

УДК 533.601: 614.8.084

К ОЦЕНКЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ОПАСНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В АВАРИЙНЫХ ВЫБРОСАХ

Ильюшонок А.В., к.ф.-м.н., доцент, Отчик В.С.
Командно-инженерный институт МЧС Республики Беларусь

e-mail: mail@kii.gov.by

Рассмотрена связь между гауссовой моделью мгновенного выброса опасных веществ и моделью стационарного гауссова шлейфа. Отмечено, что при определенном выборе аппроксимационных формул для дисперсии гауссов шлейф может быть представлен в виде суперпозиции (интеграла) мгновенных выбросов. Предложена приближенная формула для расчета концентрации опасных веществ в случае выброса конечной длительности.

The connection between Gaussian puff and Gaussian plume models for releases of hazardous materials is considered. It is pointed out that for a certain choice of expressions for dispersion the Gaussian plume can be presented in the form of a superposition of an infinite sequence of puffs. An approximate expression for the concentration of hazardous materials in the case of release of finite duration is presented.

(Поступила в редакцию 10 июля 2012 г.)

ВВЕДЕНИЕ

Развитие промышленности вызывает необходимость широкомасштабного транспортирования и хранения различных химических веществ. Многие из этих веществ, такие как хлор, аммиак, представляют значительную опасность для окружающей среды и человека. Таким образом, оценка потенциальной опасности, связанной с их хранением, важна для рационального размещения производственных объектов и разработки мер безопасности. Важную роль в оценке риска для населения и возможного влияния на окружающую среду играет прогнозирование последствий аварийных выбросов, в частности, определение концентрации аварийно химически опасных веществ (АХОВ) в атмосфере.

Наряду с развитием методов расчета концентрации, основанных на численном решении уравнения турбулентной диффузии примесей в атмосфере, по-прежнему широко применяются методики, использующие простейшие гауссовы модели. К ним относится методика «Токси-2», послужившая прототипом для системы прогнозирования последствий аварийных выбросов в Беларуси.

В данной работе рассматривается связь между гауссовыми моделями мгновенного выброса и стационарного шлейфа и применение этих моделей для описания концентрации в облаке, возникшем в результате выброса конечной длительности. Предлагается модификация формулы, используемой в методике «Токси-2», с целью учета дисперсии в направлении движения облака.

РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ДИФФУЗИИ (Фика)

Первые попытки теоретического описания распространения примесей в атмосфере путем турбулентной диффузии базировались на формальной аналогии между турбулентной и молекулярной диффузией [1] (см. также [2] и цитированную там литературу). Поэтому в данном разделе мы рассмотрим некоторые решения уравнения диффузии, послужившие отправной точкой для вывода практических формул для вычисления концентрации

примесей. В случае молекулярной диффузии концентрация $C(x, y, z, t)$ удовлетворяет уравнению Фика

$$\frac{\partial C}{\partial t} = K \Delta C, \quad (1)$$

где K – коэффициент диффузии. Задавая начальные условия, можно получить решения уравнения (1), соответствующие различным типам источников примеси.

Если количество вещества Q в точке с координатами (x, y, z) возникает в момент времени $t = t'$ и подвергается рассеянию, то зависимость концентрации этого вещества от времени задается решением уравнения (1)

$$C_i(x, y, z, t) = \frac{Q}{8[\pi K(t-t')]^{3/2}} \exp\left[-\frac{(x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2}{4K(t-t')}\right]. \quad (2)$$

Если в точке с координатами x, y, z имеется точечный источник с постоянным расходом q , возникший при $t = 0$, то, интегрируя выражение (2), получим концентрацию вещества в момент времени t :

$$C_c(x, y, z, t) = \frac{q}{8(\pi K)^{3/2}} \int_0^t \exp\left[-\frac{r_1^2}{4K(t-t')}\right] \frac{dt'}{(t-t')^{3/2}} = \frac{q}{4\pi K r} \operatorname{erfc} \frac{r_1}{\sqrt{4Kt}},$$

где использованы обозначения $r_1^2 = (x-x')^2 + (y-y')^2 + (z-z')^2$ и

$$\operatorname{erfc} z = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty e^{-t^2} dt = 1 - \operatorname{erf} z = 1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z e^{-t^2} dt.$$

В среде, движущейся со скоростью U в направлении оси x , уравнение диффузии принимает вид

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = K \Delta C. \quad (3)$$

В этом случае возникший при $t = t'$ мгновенный точечный источник Q , находящийся в начале координат, создает концентрацию

$$C_i(x, y, z, t) = \frac{Q}{[\pi K(t-t')]^{3/2}} \exp\left[-\frac{[x-U(t-t')]^2 + y^2 + z^2}{4Kt}\right], \quad (4)$$

а выражение для концентрации, создаваемой непрерывным точечным источником с постоянным расходом q , возникшим при $t = 0$, может быть получено интегрированием выражения (4)

$$C_c(x, y, z, t) = \frac{q}{8(\pi K)^{3/2}} \int_0^t \exp\left[-\frac{[x-U(t-t')]^2 + y^2 + z^2}{4K(t-t')}\right] \frac{dt'}{(t-t')^{3/2}}. \quad (5)$$

Производя в выражении (5) замену

$$\tau = \frac{r}{2\sqrt{K(t-t')}},$$

перепишем его в виде

$$\begin{aligned} C_c(x, y, z, t) &= \frac{q}{2K\pi^{3/2}r} \exp\left(\frac{Ux}{2K}\right) \int_{\frac{r}{2\sqrt{Kt}}}^{\infty} \exp\left(-\tau^2 - \frac{U^2 r^2}{4K^2 \tau^2}\right) d\tau = \\ &= \frac{q}{8K\pi r} \exp\left[-\frac{U(r-x)}{2K}\right] \left[1 + \exp\left(\frac{Ur}{K}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{r-Ut}{2\sqrt{Kt}}\right) - \exp\left(\frac{Ur}{K}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{r+Ut}{2\sqrt{Kt}}\right)\right]. \end{aligned} \quad (6)$$

Когда $t \rightarrow \infty$, т. е. источник действует бесконечно долго, из (6) следует выражение для концентрации, создаваемой стационарным источником

$$C(x, y, z) = \frac{q}{4\pi Kr} \exp\left[-\frac{U(r-x)}{2K}\right]. \quad (7)$$

Выражение (7) удовлетворяет уравнению

$$U \frac{\partial C}{\partial x} = K\Delta, \quad (8)$$

которое получается из уравнения (3), когда концентрация C не зависит от времени. Для точек облака, не находящихся в непосредственной близости от источника, можно записать для концентрации (7) приближенное выражение

$$C(x, y, z) = \frac{q}{4\pi Kx} \exp\left[-\frac{U(y^2 + z^2)}{4Kx}\right]. \quad (9)$$

Это выражение удовлетворяет уравнению

$$U \frac{\partial C}{\partial x} = K \left(\frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right), \quad (10)$$

которое получается из уравнения (8), если пренебречь диффузией вдоль оси x по сравнению с переносом вещества ветром.

Остановимся еще на ситуации, когда точечный источник, возникший при $t = 0$, исчезает в момент времени t_1 . В этом случае концентрация при $t > t_1$ находится по формуле

$$\begin{aligned}
 C_c(x, y, z, t, t_1) &= \frac{q}{2K\pi^{3/2}r} \exp \frac{Ux}{2K} \int_{\frac{r}{2\sqrt{Kt}}}^{\frac{r}{2\sqrt{K(t-t_1)}}} \exp \left(-\tau^2 - \frac{U^2 r^2}{4K^2 \tau^2} \right) d\tau = \\
 &= \frac{q}{8K\pi r} \exp \left[-\frac{U(r-x)}{2K} \right] \left[\operatorname{erf} \left(\frac{r-U(t-t_1)}{2\sqrt{Kt}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{r-Ut}{2\sqrt{Kt}} \right) + \right. \\
 &\quad \left. + \exp \frac{Ur}{K} \operatorname{erf} \left(\frac{r+U(t-t_1)}{2\sqrt{Kt}} \right) - \exp \frac{Ur}{K} \operatorname{erf} \left(\frac{r+Ut}{2\sqrt{Kt}} \right) \right]. \quad (11)
 \end{aligned}$$

Приведенные решения описывают диффузию вещества во всем пространстве. Они легко могут быть обобщены на случай распространения в полупространстве. Так, для мгновенного источника, возникшего при $t = 0$ и расположенного на высоте h над плоскостью $z = 0$, при условии полного отражения от этой плоскости, концентрация задается решением уравнения (3) вида

$$C_i(x, y, z, t) = \frac{Q \exp \left[-\frac{(x-Ut)^2 + y^2}{4Kt} \right]}{8(\pi Kt)^{3/2}} \left\{ \exp \left[-\frac{(z-h)^2}{4Kt} \right] + \exp \left[-\frac{(z+h)^2}{4Kt} \right] \right\}. \quad (12)$$

Соответствующее решение уравнения (8) имеет вид

$$C(x, y, z) = \frac{q \exp \left[-\frac{Uy^2}{4Kx} \right]}{4\pi Kx} \left\{ \exp \left[-\frac{(z-h)^2}{4Kx} \right] + \exp \left[-\frac{(z+h)^2}{4Kx} \right] \right\}. \quad (13)$$

Приведенные решения легко обобщаются также на случай анизотропной диффузии, когда коэффициенты диффузии постоянны, но различны для разных направлений [1].

Более подробное обсуждение решений уравнения диффузии (и совпадающего с ним по форме уравнения теплопроводности) можно найти в работах [1–5].

Зависимость концентрации от координат, описываемая приведенными формулами, соответствует нормальному распределению (Гаусса). При этом дисперсия пропорциональна времени t , а для стационарного источника – расстоянию до источника x .

ПРАКТИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ РАСЧЕТА КОНЦЕНТРАЦИИ

Приведенная в (9) зависимость концентрации примеси от расстояния до стационарного источника не подтверждается экспериментом. Это означает, что турбулентная диффузия, отвечающая за рассеяние примесей в атмосфере, не описывается уравнением с постоянным коэффициентом диффузии K . Необходимое обобщение может быть сделано введением зависимости K от координат в уравнения (1), (3), (8), (10). Тогда эти уравнения уже не будут иметь простых решений, рассмотренных выше. Другой путь – сохранить общий гауссов вид выражений для концентрации, изменив вид зависимости дисперсии от времени и расстояния до источника. Так, в работе [6] была предложена более общая степенная зависимость дисперсии от времени и получены соответствующие обобщения формул (12) и (13). В работе [7] формулы для концентрации были представлены в форме, получившей в дальнейшем широкое распространение

$$C_i(x, y, z, t) = \frac{Q \exp\left[-\frac{(x-Ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]}{(2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}, \quad (14)$$

$$C(x, y, z) = \frac{q \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]}{2\pi U \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}. \quad (15)$$

Значения входящих в эти формулы дисперсий σ_x , σ_y , σ_z определяются из экспериментальных данных. Эти значения обычно представлялись в виде графиков, удобных для практического использования [8]. Впоследствии были предложены также различные аналитические выражения, аппроксимирующие зависимость дисперсии от расстояния до источника выброса (см. [9, 10]).

Наиболее широкое применение нашла формула для гауссова шлейфа (15), в течение многих лет использовавшаяся в оценке последствий промышленных выбросов в США. Формулы (14), (15) были также рекомендованы Всемирным банком для использования в оценках рисков, связанных с промышленными проектами [11].

Формулы (14), (15) пригодны для использования в ситуации, когда размером источника можно пренебречь. В методике оценки последствий аварий «Токси-2» [12], входящей в состав нормативных документов Гостехнадзора России, используются модифицированные формулы

$$C_i(x, y, z, t) = \frac{Q \exp\left[-\frac{(x-Ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]}{\frac{8}{3} \pi R^3 + (2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}, \quad (16)$$

для случая мгновенного выброса и

$$C(x, y, z) = \frac{q \exp\left[-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]}{2 \frac{q}{\rho} + 2\pi U \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\} \quad (17)$$

для стационарного выброса. В формуле (16) R – радиус шарообразного облака АХОВ в момент выброса; в формуле (17) ρ – плотность АХОВ в месте выброса. Добавочные слагаемые в знаменателях выражений для концентрации обеспечивают правильное ее значение в момент выброса для формулы (16) и в месте выброса для формулы (17).

В методике «Токси-2» зависимость дисперсий σ_x , σ_y , σ_z от x задана посредством аппроксимирующих формул. Например, выражение для дисперсии вдоль направления распространения облака имеет вид

$$\sigma_x = \frac{C_3 x}{\sqrt{1 + 0,0001x}}, \quad (18)$$

где постоянная C_3 определяется из таблиц с учетом состояния атмосферы. При расчетах для мгновенных выбросов значения дисперсии берутся в точке, где находится центр облака, т. е. при $x = Ut$. Таким образом, они зависят от времени и заменяют величину Kt . В частности, соответствующее выражение для σ_x запишется в виде

$$\sigma_x(t) = \frac{C_3 Ut}{\sqrt{1 + 0,0001 Ut}}. \quad (19)$$

Выражения (16) и (17) не являются решениями каких-либо простых уравнений, обобщающих уравнения (3), (8). Однако, если мгновенный и стационарный источники являются идеализацией объектов одинаковой природы, различающихся только временем их действия, естественно ожидать, что выражение для источника продолжительного действия должно получаться интегрированием по времени выражения для мгновенного источника, подобно тому, как это имеет место для решений уравнения диффузии.

Таким образом, если известна концентрация $C_i(x, y, z, t, Q)$, создаваемая мгновенным выбросом количества вещества Q , то в момент времени t концентрация, создаваемая источником с постоянным расходом q , возникшим при $t = 0$, должна определяться интегралом

$$C_c(x, y, z, t) = \int_0^t C_i(x, y, z, t - t', q) dt'. \quad (20)$$

Концентрация, создаваемая стационарным источником с расходом q , должна получаться из (20) при $t \rightarrow \infty$

$$C(x, y, z) = \int_0^{\infty} C_i(x, y, z, t, q) dt. \quad (21)$$

Ввиду сложности выражения для $C_i(x, y, z, t, q)$, в которое входят σ_x , σ_y , σ_z , определяемые подгонкой под данные экспериментов, вычислить интегралы (20) и (21) аналитически невозможно. Однако, благодаря резкому максимуму гауссовской кривой, основной вклад в интеграл (20) дает область вблизи этого максимума (см., например, [13]). Запишем выражение (14) в виде

$$C_i(x, y, z, t) = \exp\left[-\frac{(x - Ut)^2}{2\sigma_x^2}\right] f(t) = \exp S(t) f(t), \quad (22)$$

выделив в нем сомножитель, определяющий положение максимума $t_0 = x/U$ (зависимость от пространственных координат мы опускаем). Тогда приближенное выражение для интеграла (21) можно записать в виде

$$\int_0^{\infty} \exp S(t) f(t) dt \approx \sqrt{\frac{2\pi}{S''(t_0)}} f(t_0). \quad (23)$$

Нетрудно убедиться, что интегрирование с помощью формулы (23) выражения (14) для концентрации, создаваемой мгновенным точечным источником, дает концентрацию в шлейфе (15).

В случае формул методики «Токси» задан начальный радиус сферического мгновенного источника, а форма и размеры источника стационарного не задаются. Поэтому нельзя ожидать, что интегрирование выражения (16) даст в точности (17). Однако можно получить выражение (17), если считать, что стационарный выброс создается непрерывной последовательностью мгновенных выбросов, создающих концентрацию

$$C_i(x, y, z, t, q) = \frac{q \exp\left[-\frac{(x-Ut)^2}{2\sigma_x^2} - \frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right]}{\frac{2q}{U} \sqrt{2\pi\sigma_x} + (2\pi)^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \left\{ \exp\left[-\frac{(z-h)^2}{2\sigma_z^2}\right] + \exp\left[-\frac{(z+h)^2}{2\sigma_z^2}\right] \right\}. \quad (24)$$

Поэтому интеграл (20) с подынтегральной функцией (24) можно использовать для определения концентрации в момент времени t , которая создается источником, возникшим при $t = 0$. Если в момент времени t_1 этот источник исчез, это можно рассматривать как включение в этот момент дополнительного источника $-q$. Поэтому концентрация в момент времени t , создаваемая источником, действовавшим от $t = 0$ до $t = t_1$, может быть определена по формуле

$$C_c(x, y, z, t, t_1) = \int_0^{t_1} C_i(x, y, z, t-t', q) dt'. \quad (25)$$

Выражение (25) может быть использована в качестве альтернативы упрощенным формулам, используемыми в методике «Токси-2» для определения вклада в концентрацию АХОВ источника, действующего в течение конечного времени. В этой методике концентрация в облаке определяется по формулам для стационарного источника. После окончания действия источника, начиная с некоторого расстояния, она находится по формулам для мгновенного источника, выбросившего количество вещества, равное произведению расхода источника на время его действия. В отличие от случая молекулярной диффузии (ср. (11)), интеграл (25) с подынтегральной функцией (24) не может быть выражен через известные функции. Однако гауссово поведение подынтегральной функции позволяет записать приближенное выражение для концентрации в виде

$$C_c(x, y, z, t, t_1) \approx C(x, y, z) \left[\operatorname{erf}\left(\frac{x-U(t-t_1)}{\sqrt{2}\sigma_x(t-t_1)}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{x-Ut}{\sqrt{2}\sigma_x(t)}\right) \right], \quad (26)$$

где $\sigma_x(t)$ определено в (19).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В качестве примера рассмотрим модельную задачу о мгновенном разрыве емкости, в которой находится 1 т сжиженного хлора под давлением 1620,8 кПа при температуре окружающей среды (-20 °С). Подстилающая поверхность – бетон, стратификация атмосферы – конвекция.

Расчет показывает, что количество хлора в первичном облаке, образующемся при кипении пролива, незначительно. Поскольку вторичное облако образуется при испарении

пролива, то растекание облака под действием сил тяжести отсутствует, и для расчета концентрации хлора можно использовать гауссову модель.

На рисунке показан вклад в концентрацию хлора от испарения пролива, рассчитанный по формулам методики «Токси-2», в которых предполагается, что ненулевая концентрация возникает, когда точки наблюдения достигает передний край облака (кривая 1), а также с помощью численного интегрирования по формуле (25) (кривая 2) и по приближенной формуле (26) (кривая 3). Случай *а*) соответствует скорости ветра $U = 3$ м/с, в случае *б*) $U = 4$ м/с.

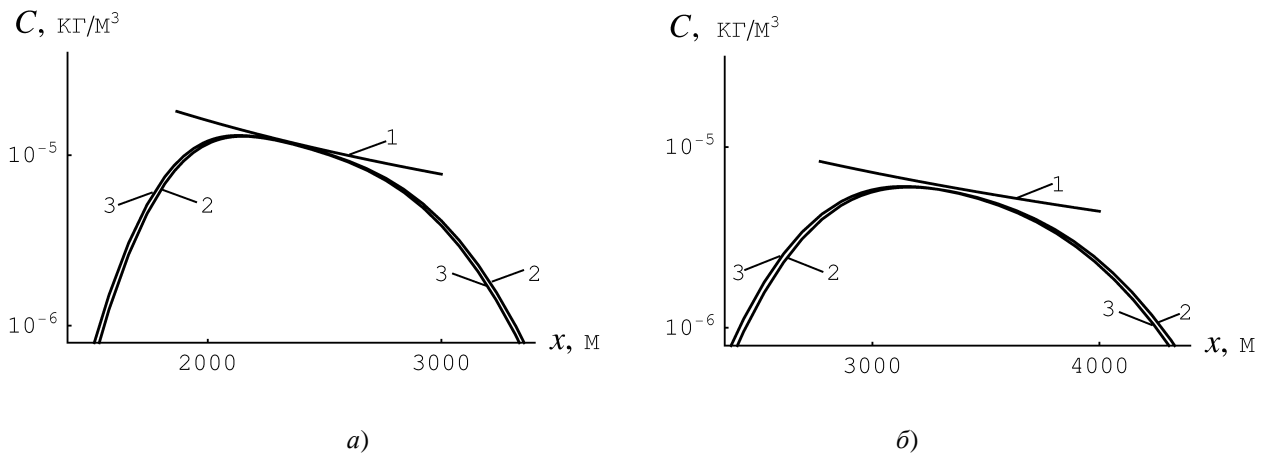


Рисунок 1 – Зависимость концентрации хлора от расстояния до места пролива при $y = z = 0$ в момент времени $t = 1000$ с

Как видно из рисунка, методика «Токси-2», использующая формулу (17) для стационарного выброса, позволяет определить максимальные концентрации АХОВ в атмосфере, но не дает реальной картины пространственного поля концентрации АХОВ в случае продолжительного выброса. Положение переднего и заднего края облака в некоторый момент времени определяются в этой методике временем начала и конца испарения пролива и скоростью ветра, сносящего облако. Форма же облака в пределах, ограниченных его краями (кривая 1), совпадает с формой облака от стационарного выброса, т. е. фактически определяется интегрированием выражения (24) для концентрации от мгновенного выброса в бесконечных пределах. Интегрирование того же выражения в пределах от начала до конца испарения пролива дает распределение концентрации (25), изображаемое кривой 2. Эта кривая учитывает влияние диффузии вдоль направления ветра, которое отражено в формуле (24) для мгновенного выброса, но отсутствует в формуле (17) для стационарного выброса. Формула (26) получена заменой входящего в (25) интеграла на его приближенное выражение и дает распределение концентрации, изображаемое кривой 3, которое довольно близко к распределению (25). В то же время, определение концентрации АХОВ по формуле (26) не требует проведения значительных расчетов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Roberts, O.F.T. The theoretical scattering of smoke in a turbulent atmosphere / O.F.T. Roberts // Proc. R. Soc. Lond. A – 1923. – V. 104. – P. 640–654.
2. Сеттон, О.Г. Микрометеорология / О.Г. Сеттон. – Л. : Гидрометиздат, 1958. – 355 с.
3. Карслоу Г. Теплопроводность твердых тел / Г. Карслоу и Д. Егер. – М. : Наука, 1964. – 487 с.
4. Crank, J. The mathematics of diffusion / J. Crank. – Oxford: Clarendon Press. – 1975. – 414 p.

5. Stockie, J.M. The mathematics of atmospheric dispersion modeling / J.M. Stockie // SIAM Review. – 2011. – V. 53. – P. 349–372.
6. Sutton, O.G. A theory of eddy diffusion in the atmosphere / O.G. Sutton // Proc. R. Soc. Lond. A – 1932. – V. 135. – P. 143–165.
7. Pasquill, F. The estimation of the dispersion of windborne material / F. Pasquill // Meteorol. Mag. – 1961. – V. 90. – P. 33–49.
8. Turner, D.B. Workbook of atmospheric dispersion estimates / D.B. Turner. – PHS Publ. – 1967. – 84 p.
9. Gifford, F.A. Turbulent diffusion typing schemes – a review / F.A. Gifford // Nuclear Safety – 1976. – V. 17. – P. 68–86.
10. Гусев, Н. Г. Радиоактивные выбросы в биосферу: Справочник / Н.Г. Гусев, В.А. Беляев. – М. : Энергоатомиздат, 1986. – 223 с.
11. Techniques for Assessing Industrial Hazards: a Manual. (World Bank Tech. Paper No. 55). London: Technica, Ltd., 1988. – 170 p.
12. Методика оценки последствий химических аварий (Методика «Токси-2.2», утв. НТЦ «Промышленная безопасность», в сборнике «Методики оценки последствий аварий на опасных производственных объектах»: Сборник документов. Серия 27. Выпуск 2. М. : ГУП НТЦ «Промышленная безопасность», 2002. – 208 с.
13. Федорюк, М.В. Метод перевала / М.В. Федорюк. – М. : Наука, 1977. – 368 с.