## К ВОПРОСУ О РАЗРАБОТКЕ МЕТОДИК ОЦЕНКИ ПОСЛЕДСТВИЙ АВАРИЙНЫХ ВЫБРОСОВ ОПАСНЫХ ВЕЩЕСТВ

### Основные требования к разрабатываемой методике

В области промышленной безопасности для оценки последствий аварийных выбросов опасных веществ (ОВ) существуют две основные задачи, для которых необходимо рассматривать распространение газообразных ОВ в атмосфере:

- рассеяние токсичного вещества в атмосфере до пределов, на которых сохраняется способность негативного воздействия ОВ на человека;
- рассеяние пожаро- взрывоопасного вещества в атмосфере до пределов, на которых сохраняется способность ОВ к воспламенению (задача о рассеянии и взрыве топливовоздушной смеси).

В первой задаче характерный размер зон поражения может составлять до нескольких десятков километров. Во второй до нескольких сот метров, а иногда и до 1000-1500 м.

С точки зрения газодинамики между этими задачами не существует различий: в обоих случаях необходимо определить пространственно-временное распределение ОВ в атмосфере.

Конечными вопросами, на которые необходимо дать ответ при решении этих задач, являются:

- каковы размеры зоны токсичного поражения различной степени тяжести для человека – для первой задачи;
- каковы размеры зоны, где облако сохраняет способность к воспламенению, и какой объем топлива может сгореть/взорваться (объем топлива во взрывоопасных пределах) для второй задачи.

Именно возможностью получить ответы на эти вопросы и следует руководствоваться при выборе подхода к решению задачи о распространении ОВ в атмосфере. Это является первым требованием к создаваемой методике (критерием при выборе подхода).

Способность методики дать правильный ответ на поставленные вопросы будет напрямую зависеть от полноты учета физических факторов, определяющих процесс распространения ОВ. Поэтому вторым требованием является учет основных физических процессов, происходящих при распространении ОВ в атмосфере.

Как отмечалось выше, при расчетах распространения ОВ в атмосфере приходится привлекать определенные эмпирические данные. Следовательно, при разработке методики также придется использовать эмпирическую информацию. Поэтому необходимо, чтобы она была бы достаточно проверенной и достоверной. Это третье требование к методике.

Четвертым требованием к разрабатываемой методике является возможность прогнозировать распространение ОВ в атмосфере не для абстрактных ситуаций, а для максимально большого круга задач связанных с реальными ситуациями на конкретных объектах.

При выборе метода решения, также существенным требованием является возможность быстро и с приемлемой точностью получать решения. Действительно, если время расчета одной задачи составляет, условно говоря, один месяц, то практическая ценность такой работы может оказаться ничтожной, хотя с точки зрения научной и будут получены значимые результаты.

Наконец, предлагаемая методика должна позволять пользоваться ею людям, обладающим минимально необходимыми знаниями, и обладать высокой устойчивостью к ошибочным действиям. В настоящее время существует принципиальная возможность создать чрезвычайно сложные (и дорогостоящие) методики прогнозирования распространения ОВ в

атмосфере, в этих методиках можно учесть практически все основные факторы, определяющие развитие процесса. Однако, для пользования ими (ввод данных, проведение расчетов, оценка и интерпретация результатов) требуется персонал, имеющий опыт и навыки работы в ряде смежных областей — газовая динамика, математическая физика, разностные численные методы. Понятно, что создание таких методик должно сопровождаться подготовкой соответствующих кадров. Вряд ли можно ожидать, что экономическое положение в стране позволит реализовать на практике такую схему, поэтому предлагаемая методика должна соответствовать реальным возможностям людей и их способности работать в существующей экономической ситуации.

Наконец, последним требованием к разрабатываемой методике является возможность реализовать ее в виде пригодном для практического применения и провести необходимую верификацию максимально быстро, в течение нескольких месяцев.

Итак, суммируя вышесказанное, можно перечислить следующие требования, которым должна удовлетворять разрабатываемая методика:

- позволять определять концентрации и пространственные размеры зон, где эта концентрация наблюдается;
- позволять оценить объем топлива во взрывоопасных пределах;
- учитывать основные физические процессы, протекающие при распространении OB в атмосфере;
- использовать достоверные эмпирические данные с пониманием границ их применимости;
- позволять рассчитать распространение OB в атмосфере для основных случаев, представляющих интерес с точки зрения рассматриваемого круга задач;
- позволять достаточно быстро получать результаты (время одного расчета должно составлять порядка одной минуты);
- быть надежной при проведении расчетов, быть доступной в использовании пользователю средней степени подготовки (типичным уровнем развития предлагается считать уровень эксперта в области промышленной безопасности) и обладать устойчивостью по отношению к ошибочным действиям;
- иметь возможность быстрой реализации в виде, пригодном для практического применения.

Рассмотрим последовательно каждый из этих факторов и определим как возможную на сегодня, так и необходимую нам степень его учета и детализации.

# Перечень физических процессов, которые необходимо учитывать при разработке методики

В рамках поставленной задачи (создать методику ДЛЯ прогнозирования распространения ОВ в атмосфере) рассмотрим основные процессы, протекающие (имеющие атмосфере. Можно выделить четыре основные место) взаимосвязанные взаимообусловленные составляющие движения ОВ в атмосфере, в т.ч. в условиях застройки и сложного рельефа:

- движение на начальном этапе, когда значительную роль играют большие градиенты концентрации, скорости и давления;
- дрейф выброса в поле ветра;
- турбулентное рассеяние в поле ветра;
- движение под действием силы тяжести.

Для решения задач в области промышленной безопасности необходимо учитывать все эти факторы. Первый и четвертый будут играть существенную роль вблизи места выброса, второй и третий будут оказывать преобладающее воздействие на больших расстояниях. Поэтому для решения задач по определению зон поражения при выбросе пожаровзрывоопасных ОВ, когда размер зон поражения составляет до несколько сот метров,

обязательно следует рассматривать движение на начальном этапе и учитывать силу тяжести. При рассмотрении же распространения выброса в дальних зонах (километры от места выброса, как правило, это случай токсичных и загрязняющих ОВ) можно ограничиться рассмотрением лишь дрейфа в поле ветра и турбулентного рассеяния. Хотя, заметим, что и при распространении токсичных веществ, по возможности следует учитывать течение на начальной стадии, ибо размеры облака или такое явление как движение ОВ против ветра на месте выброса можно рассмотреть лишь при учете действия силы тяжести и начального смешения.

Степень детализации при учете этих факторов так же может быть существенно различной. Наиболее полно описать все вышеперечисленные составляющие движения можно напрямую решая (численно) систему уравнений для средних характеристик потока, при этом автоматически просчитываются все процессы на всех стадиях распространения выброса. Однако, такое решение столкнется с массой проблем. Процедура решения, если охарактеризовать ее одним словом, окажется слишком сложной (и дорогостоящей), что противоречит требованиям к методике, сформулированным выше. Вряд ли целесообразно на сегодня в массовых расчетах опираться на такой подход. Другие подходы (см. ниже) также позволяют учесть перечисленные процессы в атмосфере. Однако этот учет происходит уже не автоматически (т.е. не в ходе решения уравнений), а с привлечением информации эмпирического характера.

В предлагаемой методике (в рамках интегрального подхода) будут учтены все четыре основные процесса в атмосфере. Учет этот будет произведен следующим образом.

Движение на начальной стадии будет подразделено для трех случаев: струйный выброс, эмиссия от пролива и залповый выброс. Для каждого случая будут использованы либо простейшие модели, либо рекомендации на основе опытных данных, исходя из которых можно будет определить размер облака и степень смешения с воздухом после окончания начального этапа распространения.

Гравитационное растекание будет учитываться с помощью эмпирической зависимости.

В методике предполагается использовать стандартные характеристики атмосферы и профили ветра (ветер дует в одном направлении с переменным значением по высоте), а также известные скорости подсоса воздуха в плотные слои.

Помимо процессов в атмосфере, в разрабатываемой методике предлагается учесть еще и такие факторы как наличие аэрозолей и тепломассообмен с подстилающей поверхностью.

Таким образом, в предлагаемой методике должны учитываться следующие физические факторы:

- движение на начальном этапе, когда значительную роль играют большие градиенты скорости и давления;
- дрейф выброса в поле ветра;
- турбулентное рассеяние в поле ветра;
- движение под действием силы тяжести;
- наличие аэрозолей в выбросе и фазовые переходы «газ-жидкость» как для OB, так и для паров воды;
- теплообмен с подстилающей поверхностью.

За пределами создаваемой методики остается рассеяние твердых частиц, выпадение конденсированной фазы на подстилающую поверхность и ее повторное поступление в атмосферу, поглощение ОВ подстилающей поверхностью при распространении в атмосфере.

Одним из недостатков предлагаемой методики является то, что она не будет учитывать взаимодействие с препятствиями (застройка, рельеф).

Перечень основных сценариев, которые необходимо учитывать при разработке методики.

Перечень основных сценариев будет полностью совпадать с перечнем для методики «ТОКСИ» (вторая редакция).

## Какие конкретные методики существуют

Для каждого из перечисленных в предыдущем разделе класса методов существует набор методик и программных продуктов. Существует множество обзоров по этим методикам.

В нашей стране гауссовские методики реализованы, например, в методике «Токси», интегральные методы – в ГОСТе, а методы, основанные на решении уравнений в частных производных, в программных продуктах фирмы FEM-CAD, расчетном комплексе PHOENIX.

Не вдаваясь в подробности, отметим, что на сегодня в рамках интегральной модели не существует цельной методики позволяющей рассчитывать все стадии аварии (включая начальную стадию) и получать ответы на поставленные вопросы: какие концентрации достигаются на различных расстояниях, какие объемы газа сосредоточены во взрывоопасных пределах, какие размеры имеют облака OB.

Поэтому необходима формулировка такой методики и ее программная реализация.

#### Выводы

Предлагается создать методику расчета распространения выброса ОВ в атмосфере на основе интегральных методов (с переменным профилем концентрации по объему). Предполагается рассмотреть выбросы залповые, струйные, эмиссию от пролива. Перечень рассматриваемых сценариев будет соответствовать сценариям, приведенным в методике «ТОКСИ». Методика должна позволять рассчитывать как выбросы токсичных, так и пожаровзрывоопасных веществ.

Ниже приводятся основные положения, которые будут включены в методику.

## Предлагаемая структура и основные положения

### Предполагаемая структура методики

- 1. Определение состояния и характеристик атмосферы и прилегающих повехностей.
  - 1.1 Устойчивость атмосферы
  - 1.2 Размер шероховатости
  - 1.3 Масштаб Монина-Обухова
  - 1.4 Поверхностная скорость трения
  - 1.5 Профиль ветра
  - 1.6 Характерная скорость подмешивания воздуха в облако
  - 1.7 Коэффициенты дисперсии в различных направлениях
- 2. Определение характеристики источника выброса
  - 2.1. Определение типа выброса
  - 2.2. Расчет начальной стадии распространения выброса
- 2.2.1 Определение размеров облака и степени смешения с воздухом на месте выброса
  - 2.2.2 Определение распространение струи
  - 2.2.3 Расчет скорости испарения пролива и размеров облака на месте выброса
  - 2.2.4 Расчет характеристик облака при полном штиле
- 3. Определение характеристик дрейфующего облака
  - 3.1 Залповый выброс
  - 3.2 Шлейфовый выброс
- 4. Определение состояния в облаке
- 5. Организация вычислительной процедуры
- 6. Примеры расчетов

# Основные уравнения, описывающие распространение облака (на примере залпового выброса без аэрозолей)

- 1.1. Состояние облака характеризуется семью параметрами (в отсутствие аэрозолей):
- $C_c$  концентрация опасного вещества в центре облака (кг/м<sup>3</sup>);
- $S_z$  коэффициент вертикальной дисперсии (м);
- $S_{y}$  коэффициент горизонтальной (вдоль ветра и в поперечном направлении) дисперсии (м);
  - r радиус центральной части облака (м);
  - Q энергия в облаке (Дж/Кмоль);
  - *w* доля паров воды в облаке (Кмоль/Кмоль смеси).
  - $\mathcal{X}_{c}$  положение центра облака

Кроме того, облако характеризуется такими параметрами, как  $\rho_{\scriptscriptstyle m}$  - плотность (кг/м³) (или  $V_{\scriptscriptstyle m}$  - удельный объем (м³/кг)),  $T_{\scriptscriptstyle m}$  - температура (град К)

Перечисленные выше параметры дополняются еще четырьмя параметрами, рассчитываемыми на основе уже введенных выше переменных (см. ниже формулы):

- $R_{\rm eff}$  эффективный радиус облака (м);
- $H_{\mbox{\tiny eff}}$  эффективная широта облака (м);
- $u_{eff}$  эффективная скорость движения облака (м/с);
- $M_{\mbox{\tiny eff}}$  эффективная масса воздуха и опасного вещества в облаке (кг);

1.2. Распределение концентрации в облаке описывается зависимостью:

$$\begin{split} c(x,y,z,t) &= c_c(t) \cdot \exp \left[ - \left[ \frac{z}{S_z(t)} \right]^\beta \right], \quad \text{при} \quad (x-x_c)^2 + y^2 < r^2 \\ c(x,y,z,t) &= c_c(t) \cdot \exp \left[ - \left[ \frac{z}{S_z(t)} \right]^\beta \right] \cdot \exp \left[ - \frac{\left(x-x_c\right)^2 + y^2 - r(t)^2}{\left[S_y(t)\right]^2} \right], \quad \text{при} \quad (x-x_c)^2 + y^2 >= r^2 \end{split}$$

1.3 Для определения пространственного распределения концентрации, описываемой в п. 1.2. с помощью семи параметров (п. 1.1), используются семь следующих уравнений:

$$M = c_c(x) \cdot \pi \cdot R_{eff}^2 \cdot H_{eff}$$

сохранение массы опасного вещества

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \left[ M_{eff} \right] = u_{eff} \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}} \left[ M_{eff} \right] = M_{up} + M_{side}$$

вовлечение в облако воздуха (сохранение массы воздуха)

где 
$$Ri = g \cdot \left[1 - \frac{\rho_{amb}(z=0)}{\rho_m}\right] \frac{H_{eff}}{u_*^2}$$
,  $C_D = 5$ 

гравитационное растекание облака пока r>0 или пока плавучесть не стала нейтральной

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \left[ S_y \right] = \frac{u_{eff}}{S_y} \cdot 2 \cdot (2/\pi)^{1/2} \cdot \left( r + 1/2 \cdot \pi^{1/2} \cdot S_y \right) \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dx}} \left[ \sigma_y^e \right], \quad \text{при r} > 0$$

$$R_{eff} = \left( r + 1/2 \cdot \pi^{1/2} \cdot S_y \right),$$

$$S_y(x) = 2^{1/2} \cdot \sigma_y^e (x + x_t), \quad \text{при r} = 0$$

рассеяние поперек ветра

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}}[Q] = Q_{hup} + Q_{hside}$$

сохранение энергии в облаке

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left[ w \cdot M_{eff} \right] = Q_{wup} + Q_{wside}$$

сохранение количества воды в облаке

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{dt}} \left[ x_c \right] = u_{eff}$$

положение центра облака

в этих уравнениях используются следующие переменные, связанные с перечисленными в разделе 1.1

$$\begin{split} R_{\textit{eff}} &= r + 0.5 \cdot \sqrt{\pi} \cdot S_{y} \\ H_{\textit{eff}} &= \frac{1}{\beta} \cdot \Gamma \bigg( \frac{1}{\beta} \bigg) \cdot S_{z} \\ u_{\textit{eff}} &= \frac{\Gamma \big[ (1 + \alpha) / \beta \big]}{\Gamma \big[ 1 / \beta \big]} \cdot u_{0} \cdot \bigg( \frac{S_{z}}{z_{0}} \bigg)^{\alpha} \\ M_{\textit{eff}} &= \pi \cdot R_{\textit{eff}}^{2} \cdot H_{\textit{eff}} / V_{\textit{m}} \end{split}$$

1.4. Для заданной энергии и массы в облаке и для заданных геометрических размеров облака состояние в облаке ( $\rho_{\scriptscriptstyle m}, V_{\scriptscriptstyle m}, T_{\scriptscriptstyle m}$ ) определяется решением термодинамической задачи (UV-задача).