

REDAKCJA NAUKOWA

BARTŁOMIEJ POŁEĆ
JAROSŁAW TĘPIŃSKI

METODY I NARZĘDZIA WSPOMAGAJĄCE

PROCES OCENY RYZYKA AWARII W ZAKŁADACH PRZEMYSŁOWYCH



METODY I NARZĘDZIA WSPOMAGAJĄCE

PROCES OCENY RYZYKA AWARII W ZAKŁADACH PRZEMYSŁOWYCH

Praca pod redakcją

mgr. Bartłomieja Połcia

dr. inż. Jarosława Tępińskiego

Publikacja opracowana w ramach projektu nr DOB-BIO7/09/03/2015
pt. „Program do oceny ryzyka wystąpienia awarii w obiektach przemysłowych stwarzających
zagrożenie poza swoim terenem” finansowanego przez Narodowe Centrum Badań i Rozwoju.

Projekt realizowany przez konsorcjum w składzie:

Centrum Naukowo-Badawcze Ochrony Przeciwpowodziowej im. Józefa Tuliszkowskiego

– Państwowy Instytut Badawczy (lider)

Narodowe Centrum Badań Jądrowych

Politechnika Warszawska

Bera Systems sp. z o.o.



Wydawnictwo CNBOP-PIB

Józefów 2019

Recenzja naukowa:

prof. dr hab. Kazimierz Lebecki
st. bryg. mgr inż. Sławomir Zając

Redakcja naukowa:

mgr Bartłomiej Połeć
dr inż. Jarosław Tępiński

Przygotowanie do druku:

Aleksandra Grzęda
Elżbieta Muszyńska-Poleć
Katarzyna Szulejewska

Skład i projekt okładki:

Arkadiusz Choraży

Grafika na okładce: AdobeStock

Ta publikacja jest dostępna na licencji Creative Commons-Uznanie
autorstwa-Na tych samych warunkach 4.0 Międzynarodowe (CC BY-SA 4.0)

Pewne prawa zastrzeżone.

Pełna treść licencji jest dostępna na stronie
creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/legalcode.pl

Wydawca:

Centrum Naukowo-Badawcze Ochrony Przeciwpożarowej
im. Józefa Tuliszkowskiego
Państwowy Instytut Badawczy
05-420 Józefów k/Otwocka ul. Nadwiślańska 213
www.cnbop.pl

DOI: 10.17381/2019.2
ISBN 978-83-948534-5-7

Druk i oprawa:

Blue Space Sp. z o.o.

Nakład: 100 egz.

Spis treści

I. MODELOWANIE MATEMATYCZNE DYSPERSJI ZANIECZYSZCZEŃ W ATMOSFERZE – BADANIA LITERATUROWE I SYMULACJE NUMERYCZNE. .7

Michał Lewak

Wprowadzenie	9
1. Rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń	11
2. Molekularny transport masy	11
3. Makroskopowy transport masy	13
4. Modelowanie matematyczne procesu transportu zanieczyszczeń.	22
Podsumowanie i wnioski	44
Literatura	47

II. MODELE I PROGRAMY OBLICZENIOWE NA POTRZEBY SYSTEMU WYZNACZANIA RYZYKA OBSZAROWEGO

49

*Mieczysław Borysiewicz, Piotr Kopka, Michał Korycki, Tomasz Kąciatkowski, Sławomir Potemski, Piotr Prusiniński,
Anna Wawrzyńczak-Szaban*

Wprowadzenie	51
1. Klasyfikacja modeli	53
2. Opis wybranych modeli	57
3. Modelowanie transportu i dyspersji w wodach powierzchniowych	89
4. Porady dla użytkowników modeli	90
Podsumowanie i wnioski	94
Literatura	95

III. KONCEPCJA INFORMATYCZNA BUDOWY SYSTEMU DO WYZNACZANIA RYZYKA OBSZAROWEGO POCHODZĄCEGO OD INSTALACJI PRZEMYSŁOWYCH

97

Mieczysław Borysiewicz, Piotr Kopka, Sławomir Potemski, Grzegorz Siess, Anna Wawrzyńczak-Szaban

Wprowadzenie	99
1. Założenia funkcjonalne systemu	101
2. Wskaźniki ryzyka obszarowego	102
3. Podstawowe algorytmy	105
4. Generyczne częstości występowania awarii	113
5. Kryteria wyboru modelu obliczeniowego	117
6. Koncepcja informatyczna: klasy i obiekty	118

7. Sposób prezentacji wyników analiz	120
8. Algorytm określania potencjalnych skutków poważnych awarii metodyką IAEA.	124
Podsumowanie i wnioski.	142
Literatura	145

IV. PROGRAM DO OCENY RYZYKA WYSTĄPIENIA AWARII W OBIEKTACH PRZEMYSŁOWYCH – ZAŁOŻENIA PROJEKTU SYSTEMU A PRAKTYCZNE ZASTOSOWANIE

147

Bartłomiej Poleć, Jarosław Tępiński

Wprowadzenie	149
1. Projekt Evaris	151
2. Oprogramowanie RAT-if.	152
3. Zastosowanie w praktyce.	161
Podsumowanie i wnioski.	163
Literatura	164
Notki biograficzne autorów	165

Szanowni Państwo,

Przemysł ciężki, przy którym prowadzona jest działalność polegająca m.in. na przetwarzaniu i magazynowaniu dużych ilości substancji niebezpiecznych, niewątpliwie stanowi potencjalne źródło zagrożeń dla zdrowia i życia ludzi, mienia oraz środowiska naturalnego w każdym zakątku świata. Zapewnienie bezpieczeństwa, w tym przeciwdziałanie możliwym zdarzeniom awaryjnym związanym z funkcjonowaniem zakładów przemysłowych w zróżnicowanym otoczeniu, jest poważnym wyzwaniem dla każdej gospodarki – również polskiej. Dlatego dla odpowiedniego kształtowania ładu przestrzennego oraz planów ratowniczych względem projektowanych oraz istniejących instalacji tak istotne jest dokonanie rzetelnej oceny ryzyka. Obecnie w Polsce wciąż brakuje uniwersalnej i jednolitej dla całego kraju metodyki prowadzenia oceny ryzyka, pozwalającej na porównywanie zebranych w tym procesie danych.

Niniejsza publikacja ma na celu przedstawienie zarówno metod, koncepcji ich zastosowania, jak i narzędzi możliwych do wykorzystania na potrzeby wspomagania procesu oceny ryzyka w zakładach przemysłowych. W czterech rozdziałach autorskich przedstawiono problematykę związaną z modelowaniem matematycznym dyspersji zanieczyszczeń przy pomocy obliczeniowej mechaniki płynów CFD, modelami oraz programami obliczeniowymi do wyznaczania ryzyka obszarowego, koncepcją systemu informatycznego wspomagającego wykonywanie zaawansowanych analiz ryzyka pochodzącego od instalacji przemysłowych oraz dedykowanym narzędziem do prowadzenia całościowej oceny ryzyka wystąpienia awarii w obiektach przemysłowych stwarzających zagrożenie poza swoim terenem.

Zagadnienia poruszane w niniejszej publikacji zostały dobrane z myślą o osobach zajmujących się prezentowaną problematyką zawodowo (czyli pracownikach organów administracji publicznej, jednostek organizacyjnych Państwowej Straży Pożarnej i innych służb ratowniczych, instytucji zaangażowanych bezpośrednio w proces tworzenia aktów planistycznych, identyfikację zakładów stwarzających ryzyko poza swoim terenem, zajmujących się zarządzaniem ryzykiem już na etapie tworzenia założeń do aktów planistycznych), a także studentach oraz innych zainteresowanych procesem oceny ryzyka w zakładach przemysłowych.

Mamy nadzieję, że publikacja zwiększy poziom świadomości nt. problemów związanych z prowadzeniem procesu oceny ryzyka w obiektach przemysłowych,

które mogą przyczynić się do wystąpienia awarii poza swoim terenem. Monografia ta w zamierzeniu autorów ma również wpłynąć na podniesienie poziomu debaty i przyspieszenie prac nad krajowymi wytycznymi w zakresie ustalania bezpiecznej odległości od zakładów przemysłowych na potrzeby planowania i zagospodarowania przestrzennego oraz standaryzację w postaci krajowej metodyki dokonywania oceny ryzyka dla zakładów przemysłowych.

Z poważaniem
mgr Bartłomiej Połec
dr inż. Jarosław Tępiński

ROZDZIAŁ I.

**MODELOWANIE MATEMATYCZNE
DYSPERSJI ZANIECZYSZCZEŃ
W ATMOSFERZE
– BADANIA LITERATUROWE
I SYMULACJE NUMERYCZNE**

Michał Lewak

Politechnika Warszawska

Wprowadzenie

Czystość powietrza, którym oddychamy, ma bezpośredni wpływ na nasze zdrowie i życie. Stan środowiska przekłada się na funkcjonowanie gospodarki, a więc i na rozwój całego państwa – dlatego tak ważne jest zwiększenie świadomości społecznej na temat jakości powietrza atmosferycznego. Nie będzie przesadne stwierdzenie, że społeczeństwa nie stać na lekceważenie zagrożeń, jakie niosą ze sobą zanieczyszczenia środowiska. Należy więc podejmować działania ukierunkowane na poprawę czystości powietrza, a podstawową czynnością w tym zakresie jest monitorowanie jakości powietrza. W tym celu przy Ministerstwie Środowiska powołano urząd o nazwie Główny Inspektorat Ochrony Środowiska (GIOŚ), który ma za zadanie monitorowanie stężeń zanieczyszczeń oraz ocenę stanu środowiska. Monitoring prowadzony jest z wykorzystaniem zintegrowanego systemu pomiaru jakości powietrza, przy wsparciu terenowych stacji pomiarowych. Za ich pomocą mierzone są – w funkcji czasu – stężenia wybranych substancji niebezpiecznych, na przykład: dwutlenku siarki, dwutlenku azotu, tlenku węgla, tlenku azotu, benzenu, ozonu, pyłu zawieszonego PM₁₀, PM_{2,5} w powietrzu [przy czym pod nazwą PM₁₀ i PM_{2,5} kryją się zarówno ciała stałe, jak i krople cieczy o średnicach nie większych niż 10 µm (PM₁₀) oraz 2,5 µm (PM_{2,5}), które są najbardziej podatne na deponowanie w drogach oddechowych]. Dodatkowo prowadzone są pomiary zawartości metali i benzo(a)pirenu w pyłe PM₁₀¹. Z danych zawartych na stronie Głównego Inspektoratu Ochrony Środowiska² wynika, że monitoring na terenie całego kraju w roku 2019 jest prowadzony na podstawie danych z ok. 180 stacji pomiarowych.

Monitorowanie stężeń zanieczyszczeń dostarcza bardzo cennych informacji. Pozwala na głębszą analizę zagrożeń, jakie niosą zarówno źródła punktowe, jak i liniowe. Niemniej jednak ze względu na ograniczoną liczbę stanowisk pomiarowych dokładna ocena jakości powietrza na terenach, które nie są gęsto pokryte siatką detektorów, nie jest możliwa. W tak mocno zurbanizowanym mieście jak Warszawa mapa stacji pomiarowych aktywnie włączonych w system monitoringu wskazuje 7 lokalizacji³. Taka liczba stacji jest zapewne uzasadniona, nie daje jednak pełnej

¹ http://powietrze.gios.gov.pl/pjp/content/measuring_air_assessment_measureings [dostęp: 19.07.2019].

² Tamże.

³ <http://powietrze.gios.gov.pl/pjp/maps/measuringstation> [dostęp: 19.07.2019].

informacji o stanie powietrza w całym mieście. Możliwe jest przecież wystąpienie emisji zanieczyszczeń w punkcie, który jest oddalony od stacji pomiarowej – wówczas alert o niepożądanym wzroście stężenia substancji niebezpiecznej dotrze do najbliższego miejsca pomiaru po długim czasie. Co gorsza, zmierzone wartości stężenia substancji niebezpiecznych będą dużo niższe niż w pobliżu źródła emisji, więc system ostrzegania nie będzie mógł prawidłowo zadziałać. Jednym z głównych działań, podejmowanych w celu przeciwdziałania takiej sytuacji, są badania prowadzące do opisu matematycznego zjawiska emisji zanieczyszczeń w atmosferze. Na podstawie modeli matematycznych, które pozwalają opisać zjawisko uwalniania się substancji niebezpiecznych, możliwe jest określenie szybkości zmian stężenia w przestrzeni i w czasie. Dzięki modelowaniu matematycznemu w przypadku jednorazowego uwolnienia się substancji niebezpiecznych można obliczyć zmiany stężenia substancji w danej przestrzeni w zależności od czasu, jaki minął od emisji substancji. Badania te dotyczą analizy procesów nieustalonych. W przypadku ciągłych źródeł emisji możemy wyznaczać pola stężenia w przestrzeni dla procesów niezależnych od czasu trwania emisji. Modelowanie matematyczne ma jedną cenną zaletę – na podstawie pola stężenia w danym punkcie oraz danych na temat warunków pogodowych w rozpatrywanym obszarze pozwala wskazać miejsce emisji zanieczyszczenia. Jest to tzw. **problem odwrotny** rozpraszania zanieczyszczeń w środowisku atmosferycznym.

Celem niniejszego rozdziału jest krytyczna analiza modeli matematycznych, wykonana na podstawie dwóch grup modeli. Pierwszą grupę stanowią rozwiązania analityczne, do drugiej można zaliczyć modele numeryczne. Z każdej z grup wybrano po jednym modelu matematycznym, a następnie pokazano symulowane rozkłady stężeń dla wybranych przypadków punktowego źródła zanieczyszczeń. Przedstawione wyniki symulacji wykonano przy pomocy oprogramowania Matlab 2015b oraz pakietu ANSYS Workbench 17.

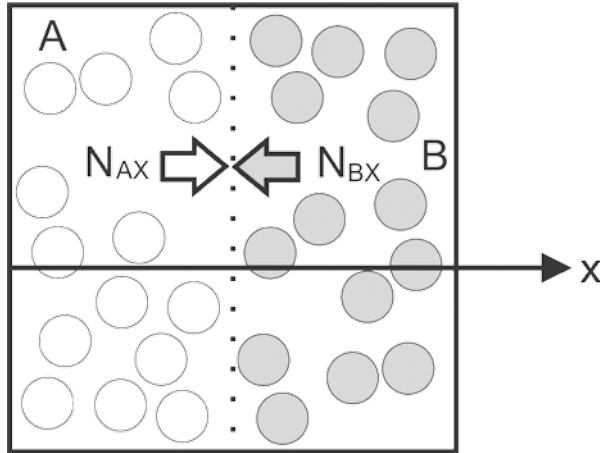
1. Rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń

Każdy układ termodynamiczny dąży do osiągnięcia równowagi z otoczeniem, co wynika z wyrównywania się potencjałów chemicznych, które określają stan termodynamiczny substancji w układzie. Rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń w środowisku atmosferycznym jest związane z transportem masy w danej objętości przestrzeni. Do zaistnienia transportu masy niezbędne jest występowanie różnic stężeń danych substancji. W przypadku dyspersji zanieczyszczeń wystarczy, aby pojawiło się niezerowe stężenie substancji niebezpiecznej w danym punkcie przestrzeni. Proces ten zachodzi samoczynnie do momentu wyrównania się stężeń składników mieszaniny, tym intensywniej, im większa jest wartość różnicy stężeń występującej w przestrzeni. Z uwagi na fakt wyrównywania się stężeń substancji w miarę transportu zanieczyszczeń, siła napędowa procesu maleje. W efekcie – w dużej odległości od źródła emisji – zmierzone doświadczalnie stężenia mogą być wielokrotnie niższe niż w punkcie emisji. Proces rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w atmosferze nosi nazwę dyspersji zanieczyszczeń. Termin dyspersja oznacza rozproszenie jednego składnika w ośrodku, w wyniku czego następuje transport masy. Składnik zdyspergowany – inaczej mówiąc rozproszony – w przestrzeni jest transportowany w ośrodku ciągłym, który w tym przypadku stanowi powietrze. Transport ten może zachodzić za pomocą dwóch odmiennych mechanizmów.

2. Molekularny transport masy

Mechanizm transportu masy występujący w skali molekularnej nosi nazwę dyfuzji. Proces ten jest związany z wzajemnym powinowactwem chemicznym składników mieszaniny. Opisu matematycznego zjawiska dyfuzji masy dokonał Adolf Fick. Zjawisko to można wytłumaczyć następująco. Weźmy zamknięte pudełko, przedzielone pionową ścianą na dwie równe części (komory). Ściana ta nie przepuszcza składników znajdujących się po obu jej stronach. Niech w komorach znajdą się dwie różne substancje gazowe: w jednej – substancja A, w drugiej – substancja B. Schemat myślowy procesu zaprezentowano na rycinie 1. Jeżeli w pewnej chwili usunięta zostanie ściana rozdzielająca obie substancje, to przy powierzchni oddzielającej oba płyny pojawi się różnica stężeń. Powsta-

nie wówczas siła napędowa, która spowoduje transport masy jednego składnika w drugim. Proces ten będzie trwał do momentu wyrównania się stężeń obu składników w pudełku. Szybkość procesu przenoszenia masy będzie zależała od różnicy stężeń substancji, a stężenie obu płynów po osiągnięciu przez układ równowagi – od całkowitej masy obu substancji. Fizycznie wielkość odpowiedzialna za rozprzestrzenianie się jednego składnika w drugim nazywamy współczynnikiem dyfuzji masy D_{AB} .



Ryc. 1. Dyfuzja molekularna dwóch substancji – schemat zjawiska

Adolf Fick podał zależność matematyczną na wartość gęstości strumienia masy dyfundującego w kierunku x :

$$\overrightarrow{N_{Ax}} = -D_{AB} \frac{dC_A}{dx} \quad (1)$$

Z równania (1) wynika, że gęstość strumienia masy N_{Ax} składnika A w kierunku x jest proporcjonalna do gradientu stężenia tego składnika, a współczynnikiem proporcjonalności jest współczynnik dyfuzji masy D_{AB} . Równanie (1) stanowi matematyczną formę pierwszego prawa Ficka i jest pomocne podczas modelowania matematycznego zagadnień rozpraszania się zanieczyszczeń. Zgodnie z pierwszym prawem Ficka składnik jest transportowany w przestrzeni od stężeń wyższych do niższych. Zatem gradient stężenia wzdłuż drogi dyfuzji będzie zawsze ujemny, przez co naturalny proces rozprzestrzeniania się składnika cechowałyby ujemne wartości N_{Ax} . W związku z tym, aby proces zachodzący naturalnie nie powodował ujemnych wartości gęstości strumienia masy, do równania wprowadzony został znak minus. Prawo Ficka ma kilka zalet. Przede wszystkim jest przejrzystą formą matematyczną opisu skomplikowanego proce-

su dyfuzji molekularnej oraz wyrażeniem, które zależy od współczynnika dyfuzji i gradientu stężenia. Pozwala to wytłumaczyć spadek szybkości transportu masy wraz z wyrównywaniem się stężeń reagentów (gradient dąży do zera). Ponadto zastosowanie współczynnika dyfuzji daje możliwość opisania różnic w szybkościach wzajemnego rozprzestrzeniania się substancji o podobnym składzie chemicznym.

3. Makroskopowy transport masy

Laminarny transport masy

Drugim mechanizmem transportu substancji jest **konwekcja masy** – proces bardziej efektywny niż dyfuzja. Jest on ściśle związany z transportem pędu w mieszaninie, ponieważ do jego powstania konieczny jest ruch makroskopowy płynu. Ruch ten może być powodowany różnicą gęstości w polu grawitacyjnym. Wówczas proces nosi nazwę **konwekcji swobodnej**. Jeśli ruch wywołany jest przez mieszadło, dmuchawę lub różnicę ciśnień, to zjawisko nosi miano **konwekcji wymuszonej masy**. Oba procesy są do siebie bardzo podobne, przy czym konwekcja wymuszona jest mechanizmem o wiele bardziej intensywnym od konwekcji swobodnej – tym intensywniejszym, im większa jest prędkość płynu w przepływie wymuszonym. Z uwagi na ścisłą zależność między transportem pędu a konwekcyjnym transportem masy opis matematyczny tego procesu należy rozbić na dwa odmienne modele matematyczne. Pierwszy uwzględnia wymianę masy w przypadku przepływów laminarnych. W tego rodzaju przepływach pęd przekazywany jest na ogół tylko w jednym kierunku, zazwyczaj prostopadłym do głównego kierunku przepływu. Najczęściej jest to związane z przepływem w obecności nieruchomych ciał stałych, w obrębie których istnieje warstwa przyścienna. Rozkład prędkości zależy tu od jednej składowej przestrzennej, co prowadzi do wniosku, że transport masy odbywa się w tym samym kierunku co transport pędu. Model matematyczny transportu masy w przepływach laminarnych jest wyprowadzony za pomocą prawa zachowania masy bilansowanego składnika w objętości kontrolnej. Zaprezentowany poniżej model matematyczny transportu masy w przepływie laminarnym został zaczerpnięty z książki autorstwa R. B. Birda, W. E. Stewarta i E. N. Lightfoota¹. W modelu tym opis problemu przenoszenia masy w układzie, w którym nie istnieją reakcje chemiczne między składnikami, może być wyrażony równaniem:

$$\frac{\partial(C_i)}{\partial t} + \text{div}(\vec{u}C_i) - \text{div}(D_{ij}\text{grad}(C_i)) = 0 \quad (2)$$

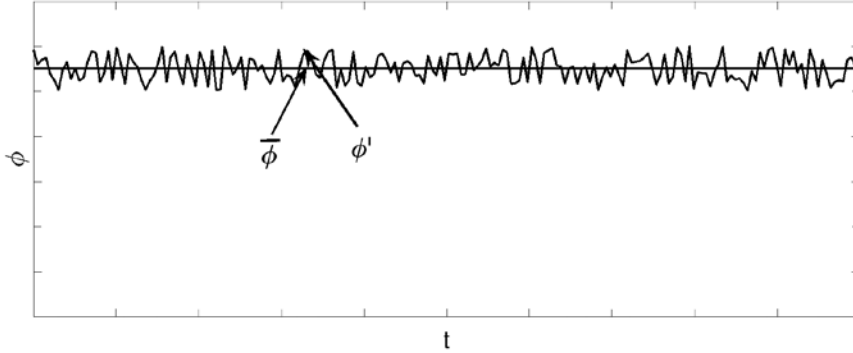
Gdzie C_i to stężenie molowe i -tego składnika w mieszaninie, a D_{ij} oznacza współczynnik dyfuzji i -tego składnika w j -tym. Bilans masy i -tego składnika w mieszaninie może być opisany za pomocą sumy trzech członów [zob. równanie (2)]. Pierw-

¹ http://powietrze.gios.gov.pl/pjp/content/measuring_air_assessment_measureings [dostęp: 19.07.2019].

szy człon oznacza akumulację masy i -tego składnika w objętości kontrolnej, drugi człon wyraża transport konwekcyjny tego składnika, a trzeci – jego transport dyfuzyjny. Opis matematyczny procesu zapisany jest przy pomocy równania różniczkowego cząstkowego drugiego rzędu. Do jego rozwiązania potrzebna jest znajomość sześciu warunków brzegowych (po dwa dla każdej składowej przestrzennej) i jednego warunku początkowego. Rozwiązanie równania bilansu masy przy pomocy warunku początkowego i warunków brzegowych pozwala na określenie pola stężenia w rozpatrywanym układzie. Dzięki temu można modelować matematycznie zmiany rozprzestrzeniania się substancji w zależności od warunków procesowych. Modelowanie matematyczne pozwala na rozpatrywanie scenariuszy awaryjnych podczas uwolnienia substancji niebezpiecznych bez konieczności prowadzenia niebezpiecznych doświadczeń. Z modelowaniem konwekcji masy w przepływie laminarnym wiąże się opis procesu przenoszenia przy istnieniu dwóch mechanizmów transportu: dyfuzji i konwekcji. W warunkach rzeczywistych oba procesy zachodzą równocześnie, dlatego modelowanie matematyczne dyfuzji zanieczyszczeń w rzeczywistych przypadkach powinno być rozpatrywane przy użyciu modeli zawierających oba mechanizmy przenoszenia masy. Bardzo ciekawy jest wpływ procesu dyfuzji molekularnej na opis matematyczny zjawiska transportu masy. Pomimo tego, że dyfuzja molekularna jest o wiele mniej intensywna niż konwekcja masy, to w modelowaniu matematycznym nie może być pominięta. Uproszczenie układu równań poprzez rezygnację z członów dyfuzyjnych prowadzi do rozwiązania równania transportu, którego wynik przypomina poruszanie się ciała stałego ze stałą prędkością. Takie podejście w modelowaniu matematycznym zjawiska skutkuje nierealistycznym opisem procesu.

Burzliwy transport masy

Szczególnie duży problem przy określaniu zależności matematycznych opisujących proces transportu masy stanowią przepływy burzliwe. Po raz pierwszy ten rodzaj przepływu zaobserwował i opisał Osborne Reynolds. W 1883 roku podał on kryterium rozgraniczające przepływ laminarny od burzliwego przy przepływach w rurze. Reynolds doświadczałnie wyznaczył graniczną zależność, powyżej której przepływ laminarny przechodzi w turbulentny. Zależność ta wyznaczona została w postaci liczby bezwymiarowej Re , na jego cześć nazwanej **liczbą Reynoldsa**. W przepływie burzliwym następuje intensyfikacja procesów przenoszenia spowodowana destabilizacją przepływu laminarnego przez siły bezwładności płynu. Ruch płynu staje się nieregularny; występują niezerowe składowe prędkości we wszystkich kierunkach. Tworzą się wiry burzliwe, których wielkość oraz częstotliwość pojawiania się stanowią o wielkości turbulencji. Powoduje to nieustalone mieszanie płynu we wszystkich trzech kierunkach, a zatem wzrasta konwekcyjny transport pędu, masy i energii. W związku z tym prędkość, temperatura, stężenie oraz właściwości fizykochemiczne ulegają zmianie w czasoprzestrzeni. Utrudniać to może nie tyle sam opis matematyczny problemu transportu w tego rodzaju przepływach, ile jego rozwiązanie numeryczne.



Ryc. 2. Schemat obrazujący koncepcję Reynoldsa dotyczącą opisu wielkości intensywnych w przepływie burzliwym

Źródło: Opracowanie własne.

Koncepcję Reynoldsa wykorzystuje się do określenia matematycznego problemu przenoszenia pędu, masy i energii (jej szczegółowy opis można znaleźć w klasycznej pracy Elsnera²). Schemat problemu przepływów burzliwych w odniesieniu do zmiennej ϕ zaprezentowano na rycinie 2. W przepływie burzliwym każda wielkość intensywna ϕ może podlegać chaotycznym zmianom, zarówno w czasie, jak i w przestrzeni. Jak widać, zmiany wielkości ϕ w zależności od czasu podlegają ciągłym fluktuacjom wokół wartości średniej dla określonych czasów próbkowania (patrz ryc. 2). Zatem w dowolnej chwili czasowej wartość parametru ϕ może być wyrażona jako suma wartości średniej i jej chwilowej fluktuacji zarówno w czasie, jak i w przestrzeni. Wobec tego wielkości, takie jak składowe prędkości, temperatura, stężenie czy ciśnienie, mogą być wyrażone w postaci następującej zależności:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3)$$

Modelowanie matematyczne procesów dyspersji zanieczyszczeń w przepływach burzliwych bazują na modelach opisujących transport pędu, dlatego modelowanie matematyczne bilansu pędu w przepływach burzliwych wymaga w tym miejscu krótkiego omówienia.

W przepływie laminarnym rozkład prędkości w płynie może być określony przy pomocy czterech równań różniczkowych cząstkowych. Pierwsze (zwane **równaniem ciągłości**) wyprowadzone zostało przy pomocy prawa zachowania masy w układzie i dla płynu ściśliwego wyraża się zależnością:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho \cdot u_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho \cdot u_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho \cdot u_z) = 0 \quad (4)$$

² J. W. Elsner, Turbulencja przepływów, PWN, Warszawa 1987.

Do wyprowadzenia kolejnych trzech równań skorzystano z bilansu sił działających na elementarną objętość płynu. Dzięki temu otrzymuje się równania na trzy składowe prędkości płynu. Równania (5–7) noszą nazwę **równań Naviera-Stokesa** od nazwisk dwóch badaczy, którzy wyprowadzili je po raz pierwszy³:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_x) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u_x u_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho u_x u_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_x u_z) = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} - \left[\frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right] \quad (5)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_y) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u_y u_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho u_y u_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_y u_z) = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} - \left[\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zy}}{\partial z} \right] \quad (6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_z) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u_z u_x) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho u_z u_y) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho u_z u_z) = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} - \left[\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zz}}{\partial z} \right] \quad (7)$$

Rozwiązanie analityczne układu równań (4–7) w czasoprzestrzeni nie istnieje, dlatego do rozwiązania zagadnień przepływu w płynach rzeczywistych stosuje się metody numeryczne. Metody te pozwalają na przybliżone rozwiązanie ww. równań za pomocą trzech różnych metod: metody różnic skończonych, metody elementów skończonych i metody objętości skończonych. Każda z nich wymaga nieco innego podejścia i opiera się na innym przybliżeniu układów równań (patrz równania 4–7) w procesie iterowania rozwiązania przybliżonego.

Metody różnic skończonych bazują na aproksymacji pochodnej za pomocą ilorazów różnicowych. Z punktu widzenia problemu dyspersji zanieczyszczeń, które wymaga modelowania na dużych obszarach (1 km), spełnienie takiego założenia możliwe jest poprzez stworzenie siatki numerycznej o bardzo dużej gęstości. Ponadto w metodach różnic skończonych nie można zastosować skomplikowanych warunków brzegowych, dlatego są one wykorzystywane do uproszczonych modeli matematycznych opisujących procesy przenoszenia. Natomiast metody elementów skończonych oraz metody objętości skończonych bazują na odpowiednio zmodyfikowanych równaniach przenoszenia.

Metoda elementów skończonych czerpie z metod Galerkina i pokrewnych do obliczenia równań w węzłach siatki numerycznej. Metoda objętości skończonych wykorzystuje zmodyfikowane równania bilansowe, rozwiązywane metodami numerycznymi w skończonych komórkach siatki numerycznej. Wszystkie trzy podejścia numeryczne pozwalają otrzymać rozwiązanie, jeżeli odpowiednio określone zostały warunki początkowe i brzegowe.

W przepływie burzliwym do opisu ruchu wykorzystuje się równania Naviera-Stokesa, przekształcając je przy pomocy hipotezy uśredniania czasowego oraz koncepcji Reynoldsa. Dzięki temu bilans pędu w tego rodzaju przepływach modyfikuje się do równań znanych pod akronimem RANS (Reynolds Averaged

³ R. B. Bird, W. E. Stewart, E. N. Lightfoot, *Transport Phenomena*, dz. cyt.

Navier Stokes)⁴. Ich postać dla płynu o stałej gęstości może być wyrażona matematycznie przez poniższy układ równań:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\overline{u_x}) + \frac{\partial}{\partial y}(\overline{u_y}) + \frac{\partial}{\partial z}(\overline{u_z}) = 0 \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{u_x}}{\partial t} + \overline{u_x} \frac{\partial \overline{u_x}}{\partial x} + \overline{u_y} \frac{\partial \overline{u_x}}{\partial y} + \overline{u_z} \frac{\partial \overline{u_x}}{\partial z} = g_x - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} - \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial \overline{\tau_{xx}}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\tau_{yx}}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{\tau_{zx}}}{\partial z} \right] + \\ - \frac{\partial}{\partial x}(\overline{u'_x u'_x}) - \frac{\partial}{\partial y}(\overline{u'_y u'_x}) - \frac{\partial}{\partial z}(\overline{u'_z u'_x}) \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{u_y}}{\partial t} + \overline{u_x} \frac{\partial \overline{u_y}}{\partial x} + \overline{u_y} \frac{\partial \overline{u_y}}{\partial y} + \overline{u_z} \frac{\partial \overline{u_y}}{\partial z} = g_y - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial y} - \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial \overline{\tau_{xy}}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\tau_{yy}}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{\tau_{zy}}}{\partial z} \right] + \\ - \frac{\partial}{\partial x}(\overline{u'_x u'_y}) - \frac{\partial}{\partial y}(\overline{u'_y u'_y}) - \frac{\partial}{\partial z}(\overline{u'_z u'_y}) \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \overline{u_z}}{\partial t} + \overline{u_x} \frac{\partial \overline{u_z}}{\partial x} + \overline{u_y} \frac{\partial \overline{u_z}}{\partial y} + \overline{u_z} \frac{\partial \overline{u_z}}{\partial z} = g_z - \frac{1}{\rho} \frac{\partial \bar{p}}{\partial z} - \frac{1}{\rho} \left[\frac{\partial \overline{\tau_{xz}}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\tau_{yz}}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{\tau_{zz}}}{\partial z} \right] + \\ - \frac{\partial}{\partial x}(\overline{u'_x u'_z}) - \frac{\partial}{\partial y}(\overline{u'_y u'_z}) - \frac{\partial}{\partial z}(\overline{u'_z u'_z}) \end{aligned} \quad (11)$$

Równania (9–11) określane są akronimem RANS, natomiast równanie (8) to równanie ciągłości w przepływach burzliwych przy stałej gęstości płynu. Problem z rozwiązaniem równań (8–11) wynika z faktu ich niedomknięcia po wykonanej modyfikacji, tzn. mamy więcej niewiadomych niż równań. Problem zamknięcia równań RANS jest szeroko omawiany i opisywany w mechanice płynów lepkich. Doczekał się on sporej liczby publikacji w wielu dziedzinach naukowych. W przeważającej większości problemów rzeczywistych rozpraszanie zanieczyszczeń odbywa się podczas przepływów burzliwych. Tym samym opis transportu masy w przepływie turbulentnym wymaga rozwiązania problemu zamknięcia układu (8–11). Dodatkowe człony w równaniach (9–11) nazwano naprężeniami Reynoldsa i są one źródłem intensyfikacji procesów przenoszenia pędu. Jedną z pierwszych prób zamknięcia równań RANS była koncepcja drogi mieszania zaproponowana przez Prandtla⁵. Opiera się ona na pojęciu drogi mieszania ℓ , która jest wielkością zależną od przepływu, geometrii oraz właściwości fizykochemicznych płynu. Zgodnie z tą koncepcją naprężenia Reynoldsa $\overline{u'_x u'_y}$ mogą być zapisane w postaci:

$$\overline{u'_x u'_y} = -\rho \ell^2 \left| \frac{\partial \overline{u_x}}{\partial x} \right| \frac{\partial \overline{u_x}}{\partial x} \quad (12)$$

⁴ J. W. Elsner, Turbulencja przepływów..., dz. cyt.

⁵ L. Prandtl, *Dynamika przepływów*, PWN, Warszawa 1956.

Koncepcja drogi mieszania uzależnia wartość naprężeń burzliwych od gradientu prędkości średniej. Dzięki temu do zamknięcia układu równań (8–11) wymagane jest określenie funkcji opisującej drogę mieszania ℓ . Koncepcja Prandtla pozwoliła uzależnić przepływ burzliwy od gradientów prędkości średniej, jednakże opis matematyczny drogi mieszania okazał się bardzo przybliżony. Dużo lepsze wyniki w opisie matematycznym ww. przepływu wprowadziła hipoteza Boussinesq’a, dzięki której do bilansu pędu w przepływach turbulentnych wprowadzono pojęcie lepkości burzliwej ν_T :

$$-\overline{u'_x u'_y} = \nu_T \left(\frac{\partial \overline{u}_x}{\partial y} + \frac{\partial \overline{u}_y}{\partial x} \right) \quad (13)$$

Wykorzystanie koncepcji lepkości burzliwej, która jest miarą intensywności turbulencji w układzie, pozwala przesunąć problem zamknięcia układu równań RANS w kierunku określenia tej wielkości. Podział hipotez zamykających skupia się głównie na różnicach w opisie matematycznym lepkości burzliwej od pola prędkości średniej w płynie. Z punktu widzenia modelowania matematycznego dyspersji zanieczyszczeń głównym zadaniem jest poprawny wybór hipotezy zamykającej układ RANS. Przez poprawność rozumie się taką hipotezę, która z najmniejszym możliwym błędem opisuje rzeczywisty rozkład stężenia wplynie. Modele matematyczne pozwalające zamknąć ww. układ dzielą się w zależności od liczby równań różniczkowych cząstkowych, jakie należy dopisać do układu (8–11), aby umożliwić jego rozwiązanie.

Do najpopularniejszych hipotez zamykających należą dwa modele: k - ε i k - ω . Składają się one z dwóch dodatkowych równań różniczkowych cząstkowych, wobec czego opis pola prędkości w przepływie burzliwym wymaga obliczenia sześciu równań różniczkowych cząstkowych. Modele te dość dobrze zgadzają się z opisem pola prędkości w rzeczywistych przypadkach, a wymagają mniej nakładów obliczeniowych niż modele wyższych rzędów. Z kolei modele jednorównaniowe nie dość dokładnie opisują problem przepływu, wobec tego nie będą tu prezentowane. Ciekawą grupą modeli zamykających są modele LES (Large Eddy Simulations), które mogą być wykorzystane zarówno do opisu transportu pędu w przepływach laminarnych, jak i burzliwych. Cecha ta okazuje się cenna w przypadku problemu z określeniem rodzaju przepływu. Niestety hipotezy zamykające oparte na modelu LES muszą być liczone w procesie nieustalonym – nawet jeśli emisja źródła masy nie zależy od czasu. Wpływa to na wydłużenie czasu potrzebnego na obliczenie modelu w siatce numerycznej. Z drugiej strony hipotezy zamykające nadają się do opisu zarówno przepływów laminarnych, jak i burzliwych, co jest ich niewątpliwą zaletą podczas modelowania dyspersji zanieczyszczeń. W tych procesach dość trudno rozgraniczyć rodzaj przepływu płynu.

Równanie opisujące turbulentny przepływ masy i -tego składnika może być wprowadzone podobnie jak równania RANS. W tym celu należy zastosować hipotezę Reynoldsa i uśrednienie czasowe do równania (2) stanowiącego bilans masy i -tego składnika:

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\bar{C}_l)}{\partial t} + \bar{u}_x \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial x} + \bar{u}_y \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial y} + \bar{u}_z \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial z} - \operatorname{div} \left(D_{ij} \operatorname{grad}(\bar{C}_l) \right) + \frac{\partial}{\partial x} (\bar{u}'_x \bar{C}'_l) + \\ + \frac{\partial}{\partial y} (\bar{u}'_y \bar{C}'_l) + \frac{\partial}{\partial z} (\bar{u}'_z \bar{C}'_l) = 0 \end{aligned} \quad (14)$$

Podobnie jak w przypadku bilansu pędu, w bilansie masy opis transportu w przepływach burzliwych jest niezamknięty. Do rozwiązania numerycznego równania (14) wymagane jest określenie dodatkowych zależności, które modelują burzliwy transport masy. W analogii do naprężeń burzliwych dodatkowe człony noszą nazwę dyfuzji burzliwej. W odróżnieniu od molekularnej dyfuzja burzliwa jest zależna nie tylko od własności fizykochemicznych płynu, ale również od geometrii układu i pola prędkości. Z punktu widzenia transportu zanieczyszczeń w przyrodzie przeważa przenoszenie masy na skutek dyfuzji burzliwej. Turbulentny transport masy (gęstość strumienia masy) można wyrazić zależnością:

$$\bar{u}'_x \bar{C}'_l = -D_{Tx} \left(\frac{\partial \bar{C}_l}{\partial x} \right) \quad (15)$$

Jak już zostało wspomniane, współczynnik dyfuzji burzliwej D_{Tx} zależy od pola prędkości, wobec tego jego wartość powinna być zależna od składowej prędkości, w kierunku której następuje turbulentny transport masy. W rzeczywistości w rozwiniętym przepływie burzliwym fluktuacje prędkości zachodzą we wszystkich trzech kierunkach i są tym większe, im intensywniejszy jest przepływ burzliwy. Wobec tego, przy dużych wartościach liczb Reynoldsa opis matematyczny tego procesu powinien uwzględniać wpływ fluktuacji prędkości na wartości D_{Tx} . I tu pojawiają się problemy z obliczeniem równań modelowych, ponieważ rozwiązanie analityczne nie istnieje. Można jedynie obliczać numerycznie równania różniczkowe, pamiętając o tym, że jest to rozwiązanie przybliżone. Za pomocą metod numerycznych można obliczyć układ (8–11) wraz z równaniami zamykającymi bilans pędu oraz równaniem (14), które również wymaga zamknięcia. Dla rozwiązania ww. układów równań konieczna jest obszerna wiedza z zakresu informatyki, metod numerycznych, jak i zrozumienie problemów przenoszenia masy i pędu. Wydaje się to niezbędne, aby otrzymane rozwiązanie numeryczne spełniało z założoną dokładnością pierwotny układ równań różniczkowych. W przeciwnym razie będziemy mieć do czynienia jedynie z nieudaną symulacją, która nie opisuje rzeczywistego procesu. W ostatnich latach obserwuje się wzrost zainteresowania metodami numerycznymi pozwalającymi całkować ww. układy równań. Kierunek ten da się uzasadnić głównie rozwojem techniki komputerowej, która umożliwia rozwiązywanie dużych układów równań, nawet z pomocą komputerów osobistych. Mechanika płynów korzysta z tego rozwoju poprzez powstanie stosunkowo młodej dziedziny o nazwie **obliczeniowa mechanika płynów** CFD (ang. Computational Fluid Dynamics). Dziedzina ta zajmuje się obliczeniem numerycznym równań transportu pędu, energii i masy przy pomocy metod numerycznych. Rozwiązania reali-

zowane są z wykorzystaniem siatek numerycznych, nakładanych na analizowany obszar. Modelowanie matematyczne pola prędkości wraz z polem stężenia pozwala na opis matematyczny zjawiska przenoszenia w znacznie rozwiniętej formie. Dzięki temu metody te aktualnie stanowią jedno z najlepszych narzędzi do opisu procesu transportu masy w przepływach burzliwych. Wprowadzając koncepcje dyfuzyjności burzliwej do równania (14), otrzymuje się model matematyczny opisujący turbulentny transport masy:

$$\frac{\partial(\bar{C}_l)}{\partial t} + \bar{u}_x \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial x} + \bar{u}_y \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial x} + \bar{u}_z \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial z} - \text{div} \left((D_{ij} + D_{ij}^{turb}) \text{grad}(\bar{C}_l) \right) = 0 \quad (16)$$

Jedną z pierwszych prób zamknięcia równania (16) było wprowadzenie współczynnika dyspersji masy E , który stanowił miarę efektywnego współczynnika przenoszenia masy. Współczynnik dyspersji masy opisany równaniem (17) jest zależny nie tylko od właściwości fizykochemicznych substancji, ale też od pola prędkości w płynie (podobnie jak lepkość burzliwa). Problem określenia współczynnika dyfuzji burzliwej przesunął się do obszaru opisu współczynnika dyfuzji efektywnej.

$$(D_{ij} + D_{ij}^{turb}) = E_{ij} \quad (17)$$

W rozwiniętym przepływie burzliwym mechanizmem decydującym o szybkości transportu masy jest dyfuzja burzliwa, dlatego większość modeli opisujących transport zanieczyszczeń korzysta z następującej zależności:

Jeżeli $D_{ij}^{turb} \gg D_{ij}$, to współczynnik dyspersji może być zapisany w następujący sposób:

$$E_{ij} = D_{ij}^{turb} \quad (18)$$

Dzięki temu równanie transportu masy i -tego składnika w przepływach burzliwym może być zmodyfikowane do postaci podobnej jak przy przepływach laminarnych [zob. równanie (19)].

$$\frac{\partial(\bar{C}_l)}{\partial t} + \bar{u}_x \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial x} + \bar{u}_y \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial x} + \bar{u}_z \frac{\partial \bar{C}_l}{\partial z} - \text{div} \left(E_{ij} \text{grad}(\bar{C}_l) \right) = 0 \quad (19)$$

Wydawać by się mogło, że problem z opisem matematycznym burzliwego transportu masy został rozwiązany przy pomocy równania (19). Wynika to z jego pozornego podobieństwa do równania (2). Niemniej jednak równanie (19) jest niezamknięte, ponieważ brakuje w nim formuły matematycznej definiującej współczynnik dyspersji masy E_{ij} . Jak zostało już wcześniej powiedziane, jest on miarą nie tyle samej prędkości płynu, co uśrednionego iloczynu fluktuacji składowych prędkości i fluktuacji stężenia. W tym tkwi główny problem z opisem matematycznym dyspersji zanieczyszczeń – wielkość definiująca transport burzliwy jest wektorem zależnym zarówno od przestrzeni, jak i czasu. W rozwiniętym przepływie burzliwym jej wartości podlegają ciągłym i chaotycznym zmianom,

co bardzo utrudnia opis procesu. W związku z tym określenie współczynników dyspersji masy na ogół wiąże się z przeprowadzeniem pomiarów eksperymentalnych w skali laboratoryjnej, a następnie z uogólnieniem wyników przy pomocy analizy wymiarowej. Współczynniki dyspersji masy mogą być określone na podstawie korelacji literaturowych. W tych korelacjach współczynnik dyspersji zależy od właściwości fizykochemicznych, geometrycznych i hydrodynamicznych. Do właściwości fizykochemicznych można zaliczyć lepkość i gęstość płynu. Wiele korelacji literaturowych pomija wpływ współczynnika dyfuzji molekularnej na efektywny współczynnik dyspersji masy. Powodowane to jest jego dużo mniejszymi wartościami w porównaniu ze współczynnikiem dyspersji masy. Z punktu widzenia właściwości hydrodynamicznych, korelacje literaturowe są opracowane w zależności od średniej prędkości płynu związanej z głównym kierunkiem przepływu. Z jednej strony takie podejścia pozwala modelować matematycznie transport masy tylko przy pomocy równania (19), z drugiej traci się możliwość opisu matematycznego dyfuzji burzliwej w pozostałych dwóch kierunkach. Ostatni parametr, jaki występuje w korelacjach literaturowych, to wymiary geometryczne układu. Korzystanie z korelacji doświadczalnych wymaga pełnego podobieństwa obu procesów. Spełnienie tego wymagania może być niekiedy trudne, dlatego należy zdawać sobie sprawę z pewnych ograniczeń w stosowaniu równań korelacyjnych na współczynnik dyspersji masy. Zastosowanie ich do przepływu, w którym podobieństwo obu procesów nie jest spełnione, może skutkować sporą rozbieżnością między wynikami numerycznymi a rzeczywistym procesem. Na ogół opracowywane korelacje wyrażone są w postaci liczb bezwymiarowych, takich jak liczba Bodensteina i liczba Reynoldsa oraz inwariantów podobieństwa i_D . Korelacje literaturowe opisujące proces dyfuzji burzliwej w zamkniętych układach można znaleźć w pracach⁶ w postaci zależności:

$$Pe = \frac{uL}{E} = f(Re, i_D) \quad (20)$$

Część autorów do opisu współczynnika dyspersji masy wykorzystuje współczynnik dyfuzji molekularnej i tworzy korelacje w oparciu o liczbę Reynoldsa i liczbę Schmidta⁷:

$$Pe = \frac{uL}{E} = f(Re, Sc, i_D) \quad (21)$$

Należy jasno powiedzieć, że korelacje opisujące burzliwy transport masy w atmosferze mogą być określone przy pomocy tych samych liczb bezwymiarowych, co podane poniżej (Bo, Re, Sc). Jednakże wśród badaczy zajmujących się modelo-

⁶ T. K. Sherwood, R. L. Pigford, C. R. Wilke, *Mass transfer*, Mc Graw-Hill, 1975; E. Molga, *Procesy adsorpcji reaktywnej*, WNT, Warszawa 2008.

⁷ H. A. Kramers, K. R. Westerterp, *Elements of chemical reactor design and operation*, Netherlands University Press, Amsterdam 1963.

waniem dyspersji zanieczyszczeń w atmosferze ten rodzaj opisu problemu nie przyjął się. Wśród tych prac naukowych korzysta się z uproszczenia równań korelacyjnych na wartości E . W tym celu stosuje się wykładniczą zależność współczynnika dyspersji masy od prędkości płynu. Głównie jest to spowodowane sposobem opisu transportu, w którym fazę ciągłą stanowi powietrze. Z uwagi na niewielkie stężenia fazy rozproszonej (zanieczyszczenia), parametry fizykochemiczne mieszaniny są znane i mogą być opisane przy pomocy właściwości fizykochemicznych powietrza. Dzięki temu równania (20–21) zazwyczaj przedstawiane są jako funkcja prędkości średniej płynu:

$$E = Au^B \quad (22)$$

W równaniu (22) parametry A i B oznaczają stałe modelowe. Taki sposób opisu jest typowy przy modelowaniu dyspersji zanieczyszczeń w atmosferze⁸. Powyższe podejście umożliwia modelowanie procesu z wykorzystaniem tylko równania (19). W tym celu zakłada się stałe pole prędkości płynu wzdłuż głównego kierunku przepływu wiatru. Niestety takie ujęcie nie pozwala na modelowanie transportu pędu w procesie. Może to mieć spore znaczenie w miejscu rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń. W takim przypadku założenie stałej prędkości zanieczyszczeń równej prędkości wiatru oraz pokrywania się kierunku ruchu obu substancji może prowadzić do niezgodności rozwiązania matematycznego z rzeczywistym procesem. Zjawisko konwekcji masy w jednym kierunku opisuje się matematycznie jako dominujące. Następnie dodaje się dla pozostałych kierunków (innych niż transport konwekcyjny) dyspersyjne rozpraszanie masy, które opisuje się za pomocą zależności (21–22). Takie podejście do modelowania matematycznego zostało wymuszone problemami z rozwiązaniem numerycznym pełnego modelu transportu pędu, masy i energii.

4. Modelowanie matematyczne procesu transportu zanieczyszczeń

Dla opisu procesu przenoszenia zanieczyszczeń w atmosferze istotny jest dobry model matematyczny, który pozwoli na przewidywanie rozkładu stężeń substancji niebezpiecznych w zależności od warunków emisji zanieczyszczeń. Ważne jest określenie wpływu infrastruktury otaczającej miejsce emisji oraz warunków meteorologicznych na rozprzestrzenianie się substancji niebezpiecznych w atmosferze. Trudno sobie wyobrazić pomiary doświadczalne rozprzestrzeniania się niebezpiecznych związków chemicznych wykonywane na obszarze gęsto zaludnionym. W związku z tym modelowanie procesu rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń należy do głównych metod wykorzystywanych do przewidywania rozkładu stężeń

⁸ O. Roberts, *The Theoretical Scattering of Smoke in a Turbulent Atmosphere*, „Proceedings Royal Society A.” 1923, 104(728), <https://doi.org/10.1098/rspa.1923.0132>; O.G. Sutton, G.C. Clarke, *A theory of eddy diffusion in the atmosphere*, „Proceedings Royal Society A.” 1931, 135(826), <https://doi.org/10.1098/rspa.1932.0025>.

substancji niebezpiecznych, stanowi także podstawę przy wydawaniu pozwoleń na emisję zanieczyszczeń. Podział modeli matematycznych stosowanych do opisu powyższego zagadnienia został wymuszony przez efektywność obliczeń wykonywanych z użyciem tych modeli. Z uwagi na spory problem z opisem zmian warunków atmosferycznych wprowadzono pewne warunki standardowe dla różnych klas warunków pogodowych. W oparciu o warunki pogodowe zdefiniowane zostały zależności określające zmianę prędkości wiatru wraz z wysokością oraz zmiany temperatur wraz z wysokością. Opracowano 36 różnych kombinacji opisujących możliwe warunki atmosferyczne, które mają wpływ na proces rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń. Dzięki temu modelowanie warunków pogodowych jest dużo bardziej zbliżone do rzeczywistych, a zatem wpływa na dokładniejsze przewidywania rozkładów stężenia.

Modelowanie matematyczne zjawiska dyspersji

Modelowanie matematyczne zjawiska dyspersji masy można podzielić na cztery grupy. W pierwszej grupie znajdują się modele matematyczne oparte na rozwiązaniach analitycznych uproszczonego równania różniczkowego cząstkowego. Do tej grupy można zaliczyć model smugi Gaussa⁹ oraz kilka innych rozwiązań analitycznych równania (19)¹⁰. Sukces tej grupy modeli należy wiązać z analityczną postacią uzyskiwanych rozwiązań. Pozwalają one opisać rozkład stężenia substancji w czasoprzestrzeni w postaci funkcji analitycznej. Nie trzeba prowadzić czasochłonnych obliczeń numerycznych za pomocą komputerów o dużej mocy, wystarczy tylko podstawić dane do wzoru i otrzymuje się wynik. Zatem sukces tych metod, bazujących na dwóch publikacjach sprzed ponad osiemdziesięciu lat¹¹ nie powinien dziwić.

Do drugiej grupy modeli można zaliczyć modele numeryczne oparte na bilansie objętości kontrolnej. Modele te noszą nazwę metod siatkowych lub metod eulrowskich. Pozwalają one na bilans pędu, masy i energii w rozpatrywanej przestrzeni modelu numerycznego. Bazują na metodzie elementów skończonych lub metodzie objętości skończonych. W tym celu buduje się w rozpatrywanym obszarze siatkę numeryczną, w węzłach której obliczane są równania modelowe. Takie podejście pozwala symulować wiry burzliwe wraz z opisem transportu masy w przepływach burzliwych. Na ogół ich podstawę stanowią pojęcia koncepcji lepkości burzliwej oraz koncepcji turbulentnej liczby Schmidta. Głównym ograniczeniem omawianych metod jest duże zapotrzebowanie na moc obliczeniową oraz spore wymagania co do czasu potrzebnego na uzyskanie rozkładu prędkości w modelowanym obszarze. Rozwój tych metod zawdzięcza się postępowi technologicznemu w dziedzinie procesorów. Są one ciekawą alternatywą dla pozostałych metod matematycznych opisujących rozprzestrzenianie się zanieczyszczeń.

⁹ O. Roberts, *The Theoretical Scattering of Smoke in a Turbulent...*, dz. cyt.

¹⁰ D. L. Ermak, *An analytical model for air pollutant transport and deposition from a point source*, „Atmospheric Environment” 1977, 11(3), 231–237.

¹¹ O. Roberts, dz. cyt.; O.G. Sutton, G.C. Clarke, dz. cyt.

Do trzeciej grupy można zaliczyć metody oparte na podejściu Lagrange’a tzn. bilansie pędu i energii przy pomocy ruchu pseudocząstek. W tej metodzie płyn reprezentuje pewna skończona liczba cząstek, których rozprzestrzenianie modeluje się przy pomocy praw dynamiki Newtona. Możliwe interakcje między cząsteczkami przedstawia się za pomocą zależności matematycznych opisujących zderzenia cząstek między sobą. Świetnie nadają się do modelowania transportu pyłów w powietrzu, ponieważ lepiej niż metody siatkowe odzwierciedlają rzeczywiste zachowania drobin ciała stałego w powietrzu. Niemniej jednak, podobnie jak metody eulerowskie, również i te wymagają sporej mocy obliczeniowej. Tak jak metody siatkowe, ograniczone rozmiarami siatki, mogą opisywać pewną skończoną liczbę pseudocząstek.

Do ostatniej grupy zaliczyć można modele receptorowe. Pozwalają one na analizę odwrotną, tzn. znając rozkład stężeń, modele te pozwalają znaleźć miejsce emisji zanieczyszczeń powietrza. Są one szeroko wykorzystywane podczas analizy przekroczonych stężeń substancji szkodliwych zmierzonych przez stacje pomiarowe.

Dwuwymiarowy ustalony model analityczny dyspersji zanieczyszczeń

Jednymi z najprostszych modeli transportu masy, wykorzystywanych do opisu procesu dyspersji zanieczyszczeń są modele oparte na uproszczeniach równania (2) lub równania (19). W tym miejscu przedstawiony zostanie schemat postępowania prowadzący do wyprowadzenia dwuwymiarowego modelu transportu zanieczyszczeń, emitowanych przez źródło punktowe w sposób ciągły. Należy zaznaczyć, że modelowane będzie rozpraszanie jednego składnika A emitowanego ze stałą prędkością. Warunki atmosferyczne w rozpatrywanym obszarze są takie, że transport odbywa się w zakresie przepływu laminarnego. Równanie transportu masy w takim przypadku wyraża się równaniem:

$$u_x \frac{\partial C_A}{\partial x} + u_y \frac{\partial C_A}{\partial y} + u_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = D_{A-air} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right) \quad (23)$$

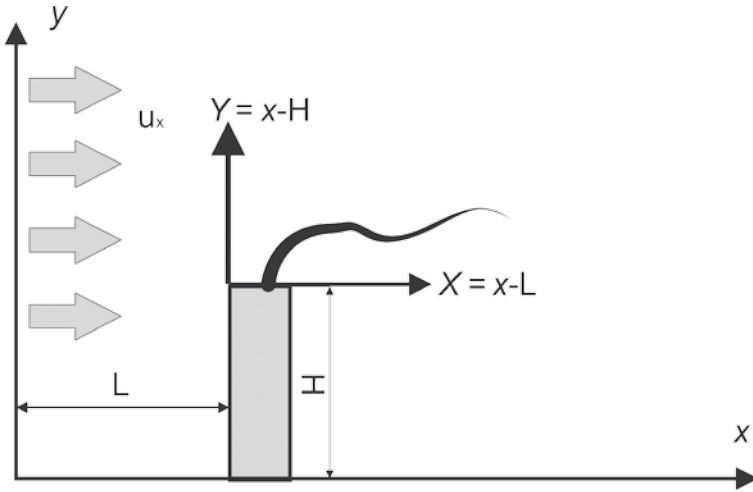
Założenie o ruchu laminarnym powietrza sprawia, że przy transporcie pędu znaczenie ma ta składowa prędkości, która pokrywa się z głównym kierunkiem ruchu. Wobec tego zakłada się, że $\mathbf{u}_y = \mathbf{u}_z = \mathbf{0}$, a zatem konwekcyjny transport masy odbywa się tylko w kierunku x . Dzięki temu dyfuzyjny transport masy w kierunku x będzie dużo mniej efektywny niż transport konwekcyjny:

$$u_x \frac{\partial C_A}{\partial x} \gg D_{A-air} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial x^2} \right) \quad (24)$$

Konsekwencją równania (24) jest przyjęcie, że gęstość strumienia dyfuzji w kierunku x jest równa zero. Ostatnim uproszczeniem równania (23) jest założenie o pomijalności mechanizmu dyfuzji masy w kierunku z , przez co otrzymujemy model matematyczny procesu przenoszenia odnoszący się do problemu dwuwymiarowego:

$$u_x \frac{\partial C_A}{\partial x} = D_{A-air} \frac{\partial^2 C_A}{\partial y^2} \quad (25)$$

Wyzerowanie strumienia dyfuzji w kierunku z jest związane z potrzebą analitycznego rozwiązania równania bilansowego. Schemat problemu został zamieszczony na rycinie 3. Jak widać, źródło zanieczyszczeń umiejscowione jest na wysokości $y = H$. Źródło to emituje zanieczyszczenia ze stałą prędkością niezależnie od czasu, a stężenie zanieczyszczeń w miejscu emisji wynosi C_{A0} .



Ryc. 3. Schemat obrazujący dwuwymiarowy model transportu zanieczyszczeń emitowanych przez źródło punktowe

Źródło: Opracowanie własne.

Do równania (25) można dopisać trzy warunki brzegowe, które określają charakter opisywanego zjawiska.

$$C_A = 0 \text{ dla } x = L \quad (26)$$

$$C_A = C_{A0} \text{ dla } y = H \quad (27)$$

$$C_A = 0 \text{ dla } y \rightarrow \infty \quad (28)$$

Warunki (26–28) nie mogą bezpośrednio posłużyć do analitycznego rozwiązania równania (25), dlatego potrzeba zmodyfikować układ współrzędnych tak, jak zostało to pokazane na rycinie 3. Należy przesunąć układ współrzędnych tak, aby jego początek zaczynał się w miejscu emisji zanieczyszczeń. Wprowadzenie nowego układu współrzędnych (X , Y) wymaga naniesienia nowych zmiennych $X = x - L$ oraz $Y = y - H$. Dzięki temu otrzymuje się przesunięcie układu współrzędnych (x , y) tak, że początek nowego układu współrzędnych (X , Y) przypada w punkcie uwolnienia się substancji.

Przy pomocy nowych współrzędnych równanie różniczkowe opisujące ruch masy można zapisać w postaci zależności danej równaniem (29).

$$u_x \frac{\partial C_A}{\partial X} = D_{A-air} \frac{\partial^2 C_A}{\partial Y^2} \quad (29)$$

Warunki brzegowe dla nowego równania mają postać:

$$C_A = 0 \text{ dla } X = 0 \quad (30)$$

$$C_A = C_{A0} \text{ dla } Y = 0 \quad (31)$$

$$C_A = 0 \text{ dla } Y \rightarrow \infty \quad (32)$$

Dzięki modyfikacji układu współrzędnych równanie (29) ma rozwiązanie analityczne. Sposób jego otrzymania można znaleźć w pracy R. B. Birda, W.E. Stewarta, E.N. Lightfoota¹². Rozwiązanie równania (29) wraz z warunkami brzegowymi (30–32) zostanie zaprezentowane w niniejszym rozdziale, ponieważ stanowi cenne źródło informacji o modelowaniu zagadnień transportu masy.

Wprowadza się dwie zmienne Φ i η :

$$\eta = \frac{Y}{\sqrt{4 \frac{D_{A-air} X}{u_x}}} \quad (33)$$

$$\Phi(X, Y) = \frac{C_A(X, Y)}{C_{A0}} \quad (34)$$

Za pomocą nowych zmiennych można zmodyfikować równanie różniczkowe cząstkowe drugiego rzędu do równania różniczkowego zwyczajnego. Równanie różniczkowe zwyczajne znacznie łatwiej rozwiązać niż równanie różniczkowe cząstkowe. Jedynym problemem są warunki brzegowe, ponieważ modyfikując równanie (29), otrzymuje się równanie różniczkowe zwyczajne drugiego rzędu. Do jego rozwiązania wystarczą tylko dwa warunki brzegowe, a równanie (29) posiada trzy

¹² R. B. Bird, W.E. Stewart, E.N. Lightfoot, Transport Phenomena..., dz. cyt.

warunki brzegowe. Zapobiegając niejednoznaczności rozwiązania, przesunięty został układ współrzędnych i – jak to zostanie pokazane poniżej – dwa warunki brzegowe w przestrzeni η zmodyfikują się do jednej i tej samej zależności. Pozwoli to na rozwiązanie równania (29). Poniżej zaprezentowane zostało całe postępowanie pozwalające rozwiązać równanie (29) wraz z warunkami (30–32). Pochodne cząstkowe w przestrzeni (X, Y) muszą być wyrażone pochodnymi w przestrzeni η . W tym celu wprowadza się wyrażenia:

$$\frac{\partial \Phi}{\partial X} = \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial X} = -\left(\frac{\eta}{2X}\right) \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \quad (35)$$

$$\frac{\partial \Phi}{\partial Y} = \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial Y} = \left(\frac{1}{\sqrt{4 \frac{D_{A-air}}{u_x} X}}\right) \cdot \frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \quad (36)$$

$$\frac{\partial^2 \Phi}{\partial Y^2} = \frac{\partial}{\partial Y} \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \eta} \cdot \frac{\partial \eta}{\partial Y} \right) = \left(\frac{1}{4 \frac{D_{A-air}}{u_x} X} \right) \cdot \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \eta^2} \quad (37)$$

Wstawienie zależności (35–37) do równania (29) pozwala na modyfikację równania do następującej postaci:

$$\frac{d\Phi^2}{d\eta^2} + 2\eta \frac{d\Phi}{d\eta} = 0 \quad (38)$$

Warunki brzegowe dla nowych zmiennych przybierają postać:

$$X = 0 \quad \eta \rightarrow \infty \quad \Phi = 0 \quad (39)$$

$$Y = 0 \quad \eta = 0 \quad \Phi = 1 \quad (40)$$

$$Y \rightarrow \infty \quad \eta \rightarrow \infty \quad \Phi = 0 \quad (41)$$

Jak widać, po modyfikacji warunki brzegowe (39) i (41) oznaczają identyczną zależność, dzięki czemu równanie (38) może być jednoznacznie rozwiązane. W związku z tym podstawia się nową zmienną $\Psi(\eta)$:

$$\frac{d\Psi}{d\eta} = \Psi(\eta) \quad (42)$$

Wprowadzenie zależności (42) do równania (38) pozwala na obniżenie rzędu równania różniczkowego zwyczajnego do postaci:

$$\frac{d\Psi}{d\eta} + 2\Psi = 0 \quad (43)$$

Równanie (43) może być obliczone analitycznie przez rozdzielanie zmiennych. Poniżej zaprezentowane zostało postępowanie pozwalające na rozwiązanie równania (43) w zależności od parametru η .

$$\frac{d\Psi}{\Psi} = -2\eta d\eta \quad (44)$$

$$\ln(\Psi(\eta)) = Ae^{-\eta^2} \quad (45)$$

Korzystając z zależności (42), można obliczyć ogólne rozwiązanie równania (38).

$$\frac{d\Phi}{d\eta} = Ae^{-\eta^2} \quad (46)$$

$$\Phi(\eta) = A \int_0^\eta e^{-\eta^2} d\eta + B \quad (47)$$

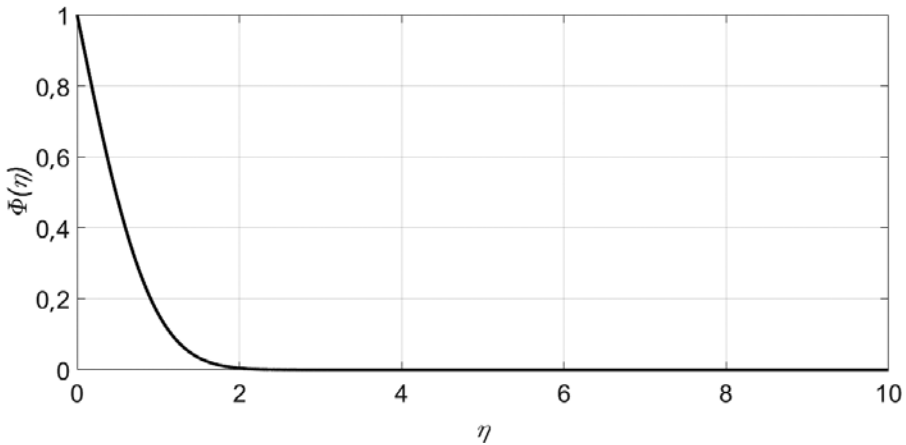
Wykorzystanie warunków (39–41) pozwala ustalić dwie stałe całkowania (A , B) w równaniu (47). Prowadzi to do określenia rozkładu bezwymiarowego stężenia substancji, która rozprzestrzenia się przez dyfuzję i konwekcję. Rozwiązaniem jest dopełnienie całki błędu:

$$\Phi(\eta) = 1 - \operatorname{erf}(\eta) \quad (48)$$

$$\frac{C_A(X, Y)}{C_{A0}} = 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{|Y|}{\sqrt{\left(4 \frac{D_{A-air}}{u_x} X\right)}}\right) \quad (49)$$

Równanie (49) jest rozwiązaniem analitycznym problemu dyspersji masy w atmosferze opisanym przy pomocy równania (29) wraz z warunkami (30–32). Moduł przy zmiennej Y jest spowodowany przesunięciem układu współrzędnych. Zmienna Y może przyjmować wartości mniejsze od zera ($Y \geq -H$ i $Y \rightarrow +\infty$). Daje ono możliwość określenia zmian stężenia substancji w zależności od odległości od źródła emisji. Dużą zaletą wyrażenia (49) jest jego analityczna forma, ponieważ pozwala niemalże natychmiast określić rozkłady stężeń bez czasochłonnych obliczeń numerycznych. Na rycinie 4 przedstawiony został kształt krzywej opisanej funkcją (zob. równanie 49) w zależności od bezwymiarowej zmiennej przestrzennej η . Jak widać, funkcja $\Phi(\eta)$ bardzo szybko zbiega do zera w zależności od zmiennej η . Dla wartości zmiennej przestrzennej η większej od 3 wartości bezwymiarowego stężenia są praktycznie równe zeru. Z definicji zmiennej η wynika, że dąży ona do nieskończoności w dwóch przypadkach. Po pierwsze – gdy zmienna Y również dąży do nieskończoności, po drugie – kiedy zmienna $X = 0$. Zatem im wyżej od źródła zanieczyszczeń, tym wartości stężenia bardzo szybko zbiegają do zera. Analiza zmiennej X nie pozwala wysnuć podobnych wniosków z kształtu krzywej (zob. rycina 4). W warunkach brzegowych założone zostało, że w punkcie $X = 0$ stężenie powinno wynosić $\Phi = 0$, a zatem funkcja spełnia ten wa-

runek tzn. dla wartości η dążącej do nieskończoności również zbiega do zera. Analiza fizyczna problemu pozwala potwierdzić słuszność tego warunku, jeżeli płyn porusza się ze stałą prędkością u_x i jest to jedyna niezerowa składowa prędkości. Dyfuzja działa tylko w kierunku Y , wobec czego substancja nie może znaleźć się po drugiej stronie komina emitującego zanieczyszczenie – wymagałoby to od niej poruszania się w kierunku przeciwnym do przepływu wiatru. Przedstawiony powyżej model nadaje się do uproszczonego opisu ustalonego procesu rozpraszania zanieczyszczeń emitowanych przez źródło punktowe.



Ryc. 4. Rozkład bezwymiarowego stężenia substancji w zależności od zmiennej η

Źródło: Opracowanie własne.

Za pomocą równania (49) wyznacza się punkt w przestrzeni bezwymiarowej η , w którym stężenie bezwymiarowe będzie równe $\Phi = 0,001$, tzn. wartości stężenia będą tysiąckrotnie mniejsze niż wartości przy źródle emisji. Dzięki temu przy pomocy równania całkowitego (zob. zależność 49) można wyznaczyć numerycznie wartość bezwymiarowego położenia, dla którego stężenie będzie równe $\Phi = 0,001$. W tym konkretnym przypadku dyspersji masy opisaną modelem przedstawionym powyżej otrzymuje się wartość równą $\eta = 2,3267$. Wobec tego dla wartości η większych od 2,3267 stężenie zanieczyszczeń będzie tysiąc razy mniejsze niż w miejscu emisji. Z warunku brzegowego (41) wynika, iż w pobliżu źródła (małe wartości X) wraz ze wzrostem wysokości stężenie substancji bardzo szybko zbiega do zera. Kluczowe jest określenie, jak stężenie zmienia się w zależności od dużej odległości poziomej od źródła (duże wartości X). Analiza oparta na modelu bezwymiarowym pozwala uogólnić wyniki symulacji procesu bez wchodzenia we właściwości hydrodynamiczne (u_x), fizykochemiczne (D_{A-air}) oraz przestrzenne (X, Y). Określenie minimalnego stężenia w zależności od zmiennych wymiarowych pozwoli na oszacowanie emisji chmury zanieczyszczeń na podstawie modelu matematycznego opisanego równaniem (49). Korzystając z obliczonej bezwymiarowej odległości od źródła zanieczyszczeń ($\eta = 2,3267$), można wyznaczyć wzajemny wpływ

parametrów procesowych. Opierając się na zależnościach przedstawionych wcześniej, można napisać:

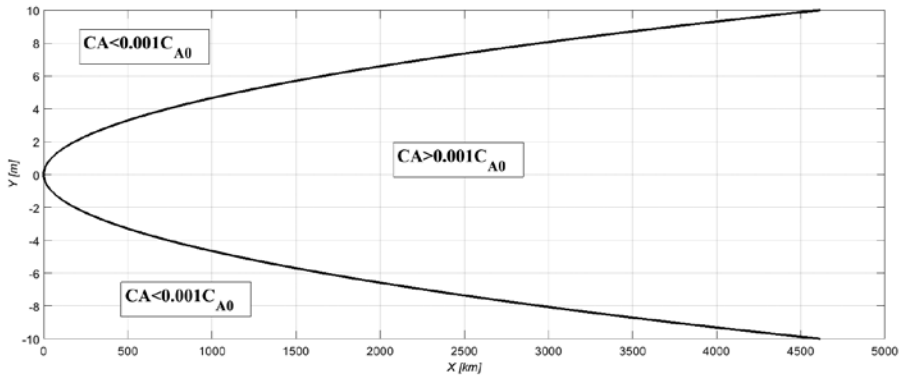
$$\eta = 2,3267 \quad (50)$$

$$\frac{|Y|}{\sqrt{\left(4 \frac{D_{A-air}}{u_x} X\right)}} = 2,3267 \quad (51)$$

$$\frac{Y^2}{5,4135} = 4 \frac{D_{A-air}}{u_x} X \quad (52)$$

$$X = \frac{u_x Y^2}{27,0675 D_{A-air}} \quad (53)$$

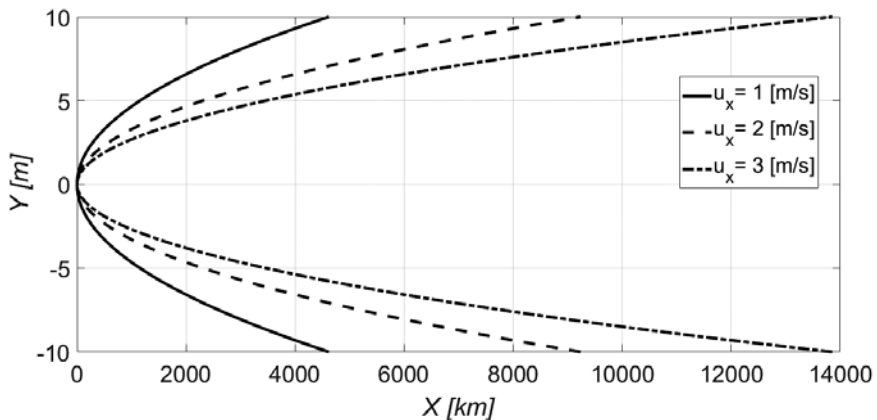
Korzystając z zależności (53) na ryc. 5 przedstawiony został kształt krzywej określającej graniczne stężenie substancji niebezpiecznej ($\Phi = 0,001$) w zależności od odległości od źródła emisji zanieczyszczeń. Do narysowania krzywej (zob. ryc. 5) wybrano prędkość wiatru równą $u_x = 1$ m/s, a współczynnik dyfuzji równy $D_{A-air} = 1,6 \cdot 10^{-5}$ m²/s. Punkt emisji zanieczyszczeń został ustawiony na wysokości równej $H = 10$ m. Jak wynika z ryciny 5, na znacznych wysokościach powyżej źródła emisji (duże wartości Y) stężenie składnika emitowanego przez komin rośnie wraz ze wzrostem zmiennej X . Oznacza to, że w znacznej odległości od źródła (duże wartości zmiennej X) stężenie może być bliskie stężeniu w punkcie emisji zanieczyszczeń. Miejsce emisji zanieczyszczeń jest ustawione na początku układu współrzędnych (X, Y). Za pomocą równania (53) można wysnuć kilka istotnych wniosków co do charakteru dyspersji masy ww. przypadku. Po pierwsze, zaproponowany model matematyczny pokazuje, że w bardzo dużych odległościach poziomych (zmienna X) od źródła dyfuzja spowoduje ujednolicenie średniego stężenia w przekroju poprzecznym do kierunku przepływu. Graniczną wartością będzie stężenie takie samo, jak w miejscu emisji [zob. warunki brzegowe (39) i (42)] do stężenia, którego wartość jest równa tej w punkcie emisji. Na pierwszy rzut oka jest to bardzo zaskakujący wniosek. Jednakże głębsza analiza problemu pokazuje, że z prawa zachowania masy składnika dyspergowanego w układzie wynika, iż otrzymane wyniki są poprawne. Źródło ciągle dostarcza substancji, która nie ulega reakcji. Substancja ta konwekcyjnie porusza się w kierunku poziomym w stosunku do źródła. Natomiast dyfuzja masy rozmywa składnik w kierunku prostopadłym do kierunku wiatru. Skoro dyfuzja prowadzi do wyrównania stężeń substancji, to w nieskończonej odległości od źródła stężenie musi być identyczne i równe – co do wartości – stężeniu przy źródle C_{A0} .



Ryc. 5. Rozkład w przestrzeni X, Y granicznego stężenia substancji niebezpiecznej $D_{A-air} = 16 \text{ mm}^2/\text{s}$, $u_x = 1 \text{ m/s}$, $H = 10 \text{ m}$

Źródło: Opracowanie własne.

Jak widać na rycinie 5, miejsce w którym stężenie przy powierzchni ziemi osiąga wartość graniczną ($\Phi > 0,001$), przypada w odległości ponad 4600 km od podstawy komina. Modelowanie matematyczne pozwala na symulowanie zagadnień w odniesieniu do wybranych mechanizmów, dzięki czemu możliwe jest określenie wpływu danego mechanizmu na proces. W pomiarach doświadczalnych wyizolowanie układu w tak dużej skali nie byłoby możliwe. Co ciekawe, wzrost prędkości wiatru powoduje zwiększanie się odległości przy powierzchni ziemi, w której stężenie przekroczy wartości ustalone jako minimalne. Wpływ prędkości na kształt krzywej granicznej został uwidoczniiony na rycinie 6.



Ryc. 6. Wpływ prędkości wiatru na kształt krzywej określającej graniczne stężenie ($\Phi = 0,001$) substancji

Źródło: Opracowanie własne.

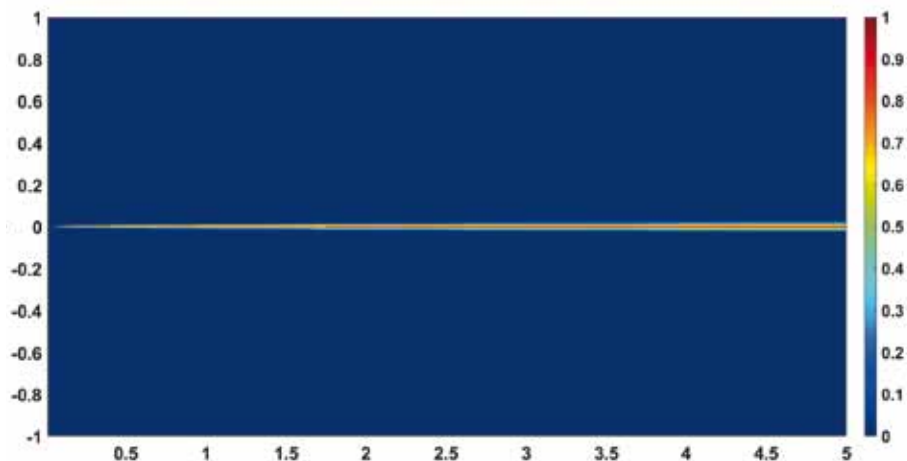
Jednym z głównych problemów pojawiających się przy opisie matematycznym procesu dyspersji zanieczyszczeń jest określenie charakteru przepływu płynu, który ustala się na podstawie wartości liczby Reynoldsa (Re). Liczba Reynoldsa zależy od prędkości płynu, współczynnika lepkości kinematycznej oraz od wymiaru charakterystycznego. Istotny problem stanowi określenie wartości wymiaru charakterystycznego dla rozpatrywanego przepływu płynu. Dla przepływu płynu w rurze wymiarem tym jest średnica rury. W przypadku komina można wybrać wymiar charakterystyczny, równy średnicy komina, jednakże takie podejście do problemu byłoby mało dokładne. Po pierwsze, modeluje się matematycznie przepływ substancji od momentu opuszczenia komina – a co za tym idzie – zakłada się, że momentalnie po opuszczeniu komina substancja ma prędkość i kierunek identyczny z prędkością wiatru. Założenie o zerowaniu się dwóch pozostałych składowych prędkości powietrza oznacza automatycznie przyjęcie laminarnego charakteru przepływu. Wobec tego równanie (29) nie powinno być używane do opisu transportu zanieczyszczeń w przepływach burzliwych. Do określenia charakteru przepływu w symulacjach rozprzestrzeniania się substancji opisanych za pomocą równania (49) wykorzystano podejście stosowane przy przepływach płynu newtonowskiego nad płytą płaską¹³. Zgodnie z tym podejściem, przepływ nad płytą płaską może być uznany za laminarny dla liczb Reynoldsa spełniających nierówność¹⁴:

$$Re_x = \frac{u_{xx}}{\nu} < 2 \cdot 10^5 \quad (54)$$

W tym przypadku wymiarem charakterystycznym jest całkowita długość płyty. Dlatego do opisu dyspersji zanieczyszczeń zastosowano wymiar charakterystyczny równy odległości od źródła zanieczyszczeń (zmienna przestrzenna X). Takie podejście pozwala na poprawny opis procesu w odniesieniu do parametru, który da się zdefiniować w rozpatrywanym przypadku. Ponadto jest to parametr ograniczający zakres stosowania funkcji danej wzorem (49) do zbyt dużego obszaru przestrzeni. Można ograniczyć rozpatrywany obszar tylko do zakresu stosowalności nierówności (54). W związku z tym na rycinie poniżej pokazana została mapa zmian bezwymiarowego stężenia substancji $\Phi = C_A/C_{A0}$ w funkcji współrzędnych określających położenie względem źródła emisji. Na podstawie ryciny 7 widać, jak emitowane zanieczyszczenia poruszają się zarówno w kierunku X , jak i w kierunku Y , co jest związane z procesem dyfuzji masy (kierunek Y) i konwekcji (kierunek X). Zakres rozpatrywanej przestrzeni został wybrany tak, aby nie przekroczyć wartości granicznej liczby Reynoldsa.

¹³ R. B. Bird, W. E. (2002). *Transport Phenomena*. John Wiley & Sons Inc., s. 133.

¹⁴ R. Pohorecki, S. Wroński, *Kinetyka i termodynamika procesów inżynierii chemicznej*, WNT 1977, s. 280.



Ryc. 7. Wartość bezwymiarowego stężenia $\Phi = f(X, Y)$ dla $Re_x = 165442$,
 $u_x = 0,5$ m/s, $D_{A-air} = 16$ mm²/s

Źródło: Opracowanie własne.

Dwuwymiarowy numeryczny model dyspersji zanieczyszczeń

Obliczeniowa mechanika płynów CFD dostarcza cenne narzędzie do rozwiązywania numerycznego równań transportu pędu, masy i energii. Narzędzie to idealnie nadaje się do opisu zjawiska rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w atmosferze, ponieważ pozwala na modelowanie transportu pędu, masy i energii w przepływach laminarnych i burzliwych. Do poprawnego skorzystania z metod CFD wymagane jest prawidłowe wykonanie trzech etapów modelowania.

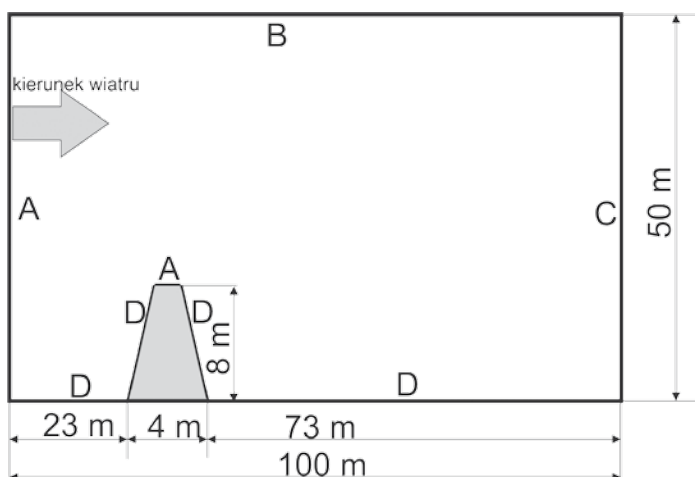
W pierwszym etapie tworzona jest geometria modelowanego układu rzeczywistego. Jest to najistotniejszy etap modelowania, ponieważ realistyczne odwzorowanie geometrii w modelu pozwala bilansować równania modelowe w warunkach tożsamyh do rzeczywistego procesu. W związku z powyższym model geometryczny powinien w miarę możliwości zawierać wszystkie parametry geometryczne charakteryzujące rzeczywisty proces transportu. Na odpowiednio przygotowaną geometrię nakładana jest siatka numeryczna, w węzłach której obliczane są równania bilansowe. Problem z odpowiednim nałożeniem siatki numerycznej stanowi bardzo obszerne zagadnienie i z uwagi na charakter tego opracowania zostanie tu opisany bardzo krótko. Ze względu na wykorzystywanie w tej pracy siatki dwuwymiarowej, poniżej zostaną opisane główne wytyczne potrzebne do tworzenia tego rodzaju siatek. Do podstawowych zasad tworzenia prawidłowych siatek numerycznych wykorzystywanych w obliczeniowej mechanice płynów należy spełnienie kilku warunków. Rekomenduje się, aby siatka dwuwymiarowa zbudowana była z dwóch rodzajów figur: kwadratów lub trójkątów równobocznych. Ma to bezpośrednie przełożenie na zbieżność metod numerycznych wykorzystywanych do obliczania równań różniczkowych cząstkowych. Oczywiście ciężko sobie

wyobrazić, aby dało się nałożyć skończoną liczbę trójkątów równobocznych w bardziej skomplikowaną geometrię (o kwadratach nie wspominając). Istotne jest także, aby elementy w siatce numerycznej były równomiernie rozmieszczone i składały się z figur o podobnych wymiarach. Siatki numeryczne niespełniające tego założenia zazwyczaj nie pozwalają na uzyskanie zbieżności numerycznej w analizowanym modelu lub prowadzą do błędnych i nierealistycznych rozwiązań. W związku z tym istnieje cały szereg parametrów określających jakość siatki numerycznej, takich jak *skewness*, *aspect ratio* czy element *quality* (z uwagi na brak zadowalającego tłumaczenia na język polski przynajmniej niektórych z parametrów, używane będą ich nazwy w języku angielskim). Do przygotowania dobrej siatki potrzebne jest także określenie warunków brzegowych – tu również należy starać się odwzorowywać rzeczywisty proces. Modelowanie CFD wymaga odpowiednio określonych warunków brzegowych. Głównym wyzwaniem podczas symulacji dyspersji zanieczyszczeń jest brak brzegów w modelowanym procesie. Siatka numeryczna stanowi co prawda skończony i zamknięty obiekt, ale nie rzeczywisty. Z uwagi na skończone rozmiary siatek wycina się interesujący fragment przestrzeni i go modeluje. Szczególnie istotne jest określenie wysokości, do jakiej modelowane będzie zjawisko transportu zanieczyszczeń. Jeżeli modelowaną objętość obiektu sprowadza się do wycięcia z przestrzeni prostopadłościanu, to istotny jest rodzaj warunków brzegowych. Dotyczy to szczególnie powierzchni poziomej określającej całkowitą wysokość modelowanego problemu. Wysokość, do jakiej modelujemy zjawisko dyspersji, zależy głównie od prędkości i kierunku wiatru w pobliżu źródła, od prędkości i kierunku zanieczyszczeń, od ich natężenia masowego itd.

Drugi etap obliczeniowej mechaniki płynów to implementacja siatki numerycznej w programie realizującym obliczenia numeryczne. Poprawne określenie w obliczeniach niustalonych warunków brzegowych oraz początkowych pozwoli na uzyskanie w badanym zagadnieniu zbieżności numerycznej. Dzięki temu otrzymuje się pola stężeń, prędkości i temperatury w rozpatrywanej przestrzeni. Jest to istotna zaleta metod CFD, pozwalająca na znacznie dokładniejszą analizę rozpraszania się substancji niebezpiecznych. Otrzymywane w procesie wartości wszystkich parametrów charakteryzujących proces są podane w postaci dyskretnej. Wynikają one z bilansu pędu, masy i energii w węzłach siatki numerycznej. Im gęstsza siatka numeryczna, tym więcej danych otrzymuje się z modelu – tym samym rośnie jednak zapotrzebowania na moc obliczeniową oraz na pojemność pamięci komputera potrzebnej do przechowywania otrzymanych wartości. Duże siatki numeryczne wymagają sporej pamięci RAM oraz szybkich procesorów o dużej częstotliwości taktowania. Ostatnim – bardzo ważnym – etapem CFD jest tzw. *post-processing*. Polega on na gruntownej analizie otrzymanych wyników pod kątem ich prawidłowości. Otrzymanie zbieżnych numerycznie rozwiązań modeli matematycznych nie daje stu procentowej pewności, że otrzymane wyniki będą zgodne z danymi pochodzącymi z pomiarów doświadczalnych. Wobec czego stosuje się metody polegające na analizie otrzymanych wyników. Do tych metod zalicza się sprawdzenie, czy bilans masy, pędu

i energii jest spełniony w rozpatrywanym obszarze, a także czy błędy obliczeniowe są mniejsze od założonych w modelu matematycznym. Sprawdza się również, czy w przepływie płynu nie pojawiają się mało realistyczne wzrosty prędkości itd.

Do symulacji zagadnień transportu zanieczyszczeń przy pomocy obliczeniowej mechaniki płynów wybrano geometrię dwuwymiarową przedstawioną na rycinie 8. Jak widać, wycięty został fragment przestrzeni o wymiarach 100 m szerokości i 50 m wysokości. W tym obszarze ustawiono źródło masy pracujące w sposób ciągły. Źródłem tym był komin o wysokości równej 8 m i średnicy podstawy równej 4 m. Założono, że wiatr wieje od lewej do prawej strony, przy czym określono tylko prędkość i kierunek wiatru na ścianie (zob. rycina 8, symbol A).



Ryc. 8. Schemat modelu geometrycznego zaimplementowanego do modelowania CFD

Źródło: Opracowanie własne.

W tabeli 1 przedstawiono zastosowane warunki brzegowe wykorzystywane w symulacjach. Prędkość i kierunek powietrza na wlocie do układu były opisane warunkiem brzegowym typu ang. *velocity inlet* (zob. symbol A, rycina 8), podobnie określono prędkość i kierunek gazów opuszczających komin – (z tą różnicą, że ruch powietrza na wlocie odbywał się w kierunku poziomym, a emisja zanieczyszczeń – w pionowym). Średnica komina na wylocie wynosiła 2 m, pozostałe wymiary zamieszczono na rycinie 8. W celu sprawdzenia kierunku ruchu zanieczyszczeń opuszczających komin, we wstępnych symulacjach przyjęto warunek brzegowy dla linii odgradzającej od góry przestrzeń typu *pressure outlet*. W efekcie pojawia się przekłamanie w wynikach symulacji numerycznych, spowodowane otwartym dla przepływu typem warunku brzegowego (zob. symbol B, tabela 1). Pomimo wyboru kierunku wiatru na wlocie, tak jak to pokazuje rycina 8, otwarty warunek brzegowy powoduje momentalny wylot gazu przez tę geometrię.

Powietrze w niewielkim stopniu dociera do źródła zanieczyszczeń, wobec czego wpływ wiatru na proces transportu zanieczyszczeń jest niewielki. W związku z tym nie można symulować wpływu prędkości wiatru oraz jego kierunku na to, w którą stronę będą przemieszczały się zanieczyszczenia. Z kolei założenie od razu warunku brzegowego typu *wall* (symbol B) mogłoby powodować określony i z góry nałożony kierunek poruszania się zanieczyszczeń. Należy pamiętać, że otrzymane rozwiązanie ściśle zależy od rodzaju warunków brzegowych w modelu matematycznym.

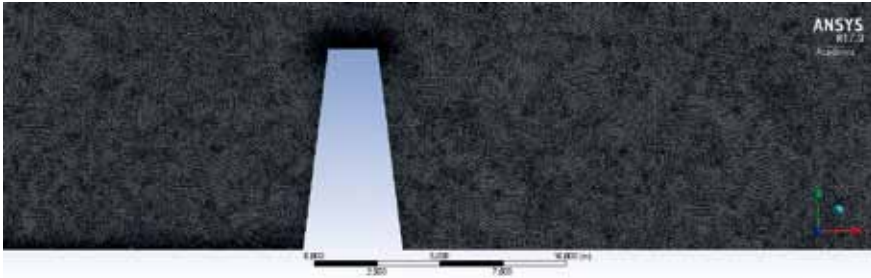
Tabela 1. Zestawienie warunków brzegowych użytych do tworzenia siatki numerycznej

SYMBOL Z RYC. 8	RODZAJ WARUNKU BRZEGOWEGO
A	Velocity inlet
B	Wall
C	Pressure outlet / wall
D	Pressure outlet

Źródło: Opracowanie własne.

Na rycinie 9 przedstawiony został fragment siatki numerycznej nałożonej na model geometryczny. Siatka ta składała się z 1040724 trójkątów (z uwagi na ich znaczną liczbę został pokazany tylko fragment obszaru – w przeciwnym razie obraz byłby mało czytelny). Duża liczba komórek dość gęsto pokrywa rozpatrywany obszar. Zdecydowano się zagęścić siatkę na obu wlotach płynu do rozpatrywanej geometrii. Na rycinie 9 obserwuje się charakterystyczne zaczernienie tuż nad wylotem z komina spowodowane większym zagęszczeniem komórek na tym obszarze. Zbudowana siatka numeryczna cechowała się dobrą jakością: 89,10% całkowitej powierzchni siatki zostało pokryte elementami o współczynniku *element quality* równym 0,975, zaś 10% – elementami o współczynniku 0,93. Z uwagi na fakt, że im bliższa jedności wartość współczynnika *element quality*, tym lepszej jakości jest siatka, wartość tego parametru potwierdza wysoką jakość wykonanej siatki. Jak wynika z zamieszczonych tu informacji, ponad 99% powierzchni zostało pokryte elementami o bardzo dobrej jakości. Jakość siatki ma przełożenie na zbieżność numeryczną podczas etapu bilansowania w rozpatrywanym obszarze równań różniczkowych. Jest to szczególnie istotne przy pojawieniu się błędu numerycznego, który nosi nazwę dyfuzji numerycznej (nie ma on żadnego związku z dyfuzją fizyczną). W wyniku dyfuzji numerycznej skalar transportowanej substancji porusza się w inną stronę niż wynika to z rzeczywistego procesu. Dyfuzja numeryczna jest spowodowana błędami numerycznymi i nie ma uzasadnienia fizycznego. Jedną z metod zapobiegania jej wystąpieniu jest wykonanie odpowiednio dobrej siatki numerycznej. Dyfuzja numeryczna wiąże się ściśle z kształtem komórki. Wartość parametru *skewness*, charakteryzującego kształt komórki, oznacza, jak bardzo dana komórka różni się kształtem od komórek idealnych. Dla czworokątnych komórek kształtem idealnym jest kwadrat (*skewness* = 0),

a dla komórek trójkątnych – trójkąt równoboczny ($skewness = 0$). Im wartości współczynnika $skewness$ bliższe zero, tym bardziej komórka kształtem odzwierciedla figurę idealną. Wartości równe 1 oznaczają znikomej jakości komórkę numeryczną, tzn. wymiary charakteryzujące komórkę numeryczną znacząco różnią się od siebie. Ponad 85% powierzchni pokryte zostało komórkami o współczynniku $skewness$ równym 0,04, a 12,5% miało ten współczynnik poniżej 0,1. Świadczy to o dobrej jakości siatki numerycznej.



Ryc. 9. Siatka numeryczna wykorzystywana do modelowania matematycznego dyspersji masy

Źródło: Opracowanie własne.

Przy pomocy zbudowanego modelu geometrycznego wykonana została seria symulacji rozpraszania substancji niebezpiecznych. Jako składnik emitowany przez źródło wybrano dwutlenek węgla, przy czym ułamek objętościowy dwutlenku węgla uwalnianego przez komin wynosił 0,95. Pozostałe 5% stanowiło powietrze. Przyjęto prędkość powietrza na wlocie do rozpatrywanego układu równą u_x , a prędkość gazu emitowanego przez komin równy u_y . Założono, że temperatura powietrza w rozpatrywanej przestrzeni jest stała i wynosi 293,15 K. Właściwości fizykochemiczne powietrza i dwutlenku węgla również są stałe, a gęstość fazy gazowej może być opisana za pomocą równania stanu gazu doskonałego. Do modelowania zjawiska dyspersji burzliwej posłużono się koncepcją lepkości turbulentnej, której wartość liczono w oparciu o wybrany model zamykający układ równań RANS. W związku z tym efektywny współczynnik dyfuzji określony był równaniem:

$$D_{A-air}^{eff} = D_{A-air} + \frac{\nu_T}{Sc_T} \quad (55)$$

Ze wzoru (55) wynika, że opis problemu transportu burzliwego został przesunięty do określenia turbulentnej liczby Schmidta. Dzięki niej możliwe jest modelowanie matematyczne turbulentnego przenoszenia masy. Cały problem opisu sprowadza się do wyboru hipotezy zamykającej, która określa dodatkowe równania różniczkowe pozwalające zamknąć układ równań RANS. Następnie przy pomocy zmiennych charakteryzujących model zamykający obliczane są wartości lepkości

turbulentnej w węzłach siatki. Określenie turbulentnej liczby Schmidta pozwala na zamknięcie równań burzliwego transportu masy [zob. równanie (16)]. Przegląd literatury pod kątem najczęściej wykorzystywanych hipotez zamykających zebrano w tabeli 2. Z uwagi na znaczną liczbę prac traktujących o modelowaniu dyspersji zanieczyszczeń zestawiono tylko najistotniejsze opracowania. Analiza literaturowa pozwala stwierdzić, że do modelowania przepływów burzliwych najczęściej używa się modelu κ - ϵ oraz modelu LES.

Tabela 2. Dane literaturowe nt. wykorzystywanych hipotez zamykających oraz wartości Sc_T ¹⁵

AUTORZY	MODEL BURZLIWOŚCI	Sc_T
Karim i wsp.	κ - ϵ	1,3
Gousseau i wsp.	κ - ϵ , LES	0,3; 0,5; 0,7
Tauseef i wsp.	κ - ϵ	brak
Salim i wsp.	κ - ϵ , RSM, LES	0,7
Steffens i wsp.	κ - ϵ , LES	brak
Tominaga i wsp.	κ - ϵ , RNG, LES	0,2–2 (0,7)

Pierwszy model dwuwymiarowy pozwala na opis zjawisk turbulencji za pomocą dwóch zmiennych: energii kinetycznej turbulencji κ oraz dyssypacji energii kinetycznej turbulencji ϵ . Model ten wymaga dużo mniejszych mocy obliczeniowych niż model LES. W związku z tym do symulacji zagadnienia rozpraszania zanieczyszczeń w opracowanej geometrii wybrano model κ - ϵ Realizable. Współczynnik dyfuzji dwutlenku węgla w powietrzu w temperaturze równej 298,15 K wynosi $D_{CO_2-air} = 1,6 \cdot 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ ¹⁶. Do opisu dyfuzji burzliwej wybrano – najczęściej używaną przez różnych autorów – wartość turbulentnej liczby Schmidta równą 0,7. Molekularna liczba Schmidta charakteryzuje opory przenoszenia masy i pędu w płynie. Bezpośrednio jest ona stosunkiem oporów przenoszenia pędu (lepkość kinematyczna ν) do oporów przenoszenia masy (współczynnik dyfuzji D), przy czym dla większości gazów jej wartości mieszczą się między (0,1–1). Wobec

¹⁵ A. A. Karim, P. F. Nolan, *Modelling reacting localized air pollution using Computational Fluid Dynamics (CFD)*, „Atmos. Environ.” 2011, 45(4), 889–895; P. Gousseau i in., *CFD simulation of near-field pollutant dispersion on a high-resolution grid: A case study by LES and RANS for a building group in downtown Montreal*, „Atmospheric Environment” 2011, 45(2), <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.09.065>; S. M. Tauseef, D. Rashtchian, S. A. Abbasi, *CFD-based simulation of dense gas dispersion in presence of obstacles*, „Journal of Loss Prevention in the Process Industries” 2011, 24(4), 371–376, <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2011.01.014>; Salim M., Chan A., Siew C.C., *Numerical simulation of dispersion in urban street canyons with avenue-like tree plantings: Comparison between RANS and LES*, „Building and Environment” 2011, 46(9), 1735–1746; J. T. Steffens, D. K. Heist S. G. Perry, M. K. Zhanga, *Modeling the effects of a solid barrier on pollutant dispersion under various atmospheric stability conditions*, „Atm. Env” 2013, 69, 76–85, <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.11.051>; Y. Tominaga, T. Stathopoulos, *CFD Modeling of Pollution Dispersion in Building Array: Evaluation of turbulent scalar flux modeling in RANS model using LES results*, „J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn” 2012, Vol. 104–106, 484–491, <https://doi.org/10.1016/j.jweia.2012.02.004>.

¹⁶ http://www2.bren.ucsb.edu/~turney/WebResources_13/GasInWaterProperties_files/BinaryDiffusionOfGases.pdf

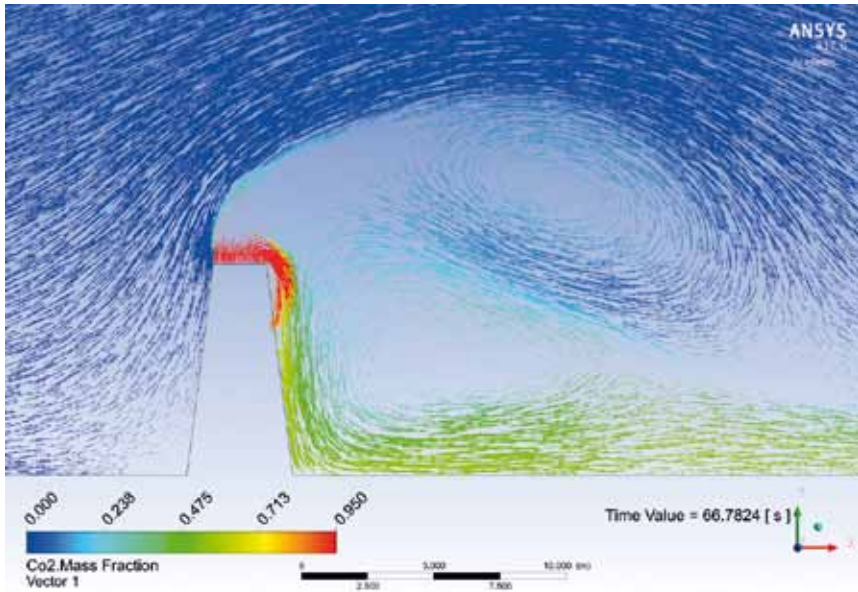
tego opory przenoszenia pędu są mniejsze niż opory przenoszenia masy. Nie ma powodów, aby w przepływie burzliwym ta właściwość gazów nie była spełniona. W związku z tym przyjęcie $Sc_T = 0,7$ jest słusznym rozwiązaniem.

Tabela 3. Zestawienie warunków procesowych użytych w symulacjach CFD

u_x	u_y	T	D_{CO_2-air}	Sc_T
[m/s]	[m/s]	[K]	[mm ² /s]	[-]
1	2	293,15	16	0,7

Źródło: Opracowanie własne.

Pierwszą serię obliczeń wykonano w zależności od czasu trwania emisji zanieczyszczeń. Założono, że źródło opuszczają zanieczyszczenia ze stałą prędkością u_y , a prędkość powietrza na wlocie do rozpatrywanej przestrzeni wynosi u_x i też jest stała. Obliczenia numerycznie w zależności od czasu prowadzono ze zmiennym krokiem czasowym, którego wartości zmieniały się w granicach od 0,001 do 0,05 sekundy, w zależności od zbieżności procedury iteracyjnej. Niestalone symulacje numeryczne prowadzono do niecałych 2 minut od startu rozpraszania zanieczyszczeń przez komin. Wartości pola stężenia, prędkości oraz parametrów opisujących turbulencje zapisywano z krokiem czasowym symulacji równym 1 sekundzie. Symulacje te pozwoliły na sprawdzenie wpływu prędkości i kierunku wiatru na kształt smugi zanieczyszczeń w obrębie komina oraz w pewnej odległości od niego. Niestety całkowity czas potrzebny na uzyskanie obliczeń dla – wydawać by się mogło – bardzo krótkiego czasu symulowanego procesu (ok. 2 minut) wyniósł ok. 170 godzin. Obliczenia były prowadzone na stacji roboczej Workstation HP Z620 wyposażonej w 4 procesory Intel Xeon, które sumarycznie posiadały 12 rdzeni. Pojemność pamięci RAM komputera wynosiła 32 GB. Jak widać, mimo dużej mocy obliczeniowej wykorzystanej do symulacji zagadnienia, całkowity czas potrzebny na wykonanie symulacji procesu rozpraszania się zanieczyszczeń, który trwał 2 minuty, wyniósł tydzień. Jest to główna wada obliczeń CFD, ponieważ obliczenia numeryczne na dużych i bardzo dużych siatkach wymagają znacznej ilości czasu i znacznej mocy obliczeniowej. Im większa moc obliczeniowa zostaje użyta do obliczeń, tym mniej czasu potrzeba na wykonanie obliczeń numerycznych.



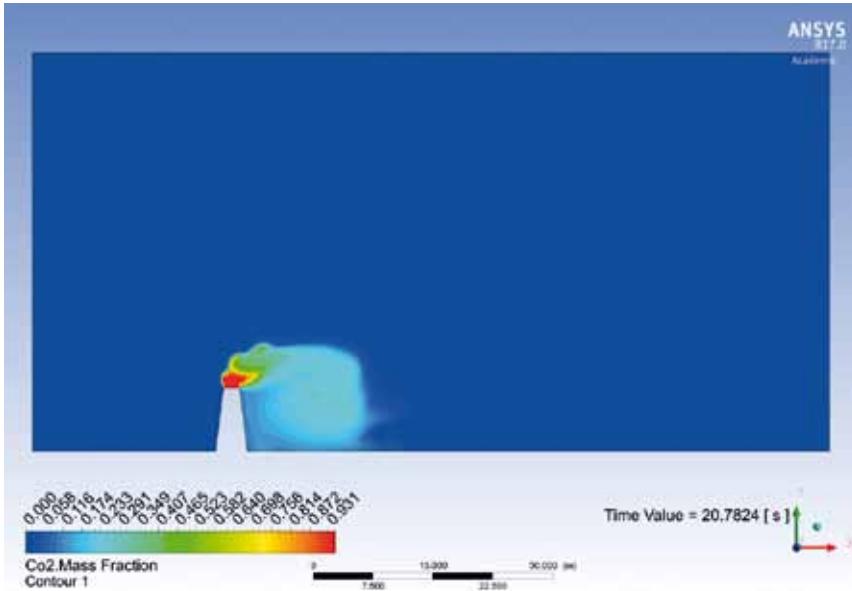
Ryc. 10. Pole wektorów prędkości w przestrzeni w zależności od ułamka objętościowego CO_2 dla $t = 66,7824$ s

Źródło: Opracowanie własne.

Na rycinie 10 przedstawiono pole wektorowe prędkości płynu w zależności od położenia względem źródła zanieczyszczeń. Strzałki reprezentujące wektory prędkości pokazują kierunek poruszania się płynu, natomiast wartości liczbowe oznaczają masowy ułamek objętościowy dwutlenku węgla w mieszaninie gazowej. W celu zwiększenia przejrzystości wykresu pominięto część wektorów prędkości, dlatego w niektórych miejscach widnieją przestrzenie bez strzałek. Nie oznacza to obecności próżni (co byłoby błędem), ale wiąże się z procedurą automatycznego pomijania wektorów. Użytkownik wybiera, co który wektor ma być pominięty, natomiast program sam wycina wektory.

Jak wynika z symulacji pokazanej na rycinie 10, przy wylocie z komina – pomimo ustalenia dwa razy większej prędkości niż prędkość powietrza na wlocie – CO_2 wcale nie porusza się do góry. Powietrze niejako zdmuchuje cięższy gaz, który zaczyna być transportowany poniżej miejsca uwolnienia. W bliskiej odległości za kominem tworzą się dwie pętle cyrkulacyjne, które dodatkowo intensyfikują proces mieszania. Na kolejnym wykresie zobrazowano pole ułamka wagowego dwutlenku węgla w przestrzeni (zob. rycina 11) po niecałych 20 s od momentu uruchomienia źródła zanieczyszczeń. Jak widać cięższy gaz (CO_2) zaczyna opadać po prawej stronie komina. Ponadto przepływające powietrze powoduje rozmywanie dwutlenku węgla, który zaczyna się przemieszczać w kierunku powierzchni ziemi. W bliskiej

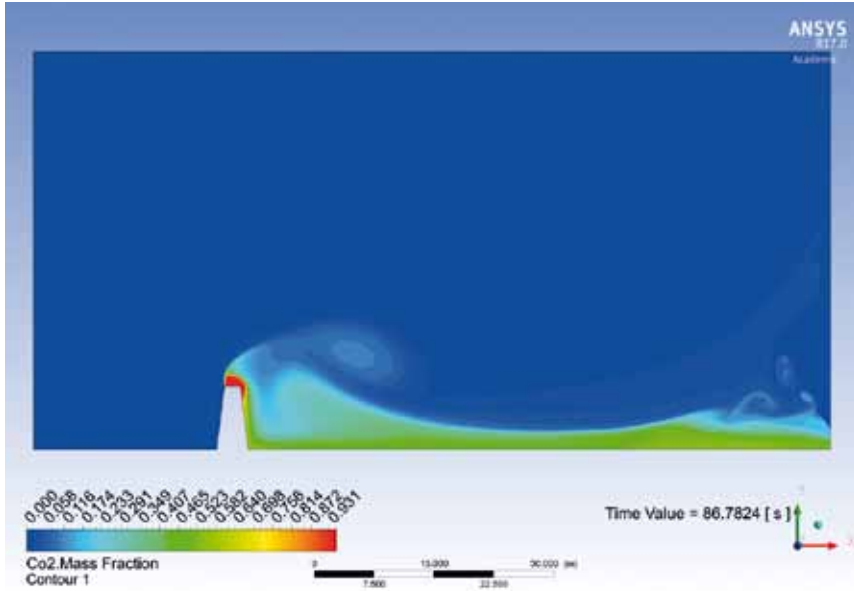
odległości od wylotu ułamek wagowy składnika stanowiącego zanieczyszczenie spada poniżej 50% (na wylocie z komina $W_{CO_2} = 95\%$).



Ryc. 11. Rozkład ułamka wagowego CO_2 w przestrzeni po czasie $t = 20,7824$ s

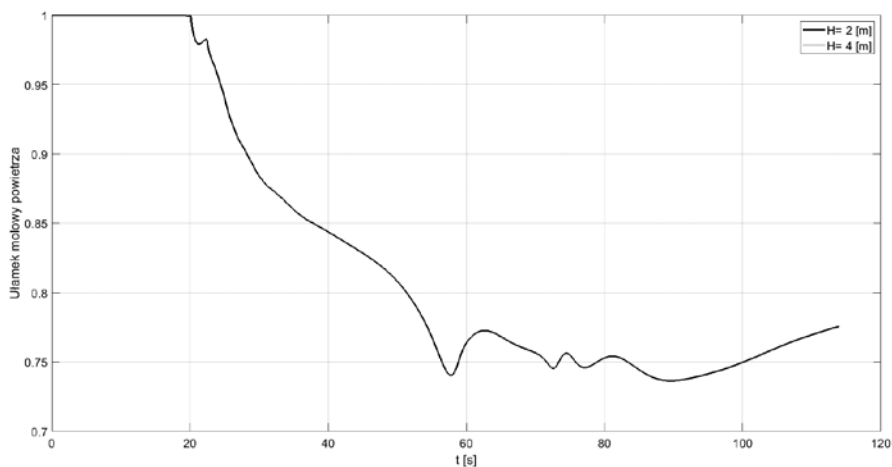
Źródło: Opracowanie własne.

W miarę jak komin uwalnia mieszaninę dwutlenku węgla z powietrzem, proces rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń zaczyna postępować w kierunku zgodnym z kierunkiem przepływu wiatru. Potwierdza to poprawność obliczeń numerycznych wykonanych przy pomocy siatki zbudowanej z ponad miliona komórek w kształcie trójkąta. Po czasie krótszym niż 1,5 min zanieczyszczenia docierają do końca rozpatrywanej przestrzeni, pokonując 73 m w poziomie (zob. rycina 12). Z przedstawionej tu symulacji numerycznej wynika, że emisja niemalże czystego dwutlenku węgla z komina o wysokości równej 8 m i 2 m średnicy na wylocie jest bardzo niebezpieczna dla otoczenia. Stężenie CO_2 w symulowanym układzie w niektórych miejscach przyjmuje bardzo wysokie wartości. Jak widać na rycinie 12, dwutlenek węgla od prawej podstawy komina na odcinku 73 m w poziomie i prawie 4 m w pionie stanowi 50% całkowitej masy zawartej w tym obszarze, przy czym 4 m w pionie określają najmniejszą grubość warstwy z dużym stężeniem CO_2 . Wobec tego przebywanie w pobliżu takiego źródła emisji spowodowałoby zagrożenie dla życia wszystkich organizmów żywych.



Ryc. 12. Rozkład ułamka wagowego CO_2 w przestrzeni po czasie $t = 86,7824$ s

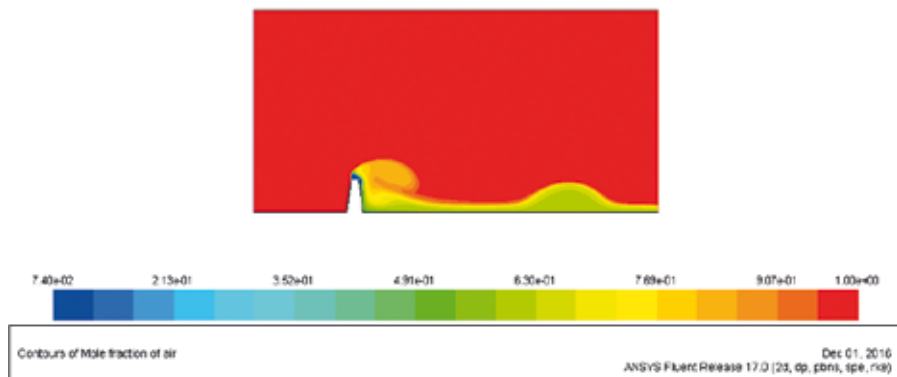
W celu określenia uśrednionych wartości stężenia powietrza w przestrzeni wybrano dwa punkty na siatce numerycznej. W tych punktach na każdym etapie obliczeń numerycznych obliczano ułamki molowe powietrza w zależności od czasu trwania emisji. Punkty te były oddalone od prawej podstawy komina o 20 metrów. Pierwszy punkt ustawiony był na wysokości 2 m, a drugi – na wysokości 4 metrów. Należy nadmienić, że nie były to rzeczywiste punkty pomiarowe, tylko komórki numeryczne, z pomocą których zbierano informacje o stężeniu gazów w tych punktach. Wyniki tych danych zamieszczono na rycinie 13. Jak widać, ułamki molowe w jednym i drugim punkcie się pokrywają. Na rycinie 13 widać tylko jedną linię, a zatem na wysokości 2 m i wysokości 4 m ułamek molowy powietrza jest taki sam. Oznacza to, że chmura zanieczyszczeń w odległości 20 m od źródła jest znacznie grubsza niż 4 metry. Zawartość dwutlenku węgla za kominem jest śmiertelnie niebezpieczna. Widoczne są fluktuacje stężenia gazu w zależności od czasu trwania emisji. W rzeczywistości również czas odgrywa znaczącą rolę w procesach przenoszenia masy, jednakże w wielu modelach analitycznych jesteśmy zmuszeni traktować proces jako ustalony.



Ryc. 13. Zmiany ułamka molowego powietrza w dwóch punktach pomiarowych w zależności od czasu trwania emisji

Źródło: Opracowanie własne.

Problem z niebezpiecznym przemieszczaniem się zanieczyszczeń potwierdza obliczenia ustalone w czasie. Jak wynika z zamieszczonego wykresu (zob. rycina 14), ułamek molowy powietrza za kominem na wysokości ok. 4 m wynosi poniżej 50%. Mamy tu do czynienia z opływem płynu za przegrodą, co znacznie intensyfikuje procesy transportowe. Wzajemne oddziaływanie strumienia masy opuszczającego komin ze strumieniem powietrza nad kominem dodatkowo powoduje nasilenie dyfuzji burzliwej w płynie. W symulacji procesu w warunkach ustalonych bilans masy pomiędzy wlotem a wylotem był spełniony z błędem, który wynosił $2,63 \cdot 10^{-4} \left[\frac{\text{kg}}{\text{s}} \right]$. Strumień masowy powietrza wpływającego do układu wynosił 117,668 kg/s, natomiast strumień zanieczyszczeń generowanych przez komin był równy 3,48 kg/s. Przy takich wartościach błąd rzędu 0,263 mg/s jest do przyjęcia. Wobec tego wykonane obliczenia dla procesu ustalonego mogą być pozytywnie zweryfikowane. Dodatkowo z symulacji numerycznej przedstawionej na rycinie 14 wynika, iż emitowanie gazów cięższych od powietrza może skutkować ich opadaniem zaraz za kominem. Jest to zjawisko naturalne, ale bardzo niebezpieczne, dlatego należałoby rozważyć rozcieńczanie emitowanej substancji. Zapobiegłoby to nadmiernym stężeniom tuż przy powierzchni ziemi w niedalekiej odległości od źródła masy.



Ryc. 14. Rozkład ułamka molowego powietrza w procesie ustalonym

Źródło: Opracowanie własne.

Podsumowanie i wnioski

Podsumowanie analitycznego dwuwymiarowego modelu matematycznego

Model matematyczny, który został zaprezentowany wcześniej, pozwala na wstępne symulacje rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń w niewielkiej odległości od źródła emisji. Z uwagi na liczne uproszczenia model ten nie nadaje się do opisu transportu masy w przepływach burzliwych. Niewłaściwe jest również posługiwanie się nim przy opisie transportu burzliwego składnika rozproszonego przez zastosowanie współczynnika dyspersji masy. Niewątpliwą zaletą modelu opisanego zależnością (49) jest jego analityczny charakter. Dzięki temu symulacja sprowadza się do wyznaczenia wartości funkcji w określonym punkcie przestrzeni, co pozwala zaoszczędzić dużo czasu oraz nie wymaga znacznej mocy obliczeniowej, jak w wypadku modeli numerycznych. Jak wynika z ryciny 7, zastosowanie modelu matematycznego [zob. równanie (49)] dla zmiennej przestrzennej poziomej X większej niż 5 m jest mocno dyskusyjne. Wobec tego analiza profilu stężenia w zależności od zmiennych X większych niż 5 m może być wykorzystana do teoretycznych i wstępnych rozważań. Oczywiście trudno sobie wyobrazić, że zanieczyszczenia przepłyną 5000 km i nie napotkają na swej drodze żadnych przeszkód terenowych. Nieprawdopodobne jest także, aby substancje wydostające się ze źródła punktowego nagle zmieniały kierunek ruchu na zgodny z kierunkiem przepływu powietrza. Świadczyłoby to o braku przekazywania pędu między substancjami. Jednakże takie podejście szeroko stosuje się w odniesieniu do znacznej grupy modeli matematycznych, które służą do określenia rozkładu zanieczyszczeń w przestrzeni. Szczególny sukces odniósł model zaproponowany przez Roberta¹⁷, tzw. model smugi Gaussa.

¹⁷ O. Roberts, dz. cyt.

Uwzględnia on dyfuzję masy w kierunkach Y i Z, natomiast konwekcyjny transport tylko w kierunku X. Równanie modelowe jest bardziej rozbudowane niż zaproponowana w tej pracy zależność zobrazowana równaniem (49). Do popularyzacji tego modelu przyczyniły się późniejsze prace innych autorów. Jednym z nich był Sutton¹⁸, który przy pomocy pomiarów doświadczalnych prowadzonych w zależności od warunków meteorologicznych oszacował wartości współczynników dyspersji masy. Należy wspomnieć o dwóch dodatkowych modelach bazujących na pracy Roberta, zaproponowanych przez Ermaka¹⁹ i Llewelyna²⁰. Drugi z nich rozważał jednoczesną reakcję wraz z dyspersją masy. Modele matematyczne bazujące na rozwiązaniu analitycznym równań bilansu masy dla przepływów laminarnych są często wykorzystywane do opisu zjawiska przenoszenia masy w atmosferze (o czym świadczą najnowsze prace naukowe²¹). Należy nadmienić, że stosowanie tych modeli przy przepływach burzliwych powietrza w niskich warstwach atmosfery może prowadzić do znacznych rozbieżności między obliczonymi a zmierzonymi wartościami stężenia.

Podsumowanie modelu numerycznego

Modelowanie CFD oferuje badaczowi cały zbiór metod pozwalających na obliczanie zagadnień związanych z transportem pędu, masy i energii. Dzięki temu można rozważać zagadnienie w nieco mniej uproszczonej formie niż poprzez analityczne modele matematyczne. Szczególnie cenną zaletą metod CFD jest możliwość obliczania dyfuzji burzliwej przy użyciu modelu zamykającego równania RANS. Za jego pomocą określić można wpływ geometrii układu, jak i pól prędkości na rzeczywisty proces rozprzestrzeniania się substancji niebezpiecznej. Niestety metody te posiadają również wady. Z punktu widzenia dyspersji zanieczyszczeń można wskazać ich dwa główne mankamenty. Pierwszy jest związany z wielkością modelowanego obszaru. Z uwagi na jego znaczne rozmiary nałożona siatka numeryczna musi cechować się dużą gęstością. W przeciwnym razie zbyt duża wielkość komórki spowoduje wystąpienie dyfuzji numerycznej lub doprowadzi do rozbieżności. Znaczne zagęszczenie komórek w siatce jest bezpośrednio związane z liczbą operacji zmiennoprzecinkowych, jakie musi przeprowadzić komputer, aby obliczyć układy równań różniczkowych. Tak więc druga wada wynika z pierwszej i jest związana z ogromnym zapotrzebowaniem na moc obliczeniową, co z kolei oznacza czasochłonne obliczenia zagadnienia przepływu w siatce numerycznej.

¹⁸ O. Sutton, dz. cyt.

¹⁹ D. L. Ermak, dz. cyt.

²⁰ R. P. Llewelyn, *An analytical model for the transport, dispersion and elimination of air pollutants emitted from a point source*, „Atmospheric Environment” 1983, 17(2), 249–256; E. Molga, dz. cyt.

²¹ J. Stockie, *The mathematics of atmospheric dispersion modeling*, „SIAM Review” 2011, 53(2), 349–372.

Wnioski

Modelowanie matematyczne zjawiska rozprzestrzeniania się zanieczyszczeń stanowi jedno z podstawowych źródeł informacji o sposobie ich transportowania w najniższych warstwach atmosfery, czyli troposferze. Modele matematyczne stanowią idealne narzędzie do określenia miejsc zagrożonych nadmiernym stężeniem substancji niebezpiecznej w przypadku nagłego jej uwolnienia. Trudno sobie wyobrazić prowadzenie eksperymentów doświadczalnych przy użyciu silnie trującego gazu w danym miejscu przestrzeni. Opis matematyczny procesu przenoszenia masy i pędu w takim układzie jest niewątpliwie dużym wyzwaniem dla świata nauki, ponieważ wymaga możliwie jak najdokładniejszych modeli do opisu niezwykle trudnego procesu transportu zanieczyszczeń. Trudność ta nie wynika z nieznaności równań opisujących zjawisko rozprzestrzeniania, ale z niemożności poznania bardzo dużej liczby zmiennych, zarówno w czasie, jak i w przestrzeni. Wobec powyższego modele matematyczne powinny być walidowane przy pomocy pomiarów doświadczalnych. W przeciwnym razie stanowią tylko symulację numeryczną. To samo dotyczy się dwóch modeli przedstawionych w tym rozdziale. Są one tylko próbą pokazania, z jakimi dwoma przeciwstawnymi efektami w procesie modelowania zanieczyszczeń mamy do czynienia. Mianowicie istnieje cała grupa modeli oparta na bardzo mocno uproszczonym równaniu różniczkowym, która posiada za to rozwiązanie analityczne. Modele te opisują proces transportu za pomocą funkcji zależnej od miejsca w przestrzeni oraz od usytuowania źródła masy i jego natężenia masowego. Pozwalają niezwykle szybko określić rozkład stężenia w przestrzeni przy pomocy parametrów procesowych. W celu określenia zmienności parametrów oraz ich wzajemnej zależności wprowadza się grupy parametrów procesowych różnego typu, które pozwalają uzyskać dokładniejsze wyniki przy pomocy modeli analitycznych. Niestety główną wadą tych modeli jest brak uwzględnienia zmian prędkości w rozpatrywanym obszarze. Zakładają one, że prędkość jest stała, a na jej wartość nie wpływa obecność ciał stałych usytuowanych w modelowanej przestrzeni. Druga grupa metod pozwala opisywać procesy transportowe w płynie (pęd, masa i energia) przy pomocy metod przybliżonych. Metody te bazują na siatkach numerycznych w węzłach, których obliczane są równania bilansowe. Ich zaletą jest możliwość opisu procesu transportu pędu i masy w pobliżu ciał stałych oraz określania wpływu parametrów turbulencji na proces dyfuzji burzliwej. Niewątpliwie stanowią one cenne źródło informacji, jednakże kosztem sporego zapotrzebowania na moc obliczeniową. Z uwagi na fakt iterowania rozwiązania, modele te są dużo wolniejsze niż modele analityczne. Wobec powyższych faktów sięga się po nie rzadziej niż po rozwiązanie analityczne. Dobrym podsumowaniem jest stwierdzenie: dokładność kosztuje. I to zarówno w sensie posiadania odpowiednio szybkich komputerów, jak i w ilości czasu potrzebnego na rozwiązanie modelu matematycznego.

Literatura

Bird R. B., Stewart W. E., Lightfoot E. N., *Transport Phenomena*, John Wiley & Sons Inc., New York 2002.

Elsner J. W., *Turbulencja przepływów*, PWN, Warszawa 1987.

Ermak D. L., *An analytical model for air pollutant transport and deposition from a point source*, „Atmospheric Environment” 1977, 11(3), 231–237.

Gousseau P. i in., *CFD simulation of near-field pollutant dispersion on a high-resolution grid: A case study by LES and RANS for a building group in downtown Montreal*, „Atmospheric Environment” 2011, 45(2), <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2010.09.065>.

Karim A. A., Nolan P. F., *Modelling reacting localized air pollution using Computational Fluid Dynamics (CFD)*, „Atmos. Environ.” 2011, 45(4), 889–895.

Kramers H. A., Westerterp K. R., *Elements of chemical reactor design and operation*, Netherlands University Press, Amsterdam 1963.

Llewellyn R. P., *An analytical model for the transport, dispersion and elimination of air pollutants emitted from a point source*, „Atmospheric Environment” 1983, 17(2), 249–256.

Molga E., *Procesy adsorpcji reaktywnej*, WNT, Warszawa 2008.

Prandtl L., *Dynamika przepływów*, PWN, Warszawa 1956.

Roberts O., *The Theoretical Scattering of Smoke in a Turbulent Atmosphere*, „Proceedings Royal Society A.” 1923, 104(728), <https://doi.org/10.1098/rspa.1923.0132>.

Salim M., Chan A., Siew C.C., *Numerical simulation of dispersion in urban street canyons with avenue-like tree plantings: Comparison between RANS and LES*, „Building and Environment” 2011, 46(9), 1735–1746

Sherwood T.K., Pigford R. L., Wilke C. R., *Mass transfer*, Mc Graw-Hill, 1975l.

Steffens J. T., Heist D. K., Perry S. G., Zhanga M. K., *Modeling the effects of a solid barrier on pollutant dispersion under various atmospheric stability conditions*, „Atm. Env” 2013, 69, 76–85, <https://doi.org/10.1016/j.atmosenv.2012.11.051>.

Stockie J., *The mathematics of atmospheric dispersion modeling*, „SIAM Review” 2011, 53(2), 349–372.

Sutton O.G., Clarke G. C., *A theory of eddy diffusion in the atmosphere*, „Proceedings Royal Society A.” 1931, 135(826), <https://doi.org/10.1098/rspa.1932.0025>.

Tauseef S. M., Rashtchian D., Abbasi S A., *CFD-based simulation of dense gas dispersion in presence of obstacles*, „Journal of Loss Prevention in the Process Industries” 2011, 24(4), 371–376, <https://doi.org/10.1016/j.jlp.2011.01.014>.

Tominaga Y., Stathopoulos T., *CFD Modeling of Pollution Dispersion in Building Array: Evaluation of turbulent scalar flux modeling in RANS model using LES results*, „J. Wind. Eng. Ind. Aerodyn” 2012, Vol. 104–106, 484–491, <https://doi.org/10.1016/j.jweia.2012.02.004>.

Guidelines for integrated risk assessment and management in large industrial areas TECDOC-994, International Atomic Energy Agency, Vienna 1998.

International Association of Oil & Gas Producers, Process Release Frequencies, London 2010.

Rozporządzenie Ministra Spraw Wewnętrznych i Administracji z dnia 9 listopada 2011 r. w sprawie standardów technicznych wykonywania geodezyjnych pomiarów sytuacyjnych i wysokościowych oraz opracowywania i przekazywania wyników tych pomiarów do państwowego zasobu geodezyjnego i kartograficznego (Dz.U. 2011 nr 263 poz. 1572).

U.S. Environmental Protection Agency, CAMEO (Computer-Aided Management of Emergency Operations), <https://www.epa.gov/cameo> [dostęp: 15.07.2018].

U.S. Nuclear Regulatory Commission: Industry-Average Performance for Components and Initiating Events at U.S. Commercial Nuclear Power Plants, 2007.

ROZDZIAŁ II.

MODELE I PROGRAMY OBLICZENIOWE NA POTRZEBY SYSTEMU WYZNACZANIA RYZYKA OBSZAROWEGO

Mieczysław Borysiewicz, Piotr Kopka, Michał Korycki,
Tomasz Kwiatkowski, Sławomir Potemski,
Piotr Prusiński, Anna Wawrzyńczak-Szaban

Narodowe Centrum Badań Jądrowych

Wprowadzenie

W Polsce znajduje się bardzo dużo instalacji, które mogą stwarzać zagrożenia także poza swoim terenem. Do zagrożeń tych zaliczają się pożary, wybuchy, przypadki uwolnienia substancji niebezpiecznej do atmosfery lub gleby oraz hałas. Od typu instalacji zależy, które z nich może potencjalnie wystąpić. Istnieje bardzo wiele metod wyznaczania ryzyka obszarowego dotyczącego instalacji. Niniejszy rozdział ma na celu nakreślenie zarysu wyznaczania ryzyka obszarowego na podstawie wyników pochodzących z różnych modeli obliczeniowych.

Najistotniejszy problem w modelowaniu stanowi fakt, że nie ma obecnie modeli ogólnego zastosowania, które w pełni wyczerpywałyby zakres zagrożeń związanych z instalacjami. Stwarza to konieczność stosowania wielu kodów obliczeniowych, dedykowanych do poszczególnych, konkretnych celów. Opisane w niniejszym rozdziale modele dotyczą:

- uwolnienia substancji szkodliwej do atmosfery z uwzględnieniem charakteru i czasu tego zdarzenia;
- uwolnienia substancji szkodliwych (w szczególności oleju) do wód gruntowych;
- uwolnienia substancji pasywnej do rzeki;
- pożaru w pomieszczeniach oraz w środowisku zewnętrznym.

Większość modeli opisanych w rozdziale jest relatywnie prosta w użytkowaniu. Nie zabrakło jednak tych bardziej zaawansowanych, wymagających głębszej wiedzy na ich temat.

Celem niniejszego rozdziału jest przegląd literatury w poszukiwaniu narzędzi obliczeniowych, które można będzie częściowo albo całkowicie zautomatyzować. Wiele modeli pozwala poczynić prognozę na podstawie prostych do zdobycia danych. W przypadku braku niektórych informacji możliwe jest również przyjęcie pewnych wartości *ad hoc*. Dzięki temu, posiadając opis awarii w danym obiekcie, można wykonać symulację jednym z wymienionych tu modeli, otrzymać pole (np. stężeń), a następnie na tej podstawie obliczyć ryzyko.

1. Klasyfikacja modeli

Ze względu na bardzo duże zróżnicowanie modeli niniejszy rozdział należy rozpocząć od ich klasyfikacji.

Modele Gaussowskie

W najbardziej ogólnej postaci¹ Gaussowskie równania stężeń wyglądają następująco:

$$\frac{C}{Q} = \frac{1}{\pi \sigma_y \sigma_z u} \exp \left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2} \right] \exp \left[-\frac{h_p^2}{2\sigma_z^2} \right] \quad (1)$$

dla uwolnienia ciągłego

oraz:

$$\frac{C}{Q_i} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}^{3/2} \sigma_x \sigma_y \sigma_z} \exp \left[-\frac{(y - y_0)^2}{2\sigma_y^2} \right] \exp \left[-\frac{h_p^2}{2\sigma_z^2} \right] \exp \left[-\frac{(x - x_0)^2}{2\sigma_x^2} \right] \quad (2)$$

dla uwolnienia natychmiastowego.

W równaniach (1) oraz (2) symbol C oznacza stężenie, Q – masę uwolnionego gazu, a h_p – wysokość źródła. Symbole σ są współczynnikami dyspersji determinującymi szybkość rozpraszania się zanieczyszczenia w atmosferze.

Nazwa powyższych modeli pochodzi stąd, że ich rozwiązanie obrazowane jest w postaci krzywej Gaussa. Pionierem, który dał początek tej klasie modeli był Frank Pasquill. Ponieważ technologia obliczeń komputerowych w latach 60. była bardzo trudno dostępna, przyjął on wiele uproszczeń, takich jak: stały kierunek i prędkość wiatru, płaski teren o stałym współczynniku szorstkości, niezmienna stratyfikacja temperatury, uwolnienie o stałym natężeniu i temperaturze. Od tamtych czasów modele Gaussowskie zostały jednak mocno rozwinięte. Wprowadzane są rozmaite metody parametryczne umożliwiające obliczenia w znacznie szerszym zakresie zagadnień. Jednym z bardziej zaawansowanych modeli tego typu jest CALPUFF.

Typowym elementem modeli Gaussowskich jest tzw. „klasa stabilności”. Stabilność atmosfery wynika wprost z termodynamiki. Jeśli cząstka zostanie wyprowadzona ze stanu równowagi termodynamicznej w warunkach stabilnych, rozpocznie oscylację wokół swojego stanu równowagi. Po pewnym czasie cząstka wróci do stanu równowagi. W warunkach niestabilnych jednak cząstka wyciągnięta ze swojego stanu równowagi będzie kontynuować zmianę położenia.

¹ *Guidelines for use of vapor cloud dispersion models*, 1996.

Klasy stabilności wprowadzone przez Pasquilla-Giforda są kategoryzacją gradientów temperatury potencjalnej. Klasa A to klasa zwana „bardzo stabilną”, a klasa F – „bardzo niestabilną”. Wyróżnia się zatem sześć klas stabilności. Istnieją różne proponowane doборы parametrów dyspersji w zależności od klasy stabilności. Najbardziej popularną jest kategoryzacja opisana przez Hannę, Briggsa i Hoskera.

Tabela 1. Klasy stabilności rekomendowane przez Hannę, Briggsa i Hoskera

KLASA STABILNOŚCI	$\sigma_y(m)$	$\sigma_z(m)$
Warunki pozamiejskie		
A	$0,22x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,20x$
B	$0,16x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,12x$
C	$0,11x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,08x(1 + 0,0002x)^{-1/2}$
D	$0,08x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,06x(1 + 0,0015x)^{-1/2}$
E	$0,06x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,03x(1 + 0,003x)^{-1}$
F	$0,04x(1 + 0,0001x)^{-1/2}$	$0,016x(1 + 0,003x)^{-1}$
Warunki miejskie		
A-B	$0,32x(1 + 0,0004x)^{-1/2}$	$0,24x(1 + 0,001x)^{1/2}$
C	$0,22x(1 + 0,0004x)^{-1/2}$	$0,20x$
D	$0,16x(1 + 0,0004x)^{-1/2}$	$0,14x(1 + 0,003x)^{1/2}$
E-F	$0,11x(1 + 0,0004x)^{-1/2}$	$0,08x(1 + 0,0015x)^{1/2}$

Źródło: *Guidelines for use of vapor cloud dispersion models*, 1996.

Istnieją także różne metody oszacowania klasy stabilności. Obliczeń można dokonać poprzez określenie pionowego gradientu temperatury potencjalnej. Jednakże, żeby zdobyć takie dane, należy posiadać pomiar temperatury z przynajmniej dwóch wysokości oraz pomiar ciśnienia. Dlatego często stosuje się metodę uproszczoną bazującą na nasłonecznieniu oraz zachmurzeniu.

Tabela 2. Klasy stabilności Pasquilla

PRZYGRUNTOWA PRĘDKOŚĆ WIATRU NA WYSOKOŚCI 10 M [M/S]	DZIEŃ NASŁONECZNIE NIE			NOC ZACHMURZENIE	
	SILNE	UMIARKOWANE	SŁABE	$\geq 4/8$	$<= 3/8$
< 2	A	A-B	B	–	–
2–3	A-B	B	C	E	F
3–5	B	B-C	C	D	E
5–6	C	C-D	D	D	D
> 6	C	D	D	D	D

Źródło: Opracowanie własne.

Modele Lagrangeowskie

Modele Lagrangeowskie stały się ważnym narzędziem badania dyspersji zanieczyszczeń². Modele cząstek bazują na założeniu, że dyfuzja atmosferyczna może być modelowana przez łańcuchy Markowa. Rozwój technologii komputerowej połączył Lagrangeowskie modele cząstek z mezoskalowymi modelami meteorologicznymi symulującymi cyrkulację atmosferyczną w terenie o złożonej topografii.

W lagrangeowskich modelach cząstek LPD (ang. *Lagrangian Particle Dispersion*) dyspersja modelowana jest przez symulowanie ruchu dużej liczby cząstek w ilości proporcjonalnej do natężenia emisji zanieczyszczeń. Jednocześnie lub sukcesywnie – zachodzi przenoszenie tych cząstek przez wiatr. Modele pojedynczej cząstki, poruszającej się ze średnią prędkością wiatru, mogą być wykorzystane do określania średniego pola stężeń. Estymacja momentów statystycznych wyższego rzędu wymaga stosowania modelu wielu cząstek, gdzie symulowane jest wyrzucanie grupy cząstek, których turbulencyjne prędkości składowe są skorelowane. Generalnie w modelach LPD ruch cząstki traktowany jest jak proces stochastyczny. Aby określić położenie każdej wirtualnie zaznaczonej cząstki, wykorzystuje się równania łańcuchów Markova:

$$X_i(t + \Delta t) = X_i(t) + [u_i(t) + u'_i(t)]\Delta t \quad (3)$$

$$u'_i(t) = u'_i(t - \Delta t)R_i(\Delta t) + u''_i(t) \quad (4)$$

gdzie:

$X_i(t)$ – i -ta składowa położenia cząstki w czasie t ;

t – krok czasowy;

$u_i(t)$ – i -ta składowa wektora wiatru w czasie t i położeniu $X_i(t)$;

u'_i – turbulencyjne składowe prędkości;

$R_i(\Delta t)$ – Lagrangeowska autokorelacyjna funkcja prędkości;

$u''(t)$ – składowe losowe prędkości niezależne od $u'(t)$.

Krok czasowy Δt jest zmienny w obszarze turbulencji niejednorodnej i zależy od Lagrangeowskiej skali czasowej T_L .

$$R_i(\Delta t) = \exp(-\Delta t/T_{Li}) \quad (5)$$

$$\Delta t = \max(0, 1T_L, \Delta t_{min}) \quad (6)$$

Minimalny krok Δt jest zadany arbitralnie, aby uniknąć zerowych wartości przy ziemi. Równanie znajduje zastosowanie przy modelowaniu trójwymiarowej dyfuzji turbulencyjnej. Często jednak zaniedbuje się dyfuzję poziomą i oblicza tylko

² S. Potemski, M. Borysiewicz, A. Furtek, *Poradnik metod oceny ryzyka związanego z niebezpiecznymi instalacjami procesowymi*, Instytut Energii Atomowej, Otwock-Świerk 2000.

pionową. Różnica między wynikami takiego modelowania wzrasta wraz z odległością od źródeł emisji.

Jeśli Δt przyjmuje wartości większe niż TL , wtedy model ten redukuje się do wersji Monte-Carlo (*random walk*), w którym prędkość jest traktowana jak biały szum, cząstka nie ma „pamięci”, porusza się w pełni losowo (rozkład cząstek jest Gaussowski).

Modele Eulerowskie

W odróżnieniu od modeli Lagrangeowskich, które śledzą każdą cząstkę w ośrodku, modele Eulerowskie dokonują obliczeń na zmiennych lokalnych. Rozpatrzmy proste równanie zachowania pędu:

$$\frac{Dv_i}{Dt} = \frac{\partial v_i}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad}(v_i) \quad (7)$$

W metodzie Lagrangeowskiej pierwszy człon równania (7) byłby rozwiązywany. Człon Dv/Dt jest to tzw. „pochodna substancjalna”. Pochodną tą (gdyż jest to pochodna całkowita) w mechanice płynów opisuje się stan cząstki, którą śledzimy. W podejściu Eulerowskim natomiast obliczany jest człon drugi $\partial v/\partial t$, czyli lokalna zmiana pewnej wartości o stałym w czasie położeniu.

Warunkiem wykonania poprawnych numerycznie symulacji jest stabilność algorytmu, którą w modelach transportu odzwierciedla się za pomocą warunku CFL (Couranta-Fredrichsa-Lewy’ego). Warunek ten występuje we wszystkich modelach tej klasy.

Ogólną zasadą jest konieczność odpowiedniego dobrania dyskretyzacji czasu Δt i przestrzeni Δx , Δy oraz Δz w zależności od spodziewanych prędkości u_x , u_y , u_z , jakie mogą wystąpić w symulacji. Liczba Couranta (C) jednoznacznie określa stosunek tych parametrów. Liczba C przyjmuje następującą postać:

– dla modelu jednowymiarowego:

$$C = \frac{u \cdot \Delta t}{\Delta x} \quad (8)$$

– dla modelu dwuwymiarowego:

$$C = \frac{u_x \cdot \Delta t}{\Delta x} + \frac{u_y \cdot \Delta t}{\Delta y} \quad (9)$$

– dla modelu trójwymiarowego:

$$C = \frac{u_x \cdot \Delta t}{\Delta x} + \frac{u_y \cdot \Delta t}{\Delta y} + \frac{u_z \cdot \Delta t}{\Delta z} \quad (10)$$

W przeważającej większości schematów numerycznych $C = 1$ oznacza stabilny warunek numerycznego całkowania. W przeciwnym wypadku model utraci stabilność.

Modele *on-line* i *off-line*

Przy modelowaniu transportu i dyspersji zanieczyszczeń można często spotkać się z terminem modeli *on-line* i *off-line*. Dzieli się je na te dwie kategorie, ponieważ w pewnych przypadkach dyspersja nie wpływa znacząco na transport, a w innych wpływ ten jest wyraźnie widoczny. Jeśli nie wpływa, można nieraz podzielić proces modelowania na dwa kroki: modelowanie dynamiki i modelowanie dyspersji. Oba te kroki są często przeprowadzane przez dwa oddzielne modele. Jednakże jeśli dyspersja ma wpływ na dynamikę ośrodka, modelowanie powinno być przeprowadzane w jednym modelu, a oba te zjawiska sprzężone tym samym układem równań.

Modelowanie *off-line* to termin stosowany do procesu, w którym transport cząstek (w tym przypadku zanieczyszczeń) jest rozbity na dwa modele. Na przykład model prognozy pogody przeprowadza symulacje atmosfery, po czym model dyspersji zanieczyszczeń korzysta z jego wyników i wykonuje swoje symulacje. Proces nazywa się *off-line*, ponieważ model dyspersji jest odseparowany od modelu dynamiki. Tego typu modelowanie stosuje się w przypadku, kiedy wiadomo, że uwolnienie substancji szkodliwej nie wpłynie na jej transport lub wpłynie w sposób nieznaczny. Zaletą tego typu podejścia jest możliwość przeprowadzenia symulacji dyspersji (które nieraz mogą być mniej kosztowne obliczeniowo) wielokrotnie, bez dodatkowego uruchamiania modelu dynamiki.

Odwrotnym podejściem do modelowania dyspersji jest modelowanie *on-line*. Transport i dyspersja są tu symulowane przez jeden model i mają wspólny układ równań. Tego typu modelowanie stosuje się, gdy wiadomo, że zanieczyszczenia znacząco wpływają na transport. Wszystkie efekty związane z tzw. „sprzężeniem zwrotnym” powinny być modelowane *on-line*.

2. Opis wybranych modeli

ALOHA

Podstawowym modelem systemu RAT-if (zob. rozdział IV) powinien zostać ALOHA. Jest to narzędzie proste w obsłudze, szybkie w obliczeniach, łatwe w interpretacji wyników. Posiada duże możliwości obliczania członu źródłowego, Gaussowski model dyspersji oraz interfejs graficzny do klarownego prezentowania wyników.

Główne cele, do których zaprojektowany został model ALOHA³, to wykonywanie szybkich symulacji zagrożeń w środowisku na wypadek niespodziewanej awarii oraz planowanie scenariuszy awaryjnych. W wielu praktycznych zastosowaniach konieczne jest dysponowanie stosunkowo prostym, niewymagającym dużej mocy obliczeniowej modelem, umożliwiającym zarazem uzyskanie rozsądnych wyników w typowych warunkach. Często osoby szacujące ryzyko awarii nie posiadają

³ M. Reynolds, *ALOHA (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) 5.0 THEORETICAL DESCRIPTION*, National Oceanic and Atmospheric Administration, August 1992.

odpowiednich danych, takich jak rozkład temperatury czy pola wiatru w zasięgu kilkuset kilometrów od swojego zakładu. Dane takie oraz specjalistyczna wiedza byłyby niezbędne do przeprowadzenia zaawansowanym modelem atmosferycznym symulacji transportu i dyspersji związków chemicznych, które w trakcie awarii zostały uwolnione do atmosfery. ALOHA poprzez założenie szeregu uproszczeń oraz zminimalizowanie wymaganych danych wejściowych eliminuje problemy charakterystyczne dla zaawansowanych modeli.

Areal Locations of Hazardous Atmospheres (ALOHA) jest bardzo łatwy w obsłudze. Przy jego użyciu można ocenić zagrożenie wynikające z wycieku związku chemicznego w postaci gazu lub płynu. Na podstawie podanych parametrów zbiornika, w którym znajdował się związek, model sam dokona obliczeń parowania i dyspersji zarówno gazów ciężkich, jak i pasywnych. ALOHA w obliczeniach bierze pod uwagę źródła gazów zmienne w czasie. Umożliwia również uzależnienie od czasu takich źródeł jak pęknięte rury, przeciekające zbiorniki pod ciśnieniem czy parujące rozlewiska. Model transportu zanieczyszczeń w atmosferze jest Gaussowski. Obszar otaczający analizowany zakład jest z założenia płaski, a wiatr stały w czasie i na całym rozpatrywanym obszarze. Profil temperatury powietrza atmosferycznego uproszczono do klas stabilności Pasquilla z możliwością dodania warstwy inwersji. ALOHA nie powinien być wykorzystywany do radioaktywnych, niskich emisji, emisji bardzo krótkiego zasięgu (< 10 m), emisji długoterminowych (> 1 h). ALOHA działa na systemach Windows oraz macOS. Wymagania sprzętowe są – jak na dzisiejsze czasy – bardzo niewielkie (Intel 80386). Jest wykorzystywany na całym świecie i dostępny za darmo.

W skład modelu ALOHA wchodzi dwa istotne komponenty – procesor źródła uwolnienia oraz model dyspersji. Użytkownik definiuje, jaki pojemnik doznał awarii z wyciekami, doprecyzowuje pewne jego parametry oraz wprowadza uproszczone dane pogodowe. ALOHA dokonuje obliczeń na podstawie wprowadzonych danych celem otrzymania wielkości uwolnienia. Następnie uruchamia algorytmy obliczeniowe związane z dyspersją.

Źródła uwolnienia, dające się zdefiniować w ALOHA, są następujące:

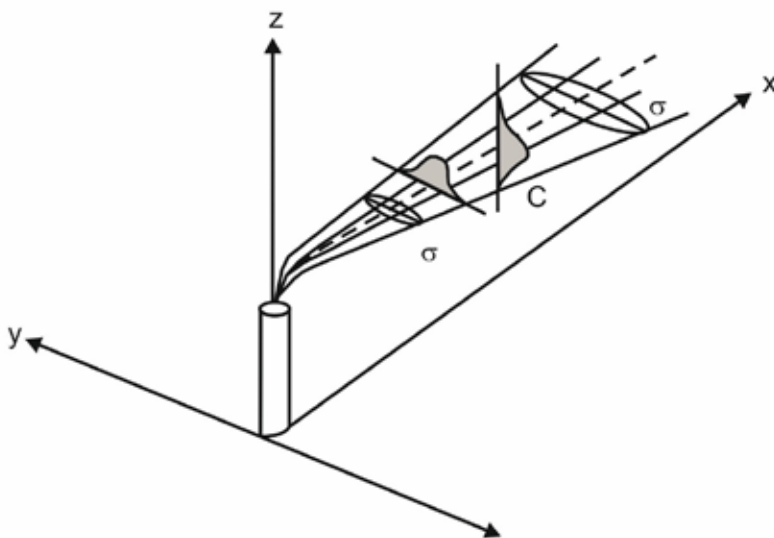
- **bezpośrednie**, czyli (a) chwilowe lub (b) ciągle podawane wprost przez użytkownika;
- **rozlewisko**, które powstało w wyniku rozlania jakiejś substancji do otoczenia. Określić można dodatkowo, czy płyn jest (a) wrzący, czy (b) nie;
- **pęknięty zbiornik** o budowie cylindra lub kuli zawierający gaz, ciecz lub skroplony gaz;
- **pęknięta rura**, przez którą przepływa gaz pod ciśnieniem.

W zależności od otrzymanych w trakcie obliczeń parametrów uwolnienia, oszacowane zostaje również, który model dyspersji powinien zostać uruchomiony. Model gazu pasywnego jest Gaussowski, czyli rozwiązanie, jakie przynosi, jest zgodne z krzywą Gaussa. Model zaniedbuje turbulencje i upraszcza transport chmury zanieczyszczeń do uśrednionych wartości. Model nie zwróci wyników obrazujących meandrujące smugi zanieczyszczeń. Zakłada ruch ustalony. Odchy-

lenia standardowe $\sigma_y(x)$ i $\sigma_z(x)$ są tutaj rozumiane jako „parametry dyspersji” w odpowiednich kierunkach. Równanie (11) opisuje formułę modelu Gaussowskiego zaprogramowanego w ALOHA.

$$C(x, y, z) = \frac{Q}{2\pi\sigma_y\sigma_zU} \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{y}{\sigma_y}\right)^2\right] \left\{ \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z-h_s}{\sigma_z}\right)^2\right] + \exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{z+h_s}{\sigma_z}\right)^2\right] \right\} \quad (11)$$

Stężenie (C) jest w równaniu (11) funkcją trójwymiarową, jednakże ALOHA zwraca wyniki jedynie w dwóch wymiarach (x, y). Prędkość wiatru (U) jest z założenia stała, a wielkość uwolnienia (Q) to funkcja czasu. Składnik h_s stanowi wysokość źródła. Parametry dyspersji są ustalane na podstawie dostarczonych przez użytkownika danych. Zależą one od klasy stabilności, którą można określić za pomocą prędkości wiatru oraz zachmurzenia. Istnieje kilka metod oszacowania klasy stabilności. Z punktu widzenia użytkownika modelu są one niewidoczne, ponieważ – skoro ALOHA jest przeznaczony do wykonania szybkich obliczeń – nie można wymagać od użytkownika posiadania danych ze stacji meteorologicznych. ALOHA oceni sam parametry dyspersji za pomocą dostarczonych danych o prędkości wiatru i zachmurzeniu.



Ryc. 1. Współczynniki dyspersji (sigma) oraz średnie stężenie (C)

Źródło: Opracowanie własne.

W wielu instalacjach często przechowywane są związki chemiczne, które po wydostaniu się ze zbiornika będą się zachowywać jak gaz ciężki. Z punktu widzenia modelu dyspersji atmosferycznej jest to istotny problem, ponieważ taki gaz (w odróżnieniu od pasywnego) wpływa na dynamikę transportu.

ALOHA od wersji 5.0 posiada wbudowany model transportu gazu ciężkiego znanego z systemu DEGADIS. Jest to model będący pewną modyfikacją równania Gaussowskiego. Warto wspomnieć, że model ten przewiduje jedynie uwolnienia z powierzchni gruntu. Modelowanie gazu ciężkiego wprowadza pewną trudność, która tkwi w jego przemianach. Najbliżej źródła uwolnienia obserwowane jest zjawisko „spływania” gazu ku ziemi. Towarzyszy temu turbulencyjne mieszanie z powietrzem i powstawanie wirów. Wraz z mieszaniem i transportem zanieczyszczenia z wiatrem następuje wytworzenie warstwy przepływu stratyfikowanego pod względem gęstości – jest to drugi obszar takiego transportu. Trzecim i ostatnim obszarem, który można wyodrębnić ze względu na transport gazu ciężkiego, jest już najdalej od źródła. W tym obszarze dochodzi do rozrzedzenia związku chemicznego, przez co zachowuje się on już jak gaz pasywny. ALOHA bierze pod uwagę te zjawiska poprzez rozłożenie równań transportu na trzy strefy dyspersji o odpowiednio dobranych współczynnikach.

Za pomocą ALOHA można modelować: chmurę toksycznego gazu, chmurę gazu palnego, wybuchy typu BLEVE (ang. *boiling liquid expanding vapor explosions*), pożary strumieniowe, pożary rozlewisk, eksplozję chmur wybuchowych. Nie wymaga wielu danych wejściowych, a te niezbędne są relatywnie łatwe do zdobycia lub przyjęcia *ad hoc*. Model jest w stanie sam, na podstawie dostarczonych danych, uruchomić prosty model dyspersji oraz wyznaczyć strefy zagrożenia. Nie wymaga przy tym żadnych kwalifikacji użytkownika. Cały proces jest uproszczony i błyskawicznie szybki. Nawet wybór modelu dyspersji może zachodzić automatycznie, co jeszcze bardziej upraszcza całość.

Ze względu na wielość wyników użytecznych w analizach bezpieczeństwa oraz łatwość użytkowania, ALOHA powinien w całości stanowić swego rodzaju podstawowy model systemu RAT-if. Zestaw danych, które należy dostarczyć do ALOHA, jest niewielki. Program wyposażono w bogaty interfejs użytkownika, który na bieżąco sprawdza poprawność wprowadzonych danych:

1. **Położenie geograficzne oraz czas** – potrzebne głównie do określenia wpływu promieniowania słonecznego.
2. **Opis budynku** – do celów oceny zagrożeń i stężeń wewnątrz nich (wprowadza się np. liczbę pięter, wymianę powietrza, otoczenie itp.).
3. **Opis chemiczny** rozpatrywanego przypadku – w celu ustalenia parametrów fizykochemicznych znajdujących się na obiekcie.
4. **Dane pogodowe** takie jak: klasa stabilności, wysokość inwersji, prędkość i kierunek wiatru, temperatura, szorstkość terenu, zachmurzenie i wilgotność.
5. **Opis źródła.**
6. **Wybór modelu** dokonany przez użytkownika manualnie albo determinowany przez ALOHA na podstawie otrzymanych wyników z preprocesora źródła (wybór dotyczy modelu gazu pasywnego albo ciężkiego).

W trakcie wprowadzania ww. danych ALOHA sugeruje pewne wybory. Wyniki obliczeń modelem ALOHA są prezentowane w pięciu formach:

1. **Podsumowanie tekstowe** – zawiera podstawowe informacje, głównie te, które zostały wprowadzone przez użytkownika. Parametry źródła także są uwzględnione po wykonaniu obliczeń.
2. **Mapa stężeń** – obrazuje trzy obszary zagrożenia.
3. **Funkcja stężenia w czasie** – obrazuje stężenia zanieczyszczeń w zadanym punkcie jedna linia wskazuje stężenie w budynkach, a druga – w obszarze otwartym.
4. **Funkcje dawki w czasie** – jw. tylko dla zakumulowanych dawek związku chemicznego.
5. **Funkcja wydatku źródła w czasie** – obrazuje szybkość uwalniania substancji. ALOHA przelicza dawkę za pomocą równania:

$$D = \int_0^t c(t')^n dt' \quad (12)$$

W równaniu (12) c jest stężeniem zanieczyszczenia w obecnie rozpatrywanym czasie liczonym od momentu uwolnienia. Natomiast n to wielkość charakterystyczna dla konkretnego związku chemicznego, która określa jego wchłanianie przez organizm.

Ze względu na szereg uproszczeń, które zostały założone przy wyprowadzaniu równań rządzących modelem ALOHA, należy pamiętać o pewnych ograniczeniach. ALOHA można stosować, kiedy wszystkie następujące kryteria są spełnione:

1. Obszar otaczający obiekt musi być płaski.
2. Zasięg przeprowadzania symulacji dyspersji musi być większy niż 10 m.
3. Zasięg przeprowadzanej symulacji dyspersji musi być mniejszy niż 10 km.
4. Maksymalny czas uwolnienia wynosi 1 godzinę.
5. Uwolnienie gazu ciężkiego musi być naziemne.

System CALPUFF

Jednym z najczęściej używanych na świecie modeli jakości powietrza jest System CALPUFF. Jest to zaawansowany model Gaussowski o dużych możliwościach. Niestety nie jest wyposażony w preprocesor złoŹu źródłowego ani oceny ryzyka. Wymaga też znacznej ilości danych, których zapewnienie leży w gestii użytkownika. Niemniej ze względu na jego duże możliwości dotyczące dyspersji atmosferycznej RAT-if powinien mieć możliwość czytania jego wyników.

Californian Puff model został stworzony z myślą o prognozowaniu jakości powietrza. W pierwszych wersjach systemu głównymi jego założeniami były:

- możliwość wprowadzania zmiennych w czasie źródeł punktowych oraz obszarowych;
- możliwość modelowania w domenach od kilkudziesięciu metrów do tysięcy kilometrów odległości od źródła;
- sporządzanie prognoz o okresach uśrednień od jednej godziny do roku;

- symulowanie pasywnych zanieczyszczeń atmosfery oraz liniowych przemian chemicznych;
- możliwość stosowania modelu do symulacji w skomplikowanej topografii.

System CALPUFF łączy trzy główne elementy:

1. Model meteorologii CALMET⁴, który zawiera zarówno generatory diagnostyczne, jak i prognostyczne. CALMET generuje godzinne pola wiatru i temperatury w trójwymiarowej siatce. Oblicza również dwuwymiarowe pola, takie jak wysokość mieszania, charakterystyki podłoża oraz parametry dyspersji.
2. Gaussowski model dyspersji CALPUFF⁵ wyposażony jest w algorytmy suchej i mokrej depozycji, transportu nad skomplikowanym terenem, efekt *downwash* i inne. CALPUFF generuje zarówno średnio godzinne stężenia zanieczyszczeń, jak i strumienie depozycji w określonych receptorach.
3. Narzędzie do obróbki danych wyjściowych z poprzednich modeli CALPOST.

Dodatkowe elementy systemu to model fotochemiczny CALGRID oraz lagrangeowski model dyspersji KSP (*Kinematic Simulation Particle*). Wszystkie trzy modele (CALPUFF, CALGRID, KSP) zostały stworzone do korzystania z danych wejściowych pochodzących z CALMET. Dane wyjściowe z wymienionych modeli są czytane przez CALPOST.

Transport zanieczyszczeń w omawianym modelu jest rozwiązany poprzez pewnego rodzaju podzielenie smugi na segmenty. Wiele wiatr przemieszcza środek ciężkości uwolnionej substancji, po czym zostaje przeliczona jej dyspersja. Współczynniki dyspersji σ_x , σ_y i σ_z zależą do klasy stabilności oraz drogi s , jaką przejdzie chmura. Stężenie C w receptorze oddalonym od smugi o odległość wzdłuż smugi d_a i w poprzek smugi d_c oblicza się równaniem:

$$C = \frac{Q}{2\pi\sigma_x\sigma_y} g \exp\left(\frac{-d_a^2}{2\sigma_x^2}\right) \exp\left(\frac{-d_c^2}{2\sigma_y^2}\right) \quad (13)$$

$$g = \frac{2}{(2\pi)^{1/2}\sigma_z} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp\left[\frac{-(H_e+2nh)^2}{2\sigma_z^2}\right] \quad (14)$$

W równaniu (13) symbol Q to masa uwolnionej substancji. Natomiast w równaniu (14) symbol H jest efektywną wysokością środka chmury, a h – wysokością warstwy mieszania. Równanie (14) może być określone jako pionowa składowa równania Gaussowskiego.

Można założyć, że dyspersja zachodzi w obu kierunkach poziomych z taką samą szybkością ($\sigma_x = \sigma_y$). Wtedy równanie (13) upraszcza się do postaci:

⁴ J. S. Scire, F. R. Robe, M. E. Fernau, R. J. Yamamoto, *A User's Guide for the CALMET Meteorological Model*, Earth Tech, Inc., 5 edition, January 2000.

⁵ J. S. Scire, D. G. Strimaitis, R. J. Yamamoto, *A User's Guide for the CALPUFF Dispersion Model*, Earth Tech, Inc., 5 edition, January 2000.

$$C(s) = \frac{Q(s)}{2\pi\sigma_y^2(s)} g(s) \exp \left[\frac{-R^2(s)}{2\sigma_y^2(s)} \right] \quad (15)$$

gdzie R jest odległością środka smugi od danego receptora, a s jest drogą przebytą przez smugę. Średnie stężenie w receptorze wyniesie zatem:

$$\bar{C} = \frac{1}{ds} \int_{s_0}^{s_0+ds} \frac{Q(s)}{2\pi\sigma_y^2(s)} g(s) \exp \left[\frac{-R^2(s)}{2\sigma_y^2(s)} \right] ds \quad (16)$$

gdzie s_0 jest drogą przebytą na początku próbkowanego kroku.

$$R(s) = [(x_1 - x_r + p dx)^2 + (y_1 - y_r + p dy)^2]^{1/2} \quad (17)$$

Odległość receptora od smugi R można obliczyć za pomocą równania (17), w którym p jest równe 0 na początku segmentu (x_1, y_1) oraz równe 1 na końcu segmentu (x_2, y_2) . Punkt (x_r, y_r) jest położeniem receptora, natomiast $dx = x_2 - x_1$ oraz $dy = y_2 - y_1$.

$$Q(s) = Q(s_0) + p[Q(s_0 + ds) - Q(s_0)] \quad (18)$$

Przemiany chemiczne są opisane prostą zależnością liniową zgodną z równaniem (18).

Łącząc zatem równania (18) i (16), można otrzymać ostateczne równanie stężenia w receptorze uwzględniające odległość smugi i przemiany chemiczne.

$$C = \frac{g}{2\pi\sigma_y^2} \left\{ Q(s_0) \int_0^1 \exp \left[\frac{-R^2(p)}{2\sigma_y^2} \right] dp + \right. \\ \left. + [Q(s_0 + ds) - Q(s_0)] \int_0^1 p \exp \left[\frac{-R^2(p)}{2\sigma_y^2} \right] dp \right\} \quad (19)$$

Równanie (19) jest podstawowym równaniem działającym w CALPUFF. Należy zwrócić uwagę, że nie jest przystosowane do gazu ciężkiego oraz zawiera szereg uproszczeń. Dla potrzeb sporządzania ogólnych analiz bezpieczeństwa ten poziom dokładności jest wystarczający, a jego prostota sprawia, że model nie wymaga dużych zasobów obliczeniowych.

System CALPUFF jest bardziej zaawansowanym modelem Gaussowskim niż ALOHA, jednak umożliwia wyłącznie modelowanie gazów pasywnych. Ma większe możliwości i większą dokładność w zagadnieniach transportu zanieczyszczeń pasywnych. Dodatkowo może być wykorzystywany w większej skali przestrzennej. Ceną jednak jest duże zapotrzebowanie na specjalistyczne dane wejściowe. Ponadto CALPUFF to system współzależnych modeli atmosferycznych bez dodatkowych algorytmów wyznaczania strefy zagrożenia. Zatem – do otrzymania tych stref – wyniki z tego modelu muszą być później ponownie przetworzone. CALPUFF może służyć do obliczeń dotyczących konkretnych scenariuszy awarii przy znanych warunkach pogodowych oraz topografii. Można również uruchamiać CALPUFF,

wielokrotnie powtarzając ten sam scenariusz awarii przy założeniu różnych warunków pogodowych mogących wystąpić w danym miejscu. Posiadając wystarczająco duży zestaw takich wyników, można określić statystyki na podstawie otrzymanych pól stężeń i dokonać oceny.

System CALPUFF dzieli się na poszczególne modele, które mogą zarówno działać niezależnie, jak i przetwarzać wzajemnie przez siebie wygenerowane dane. Niemniej, żeby efektywnie używać systemu CALPUFF, należy najpierw przeprowadzić obliczenia modelem meteorologii CALMET, a następnie jego dane wyjściowe użyć do symulacji modelem CALPUFF. Zatem w niniejszym rozdziale opisane zostaną wymagania tych dwóch modeli niezależnie.

Wymagania modelu CALMET:

- godzinne obserwacje:
 - prędkość wiatru,
 - kierunek wiatru,
 - temperatura,
 - zachmurzenie,
 - wysokość chmur,
 - ciśnienie na powierzchni,
 - wilgotność względna,
 - wysokość opadu,
 - typ opadu;
- sondáže:
 - prędkość wiatru (2 na dzień),
 - kierunek wiatru (2 na dzień),
 - temperatura (2 na dzień),
 - ciśnienie (2 na dzień),
 - wysokość (2 na dzień),
 - dane z numerycznego modelu prognozy pogody MM4/MM5 (opcjonalne, godzinne);
- obserwacje morskie (opcjonalne):
 - różnica temperatur powietrze – morze,
 - temperatura powietrza,
 - wilgotność względna,
 - wysokość mieszania,
 - prędkość wiatru,
 - kierunek wiatru;
- dane geofizyczne (na siatce):
 - wysokość terenu n.p.m.,
 - kategoria wykorzystania terenu,
 - długość tarcia powierzchni (opcjonalne),
 - albedo (opcjonalne),
 - stosunek Bowena (opcjonalne),

- stała strumienia ciepła (opcjonalne),
- antropogeniczny strumień ciepła (opcjonalne).

Wymagania modelu CALPUFF:

- dane geofizyczne (otrzymane z CALMET):
 - szorstkość terenu,
 - kategoria wykorzystania terenu,
 - wysokość terenu n.p.m,
 - wskaźnik pokrycia liściowego;
- dane meteorologiczne (otrzymane z CALMET):
 - składowe wektora wiatru u , v , w ,
 - temperatura powietrza,
 - prędkość tarciowa,
 - skala konwekcyjnej prędkości,
 - wysokość mieszania,
 - długość Monina-Obukhova,
 - klasa stabilności,
 - wielkość opadu,
 - gęstość powietrza,
 - słoneczne promieniowanie krótkofalowe,
 - wilgotność względna,
 - typ opadu;
- emisje:
 - punktowe,
 - obszarowe,
 - objętościowe,
 - liniowe.

Najistotniejszymi danymi wyjściowymi z punktu widzenia systemu RAT-if są średniodzinne pola stężeń zanieczyszczeń w atmosferze. Jeśli zajdzie potrzeba, postprocesor CALPOST może obliczyć stężenia średnie trzygodzinne albo dobowe (najwyższa rozdzielczość czasowa to stężenia średniodzinne). Należy też zwrócić uwagę na fakt, że stężenia przelicza się na poziomie gruntu. Wyniki są w rozdzielczości przestrzennej, zgodne z tym co zdefiniował użytkownik. Zaletą CALPUFF – w porównaniu z ALOHA – jest posiadanie przez system algorytmów do obliczeń stężeń zanieczyszczeń w bliskim zasięgu od źródła.

CALPUFF, pomimo posiadanych ograniczeń dziedziczonych po modelach gaussowskich, rozwiązuje wiele problemów za pomocą metod parametrycznych. Główne ograniczenia systemu CALPUFF są następujące:

1. Model dyspersji zanieczyszczeń jest dwuwymiarowy. Co prawda rozmaite dane meteorologiczne, jakie czyta CALMET, są trójwymiarowe, jednakże sama symulacja zanieczyszczeń dotyczy uśrednionych pól stężeń zanieczyszczeń przy powierzchni ziemi. Wynikowe pole zanieczyszczeń będzie zatem zawsze polem

dwuwymiarowym. Z tego powodu CALPUFF nie powinien być używany do symulacji, w których istotne są stężenia na wysokich piętrach.

2. Charakterystyka równań dyspersji modeli Gaussowskich jest taka, że otrzymany wynik zawsze jest wynikiem uśrednionym po czasie. Z tego względu należy pamiętać, że wyniki symulacji nie są chwilowymi stężeniami zanieczyszczeń, lecz uśrednionymi stężeniami przy najkrótszym okresie uśredniania wynoszącym godzinę.

HGSYSTEM

HGSYSTEM to bogaty system modelowania toksycznych gazów, gazów palnych, pożarów strumieniowych i pożarów rozlewisk, wyposażony w preprocesor źródła i Gaussowskie modele dyspersji. Posiada model gazu pasywnego oraz ciężkiego. Rozwój modelu jednak został wstrzymany. Powinien zatem stanowić zbiór pomocnych algorytmów do własnej implementacji w przyszłości. HGSYSTEM jest pakietem modeli opisujących dyspersję gazów, płynów lub dwufazowych uwolnień ze zbiorników zawierających wieloskładnikowe substancje. Pierwsza wersja HGSYSTEM została zaprojektowana do przeprowadzania symulacji uwolnień fluorowodoru lub gazu doskonałego. Później pakiet został rozszerzony do mieszanin wieloskładnikowych.

Pakiet HGSYSTEM zawiera rozmaite modele służące do opisu różnych zjawisk. Model termodynamiki odwzorowuje dyspersję wieloskładnikowych mieszanin dwufazowych (model aerozolowy). Kolejne modele opisują dyspersję krótkozasięgową, również dla uwolnień wieloskładnikowych dwufazowych substancji przechowywanych w zbiornikach pod ciśnieniem. Ze względów historycznych najbardziej rozbudowane algorytmy są obecne przy dyspersji fluorowodoru, jak na przykład algorytm opróżniania zbiornika w trakcie uwolnienia tego związku.

Aktualna wersja HGSYSTEM pozwala obliczać zmienne w czasie uwolnienia. Możliwe jest również symulowanie parowania płynnych rozlewisk oraz zmiennych w czasie uwolnień gazów ciężkich. Rozwój HGSYSTEM był sponsorowany przez wiele instytucji, niepobierających opłat za korzystanie albo rozwijanie kodu. Jest on udostępniony za darmo z możliwością dowolnego użytkowania.

HGSYSTEM⁶ na początku został opracowany przez ponad 20 instytucji z branży chemicznej lub petrochemii celem zapewnienia ogólnodostępnego narzędzia do symulacji dyspersji fluorowodoru i idącej za tym oceny bezpieczeństwa. Później pakiet ewoluował do znacznie szerszych zastosowań. Można w nim znaleźć rozmaite modele do symulacji losu różnych substancji.

Istnieją dwa modele termodynamiczne w obrębie pakietu: (1) Wieloskładnikowy, dwufazowy – przeznaczony do symulowania uwolnień, takich jak mieszanina cieczy i gazu. Użytkownik modelu może sam określić, jaki jest skład mieszaniny poprzez wybór składników w bazie dostępnej w pakiecie. Model nie uwzględnia efektów reakcji chemicznych; (2) Model specjalistyczny – przeznaczony do dyspersji fluoro-

⁶ L. Post, HGSYSTEM technical reference manual: The SPILL model, 1998.

wodoru, uwzględniający reakcje chemiczne i procesy termodynamiczne. Model jest stosowany do mieszanin fluorowodoru z wodą i gazem doskonałym. Uwzględnione są reakcje chemiczne (fluorowodoru z wodą oraz polimeryzacja fluorowodoru).

Model rozlewu SPILL⁷ ogólnego zastosowania dotyczy uwolnienia substancji dwufazowej wieloskładnikowej ze zbiornika pod ciśnieniem. Model uwzględnia zmienność w czasie uwolnienia. Jego głównym zastosowaniem jest uwolnienie substancji ciekłej. Model pozwala obliczyć opróżnienie zbiornika pod ciśnieniem za pomocą tylko uwolnienia gazowego, za czym idzie inna zmiana ciśnienia w zbiorniku, jeśli przechowywana w nim była substancja ciekła.

Kolejnym ważnym modelem w pakiecie HGSYSTEM jest LPOOL⁸ przeznaczony do symulowania parowania rozlewiska. Model oblicza strumienie masy uwalniane z rozlewiska z gruntu zarówno z wrzących, jak i nie wrzących płynów. Umożliwia również obliczenie wielkości uwolnienia ze zbiornika pod ciśnieniem.

HGSYSTEM posiada też model dyspersji dalekozasięgowej. Model PGPLUME⁹ dotyczy transportu związku pasywnego. Pakiet zawiera również zwalidowany model przeznaczony do obliczeń gazu ciężkiego. Model oblicza stężenia substancji na poziomie gruntu wyemitowanych ze źródeł obszarowych niezmiennych w czasie.

Ostatnia aktualizacja HGSYSTEM miała miejsce w roku 1998. Pakiet jest dostępny w formie binarnej 32-bitowej. Dodatkowo dokumentacja nie jest wyczerpująca, co jednak można zrekomensować dostępnymi artykułami naukowymi, które wielokrotnie są w niej cytowane. Z tych względów HGSYSTEM nie powinien być stosowany bezpośrednio jako model w RAT-if, ale może służyć jako zaplecze intelektualne podczas pojawienia się ewentualnej potrzeby poszerzenia możliwości systemu. W takim przypadku można wskazać publikacje użyte w procesie projektowania HGSYSTEM do zaprogramowania jako dodatkowe algorytmy.

Model przyjmuje następujące dane:

- dane o zanieczyszczeniu:
 - ułamek molowy zanieczyszczenia w mieszaninie,
 - ułamek molowy każdego składnika w mieszaninie,
 - entalpia zanieczyszczenia;
- dane o otoczeniu:
 - wilgotność względna,
 - temperatura powietrza;
- dane o podłożu;
- właściwości każdego składnika w mieszaninie:
 - masa atomowa,
 - ciepło właściwe,
 - ciepło skraplania;
- ciśnienie otoczenia.

⁷ L. Post, HGSYSTEM technical reference manual: The SPILL model, 1998.

⁸ L. Post, HGSYSTEM technical reference manual: The LPOOL model, 1998.

⁹ K. McFarlane, HGSYSTEM technical reference manual: The PGPLUME model for far-field dispersion, 1998.

HGSYSTEM zwraca stężenia wszystkich modelowanych zanieczyszczeń; dziedziży ograniczenia modeli gaussowskich. Dodatkowo należy zwrócić uwagę na następujące aspekty:

1. Model jest jednowymiarowy. Tego typu narzędzia zakładają, że wiatr wieje w jednym kierunku równoległym z osią OX i jest stały w czasie.
2. Teren dookoła miejsca awarii jest płaski.

MODFLOW

Najpopularniejszym modelem dynamiki wód podziemnych jest MODFLOW. Bogaty zestaw dodatkowych pakietów i programów, z jakich można skorzystać podczas przeprowadzania symulacji powoduje, że jego zastosowania są bardzo szerokie. Jednakże celem przeprowadzenia symulacji stężeń zanieczyszczeń powinno stosować się dodatkowe modele *off-line*, gdyż MODFLOW służy do dynamiki wód podziemnych, a nie transportu zanieczyszczeń.

Głównymi założeniami modelu MODFLOW¹⁰ było symulowanie przepływów wód podziemnych w dwóch lub trzech wymiarach przestrzennych. MODFLOW jest rozwijany przez U.S. Geological Survey (USGS). Od roku 1990 jest to jeden z najczęściej używanych modeli przeznaczonych do symulacji przepływu wód podziemnych, stanowi podstawę do opracowywania różnych rozszerzeń i modeli aplikacyjnych. Aktualna wersja MODFLOW-2005 jest łatwa w zrozumieniu, obsłudze i modyfikacji. Struktura modelu jest modułowa. Przykładowe moduły to moduł studni do symulowania dodatkowego wpływu studni na wody powierzchniowe albo moduł rzeczny. MODFLOW sam jest modelem przepływu wód, a nie transportu zanieczyszczeń, zatem potrzebuje dodatkowych programów do takich symulacji. Podstawowe równanie ruchu wody w trzech wymiarach opisać można:

$$S_s \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(K_{xx} \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_{yy} \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_{zz} \frac{\partial h}{\partial z} \right) + W \quad (20)$$

gdzie:

K_{xx} , K_{yy} i K_{zz} są współczynnikami filatracji w odpowiednich kierunkach;

H – wysokość piezometryczna;

W – źródło albo upust;

S_s – pojemność właściwa;

t – czas.

Zazwyczaj S_s oraz K są funkcjami przestrzeni, natomiast W jest też funkcją czasu. Użytkownik modelu musi sam określić wielkości tych funkcji – początkowy stan wysokości piezometrycznej h oraz warunki brzegowe.

¹⁰ A. W. Harbaugh, *U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6-A16, w: MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey Modular Ground – Water Model – the Ground-Water Flow Process*, 2005, <https://doi.org/10.3133/tm6A16>.

Ze względu na brak konieczności operowania całym zbiorem równań, w które wyposażony jest MODFLOW, został on podzielony na pakiety. Użytkownik systemu sam dobiera pakiety, które będą mu potrzebne do konkretnego zadania. Wybierać może spośród następujących:

1. **Basic** – program podstawowy.
2. **Block-Centered Flow** – pakiet służący do definiowania typów warstw w modelu.
3. **Layer-Property Flow** służy do określenia, czy przepuszczalność warstwy w modelu jest zmienna w czasie, czy stała.
4. **Horizontal Flow Barrier** służy do definiowania nieprzepuszczalnych barier w modelu (np. skały).
5. **Well** jest pakietem definiującym studnie. Studnie zdefiniowane za jego pomocą mogą zarówno powodować czerpanie wody, jak i zasilanie warstwy wodonośnej.
6. **Recharge** określa zasilanie warstw wodonośnych poprzez źródła powierzchniowe. Stosuje się go na przykład do symulacji opadu deszczu.
7. **River** służy do uwzględnienia wpływu obecności cieku wodnego na wody podziemne. Nie jest to zaawansowany model wód powierzchniowych, ale sposób na obliczenie zmian wysokości piezometrycznej w obliczu rzeki.
8. **General-Head Boundary** jest pakietem do symulacji zdarzeń zasilania pewnych obszarów warstwy wodonośnej za pośrednictwem wewnętrznych źródeł.
9. **Drain** wykorzystywany jest do symulacji czerpania wód podziemnych przez roślinność.
10. **Evapotranspiration** dotyczy transpiracji roślinnej oraz bezpośredniego parowania z nasyconych obszarów gleby.
11. **Strongly Implicit Procedure** – pakiet numeryczny do rozwiązywania dużych układów równań liniowych.
12. **Preconditioned Conjugate Gradient** – pakiet numeryczny do rozwiązywania równań metodą sprzężonego gradientu.
13. **Direct Solution** – pakiet numeryczny do rozwiązywania równań bezpośrednio.

MODFLOW wymaga pewnych specyficznych danych wejściowych, które można pozyskać z pomiarów lub od instytucji takich jak Państwowy Instytut Geologiczny. Przewodność oraz cała struktura warstw wodonośnych są informacjami koniecznymi do pracy z tym modelem. Wartości takie jak wysokość terenu są już łatwiejsze do zdobycia. Część danych dotyczących warstw wodonośnych można przyjąć ad-hoc, przy założeniu, że na niewielkim obszarze panuje jednorodność przewodności hydraulicznej. Musi to być jednak robione ostrożnie, z pomocą osoby doświadczonej w modelowaniu wód podziemnych. Uruchomienie MODFLOW jest konieczne, aby umożliwić późniejsze przeprowadzenie symulacji transportu zanieczyszczeń w warstwie wodonośnej. Aby zatem zapewnić prawidłowe działanie systemu RAT-if, należy pozyskać odpowiednie dane do zasilania MODFLOW.

MODFLOW jest modelem siatkowym operującym na siatkach strukturalnych (tzn. że wszystkie elementy są tego samego kształtu). W związku z tym należy dostarczyć mu wszystkie dane opisane przez zmienne w równaniu (20). Należy także pamiętać o odpowiedniej dyskretyzacji siatki obliczeniowej. Ujęcie odpowiednich warstw wodonośnych w prawidłowo dobrane węzły obliczeniowe powinno zostać pozostawione w gestii użytkownika. Należy określić wysokość terenu na powierzchni, wysokości piezometryczne w każdym aktywnym węźle siatki i przewodność hydrauliczną.

W stworzonej przez siebie siatce użytkownik musi zdefiniować, które komórki mają się zachowywać w określony sposób. Mianowicie MODFLOW operuje na trzech rodzajach komórek: *no-flow cell* – komórka, przez którą przepływ nie zachodzi, *constant-head cell* – stała wysokość piezometryczna w komórce, *variable – head cell* – komórka, w której zachodzi zmienność czasowa wysokości piezometrycznej.

Użytkownik musi również zdefiniować, czy interesuje go przepływ ustalony, czy nieustalony. Jeśli będzie to przepływ nieustalony, to w czasie trwania całej symulacji można spodziewać się zmian w wysokości piezometrycznej każdej aktywnej komórki, natomiast przy ustalonym rozwiązaniu zostanie jeden układ równań i ruch będzie stały w czasie. W tym ostatnim przypadku obliczenia powinny zająć mniej czasu. Zależnie od zdefiniowanego kroku czasowego (w MODFLOW może wynosić on od dni do sekund) obliczona zostanie ewolucja w czasie wysokości piezometrycznej. Dodatkowo model w trakcie obliczeń sporządza bilans masy wody.

Jako model Eulerowski MODFLOW dziedziczy wszystkie ograniczenia modeli tej klasy. Dodatkowo, ze względu na konkretne założenia i metody zaimplementowane w modelu, należy pamiętać o dodatkowych ograniczeniach:

1. Ponieważ w modelu prędkość filtracji jest opisywana przez prawo Darcy'ego, nie należy stosować go do przepływów turbulentnych. Ruch turbulentny jest dość rzadkim zjawiskiem w wodach podziemnych, jednakże samym modelem można utworzyć takie warunki, które wspomniany ruch powinny powodować (poprzez wprowadzenie dużych gradientów wysokości piezometrycznej). W praktyce oznacza to, że nie powinno się wprowadzać dużych spadków hydraulicznych.
2. Tensor współczynnika filtracji nie odwzorowuje nieortogonalnej anizotropii. Zatem warstwy gleby o tym samym współczynniku filtracji należy odwzorowywać w modelu tak, że granice węzłów obliczeniowych powinny być równoległe z granicami ośrodków o tym samym współczynniku. Dyskretyzacja węzłów obliczeniowych w taki sposób, że objętość węzła zajmie dwa lub więcej ośrodków o tym samym współczynniku filtracji, przyniesie nieprawidłowe wyniki.
3. Model zakłada, że woda w całej domenie obliczeniowej ma stałą gęstość, dynamiczną lepkość oraz – co za tym idzie – temperaturę. Do zagadnień tego typu MODFLOW nie jest przystosowany. W zamian można używać pakietu SEAWAT.

4. Model może być stosowany do symulacji stanu ustalonego (wystarczy jedna iteracja) oraz stanu przejściowego pomiędzy laminarnym a turbulentnym.

MT3DMS

Uzupełnieniem do modelu MODFLOW, który może służyć do symulacji zanieczyszczeń w wodach podziemnych, jest MT3DMS. Jest to model dyspersji ogólnego zastosowania, który wymaga danych z modelu dynamiki wód podziemnych. *Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model* (MT3DMS)¹¹ jest następcą starszego modelu MT3D służącego do transportu zanieczyszczeń rozpuszczonych w wodach podziemnych. W porównaniu ze swoim poprzednikiem MT3DMS posiada kilka użytecznych usprawnień w postaci bardziej zaawansowanych metod numerycznych. Najważniejsze jednak usprawnienie polega na umożliwieniu symulacji transportu i dyspersji wielu związków chemicznych w warstwie wodonośnej oraz reakcji chemicznych zachodzących między nimi.

MT3DMS nie jest modelem dynamiki warstwy wodonośnej, zatem do działania potrzebuje pola prędkości wcześniej otrzymanego z MODFLOW. Dzieje się tak, ponieważ założono, że przemiany chemiczne nie wpłyną znacząco na przepływ. Modelowanie transportu i dyspersji poza modelem dynamiki stwarza możliwość uruchamiania modelu wiele razy bez konieczności powtarzania symulacji pola prędkości. MODFLOW zatem powinien być uruchamiany tylko wtedy, kiedy zachodzi taka potrzeba.

Podstawowe równanie opisujące ewolucję w czasie związku chemicznego rozpuszczonego w wodzie podziemnej opisuje równanie:

$$\frac{\partial(\Theta C^k)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\Theta D_{ij} \frac{\partial C^k}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (\Theta v_i C^k) + q_s C_s^k + \sum R_n \quad (21)$$

gdzie:

- Θ – porowatość ośrodka;
- C^k – stężenie k -tej substancji rozpuszczonej;
- t – czas;
- $x_{i,j}$ – odległość w kartezjańskim układzie współrzędnych;
- D_{ij} – hydrodynamiczny współczynnik dyspersji;
- v_i – prędkość przepływu $v_i = q_i / \Theta$;
- q_s – przepływ objętościowy przypadający na objętość warstwy wodonośnej (źródło lub upust);
- C_s^k – źródło albo upust związku chemicznego;
- R_n – człon reakcji chemicznych.

¹¹ Ch. Zheng, P. Wang, *MT3DMS: A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User's Guide*. University of Alabama, December 1999.

Pierwsze dwa człony prawej strony równania (21) opisują odpowiednio dyspersję i adwekcję. Warto nadmienić, że współczynnik dyspersji D_{ij} nie jest w pełni współczynnikiem prawidłowym dla ośrodka anizotropowego. Uzyskanie wszystkich współczynników do otrzymania pełnego anizotropowego D_{ij} jest często niemożliwe. W związku z tym MT3DMS wprowadza pewne uproszczenia przy wyznaczaniu D_{ij} , zakładając oddzielne parametry przepływu poziomego i pionowego. Takie założenia są często czynione w modelowaniu wód podziemnych, ponieważ wprowadzają pewien poziom dokładności, który jest wystarczający. Trzeci człon prawej strony równania (21) odpowiada za źródło lub upust. Dotyczy to tylko dodawania lub odejmowania masy substancji rozpuszczonej. MT3DMS bierze pod uwagę ten człon jako punktowy albo obszarowy. Obszarowe oddziaływanie dotyczy zasilania albo ewapotranspiracji. Punktowe źródła lub upusty dotyczą studni, drenaży i rzek.

Ostatni człon równania (21) opisuje reakcje chemiczne. MT3DMS oblicza reakcje sorpcji, rozpad promieniotwórczy oraz biodegradację.

Wymaganiem koniecznym do zastosowania modelu MT3DMS w analizach ryzyka jest wcześniejsze uruchomienie modelu MODFLOW. Jeśli ten warunek jest spełniony (zakładając, że MODFLOW obsługiwany jest prawidłowo) nie ma dodatkowych przeciwwskazań w stosowaniu MT3DMS. Model zwróci ewolucję pola stężeń związków chemicznych w czasie w danej warstwie wodonośnej. MT3DMS wymaga do działania danych pochodzących bezpośrednio z MODFLOW. Są nimi pola wysokości piezometrycznej, strumienie między komórkami obliczeniowymi, lokalizacja oraz wielkość upustów albo źródeł w przypadku studni.

Model sporządza podsumowanie dotyczące stężeń wszystkich związków rozpuszczonych, parametrów przepływu oraz bilans masy. Naturalnie możliwe jest także stworzenie pól trójwymiarowych stężeń w każdym węźle siatki oraz stężeń w zaznaczonych przez użytkownika miejscach. Dane o stężeniach będą zapisywane z częstotliwością wybraną przez użytkownika.

Ze względu na fakt, iż MT3DMS jest modelem Lagrangeowskim, dziedziczy wszystkie ograniczenia modeli tej klasy. Ponadto, skoro korzysta z wyników modelu MODFLOW, jest również od jego ewentualnych błędów uzależniony. Trzeba zatem pamiętać o wszystkich ograniczeniach modeli Lagrangeowskich, modelu MODFLOW oraz jego klasy.

Sam model MT3DMS posiada następujące ograniczenia:

Koncepcją zaimplementowaną w modelu jest brak dyfuzji molekularnej. Wprowadzenie takiego założenia zwiększyłoby koszt obliczeniowy modelu, ale polepszyłoby wyniki w bardzo specyficznych przypadkach. Zakłada się zatem, że dyspersja mechaniczna jest znacznie większa, a dyfuzja molekularna jest w stosunku do niej zaniedbywana, ponieważ ma ona znaczenie głównie w przypadkach bardzo małych prędkości przepływu. W praktyce oznacza to, że model MT3DMS nie powinien być stosowany przy bardzo małych gradientach wysokości piezometrycznej.

FDS

Fire Dynamics Simulator¹² (FDS) to bezpłatny i ogólnodostępny kod klasy CFD (czyli obliczeniowej mechaniki płynów) przeznaczony do zastosowania na okoliczność modelowania zjawiska powstawania, rozwoju i rozprzestrzeniania się pożarów lub – w skrócie – dynamiki pożarów. Kody klasy CFD odznaczają się obecnie najwyższym poziomem dokładności odwzorowania realnych zjawisk fizycznych, ale co do zasady uzyskanie wiarygodnych wyników przy ich pomocy okupione jest niezwykle czasochłonnymi i wymagającymi wielu zasobów obliczeniami (często zasadnymi tylko, jeśli w posiadaniu użytkownika dostępny jest klasterek komputerowy). Kody CFD są wykorzystywane do weryfikacji prostszych modeli, np. parametrycznych, stworzonych z myślą o szybkich obliczeniach.

FDS to czysty solver obliczeniowy, a uzyskane za jego pomocą wyniki są trudne do zinterpretowania bez dodatkowego narzędzia do ekstrakcji danych i/lub tzw. renerenderingu w trójwymiarze, czyli postprocessingu. Stąd też dostarczany jest on wraz z dodatkowym oprogramowaniem – SmokeView. Oba programy zostały stworzone i są rozwijane przez amerykański National Institute of Standards and Technology (NIST) oraz VTT Technical Research Centre w Finlandii. Do głównych developerów zaliczyć można ponadto specjalistów z firmy Jensen Hughes (USA), Continuum Analytics (USA), Uniwersytetu w Aalto (Finlandia), Uniwersytetu w Teksasie (USA), U.S. Forest Service (USA), Julich Supercomputing Centre (Niemcy).

Nagły globalny wzrost komputerowych mocy obliczeniowych w ostatnich latach oraz związany z nim intensywny rozwój technik numerycznej analizy przepływu płynów sprawiają, że ta ostatnia jest obecnie aplikowana coraz szerzej w bardzo różnych dziedzinach życia, a zwłaszcza w technice. Należy przy tym zaznaczyć, że aktualne kody tzw. ogólnego zastosowania są już na tyle rozbudowane, że przez to stanowią mniej efektywne narzędzia do rozwiązywania konkretnych problemów niż tzw. kody dziedzinowe lub inaczej kody dedykowane.

CFD wyrosło generalnie na gruncie idei noszącej miano Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations (RANS), w której podstawowe równania zasad zachowania masy, pędu i energii – a więc fizyce branej pod uwagę jako *ab initio!* – przyjmuje się, że turbulentny, czyli czasowo-zmienny ruch płynu można rozdzielić na dwie składowe prędkości: na tzw. prędkość uśrednianą oraz na fluktuację tejsze prędkości lub inaczej szybkozmienną oscylację wokół tej prędkości uśrednianej. Pierwszą przełomową pracę w tej dziedzinie stanowił algorytm modelu turbulencji zwanego „*k-ε*”, którego twórcami byli Patankar i Spalding¹³. Model ten wykorzystywany jest także i dziś. CFD jest stosowane z dużym powodzeniem w bardzo różnych dziedzinach, od modelowania przepływu płynów fizjologicznych w ciałach żywych stworzeń, poprzez optymalizację aerodynamiki pojazdów, aż po bezpieczeństwo instalacji jądrowych i lotów kosmicznych.

¹² K. McGrattan i in., *Fire Dynamics Simulator – Technical Reference Guide Volume 1: Mathematical Model*, “NIST Special Publication” 2016, 1018.

¹³ S. V. Patankar, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing, New York 1980.

Jak już wspomniano, modele RANS były i są rozwijane jako aproksymacja uśredniania w czasie równań zasad zachowania. Takie podejście do tematu z natury rzeczy nie daje precyzyjnej odpowiedzi. To czego można się spodziewać po zastosowaniu powyższej metody, zwłaszcza jeśli chodzi o modelowanie pożarów, to wynik uśredniony. Co prawda dokładniejszy niż niejeden wcześniej opisywany model, ale wciąż niedoskonały.

Pożar jest z definicji zjawiskiem miejscowo bardzo dynamicznym, zmiennym przestrzennie, w którym znaczenie mają bardzo lokalne zmiany masy substratów i produktów reakcji, gradientów temperatur czy profili prędkości. Trudno wychwycić te zmiany, skupiając się na podejściu uśrednień Reynoldsa, czyli pomijając obliczenia tzw. kaskady wirów, prowadzących do dyssypacji energii. Dlatego uzasadnionym krokiem naprzód jest implementacja techniki Large Eddy Simulation (LES), czyli symulacji wielkich wirów, dzięki której uzyskuje się wyniki w znacznie dokładniejszych skalach czasowych i przestrzennych na dużo gęstszych siatkach obliczeniowych. Tu należy zauważyć, że mówiąc o klasycznych analizach CFD, najczęściej chodzi o podejście eulerowskie, czyli takie, w którym niezbędna jest dyskretyzacja domeny na małeńkie objętości, komórki (zwane z ang. *mesh*). Przy tym zestaw równań, o których mowa była wcześniej, jest rozwiązywany dla każdej komórki z osobna. Im więcej komórek, tym więcej układów równań do jednoczesnego obliczenia, stąd stale rosnące zapotrzebowanie na moc obliczeniową.

Podstawowa idea techniki LES zakłada, że struktury wielkich wirów – dominujących przepływ – są wystarczająco duże, aby móc je obliczać (a nie tylko aproksymować) z podstawowych równań mechaniki płynów z wystarczającą dokładnością. Przyjmuje się jednocześnie, że małe wiry mogą być pomijane, tj. modelowane współczynnikami twierdzeń domykających lub dodatkowych równań. LES w ujęciu pożarowym odnosi się do opisu turbulentnego mieszania się lotnych związków paliwa i produktów spalania z lokalną atmosferą otaczającą płomień. Proces, który kontroluje prędkość spalania i rozprzestrzeniania dymu czy spalin, jest niezwykle trudny do precyzyjnego przewidzenia.

Równania opisujące transport masy, pędu i energii w przepływach wymuszonych pożarem muszą być upraszczane tak, aby mogły być efektywnie rozwiązywane. Równania mechaniki płynów w ogólności opisują całą paletę zjawisk i procesów fizycznych, z których większość nie ma związku z pożarami. Pozostawiając je w takiej postaci, można by narazić się na ogromny i jednocześnie zbyteczny koszt obliczeniowy, który niekoniecznie wniesie cokolwiek nowego do analizy. Dlatego też szuka się uproszczeń w równaniach. Najlepszym tego przykładem są równania Rehma i Bauma¹⁴, nazywane też przez specjalistów zajmujących się modelowaniem pożarów CFD równaniami spalania przy niskiej liczbie Macha (Low Mach Number combustion equations), zwanymi dalej równaniami niskiej liczby Macha. Równania te opisują

¹⁴ R. G. Rehm, H. R. Baum, *The equations of motion for thermally driven, buoyant flows*, "Journal of Research of the NBS" 1978, 83, 297–308.

powolny ruch gazu powodowany przez chemiczne procesy uwalniania ciepła oraz siłę nośną (z ang. *buoyancy forces*). Wciąż jednak problemem jest pogodzenie jednym algorytmem przepływów szybkich i wolnych.

Równania niskiej liczby Macha, zaadoptowane w FDS, rozwiązywane są numerycznie przy użyciu metody objętości skończonych, dzieląc przestrzeń zawierającą w sobie objętość płomienia w szereg licznych regularnych, prostopadłościennych komórek. W każdej komórce przechowywane są lokalne parametry gazu, tj. np. jego prędkość czy temperatura. Oczywiście dokładność odwzorowania dynamiki pożaru zależy od wielkości oraz liczby komórek użytych do symulacji. Im są one mniejsze i im jest ich więcej, tym lepiej dla jakości wyniku. Ta liczba jest niestety skończona i ściśle zależna od przewidzianego do realizacji obliczeń sprzętu komputerowego i jego mocy.

Na dzień dzisiejszy, pojedynczy (choć wielordzeniowy) procesor komputera biurowego jest w stanie przeliczać przy pomocy FDS-a domeny zawierające do kilku milionów komórek w rozsądnym przedziale czasu. To oznacza, że stosunek wielkości największego do najmniejszego wiru w kaskadzie (tzw. dynamiczny zakres symulacji) wynosi 100, czyli tylko dwa rzędy wielkości różnicy. Tymczasem istnieje potrzeba wzięcia pod uwagę różnicy nawet 4–5 rzędów wielkości, aby ująć wszystkie istotne procesy rozwoju płomienia, począwszy od 1 mm lub mniej z punktu widzenia samego płomienia aż do dziesiątek metrów, uwzględniając wymiary budynku, w którym ten pożar jest modelowany/liczony. Decyzja użytkownika dotycząca wyboru skali i dokładności obliczeń ma również wpływ na kształt równań wykorzystywanych przez model.

Analiza w kontekście zarówno pożarów w przestrzeniach zamkniętych, jak i w otwartym terenie przy użyciu narzędzi CFD jest uznawana obecnie za najbardziej precyzyjną technikę śledzenia rozwoju płomienia i transportu gorących gazów czy dymu w przestrzeni. Pozwala określić parametry, takie jak temperatura, ciśnienie, prędkość czy kierunek przepływu z dokładnością do wielkości użytych komórek w dowolnym miejscu, gdzie w normalnych warunkach nie byłoby w ogóle możliwe zainstalowanie urządzeń pomiarowych, nie mówiąc o ewentualnym zaburzeniu pomiarów przez samo urządzenie pomiarowe.

Narzędzia CFD nazywa się też potocznie wirtualnym laboratorium. Każdy eksperyment można przeprowadzić dowolną liczbę razy, bez obawy o koszty związane z przygotowaniem kolejnej (koniecznie powtarzalnej) próbki do badań, zwłaszcza jeśli jest to analiza zniszczeniowa – i to bez obawy o samo laboratorium.

Oprogramowanie CFD dedykowane pożarom wykorzystywane jest aktualnie nawet przez małe (kilkuosobowe) biura projektowe, zajmujące się planowaniem wentylacji i systemów przeciwpożarowych. Jeśli chodzi o jakość wyników, jest to zdecydowanie najlepszy wybór dostępny na rynku.

Dane wejściowe do kodu FDS najczęściej zapisuje się w pojedynczym pliku tekstowym, choć istnieje możliwość wczytania siatki obliczeniowej z pliku zewnętrznego. Do niezbędnych danych wejściowych należą:

- geometria/siatka obliczeniowa – przestrzeń przepływowa wraz z przeszkodami;
- warunki brzegowe – mogą to być nawet izolowane cieplnie ściany domykające siatkę obliczeniową;
- dane materiałowe – definicja paliwa i ewentualnych przeszkód.

Samo źródło płomienia w przypadkach 3D najczęściej definiuje się jako powierzchnię lub objętość.

Dane wyjściowe zależą od setupu zaprojektowanego przez użytkownika. Wśród danych wyjściowych wyróżnić należy przestrzenne rozkłady: prędkości przepływu, temperatury, współczynnika ciepła oddanego, ciśnienia itp. Istnieje możliwość zapisywania konkretnych parametrów w konkretnych punktach przestrzeni w określonym przedziale czasu symulacji do formatu tekstowego stabelizowanego (*.csv).

Warto przy tym zaznaczyć, że o ile plik wsadowy może być bardzo niepozorny i mieć mniej niż 100 KB, o tyle dane wyjściowe mogą być zbiorem mierzącym nawet do kilku lub wręcz kilkunastu GB.

Z punktu widzenia projektu EVARIS, odradza się próby bezpośredniej implementacji kodu CFD z projektowaną platformą. Główną przyczyną takiego stanu rzeczy jest przede wszystkim poziom złożoności danych wejściowych, pierwszym z wymogów jest dostarczenie siatki obliczeniowej, opartej na geometrii CAD 3D, do których platforma nie ma dostępu. Prawdopodobnie podobny problem napotka później użytkownik końcowy. Problem leży nie tylko w dostępie do danych – od użytkownika, w tym również od jego umiejętności i doświadczenia w dziedzinie. Odradza się korzystania z kodu FDS użytkownikowi, który nie miał żadnego wcześniejszego doświadczenia z kodami CFD.

Istnieje natomiast możliwość wykorzystania danych wyjściowych z platformy RAT-if do przygotowania zestawu danych wejściowych do programu FDS. Trzeba jednak pamiętać, że będzie niezbędny także dodatkowy wysiłek po stronie użytkownika, który najprawdopodobniej będzie musiał sam przygotować sobie geometrię modelowanej przestrzeni.

Co się zaś tyczy kryteriów stosowania modelu FDS, jedyną uwagę, którą w tym miejscu należy poczynić, jest to, że z jednej strony mowa jest o wysokiej jakości/rozdzielczości wyników, nieporównywalnej z innymi dostępnymi technikami, z drugiej jednak strony także o odwzorowywaniu rzeczywistej geometrii przy pomocy prostopadłościennych komórek. Komórka bowiem jest albo przestrzenią płynu (tu najczęściej gazu), albo przeszkodą – ciałem stałym. Trzeba to jasno zaznaczyć. Dokładność powierzchni krzywoliniowych jest taka, jak najmniejszej komórki użytej do jej tworzenia. Innymi słowy kula jest *de facto* zbiorem prostopadłościanów różnej objętości, które wypełniają pozornie tę samą przestrzeń co kula idealna. Nie jest to poważna wada i jednocześnie jest ona typowa dla FDS-a, a nie dla całej gamy programów klasy CFD, tym niemniej jednak należy o tym wspomnieć.

FDS jest kodem stale rozwijanym, wciąż poszerza się bazę substancji (głównie paliw), choć istnieje możliwość definiowania własnych.

Jedynym realnym kryterium stosowania kodu FDS są tak naprawdę umiejętności użytkownika i dostęp do maszyny obliczeniowej, która pozwoli zapewnić odpowiednią rozdzielczość analizy. W tym miejscu warto dodać, że mimo wszystko do analiz terenowych zaleca się jednak stosowanie maszyn nie tylko wielordzeniowych, ale wręcz wieloprocessorowych. W NCBJ przetestowano, że pojedynczy rdzeń jest w stanie udźwignąć obliczenia zakładające do miliona komórek na rdzeń, ale wydaje się to być granicą możliwości dostępnego na rynku najnowocześniejszego sprzętu obliczeniowego. Redukcja liczby komórek – przy zwiększeniu liczby rdzeni i przy zachowaniu całkowitej liczby komórek w domenie – może wydatnie przyspieszyć obliczenia.

FLACS

FLame ACceleration Simulator (FLACS) jest komercyjnym kodem klasy CFD rozwijanym i dystrybuowanym przez Global Explosion Consultants (GexCon AS), z siedzibą w Bergen w Norwegii. Podobnie jak FDS, FLACS jest dedykowany do modelowania takich aspektów zjawisk niebezpiecznych jak: dyspersja gazów palnych i toksycznych, wybuchy gazów i pyłów, propagacja fali uderzeniowej, a także pożary substancji płynnych w stanie stagnacji (tzw. pożaru rozlewisk, z ang. *pool fires*) oraz pożaru strumieniowego (z ang. *jet fires*). A wszystko to zarówno w geometriach otwartych, jak i zamkniętych.

Prace nad FLACS-em rozpoczęły się w 1980 roku w Department of Science and Technology w Christian Michelsen Institute (CMI), a jego pierwsza wersja została udostępniona w 1986 roku. CMI kontynuowało rozwój kodu aż do 1992, kiedy to Department of Science and Technology przekształcił się w Christian Michelsen Research (CMR). W 1998 roku CMR powołał do życia nową jednostkę GexCon, której celem było doradztwo w zakresie prac realizowanych przez CMR. Od 2000 roku GexCon został wyłączną jednostką odpowiedzialną za rozwój FLACS-a.

Dużą przewagą FLACS-a nad FDS-em jest to, że solver jest tu zintegrowany z graficznym interfejsem użytkownika. Dzięki temu jest zdecydowanie prostszy w użyciu i poniekąd przyspiesza przygotowanie zestawu danych wejściowych do obliczeń.

Generalnie FLACS w swoich założeniach i zastosowanych wzorach modelowych przypomina FDS. FLACS rozwiązuje równania zasad zachowania dla przepływów płynów ściśliwych na trójwymiarowych siatkach kartezjańskich, tzn. o regularnych prostopadłościennych komórkach, metodą objętości skończonej. Mowa tu o równaniach zasady zachowania masy, pędu, energii (entalpii) oraz udziałów masowych substancji (pierwiastków) składowych, wszystko to domknięte równaniami dla gazu doskonałego. Zamiast więc powtarzać opis kodu FDS, lepiej przyjrzeć się zaletom i wadom kodu zaczerpniętym z publikacji S. Ganta i J. Hoyesa¹⁵:

¹⁵ E. R. Pardyjak, M. J. Brown, *QUIC URB v. 1.1: Theory and Users Guide*, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos 2003.

Zalety:

1. FLACS został sprawdzony w szerokim zakresie różnych scenariuszy dyspersyjnych, wliczając w to uwolnienia zarówno gęstych, pasywnych, jak i wypornościowych (z ang. *buoyant*) gazów w przestrzeniach otwartych czy zamkniętych, wypełnionych przeszkodami. Większość tych testów wykazała, że FLACS jest w stanie generować rozsądne wyniki.
2. FLACS oparty został na modelu rozproszonej porowatości (z ang. *distributed porosity model*) w zastosowaniu do małych obiektów, stanowiących przeszkody dla przepływu. Dodatkowo wyposażono go w półautomatyczny system generowania kartezjańskich siatek obliczeniowych dla skomplikowanych geometrii przepływowych, co wydatnie przyspiesza obliczenia w porównaniu do kodów CFD ogólnego zastosowania.
3. Kod zawiera model źródeł uwolnień gazów pod wysokim ciśnieniem, uwolnień wybuchowych (z ang. *flashing releases*) oraz model parowania z rozlewiska.
4. Warunki atmosferyczne na wlocie do domeny (modelu) mogą być definiowane w ten sposób, że będą brały pod uwagę szorstkość terenu i stabilność atmosfery przed domeną.
5. FLACS wykorzystuje dobrze znane, rozwinięte modele turbulencji oraz metody rozwiązywania równań.
6. GexCon poza oprogramowaniem zapewnia szkolenia oraz materiały edukacyjne. Szkolenia są wręcz wymagane od użytkowników rozpoczynających swoją pracę z FLACS-em. Dokumentacja nie jest być może bardzo rozbudowana, ale zawiera szereg uwag i wskazówek dotyczących najlepszych praktyk w stosowaniu kodu. Pomimo tego użytkownikom poleca się uwadze przewodniki przygotowane przez European Research Community on Flow Turbulence and Combustion¹⁶.
7. FLACS może być wykorzystywany również do modelowania wybuchów pary i pyłu.

Wady:

1. Wiele studiów walidacyjnych kodu FLACS zawiera istotne braki, które nie dają pewności co do powtarzalności wyniku. Bardzo często przedstawia się wyniki zrealizowane tylko na jednej siatce, bez wcześniejszego studium wrażliwości wyniku w zależności od gęstości (jakości) siatki. Co więcej, przykłady te często pozbawione są referencji do wersji użytego kodu.
2. Brakuje klarownego loga postępów zmian w modelach matematycznych wraz z nowymi wersjami kodu. Nie czyni się wysiłku, by odpowiedzieć na pytanie, jak te zmiany wpływają na trafność wyników przewidywań.
3. FLACS opiera się na podejściu siatki kartezjańskiej zamkniętej w jednym bloku (z ang. *single-block Cartesian grid*). Takie podejście może prowadzić do nierealnych wyników np. z modelowania dyspersji gazu gęstego płynącego

¹⁶ M. Casey, T. Wintergerste, Best Practice Guidelines, 2000; J. Franke i in., *Best practice guideline for the cfd simulation of flows in the urban environment, COST Action 732, Quality Assurance and Improvement of Microscale Meteorological Models*, Cost Office, [Belgium] 2007.

zboczem wzniesienia lub ponad pofałdowanym terenem, wynikającym ze znacznej dyssypacji pędu w kontakcie z powierzchnią. Do tego typu zastosowań zaleca się zdecydowanie siatki krzywoliniowe i/lub niestrukturalne. Single-block wprowadza również ograniczenia w kontekście modelowania strug gazu (ang. *gas jets*). Warto nadmienić, że FLACS w wersji 9.0 nie obsługiwał obliczeń w trybie równoległym – co istotnie ograniczało ilość elementów w siatce obliczeniowej. Wraz z wersją 10.0 nastąpił w tym kontekście postęp, trudno jednak powiedzieć, na ile poprawiło to sytuację.

4. FLACS nie daje możliwości wyboru sub-modeli. W wersji 9.0 występuje tylko jeden model turbulencji (konkretnie RANS $k-\varepsilon$), który pomimo dużej popularności ma swoje konkretne ograniczenia w zastosowaniu. Kod nie zawiera modelu lagrange’owskiego oraz niejednorodnego modelu eulerowskiego do modelowania tryskaczy (ang. *sprays*).
5. Implementacja koncepcji rozproszonej porowatości do modelowania dyspersji zyskuje co prawda coraz więcej zwolenników, ale nie można jej jeszcze nazwać w pełni rozwiniętą. Jej rozwój skupia się teraz w dużej mierze na zastosowaniach do przepływów wymuszonych eksplozją. Brakuje danych walidacyjnych, potwierdzających dokładność przewidywań w zależności choćby od gęstości siatki, jak również od umieszczanych w niej przeszkód, nie mówiąc już o lokalnych zmianach porowatości.

Podobnie jak FDS, FLACS pozwala określić parametry takie jak temperatura, ciśnienie, prędkość czy kierunek przepływu z dokładnością do wielkości użytych komórek w dowolnym miejscu. Jako kod klasy CFD należy do grupy kodów o najwyższym poziomie odwzorowania rzeczywistości.

W przeciwieństwie do FDS, FLACS wymaga nie jednego, a kilku plików wsadowych. Ich podstawowa struktura (niezbędna do uruchomienia obliczeń) przedstawia się następująco:

- cs000000.dat3 – Scenariusz – opis monitorów parametrów
- cg000000.dat3 – Siatka modelu
- cp000000.dat3 – Porowatości poszczególnych komórek siatki
- co000000.dat3 – Geometria modelu
- cl000000.n000 – Funkcja wycieku substancji w czasie

Dane wyjściowe zależą od setupu zaprojektowanego przez użytkownika. Wśród danych wyjściowych wyróżnić należy przestrzenne rozkłady: prędkości przepływu, temperatury, współczynnika ciepła oddanego, ciśnienia itp. Struktura podstawowych plików wyjściowych przedstawiona została poniżej:

- r1000000.dat3 – Wynik skalarny
- r3000000.dat3 – Wynik wektorowy
- rt000000.dat3 – Log/rejestr symulacyjny
- tt000000 – Zapis wydruku standardowego z ekranu do pliku
- rd000000.n000 – Zrzut danych symulacyjnych
- rx000000.n000 – Tymczasowy plik zapisu dla aktualnego stanu symulacji

Pomimo gwarancji dystrybutora (GexCon AS) kod ten nie powinien być wykorzystywany przez użytkowników, którzy nie posiadali wcześniejszej wiedzy z zakresu CFD. Podobnie jak w przypadku kodu FDS, z punktu widzenia projektu RAT-if odradza się też próby bezpośredniej implementacji kodu CFD do projektowanej platformy. Zdecydowanie bardziej efektywnym rozwiązaniem będzie przygotowanie niezależnego modelu przez doświadczonego użytkownika w kodzie FLACS na podstawie danych produkowanych z RAT-if. Tworzenie interfejsów mija się z celem. Największym problemem będzie, podobnie jak w przypadku FDS, dostęp do geometrii CAD 3D.

Kryteria stosowania modelu FLACS są identyczne jak dla FDS. Poleca się go zwłaszcza tam, gdzie geometria przestrzeni ma nieoczywisty wpływ na zasięg fali uderzeniowej, pożaru i dyspersji lotnych produktów spalania.

QUIC

Obliczenia CFD często są bardzo kosztowne oraz czasochłonne. Do celów szybkiego reagowania w sytuacjach kryzysowych stosuje się modele parametryczne, które nie przeprowadzają dokładnych symulacji, lecz przynoszą wynik przybliżony. Takim modelem jest QUIC, wykorzystywany na potrzeby szybkiej oceny sytuacji w przypadku uwolnienia substancji niebezpiecznej dla zdrowia w środowisku miejskim.

Nad rozwojem modelu QUIC pracuje Los Alamos National Laboratory. Model ten został stworzony z myślą o szybkich odpowiedziach w sytuacjach uwolnienia niebezpiecznych substancji lotnych w środowisku miejskim. Przepływy powietrza w środowisku miejskim to zagadnienie bardzo skomplikowane. Mnogość konfiguracji pogodowych, bryły budynków oraz sam koszt obliczeniowy dokładnych symulacji czyni ten obszar niezwykle istotnym w obliczu ataków terrorystycznych.

Model QUIC (*Quick Urban & Industrial Complex*) składa się z dwóch części. Pierwszą jest QUIC-URB¹⁷ stosowany do symulacji pola wiatru, drugą – QUIC-PLUME¹⁸ będącą modelem *off-line* dla symulacji transportu oraz dyspersji związków chemicznych w atmosferze na podstawie pola wiatru z QUIC-URB.

QUIC-URB nie jest kosztownym modelem CFD, choć istnieją w pakiecie QUIC modele droższe oraz bardziej zaawansowane jak QUIC-CFD czy QUIN-INDOOR. Trójwymiarowe pole wiatru QUIC-URB oblicza na podstawie zestawu diagnostyczno-parametrycznych równań, co daje przybliżony wynik. Model jest w stanie obliczyć pole wiatru dużego obszaru miejskiego na komputerze domowym bez potrzeby posiadania klastra obliczeniowego. Otrzymane pole wiatru może powstać na podstawie wprowadzonego skomplikowanego zestawu budynków oraz niewielkiego zestawu danych meteorologicznych.

Lagrangeowski model transportu zanieczyszczeń w atmosferze QUIC-PLUME używa uśrednionych pól wiatru obliczonych przez QUIC-URB. Dodatkowo

¹⁷ E. R. Pardyjak, M. J. Brown, *QUIC URB v. 1.1: Theory and Users Guide*, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos 2003.

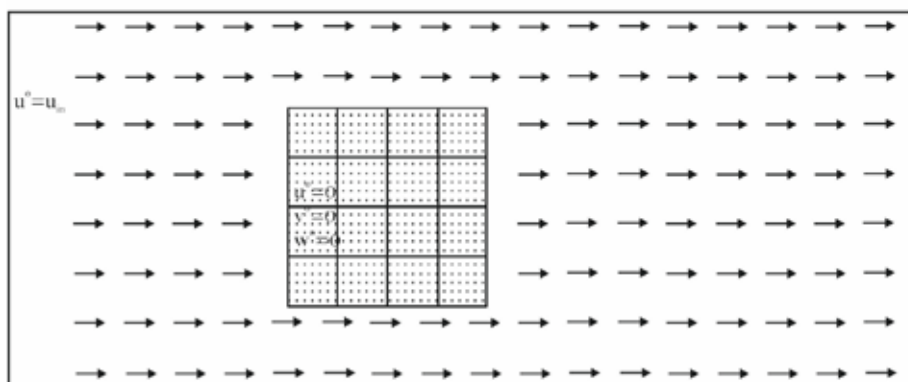
¹⁸ M. D. Williams i in., *QUIC-PLUME Theory Guide*, Los Alamos Laboratory, Los Alamos 2004.

QUIC-PLUME wewnętrznie oblicza turbulencję, co czyni wyniki bardziej realistycznymi.

Początkowe pole wiatru, jakie przyjmuje QUIC-URB, jest zaczerpnięte z danych wprowadzonych przez użytkownika modelu. W miejscach, gdzie znajdują się budynki, wymuszona zostaje prędkość zerowa. W pozostałych stosuje się równanie potęgowe:

$$U_0(z) = U_0(z_{ref}) \cdot \left(\frac{z}{z_{ref}} \right)^2 \quad (22)$$

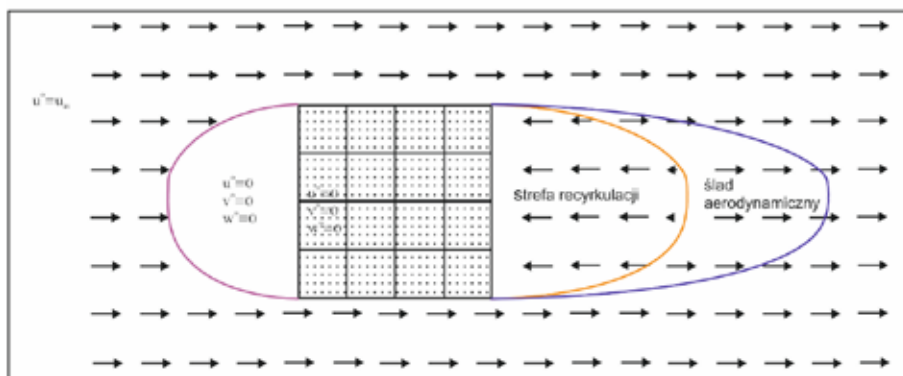
Całe pole zostaje zmodyfikowane po wprowadzeniu odpowiednio dobranych wymuszeń zakładających zachowanie masy.



Ryc. 2. Pierwsza interpolacja wiatru w domenie

Źródło: E. R. Pardyjak, M. J. Brown, dz. cyt.

Pierwsza iteracja QUIC uwzględnia budynki poprzez zwykłe ustawienie prędkości zerowej w ich objętości. Profil wiatru natomiast opisuje równanie (22).



Ryc. 3. Wiatr po uwzględnieniu efektów budynków

Źródło: E. R. Pardyjak, M. J. Brown, dz. cyt.

Dookoła budynków pole wiatru jest dodatkowo modyfikowane równaniami empirycznymi, aby uzyskać zmienność czasową.

Model Lagrangeowski QUIC-PLUME wykorzystuje pole wiatru i dokonuje symulacji transportu za pomocą równań:

$$x = x_p + U\Delta t + \frac{u'_p + u'}{2} \Delta t \quad (23)$$

$$y = y_p + V\Delta t + \frac{v'_p + v'}{2} \Delta t \quad (24)$$

$$z = z_p + W\Delta t + \frac{w'_p + w'}{2} \Delta t \quad (25)$$

Gdzie x, y i z są obecną pozycją cząstki, której poprzednie położenie opisują x_p, y_p, z_p . Prędkości średnie są oznaczone symbolami U, V, W , a odchylenia od nich u', v', w' .

$$u' = u'_p + du \quad (26)$$

$$v' = v'_p + dv \quad (27)$$

$$w' = w'_p + dw \quad (28)$$

QUIC stanowi bardzo użyteczne narzędzie do szybkiej odpowiedzi. Pozwolenie na używanie modelu oraz kodu udziela Los Alamos National Laboratory.

Ze względu na łatwość obsługi modelu QUIC oraz jego interfejs graficzny, który upraszcza konfigurację, powinno się uwzględnić ten model w zastosowaniach wymagających szczegółowych analiz w małej skali (do kilku metrów).

Niemniej licencja, której udziela Los Alamos National Laboratory, stawia QUIC na pozycji modelu zewnętrznego w systemie RAT-if. QUIC będzie zatem obsługiwany przez pracownika poza RAT-if, ale dane wyjściowe które stworzy, powinny być czytane przez system. Model QUIC powinien być stosowany w przypadku konieczności uzyskania dokładnych wyników w specyficznych warunkach miejskich.

Oba modele QUIC-URB oraz QUIC-PLUME działają oddzielnie. Żeby przeprowadzić symulację transportu zanieczyszczeń, należy w nich uwzględnić:

- topografię miasta;
- stały lub zmienny w czasie kierunek lub pole wiatru;
- miejsce, czas i masę uwolnienia.

Dane wyjściowe:

- QUIC-URB tworzy średnie pole wiatru;
- QUIC-PLUME tworzy zmienne w czasie pole stężenia zanieczyszczenia.

Docelową kategorią zastosowania modelu QUIC są problemy uwolnień gazów w obszarach silnie zurbanizowanych. Mechanizm budowy domeny oraz definicji warunków meteorologicznych jest nakierowany na lokalizację obejmującą sieć budynków. Jako zalety modelu QUIC warto wymienić możliwość użycia predefiniowanych elementów infrastruktury, takich jak:

- gotowe budynki,
- mosty,
- parkingi,
- tereny zielone.

Ograniczenia modelu dotyczą symulacji cząstek w modelu Lagrangeowskim QUIC-PLUME:

1. Krok siatki obliczeniowej nie może być mniejszy niż 1 m.
2. Między dwoma dowolnymi budynkami musi być umieszczony przynajmniej 1 węzeł siatki.

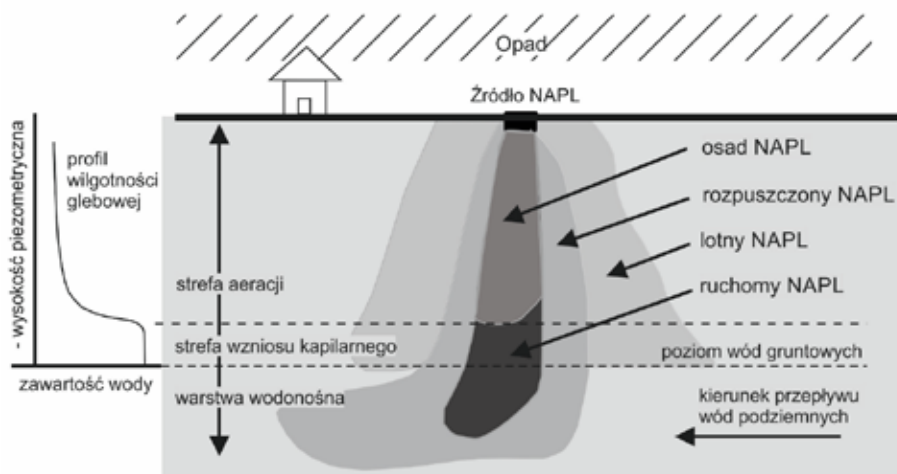
W wielu przypadkach zdefiniowanie gęstej siatki obliczeniowej dla dużej przestrzeni spowoduje błąd w uruchomieniu modelu ze względu na brak możliwości alokowania danych. Przewidywana maksymalna możliwość symulacji to domena o powierzchni 500 m² dla regularnego kroku siatki o długości 1 m przy 50 poziomach wysokości w dowolnej skali dla 20 minut symulacji o kroku czasowym równym 1.

NAPL

Specyficznym oraz bardzo istotnym z punktu widzenia RAT-if zagadnieniem dotyczącym wód podziemnych jest transport i dyspersja oleju. Ze względu na lepkość oraz gęstość tych substancji ich los w glebie może być różny. NAPL jest modelem przeznaczonym do transportu oleju w glebie.

Jednym z najistotniejszych fizycznych problemów dotyczących środowisk naturalnych jest skażenie ośrodków porowatych spowodowane uwolnieniami cieczy organicznych zwanych „niewodnymi ciekłymi związkami” (ang. *Non-Aqueous Phase Liquids*, NAPL). Ciecze takie stanowią problem z punktu widzenia modelowania, ponieważ mogą zarówno być lżejsze od wody (zwane LNAPL, jak na przykład benzyna), jak i cięższe od wody (zwane DNAPL, jak na przykład węglowodory chlorowane). Model NAPL może symulować przepływ tych związków w strefie bliskiej powierzchni, czyli takiej, w której ciśnienie cieczy znajduje się głównie pod wpływem ciśnienia atmosferycznego. Model potrafi również odwzorować trzy strefy struktury gleby: aeracji, saturacji oraz strefę wzniosu kapilarnego.

Schemat migracji związków niewodnych w strefach aeracji, saturacji i wzniosu kapilarnego jest przedstawiony na rycinie 4. Istnieją trzy podstawowe mechanizmy migracji NAPL.



Ryc. 4. Schemat migracji NAPL w glebie

Źródło: M. Fishman, J. Guarnaccia, G. Pinder, *NAPL: Simulator Documentation*, 1997.

1. Pod wpływem grawitacji i sił kapilarnych ciecz infiltruje włąb gleby w kierunkach pionowym i poziomym. Rozkład związków niewodnych jest funkcją fizycznych parametrów płynu (gęstość, lepkość, napięcie międzyfazowe, potencjał zwilżania, skład chemiczny), właściwości gleby (frakcja, skład mineralny, wilgotność, porowatość, współczynnik filtracji) i sił występujących w systemie. Jeśli uwolniony związek jest gęstszy od wody, przepłynie przez strefę wzniosu kapilarnego i będzie przemieszczać się dalej, dopóki utraci mobilność albo trafi na nieprzepuszczalną warstwę.
2. Ciecz rozpuszcza się i jest transportowana w dół oraz „popychana” przez wodę opadową. W przypadku DNAPL woda gruntowa w strefie saturacji transportuje składniki DNAPL.
3. NAPL w fazie gazowej przemieszcza się w glebie i – z powodu większej jego gęstości niż gazów obecnych w glebie – przemieszcza się w dół.

Model NAPL powstał z myślą o jak najwierniejszym odwzorowaniu wyżej wymienionych mechanizmów, ponieważ występują one w naturalnym środowisku. Dużo pracy włożono w ilościowe opisanie następujących procesów:

- uwolnienie oraz uwięzienie płynów;
- histereza przepuszczalności względnej – saturacji – modelu kapilarnego;
- przenikanie masy do opisu rozpuszczania oraz parowania NAPL;
- opis adwekcji i dyspersji w fazach ciekłej oraz gazowej.

Wybrane możliwości modelu:

- zagadnienia jedno- dwu- oraz trójwymiarowe;
- metoda elementu skończonego;
- możliwość dokonania symulacji maksymalnie jedno- dwu- oraz trójfazowych;

- do modelu adwekcji wykorzystano prawo Darcy'ego;
- do modelu dyspersji wykorzystano prawo Ficka;
- adaptacyjny krok czasowy;
- kod napisany w języku Fortran 77.

Opis matematyczny modelu składa się z dwóch części. Pierwszą stanowią równania zachowania masy, które opisują ewolucję w czasie i przestrzeni tzw. podstawowych zmiennych. Druga część to zestaw równań konstytutywnych, które opisują wzajemne relacje między zmiennymi podstawowymi a drugorzędnymi. Podstawowe zmienne według dokumentacji NAPL¹⁹ to te, które rozwiązuje się za pomocą równań zachowania masy. Drugorzędowe zmienne natomiast są funkcjami podstawowych zmiennych.

Równania zachowania masy opisują zachowanie masy każdej fazy (płynnej i stałej) i każdego składnika fazy (np. rozpuszczonego gazu w wodzie) w trakcie jego przemieszczania się w ośrodku porowatym.

Dla wody:

$$\frac{\partial(\epsilon S_W \rho^W)}{\partial t} + \nabla \cdot [\epsilon S_W \rho^W \vec{v}^W] = \rho^W Q^W + E_n^W - E_{n/W}^G - E_{n/W}^S \quad (29)$$

Dla NAPL:

$$\frac{\partial(\epsilon S_N \rho^N)}{\partial t} + \nabla \cdot [\epsilon S_N \rho^N \vec{v}^N] = \rho^N Q^N - E_n^W - E_n^G \quad (30)$$

Dla gazu:

$$\frac{\partial(\epsilon S_G \rho^G)}{\partial t} + \nabla \cdot [\epsilon S_G \rho^G \vec{v}^G] = \rho^G Q^G + E_n^G + E_{n/W}^G \quad (31)$$

gdzie:

- ϵ – współczynnik porowatości;
- S_α – współczynnik saturacji fazy α ;
- ρ^α – koncentracja masy $[M/L^3]$;
- v^α – prędkość fazy α $[M/L]$;
- Q^α – punktowe źródło lub upust $[1/T]$;
- E_n^W – transfer masy poprzez rozpuszczanie NAPL w wodzie;
- E_n^G – transfer masy poprzez parowanie NAPL rozpuszczonego w wodzie;
- E_n^S – transfer masy poprzez parowanie NAPL;
- E_n^S – transfer masy poprzez absorpcję wody przez glebę.

Pełny proces wyprowadzeń równań (29), (30) i (31) znaleźć można w dokumentacji NAPL²⁰. Są to podstawowe równania opisujące równowagę masy trzech faz: wody, NAPL oraz gazu. Dwa kolejne równania (niewypisane) opisują przemiany fazowe.

¹⁹ M. Fishman, J. Guarnaccia, G. Pinder, NAPL: Simulator Documentation, EPA/600/R-97/102, Environmental Protection Agency, United States 1997.

²⁰ Tamże.

Model operuje na pięciu podstawowych zmiennych do rozwiązania równań zachowania masy. Są nimi:

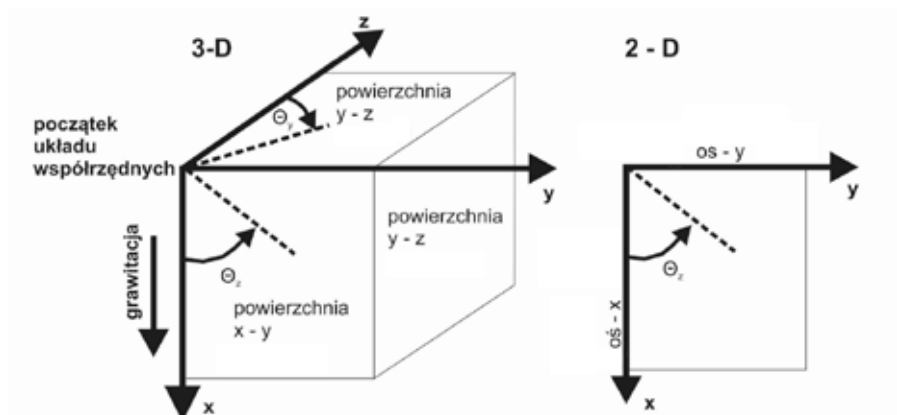
$$\{P^W, S_W, S_{TW}, \rho_n^W, \rho_n^G\} \quad (32)$$

gdzie P^W jest ciśnieniem wody [$M/(LT^2)$]. Całkowity współczynnik saturacji fazy ciekłej S_{TW} definiuje się jako sumę pozostałych współczynników saturacji:

$$S_{TW} = S_W + S_N = 1 - S_G \quad (33)$$

Model interpretuje rozbudowane definicje warunków brzegowych. Definicje te są tworzone poprzez podanie dwóch parametrów:

1. Typ warunku brzegowego. Można tu wyszczególnić trzy typy warunków brzegowych. Warunek Dirichleta (pierwszy typ), który polega na zadaniu stałej lub zmiennej w czasie wartości na brzegu (np. wysokości piezometrycznej), warunek Neumanna (drugi typ), który polega na zadaniu strumienia pewnej wielkości fizycznej (np. strumień zanieczyszczeń), lub warunek mieszany (trzeci typ) łączący dwa poprzednie warunki w jeden.
2. Kierunek działania warunku brzegowego. W zależności od tego, który brzeg domeny ma być opisany przez warunek (powierzchnia x-y, y-z lub x-z), należy określić powierzchnię warunku.



Ryc. 5. Układ współrzędnych w modelu NAPL

Źródło: M. Fishman, J. Guarnaccia, G. Pinder, dz. cyt.

Bywa, że model NAPL do pracy wymaga specyficznych danych (jak na przykład gęstość oleju albo jego lepkość). Z tego względu używanie modelu jest utrudnione. Dodatkowo problematyczne może się okazać pozyskanie danych na temat warstw wodonośnych w obszarze rozpatrywanego obiektu lub choćby gleby. Te czynniki i wiele innych czynią NAPL modelem trudniejszym w obsłudze oraz automatyzacji.

Jednakże możliwe jest stworzenie bazy danych dotyczącej parametrów fizycznych często używanych w instalacjach olejów oraz bazy danych dotyczącej współczynników odpowiednich gleb. Dzięki takim działaniom większość trudności związanych z wykorzystaniem NAPL w systemie RAT-if można rozwiązać.

Do celów wstępnej oceny można przyjąć ustawienia domyślne, które powinny się sprawdzić w większości przypadków obliczeniowych przy ograniczonym czasie symulacji. Dokładne, długoterminowe symulacje należy przeprowadzać przy udziale ekspertów w dziedzinie wód podziemnych.

Podstawowym plikiem wejściowym do modelu NAPL jest *sm.in*, który określa globalne parametry modelu. Na jego podstawie model poszukuje kolejnych plików szczegółowo opisujących parametry płynów oraz ośrodka porowatego.

Wymagania modelu NAPL:

- plik sterujący *sm.in*;
- definicja siatki. Plik *space.in* przechowuje wymiary regularnej siatki obliczeniowej;
- warunki początkowe:
 - plik *roa.in* opisuje odstępstwa od globalnie zdefiniowanego ρ_n^W ;
 - plik *rog.in* opisuje odstępstwa od globalnie zdefiniowanego ρ_n^G ;
 - plik *sat.in* opisuje odstępstwa od globalnie zdefiniowanego S_w i S_{TW} ;
- zmienne w przestrzeni parametry fizyczne:
 - plik *bulk.in* opisuje odstępstwa od globalnie zdefiniowanej suchej gęstości objętościowej;
 - plik *o.c.in* opisuje odstępstwa od globalnie zdefiniowanej zawartości organicznego węgla w glebie;
 - plik *perm.in* opisuje odstępstwa od globalnie zdefiniowanego współczynnika filtracji;
 - plik *por.in* opisuje odstępstwa od globalnie zdefiniowanej porowatości;
- warunki brzegowe oraz zewnętrzne wymuszenia:
 - plik *bc flow.in* opisuje warunki brzegowe Dirichleta dla przepływu wody;
 - plik *bc roa.in* opisuje warunki brzegowe Dirichleta dla NAPL;
 - plik *bc rog.in* opisuje warunki brzegowe Dirichleta dla NAPL w fazie gazowej;
 - plik *well.in* opisuje punktowe źródła lub upusty.

Pliki wyjściowe z modelu NAPL są pogrupowane w zależności od tego, jakie dane zawierają. Wyróżnić można trzy grupy:

- pliki zawierające dane do wizualizacji. Używane tylko wtedy, kiedy zostanie uruchomiona opcja automatycznego generowania grafik. Biblioteka graficzna jest już przestarzała, zatem nie zostanie omówiona.
- pliki zawierające wyniki bilansu masy i wydajność symulacji. Pliki te są zapisywane tylko wtedy, kiedy obliczenia bilansu masy zostały wybrane w pliku sterującym:

- plik *cmass.out* zawiera skumulowany bilans masy po każdym kroku czasowym;
 - plik *mass.out* zawiera bilans masy każdej fazy;
 - plik *massg.out* zawiera bilans masy gazu;
 - plik *masso.out* zawiera bilans masy NAPL;
 - plik *massw.out* zawiera bilans masy wody;
 - plik *masst.out* całkowity błąd bilansu masy.
- pliki zawierające informacje o związkach rozpuszczonych w wodzie gruntowej.
- pliki *sw.out*, *st.out* współczynniki saturacji S_w i S_{TW} ;
 - plik *ps.out* ciśnienie wody;
 - plik *oa.out* i *og.oug* koncentracja masy ρ_n^w i ρ_n^G ;
 - plik *echo.out* standardowe wyjście modelu, zapisuje parametry oraz ostrzeżenia;
 - plik *sat.out* zawiera bogate dane dotyczące obliczonych pól: współczynników saturacji, ciśnień oraz koncentracji mas;
 - plik *velg.out* zawiera pole strumieni gazu;
 - plik *veln.out* zawiera pole strumieni NAPL;
 - plik *velw.out* zawiera pole strumieni wody.

Jako model Eulerowski NAPL musi być obsługiwany zgodnie z wytycznymi typowymi dla tej klasy modeli. Ponadto podczas używania modelu należy pamiętać o dodatkowych kryteriach:

1. Współczynnik filtracji jest zgodny z prawem Darcy'ego. Zgodnie z badaniami współczynnika filtracji założenie to nie jest prawidłowe dla wszystkich gradientów wysokości piezometrycznej. W takich warunkach może powstać ruch turbulentny, przy którym prawo Darcy'ego jest mylne. W związku z tym zaleca się stosowanie modelu NAPL przy niewielkich różnicach wysokości piezometrycznej w domenie obliczeniowej.
2. Dyfuzja jest w modelu zgodna z prawem Ficka. Prawo to nie uwzględnia efektów turbulentnych. Jest to kolejny powód, dla którego model powinien być używany do ruchów laminarnych lub przejściowych.
3. Wszystkie fazy (woda, gaz, NAPL) są opisane jako nieściśliwe. Oznacza to, że fazy w trakcie trwania całej symulacji mają taką samą gęstość pod zmieniającym się ciśnieniem. Model powinien być zatem stosowany do głębokości takiej, przy której zmiany gęstości będą pomijalne.
4. Model dopuszcza przeprowadzenie symulacji ze zmiennymi w przestrzeni parametrami współczynnika filtracji. Głównym założeniem modelu jest heterogeniczność oraz izotropowość ośrodka porowatego.
5. Warunki izotermiczne. Jeśli w domenie ma wystąpić ośrodek o zmiennej w przestrzeni temperaturze, może wpłynąć na dynamikę. Model NAPL nie uwzględnia zmienności termicznej.

6. Model umożliwia symulację tylko jednego związku niewodnego i jednego gazu. W przypadku uwolnienia więcej niż jednego związku lub braku możliwości zastąpienia dodatkowych związków jednym, podobnym, nie powinno się przeprowadzać symulacji.

3. Modelowanie transportu i dyspersji w wodach powierzchniowych

W niektórych zagadnieniach dyspersji, żeby otrzymać wiarygodne i użyteczne wyniki, nie jest konieczne posiadanie złożonego modelu matematycznego. „Rzeki” to zestaw prostych równań obliczających średnie stężenia zanieczyszczeń w rzekach.

Celem dokonania szybkiej oceny skutków uwolnienia szkodliwej substancji do rzeki można przeprowadzić kilka prostych obliczeń niewielkim zestawem równań. Model „Rzeki” nie jest złożonym algorytmem obliczeniowym rozwijanym przez różne instytucje. Jest to raczej kilka formuł Gaussowskich, które można obliczyć za pomocą kalkulatora. Równania powstały na podstawie literatury²¹.

Średnie stężenia zanieczyszczeń chemicznych w wodach można opisać za pomocą zestawu krótkich formuł Gaussowskich. Dla uwolnienia natychmiastowego trzeba najpierw sprawdzić, czy ruch wody w rzece jest turbulentny, czy laminarny. Do tego celu należy obliczyć liczbę Re :

$$Re = \frac{u \cdot W}{v_{wody}} \quad (34)$$

W równaniu (34) symbol u oznacza średnią prędkość wody, W jest średnią szerokością rzeki, a v_{wody} jest lepkością wody.

Dla liczby Reynoldsa ($Re < 500$) można założyć, że ruch jest laminarny i skorzystać z formuły:

$$\bar{C}(x, t) = \frac{Q}{(\sqrt{4\pi \cdot \chi \cdot t})^3} \cdot \exp \left[-\frac{(x-ut)^2}{4 \cdot \chi \cdot t} \right] \quad (35)$$

gdzie χ jest współczynnikiem dyfuzji molekularnej, Q – masowym strumieniem wypływu substancji chemicznej, a t – okresem wypływu.

Dla większych liczb Reynoldsa ($Re > 500$) należy skorzystać z formuły:

$$\bar{C}(x, t) = \frac{M}{2\sqrt{\pi \cdot \kappa \cdot t}} \cdot \exp \left[-\frac{(x-ut)^2}{4 \cdot \kappa \cdot t} \right] \quad (36)$$

gdzie κ jest współczynnikiem turbulentnego mieszania.

²¹ *Generic Models for Use in Assessing the Impact of Discharges of Radioactive Substances to the Environment*, Safety Reports Series No. 19, International Atomic Energy Agency, Vienna 2001; E. Boeker, G. Rient, *Fizyka środowiska*, Wydawnictwo naukowe PWN, Warszawa 2002.

W przypadku uwolnienia ciągłego formuła się zmienia. Stosowana jest natomiast do każdej liczby Re .

$$\bar{C}(x, y) = \frac{C_0}{\sqrt{4\pi \cdot x'}} \cdot \sum_{n=-\infty}^{\infty} \exp \left[-\frac{(y' - y'_0 - 2n)^2}{4 \cdot x'} \right] + \exp \left[-\frac{(y' + y'_0 - 2n)^2}{4 \cdot x'} \right] \quad (37)$$

gdzie q to znormalizowany strumień wypływu substancji, a x' i y' są znormalizowanymi względem szerokości rzeki odległościami od miejsca uwolnienia.

Ze względu na małe wymagania względem danych wejściowych oraz łatwość wykorzystania modelu czy interpretacji wyników model „Rzeki” powinien stanowić podstawę do symulacji średnich stężeń zanieczyszczeń w rzekach. Wskazane jest, aby w systemie RAT-if był on być silnie zintegrowany z resztą komponentów.

Na podstawie posiadanych danych o szerokości rzeki oraz jej głębokości przeprowadzenie symulacji jest już dość proste. Potrzeba zatem poczynić wszelkie starania, żeby model „Rzeki” był domyślnym modelem w zagadnieniach zanieczyszczenia rzek.

Zgodnie z równaniami opisanymi wyżej należy zdefiniować następujące zmienne:

- masę uwolnionej substancji $M(\text{kg})$,
- szerokość rzeki $W(\text{m})$,
- głębokość rzeki $d(\text{m})$,
- średnią prędkość rzeki (prąd) $u(\text{m/s})$,
- temperaturę wody $T(\text{C})$,
- czas jaki upłynął od momentu uwolnienia $t(\text{s})$,
- strumień wypływu substancji chemicznej $Q (\text{kg/s})$.

Wyjściowymi danymi z modelu „Rzeki” będą uśrednione w czasie stężenia zanieczyszczeń. Zgodnie z równaniami (35), (36) oraz (37) stężenia średnie można obliczyć dla odpowiedniego czasu uśredniania t oraz odległości od źródła x .

„Rzeki” – jako model Gaussowski – nie uwzględnia efektów turbulencji. Pamiętać też trzeba, że zwracane wyniki są uśrednione po pewnym czasie.

1. Obliczenia średniego stężenia muszą być przeprowadzone na odległości takiej, że uwolniona substancja zdąży się wymieszać.
2. Modelu nie można stosować do systemu rzek, tylko do jednego cieklu wodnego.
3. Prędkość przepływu nie może być znacząco zmienna w czasie i przestrzeni.
4. Szerokość koryta musi być jednorodna na całej długości rzeki.

4. Porady dla użytkowników modeli

Gaz ciężki i pasywny

Jednym z częstych problemów przy modelowaniu dyspersji zanieczyszczeń jest określenie czy gaz, który został uwolniony, jest ciężki, czy pasywny. Wybór ten nie jest łatwy, ponieważ determinuje on, który model zostanie użyty. Często mo-

dele mają wbudowane algorytmy do oceny, czy gaz jest ciężki i samodzielnie dobierają odpowiednie metody obliczania transportu. Niemniej metody te do dnia dzisiejszego są oparte o doświadczenia i obserwacje, zatem często określają eksperymentalną granicę między tymi typami gazów. Nie istnieje dziś algorytm ogólnego zastosowania, który będzie prawidłowo określał, czy gaz jest ciężki we wszystkich warunkach.

Jednakże do celów oceny ryzyka można korzystać z uproszczonych metod. Jedną z nich jest metoda używana w ALOHA. Początkowo należy określić stosunek gęstości.

$$\Delta = \frac{(\rho - \rho_a)}{\rho_a} \quad (38)$$

gdzie ρ jest gęstością omawianego gazu, a ρ_a gęstością otaczającej go atmosfery. Jeżeli $\Delta > 1$, uznaje się gaz za ciężki. Na tym etapie można byłoby zakończyć obliczenia, ale należy pamiętać, że gaz ciężki też podlega zmianom gęstości. Początkowo, zaraz po uwolnieniu, gaz opada na podłoże, następnie przemieszcza się po nim. W ostatnich fazach gaz ciężki rozprasza się na tyle, że nie może już być traktowany jako taki. Dodatkowo sam ruch powietrza jest w stanie „poderwać” gaz ciężki z podłoża, przez co zachowuje się on podobnie do pasywnego. Wobec powyższego dokonuje się dalszych obliczeń.

Najpierw oblicza się zredukowane przyspieszenie grawitacyjne opisane wzorem:

$$\hat{g} = g\Delta \quad (39)$$

Następnie można obliczyć liczbę Richardsona z uwzględnieniem prędkości tarcia u_* za pomocą wzoru:

$$Ri_c = \frac{\hat{g}_0 H}{u_*^2} \quad (40)$$

gdzie H jest charakterystyczną wysokością źródła. Jeżeli $Ri \leq 1$, można uznać, że omawiany gaz jest pasywny. Prędkość tarcia można obliczyć za pomocą uproszczonego równania:

$$u_* = \frac{U_{10}}{16} \quad (41)$$

Charakterystyczną wysokość źródła można ustalić za pomocą dwóch równań. Dla uwolnień natychmiastowych:

$$H = \frac{V_0}{A_0} \quad (42)$$

gdzie V_0 jest objętością uwolnionego gazu, a A_0 – obszarem źródła. Dla uwolnień ciągłych należy użyć równania:

$$H = \frac{\dot{V}_0}{U_{10}D} \quad (43)$$

gdzie U_{10} jest prędkością wiatru na wysokości 10 m, a D jest średnicą zastępczą źródła czyli średnicą, jaką osiągnęłoby koło o takim samym polu jak pole źródła. V_0 jest uwolnioną objętością uśrednioną w czasie [m³/s].

Kolejne kryterium zgodne z publikacją *Workbook on the dispersion of dense gases*²² polega na prostym porównaniu odpowiednich empirycznych wartości do wzorów.

Dla uwolnień ciągłych:

$$U_{ref}/\left(\frac{g_0/p_0}{D}\right)^{\frac{1}{3}} > 6 \quad (44)$$

lub

$$\left(\left(\frac{g_0/p_0}{U_{ref}^3}\right)/D\right)^{\frac{1}{3}} \leq 0,15 \quad (45)$$

lub

$$u_*/\left(\frac{g_0/p_0}{D}\right)^{\frac{1}{3}} > 0,35 \quad (46)$$

Dla uwolnień natychmiastowych:

$$\left(\left(g_0/Q_0^{\frac{1}{3}}\right)U_{ref}^2\right)^{\frac{1}{2}} < 0,2 \quad (47)$$

lub

$$\left(\left(g_0/Q_0^{\frac{1}{3}}\right)u_*^2\right)^{\frac{1}{2}} < 3 \quad (48)$$

gdzie D jest charakterystycznym wymiarem źródła, a Q_0 – objętością uwolnionej chmury.

W zależności od posiadanych danych można skorzystać z dowolnej z wymienionych metod.

Uwolnienie natychmiastowe i ciągłe

Istotną kwestią przy modelowaniu uwolnień jest oszacowanie, czy uwolnienie było natychmiastowe, czy ciągłe. Z takiego oszacowania wynika, jaki model zostanie użyty. Modele obłoku (ang. *puff*) używane są do uwolnień natychmiasto-

²² B. McQuaid, R. E. Britter, *Workbook on the dispersion of dense gases*, Health & Safety Executive, England 1988.

wych, natomiast modele smugi (ang. *plume*) do uwolnień ciągłych. Nie istnieje jasno określona granica między tymi dwoma pojęciami i dysponuje się wieloma metodami oszacowania zagadnienia. Zgodnie z McQuaidem i Britterem²³ można podać trzy metody.

$$\frac{U_{ref}T_0}{x} < 0,6 \quad (49)$$

lub

$$\frac{u_*T_0}{x} < 0,04 \quad (50)$$

lub

$$T_0 U_{ref}^2 / \left(\frac{g_0 Q_0}{\pi} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (51)$$

Jeśli (51) będzie mniejsze od 10, należy uznać, że uwolnienie jest natychmiastowe. Tak samo, jeśli spełnione będą warunki (49) lub (50).

Założenia do modeli atmosferycznych

System RAT-if musi przyjmować dane meteorologiczne zgodne z opisem awarii lub zgodne z lokalnymi statystykami stanu atmosfery. W przypadku braku posiadanych danych należy przyjąć dane opisujące najgorszy przypadek. Istnieją również kryteria dotyczące stosowalności modeli.

1. Jeżeli w opisie awarii nie uwzględniono prędkości wiatru, należy przyjąć 1,5 m/s lub 1 m/s – w przypadku braku możliwości zdefiniowania liczby rzeczywistej. Modele Gaussowskie nie mogą być uruchamiane przy prędkości wiatru mniejszej niż 1 m/s.
2. Jeżeli nie występuje informacja, na jakiej wysokości zmierzono prędkość wiatru, należy przyjąć, że było to na 10 m.
3. Należy przyjąć temperaturę otoczenia równą zmierzonej w najbliższej stacji meteorologicznej danego dnia. W przeciwnym wypadku średnią dzienną lub nocną dla danego obszaru. W ostateczności można przyjąć 25°C.
4. Jeżeli w opisie awarii odnotowano zjawiska smogowe, należy przyjąć wysokość inwersji 50 m.
5. W przypadku pionowej równowagi atmosfery, jeśli model wymaga zdefiniowania długości Obukhova, należy podać $L = 26,0 z^{0,17}$, co odpowiada klasie stabilności F.
6. W przypadku braku danych wartość ciśnienia przy powierzchni ziemi należy założyć na wartość 1013,25 hPa.
7. Jeśli trzeba przyjąć profil pionowy wiatru, należy użyć równania (12).

²³ Tamże.

Założenia do modeli wód podziemnych

W przypadku braku dokładnego opisu gleby lub rozlewiska należy przyjmować następujące założenia:

1. Ruch wód gruntowych zależy jest głównie od gradientów wysokości piezometrycznej. Bez nich przepływ nadal może zachodzić, ale dla potrzeb RAT-if najlepszym wyborem będzie ustawienie pola wysokości piezometrycznych na obszarze całej siatki, co spowoduje przepływ, jeśli wystąpią gradienty. Zaleca się, aby użytkownik musiał zadać wysokości piezometryczne w minimum trzech punktach siatki. Trzy punkty, które nie leżą na tej samej prostej, umożliwią obliczenie płaszczyzny, natomiast więcej punktów umożliwi wprowadzenie bardziej złożonej powierzchni. Zaleca się użycie krigingu celem poczynienia takich obliczeń. Należy dodatkowo uniemożliwić przeprowadzanie symulacji dla braku gradientów z powodów opisanych w rozdziałach dotyczących poszczególnych modeli.
2. W przypadku wystąpienia rozlewiska i braku możliwości obliczenia jego promienia należy założyć, że rozlewisko formuje walec o wysokości 5 cm i całą substancja uwolniona zostaje zaabsorbowana przez glebę.
3. Jeżeli opis gleby pod instalacją nie jest znany, należy założyć, że jej porowatość wynosi tyle, ile wynosi najmniej porowata gleba występująca w tych obszarach.
4. Jeżeli zajdzie konieczność zadania współczynnika saturacji szkodliwą substancją, należy ustawić $S = 0,4$.

Podsumowanie i wnioski

W niniejszym rozdziale przedstawiono zarys wprowadzenia do modeli będących podstawą obliczeń ryzyka obszarowego. Opisano klasyfikację oraz pewne szczególnie zasługujące na uwagę modele. Zaprezentowano proste metody oszacowania charakteru uwolnienia (natychmiastowe albo ciągłe) oraz typu modelu odpowiedniego do zagadnienia (model gazu ciężkiego albo pasywnego). W rozdziale przedstawiono również założenia, jakie trzeba poczynić w przypadku braku pewnych danych. Należy również pamiętać, że modele wymienione w rozdziale nie wyznaczają ryzyka. Dlatego wyniki z nich otrzymane wymagają jeszcze dodatkowego przeliczenia celem jego wyznaczenia.

Ze względu na mnogość dostępnych modeli, ich charakter, zastosowanie oraz licencje wybór grupy modeli, które będą przeznaczone do zagadnień oceny ryzyka obszarowego, jest niezwykle trudny. Podstawowym modelem do takich zastosowań jest ALOHA ze względu na kompleksowe obliczenia oraz prostotę w użyciu. Jednakże z powodu braków w ALOHA (np. symulacji wód podziemnych, dokładniejszych modeli transportu zanieczyszczeń) lista istotnych modeli musiała zostać poszerzona. Ponadto sam wybór modelu nie rozstrzyga wszystkich problemów z ustawieniami oraz przygotowaniem danych do symulacji. Mimo to

zadowalające wyniki symulacji można otrzymać, konfigurując pewne „bezpieczne” ustawienia, które zostały wymienione w ostatnich sekcjach tego rozdziału.

Literatura

Boeker E., Rient G., *Fizyka środowiska*, Wydawnictwo naukowe PWN, Warszawa 2002.

Casey M., Wintergerste T., *Best Practice Guidelines*, 2000.

Fishman M., Guarnaccia J., Pinder G., *NAPL: Simulator Documentation*, EPA/600/R-97/102, Environmental Protection Agency, United States 1997.

Franke J. i in., *Best practice guideline for the cfd simulation of flows in the urban environment, COST Action 732, Quality Assurance and Improvement of Microscale Meteorological Models*, Cost Office, Belgium 2007.

Gant S., Hoyes J., *Review of FLACS version 9.0 – Dispersion modelling capabilities*, Health & Safety Laboratory, Buxton 2010.

Generic Models for Use in Assessing the Impact of Discharges of Radioactive Substances to the Environment, Safety Reports Series No. 19, International Atomic Energy Agency, Vienna 2001.

Guidelines for use of vapor cloud dispersion models, 1996.

Harbaugh A. W., *U.S. Geological Survey Techniques and Methods 6–A16*, w: *MODFLOW-2005, The U.S. Geological Survey Modular Ground – Water Model – the Ground-Water Flow Process*, 2005, <https://doi.org/10.3133/tm6A16>.

McFarlane K., *HGSYSTEM technical reference manual: The PGPLUME model for far-field dispersion*, 1998.

McGrattan K. i in., *Fire Dynamics Simulator – Technical Reference Guide Volume 1: Mathematical Model*, “NIST Special Publication” 2016, 1018.

McQuaid B., Britter R. E., *Workbook on the dispersion of dense gases*, Health & Safety Executive, England 1988.

Pardyjak E. R., Brown M. J., *QUIC URB v. 1.1: Theory and Users Guide*, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos 2003.

Patankar S. V., *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, Hemisphere Publishing, New York 1980.

Post L., *HGSYSTEM technical reference manual: Introduction*, 1998.

Post L., *HGSYSTEM technical reference manual: The LPOOL model*, 1998.

Post L., *HGSYSTEM technical reference manual: The SPILL model*, 1998.

Potemski S., Borysiewicz M., Furtek A., *Poradnik metod oceny ryzyka związanego z niebezpiecznymi instalacjami procesowymi*, Instytut Energii Atomowej, Otwock-Świerk 2000.

Rehm R. G., Baum H. R., *The equations of motion for thermally driven, buoyant flows*, “Journal of Research of the NBS” 1978, 83, 297–308.

Reynolds M., *ALOHA (Areal Locations of Hazardous Atmospheres) 5.0 THEORETICAL DESCRIPTION*, National Oceanic and Atmospheric Administration, August 1992.

Scire J. S., Robe F. R., Fernau M. E., Yamamoto R. J., *A User's Guide for the CALMET Meteorological Model*, Earth Tech, Inc., 5 edition, January 2000.

Scire J. S., Strimaitis D. G., Yamamoto R. J., *A User's Guide for the CALPUFF Dispersion Model*. Earth Tech, Inc., 5 edition, January 2000.

Williams M. D. i in., *QUIC-PLUME Theory Guide*, Los Alamos Laboratory, Los Alamos 2004.

Zheng Ch., Wang P., *MT3DMS: A Modular Three- Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User's Guide*. University of Alabama, December 1999.

ROZDZIAŁ III.

**KONCEPCJA INFORMATYCZNA
BUDOWY SYSTEMU
DO WYZNACZANIA RYZYKA
OBSZAROWEGO POCHODZĄCEGO
OD INSTALACJI PRZEMYSŁOWYCH**

Mieczysław Borysiewicz, Piotr Kopka, Sławomir Potemski,
Grzegorz Siess, Anna Wawrzyńczak-Szaban

Narodowe Centrum Badań Jądrowych

Wprowadzenie

Jednym z podstawowych zagadnień planowania przestrzennego jest ocena, na ile nowa inwestycja przemysłowa może mieć negatywny wpływ na zdrowie mieszkańców oraz na środowisko. Rozważyć należy tu dwa aspekty: skutki działania instalacji pracującej w normalnym trybie oraz prawdopodobieństwo i skutki wystąpienia awarii wychodzącej poza teren planowanego zakładu. Dla pierwszego przypadku istnieją określone przepisy podające wartości progowe dopuszczalnych emisji substancji niebezpiecznych (np. Rozporządzenie Ministra Środowiska w sprawie wartości odniesienia dla niektórych substancji w powietrzu), natomiast problem sytuacji awaryjnych wymaga osobnego rozwiązania. Celem niniejszego rozdziału jest zaprezentowanie koncepcji systemu informatycznego, który mógłby wspomagać wykonywanie zaawansowanych analiz ryzyka pochodzącego od instalacji przemysłowych na danym obszarze.

Trzeba podkreślić, iż na świecie opracowywane były podobne systemy. Przede wszystkim należy wymienić następujące:

- ARIPAR (Area Risk Assessment and Management)¹: system opracowany w ramach programów UE przez trzy instytucje: Institute for the Protection and Security of the Citizen, Joint Research Centre UE, Civil Protection Service of the Emilia Romagna Region, Chemical, Mineral and Environmental Technologies Engineering Department of the University of Bologna; oparty na interfejsie GIS znanego systemu informacji przestrzennej Arcview;
- CAMEO (Computer-Aided Management of Emergency Operations)²: pakiet amerykański opracowany dla NOAA (National Oceanographic Atmospheric Agency) i EPA (Environmental Protection Agency) zawierający systemy baz danych (substancji, zakładów), model transportu i dyspersji skażeń oraz skutków różnych typów awarii ALOHA, a także system GIS – MARPLOT.

Oba te pakiety wykorzystują system informacji przestrzennej sprzężony z bazami danych obiektów przemysłowych oraz model do określenia skutków potencjalnych awarii, którym standardowo jest ALOHA.

¹ ARIPAR 5.0: Getting Started Manual, S. Contini, L. Fabbri (red.), EUR 24963 EN Joint Research Centre – Institute for the Protection and Security of the Citizen, Publications Office of the European Union, Luxembourg 2011.

² U.S. Environmental Protection Agency, CAMEO (Computer-Aided Management of Emergency Operations), <https://www.epa.gov/cameo> [dostęp: 15.07.2018].

Koncepcja prezentowana w niniejszym rozdziale uwzględnia dotychczasowe doświadczenia z wykorzystywania wymienionych wyżej systemów, stanowiąc istotne ich rozszerzenie poprzez wprowadzenie możliwości zastosowania całego spektrum modeli o różnym stopniu złożoności. Pozwoli to na wykonywanie zarówno analiz zgrubnych, jak i bardzo szczegółowych – w tych sytuacjach, które będą tego wymagały.

1. Założenia funkcjonalne systemu

Głównym zadaniem systemu jest określenie następujących wielkości – zależnie od rodzaju ryzyka:

1. Dla ryzyka lokalnego: częstość szkód referencyjnych (np. śmiertelność) w wyniku wypadku w danym punkcie obszaru; prezentacja w postaci konturów ryzyka oraz histogramu pokazującego wielkość ryzyka i udział różnych źródeł w punkcie.
2. Dla ryzyka indywidualnego: podobnie jak powyżej, ale w ewaluacji referencyjnych szkód uwzględnia się inne wielkości, np. średni czas ekspozycji, możliwość ochrony w budynku, a także obecność miejsc o szczególnej wrażliwości (jak szkoły, szpitale i inne); wyniki powinny być przedstawione w postaci konturów ryzyka.
3. Dla ryzyka społecznego: liczba osób, które mogą być dotknięte skutkami awarii; prezentacja ryzyka powinna przybierać formę krzywej F-N, tj. wykresu skumulowanej częstości awarii ze wszystkich źródeł, które dotknęły nie więcej niż N osób; inny sposób prezentacji to histogram I-N pokazujący liczbę osób (N) eksponowanych na indywidualne ryzyko w przedziale I (np. śmiertelność/rok 10^{-6} – 10^{-5}).

Wielkości ryzyka są wyznaczane dla scenariuszy zdarzeń awaryjnych przy uwzględnieniu:

- substancji lub grup substancji (np. palnych, wybuchowych, toksycznych);
- źródła (zakładu lub grup zakładów o takiej samej działalności np. magazyny paliw);
- rodzaju skutków.

Użytkownik powinien mieć możliwość filtrowania wyników, wybierając:

- substancję lub typ substancji,
- typ awarii,
- rodzaj skutków,
- źródła (zakłady) lub typy źródeł.

Ponadto ważna jest możliwość dodania dowolnego obiektu na mapie, który potencjalnie stanowi źródło zagrożenia – np. planowanej instalacji przemysłowej. Obiekt ten powinien zawierać się w osobnej warstwie mapowej.

Użytkownik powinien móc niezależnie obsługiwać tabele baz danych w celu wprowadzenia, modyfikacji lub usunięcia rekordów. Pożądana byłaby możliwość wyszukiwania rekordów tabeli poprzez powiązania z innymi tabelami np. wyszukiwanie w tabeli o awariach rekordów dotyczących danej substancji lub grup substancji (np. łatwopalnych).

2. Wskaźniki ryzyka obszarowego

W systemie należy uwzględnić ryzyko, jakie na wybranym obszarze stwarzają analizowane instalacje. W pomiarach ryzyka zawarte zostają przede wszystkim trzy typy informacji:

- częstość występowania wypadków/prawdopodobieństwo wystąpienia wypadku lub ciągu zdarzeń;
- rozłożenie efektów fizycznych odpowiedzialnych za szkodę referencyjną (promieniowanie cieplne w przypadku pożaru, nadciśnienie w przypadku eksplozji, stężenie/dawka wchłonięta w przypadku uwolnienia substancji toksycznych);
- relacja pomiędzy efektem fizycznym i wielkością szkód.

Przy rozważaniu ryzyka społecznego informacje o analizowanym obszarze powinny zawierać rozkład przestrzenny populacji ludzkiej oraz położenie ognisk narażenia (szpitali, centrów komercyjnych, szkół, itp.). Wykorzystuje się je do oszacowania liczby osób, które mogą ucierpieć w wyniku awarii. Informacje o terenie, takie jak sposób użytkowania gruntu (tereny przemysłowe, osiedla mieszkaniowe, grunty rolnicze, itp.) oraz średnie warunki meteorologiczne panujące w jego rejonie, są domyślnie rozważane przy definiowaniu przestrzennego rozmieszczenia populacji oraz częstości i skutków scenariuszy awaryjnych (na przykład szorstkość terenu, prawdopodobieństwo zapłonu, różne ograniczenia).

Wymienione na początku tego podrozdziału trzy miary ryzyka nie nadają się do opisywania zagrożeń dla środowiska. Obecnie brak jest powszechnie przyjętych wskaźników opisujących kompleksowo skutki dotyczące komponentów środowiska oraz ludności. Stan ten wynika z faktu, że wymogi dotyczące uwzględnienia w raportach bezpieczeństwa tego rodzaj szkód wprowadzone zostały dopiero przez najnowsze ustawodawstwo. Do tego celu zaproponowane zostały pewne wskaźniki, bazujące na podejściu zbiorów rozmytych, które łączą w sobie stopień szkód dotyczących poszczególnych zasobów. Jednak – jak już wspomniano – nie zostały one powszechnie zaaprobowane. Podobnie w zaadoptowanych pomiarach ryzyka nie uwzględniono długofalowych efektów długotrwałych uwolnień oraz kwestii BHP.

Przy sporządzaniu oceny ryzyka dla terenów przemysłowych wymagane oszacowania nie są prostą sumą analiz ryzyka dla każdego z zakładów przemysłowych, lecz działaniem wymagającym uwzględnienia złożoności powiązań pomiędzy wszystkimi zasobami a terenem.

W procedurach QARA (ang. Quantitative Area Risk Analysis) pierwszy krok to wybór terenu objętego wpływem instalacji przemysłowej. Wstępny wybór musi zostać zweryfikowany oraz – w razie takiej konieczności – skorygowany po wykonaniu analiz. Teoretycznie narzuca to procedurę interaktywną, ale w praktyce pierwszy wybór jest zachowawczy i zawiera gęsto zamieszkane ogniska, które nie podlegają znaczącemu ryzyku. Na potrzeby tworzenia odwzorowania kartograficznego obszaru analiz niezbędne są informacje na temat instalacji, dróg, portów, linii

kolejowych, rurociągów, a także – jak już zostało wspomniane – dane o populacji ludzkiej. Kolejnym krokiem QARA jest skompletowanie listy źródeł ryzyka. Kompletne dane na temat ilości substancji niebezpiecznych przetwarzanych i transportowanych na badanym obszarze umożliwia skompletowanie danych potrzebnych do rozpoczęcia analiz ryzyka źródłowego. Zebranie informacji o instalacjach przemysłowych, przy dostępności raportów bezpieczeństwa, jest relatywnie proste. Bardziej złożonym zadaniem jest ustalenie ilości transportowanych substancji, a przede wszystkim używanych tras. Szacowanie ryzyka stwarzanego przez każde źródło z osobna należy rozpocząć od identyfikacji zbioru prawdopodobnych zdarzeń awaryjnych, a następnie przeprowadzić ocenę całkowitej częstości występowania wypadków oraz ich konsekwencji. Szczególny nacisk powinien zostać położony na zbiór powszechnych metod identyfikacji źródeł awarii oraz metod symulacji skutków fizycznych, który będzie używany do porównywania wyników oraz szeregowania ważności źródeł. Ostatni krok oceny to transformacja wyników analiz bezpieczeństwa instalacji oraz przeniesienie ich do zbioru par danych o częstości występowania i skutkach scenariuszy awaryjnych. Scalający je model ma za zadanie uporządkowanie ich tak, aby uzyskać miary ryzyka dla całego obszaru objętego wpływem. Równania łączące takie pary danych są różne dla źródeł punktowych (najważniejsze wydarzenia w instalacjach) oraz źródeł liniowych (szlaki komunikacyjne), ponieważ w tym ostatnim przypadku, lokalizacja ewentualnych wypadków zmienia się w miarę przemieszczania się po drogach, liniach kolejowych, rurociągach oraz trasach morskich.

Jeżeli P jest punktem analizowanego obszaru, ryzyko lokalne jest oceniane za pomocą równania:

$$RL(P) = \sum_{i=1}^N \lambda_i \sum_{s=1}^{N_{ST}} p_{i,s} \sum_{j=1}^{N_I(i)} \alpha_{i,j} \sum_{cv=1}^{N_{CV}} \sum_{\theta_v=1}^{N_{\theta_v}} p_{cv, \frac{\theta_v}{s}} \bar{v}_{i,j,cv,\theta_v}(X_S \rightarrow P) \quad (1)$$

$$RL_t(P) = \sum_{i=1}^{N_I} \lambda_i \sum_{s=1}^{N_{ST}} p_{i,s} \sum_{j=1}^{N_I(i)} \alpha_{i,j} \int_l \sum_{cv=1}^{N_{CV}} \sum_{\theta_v=1}^{N_{\theta_v}} p_{cv, \frac{\theta_v}{s}} \bar{v}_{i,j,cv,\theta_v}(x_{dl \rightarrow P}) dl \quad (2)$$

gdzie:

$\alpha_{i,j}$ – prawdopodobieństwo zajścia wypadku j , determinowane dla występowania najwyższego i ($i = 1, \dots, N, j = 1, \dots, N_I(i)$);

λ_i to częstość występowania najwyższego i ;

$p_{i,s}$ jest prawdopodobieństwem, że najwyższe i występuje w sezonie s (wartość ta jest równa $1/4$, jeśli rozważany jest równomierny rozkład roczny), $s = 1, \dots, N_s$;

$p_{cv, \frac{\theta_v}{s}}$ to prawdopodobieństwo wystąpienia pary cv ($cv = 1, \dots, N_{CV}$) „klasy stabilności, prędkości wiatru” w kierunku θ_v , zastrzeżony dla czasu s ; $\theta_v = 1, \dots, N_{\theta_v}$.

W równaniach (1) i (2) v jest średnim narażeniem na śmierć spowodowaną poprzez realizację wszystkich scenariuszy wypadków w punkcie P , których kierunki zostały zawarte w sektorze róży wiatrów, posiadającej θ_v jako dwusieczną. Wynika to z definicji przeciętnego scenariusza awarii, dla którego narażenie jest określone przez zależność:

$$\bar{v}_{i,j,cv,\theta_v}(x_{S(dl) \rightarrow P}) = \frac{1}{\theta_{set.v}} \int_{\theta_{set.v}} v_{i,j,cv,\theta_v} d\theta \quad (3)$$

Należy zauważyć, że równania (1) i (2) nie zawierają informacji na temat populacji objętej ryzykiem, uwzględniają natomiast ocenę ryzyka indywidualnego. Odpowiednie wartości prawdopodobieństwa obecności lub nieobecności ludzi w danym miejscu rozpatruje się w zależności od pory dnia lub nocy, od pory roku oraz od tego, jak szczytowe wydarzenie zależy od dnia lub nocy poprzez prawdopodobieństwo p_g . Oczywiście ekspozycja w pomieszczeniach zamkniętych łagodzi skutki scenariuszy, więc zdefiniowany musi dla niej zostać odpowiedni współczynnik $\beta_{i,j,cv,\theta_v,io}$.

Biorąc pod uwagę powyższe rozważania, otrzymujemy wielkość:

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i \sum_{s=1}^{N_{ST}} p_{i,s} \sum_{g=1}^2 p_{i,g} \sum_{j=1}^{N_I(i)} \alpha_{i,j} \sum_{cv=1}^{N_{CV}} \sum_{\theta_v=1}^{N_{\theta_v}} p_{cv,\frac{\theta_v}{s}} \bar{v}_{i,j,cv,\theta_v}(x_{S \rightarrow P}) \sum_{io} p_{\frac{io}{s}/g}^{cat} \beta_{i,j,io} \quad (4)$$

Wielkość ta opisuje rozkład geograficzny ryzyka indywidualnego dla osób z każdej kategorii.

Jak zostało to już wcześniej przedstawione, ryzyko społeczne może być reprezentowane poprzez krzywe F/N , miary wpływu społecznego wszystkich scenariuszy awaryjnych. Aby uzyskać inne składowe, należy skupić się na średnich scenariuszach awaryjnych występujących w S . Ich częstość wynosi:

$$F_{sc}(i, j, s, g, cv, \theta_v) = \lambda_i p_{i,s} p_{i,g} \alpha_{i,j} p_{cv,\theta_v/s} \quad (5)$$

Populacja podlegająca obrażeniom jest rozłożona na całym obszarze wpływu lub skoncentrowana w ogniskach narażenia, takich jak szpitale, szkoły, kościoły, stadiony, supermarkety. Aby przeprowadzić obliczenia, jednostki populacji ludzkiej znajdującej się na obszarze należy pogrupować w punktach siatki. Liczba ofiar jest obliczana za pomocą równania:

$$N_{SC}(i, j, s, g, cv, \theta_v) = \sum_{P_{ef}} \sum_{k=1}^{N_{cat}} N_k \bar{v}_{i,j,cv,\theta_v}(x_{S \rightarrow P_{ef}}) \sum_{io} p_{\frac{io}{s}/g}^k \beta_{i,j,io} \quad (6)$$

gdzie P_{ef} to zbiór punktów, w których efekt fizyczny scenariusza nie jest pomijalny.

Wcześniej uzyskane pary wartości F_{sc} i N_{sc} są podstawowymi elementami do wytworzenia skumulowanej krzywej F/N . Przy podobnych ocenach można również obliczyć krzywe F/N dla transportu, przy dogodnym pogrupowaniu każdego źródła liniowego w segmenty. W kompletnej i szczegółowej procedurze oszacowania całkowitego ryzyka, przy obecności wielu źródeł, nie może zostać pominięty efekt domina, ponieważ kolejne wypadki na obszarze przemysłowym mogą być konsekwencją wcześniejszych zdarzeń szczytowych. Prosty sposób uwzględnienia efektów domina jest ten zasugerowany w niniejszej procedurze. Wydarzenia szczytowe w instalacjach przyjmowane są jako lokalizacje instalacji podatne na szkody – jedynie te miejsca są analizowane za pomocą krzywych interakcji jako

źródła i cele efektu domina. Każda z nich zostaje zdefiniowana jako „umieszczenie punktów, których odległość od fizycznej lokalizacji wypadku szczytowego jest największa ze wszystkich tych, które mieszczą się w wartościach progowych efektów promieniowania cieplnego i nadciśnienia”.

Równania od (1) do (6) dają teoretyczny obraz pomiarów ryzyka, który wyraźnie pokazuje ogromną ilość informacji potrzebnych do ich sporządzenia. Ogólny wpływ na teren może ulec zmianie, jeżeli nie spełnia on warunków tolerancji oraz jeśli zmiany mogą mieć pozytywny rezultat przy skorzystaniu z możliwości rozdzielenia składowych związanych z instalacją, substancjami, źródłem ryzyka oraz wszystkich tych parametrów, które znacząco wpływają na wyniki.

Podsumowując, budowa systemu powinna uwzględniać algorytm wyznaczania ryzyka obszarowego oparty o powyższe równania, dotyczące obliczeń ryzyka, na które narażeni są ludzie, a także efekt domino oraz zagrożenia dla środowiska naturalnego.

3. Podstawowe algorytmy

Użytkownik powinien mieć możliwość wyznaczenia ryzyka wystąpienia określonych szkód w zaznaczonym przez niego obszarze, w jednostce administracyjnej oraz w przyjętym promieniu wokół wybranego punktu. Ponadto można wyznaczyć ryzyko:

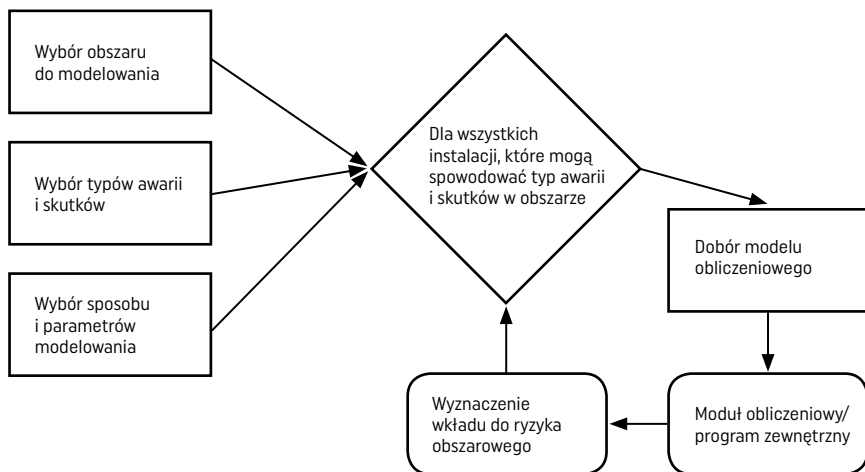
- określonego rodzaju zagrożenia: pożarowe, wybuchowe, toksyczne;
- pochodzące od jednej substancji lub grupy substancji;
- dla zdefiniowanych typów szkód (skutków wystąpienia zagrożenia): ludzkich bądź materialnych;
- będące kombinacją wybranych elementów.

W ogólności poprzez określenie zespołu ww. czynników użytkownik definiuje typ ryzyka, które ma być wyznaczone. Oczywiście nie każdy zakład może być źródłem ryzyka, którym zainteresowany jest użytkownik. W celu wyznaczenia ryzyka określonego typu powinny być zatem uwzględnione jedynie te zakłady, które mogą być jego źródłem.

Generalnie algorytm wyznaczania ryzyka w obszarze składać się będzie z czterech podstawowych kroków (rycina 1):

1. Dla każdego zakładu znajdującego się w obszarze przeprowadza się weryfikację, czy powinien on być uwzględniony w kalkulacji ryzyka szkód (tzn. czy może być źródłem ryzyka określonego typu).
2. Jeżeli dla danej instalacji (zakładu) istnieją indywidualne scenariusze awaryjne, to wielkości ryzyka wyznaczane są na ich podstawie.
3. Jeśli nie ma dedykowanych scenariuszy, to stosowane są scenariusze generyczne dla instalacji danego typu i na ich podstawie wyznaczane są wielkości ryzyka.

4. Na podstawie scenariuszy następuje wybór odpowiedniego modelu obliczeniowego (który może być modulem wewnętrznym lub programem zewnętrznym) oraz wyznaczenie wkładu danej instalacji (zakładu) do wielkości ryzyka na rozważanym obszarze.



Ryc. 1. Ogólny algorytm działania systemu

Źródło: Opracowanie własne.

Tabela 1. Podstawowe typy scenariuszy awaryjnych

RODZAJ SCENARIUSZA AWARYJNEGO	ZESTAW PARAMETRÓW POTRZEBNYCH DO OKREŚLENIA CZŁONU ŹRÓDŁOWEGO
Modelowanie chmury toksycznej parującej z rozlewiska	Geometria zbiornika/rurociągu Stan substancji Temperatura przechowywania substancji Masa substancji Wielkość otworu Położenie otworu Wielkość powierzchni ograniczającej
Modelowanie pożaru rozlewiska	Geometria zbiornika/rurociągu Stan substancji Temperatura przechowywania substancji Masa substancji Wielkość otworu Położenie otworu Wielkość powierzchni ograniczającej
BLEVE	Geometria zbiornika/rurociągu Stan substancji Temperatura przechowywania substancji Masa substancji

RODZAJ SCENARIUSZA AWARYJNEGO	ZESTAW PARAMETRÓW POTRZEBNYCH DO OKREŚLENIA CZŁONU ŹRÓDŁOWEGO
Pożar błyskawiczny	Geometria zbiornika/rurociągu Stan substancji Temperatura przechowywania substancji Masa substancji Wielkość otworu Położenie otworu
Wybuch par chmury VCE	Geometria zbiornika/rurociągu Stan substancji Temperatura przechowywania substancji Masa substancji Wielkość otworu Położenie otworu Czas zapłonu (może być nieznany) Sposób zapłonu (iskra/płomień lub detonacja)
Pożar strumieniowy	Geometria zbiornika/rurociągu Stan substancji Temperatura przechowywania substancji Masa substancji Wielkość otworu Położenie otworu
Dyspersja substancji toksycznej	Geometria zbiornika/rurociągu Stan substancji Temperatura przechowywania substancji Masa substancji Wielkość otworu Położenie otworu

Źródło: Opracowanie własne.

W systemie niezbędne będzie wykorzystywanie następujących parametrów meteorologicznych:

- prędkości i kierunku wiatru,
- wysokości pomiaru wiatru,
- szorstkości terenu (lub określenia typu terenu),
- kategorii stabilności (lub określenia stopnia zachmurzenia),
- temperatury,
- wysokości inwersji,
- wilgotności.

Inne możliwe do zastosowania parametry terenowe to typ i temperatura gruntu oraz gęstość zabudowy.

W zależności od rodzaju rozważanej substancji wykorzystane będą różne parametry wyznaczające strefy zagrożeń:

- dla substancji toksycznej: ERPG lub AEGL (wartości stężeń – ppm);
- dla substancji palnej: promieniowanie cieplne (np. $> 10 \text{ kW/m}^2$ zgon w ciągu 1 min, $> 5 \text{ kW/m}^2$ oparzenie 2. stopnia w ciągu 1 min, $> 2 \text{ kW/m}^2$ ból w ciągu 1 min);
- dla substancji wybuchowej: LEL (Lower Explosive Limit), UEL (Upper Explosive Limit).

Scenariusze awaryjne dla instalacji przechowywane będą w bazach danych. Podstawowe informacje, jakie należy tam zawrzeć to:

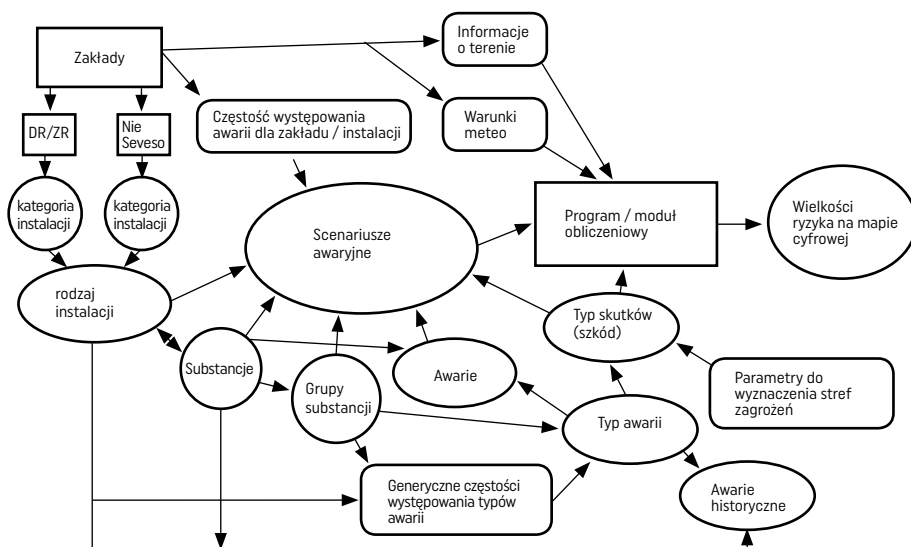
- nazwa i rodzaj scenariusza;
- typ skutków, parametry określające strefy zagrożeń;
- źródło: substancja (lub grupa substancji) – wielkość substancji oraz stan jej przechowywania powinien być związany z bazą zakładów;
- czynnik inicjujący scenariusz (w szczególności, czy może być to czynnik zewnętrzny);
- częstość występowania scenariusza;
- link do pliku zawierającego parametry scenariuszy;
- link do programu/modułu obliczeniowego dla danego scenariusza.

Diagram (rycina 2) pokazuje połączenia między poszczególnymi elementami systemu.

Założenia konstrukcji diagramu są następujące:

1. Zakłady podzielone są na te dużego (ZDR) i zwiększonego ryzyka (ZZR) oraz niepodlegające Dyrektywie Seveso, tj. niesewesowskie (NSev).
2. Z zakładami związane są informacje o terenie, statystyce warunków meteorologicznych oraz kategorii występujących w nim instalacji (które są różne dla ZDR, ZZR i NSev).
3. W przypadku niektórych zakładów mogą być dostępne szczegółowe informacje o scenariuszach awaryjnych i częstościach ich występowania.
4. Bardziej szczegółowo instalacje dzielą się na rodzaje instalacji (zbiorniki, urządzenia, magazyny, itp.), które są powiązane z występującymi substancjami.
5. Rodzaje instalacji oraz grupy substancji definiują typy awarii, dla których są generyczne częstości występowania awarii.
6. Typy awarii z jednej strony wyznacza człon źródłowy i warunki zdarzenia, z drugiej zaś określa typ możliwych skutków (szkód), zaś strefy zagrożeń są określone przez parametry progowe tych skutków.
7. Scenariusze awaryjne określone są przez rodzaj instalacji, substancję oraz typ awarii.
8. W celu wyznaczenia wielkości ryzyka określonych skutków do scenariusza awaryjnego muszą być dołączone dane meteorologiczne (statystyki) oraz informacje o terenie.

Należy założyć, że system będzie miał dostęp do danych ze źródeł zewnętrznych, np. awarii historycznych jak BARPI-ARIA, danych mapowych jak GEOPORTAL lub generycznych baz danych o częstości występowania różnych typów awarii. Można też przyjąć, że dane mapowe będzie można pozyskać z bazy danych obiektów topograficznych GBDOT10k. Jest to obecnie najbardziej wiarygodne źródło informacji, z którego korzystać mogą instytucje publiczne i podmioty gospodarcze zainteresowane tworzeniem systemów geoinformacyjnych dla wspomagania i realizacji swoich zadań oraz w procesie podejmowania decyzji.



Ryc. 2. Diagram połączeń między elementami systemu

Źródło: Opracowanie własne.

Przykładowe kategorie i rodzaje instalacji podano poniżej.

Kategorie instalacji ZDR/ZZR:

- duże instalacje przechowywania paliw,
- instalacje petrochemiczne,
- instalacje produkcji nawozów sztucznych,
- duże instalacje syntezy chemicznej,
- duże magazyny chemikaliów,
- duże instalacje chłodnicze.

Kategorie instalacji NSev:

- instalacje wytwórcze biogazu,
- instalacje przechowywania paliw (małe i średnie stacje dystrybucyjne),
- małe i średnie instalacje chłodnicze,
- małe instalacje syntezy chemicznej,
- instalacje magazynowe chemikaliów,
- oczyszczalnie ścieków,
- stacje uzdatniania wody,
- instalacje obróbki powierzchniowej.

Rodzaje instalacji kategoryzują sposób ujęcia dokładniejszych informacji o zbiornikach, urządzeniach i tych obiektach, które mogą stanowić źródło zagrożenia w zakładach:

- instalacje rurowe;
- zbiorniki wielkogabarytowe:
 - kuliste:
 - konstrukcji „twardej”,
 - konstrukcji „miękkiej”;
 - walcowe poziome,
 - walcowe pionowe;
- zbiorniki małogabarytowe umiejscowione poza budynkami:
 - kuliste,
 - walcowe poziome,
 - walcowe pionowe;
- duże urządzenia syntezy chemicznej (umiejscowione poza budynkami):
 - komory fermentacyjne,
 - reaktory,
 - kolumny rektyfikacyjne,
 - chłodnie kominowe;
- budynki zawierające wrażliwe instalacje przemysłowe,
- budynki magazynowe,
- place magazynowe,
- przyłącza dystrybucyjne umiejscowione poza budynkami.

Istotne jest, aby baza rodzajów instalacji zawierała także informacje o generycznych częstościach typów awarii dla danych rodzajów instalacji.

Przez typ awarii rozumiemy zbiór tych parametrów, które określają warunki konieczne do wyznaczenia członu źródłowego. Przykładowo może to być: uwolnienie ze zbiornika pod ciśnieniem atmosferycznym lub ze zbiornika ciśnieniowego, pęknięcie rurociągu, rozerwanie katastroficzne zbiornika, itp.

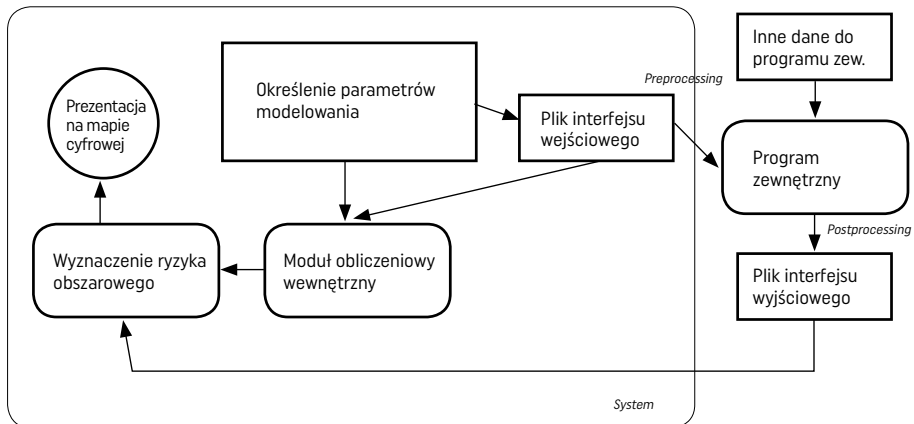
Natomiast zbiór parametrów awarii – w stosunku do typu awarii – zawiera dodatkowo dane potrzebne do opracowania scenariusza awarii określonego typu, np. wielkość uwolnionej substancji, warunki jej przechowywania, wielkość otworu, rozmiar zbiornika. Tak więc typ awarii jest pojęciem bardziej ogólnym, podczas gdy zbiór parametrów awarii uwzględnia dane potrzebne do wykonania konkretnych obliczeń członu źródłowego. Ciąg implikacji jest taki, że typ awarii określa rodzaj zagrożenia (toksyczne, pożarowe, wybuchowe), co następnie determinuje rodzaj skutków.

Scenariusz awaryjny agreguje informacje niezbędne do uruchomienia programu obliczeniowego. Zakłada się, że program obliczeniowy może być wewnętrzny lub zewnętrzny. W pierwszym przypadku jest on wbudowany w system, zaś w drugim konieczne jest opracowanie interfejsu wejściowego oraz wyjściowego. Można założyć, iż istnieć będą dwa sposoby uruchamiania modelu zewnętrznego:

1. Poprzez interfejs systemu: użytkownik wprowadza do systemu niezbędne dane (lub są one pobierane z bazy), system tworzy plik wejściowy, wywołuje program zewnętrzny, a następnie przetwarza dane wyjściowe.

2. Niezależnie: w systemie musi być opracowany interfejs, który pozwoli na wykorzystanie wyników programu zewnętrznego; oznacza to, że rezultaty symulacji powinny być przetworzone do odpowiedniej postaci.

Przykładem programu zewnętrznego, który mógłby być wywoływany przez interfejs systemu, jest program ALOHA. Z kolei narzędzia bardziej zaawansowane, jak klasy CFD, powinny być wykonywane niezależnie. Rycina 3 pokazuje ogólny schemat wywoływania modeli obliczeniowych. Komunikacja z programami zewnętrznymi odbywa się poprzez pliki interfejsów wejściowych i wyjściowych. Plik interfejsu wejściowego powinien posiadać co najmniej dane o źródle awarii i położeniu instalacji. W przypadku programów, które są wywoływane bezpośrednio przez system, zasadniczo taki plik wejściowy powinien zawierać pełen zestaw danych niezbędnych do jego uruchomienia (chyba, że część danych jest udostępniana w zewnętrznych plikach). Dla programów bardziej zaawansowanych plik interfejsu wejściowego zwykle nie będzie zawierać wszystkich danych (np. siatki obliczeniowej dla programów typu CFD). Taki plik interfejsu zwykle musi być przetworzony do właściwego pliku wejściowego danego programu (preprocessing). Dodatkowe dane niezbędne do uruchomienia programu zewnętrznego mogą pochodzić również z systemu GIS – np. informacje o terenie wokół instalacji. W obu przypadkach natomiast wyniki uzyskane z programów zewnętrznych powinny być przetworzone do takiej postaci, którą system będzie w stanie wczytać – konieczny jest więc postprocessing. Dla pewnych programów taki postprocessing może też stanowić wbudowaną część systemu.



Ryc. 3. Sposób interakcji systemu z programami zewnętrznymi

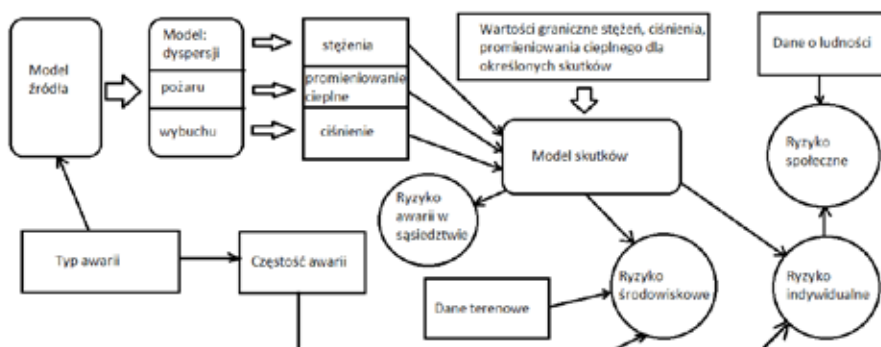
Źródło: Opracowanie własne.

Na rycinie 4 przedstawiony jest główny łańcuch modelowy systemu. W uogólnieniu obrazuje on następujące zależności:

1. Typ awarii determinuje sposób wyznaczenia członu źródłowego (model do wyznaczania parametrów źródła może także być elementem programu zewnętrznego).
2. W zależności od rodzaju awarii lub uwolnionej substancji modelowane są: dyspersja, pożar lub wybuch (bądź ich kombinacje).
3. Na podstawie wartości granicznych (np. takich jak dla stref zagrożeń) modelowane są różne skutki.
4. W połączeniu z informacją o częstości występowania awarii wyznaczane jest ryzyko indywidualne.
5. Ryzyko społeczne jest określone dodatkowo na podstawie danych o populacji na danym obszarze.
6. Model skutków może również dotyczyć środowiska – co w połączeniu z danymi o terenie ma pozwolić wyznaczyć ryzyko środowiskowe.
7. Ryzyko wywołania awarii w pobliskich instalacjach jest wyznaczane na podstawie modelu skutków.

System może również zawierać zgrubne metody wyznaczania ryzyka obszarowego charakterystyczne dla metod przesiewania („screening”). W porównaniu z modelami dokładniejszymi bazują one na następujących założeniach:

- stosuje się specjalną kategoryzację zakładów i instalacji;
- wielkość ryzyka zależy w zasadzie wyłącznie od ilości substancji w zakładzie; nie rozważa się scenariuszy awaryjnych (faktycznie są one ukryte w samej metodologii);
- uwzględniana jest gęstość zaludnienia oraz uproszczone warunki meteorologiczne (zwykle dane o wietrze i klasie stabilności).



Ryc. 4. Łańcuch modelowy systemu

Źródło: Opracowanie własne.

Jako przykład takiego podejścia można podać metodologię IAEA (opracowaną wspólnie przez IAEA, UNER, UNIDO i WHO – IAEA Tecdoc-727)³. W podrozdziale *Algorytm określania potencjalnych skutków poważnych awarii metodyką IAEA* zawarty jest szczegółowy opis tej metody.

4. Generyczne częstotliwości występowania awarii

W niniejszym podrozdziale przedstawione zostały informacje o podstawowych bazach danych dotyczących częstotliwości występowania awarii w instalacjach przemysłowych. Zestawienie to oparto na raportach opublikowanych przez takie instytucje jak:

- International Association of Oil & Gas Producers (OGP)⁴,
- U.S. Nuclear Regulatory Commission (U.S. NRC)⁵,
- Inter-Institutional Group on the Classification of Hazardous Locations (IIG CHL)⁶.

International Association of Oil & Gas Producers (OGP)

Dane przedstawione w raporcie OGP odnoszą się do częstotliwości uwolnień z takich urządzeń oraz komponentów technologicznych, jak: rury, pompy odśrodkowe i tłokowe, sprężarki odśrodkowe i tłokowe, wymienniki ciepła płaszczowo-rurowe, płytowe i powietrzne, filtry, śluzy, kołnierze, łączniki, zbiorniki ciśnieniowe, zawory manualne i elektryczne. Dla większości z nich uwzględniono trzy rodzaje uwolnień:

- całkowite: zgodne z przepływem przez zdefiniowany otwór, począwszy od normalnego ciśnienia roboczego, kontynuowane dopóki nie będzie kontrolowane przez awaryjne wyłączenie lub do wyczerpania zapasów;
- ograniczone: przypadki, w których ciśnienie nie równa się zeru, ale ilość substancji uwolnionej jest znacznie mniejsza niż przy pełnym uwolnieniu. Może tak być, gdy uwolnienie jest izolowane lokalnie dzięki interwencji człowieka (na przykład człowiek zamknie zawór przypadkowo otwarty) lub nastąpi ograniczenie w przepływie od inwentaryzacji systemu (np. uwolnienie płynu zgromadzonego między uszczelnieniem wału pompy);
- bezciśnieniowe (przy zerowym ciśnieniu): przypadki, kiedy różnica pomiędzy ciśnieniem wewnątrz nieszczelnego urządzenia a ciśnieniem atmosferycznym jest praktycznie zerowa. Może to być spowodowane zerowym ciśnieniem roboczym sprzętu (np. otwarte kanały ściekowe) albo pozbawieniem sprzętu ciśnienia dla celów konserwacji.

³ Guidelines for integrated risk assessment and management in large industrial areas TECDOC-994, International Atomic Energy Agency, Vienna 1998.

⁴ International Association of Oil & Gas Producers, Process Release Frequencies, London 2010.

⁵ U.S. Nuclear Regulatory Commission: Industry-Average Performance for Components and Initiating Events at U.S. Commercial Nuclear Power Plants, 2007.

⁶ Cox A. W., Lees F. P., Ang M. L., Classification of Hazardous Locations, Institution of Chemical Engineers, Totton, Hampshire 2000.

Metoda szacowania częstości uwolnień w OGP składała się z trzech głównych etapów:

- klasyfikacji urządzeń (ze względu na typ i wielkość) na grupy, w obrębie których nie występują istotne różnice;
- dopasowanie do danych doświadczalnych funkcji opisującej częstość występowania awarii w urządzeniu danego typu w zależności od wielkości uszkodzenia;
- przydzielenie określonej częstości uwolnienia do różnych scenariuszy awaryjnych.

Rozkład wielkości uwalniania jest reprezentowany przez funkcję częstości, co zapewnia niezerową częstość uwolnień dla wszystkich rozszczelnień o wielkości od 1 mm aż do średnicy rury wlotowej. W przypadku gdy częstość zależy od wielkości instalacji (rury, kołnierze, zawory manualne), funkcja ta przyjmuje następującą postać:

$$F(d) = C(1 + aD^n)d^m + F_{rup} \quad (7)$$

gdzie:

$F(d)$ – średnia liczba uwolnień na rok z rozszczelnień przekraczających rozmiar d [mm];

D – średnica komponentu;

F_{rup} – średnia liczba uszkodzeń na rok;

C, a, m, n – stałe charakterystyczne dla komponentu i scenariusza awaryjnego. W przypadku gdy częstość nie zależy od wielkości urządzenia, funkcja jest nieco prostsza:

$$F(d) = Cd^m + F_{rup} \quad (8)$$

Na tej podstawie można określić częstość uwalniania w dowolnym zakresie wielkości d_1 – d_2 jako $F(d_2) - F(d_1)$.

Dane przedstawione w raporcie OGP odzwierciedlają stan bezpieczeństwa brytyjskich instalacji morskich w latach 1992–2006. Zdaniem autorów są one zgodne z wymogami obecnych standardów, nie uwzględniają jednak kluczowego znaczenia jakości obsługi, kontroli i konserwacji urządzeń w kontekście częstości awarii i potencjalnych uwolnień substancji niebezpiecznych. Częstość uwolnień może więc w praktyce być znacznie wyższa, jeśli wymienione czynniki nie są utrzymywane na odpowiednim poziomie.

Aby uwzględnić rzeczywisty poziom bezpieczeństwa w konkretnym zakładzie w sposób ilościowy, należy wykonać audyt systemu zarządzania bezpieczeństwem i przekonwertować wynik tego audytu do tzw. czynnika zarządzania ogólnego (MF – *overall management factor*), przez który należy pomnożyć wszystkie generyczne częstości awarii. Wartości czynnika MF powinny mieścić się między 0,1 a 10,0 (od dziesięciokrotnie wyższych do dziesięciokrotnie niższych standardów w porówna-

niu do średniego zakładu). Zaleca się, aby audyt obejmował m.in. takie elementy jak: zarządzanie zmianą, analiza zdarzeń niepożądanych, procedury operacyjne i awaryjne, certyfikacja i szkolenia dla wykonawców i podwykonawców, bezpieczne praktyki pracy. Każdy z elementów dla danego zakładu powinien podlegać punktacji względem pozostałych instalacji. Ponadto duża liczba innych czynników zewnętrznych może stanowić podstawę do wprowadzenia dodatkowych modyfikacji danych, tak aby lepiej odzwierciedlały one niezawodność urządzeń pracujących w określonych warunkach. Czynniki te obejmują m.in. fizyczne cechy sprzętu i warunki klimatyczne, takie jak: środowisko działania, ciągłość utrzymywania procesu, materiał, z którego są wykonane komponenty, ekstremalne wahania temperatur, cykliczne przeciążenia, rodzaj olejów i płynów chłodzących w urządzeniach, wiek sprzętu, jakość spoin, ciśnienie operacyjne, aktywność sejsmiczna na danym terenie, radiografia, temperatura robocza, stan integralności (korozja wewnętrzna, kruszenie, pęknięcie, zmęczenie mechaniczne, inne). Sugerowane jest więc wprowadzenie dodatkowego multiplikatywnego współczynnika środowiskowego (*EF – environmental factor*) opisującego warunki pracy urządzeń względem warunków nominalnych określonych przez producenta.

U.S. Nuclear Regulatory Commission (U.S. NRC)

W 2007 roku Amerykańska Komisja Dozoru Jądrowego (U.S. NRC) opublikowała raport, w którym przedstawiono dane dotyczące częstości występowania ponad 220 różnych awarii. Zestawienie to obejmuje m.in. takie komponenty jak zawory (manualne, elektryczne, zwrotne, pneumatyczne, elektromagnetyczne, napowietrzające i upustowe), pompy (wysokoprężne, elektryczne, odśrodkowe i turbino-we), generatory (spalinowe, elektryczne, diesla), sprzęt elektryczny (szyny, transformatory, przełączniki, baterie, falowniki itp.), różnego rodzaju filtry, urządzenia wentylacji, rury i zbiorniki. Dane pochodzą z instalacji przemysłowych działających na terenie Stanów Zjednoczonych. Były zbierane w latach 1998–2002.

W analizie danych dokonano zróżnicowania na awarie komponentów aktywnych występujące w czasie ciągłej pracy, awarie komponentów pasywnych oraz na tzw. awarie na żądanie. Do danych doświadczalnych dopasowano ciągłe funkcje opisujące rozkłady prawdopodobieństwa wystąpienia poszczególnych awarii. Prawdopodobieństwo awarii podczas ciągłej pracy urządzeń, takich jak np. pompy elektryczne, zależy od czasu wymaganej aktywności. Częstość awarii komponentów pasywnych, takich jak np. rurociągi czy zbiorniki, zależy natomiast od częstości ich konserwacji i przeglądów. W obu przypadkach istotnym aspektem jest więc czas, przez który dany komponent ma spełniać swoją rolę (aktywną lub pasywną). Stąd też do modelowania tych awarii wykorzystano rozkład gamma opisany następującą zależnością:

$$f(\lambda) = (\beta^\alpha \cdot \lambda^{\alpha-1} / \Gamma(\alpha)) \exp(-\beta\lambda) \quad (9)$$

gdzie:

$f(\lambda)$ – gęstość prawdopodobieństwa;

λ – częstość występowania awarii (w jednostkach 1/h);

α – parametr kształtu;

β – parametr skali.

Średnia wartość częstości awarii λ_{sr} wynosi wówczas:

$$\lambda_{sr} = \alpha/\beta. \quad (10)$$

Inny typ uszkodzeń stanowią awarie na żądanie. Są one związane z brakiem odpowiedzi elementu aktywnego na przesłany sygnał sterowania (np. zawór elektryczny nie zamyka się, pompa elektryczna nie uruchamia się itp.). Awarie na żądanie dotyczą także innego typu komponentów, np. zaworów zwrotnych, które otwierają się pod wpływem ciśnienia, jakie wywiera woda płynąca w określonym kierunku. Nie są to więc komponenty aktywne, ale mechanizm awarii jest podobny – brak pożądanej zmiany stanu elementu. Częstość tych awarii jest modelowana rozkładem beta:

$$f(p) = (\Gamma(\alpha+\beta) / \Gamma(\alpha) \cdot \Gamma(\beta)) \cdot p^{\alpha-1} \cdot (1-p)^{\beta-1} \quad (11)$$

gdzie:

p – prawdopodobieństwo awarii na żądanie.

Wówczas wartość średnia p_{sr} wynosi:

$$p_{sr} = \alpha/(\alpha + \beta) \quad (12)$$

Takie podejście, bazujące na rozkładach prawdopodobieństwa awarii zamiast na wartościach punktowych, pozwala dodatkowo na ocenę niepewności, z jaką szacowana jest niezawodność systemów złożonych z dużej liczby komponentów.

Inter-Institutional Group on the Classification of Hazardous Locations (IIG CHL)

W 1990 roku Instytucja Inżynierów Chemicznych opublikowała raport klasyfikacji niebezpiecznych lokalizacji, w którym przedstawiono dane dotyczące częstości występowania przecieków, pożarów, wybuchów w instalacjach chemicznych. Zestawienie to obejmuje m.in. takie komponenty jak zawory, pompy, kołnierze, złącza rozgałęziające. Informacje przedstawione przez IIG CHL przygotowano z użyciem danych z instalacji przemysłowych oraz różnych wcześniejszych opracowań. Ideą raportu IIG CHL było opracowanie koncepcji i metod, które mogłyby stanowić podstawę do ilościowej klasyfikacji strefy, ale twórcy dokumentu nie podjęli próby utworzenia rzeczywistego modelu projektowego. Raport zawiera recenzje odnoszące się do postępów w danym temacie, aktualnych norm i przepisów, bieżących wyników dotyczących kontrolowania

źródeł zapłonu oraz opis kryteriów oceny ryzyka, które mogą być stosowane w ocenie ilościowej. Ryzyko szacowane jest wyrażone przede wszystkim w odniesieniu do klasyfikacji wypadków śmiertelnych (FAR – Fatal Accident Rate).

Praca opisana w raporcie IIG CHL jest badaniem wykonalności wprowadzenia klasyfikacji stref niebezpiecznych na podstawie metody ilościowej. Nie osiągnięto w niej punktu, w którym jasno i bez sprzeczności mogą być podane wytyczne w sprawie klasyfikacji niebezpiecznych obszarów, jednakże został utworzony ogólny typ podejścia do klasyfikacji. Obejmuje on modele i kryteria ryzyka oraz mógłby stanowić podstawę dalszych prac mających na celu opracowanie wytycznych do oceny ryzyka.

5. Kryteria wyboru modelu obliczeniowego

Modele matematyczne przeznaczone do prognozowania zagrożeń w środowisku atmosferycznym, glebowym i wodnym są różnicowane pod względem tego, jakich danych potrzebują. Każdy model ma swoje charakterystyczne ograniczenia. Kolejny problem stanowią wymagania, jakie można postawić przed konkretnym modelem. Wszystko to sprawia, że konieczne jest skonstruowanie zestawu ogólnych konfiguracji do każdego z modeli.

Za każdym razem, kiedy powstanie potrzeba dodania jakiegoś modelu do systemu, konieczne będzie sporządzenie dokładnego jego opisu, rozumianego przez zintegrowany z systemem interpreter. Możliwe będzie opracowanie wielu konfiguracji do jednego modelu. Każda konfiguracja będzie zawierać następujące pliki:

- plik z opisem ograniczeń – jakie muszą być spełnione warunki, żeby model z tą konfiguracją mógł zostać uruchomiony. Kryteria będą dotyczyć potrzeby konkretnych danych oraz ograniczeń dotyczących samych wielkości w tych danych. Będą również dotyczyć członu źródłowego;
- plik konfiguracyjny – szablon pliku bezpośrednio używanego przez model;
- skrypt uruchamiający – skrypt, który zostanie uruchomiony, kiedy wszystkie kryteria zostaną spełnione.

Ze względu na różnicowanie danych o środowisku, jakie można zdobyć z różnych źródeł, oraz możliwości i wymagań modeli należy stworzyć bibliotekę do interpolacji danych. Na przykład, jeśli użytkownik systemu będzie dysponował danymi trójwymiarowymi, ale będzie posiadał jedynie model pracujący z danymi jednowymiarowymi, należy zezwolić na interpolację danych, o ile będzie to możliwe.

Podobnym problemem jest utworzenie członu źródłowego. Niektóre modele są wyposażone w preprocesor członu źródłowego, który na podstawie typu awarii wyznaczy wielkość uwolnienia. Inne modele jednak nie muszą posiadać takiego mechanizmu. W pliku z opisem modelu musi znaleźć się sekcja dotycząca przeliczania członu źródłowego. Jeśli model nie posiada preprocesora uwolnień, zostanie uruchomiony preprocesor zintegrowany z systemem. Dane o uwolnieniu zostaną przekazane do modelu w formacie interfejsu wejściowego.

Należy też założyć, iż najprostszym sposobem włożenia do systemu wyników z modelu zewnętrznego będzie wczytanie pliku tekstowego o określonym formacie i interpolacji danych na mapie cyfrowej. Postać funkcji interpolowanej zależeć będzie od rodzaju awarii – możliwe będzie wykorzystanie metodyki stosowanej w systemie ARIPAR⁷.

6. Koncepcja informatyczna: klasy i obiekty

Główna idea tytułowej koncepcji polega na traktowaniu każdego elementu systemu jako obiektu określonej klasy. Z kolei klasa zdefiniowana jest przez swoje atrybuty. Oznacza to, że w momencie tworzenia obiektu określonej klasy automatycznie dziedziczone są wszystkie atrybuty charakteryzujące daną klasę. W definicji atrybutu trzeba będzie podać typ wartości, który będzie mógł przybierać różne formy (oprócz standardowych typów, jak numeryczne czy tekstowe, również adresy dokumentów HTML oraz typy specjalne).

Podstawowym założeniem jest to, że system ma być otwarty, tzn. powinna istnieć możliwość nie tylko dodawania nowych elementów, ale również zmiany struktury systemu – oczywiście w pewnych określonych ramach. Budowanie systemu będzie w znacznej mierze oparte na definiowaniu klas poprzez określanie atrybutów przy zachowaniu wszelkich reguł podejścia obiektowego, jak np. możliwość zdefiniowania nowej klasy poprzez wprowadzenie dodatkowych atrybutów dla klas istniejących.

Istotną rolę w systemie odgrywają obiekty geograficzne oraz inne informacje związane z mapą numeryczną. Obiekty pogrupowane są na wektorowej mapie numerycznej w warstwy. Warstwy te odpowiadają w zasadzie klasom. Każdy obiekt geograficzny ma następujące predefiniowane elementy:

- nazwa obiektu,
- numer działki geodezyjnej/kataster,
- identyfikator obiektu na mapie numerycznej.

Obiekty niewystępujące w rzeczywistości (np. planowane instalacje) powinny znaleźć się w osobnej warstwie. Oczywiście istnieje możliwość nadawania obiektom różnych atrybutów. Atrybuty te mogą zaliczać się do jednego z poniższych typów wartości:

- typ znakowy (do 255 znaków),
- typ liczby całkowitej,
- typ liczby zmiennoprzecinkowej,
- typ adresu URL (tj. dokumentu w postaci HTML),
- typy specjalne omówione później.

Wobec powyższego, jeśli np. użytkownik chce przypisać do obiektu atrybut

⁷ ARIPAR 5.0: *Getting Started Manual*, (...).

w postaci fotografii, wystarczy że przygotuje odpowiednią stronę html zawierającą opis z obrazkiem bitowym, a następnie zdefiniuje nowy atrybut (podając jako typ wartości adres URL) i jako wartość tego atrybutu wpisze adres przygotowanej strony. Ponadto z obiektami – w relacji wiele do wielu – skojarzyć można tabele bazy danych zawierających informacje o zakładach, substancjach, scenariuszach, itp.

Tabele baz danych powinny odpowiadać klasie – wówczas wartości atrybutów tej klasy są wartościami odpowiednich pól tabeli bazy danych. Można wyróżnić:

- klasę zakładów – czyli źródeł potencjalnych awarii: powiązaną z substancjami, awariami i scenariuszami awaryjnymi;
- klasę substancji – powiązaną z zakładami, awariami oraz scenariuszami;
- klasę scenariuszy awaryjnych – powiązaną z zakładami, substancjami awaryjnymi;
- klasę awarii – powiązaną z substancjami, zakładami, scenariuszami awaryjnymi.

Ponadto powstaną ustalone tabele (bazy) słownikowe: rodzaje substancji, typy scenariuszy awaryjnych, rodzaj skutków, typy ryzyka oraz ewentualnie inne w razie potrzeby (np. wykaz województw, powiatów).

Jednym z atrybutów typu scenariusza awaryjnego będzie program wykonywalny (tj. nazwa ze ścieżką dostępu) lub moduł obliczeniowy, za pomocą którego będzie można przeliczyć dany typ scenariusza. Podobnie z typem ryzyka można będzie powiązać algorytm jego wyznaczania tj. moduł obliczeniowy systemu. W razie potrzeby administrator systemu będzie mógł budować nowe klasy. W tym celu należy wykonać następujące czynności:

- zdefiniować atrybuty, które klasa ma zawierać,
- zdefiniować klasę przez podanie jej nazwy oraz określenie które atrybuty ma zawierać.

Następnie uprawniony użytkownik będzie mógł wprowadzać obiekty dla nowo zdefiniowanej klasy. Jeżeli zajdzie konieczność dodania atrybutów do danej klasy, to administrator systemu będzie miał taką możliwość. Oczywiście wtedy, dla obiektów już wcześniej wprowadzonych, nowo zdefiniowane atrybuty nie będą miały żadnych wartości (będą niewypełnione).

Istotnym elementem jest sposób wyszukiwania informacji o obiektach na mapie cyfrowej. Zasadniczo przewidziano następujące możliwości wyszukiwania:

- według nazw obiektu,
- według atrybutów i ich wartości (tutaj możliwe jest zastosowanie operatorów logicznych i matematycznych),
- według substancji lub rodzajów substancji,
- według zakładów,
- według scenariuszy lub typów scenariuszy,
- według identyfikatora obiektu na mapie numerycznej.

Lista ta może zostać rozszerzona w przyszłości, jeśli zajdzie taka konieczność.

7. Sposób prezentacji wyników analiz

Wynikiem analiz ryzyka w obszarze jest prezentacja:

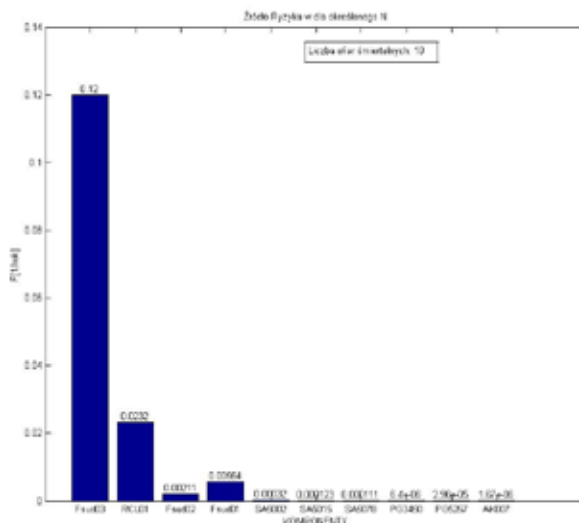
- konturów ryzyka lokalnego lub indywidualnego (rycina 5)



Ryc. 5. Prezentacja konturów ryzyka na mapie cyfrowej

Źródło: Opracowanie własne.

- wartości ryzyka lokalnego w predefiniowanym punkcie obszaru (rycina 6); prezentacja na mapie może dotyczyć wybranych (predefiniowanych) punktów lub być realizowana poprzez interpolację z siatki na obszarze (rycina 7)



Ryc. 6. Wielkość ryzyka w wybranym punkcie

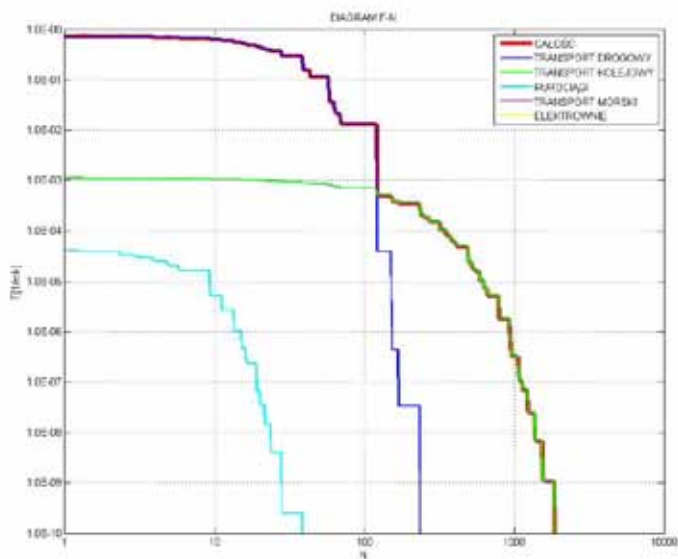
Źródło: Opracowanie własne.



Ryc. 7. Wielkość ryzyka na mapie cyfrowej

Źródło: Opracowanie własne.

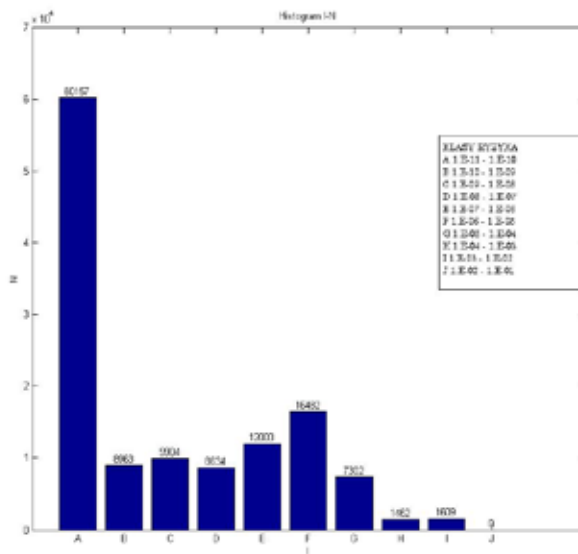
- krzywych F-N dotyczących częstości zdarzeń i ich skutków (rycina 8)



Ryc. 8. Krzywe F-N

Źródło: Opracowanie własne.

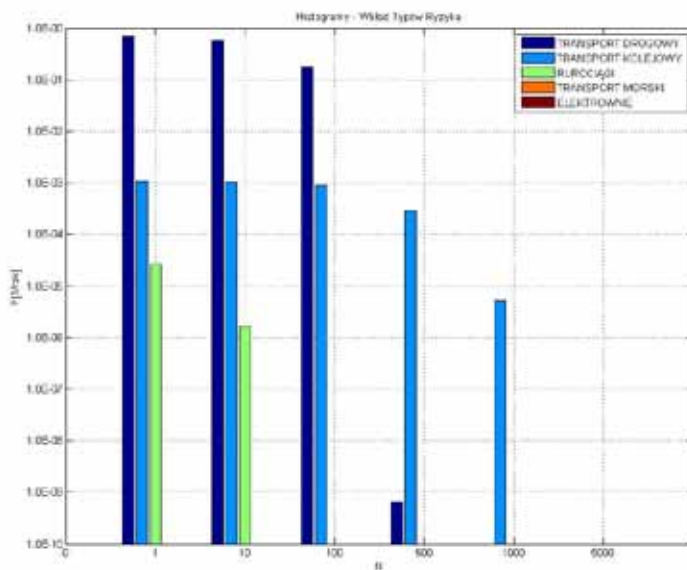
– histogramów I-N (rycina 9)



Ryc. 9. Histogram I-N

Źródło: Opracowanie własne.

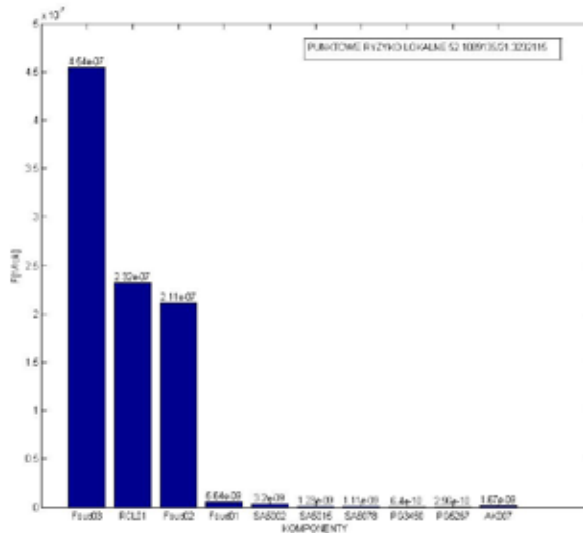
– histogramów wkładu typów ryzyka (rycina 10)



Ryc. 10. Histogram wkładów ryzyka

Źródło: Opracowanie własne.

– częstości dla źródeł ryzyka (rycina 11)



Ryc. 11. Rozkład częstości według źródeł ryzyka

Źródło: Opracowanie własne.

– krzywych potencjalnych szkód tzn. krzywych odpowiadających określonym wielkościom skutków dla danej awarii (rycina 12)



Ryc. 12. Krzywe potencjalnych szkód

Źródło: Opracowanie własne.

8. Algorytm określania potencjalnych skutków poważnych awarii metodyką IAEA

Algorytm określania potencjalnych skutków poważnych awarii składa się z następujących kroków:

1. Określenie rodzaju prowadzonej działalności zakładu według tabeli 2 – w ten sposób uzyskujemy numer referencyjny (w tabeli występują również odniesienia do działalności związanej z transportem, które nie będą wykorzystywane do ocen awarii zakładów, jednak dla kompletności metodyki oraz biorąc pod uwagę możliwe rozszerzenie funkcjonalności opracowywanego systemu, nie zostały one usunięte).
2. Wybór z tabeli 3 (lub tabeli 4 dla rurociągów) – według numeru referencyjnego oraz ilości substancji (lub typu rurociągu) – uzyskujemy grupę skutków.
3. Dla wybranej grupy skutków określenie zasięgu potencjalnych skutków oraz wielkości obszaru skutków (na podstawie tabeli 5).

Ponieważ wielkości skutków wyznaczone są dla przedziałów wielkości substancji, wykonuje się prostą interpolację wielkości promienia zasięgu skutków.

Skutki oraz prawdopodobieństwo wystąpienia poważnej awarii – jako liczbę potencjalnych ofiar wyznacza się według następującego algorytmu:

Oszacowujemy gęstość zaludnienia (ewentualnie korzystając z tabeli 6).

Obliczamy współczynnik f_A – stosunek części zamieszkałej obszaru zagrożonego do całego obszaru zagrożonego w kole o promieniu odpowiadającym maksymalnemu zasięgowi skutków (tabela 7).

Obliczamy współczynnik poprawkowy f_m ze względu na możliwość uniknięcia skutków awarii (tabela 8).

Obliczamy skutki (tj. potencjalną liczbę ofiar), stosując wzór:

$$C_{A,d} = A \times d \times f_A \times f_m$$

gdzie:

- A – powierzchnia zagrożonego obszaru w ha;
- d – gęstość zaludnienia w obszarze zagrożonym;
- f_A i f_m – współczynniki poprawkowe wyznaczone wg wymienionego wyżej algorytmu.

Oszacowujemy prawdopodobieństwo wystąpienia poważnej awarii wg wzoru:

$$N_{i,s} = N_{i,s}^* + n_i + n_f + n_o + n_p$$

gdzie:

- $N_{i,s}^*$ – średnia wartość liczby prawdopodobieństwa (tabela 9);
 n_i – współczynnik poprawkowy ze względu na częstość operacji ładowania/rozładunku (tabela 10);
 n_f – współczynnik poprawkowy ze względu na przyjęte zasady bezpieczeństwa dla substancji palnych (tabela 11);
 n_o – współczynnik poprawkowy ze względu na bezpieczeństwo organizacyjne i zarządzanie (tabela 12);
 n_p – współczynnik poprawkowy ze względu na możliwość wystąpienia wiatru w kierunku obszarów zamieszkałych (tabela 13).

Po obliczeniu $N_{i,s}$ wartość prawdopodobieństwa P awarii można ocenić na podstawie zależności:

$$N_{i,s} = |lg_{10} P|$$

Tabela 2. Rodzaj działalności

Działalność		Najważniejsze substancje	NUMERY REFERENCYJNE (ZOB. TAB. 3)
Magazynowanie paliwa	bazy dostawcze	benzyna	6
	bazy samochodowe	benzyna i skroplony gaz ziemny	7
	składy pośrednie	benzyna	6
		SGZ (skroplony gaz ziemny)	7, 9
	główne magazyny	ropa naftowa	1, 3
		benzyna	4, 6
		SGZ (skroplony gaz ziemny)	7, 9, 10, 11
		gaz ziemny	10, 11
Przetwarzanie i magazynowanie paliwa	różne gazy	różne gazy	13
	rafinerie	SGZ propan	7, 9
	procesy alkylacji	fluorek wodoru	31
	kraking	butylen	7, 9
		etylen	12
		tlenek etylenu	30
		propylen	7, 9
		chlorek winylu	7, 9

Transport paliwa	rurociągi	SGZ, propan	8
		gaz ziemny	12
		ropa naftowa	5
	wewnątrz lądowe szlaki wodne	benzyna	2
		SGZ (pod ciśnieniem)	9
		SGZ (schłodzony)	11
		ropa naftowa	6
		benzyna	3
	koleje/drogi	SGZ	7
		ropa naftowa	6
		benzyna	4
Instalacje chłodnicze	rzeźnia, mleczarnia, browar	amoniak	31
	wytwórnie margaryn, lodów, czekolady	amoniak	31
	chłodnie mięsa, ryb, owoców, kwiatów	amoniak	31
Żywność i stymulatory	przemysł cukierniczy	dwutlenek siarki	31
	produkcja mąki	bromek metylenu	32
	tłoczarnie oleju/tłuszczu	heksan	1, 3
	wytwórnie drożdży, destylarnie spirytusu	ciecze palne	4, 6
	produkcja kakao	heksan	1, 3
Specyficzne produkty podstawowe	przemysł skórzany	kwasy akroleinowe	18, 1
	przemysł drzewny	formaldehyd	32
	przemysł papierniczy	tlenek etylenu	30
		epichlorohydryna	16, 17
	przemysł gumowy	styren	4, 6
		akrylonitryl	18, 1
	przemysł tekstylny	tlenek etylenu	30
		formaldehyd, fenole alkylowe	32
Przemysł metalurgiczny i elektroniczny	wielkie piece	tlenek węgla	31
		amoniak	31
	obróbka powierzchni	arsen	34

ROZDZIAŁ III

Koncepcja informatyczna budowy systemu do wyznaczania ryzyka obszarowego pochodzącego od instalacji przemysłowych

Specyficzne związki chemiczne	nawozy sztuczne	amoniak	31, 36
		produkty spalania	43
	kwask siarkowy	tlenek siarki	45
	żywica syntetyczna	tlenek etylenu	30
		chlor	32
		akrylonitryl	18, 21
		fosgen	33
		formaldehyd	32
	tworzywa sztuczne	chlorek winylu	7, 9
		akrylonitryl	18, 21
		chlor	32
		produkty spalania	46
	farby/pigmenty	fosfen	33
		rozpuszczalniki	4, 6
		produkty spalania	46
	związki chloru, fluoru i węgla (CFC)	chlorek wodoru	40, 42
		chlor	32
		fluorek wodoru	31
	chlor	chlor	32, 37
	chlorek winylu	chlor	32
		chlorek winylu	7, 9
		chlorek wodoru	40, 42
	amoniak	amoniak	31, 36
	chlorek wodoru	chlorek wodoru	40, 42
		chlor	32
	włókna	siarczki węgla	18
		siarczki wodoru	32
	leki/środki farmaceutyczne	chlor	32
		rozpuszczalniki	4,6

(a) zob. aneks;

(b) międzynarodowy kod klasyfikacji stosowany w transporcie substancji;

(c) nierozpuszczalne, ciężar właściwy $\leq 1 \text{ dkg/dm}^3$.

Specyficzne związki chemiczne	polimeryzacja	butylen	7, 9
		etylen	12
		propan	7, 9
		oktan winylu	1, 3
	sztuczne włókna	metanol	1,3
	chloroalkalia	chlor	32
		wodór	12
Środki ochrony roślin	produkcja substancji wyjściowych	fosgen	33
		izocyjaniny	26, 29
		chlor	32
		produkty spalania	43
	produkcja preparatów i magazynowanie	produkty spalania	43
	sprzedaż detaliczna i magazynowanie	produkty spalania	43
		bromki metylu	32
Materiały wybuchowe	produkcja i magazynowanie	różne	14
	magazynowania amunicji	różne	14, 15
Miejsca, urządzenia użyteczności publicznej	magazyny środków ochronnych roślin	chlor	32
		produkty spalania	43
Urządzenia portowe	kontenery	różne	(a)
	zbiorniki	różne	(a)
Transport	rurociągi	chlor	41
		amoniak	40
		tlenek etylenu	40
		chlorek wodoru	41, 42
	droga, kolej (także miejsca rozrządu)	gazy palne: 23, 236, 239 (b)	7
		ciecze palne: 33, 336, 338, 339, 333, x338, x323, x423, 446, 539 (b)	6
		gazy wysokotoksyczne: 26, 265, 266 (b)	32
		gazy średniotoksyczne: 236, 268, 286 (b)	31
		ciecze toksyczne: 336, 66, 663 (b)	19
		materiały wybuchowe: 1.1, 1.5 (b)	14
	woda	gazy palne (pod ciśnieniem) 23, 236, 239 (b)	9
		gazy palne (schłodzone) 23, 236, 239 (b)	11
		ciecze palne: 33, 336, 338, 339, 333, x338, x323, x423, 446, 539 (b)	6
		gazy wysokotoksyczne: 26, 265, 266 (b) (pod ciśnieniem)	32
		gazy wysokotoksyczne 26, 265, 266 (b) (schłodzone)	37
		gazy średniotoksyczne: 236, 268, 286 (b) (pod ciśnieniem)	31
		gazy średniotoksyczne: 236, 268, 286 (b) (schłodzone)	36
		ciecze toksyczne: 336, 66, 663 (b) (c)	20

Tabela 3. Klasyfikacja substancji ze względu na kategorie skutków

Numer referencyjny	Typ substancji	Opis substancji	Działalność
1	Ciecze palne	Ciśnienie pary <0,3 bara przy 20°C	Magazynowanie w zbiornikach podziemnych
2 ^a			Rurociągi
3			Inne
4			
5 ^a		Ciśnienie pary ≥0,3 bara przy 20°C	Magazynowanie w zbiornikach podziemnych
6			Rurociągi
			Inne
7	Gazy palne	Skroplone pod ciśnieniem	Transport drogowy, kolejowy, zbiorniki nadziemne
8 ^a			Rurociągi
9		Skroplony przez schłodzenie	Inne
10			Magazynowanie w zbiornikach podziemnych
11		Pod ciśnieniem	Inne
12 ^a			Zbiorniki cylindryczne (25–100 kg)
13			Rurociągi
14	Substancje wybuchowe	Luzem	
15		W opakowaniach	
16	Ciecze toksyczne	Nisko toksyczne	Magazynowanie w zbiornikach podziemnych
17			Inne
18		Średnio toksyczne	Magazynowanie w zbiornikach podziemnych
19			Transport: drogami,
20			koleją, wodą
21			Inne
22		Silnie toksyczne	Magazynowanie w zbiornikach podziemnych
23			Transport: drogami,
24			koleją, wodą
25			Inne
26		Bardzo silnie toksyczne	Magazynowanie w zbiornikach podziemnych
27			Transport: drogami,
28			koleją, wodą
29			Inne

	Gazy toksyczne	Skroplone pod ciśnieniem:	
30		– nisko toksyczne	
31		– średnio toksyczne	
32		– silnie toksyczne	
33		– bardzo silnie toksyczne	
34		– ekstremalnie toksyczne	
35		Skroplone przez schłodzenie:	
36		– nisko toksyczne	
37		– średnio toksyczne	
38		– silnie toksyczne	
39		– bardzo silnie toksyczne	
40 ^a		– ekstremalnie toksyczne	
41 ^a		W rurociągach:	
42 ^a		– średnio toksyczne	
43		– silnie toksyczne	
44		Pod ciśnieniem >25 barów	
45		– wysoko toksyczne	
46		Toksyczne produkty spalania ⁹⁾	⁹⁾ Z produktów ochrony roślin Z azotowych nawozów sztucznych Z kwasu siarkowego Z tworzyw sztucznych zawierających chlor

Tabela 3. cd.

NR REF.	ILOŚĆ(T)								
	0,2–1	1–5	5–10	10–50	50–200	200–1000	1000–5000	5000–10000	>10000
1	-	-	-	-	-	AI	BI	BI	CI
2 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	-
3	-	-	-	AI	BI	CI	DII	X	X
4	-	-	-	-	-	BI	CII	CII	DII
5 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	-
6	-	-	-	BII	CII	DII	EII	X	X
7	-	AI	BI	CI	DI	EI	X	X	X
8 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	-
9	-	BII	CIII	CIII	DIII	EIII	X	X	X
10	-	-	-	-	-	BI	CII	CII	DII
11	-	-	-	BII	CII	DII	EII	X	X
12 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	-
13	-	-	CIII	CII	CI	CI	X	X	X
14	AI	BI	BI	CI	CI	DI	X	X	X
15	BIII	BIII	CIII	CI	CI	DI	X	X	X

ROZDZIAŁ III

Koncepcja informatyczna budowy systemu do wyznaczania ryzyka obszarowego
pochodzącego od instalacji przemysłowych

16	-	-	-	-	-	AII	AII	BII	CIII
17	-	-	-	AIII	AII	BII	CII	CII	CII
18	-	-	-	AIII	BIII	DIII	EIII	FIII	FIII
19	-	AII	CIII	DIII	X	X	X	X	X
20	-	BII	DIII	EIII	FIII	GIII	X	X	X
21	-	BII	CIII	DIII	EIII	FIII	FIII	X	X
22	-	-	AII	BIII	CIII	EIII	FIII	GIII	GIII
23	BII	CII	DIII	EIII	X	X	X	X	X
24	CII	DII	EIII	FIII	GIII	HIII	X	X	X
25	BII	CII	DIII	EIII	FIII	GIII	GIII	X	X
26	AII	BII	CIII	EIII	FIII	GIII	GIII	HIII	HIII
27	CII	DIII	EIII	FIII	X	X	X	X	X
28	DIII	EIII	FIII	GIII	HIII	HIII	X	X	X
29	CIII	DIII	EIII	FIII	GIII	HIII	HIII	X	X
30	-	-	AII	AI	BII	BI	CIII	CII	X
31	-	-	BII	CII	DIII	EIII	FIII	FIII	X
32	CII	DIII	EIII	EIII	FIII	FIII	GIII	X	X
33	DIII	EIII	FIII	GIII	GIII	GIII	X	X	X
34	EIII	FIII	GIII	HIII	HIII	X	X	X	X
35	-	-	-	AII	AII	BII	BII	BII	CII
36	-	AII	BII	CII	DIII	DIII	DIII	EIII	FIII
37	BII	CII	DIII	EIII	EIII	EIII	FIII	GIII	X
38	DIII	EIII	FIII	FIII	GIII	GIII	X	X	X
39	EIII	FIII	GIII	HIII	HIII	X	X	X	X
40 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	-
41 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	-
42 ^a	-	-	-	-	-	-	-	-	-
43	-	-	-	BII	DIII	EIII	EIII	X	X
44	-	AII	AII	CIII	EIII	FIII	FIII	X	X
45	-	-	BII	AII	CIII	DIII	DIII	X	X
46	-	-	-	AII	CIII	DIII	DIII	X	X

Symbol *X* oznacza kombinację rodzaju i ilości substancji niespotykanej w praktyce.

Tabela 4. Klasyfikacja substancji ze względu na grupy skutków w wypadku podziemnych rurociągów poza obszarem instalacji

NR REFEREN.	TYP SUBSTANCJI	OPIS SUBSTANCJI	ŚREDNICA NAJWIĘKSZEJ CZĘŚCI RUROCIĄGU	GRUPA SKUTKÓW
2	Ciecze palne	Ciśnienie przy 20°C <0,3 bara	>0,2	AI
5		Ciśnienie przy 20°C ≥0,3 bara	0,2–0,4 >0,4	AI BII
8	Gazy palne	Skroplony pod ciśnieniem	<0,1 0,1–0,2 >0,2	CI DI EI
12		Pod ciśnieniem	0,2–1 >1	AI BI
40	Gazy toksyczne	Średnio toksyczny	<0,1 0,1–0,2	EIII FIII
41		Silnie toksyczny	<0,1 0,1–0,2	FIII GIII
42		Ciśnienie >25 barów, silnie toksyczny	<0,02 0,02–0,04 0,04–0,1	DIII EIII FIII

Tabela 5. Kategorie skutków ze względu na największy zasięg i obszar skutków

KATEGORIE ZASIĘGU SKUTKÓW (M)		KATEGORIE OBSZARU SKUTKÓW (HA)		
		I	II	III
A	0–25	0,2	0,1	0,02
B	25–50	0,8	0,4	0,1
C	50–100	3	1,5	0,3
D	100–200	12	6	1
E	200–500	80	40	8
F	500–1000	–	–	30
G	1000–3000	–	–	300
H	3000–10 000	–s	–	1000

Tabela 6. Ocena gęstości zaludnienia

OPIS OBSZARU	TYPOWA GĘSTOŚĆ (OSOBY/HA)
Obszary rolnicze	5
Pojedyncze skupiska domów	10
Wioski i willowe obszary zamieszkania	20
Typowe obszary zamieszkania	40
Ruchliwe obszary zamieszkania	80
Obszary ryzyka, centra zakupowe, centra miast	160

Tabela 7. Współczynnik poprawkowy f_a uwzględniający rozkład głównych obszarów zamieszkania w kole, którego promień odpowiada maksymalnemu zasięgowi skutków

KATEGORIE OBSZARU SKUTKÓW	PROCENT ZALUDNIENIA (%) OBSZARU KRYTYCZNEGO				
	100%	50%	20%	10%	5%
I	1	0,5	0,2	0,1	0,05
II	1	1	0,4	0,2	0,1
III	1	1	1	1	1

Tabela 8. Współczynnik poprawkowy f_m łączenia skutków

SUBSTANCJE (LICZBY REFERENCYJNE)	WARTOŚĆ WSPÓŁCZYNNIKA
Palne (1–12)	1
Palne (13)	0,1
Wybuchowe (14, 15)	1
Ciecze toksyczne (16–29, 43–46)	0,05
Gazy toksyczne (30–34, 40–42)	0,1
Gazy toksyczne (35–39)	0,05

Tabela 9. Średnia wartość prawdopodobieństwa N_{is}^*

SUBSTANCJE (LICZBY REFERENCYJNE)	RODZAJ DZIAŁALNOŚCI	
	MAGAZYNOWANIE	PRZETWARZANIE
Ciecze palne (1–3)	8	7
Ciecze palne (4–6)	7	6
Gazy palne (7)	6	5
Gazy palne (9)	7	6
Gazy palne (10–11)	6	–
Gazy palne (13)	4	–
Materiały wybuchowe (14–15)	7	6
Ciecze toksyczne (16–29)	5	4
Gazy toksyczne (30–34)	6	5
Gazy toksyczne (35–39)	6	–
Gazy toksyczne (42)	5	4
Produkty spalania (43–46)	3	–

Tabela 10. Parametr poprawkowy n_i (częstość operacji ładowania/rozładunku)

CZĘSTOŚĆ OPERACJI ŁADOWANIA/ROZŁADUNKU	WARTOŚĆ WSPÓŁCZYNNIKA
1–10	+0,5
10–50	0
50–200	-1
200–500	-1,5
500–2000	-2

Tabela 11. Parametr poprawkowy n_f dla zabezpieczeń substancji palnych

SUBSTANCJA	ŚRODKI BEZPIECZEŃSTWA	WARTOŚĆ WSPÓŁCZYNNIKA
Gaz palny (7, 13)	System zraszania	0,5
Gaz palny (10)	Podwójna obudowa	1
Gaz palny (13)	Ściana ogniowa	1
	System zraszania	0,5
	5–50 zbiorników cylindrycznych	1
	50–500 zbiorników cylindrycznych	0
	> 500 zbiorników cylindrycznych	-1

Tabela 12. Parametr poprawkowy n_o bezpieczeństwa organizacyjnego i zarządzania

ŚRODKI ORGANIZACYJNE	WARTOŚĆ WSPÓŁCZYNNIKA
Warunki lepsze niż przeciętne	0,5
Przeciętne warunki	0
Warunki poniżej przeciętnych	-0,5
Warunki słabe	-1
Brak	-1,5

Tabela 13. Współczynnik poprawkowy n_p ze względu na możliwość wystąpienia wiatru w kierunku obszarów zamieszkałych

KATEGORIE OBSZARU SKUTKÓW	ZAMIESZKAŁA CZĘŚĆ OBSZARU W %				
	100%	50%	20%	10%	5%
I	0	0	0	0	0
II	0	+0,5	+0,5	+0,5	+0,5
III	0	+0,5	+0,5	+1	+1,5

Aneks. Wykaz substancji

Poniższe zestawienie zawiera wykaz substancji pogrupowanych według typów z podaniem numerów referencyjnych odpowiadających tabelom 2 i 3 – podstawowym dla określenia skutków.

NUMER REFERENCYJNY	TYP SUBSTANCJI	SUBSTANCJE (PRZYKŁADY)
1–3	Ciecze palne <0,3 bara przy 20°C Temperatura zapłonu > 20°C	alkohol allilowy
		anilina
		benzaldehyd
		chlorek benzylu
		butanol
		diglicolbutylowy
		dichlorobenzen
		dichloropropen
		olejnapędowy
		węglandietylu
		dimetyloformamid
		etanoloamina
		octan etyloglikolu
		krzemian etylu
		chlorohydrin etylenu
		glikol etylenowy
		olej opałowy
		furfural
		metanolfurylu
		alkohol izoamylowy
		izobutanol
		izopropanol
		keton metylobutyłu
		glikol metylowy
		octan glikolu metylowego
		naftalen
		nitrobenzen
		fenol
		styren
		trioksan
		ksylen
1–3	Ciecze palne <0,3 bara przy 20°C	acetal

NUMER REFERENCYJNY	TYP SUBSTANCJI	SUBSTANCJE (PRZYKŁADY)
	Temperatura zapłonu < 20°C	acetaldehyd
		aceton
		acetonitryl
		benzen
		chlorekbenzylu
		butanol
		butanon
		chlorekbutylu
		cycloheksan
		dichloroetan
		dichloropropan
		dietyloamina
		keton dietylu
		węglan dimetylu
		dimetylocycloheksan
		etanol
		octan etylu
		akrylan etylu
		etylobenzen
		etyl
		heptan
		heksan
		octan izobutylu
		eter izopropylowy
		metanol
		octan metylu
		metylocycloheksan
		keton izobutylowo metylowy
		metakrylan metylu
		keton winylowo metylowy
		oktan
		piperydyna
		octan propylu
		pirydyna
		toluen
		trietylamina

ROZDZIAŁ III

Koncepcja informatyczna budowy systemu do wyznaczania ryzyka obszarowego pochodzącego od instalacji przemysłowych

NUMER REFERENCYJNY	TYP SUBSTANCJI	SUBSTANCJE (PRZYKŁADY)
4–6	Ciecze palne >0,3 bara przy 20°C	octan winylu
		propionian metylu
		disiarczek węgla
		kolodionowy roztwór
		cyclopentan
		eterdietylowy
		bromeketylu
		izopropene
		alkohol izopropylowy
		mrówczan metylu
		nafta
		pentan
		benzyna
		propanol (alkohol propylowy)
		tlenek propylenu
7–9	Gazy palne	buta-1,3-dien
		butan
		buten
		cyklopropan
		difluoroetan
		eter dimetylowy
		etan
		chlorek etylu
		izobutan
		izobutylen
		naturalny gaz płynny (propan-butan)
		eter metylowy
		propadien
		propan
		propylen
10, 11	Gazy palne	eten
		metan
		(zob. numery 7–9).
12	Gazy palne pod ciśnieniem	acetylen metylu
		skroplony gaz ziemny
		etylen
		wodór

NUMER REFERENCYJNY	TYP SUBSTANCJI	SUBSTANCJE (PRZYKŁADY)
		metan
		acetylen metylu
		skroplony gaz ziemny
13	Gazy palne w butlach	acetylen
		butan
		wodór
		naturalny gaz płynny (propan-butan)
		propan
14, 15	Wybuchowe	azotan amoniaku (nawóz typu A1)
		amunicja
		nitrogliceryna
		organiczne nadtlenki (typu B)
		TNT
16, 17	Ciecze nisko toksyczne	chlorek acetylu
		alliloamina
		bromek allilu
		chlorek allilu
		chloropikryna
		eter dichlorodietylowy
		dimetylohydrazyna
		siarczek dimetylu
		epichlorohydryna
		etanotiol
		izocyjanek etylu
		etylotrichlorosilan
		pentakarbonyl żelaza
		izopropylamina
		metakroleina
		hydrazyna metylu
		tetralenekosmium
		perchlorometylotiol
		tlenochlorek fosforu
		trichlorek fosforu
		chlorek siarczyny
		czteroetylenek ołowiu
		czterometylek ołowiu

ROZDZIAŁ III

Koncepcja informatyczna budowy systemu do wyznaczania ryzyka obszarowego
pochodzącego od instalacji przemysłowych

NUMER REFERENCYJNY	TYP SUBSTANCJI	SUBSTANCJE (PRZYKŁADY)
18–21	Ciecze średnio toksyczne	trichlorosilan
		chlorek winylidenu
		akroleina
		akrylonitril
		brom
		siarczek węgla
		aldehyd chloro octowy
		eter chloro metylowy
		bromek cyjanu
		dimetylodichlorosilan
		etylenoimina
		izobutyloamina
		metylodichlorosilan
		jodek metylu
		metylotrichlorosilan
		kwas azotowy (dymiący)
		oleum (dymiący kwas siarkowy)
22, 25	Ciecze silnie toksyczne	pentaboran
		propylenoimina
		tlenek propylenu
		tetrachlorek cyny
		cyjanek wodoru
26, 29	Ciecze bardzo silnie toksyczne	ditlenek azotu
		tritlenek siarki
		tetra-butyloamina
		izocyjanek metylu
		karbonyl niklu
30, 35	Gazy nisko toksyczne	pentafluorek siarki
		etyloamina
		tlenek etylenu
31, 36, 40	Gazy średnietoksyczne	chlorek winylu
		amoniak
		trifluorek boronu
		tlenek węgla
		trifluorek chloru
		dimetyloamina

NUMER REFERENCYJNY	TYP SUBSTANCJI	SUBSTANCJE (PRZYKŁADY)
		fluoro wodór
		trifluorek azotu
		silan
		ditlenek siarki
		trimetyloamina
		bromek winylu
32, 37, 41, 42	Gazy silnie toksyczne	trichlorek boronu
		siarczek karbonylu
		chlor
		ditlenekchloru
		dichloroacetylen
		formaldehyd
		heksafluoroaceton
		bromo wodór
		chloro wodór
		siarko wodór
		bromek metylu
		chlerek metylu
		tlenek azotu
		tetrafluorek krzemu
		fluorek siarki
		czterowodorek cyny
33, 38	Gazy bardzo silnie toksyczne	boroetan
		chlerek karbonylu
		fluorek karbonylu
		cyjan
		eterdimetylowy
		fluor
		keten
		difluorektlenu
		fosgen
		fosforowodór
		stibin
		tetrafluorek siarki
		heksafluorekteluru
34, 39	Gazy ekstremalnie toksyczne	arsen

ROZDZIAŁ III

Koncepcja informatyczna budowy systemu do wyznaczania ryzyka obszarowego pochodzącego od instalacji przemysłowych

NUMER REFERENCYJNY	TYP SUBSTANCJI	SUBSTANCJE (PRZYKŁADY)
		selenowodór
		selen
		heksafluorek selenu

Kolejne tabele pozwalają określić toksyczność dla substancji niewymienionych w powyższej tabeli, przy zastosowaniu następujących generalnych zasad:
 jeśli ciśnienie pary < 1 bara przy 20°C, substancja jest traktowana jako ciecz;
 jeśli ciśnienie pary > 1 bara przy 20°C, substancja jest traktowana jako gaz;
 zsumuj wartości parametrów (a) i (b) otrzymanych na podstawie wartości LC₅₀ dla danej substancji oraz własności fizycznych według poniższych tabel.

1. Wyznaczenie wartości parametru (a)

LC ₅₀ 4H W PPM	WYZNACZENIE WARTOŚCI PARAMETRU (a)
0,01–0,1	–
0,1–1	–
1–10	6
10–100	5
100–1000	4
1000–10 000	3
10 000–100 000	2

2. Wyznaczenie wartości parametru (b)

WŁAŚCIWOŚCI FIZYCZNE		WYZNACZENIE WARTOŚCI PARAMETRU (b)
ciecze 20°C	< 0,05 bar	1
ciśnienie	0 0,5 0 3 bar	2
	0,3–1 bar	3
kompresowane gazy płynne	> 265 K	3
punkt wrzenia	< 265 K	4
schłodzone gazy płynne	> 245 K	3
punkt wrzenia	< 245 K	4

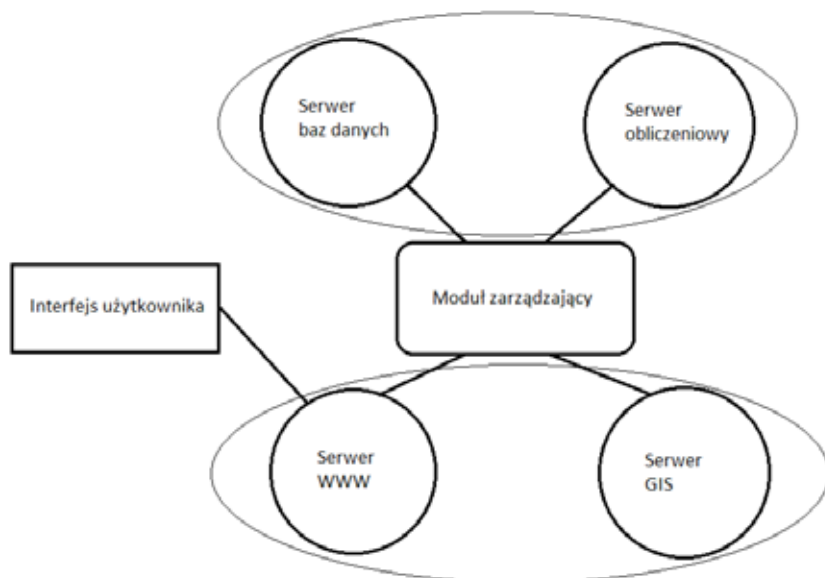
3. Określenie toksyczności

SUMA (a) + (b)	KLASA TOKSYCZNOŚCI
6	nisko
7	średnio
8	silnie
9	bardzo silnie
10	ekstremalnie

Podsumowanie i wnioski

System może być zaimplementowany na wiele sposobów. Generalną koncepcję przedstawia rycina 13. Bazuje ona na modelu klient – serwer z modułem zarządzającym, którego zadaniem jest sterowanie wykonywanymi opercjami w systemie. Zakłada się, że interfejs z użytkownikiem będzie oparty na przeglądarce – poprzez serwer WWW. Serwer ten może mieć bezpośrednio wbudowane mechanizmy obsługi operacji na mapach cyfrowych. Możliwe jest też rozwiązanie z odseparowanym serwerem mapowym. Podobnie serwer zawierający moduły obliczeniowe może mieć bezpośrednie połączenie z bazami danych lub być zupełnie niezależny. W ogólności można założyć, że każdy z serwerów funkcjonuje niezależnie, a cała komunikacja odbywa się poprzez moduł zarządzający. Dopuszczalne są także rozwiązania hybrydowe, gdzie część wybranych serwerów komunikuje się bezpośrednio.

Technicznie serwery mogą być ulokowane na jednym lub kilku serwerach fizycznych. W szczególności serwer obliczeniowy sam może pełnić rolę klastra obliczeniowego, aczkolwiek rozwiązanie takie, zdaniem autorów, nie będzie konieczne. Niemniej jednak projekt systemu powinien uwzględnić możliwość ulokowania każdego z serwerów na oddzielnych maszynach. Ta część powinna być konfigurowalna – administrator systemu mógłby, w zależności od potrzeb, ulokować serwery na odpowiednio silnych maszynach.

**Ryc. 13.** Implementacja systemu**Źródło:** Opracowanie własne.

Jednym z kluczowych elementów tworzonego systemu wyznaczającego wielkości ryzyka dla istniejących lub budowanych instalacji chemicznych są mapy oraz bazy danych obiektów topograficznych. Baza danych obiektów topograficznych GBDOT10k jest obecnie najbardziej wiarygodnym źródłem informacji, z której korzystać mogą instytucje publiczne i podmioty gospodarcze, zainteresowane tworzeniem systemów geoinformacyjnych dla wspomagania i realizacji zadań oraz podejmowania właściwych decyzji.

Zbiory danych GBDOT10k, w rozumieniu krajowej infrastruktury informacji przestrzennej, udostępniać można w formie standardowych usług danych przestrzennych WFS (Web Feature Services). Dane mogą być przekazywane przede wszystkim w postaci plików GML zgodnych ze schematem aplikacyjnym opublikowanym w rozporządzeniu⁸. Schemat aplikacyjny GML GBDOT10k wykorzystuje schemat aplikacyjny GML w wersji 3.2.1 (PN-EN ISO 19136). Oprócz formatu zgodnego z rozporządzeniem możliwe jest zapisywanie danych GBDOT10k w postaci możliwej do odczytania w standardowych aplikacjach GIS, w formatach takich jak ESRI ShapeFile, GeoMedia Warehouse, geobaza personalna ESRI lub w postaci skryptów dla ORACLE Spatial. Dane takie są konwertowane ze struktury GBDOT10k GML na strukturę relacyjnej bazy danych, a następnie zapisy-

⁸ Rozporządzenie Ministra Spraw Wewnętrznych i Administracji z dnia 9 listopada 2011 r. w sprawie standardów technicznych wykonywania geodezyjnych pomiarów sytuacyjnych i wysokościowych oraz opracowywania i przekazywania wyników tych pomiarów do państwowego zasobu geodezyjnego i kartograficznego (Dz.U. 2011 nr 263 poz. 1572).

wane w odpowiednim formacie, w sposób zgodny z modelem relacyjnym. Dane przekazywane w formatach GIS zawierają określony zakres atrybutów, który nie musi być zgodny z zakresem ustalonym w rozporządzeniu⁹. Również wartości atrybutów można dostosować dla potrzeb określonego zamówienia. Informacje w formatach GIS przeznaczone są do wykorzystania jako dane wejściowe do prowadzenia analiz klasy GIS.

Baza danych GBDOT10k zawiera niżej wymienione klasy obiektów:

- sieć wodna,
- sieć komunikacyjna,
- sieć uzbrojenia terenu,
- kompleksy pokrycia terenu,
- budynki, budowle i urządzenia techniczne,
- kompleksy użytkowania terenu,
- inne obiekty przestrzenne,
- tereny chronione,
- jednostki podziału terytorialnego.

System informatyczny wspomagający wykonywanie zaawansowanych analiz ryzyka pochodzącego od instalacji przemysłowych na danym obszarze powinien posiadać możliwość mapowania terenu zakładu przemysłowego, dla którego analiza ryzyka jest wykonywana, łącznie z terenem znajdującym się poza nim. Szczegółowe informacje o rozmieszczeniu instalacji na terenie zakładu pozwolą na precyzyjne określanie scenariuszy awaryjnych oraz ewentualnych wpływów awarii poszczególnych komponentów instalacji na inne jej części, w rezultacie umożliwiając tym samym dogłębną analizę efektu domino. Należy podkreślić, że precyzyjny opis instalacji i substancji w nich się znajdujących wraz z wzajemnym ich położeniem jest kluczowy w prawidłowym oszacowaniu skutków różnych awarii przemysłowych. Z kolei modelowanie konsekwencji wystąpienia poszczególnych awarii wymaga zintegrowania systemu ze zwalidowanymi już w literaturze modelami transportu i dyspersji skażeń, skutków wybuchów oraz pożarów lub zaimplementowania własnych modeli na potrzeby systemu. Natomiast prawidłowe oszacowanie ryzyka związanego z danym typem awarii lub też grup awarii wymaga zaimportowania danych literaturowych o częstościach awarii.

Podsumowując, efektywny informatyczny system wyznaczający obszar ryzyka wokół zakładów przemysłowych powinien łączyć ze sobą szereg informacji: dane o zakładzie i jego otoczeniu powiązane z mapami cyfrowymi, bazy danych umożliwiające oszacowanie prawdopodobieństwa wystąpienia awarii w zakładach oraz szerokie spektrum modeli oceny skutków takich awarii. Wyniki powinny być wizualizowane zarówno na mapach cyfrowych, jak i w postaci dodatkowych wykresów prezentujących wielkości ryzyka i jego składowe.

⁹ Tamże.

Literatura

ARIPAR 5.0: Getting Started Manual, S. Contini, L. Fabbri (red.), EUR 24963 EN Joint Research Centre – Institute for the Protection and Security of the Citizen, Publications Office of the European Union, Luxembourg 2011.

Cox A. W., Lees F. P., Ang M. L., *Classification of Hazardous Locations*, Institution of Chemical Engineers, Totton, Hampshire 2000.

Guidelines for integrated risk assessment and management in large industrial areas TECDOC-994, International Atomic Energy Agency, Vienna 1998.

International Association of Oil & Gas Producers, *Process Release Frequencies*, London 2010.

Rozporządzenie Ministra Spraw Wewnętrznych i Administracji z dnia 9 listopada 2011 r. w sprawie standardów technicznych wykonywania geodezyjnych pomiarów sytuacyjnych i wysokościowych oraz opracowywania i przekazywania wyników tych pomiarów do państwowego zasobu geodezyjnego i kartograficznego (Dz.U. 2011 nr 263 poz. 1572).

U.S. Environmental Protection Agency, CAMEO (Computer-Aided Management of Emergency Operations), <https://www.epa.gov/cameo> [dostęp: 15.07.2018].

U.S. Nuclear Regulatory Commission: *Industry-Average Performance for Components and Initiating Events at U.S. Commercial Nuclear Power Plants*, 2007.

ROZDZIAŁ IV.

**PROGRAM DO OCENY RYZYKA
WYSTĄPIENIA AWARII
W OBIEKTACH PRZEMYSŁOWYCH
– ZAŁOŻENIA PROJEKTU SYSTEMU
A PRAKTYCZNE ZASTOSOWANIE**

Bartłomiej Połeć, Jarosław Tępiński

*Centrum Naukowo-Badawcze Ochrony Przeciwpóżarowej
im. Józefa Tuliszkowskiego – Państwowy Instytut Badawczy*

Wprowadzenie

Zgodnie z art. 248 ust. 1 ustawy – Prawo ochrony środowiska¹ zakłady stwarzające zagrożenie wystąpienia poważnej awarii przemysłowej, w zależności od rodzaju, kategorii i ilości znajdującej się w nich substancji niebezpiecznej, uznaje się za zakłady o zwiększonym ryzyku wystąpienia awarii (ZZR) albo o dużym ryzyku wystąpienia awarii (ZDR). Do zakładu, w którym przewiduje się możliwość magazynowania substancji niebezpiecznej lub jej powstania w trakcie procesu przemysłowego, powyższy przepis stosuje się w zależności od przewidywanej ilości substancji niebezpiecznej mogącej się w nim znaleźć.

Kryteria zaliczenia zakładu do jednej z wymienionych kategorii (ZZR lub ZDR) określone są w rozporządzeniu Ministra Gospodarki z dnia 9 kwietnia 2002 r. w sprawie rodzajów i ilości substancji niebezpiecznych². Każdy, kto zamierza prowadzić lub prowadzi zakład stwarzający zagrożenie poważną awarią przemysłową (ZZR lub ZDR), jest obowiązany do zapewnienia, aby zakład ten był zaprojektowany, wykonany, prowadzony, a także likwidowany w sposób zapobiegający awariom przemysłowym, a w razie ich wystąpienia – do podjęcia działań ograniczających skutki dla ludzi i środowiska. Prowadzący zakład o zwiększonym ryzyku lub o dużym ryzyku jest zobligowany do zgłoszenia podmiotu właściwym organom Państwowej Straży Pożarnej. To ostatnie postanowienie ustawy, nakładając obowiązek zgłoszenia ZZR lub ZDR na prowadzącego, jednoznacznie wymaga od niego wiedzy o tym, czy dany obiekt stwarza zagrożenie awarią. Innymi słowy prowadzący zakład ma obowiązek sprawdzenia, czy w jego zakładzie znajdują się obiekty ZZR lub ZDR.

Procedura identyfikacji ZZR oraz ZDR powinna być wykonana we wszystkich obiektach stacjonarnych, w których – w znaczących ilościach – znajdują się lub mogą powstać w razie utraty kontroli nad procesem (instalacją) niebezpieczne substancje chemiczne ujęte w kryteriach kwalifikacyjnych we wskazanym rozporządzeniu. Przez określenie „znaczące ilości” należy rozumieć ilości większe od lub zbliżone do wartości progowych, a także ilości nieprzekraczające odpowiednich wartości progowych, kwalifikujące dany obiekt do kategorii ZZR lub ZDR. Ilości substancji niebezpiecznych, których obecność w zakładzie powoduje zaliczenie go do zakładu o zwiększonym ryzyku ZZR lub zakładu o dużym ryzyku ZDR, należy odnosić zarówno do warunków normalnej pracy zakładu, jak

¹ Ustawa z dnia 27 kwietnia 2001 r. Prawo ochrony środowiska (Dz.U. 2001 nr 62, poz. 627, z późn. zm.).

² Rozporządzenie Ministra Gospodarki z dnia 9 kwietnia 2002 r. w sprawie rodzajów i ilości substancji niebezpiecznych, których znajdowanie się w zakładzie decyduje o zaliczeniu go do zakładu o zwiększonym ryzyku albo zakładu o dużym ryzyku wystąpienia poważnej awarii przemysłowej, (Dz.U. 2002 nr 58, poz. 535).

i takich, w których przewiduje się możliwość wystąpienia substancji niebezpiecznej (np. w czasie awarii przemysłowej – wycieku, wybuchu, ulotnienia się konkretnej substancji). Powinno się przy tym rozpatrywać maksymalne ilości substancji niebezpiecznych, jakie mogą wystąpić w zakładzie. Substancje niebezpieczne, obecne w wydzielonych miejscach zakładu w ilościach nieprzekraczających 2% podanych wartości progowych, nie powinny być uwzględniane przy obliczaniu ilości całkowitej, jeżeli ich lokalizacja w zakładzie zapewnia, że nie staną się przyczyną poważnej awarii w jakimkolwiek miejscu zakładu.

W związku z wprowadzeniem do stosowania w Polsce dyrektywy Seveso III³ organy administracji, w tym służby oraz inspekcje biorące udział w procesie budowlanym zaczęły kłaść szczególny nacisk na zwiększenie bezpieczeństwa w zakresie zagadnień związanych z zagospodarowaniem przestrzennym, w tym w szczególności rozmieszczeniem na terenie kraju zakładów przemysłowych określanych mianem zakładów o zwiększonym ryzyku lub zakładów o dużym ryzyku.

Analiza problemów występujących w tym obszarze działalności organów administracji publicznej, jak również ich zapotrzebowania na rozwiązania technologiczne wspomagające nadzorowanie bezpieczeństwa, ukierunkowały grupę naukowców i praktyków na koncepcję badań mających na celu opracowanie narzędzia informatycznego pozwalającego na skuteczną identyfikację zakładów stwarzających ryzyko poza swoim terenem oraz wykonywanie operatów bezpiecznych odległości.

³ Zob.: art. 13 dyrektywy Parlamentu Europejskiego i Rady 2012/18/UE z 4 lipca 2012 r. w sprawie kontroli zagrożeń poważnymi awariami związanymi z substancjami niebezpiecznymi.

1. Projekt Evaris

W 2015 roku w ramach Konkursu Nr 7/2015 na wykonanie i finansowanie projektów w zakresie badań naukowych lub prac rozwojowych na rzecz obronności i bezpieczeństwa państwa uzyskano środki finansowe z Narodowego Centrum Badań i Rozwoju na realizację projektu pt. „Program do oceny ryzyka wystąpienia awarii w obiektach przemysłowych stwarzających zagrożenie poza swoim terenem” (akronim projektu: EVARIS).



Ryc. 1. Logo projektu EVARIS

Projekt prowadzony jest przez konsorcjum naukowo-przemysłowe: Centrum Naukowo-Badawcze Ochrony Przeciwpowodziowej – Państwowy Instytut Badawczy (lider projektu) we współpracy z Narodowym Centrum Badań Jądrowych, Wydziałem Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Warszawskiej oraz BERA Systems Sp. z o. o.

Głównym celem projektu EVARIS jest opracowanie programu do oceny ryzyka w zakładach stwarzających zagrożenie poza swoim terenem. Zaplanowano, iż cel ten zostanie osiągnięty przy wykorzystaniu metod analizy ryzyka, przebiegów scenariuszy awaryjnych oraz ocen potencjalnych skutków awarii przemysłowych, a także szeregu badań. Obejmują one m.in.:

- analizy i utworzenie metod identyfikacji obiektów przemysłowych stwarzających zagrożenie poza swoim terenem tj. zakładów niezakwalifikowanych do grupy zakładów o zwiększonym lub dużym ryzyku wystąpienia poważnej awarii przemysłowej w oparciu o dane ilościowe, a także wskazanie użytecznych parametrów oceny skutków;
- opracowanie założeń do utworzenia reprezentatywnych scenariuszy awaryjnych powiązanych ze zdefiniowaną infrastrukturą przemysłową;
- wypracowanie modeli numerycznych pozwalających ocenić skalę skutków uwolnień substancji niebezpiecznych;
- opracowanie baz danych zawierających:
 - krajową mapę zagrożeń wskazującą zakłady stwarzające zagrożenie poza swoim terenem,
 - scenariusze awaryjne i reprezentatywne scenariusze awaryjne, charakterystyczne dla tych zakładów,
 - wartości prawdopodobieństw wystąpienia zdarzeń awaryjnych,

- skutki oddziaływania promieniowania cieplnego, nadciśnienia i toksyczności dla zadanych wartości progowych;
- wypracowanie rekomendacji prawnych dotyczących zagospodarowania przestrzennego⁴.

Rezultatem prowadzonych prac będzie przede wszystkim opracowanie i wdrożenie narzędzia informatycznego oraz stworzenie modeli mających praktyczne zastosowanie w planowaniu zagospodarowania przestrzennego w kontekście zachowania tzw. „bezpiecznych odległości” obiektów przemysłowych w stosunku do otaczających je obiektów i terenów. Kolejnym znaczącym efektem projektu będzie ujednolicenie kryteriów kwalifikacji zakładów podprogowych przez służby kontrolne działające w obszarze bezpieczeństwa w przemyśle. A ponadto: efektywniejsza koordynacja czynności kontrolnych prowadzonych przez służby, ujednolicenie zakresów kontroli, poprawa bezpieczeństwa w zakładach, wczesna identyfikacja i ocena zagrożeń *in situ*, usprawnienie prowadzenia działań ratowniczo-gaśniczych, planowania ewakuacji z odpowiednim wyprzedzeniem oraz oceny zagrożeń dla środowiska. Wypracowane efekty projektu mają zostać skierowane do: Państwowej Straży Pożarnej, Państwowej Inspekcji Pracy, Wojewódzkich Inspektoratów Ochrony Środowiska, administracji właściwej w kwestiach planowania i zagospodarowania przestrzennego.

Ponadto na podstawie uzyskanych wyników, w celu zapewnienia zastosowania danych wynikowych w działalności Państwowej Straży Pożarnej oraz organów podejmujących decyzje o rodzaju zagospodarowania przestrzennego, w oparciu o zdefiniowane założenia utworzone zostaną rekomendacje prawne dotyczące zagospodarowania przestrzennego w kontekście zakładów przemysłowych⁵.

2. Oprogramowanie RAT-if

Program do oceny ryzyka wystąpienia awarii w obiektach przemysłowych stwarzających zagrożenie poza swoim terenem „RAT-if” (**Risk Assessment Toolbox – industrial facilities**) jest zaawansowanym narzędziem informatycznym działającym w oparciu o tzw. „chmurę obliczeniową”.



Ryc. 2. Logo oprogramowania RAT-if

⁴ Wniosek nr DOB-BIO7/09/03/2015 o finansowanie wykonania projektu realizowanego na rzecz obronności i bezpieczeństwa państwa.

⁵ Tamże.

Jak dotąd w Polsce nie powstało narzędzie, które pozwoliłoby na identyfikację zakładów stwarzających ryzyko poza swoim terenem, podanie ryzyka wystąpienia w tym zakładzie zdarzeń awaryjnych i określenie bezpiecznej odległości obiektów i terenów od zakładu. Założenia do specyfikacji oprogramowania informatycznego wraz z architekturą IT oparte zostały na istniejących modelach matematycznych i programach inżynierskich. Jednak otwartość systemu z możliwością nie tylko dodawania nowych elementów, ale również zmiany struktury systemu, oczywiście w pewnych określonych ramach stanowi podstawowe zagrożenie.

Oprogramowanie w znacznej mierze oparto na definiowaniu klas poprzez określanie atrybutów przy zachowaniu wszelkich reguł podejścia obiektowego, jak np. możliwość zdefiniowania nowej klasy poprzez wprowadzenie dodatkowych atrybutów dla klas istniejących. Oznacza to, że w momencie tworzenia obiektu określonej klasy automatycznie dziedziczone są wszystkie atrybuty do niej przypisane. W definicji atrybutu należy podać typ wartości, który z kolei będzie mógł przybierać różne formy z wyłączeniem standardowych typów, jak numeryczne czy tekstowe, również adresy dokumentów HTML oraz typy specjalne. Implementacja opracowanych komponentów do prototypu oprogramowania obejmuje swoim zakresem modele matematyczne, które – w konsekwencji przeprowadzonych na nich obliczeń – pozwalają na ocenę ryzyka wystąpienia awarii w obiektach przemysłowych stwarzających zagrożenie poza swoim terenem.

Istotną rolę w systemie odgrywają obiekty geograficzne oraz inne informacje związane z mapą numeryczną. Obiekty pogrupowane są na wektorowej mapie numerycznej w warstwy. Warstwy te w zasadzie odpowiadają klasom. Wsparciem użytkownika będą wbudowane bazy danych zawarte w raporcie technicznym pt. „Baza zakładów o dużym ryzyku i zwiększonym ryzyku wystąpienia poważnej awarii przemysłowych, Baza zakładów podprogowych stwarzających zagrożenie poza swoim terenem”.

Baza danych zawiera:

- krajową mapę zagrożeń wskazującą zakłady stwarzające zagrożenie poza swoim terenem;
- scenariusze awaryjne i reprezentatywne scenariusze awaryjne, charakterystyczne dla tych zakładów;
- wartości prawdopodobieństw wystąpienia zdarzeń awaryjnych;
- skutki oddziaływania promieniowania cieplnego, nadciśnienia i toksyczności dla zadanych wartości progowych.

Poprzez czytelny interfejs narzędzie umożliwi wprowadzenie danych niezbędnych do dokonania obliczeń. Istotną rolę w systemie odgrywają obiekty geograficzne i inne informacje związane z mapą numeryczną. Uwzględniono również aktualizację baz danych: substancji niebezpiecznych, historycznych awarii, scenariuszy awaryjnych, prawdopodobieństw oraz skutków.

Do opracowanego prototypu nowej aplikacji RAT-if zaimplementowane zostały wybrane metody numeryczne rozprzestrzeniania się skażeń w glebie, od-

działywania skażeń w środowisku wodnym, warunków progowych zanieczyszczeń środowiska wodnego i utworzone bazy danych, pozwalające maksymalnie usprawnić proces przeprowadzania analiz ryzyka. W tym celu do oprogramowania zaimplementowano przygotowywane listy modułów, obiektów oraz ich funkcjonalności. Opracowywano pełen model obiektowy opierający się na wykorzystaniu następujących warstw:

- abstrakcyjnej – klasy obiektów zakładów, substancji, itp.;
- przestrzennej – klasy obiektów przestrzennych na mapie cyfrowej;
- symulacyjnej – klasy obiektów programów obliczeniowych;
- danych modelu – klasa interfejsów między programami obliczeniowymi a warstwą przestrzenną;
- warstwy 3D – klasa specjalna dedykowana do przechowywania trójwymiarowych modeli zakładów w zależności od ich dostępności.

Przygotowano zestaw szczegółowych interfejsów użytkownika do zaimplementowania w systemie RAT-if, obejmujący następujące elementy:

- wprowadzanie i edycję rekordów do baz danych systemu: zakładów, substancji w zakładach, rodzajów instalacji, różnych typów awarii i scenariuszy awaryjnych;
- interfejsy do wykorzystywanych baz danych: awarii historycznych, informacji o częstościach awarii i różnych komponentów instalacji;
- interfejsy do modeli obliczeniowych, wprowadzanie informacji o źródle uwolnienia substancji niebezpiecznych oraz danych meteorologicznych;
- sposób wykorzystania systemu informacji przestrzennej (GIS) w systemie RAT-if i powiązanie obiektów geograficznych z bazami danych systemu;
- wybór analizy do przeprowadzenia, sposób wizualizacji wyników, przygotowanie raportów.

Zaimplementowano podstawową ścieżkę przebiegu analizy ryzyka na danym obszarze. Ma ona ułatwić użytkownikowi wykonanie analizy ryzyka. Opracowano także modele mające praktyczne zastosowanie w planowaniu zagospodarowania przestrzennego w kontekście zachowania tzw. „bezpiecznych odległości” obiektów przemysłowych w stosunku do otaczających obiektów i terenów. Założono instalację oprogramowania informatycznego w głównej jednostce centralnej, zaś dostęp do możliwości obliczeniowych i wizualizacyjnych będzie możliwy poprzez dedykowany interfejs użytkownika za pomocą aplikacji internetowej. Oznacza to, iż zbiory bazodanowe i proces obliczeniowy będzie odbywał się w tzw. „chmurze obliczeniowej” z poziomu użytkownika zalogowanego do przeglądarki internetowej.

RAT-if będzie potrafił wyznaczyć strefy zagrożeń w wyniku uwolnień substancji niebezpiecznych, wybuchów i pożarów. Umożliwi pozyskiwanie aktualnych danych oraz prezentację danych wynikowych – w tym w systemie GIS (warstwy mapowe) – zasobów hydro-meteorologicznych, danych archiwalnych i danych obszarowych. Oprogramowanie umożliwi przeprowadzenie pełnej analizy i oceny poziomu ryzyka wystąpienia danego zdarzenia awaryjnego z uwzględnieniem

danych wejściowych, wyjściowych, a także komponentów i bazy danych wykorzystujące zbiory danych⁶.

Wizualna strona oprogramowania

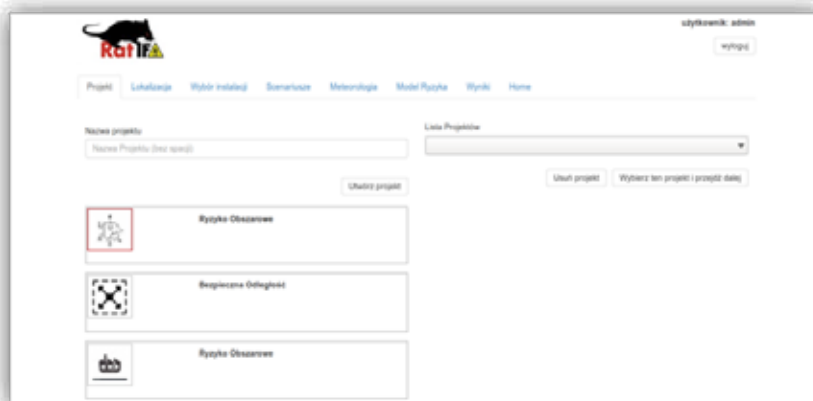
Użytkownik, przed rozpoczęciem pracy nad analizą i oceną poziomu ryzyka wystąpienia danego zdarzenia awaryjnego, ma możliwość wprowadzania danych do baz za pomocą interfejsu użytkownika.

Ryc. 3. RAT-if – ekran przedstawiający pole uzupełniania danych w bazie przedsiębiorstw

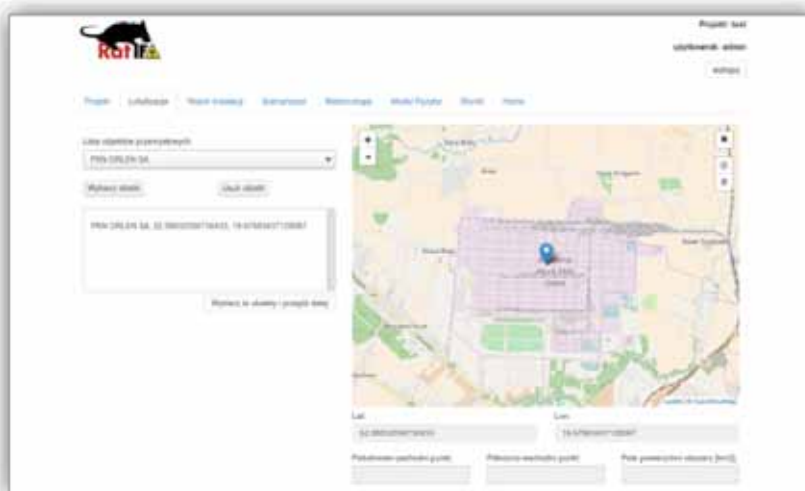
Ryc. 4. RAT-if – ekran przedstawiający pole uzupełniania danych w bazie zdarzeń awaryjnych

⁶ Wniosek nr DOB-BIO7/09/03/2015 o finansowanie wykonania projektu realizowanego na rzecz obronności i bezpieczeństwa państwa.

Użytkownik rozpoczyna pracę od utworzenia nowego projektu lub wybrania już istniejącego, a następnie określa lokalizację poddawanego analizie obiektu, co zostaje zwizualizowane na mapie.

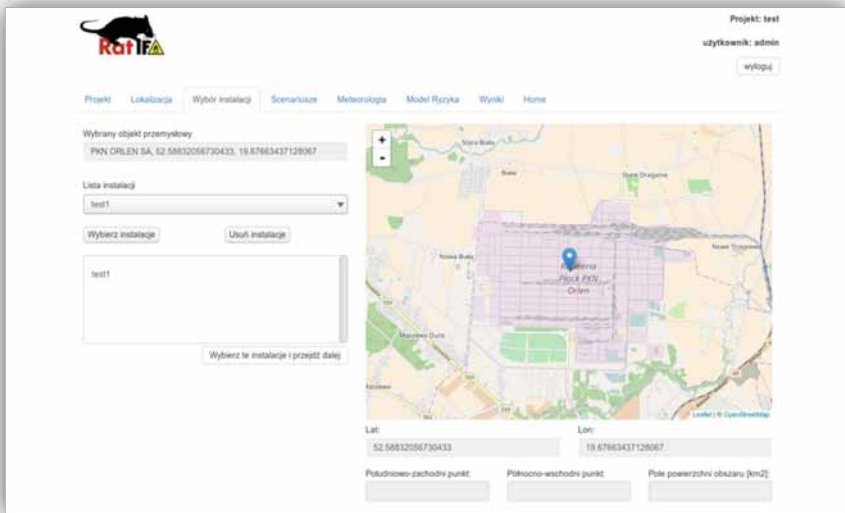


Ryc. 5. RAT-if – ekran wyboru projektu



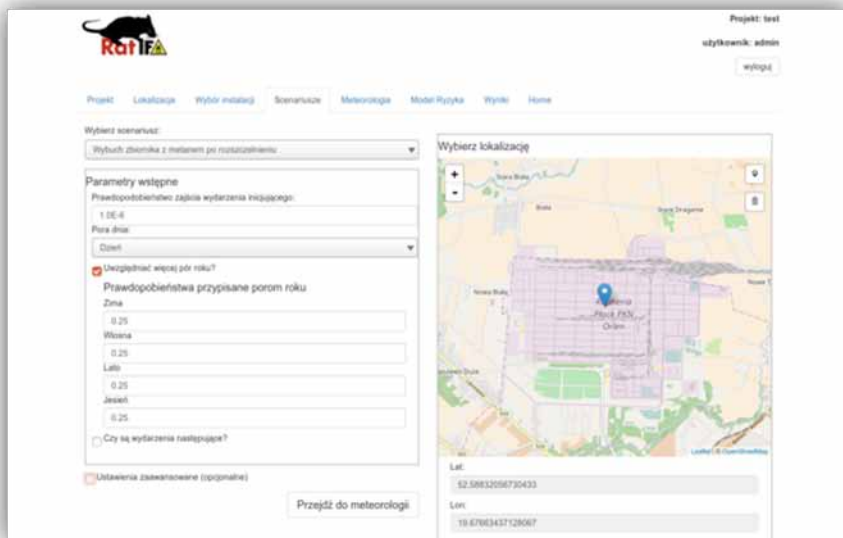
Ryc. 6. RAT-if – ekran przedstawiający moment określenia lokalizacji (obszaru) zakładu

Kolejnym krokiem jest wybór instalacji w zdefiniowanym obiekcie.



Ryc. 7. RAT-if – ekran wyboru rodzaju (typu) instalacji

W następnej kolejności użytkownik przechodzi do określania szczegółowych parametrów definiujących scenariusz, który będzie poddany analizie.

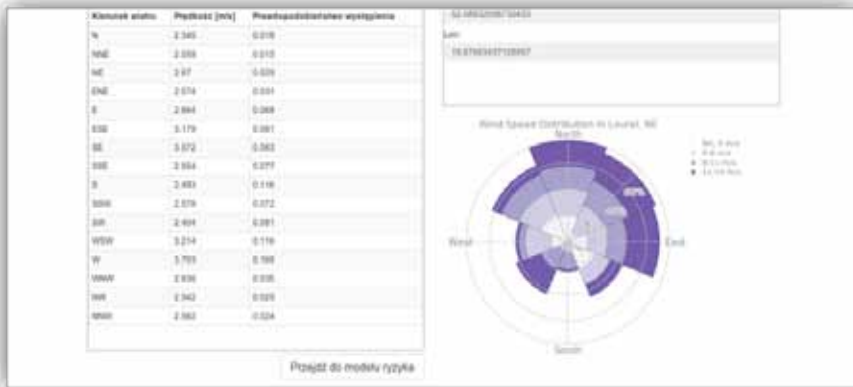


Ryc. 8. RAT-if – ekran wyboru scenariusza awaryjnego i parametrów tego scenariusza – przykład 1

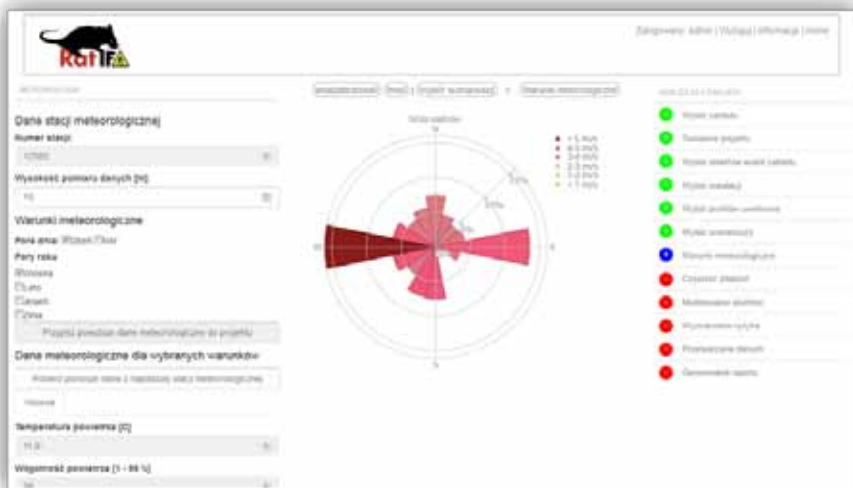
Ryc. 9. RAT-if – ekran wyboru scenariusza awaryjnego i parametrów tego scenariusza – przykład 2

W następnej zakładce użytkownik ma możliwość zdefiniowania szczegółowych parametrów meteorologicznych.

Ryc. 10. RAT-if – ekran wyboru warunków meteorologicznych – przykład 1

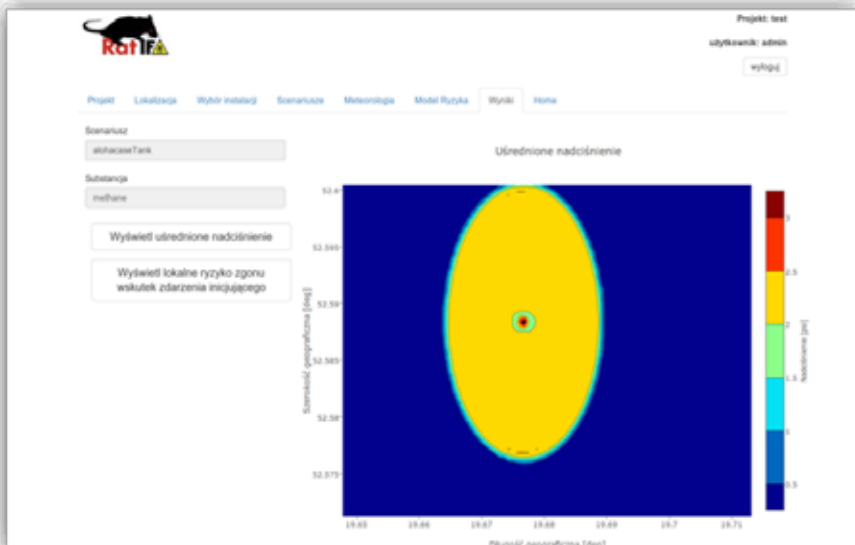


Ryc. 11. RAT-if – ekran wyboru warunków meteorologicznych – przykład 2

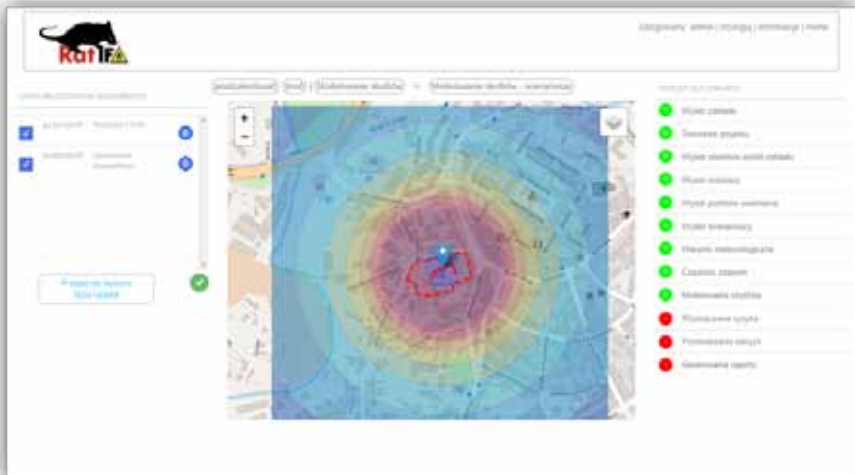


Ryc. 12. RAT-if – ekran wyboru warunków meteorologicznych – przykład 3

Następnie użytkownik może dokonać wyboru modelu ryzyka i rozpocząć obliczenia. Po zakończeniu obliczeń wyświetlane są wyniki w postaci obszarów ryzyka, które obrazują uśrednione wartości nadciśnienia oraz wartości lokalnego ryzyka zgonu.



Ryc. 13. RAT-if – ekran przedstawiający przykładowe obliczenia dla jednego ze scenariuszy na terenie zakładu – przykład 1



Ryc. 14. RAT-if – ekran przedstawiający przykładowe obliczenia dla jednego ze scenariuszy na terenie zakładu – przykład 2D

3. Zastosowanie w praktyce

Jak pokazuje doświadczenie, błędnie wybrana lokalizacja zakładu wprowadza ograniczenia w funkcjonowaniu przedsiębiorstwa, w wykorzystaniu terenów sąsiednich, podwyższa koszty prowadzenia działalności gospodarczej oraz wpływa niekorzystnie na wizerunek firmy. Dlatego oprogramowanie powinno stanowić punkt wyjścia dla polskiego przemysłu w zakresie kontroli ryzyka i zapewnienia bezpieczeństwa na obszarach zagrożonych oddziaływaniem substancji, które mogą zostać uwolnione do otoczenia⁷.

Strategie rozwoju ratownictwa i ochrony przeciwpożarowej dla województw RP uwzględniają m.in. problematykę przygotowania na wypadek działań na terenach, na których dochodzi do zdarzeń chemiczno-ekologicznych, szczególnie w miejscach występowania zakładów dużego i zwiększonego ryzyka. Wdrożenie programu informatycznego podniesie jakość działania Państwowej Straży Pożarnej zarówno w obszarze kontrolno-rozpoznawczym i rozpoznawania zagrożeń, jak też prowadzenia działań ratowniczo-gaśniczych i procesu decyzyjnego z tym związanego. Istnieje również możliwość implementacji wyników w formie mapy zagrożeń do Systemu Wspomagania Decyzji Państwowej Straży Pożarnej, co wprost znajdzie uzasadnienie w planowaniu ćwiczeń jednostek ochrony przeciwpożarowej, a także będzie służyć jako wsparcie informacyjne o obszarach zagrożonych.

Inwestorzy, wnosząc obiekty budowlane (w tym procesowe), kładą coraz większy nacisk na kwestie związane z bezpieczeństwem. Przekłada się to jednocześnie na wyniki działalności gospodarczej oraz sprawia, że firmy krajowe stanowią silną konkurencję dla zachodnich sąsiadów. Konkurencyjność ta niewątpliwie wzrośnie, gdy firmy krajowe będą potrafiły zapewnić kontrolę ryzyka oraz gotowość zarządzania nim, wspartą rzetelną symulacją zachodzących zjawisk fizycznych i chemicznych. Jednocześnie firmy, w zakresie działalności których jest opracowywanie projektów budowlanych, otrzymają narzędzie pozwalające definiować obszary oddziaływania projektowanych obiektów i instalacji na tereny sąsiednie. Będą mogły także ustalać poziom i formy oddziaływania przez istniejące sąsiednie obiekty i instalacje na obiekty i instalacje nowoprojektowane.

Zapotrzebowanie organów administracji publicznej sfery bezpieczeństwa i obronności państwa, praktyki gospodarczej i społecznej na prezentowane narzędzie pozwalające na skuteczną identyfikację zakładów stwarzających ryzyko poza swoim terenem, wykonywanie operatów bezpiecznych odległości, które umożliwia wdrożenie zasad zarządzania ryzykiem już na etapie tworzenia założeń do aktów planistycznych jest oczywiste⁸. Firmy projektujące i inwestorzy nie mają dostępu do rzetelnych informacji o zasięgach oddziaływania i bezpiecznych odległościach od przedsiębiorstw posiadających w swoim obrocie substancje niebez-

⁷ Wniosek nr DOB-BIO7/09/03/2015 o finansowanie wykonania projektu realizowanego na rzecz obronności i bezpieczeństwa państwa.

⁸ Tamże.

pieczne oraz – co ważniejsze – nie mają możliwości walidacji wyników własnych opracowań z wynikami konkretnych symulacji (CFD) lub wynikami badań wykonanych w skali przemysłowej. Powstaje więc luka, którą skutecznie wypełniają zagraniczni producenci. Ten obszar rynkowy charakteryzuje się wysokim potencjałem wzrostu i otwiera pole do działania dla polskich inżynierów.

Wdrożenie programu RAT-if zapewni możliwość jednoznacznej identyfikacji zagrożenia, stwarzanego przez przedsiębiorstwo, co w rezultacie znajdzie odzwierciedlenie w perspektywie poszerzenia prowadzonej działalności przy jednoczesnym zapewnieniu kontroli ryzyka wystąpienia zdarzeń niekorzystnych. RAT-if wypełnia w sposób kompletny postanowienia Dyrektywy Parlamentu Europejskiego i Rady nr 2012/18/UE z dnia 4 lipca 2012 r. (SEVESO III) w zakresie kontroli ryzyka wystąpienia poważnych awarii przemysłowych i uwzględnienia lokalizacji zakładów o dużym ryzyku i zwiększonym ryzyku w procesie planowania przestrzennego. Jednocześnie efekt docelowy projektu zapewni prawidłowe podejście do problematyki ustalania bezpiecznych odległości obiektów i terenów od zakładu, co umożliwi dostosowanie do postanowień, zawartych w akcie wykonawczym do znowelizowanej ustawy Prawo ochrony środowiska⁹, tj. rozporządzeniu w sprawie sposobu ustalania bezpiecznej odległości¹⁰. Doktryna przeciwdziałania poważnym awariom przemysłowym, ujęta w Dyrektywie Europejskiej „SEVESO III”, obliuguje wszystkie państwa członkowskie do kontroli ryzyka wystąpienia takich awarii. Prawodawstwo krajowe zobowiązuje organy właściwe do sporządzania aktów miejscowych do brania pod uwagę oddziaływań zewnętrznych i bezpiecznych odległości od obiektów i instalacji, które – w wyniku pojawienia się określonych zdarzeń inicjujących – mogą generować zagrożenie poza swoim terenem.

Opracowane narzędzie informatyczne znajdzie zastosowanie w procesie decyzyjnym, prowadzącym do ustalania sposobów planowania i zagospodarowania przestrzennego, określania bezpiecznych odległości oraz w procesie decyzyjnym kierujących działaniami ratowniczo-gaśniczymi. Zostanie wykorzystane do ustalania potencjalnych stref zagrożeń wokół zakładów, których przedmiotem działalności jest produkcja, przetwarzanie, magazynowanie, konfekcjonowanie lub sprzedaż substancji niebezpiecznych. Wdrożenie RAT-if pozwoli na uniknięcie lub zmniejszenie zagrożeń związanych z powstaniem awarii przemysłowych, tym samym przełoży się na poprawę bezpieczeństwa na terenach wokół zakładów. Oprogramowanie powinno pomóc w skróceniu czasu przeznaczonego na opracowywanie analiz ryzyka aktów planistycznych¹¹.

⁹ Ustawa z dnia 27 kwietnia 2001 r. Prawo ochrony środowiska (Dz.U. 2001 nr 62, poz. 627, z późn. zm.).

¹⁰ Trwa proces legislacyjny nad wydaniem rozporządzenia.

¹¹ Wniosek nr DOB-BIO7/09/03/2015 o finansowanie wykonania projektu realizowanego na rzecz obronności i bezpieczeństwa państwa.

Podsumowanie i wnioski

Realizacja projektu EVARIS ma się przyczynić do skutecznej identyfikacji zagrożeń wynikających z użytkowania substancji niebezpiecznych w obiektach przemysłowych, wczesnej identyfikacji i oceny zagrożeń *in situ* oraz pogłębienia współpracy przemysłu z władzami lokalnymi i służbami administracji publicznej, w szczególności z Państwową Strażą Pożarną.

Program informatyczny opracowany w ramach realizacji projektu umożliwi obliczanie zasięgów skutków awarii przemysłowych, w tym pozwoli również na wyznaczenie bezpiecznych odległości obiektów i terenów od zakładu.

Narzędzie to stanowić będzie na polskim rynku innowację, charakteryzującą się całościowym i jednolitym podejściem do zagadnienia oceny ryzyka związanego z uwolnieniem substancji niebezpiecznych, wykorzystywaną na potrzeby identyfikacji zakładów stwarzających zagrożenie poza swoim terenem. Proces wykonywania analizy ryzyka zostanie zwalidowany i zweryfikowany wskali wykraczającej poza skalę laboratoryjną, a produkt oceniony podczas testów użytkowników końcowych. Narzędzie zapewni przedsiębiorcom pozyskiwanie jednolitych informacji o zagrożeniach generowanych przez projektowane lub istniejące obiekty i instalacje z substancjami niebezpiecznymi, co będzie wymuszało konieczność zastosowania odpowiednich środków zaradczych w przypadku, gdy poziom ryzyka osiągnie wartość nieakceptowaną. Oprogramowanie współgrać ma z istniejącym na rynku trendem, który dąży do wzmocnienia roli obliczeń w trakcie projektowania, wykonywania i testowania wszelkich urządzeń i systemów. Tworzy się tym samym nową gałąź w gospodarce, silnie związaną z komputeryzacją i wprowadzeniem nowoczesnych rozwiązań. Końcowym efektem projektu będzie nowe rozwiązanie technologiczne w postaci programu informatycznego, stanowiącego skuteczne narzędzie do wspomagania procesu analizowania i rozpoznawania zagrożeń dla funkcjonariuszy Państwowej Straży Pożarnej, pracowników Wojewódzkich Inspektoratów Ochrony Środowiska, a także organów administracyjnych, decydujących o kształcie planowania i zagospodarowania przestrzennego. Rozwiązanie to będzie demonstratorem opracowanej technologii, pozwalającym na jego wykorzystanie w docelowych warunkach pracy. Użytkownik końcowy otrzyma oprogramowanie, które pozwoli mu na¹²:

- przypisanie do danego rodzaju zakładu/instalacji odpowiednich modeli scenariuszy awaryjnych;
- obliczenie:
 - wartości prawdopodobieństwa końcowego wystąpienia zdarzenia awaryjnego,
 - zasięgów stref zagrożeń dla wybranych scenariuszy awaryjnych,

¹² Wniosek nr DOB-BIO7/09/03/2015 o finansowanie wykonania projektu realizowanego na rzecz obronności i bezpieczeństwa państwa.

- wartości ryzyka danego zdarzenia awaryjnego wraz z oceną tego ryzyka pod kątem akceptowalności w danych warunkach;
- określenie skutków zdarzenia awaryjnego dla ludzi, środowiska i mienia, w tym szczegółową prezentację skutków w podziale na zdefiniowane wartości progowe oddziaływania promieniowania cieplnego, temperatury, nadciśnienia, toksyczności;
- zestawienie zasięgów skutków awarii i poziomu ryzyka z parametrem bezpiecznej odległości;
- czytelną wizualizację wyników wraz z utworzeniem mapy zagrożeń.

Kluczowym efektem realizacji prac nad projektem oraz oprogramowaniem będzie wypracowanie końcowych rekomendacji prawnych dotyczących planowania zagospodarowania przestrzennego w kontekście zakładów przemysłowych.

Literatura

Dyrektywa Parlamentu Europejskiego i Rady 2012/18/UE z 4 lipca 2012 r. w sprawie kontroli zagrożeń poważnymi awariami związanymi z substancjami niebezpiecznymi.

Rozporządzenie Ministra Gospodarki z dnia 9 kwietnia 2002 r. w sprawie rodzajów i ilości substancji niebezpiecznych, których znajdowanie się w zakładzie decyduje o zaliczeniu go do zakładu o zwiększonym ryzyku albo zakładu o dużym ryzyku wystąpienia poważnej awarii przemysłowej (Dz.U. 2002 nr 58, poz. 535).

Ustawa z dnia 27 kwietnia 2001 r. Prawo ochrony środowiska (Dz.U. 2001 nr 62 poz. 627, z późn. zm.).

Wiśniewski W., Sobieszek G., Połec B., *Zapobieganie poważnym awariom przemysłowym – studium przypadku na przykładzie województwa mazowieckiego*, BiTP Vol. 51 Issue 3, 2018, pp. 150–169.

Wniosek nr DOB-BIO7/09/03/2015 o finansowanie wykonania projektu realizowanego na rzecz obronności i bezpieczeństwa państwa.

Notki biograficzne autorów

dr Mieczysław Borysiewicz w 1965 roku ukończył studia na Wydziale Matematyczno-Fizycznym Uniwersytetu Warszawskiego. W 1969 r. uzyskał stopień doktora nauk fizycznych w Instytucie Badań Jądrowych w Świerku. W 1983 r. uzyskał certyfikat w zakresie probabilistycznych oszacowań ryzyka elektrowni jądrowych (ANL, USA). Jest adiunktem w Narodowym Centrum Badań Jądrowych. Specjalność – ryzyko poważnych awarii.

dr Piotr Kopka w 2012 roku ukończył studia w zakresie informatyki oraz matematyki na Wydziale Nauk Ścisłych Uniwersytetu Przyrodniczo-Humanistycznego w Siedlcach. Od 2012 roku był uczestnikiem studiów doktoranckich w Instytucie Podstaw Informatyki PAN. W 2019 roku obronił rozprawę doktorską w Instytucie Badań Systemowych PAN. Obecnie jest adiunktem w Narodowym Centrum Badań Jądrowych w Departamencie Problemów Złożonych. Specjalność – modelowanie komputerowe, metody bayesowskie.

mgr inż. Michał Korycki w 2012 roku ukończył studia na wydziale Inżynierii Środowiska Politechniki Warszawskiej. Przez 6 lat pracował w Narodowym Centrum Badań Jądrowych nad modelowaniem numerycznym zjawisk zachodzących w atmosferze. Obecnie kończy doktorat na wydziale Instalacji Budowlanych, Hydrotechniki i Inżynierii Środowiska Politechniki Warszawskiej.

mgr inż. Tomasz Kwiatkowski w 2012 roku ukończył studia na Wydziale Mechanicznym Energetyki i Lotnictwa Politechniki Warszawskiej. Jest pracownikiem naukowo-badawczym w Zakładzie Energetyki Jądrowej i Analiz Środowiska. Specjalność – numeryczna mechanika płynów, którą wykorzystuje głównie do badania oscylacji przepływu w kasetach paliwowych.

dr inż. Michał Lewak w 2004 roku ukończył studia na Wydziale Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Warszawskiej. Specjalność – inżynieria chemiczna. W 2011 roku uzyskał z wyróżnieniem stopień doktora nauk technicznych na tym Wydziale. Od 2011 roku jest zatrudniony na stanowisku adiunkta na Wydziale Inżynierii Chemicznej i Procesowej Politechniki Warszawskiej. Zajmuje się modelowaniem matematycznym zjawisk transportu pędu, masy i energii w układach z reakcją chemiczną, ze szczególnym uwzględnieniem modelowania matematycznego dyspersji zanieczyszczeń i bezpieczeństwa reaktorów chemicznych.

mgr Bartłomiej Połec jest absolwentem Wydziału Bezpieczeństwa Narodowego Akademii Obrony Narodowej w Warszawie (obecnie Akademia Sztuki Wojennej). Pracownik Jednostki Certyfikującej Usługi CNBOP-PIB. Współtwórca projektów badawczo-rozwojowych realizowanych przez CNBOP-PIB we współpracy z innymi instytucjami. Pełni funkcję zastępcy kierownika w projekcie naukowo-badawczym pn. „Program do oceny ryzyka w obiektach przemysłowych, stwarzających zagrożenie poza swoim terenem”.

dr Sławomir Potemski w 1983 roku ukończył studia na Wydziale Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Warszawskiej. W 1991 roku uzyskał tytuł doktora nauk matematycznych na Uniwersytecie Warszawskim. Jest adiunktem w Narodowym Centrum Badań Jądrowych. Specjalność – metody numeryczne, analizy ryzyka, systemy wspomagania decyzji po poważnych awariach przemysłowych.

mgr inż. Piotr Prusiński w 2010 roku studia ukończył na Wydziale Mechanicznym Energetyki i Lotnictwa Politechniki Warszawskiej. Studiował też w Królewskim Instytucie Technologicznym w Sztokholmie (Szwecja). Aktualnie pracuje w Narodowym Centrum Badań Jądrowych jako starszy specjalista badawczo-techniczny. Specjalizuje się w projektowaniu instalacji hydraulicznych wysokiego ryzyka, w tym modelowaniu zjawisk cieplno-przepływowych.

mgr inż. Grzegorz Siess w 1987 roku ukończył studia na Wydziale Technologii Chemicznej Politechniki Warszawskiej. Jest Głównym Specjalistą w Zakładzie Energetyki Jądrowej i Analiz Środowiskowych Narodowego Centrum Badań Jądrowych. Specjalność – analizy ryzyka instalacji przemysłowych.

dr inż. Jarosław Tępiński absolwent Wydziału Elektrycznego Politechniki Warszawskiej. Specjalizuje się w automatyce napędu elektrycznego. Jego zainteresowania badawcze związane są z obszarem automatyki, energoelektroniki i programowania mikroprocesorów DSP. W Centrum Naukowo-Badawczym Ochrony Przeciwpowodziowej – PIB zajmuje się badaniami urządzeń automatyki pożarniczej i prowadzeniem prac naukowo-badawczych. Reprezentuje Instytut w Komitecie Technicznym PKN nr 104 ds. Kompatybilności Elektromagnetycznej. Wyniki prowadzonych przez siebie badań zaprezentował w kilkunastu publikacjach o zasięgu krajowym i międzynarodowym oraz w licznych wystąpieniach konferencyjnych. Wystąpienie pt. „Reactive power compensator of hydro induction generator” zdobyło wyróżnienie na konferencji „International Conference and Exhibition on Ecological Vehicles and Renewable Energies – EVER” w Monaco (2012).

dr Anna Wawrzyńczak-Szaban w 2001 roku ukończyła studia magisterskie na kierunku matematyka na Wydziale Nauk Ścisłych Akademii Podlaskiej w Siedlcach. W 2007 roku uzyskała tytuł doktora nauk fizycznych na Uniwersytecie Łódzkim. Obecnie jest adiunktem w Departamencie Problemów Złożonych Narodowego Centrum Badań Jądrowych w Świerku oraz Instytucie Informatyki Uniwersytetu Przyrodniczo-Humanistycznego w Siedlcach. Jej specjalnością są stochastyczne metody obliczeniowe, metody numeryczne, modelowanie procesów fizycznych oraz metody heurystyczne przeszukiwania przestrzeni parametrów.

„Publikacja jest bardzo potrzebna w praktyce przemysłowej. Zawiera wyczerpujące opisy dostępnych programów do oceny ryzyka wystąpienia awarii przemysłowych oraz zasięgu ich oddziaływania. Autorzy książki formułują zasadne wnioski dotyczące metod i narzędzi wspomagających ocenę ryzyka w przedmiotowym obszarze badań”.

Z recenzji prof. dr hab. Kazimierza Lebeckiego

„[...] Monografię uważam za opracowanie bardzo cenne i ciekawe, wpisujące się w stosunkowo mało rozpowszechniony w Polsce obszar badań naukowych dotyczących metod i narzędzi do oceny ryzyka wystąpienia awarii przemysłowej w zakładach, w których występują substancje niebezpieczne stwarzające zagrożenie pożarem, wybuchem lub emisją substancji toksycznych. Omawiana publikacja zawiera systematyzację wiedzy na temat zjawisk związanych z rozprzestrzenianiem się zanieczyszczeń w atmosferze i ich matematycznego modelowania [...] Monografia posiada duże walory naukowe i użytkowe. Efektem końcowym prac badawczych będzie kompleksowe opracowanie i wdrożenie programu do oceny ryzyka w zakładach stwarzających zagrożenie poza swoim terenem”.

Z recenzji st. bryg. mgr inż. Sławomira Zająca

DOI: 10.17381/2019.2

ISBN 978-83-948534-5-7

