

УДК 504.056

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИФФУЗИИ ПАРОВ ОПАСНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В ВОЗДУХЕ

А. Е. БАСМАНОВ, ведущий научный сотрудник
С. С. ГОВАЛЕНКОВ, адъюнкт кафедры

Национальный университет гражданской защиты Украины, г. Харьков

Рассматривается решение уравнения диффузии паров веществ в воздухе для оценки чрезвычайной ситуации с наличием опасных химических веществ. Предложен стохастический подход к построению математической модели распространения паров веществ в воздухе в результате чрезвычайной ситуации, связанной с мгновенной утечкой газа. Источником случайности являются случайные изменения направления и скорости ветра.

Введение

При авариях на химически опасных объектах (ХОО) возникают ситуации, которые могут привести к выбросу (разливу) из резервуара или других емкостей хранения опасных химических веществ (ОХВ) в окружающую среду [1]. Особенностью таких процессов является образование газоздушного облака с последующим его распространением на территории объекта в воздухе, что при уровне концентрации выше критического может привести к поражению обслуживающего персонала и (или) личного состава аварийно-спасательных подразделений МЧС.

Вероятность возникновения таких чрезвычайных ситуаций (ЧС) в последние годы постоянно растет [2] и зависит от множества факторов: физико-химических особенностей химических веществ, условий их хранения, переработки, транспортировки и др. [3]. Сложность задачи моделирования параметров аварий и их последствий заключается в том, что проливы или выбросы ОХВ в воздух подвержены воздействию случайных изменений различных факторов, в том числе изменений направления и скорости ветра.

В данной статье предложен стохастический подход к построению математической модели распространения паров ОХВ в воздухе в результате ЧС, связанной с мгновенной утечкой газа. Источником случайности являются случайные изменения направления и скорости ветра.

Основная часть

Анализ последних исследований и публикаций. В настоящее время для моделирования, количественной оценки основных параметров ЧС и прогнозирования последствий аварий наибольшее распространение получили интегральные модели, гауссовы модели рассеивания, модели численного моделирования [4]. На основе использования таких моделей разработаны методики определения основных параметров последствий аварий. Так, гауссовы модели реализованы в методиках России РД 03-409-01, ПБ 09-540-03, интегральные методы – в ГОСТ 12.3.047-98, модели численного моделирования в методиках ОНД-86 [5]. Методы, основанные на решении уравнений в частных производных, реализованы в программных продуктах CFD и методике «ТОКСИ» [6], методике прогнозирования масштабов заражения на ХОО и

транспорте – РД 52.04.253–90, методика «СРО РЭА» детерминированной оценки степени опасности ХОО используется для прогнозирования последствий аварий.

Учитывая недостатки используемых в методиках методов, в частности, учета среднего значения направления и скорости ветра при прогнозировании развития ЧС и ее последствий, авторами был предложен алгоритм построения стохастической модели прогнозирования параметров полей концентраций в воздухе при выбросе ОХВ в атмосферу [7].

Постановка задачи и ее решение. Целью статьи является решение уравнения диффузии паров вещества в воздухе для построения стохастической модели распределения концентраций ОХВ в воздухе с учетом случайного направления и значения скорости ветра. Уравнение диффузии паров в воздухе с начальными и краевыми условиями, принятыми в [7], с учетом случайного направления и значения скорости ветра принимает вид:

$$\frac{\partial \mu}{\partial t} = a \frac{\partial^2 \mu}{\partial x^2} + a \frac{\partial^2 \mu}{\partial y^2} + a_z \frac{\partial^2 \mu}{\partial z^2} - \xi(t) \frac{\partial \mu}{\partial x} - \eta(t) \frac{\partial \mu}{\partial y}; \quad (1)$$

$$\mu(x, y, z, 0) = m \delta(x, y, z - z_0); \quad (2)$$

$$\frac{\partial \mu}{\partial z} = 0, \quad \mu(0) = \infty, \quad (3)$$

где предполагается, что выброс быстроиспаряющегося или газообразного ОХВ произошел в точке $(0, 0, z_0)$; $\mu(x, y, z, t)$ – концентрация его паров; (ξ, η) – ветер; $\xi(x)$, $\eta(x)$ – стационарные случайные процессы, имеющие нормальное распределение.

В силу случайности параметров ξ , η , концентрация паров $\mu(x, y, z, t)$, $t > 0$ также будет случайной. Зафиксировав реализацию горизонтальной составляющей вектора скорости ветра $v_x(t)$ случайного процесса $\xi(t)$ и реализацию вертикальной составляющей вектора скорости ветра $v_y(t)$ случайного процесса $\eta(t)$, можем получить соответствующую им реализацию $q(x, y, z, t)$, случайного процесса $\mu(x, y, z, t)$. Для этого следует решить краевую задачу:

$$\frac{\partial q}{\partial t} = a \frac{\partial^2 q}{\partial x^2} + a \frac{\partial^2 q}{\partial y^2} + a_z \frac{\partial^2 q}{\partial z^2} - v_x(t) \frac{\partial q}{\partial x} - v_y(t) \frac{\partial q}{\partial y}; \quad (4)$$

$$q(x, y, z, 0) = m \delta(x, y, z - z_0); \quad (5)$$

$$\frac{\partial q}{\partial z} = 0, \quad q(0) = \infty, \quad (6)$$

где $q(x, y, z, t)$, $v_x(t)$, $v_y(t)$ – реализации соответствующих случайных процессов.

Для нахождения решения уравнения (4) с начальными и краевыми условиями (5)–(6) перейдем к новым переменным [8]:

$$\begin{cases} x' = x - \int_0^t v_x(t) dt, \\ y' = y - \int_0^t v_y(t) dt \end{cases}$$

и будем рассматривать функцию

$$u(x', y', z, t) = q \left(x' + \int_0^t v_x(t) dt, y' + \int_0^t v_y(t) dt, z, t \right).$$

В этом случае:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = \frac{\partial q}{\partial x} v_x(t) + \frac{\partial q}{\partial y} v_y(t) + \frac{\partial q}{\partial t}; \quad (7)$$

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x'^2} = \frac{\partial^2 q}{\partial x^2}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial y'^2} = \frac{\partial^2 q}{\partial y^2}, \quad \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} = \frac{\partial^2 q}{\partial z^2}. \quad (8)$$

Подставляя (7) и (8) в (4), получим уравнение относительно функции $u(x', y', z, t)$:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = a \frac{\partial^2 u}{\partial x'^2} + a \frac{\partial^2 u}{\partial y'^2} + a_z \frac{\partial^2 u}{\partial z^2}, \quad (9)$$

где $q(x, y, z, t) = u \left(x - \int_0^t v_x(t) dt, y - \int_0^t v_y(t) dt, z, t \right)$. При этом начальное и краевое условия остаются аналогичными (5), (6):

$$u(x', y', z, 0) = m \delta(x', y', z - z_0); \quad (10)$$

$$\frac{\partial u}{\partial z} = 0. \quad (11)$$

Решение задачи (9)–(11) имеет вид [3], [9]:

$$u(x', y', z, t) = \frac{m}{8(\pi t)^{3/2} a \sqrt{a_z}} \exp \left[-\frac{x'^2 + y'^2}{4at} \right] \cdot \left\{ \exp \left[-\frac{(z - z_0)^2}{4a_z t} \right] + \exp \left[-\frac{(z + z_0)^2}{4a_z t} \right] \right\}.$$

Возвращаясь к переменным x , y и функции $q(x, y, z, t)$, получим концентрацию паров в воздухе:

$$q(x, y, z, t) = \frac{m}{8(\pi t)^{3/2} a \sqrt{a_z}} \exp \left[-\frac{\left(x - \int_0^t v_x(t) dt \right)^2 + \left(y - \int_0^t v_y(t) dt \right)^2}{4at} \right] \times \\ \times \left\{ \exp \left[-\frac{(z - z_0)^2}{4a_z t} \right] + \exp \left[-\frac{(z + z_0)^2}{4a_z t} \right] \right\}. \quad (12)$$

Аналогичное соотношение имеет место для случайных процессов $\mu(x, y, z, t)$, $\xi(t)$, $\eta(t)$, описывающих концентрацию паров в точке (x, y, z) и скорость ветра соответственно:

$$\mu(x, y, z, t) = \frac{m}{8(\pi t)^{3/2} a \sqrt{a_z}} \exp \left[-\frac{\left(x - \int_0^t \xi(t) dt \right)^2 + \left(y - \int_0^t \eta(t) dt \right)^2}{4at} \right] \times \left\{ \exp \left[-\frac{(z - z_0)^2}{4a_z t} \right] + \exp \left[-\frac{(z + z_0)^2}{4a_z t} \right] \right\}. \quad (13)$$

Введем следующие обозначения:

$$\theta(t) = \int_0^t \xi(t) dt; \quad (14)$$

$$\rho(t) = \int_0^t \eta(t) dt. \quad (15)$$

Поскольку $\xi(t)$ и $\eta(t)$ распределены нормально, то $\theta(t)$ и $\rho(t)$ также распределены нормально [10] с математическими ожиданиями:

$$M\theta(t) = \int_0^t M\xi(t) dt = \int_0^t \bar{v}_x dt = \bar{v}_x t; \quad (16)$$

$$M\rho(t) = \int_0^t M\eta(t) dt = \int_0^t \bar{v}_y dt = \bar{v}_y t \quad (17)$$

и корреляционными функциями [10]:

$$K_\theta(t_1, t_2) = \int_0^{t_2} (t_2 - \tau) K_\xi(\tau) d\tau + \int_0^{t_1} (t_1 - \tau) K_\xi(-\tau) d\tau - \int_0^{t_2 - t_1} (t_2 - t_1 - \tau) K_\xi(\tau) d\tau; \quad (18)$$

$$K_\rho(t_1, t_2) = \int_0^{t_2} (t_2 - \tau) K_\eta(\tau) d\tau + \int_0^{t_1} (t_1 - \tau) K_\eta(-\tau) d\tau - \int_0^{t_2 - t_1} (t_2 - t_1 - \tau) K_\eta(\tau) d\tau. \quad (19)$$

Подставляя в (18) выражение (8) для корреляционной функции и интегрируя по частям, получим:

$$\int_0^{t_2} (t_2 - \tau) K_\xi(\tau) d\tau = \int_0^{t_2} (t_2 - \tau) \sigma_\xi^2 e^{-\alpha_\xi \tau} d\tau = \frac{\sigma_\xi^2}{\alpha_\xi^2} \left[e^{-\alpha_\xi t_2} + t_2 \alpha_\xi - 1 \right]; \quad (20)$$

$$\int_0^{t_1} (t_1 - \tau) K_\xi(-\tau) d\tau = \int_0^{t_1} (t_1 - \tau) \sigma_\xi^2 e^{-\alpha_\xi \tau} d\tau = \frac{\sigma_\xi^2}{\alpha_\xi^2} \left[e^{-\alpha_\xi t_1} + t_1 \alpha_\xi - 1 \right]; \quad (21)$$

$$\int_0^{t_2 - t_1} (t_2 - t_1 - \tau) K_\xi(\tau) d\tau = \int_0^{t_2 - t_1} (t_2 - t_1 - \tau) \sigma_\xi^2 e^{-\alpha_\xi \tau} d\tau = \frac{\sigma_\xi^2}{\alpha_\xi^2} \left[e^{-\alpha_\xi (t_2 - t_1)} + (t_2 - t_1) \alpha_\xi - 1 \right]. \quad (22)$$

Объединяя (18), (20)–(22), окончательно получим выражение для корреляционной функции:

$$K_{\theta}(t_1, t_2) = \frac{\sigma_{\xi}^2}{\alpha_{\xi}^2} \left[e^{-\alpha_{\xi} t_1} + e^{-\alpha_{\xi} t_2} - e^{-\alpha_{\xi}(t_2 - t_1)} + 2t_1 \alpha_{\xi} - 1 \right] \quad (23)$$

и дисперсии

$$D_{\theta}(t) = K_{\theta}(t, t) = \frac{\sigma_{\xi}^2}{\alpha_{\xi}^2} \left[2e^{-\alpha_{\xi} t} + 2t \alpha_{\xi} - 2 \right]. \quad (24)$$

Повторяя те же рассуждения для случайного процесса $\rho(t)$, получим:

$$K_{\rho}(t_1, t_2) = \frac{\sigma_{\eta}^2}{\alpha_{\eta}^2} \left[e^{-\alpha_{\eta} t_1} + e^{-\alpha_{\eta} t_2} - e^{-\alpha_{\eta}(t_2 - t_1)} + 2t_1 \alpha_{\eta} - 1 \right]; \quad (25)$$

$$D_{\rho}(t) = K_{\rho}(t, t) = \frac{\sigma_{\eta}^2}{\alpha_{\eta}^2} \left[2e^{-\alpha_{\eta} t} + 2t \alpha_{\eta} - 2 \right]. \quad (26)$$

Полученные математические ожидания и дисперсии случайных процессов $\theta(t)$, $\rho(t)$ зависят от времени: математическое ожидание растет линейно по времени, а дисперсия – асимптотически линейно (рисунок 1). Таким образом, эти случайные процессы уже не являются стационарными.

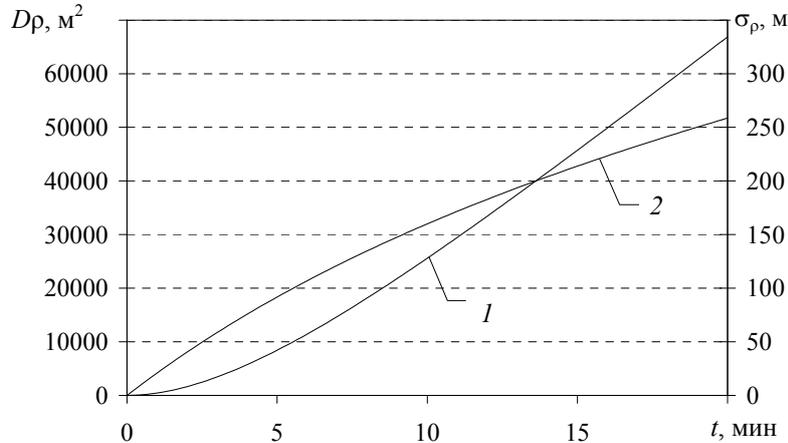


Рисунок 1 – Рост дисперсии $D_{\rho}(t)$ (1) и среднеквадратического отклонения $\sigma_{\rho}(t)$ (2, по правой оси) со временем при $\sigma_{\eta}^2 = 0,13$ и $\alpha_{\eta} = 0,0036$

Найдем совместную корреляционную функцию случайных процессов $\theta(t)$ и $\rho(t)$:

$$\begin{aligned} K_{\theta\rho}(t_1, t_2) &= M[\theta(t_1) - \bar{v}_x t_1][\rho(t_2) - \bar{v}_y t_2] = \\ &= M \left[\int_0^{t_1} (\xi(\tau_1) - \bar{v}_x) d\tau_1 \int_0^{t_2} (\eta(\tau_2) - \bar{v}_y) d\tau_2 \right] = M \left[\int_0^{t_1} \int_0^{t_2} (\xi(\tau_1) - \bar{v}_x)(\eta(\tau_2) - \bar{v}_y) d\tau_1 d\tau_2 \right]. \end{aligned}$$

Меняя местами операции математического ожидания и интегрирования и применяя затем определение совместной корреляционной функции, получим:

$$K_{\theta\rho}(t_1, t_2) = \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} M[(\xi(\tau_1) - \bar{v}_x)(\eta(\tau_2) - \bar{v}_y)] d\tau_1 d\tau_2 = \int_0^{t_1} \int_0^{t_2} K_{\xi\eta}(\tau_1, \tau_2) d\tau_1 d\tau_2.$$

С учетом стационарности случайных процессов $\xi(t)$, $\eta(t)$ и того, что $K_{\xi\eta}(\tau_1, \tau_2) = K_{\xi\eta}(\tau_1 - \tau_2)$, полученное выражение может быть упрощено [10]:

$$K_{\theta\rho}(t_1, t_2) = \int_0^{t_2} (t_2 - \tau) K_{\xi\eta}(\tau) d\tau + \int_0^{t_1} (t_1 - \tau) K_{\xi\eta}(-\tau) d\tau - \int_0^{t_2 - t_1} (t_2 - t_1 - \tau) K_{\xi\eta}(\tau) d\tau.$$

Подставляя сюда (10) и интегрируя по частям, по аналогии с (23) и (25) получим:

$$K_{\theta\rho}(t_1, t_2) = \frac{s_{\xi\eta}}{\alpha_{\xi\eta}^2} [e^{-\alpha_{\xi\eta} t_1} + e^{-\alpha_{\xi\eta} t_2} - e^{-\alpha_{\xi\eta} (t_2 - t_1)} + 2t_1 \alpha_{\xi\eta} - 1]. \quad (27)$$

Тогда ковариация между случайными процессами $\theta(t)$, $\rho(t)$ будет равна

$$\text{cov}(\theta, \rho) = K_{\theta\rho}(t, t) = \frac{s_{\xi\eta}}{\alpha_{\xi\eta}^2} [2e^{-\alpha_{\xi\eta} t} + 2t \alpha_{\xi\eta} - 2],$$

а коэффициент корреляции

$$r_{\theta\rho}(t) = \frac{\text{cov}(\theta, \rho)}{\sqrt{D_\theta(t)} \sqrt{D_\rho(t)}} = \frac{s_{\xi\eta}}{\sigma_\xi \sigma_\eta} \frac{\alpha_\xi \alpha_\eta}{\alpha_{\xi\eta}^2} \frac{e^{-\alpha_{\xi\eta} t} + \alpha_{\xi\eta} t - 1}{\sqrt{e^{-\alpha_\xi t} + \alpha_\xi t - 1} \sqrt{e^{-\alpha_\eta t} + \alpha_\eta t - 1}}. \quad (28)$$

На рисунке 2 приведено изменение коэффициента корреляции $r_{\theta\rho}(t)$ для следующих параметров: $s_{\xi\eta} = 0,181$, $\sigma_\xi^2 = 0,441$, $\sigma_\eta^2 = 0,13$, $\alpha_{\xi\eta} = 0,0037$, $\alpha_\xi = 0,0042$, $\alpha_\eta = 0,0036$.

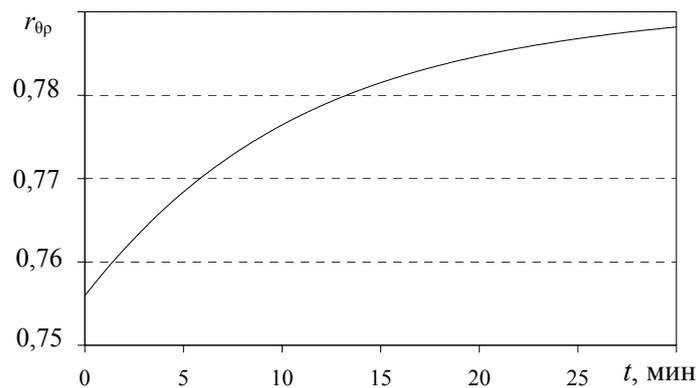


Рисунок 2 – Изменение коэффициента корреляции $r_{\theta\rho}(t)$ при $s_{\xi\eta} = 0,181$, $\sigma_\xi^2 = 0,441$, $\sigma_\eta^2 = 0,13$, $\alpha_{\xi\eta} = 0,0037$, $\alpha_\xi = 0,0042$, $\alpha_\eta = 0,0036$

$$\lim_{t \rightarrow 0} r_{\theta\rho}(t) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{s_{\xi\eta}}{\sigma_{\xi}\sigma_{\eta}} \frac{\alpha_{\xi}\alpha_{\eta}}{\alpha_{\xi\eta}^2} \frac{(\alpha_{\xi\eta}t)^2/2}{\sqrt{(\alpha_{\xi}t)^2/2}\sqrt{(\alpha_{\eta}t)^2/2}} = \frac{s_{\xi\eta}}{\sigma_{\xi}\sigma_{\eta}}; \quad (29)$$

$$\lim_{t \rightarrow \infty} r_{\theta\rho}(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{s_{\xi\eta}}{\sigma_{\xi}\sigma_{\eta}} \frac{\alpha_{\xi}\alpha_{\eta}}{\alpha_{\xi\eta}^2} \frac{\alpha_{\xi\eta}t}{\sqrt{\alpha_{\xi}t}\sqrt{\alpha_{\eta}t}} = \frac{s_{\xi\eta}}{\sigma_{\xi}\sigma_{\eta}} \frac{\sqrt{\alpha_{\xi}\alpha_{\eta}}}{\alpha_{\xi\eta}}. \quad (30)$$

Из (28)–(30) и рисунка 2 видно, что коэффициент корреляции между случайными процессами $\theta(t)$, $\rho(t)$ возрастает, изменяется от $\frac{s_{\xi\eta}}{\sigma_{\xi}\sigma_{\eta}}$ при

$$t = 0 \text{ до } \frac{s_{\xi\eta}}{\sigma_{\xi}\sigma_{\eta}} \frac{\sqrt{\alpha_{\xi}\alpha_{\eta}}}{\alpha_{\xi\eta}} \text{ при } t = \infty.$$

В приведенном на рисунке 2 примере эти значения составляют $r_{\theta\rho}(0) = 0,756$ и $r_{\theta\rho}(\infty) = 0,79$.

Заключение

Полученное решение уравнения диффузии паров в воздухе с принятыми начальными и краевыми условиями, с учетом случайного направления и значения скорости ветра позволит определять:

- математическое ожидание, дисперсию и среднеквадратическое отклонение концентрации выброшенного вещества в воздухе;
- влияние дисперсии скорости ветра на область, в которой ожидаемое значение концентрации вещества будет превосходить некоторое критическое значение;
- влияние дисперсии скорости ветра на распространение облака.

Знание математического ожидания и среднеквадратического отклонения позволит оценить вероятность превышения концентрацией выброшенного вещества некоторого критического значения. Учет этих параметров необходим при рассмотрении возможных сценариев ЧС и планировании действий подразделений МЧС по ее локализации.

Литература

- 1 Маршалл, В. Основные опасности химических производств / В. Маршалл. – М. : Мир, 1989. – 672 с.
- 2 Кіро́чкін, О. Ю. Оцінка багатокритеріальної методики аналізу хімічно-небезпечного стану об'єктів та регіонів України / О. Ю. Кіро́чкін [та інш.] // Проблеми надзвичайних ситуацій. – 2006. – № 6. – С. 62–73.
- 3 Моніторинг надзвичайних ситуацій : підручник / Ю. О. Абрамов [та інш.]. – Вид-во: АЦЗУ м. Харків, 2005. – 530 с.
- 4 Защита атмосферы от промышленных загрязнений : справочник : в 2-х ч. Ч. 2 ; пер. с англ. / под ред. С. Калверта, Г. М. Инглунда. – М. : Металлургия, 1998. – 712 с.
- 5 Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах промышленных предприятий (ОНД–86). – Л. : Гидрометеоиздат, 1987.
- 6 Моделирование аварийных ситуаций на опасных производственных объектах. Программный комплекс ТОКСИ+ (версия 3.0) : сб. документов. Сер. 27. – М. : науч.-техн. центр по безопасности в пром-сти, 2006. – Вып. 5. – 252 с.

- 7 Шматко, А. В. Алгоритм построения стохастической модели определения полей концентраций при выбросе химических веществ / А. В. Шматко, С. С. Говаленков // Проблемы надзвичайних ситуацій. – 2008. – № 7. – С. 177–183.
- 8 Полянин, А. Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики / А. Д. Полянин. – М. : ФИЗМАТЛИТ, 2001. – 576 с.
- 9 Тихонов, А. Н. Уравнения математической физики / А. Н. Тихонов, А. А. Самарский. – М. : Наука, 1977. – 735 с.
- 10 Свешников, А. А. Прикладные методы теории случайных функций / А. А. Свешников. – М. : Наука, 1968. – 463 с.

Поступила в редакцію 10.07.2014

A. E. Basmanov, S. S. Govalenkov
MATHEMATICAL MODEL OF VAPOR DIFFUSION OF HAZARDOUS
CHEMICALS IN THE ATMOSPHERE

The article discusses the solution of vapor diffusion of substances in the air to assess the emergency with a presence of hazardous chemicals. We propose a stochastic approach to the construction of a mathematical model of vapors substances spreading in the air as a result of an emergency related to the instantaneous gas leak. The source of randomness are random changes of wind direction and speed.