

ЛІТЕРАТУРА

1. Малышев В.П. Угрозы в высокотехнологичном обществе и пути их преодоления. Рос. хим. ж. 2005, т XLIX, № 4.
2. Бабич О.С., Лукашенко Н.И. Ліквідація наслідків радіаційного забруднення приміщень. «Безопасность жизнедеятельности в XXI веке», Материалы пятого международного симпозиума. Украина, Днепропетровск, январь 2005.

УДК 504.056

*Басманов А.Е., д-р техн. наук, гл. науч. сотр., УГЗУ,
Говаленков С.С., адъюнкт, УГЗУ*

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ ДИФФУЗИИ ПАРОВ ОПАСНЫХ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В ВОЗДУХЕ (представлено д-ром техн. наук Абрамовым Ю.А.)

В статье 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.

Постановка проблемы. 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 газо-воздушного 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 случайным изменениям различных факторов, в том числе изменениям направления и скорости ветра. В данной статье предложен стохастический подход построения математической модели распространения паров ОХВ в воздухе в результате чрезвычайной ситуации, связанной с мгновенной утечкой газа. Источником случайности являются случайные изменения направления и скорости ветра.

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, например, 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)-(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]

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

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

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

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 (рис. 1). Таким образом, эти случайные процессы уже не являются стационарными.

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

$$K_{\theta\rho}(t_1, t_2) = M[\theta(t_1) - \bar{v}_x t_1][\rho(t_2) - \bar{v}_y t_2] =$$

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

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

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

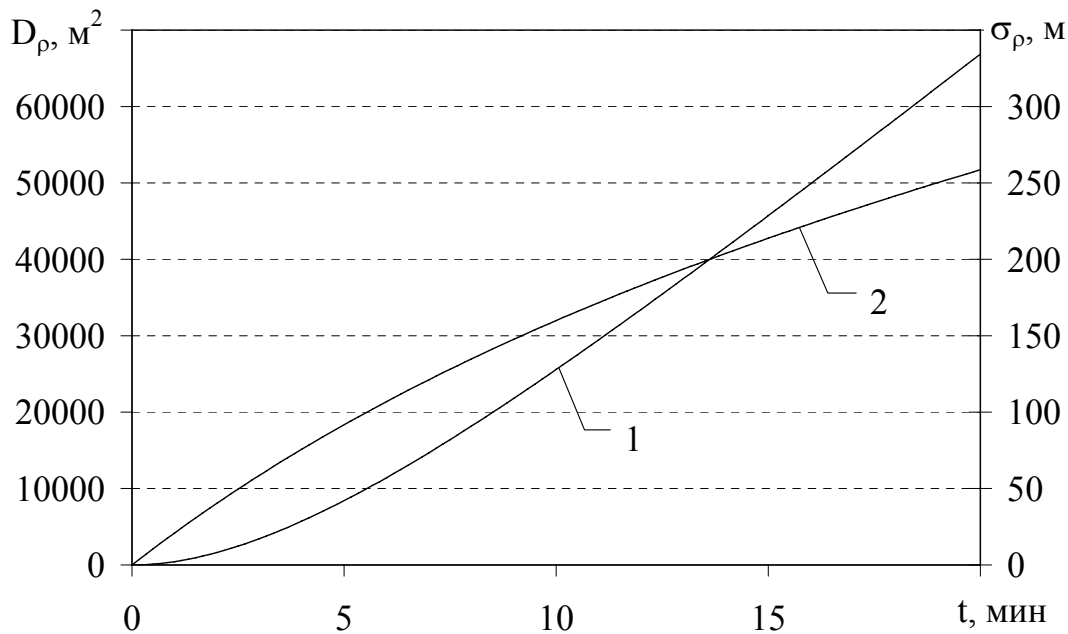


Рис. 1 – Рост дисперсии $D_\rho(t)$ (1) и среднеквадратического отклонения $\sigma_\rho(t)$ (2, по правой оси) со временем при $\sigma_\eta^2 = 0,13$ и $\alpha_\eta = 0,0036$

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

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

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

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

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

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

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

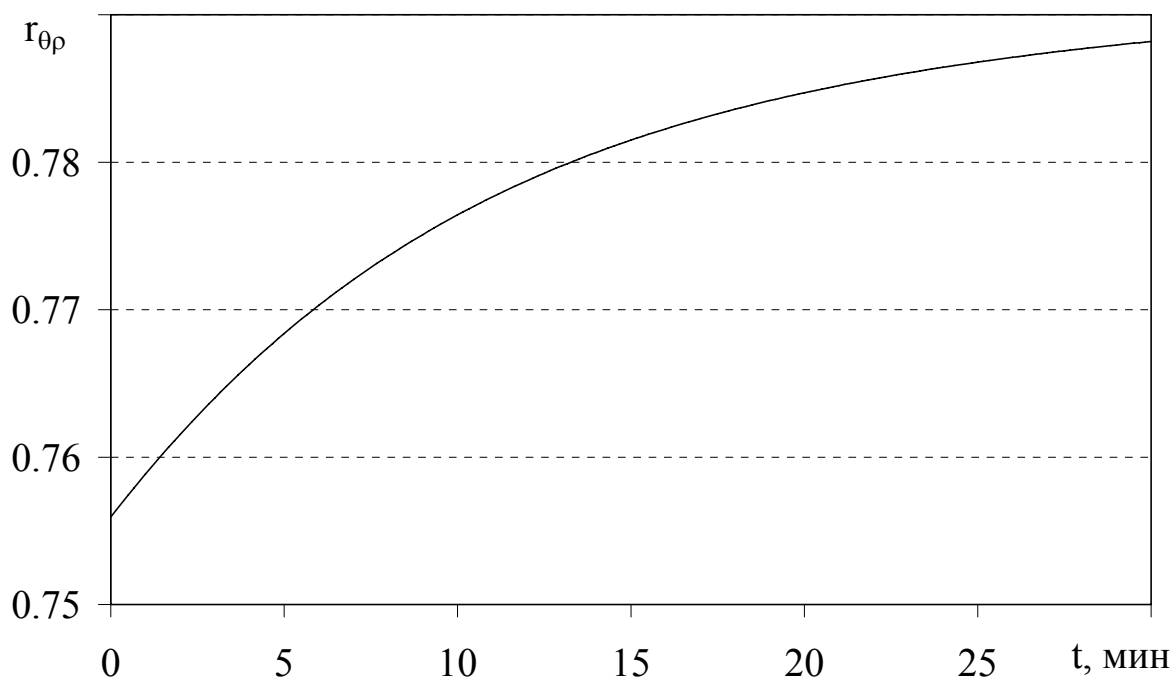


Рис. 2 – Изменение коэффициента корреляции $r_{\theta\rho}(t)$ при $s_{\xi\eta} = 0,181$, $\sigma_{\xi}^2 = 0,441$, $\sigma_{\eta}^2 = 0,13$, $\alpha_{\xi\eta} = 0,0037$, $\alpha_{\xi} = 0,0042$, $\alpha_{\eta} = 0,0036$

Из (28)-(30) и рис. 2 видно, что коэффициент корреляции между случайными процессами $\theta(t)$, $\rho(t)$ возрастает и изменяется от

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

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

Выводы. 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 чрезвычайной ситуации и планировании действий подразделений МЧС по ее локализации.

ЛИТЕРАТУРА

1. Маршалл В. Основные опасности химических производств. - М.: Мир, 1989. – 672 с.
2. Кірючкін О.Ю., Мурін М.М., Тютюник В.В., Шевченко Р.І. Оцінка багатокритеріальної методики аналізу хімічно-небезпечного стану об'єктів та регіонів України // Проблеми надзвичайних ситуацій. – 2006. - №6. – С. 62 – 73.
3. Моніторинг надзвичайних ситуацій. Підручник./Абрамов Ю.О., Грінченко Є.М., Кірючкін О.Ю., Коротинський П.А., Миронець С.М.- Вид-во: АЦЗУ м. Харків, 2005. – 530 с.
4. Защита атмосферы от промышленных загрязнений. Справочник. Изд.: В 2-х ч. Ч.2 Пер. с англ. /Под редакцией Калверта С., Инглунда Г.М. М.: Металлургия, 1998. – 712 с.
5. Методика расчета концентраций в атмосферном воздухе вредных веществ, содержащихся в выбросах промышленных предприятий (ОНД-86). – Л.: Гидрометеиздат, 1987.
6. Моделирование аварийных ситуаций на опасных производственных объектах. Программный комплекс ТОКСИ+ (версия 3.0): Сборник документов. Серия 27. Выпуск 5 /Колл. авт.– М.:Научно-технический центр по безопасности в промышленности, 2006. – 252 с.
7. Шматко А.В., Говаленков С.С. Алгоритм построения стохастической модели определения полей концентраций при выбросе химических веществ. // Проблеми надзвичайних ситуацій. – 2008. – №7. – С.177-183.
8. Полянин А.Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. – 576 с.
9. Тихонов А.Н., Самарский А.А. Уравнения математической физики. –М.: Наука, 1977. – 735 с.
10. Свешников А.А. Прикладные методы теории случайных функций. – М.: Наука, 1968. – 463 с.

nuczu.edu.ua