỹ). Kết quả tính toán bởi ChemCode cho thấy: với cùng một bộ dữ liệu đầu vào và cùng tính toán trên một máy tính giống

nhau, thời gian chạy của ChemCode và ALOHA là tương đương nhau, kết quả tính toán nồng độ hóa chất độc HCN có sự khác nhau trong khoảng 10%. Phần mềm ChemCode có thể được ứng dụng trong phân tích đánh giá tình huống sự cố hóa học trên nền bản đồ địa hình số và hỗ trợ lập kế hoạch và chỉ huy ứng phó với các sự cố hóa chất độc trong lực lượng quân sự.

### **TÀI LIỆU THAM KHẢO**

- [1]. Bùi Tá Long, “*Mô hình hóa môi trường*”, Thành phố Hồ Chí Minh: Nhà xuất bản Đại học Quốc gia Tp. Hồ Chí Minh, 441 trang, 2008.
- [2]. Bùi Tá Long, Nguyễn Minh Nam, “*Mô hình mô phỏng quá trình lan truyền và khuếch tán chất bẩn trong bài toán thiết lập hệ thống quan trắc sự nhiễm bẩn trong môi trường không khí*,” Khí tượng Thủy văn, vol. 10, pp. 38-47, 1997.
- [3]. Bùi Tá Long, Nguyễn Châu Mỹ Duyên, “*Mô hình hóa ô nhiễm không khí trong điều kiện địa hình phức tạp - trường hợp nguồn thải điểm*,” Khí tượng Thủy văn, vol. 04, pp. 35-45, 2019.
- [4]. Bernatik, W. Zimmerman, M. Pitt, M. Strizik, V. Nevrlý, Z. Zelinger, “*Modelling Accidental Releases of Dangerous Gases into the Lower Troposphere from Mobile Sources*,” Process safety and environmental protection, vol. 86, no. 3, pp. 198-207, 2008.
- [5]. Zhang Jianwen, Lei Da, Feng Wenxing, “*Analysis of chemical disasters caused by release of hydrogen sulfide-bearing natural gas*,” Procedia Engineering, vol. 26, pp. 1878-1890, 2011.
- [6]. Xiaoping Liu, Zhen Peng, Xianghua Liu and Rui Zhou, “*Dispersion Characteristics of Hazardous Gas and Exposure Risk Assessment in a Multiroom Building Environment*,” International Journal of Environmental Research and Public Health, vol. 17, no. 199, 2019.
- [7]. Pasquill, F., Smith, F.R., “*Atmospheric Diffusion*”, 440: John Wiley and Sons Inc, 1983.
- [8]. Briggs Gary A, “*Diffusion estimation for small emissions*”, Oak Ridge: TN:Atmospheric Turbulence and Diffusion Laboratory, 1973.
- [9]. Robert Jones, William Lehr, Debra Simecek-Beatty, R. Michael Reynolds, ALOHA - “*Areal Locations of Hazardous Atmospheres*”, Technical Documentation, Seattle, WA: NOAA Technical Memorandum NOS OR&R 43, 2013.
- [10]. James A. Romato, Brian J. Lukey, Harry Salem, “*Chemical Warfare Agents: chemistry, pharmacology, toxicology and therapeutics*”, United States of America: Taylor & Francis Group, ISBN 978-1-4200-4661-8, 2008.
- [11]. EPA United States Environmental Protection Agency.

### **ABSTRACT**

#### **A MODEL FOR CALCULATION OF CHEMICAL TOXICITY CONCENTRATION DISPERSED IN AIR**

*The paper proposes a model (based on the Gauss distribution) for the chemical toxicity dispersion in air. A computer software (named as ChemCode) has been also developed using language C/C++ (together with software tools as Visual Studio 2013/2017, Spyder, Python and other libraries NumPy, Matplotlib,...) for fast calculations of chemical toxicity concentration in chemical accidents as a function of latitudes and time. The ChemCode is validated through a comparison of calculation time and calculated results of chemical toxicity concentration with those obtained from an international commercial software, ALOHA (USA). The ChemCode has been developed for supporting the planning of command decision and response of the military force to a chemical accident.*

**Keywords:** Chemical toxicity; Chemical accident; Dispersion; ALOHA; ChemCode.

*Nhận bài ngày 02 tháng 8 năm 2021*

*Hoàn thiện ngày 16 tháng 9 năm 2021*

*Chấp nhận đăng ngày 10 tháng 10 năm 2021*

*Địa chỉ:* <sup>1</sup>Viện Tích hợp hệ thống - Học viện KTQS;

<sup>2</sup>Viện Hóa học môi trường quân sự;

<sup>3</sup>Viện Hóa học Vật liệu, Viện KH-CN quân sự.

\*Email: truongnx@mta.edu.vn.