ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

Формирование функции распределения радиусов аэрозольных частиц продуктов гидролиза гексафторида урана в производственных помещениях

С. П. Бабенко[1,a], А. В. Бадьин[2,b]

[1] *Московский государственный технический университет имени Н. Э. Баумана, факультет «ФН», кафедра «Физика». Россия, 105005, Москва, 2-я Бауманская ул., д. 5.*

[2] *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра математики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.*

E-mail: [a] *babenkosvetlana@mail.ru,* [b] *badyin@phys.msu.ru*

Статья поступила 28.08.2013, подписана в печать 20.10.2013.

Рассматриваются аэрозольные частицы (UO_2F_2, HF), образующиеся в воздухе рабочего помещения на предприятии атомной промышленности. Обсуждается функция распределения g_1 радиусов аэрозольных частиц в данной точке пространства в данный момент времени. Рассматриваются некоторые логарифмически нормальные функции распределения, связанные с газодисперсной средой рабочего помещения. Оценивается отклонение функции g_1 от упомянутых логарифмически нормальных функций распределения и обсуждаются связанные с этим проблемы вычисления среднего коэффициента прохождения в организм человека атомов токсичного вещества (урана или фтора) при ингаляционном поступлении.

Ключевые слова: гексафторид урана, ингаляционное поступление, функция распределения, коэффициент прохождения, математическая модель.

УДК: 51-74, 51-76, 614.876, 614.878. PACS: 87.10.–e, 87.53.–j.

Введение

Основным рабочим веществом в технологиях обогащения урана изотопом ^{235}U является гексафторид урана (UF_6, ГФУ). Используется это вещество в виде жидкости в закрытых сосудах, над поверхностью которой образуется пар.

Вследствие аварийных и технологических выходов газообразного гексафторида урана в воздух рабочего помещения воздух загрязняется газообразными и аэрозольными продуктами взаимодействия ГФУ с парами воды (продуктами гидролиза ГФУ). Продукты гидролиза токсичны, поскольку содержат атомы урана или фтора. Этот факт является источником серьезных осложнений в организации производственного процесса на предприятиях атомной промышленности. На таких предприятиях приходится решать целый ряд задач по обеспечению безопасности труда. К числу этих задач относится описание формирования газодисперсной среды рабочего помещения, а также нахождение функции распределения радиусов аэрозольных частиц. Решение этих задач имеет большое значение, поскольку известно [1], что при ингаляционном поступлении коэффициент прохождения аэрозольных частиц в организм человека зависит от их радиуса.

В работах [2, 3] опубликованы данные по нахождению функции распределения радиусов аэрозольных частиц уранил-фторида (UO_2F_2), образующихся в процессе нуклеации. Показано, что эта функция описывается логарифмически нормальным законом

$$G_0(r) = \frac{1}{2}\left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\ln(r) - \ln(r_g)}{\ln(\beta_g)\sqrt{2}}\right)\right), \quad r \in (0, +\infty),$$

$$g_0(r) = \frac{1}{\ln(\beta_g)\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{r}\exp\left(-\left(\frac{\ln(r) - \ln(r_g)}{\ln(\beta_g)\sqrt{2}}\right)^2\right), \quad r \in (0, +\infty).$$

Здесь G_0 — интегральная функция распределения радиусов аэрозольных частиц ($G_0(r)$ — вероятность того, что в процессе нуклеации атом урана попадет в состав аэрозольной частицы радиуса не больше r); g_0 — дифференциальная функция распределения радиусов аэрозольных частиц ($\int\limits_0^r d\tilde{r}\, g_0(\tilde{r}) = G_0(r)$); r_g — геометрическое среднее радиусов аэрозольных частиц; β_g (безразмерная величина) — геометрическое стандартное отклонение радиусов аэрозольных частиц; erf — функция ошибок ($\operatorname{erf}(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int\limits_0^u d\tilde{u}\, e^{-\tilde{u}^2}$).

Следует заметить, что реальная газодисперсная среда в физически бесконечно малой окрестности данной точки рабочего помещения в данный момент времени складывается под действием многих факторов — диффузии, дрейфа, гидролиза, нуклеации, воздухообмена. Так как функции G_0, g_0 описывают только процесс нуклеации, то возникает потребность в новых функциях распределения, описывающих конечный результат.

Фиксируем некоторую точку рабочего помещения и некоторый момент времени. Пусть $n(r)$ — концентрация атомов токсичного вещества (урана или фтора) в составе аэрозольных частиц радиусов не больше r, n_∞ — концентрация атомов токсичного вещества в составе аэрозольных частиц всех радиусов ($n_\infty = \lim\limits_{r\to+\infty} n(r)$), $n'(r)$ — удельная (по радиусам аэрозольных частиц) концентрация атомов токсичного

вещества в составе аэрозольных частиц радиуса r ($\int\limits_0^r d\widetilde{r}\, n'(\widetilde{r}) = n(r)$). Обозначим $G_1(r) = \frac{n(r)}{n_\infty}$, $g_1(r) = \frac{n'(r)}{n_\infty}$. Тогда $G_1(r) \xrightarrow[r\to 0+0]{} 0$, $G_1(r) \xrightarrow[r\to+\infty]{} 1$, G_1 — неубывающая функция, $\int\limits_0^r d\widetilde{r}\, g_1(\widetilde{r}) = G_1(r)$. Очевидно, $G_1(r)$ можно интерпретировать как вероятность обнаружить атом токсичного вещества в составе аэрозольных частиц радиусов не больше r. Иными словами, функции G_1, g_1 играют роль функций распределения радиусов аэрозольных частиц в данной точке в данный момент времени. Функции G_1, g_1, вообще говоря, зависят от выбора точки рабочего помещения и момента времени, отличаются от функций G_0, g_0 и даже не описываются логарифмически нормальным законом. Последнее приводит к определенным трудностям. Например, в работе [1] приводится график, с помощью которого, зная АМАД (активностный медианный аэродинамический диаметр) или ММАД (массовый медианный аэродинамический диаметр), можно найти средний коэффициент прохождения в организм человека атомов токсичного вещества. Однако этот график построен в предположении, что распределение аэродинамических диаметров аэрозольных частиц описывается логарифмически нормальным законом (в этом случае распределение радиусов аэрозольных частиц тоже описывается логарифмически нормальным законом).

Пусть $\xi'(r)$ — коэффициент прохождения в организм человека атомов токсичного вещества в составе аэрозольных частиц радиуса r. Очевидно, число $\frac{1}{n_\infty}\int\limits_0^{+\infty} dr\, \xi'(r) n'(r)$ можно интерпретировать как средний коэффициент прохождения в организм человека атомов токсичного вещества. Кроме того, очевидно, что

$$\frac{1}{n_\infty}\int\limits_0^{+\infty} dr\, \xi'(r) n'(r) = \int\limits_0^{+\infty} dr\, \xi'(r)\frac{n'(r)}{n_\infty} = \int\limits_0^{+\infty} dr\, \xi'(r) g_1(r).$$

Пусть g_* — некоторая дифференциальная функция распределения на $(0,+\infty)$. Обозначим $\xi(g_*) = \int\limits_0^{+\infty} dr\, \xi'(r) g_*(r)$ (очевидно, $\xi(g_*)$ — средний коэффициент прохождения, соответствующий функции распределения g_*). Пусть g_*^1, g_*^2 — некоторые дифференциальные функции распределения на $(0,+\infty)$. Так как $\xi'(r) \in [0,1]$ при $r \in (0,+\infty)$, то

$$\left|\xi(g_*^1) - \xi(g_*^2)\right| = \left|\int\limits_0^{+\infty} dr\, \xi'(r) g_*^1(r) - \int\limits_0^{+\infty} dr\, \xi'(r) g_*^2(r)\right| =$$

$$= \left|\int\limits_0^{+\infty} dr\, \xi'(r)\left(g_*^1(r) - g_*^2(r)\right)\right| \leqslant$$

$$\leqslant \int\limits_0^{+\infty} dr\, |\xi'(r)|\, \left|g_*^1(r) - g_*^2(r)\right| \leqslant \int\limits_0^{+\infty} dr\, \left|g_*^1(r) - g_*^2(r)\right|.$$

Следует заметить, что интеграл $\int\limits_0^{+\infty} dr\, \left|g_*^1(r) - g_*^2(r)\right|$ реализует один из стандартных способов количественного описания отклонения одной функции от другой.

В настоящей статье оцениваются перспективы следующей идеи: выбрать некоторую «базовую» функцию распределения g_{LN} («близкую» к g_1, но описывающуюся логарифмически нормальным законом), вычислить величины $\xi(g_{\mathrm{LN}})$, $\Delta g = \int\limits_0^{+\infty} dr\, |g_1(r) - g_{\mathrm{LN}}(r)|$ и оценить величину $\xi(g_1)$ следующим образом:

$$\xi(g_{\mathrm{LN}}) - \Delta g \leqslant \xi(g_1) \leqslant \xi(g_{\mathrm{LN}}) + \Delta g.$$

1. Аварийная ситуация

В работе [4] функции G_1, g_1 определяются для аварийной ситуации на предприятии атомной промышленности. При этом делаются следующие предположения. Имеет место разовый выброс ГФУ в воздух рабочего помещения. Воздухообменом пренебрегаем. Диффузией и оседанием газов пренебрегаем. Диффузией аэрозолей пренебрегаем. Имеет место оседание аэрозолей на пол рабочего помещения под действием силы тяжести и силы сопротивления среды. В работе [4] рассматривается следующая начальная задача для газов:

$$\frac{d}{dt} n_k = \sum_{m=1}^{N} a_{k,m} n_m, \quad k = \overline{1,N}, \quad t \in (0,+\infty),$$

$$n_k\big|_{t=0} = n_{k,0}, \quad k = \overline{1,N}.$$

Здесь N — число интересующих нас веществ в составе газов; $n_k(t)$ — концентрация молекул вещества с номером k в момент времени t; $\{a_{k,m}\}_{m=\overline{1,N}}^{k=\overline{1,N}}$ — коэффициенты, описывающие процессы гидролиза и нуклеации; $n_{k,0}$ — концентрация молекул вещества с номером k в нулевой момент времени. Мы предполагаем, что матрица $\{a_{k,m}\}_{m=\overline{1,N}}^{k=\overline{1,N}}$ (а точнее, оператор умножения на эту матрицу в пространстве $\mathbb{R}^N$) имеет отрицательные собственные значения и полный набор собственных векторов. Решение начальной задачи для газов может быть записано в виде

$$n_k(t) = \sum_{m=1}^{N} \chi_{k,m} C_m e^{-\delta_m t}.$$

Здесь $-\delta_1, \ldots, -\delta_N$ — собственные значения матрицы $\{a_{k,m}\}_{m=\overline{1,N}}^{k=\overline{1,N}}$; $\{\chi_{k,1}\}^{k=\overline{1,N}}, \ldots, \{\chi_{k,N}\}^{k=\overline{1,N}}$ — соответствующие линейно независимые собственные векторы матрицы $\{a_{k,m}\}_{m=\overline{1,N}}^{k=\overline{1,N}}$; коэффициенты $C_1, \ldots, C_N$ определяются как решение следующей СЛАУ:

$$\sum_{m=1}^{N} \chi_{k,m} C_m = n_{k,0}, \quad k = \overline{1,N}.$$

В работе [4] рассматривается следующая начальная задача для аэрозолей:

$$\frac{\partial}{\partial t} n' = v(r)\frac{\partial}{\partial z} n' + g_0(r)\sum_{m=1}^{N} b_m n_m(t),$$

$$z \in (0,h), \quad t \in (0,+\infty);$$

$$n'\big|_{z=h} = 0, \quad t \in (0,+\infty), \quad n'\big|_{t=0} = 0, \quad z \in (0,h).$$

Здесь r — радиус аэрозольных частиц (величина r входит в рассматриваемую начальную задачу как параметр); h — высота рабочего помещения; $n'(r,z,t)$ — удельная (по радиусам аэрозольных частиц) концентрация атомов токсичного вещества в составе аэрозольных частиц радиуса r на высоте z в момент времени t; $v(r)$ — скорость оседания аэрозольных частиц радиуса r; $b_1,\ldots,b_N$ — коэффициенты, описывающие процесс нуклеации. Величина $v(r)$ вычисляется по правилу $v(r)=\frac{\pi}{3\sqrt{2}}\frac{m_1 g}{6\pi\eta r_1^3}r^2=\gamma r^2$. Здесь m_1 — масса молекулы (из этих молекул состоит аэрозольная частица), g — ускорение свободного падения; η — коэффициент вязкости воздуха, r_1 — радиус молекулы. Обозначим $R_1(z,t)=\sqrt{\frac{h-z}{\gamma t}}$. Тогда $z+v(r)t<h$ при $r<R_1(z,t)$, $z+v(r)t=h$ при $r=R_1(z,t)$, $z+v(r)t>h$ при $r>R_1(z,t)$. Обозначим $F(t)=\sum\limits_{m=1}^{N}b_m n_m(t)$. Мы предполагаем, что $F(t)>0$. Решая начальную задачу для аэрозолей методом характеристик, получаем

$$n'(r,z,t)=g_0(r)\int\limits_0^t d\tilde{s}\,F(\tilde{s})=$$
$$=g_0(r)\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{m=1}^{N}b_m\chi_{m,j}\right)C_j\frac{1}{\delta_j}\left(1-e^{-\delta_j t}\right),$$
$$r\leqslant R_1(z,t),$$
$$n'(r,z,t)=g_0(r)\int\limits_{t-\frac{h-z}{v(r)}}^{t}d\tilde{s}\,F(\tilde{s})=$$
$$=g_0(r)\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{m=1}^{N}b_m\chi_{m,j}\right)C_j\frac{1}{\delta_j}\times$$
$$\times\left(e^{-\delta_j[t-(h-z)/v(r)]}-e^{-\delta_j t}\right),\quad r>R_1(z,t).$$

Интегрируя функцию n', получаем

$$n(r,z,t)=G_0(r)\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{m=1}^{N}b_m\chi_{m,j}\right)C_j\frac{1}{\delta_j}\left(1-e^{-\delta_j t}\right),$$
$$r\leqslant R_1(z,t),$$
$$n(r,z,t)=\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{m=1}^{N}b_m\chi_{m,j}\right)C_j\frac{1}{\delta_j}\times$$
$$\times\left(G_0(R_1(z,t))-G_0(r)e^{-\delta_j t}+\right.$$
$$\left.+\int\limits_{R_1(z,t)}^{r}d\tilde{r}\,g_0(\tilde{r})e^{-\delta_j[t-(h-z)/v(\tilde{r})]}\right),$$
$$r>R_1(z,t),$$
$$n_\infty(z,t)=\sum_{j=1}^{N}\left(\sum_{m=1}^{N}b_m\chi_{m,j}\right)C_j\frac{1}{\delta_j}\times$$
$$\times\left(G_0(R_1(z,t))-e^{-\delta_j t}+\right.$$
$$\left.+\int\limits_{R_1(z,t)}^{+\infty}d\tilde{r}\,g_0(\tilde{r})e^{-\delta_j[t-(h-z)/v(\tilde{r})]}\right).$$

Очевидно,

$$g_1(r,z,t)=\frac{g_0(r)\int\limits_0^t d\tilde{s}\,F(\tilde{s})}{n_\infty(z,t)},\quad r\leqslant R_1(z,t),$$
$$g_1(r,z,t)=\frac{g_0(r)\int\limits_{t-\frac{h-z}{v(r)}}^{t}d\tilde{s}\,F(\tilde{s})}{n_\infty(z,t)},\quad r>R_1(z,t).$$

Попробуем рассматривать функцию g_0 в качестве «базовой» функции распределения. Во-первых, это логарифмически нормальная функция распределения, описывающая процесс нуклеации. Во-вторых, как будет установлено дальше, отклонение функции $\{g_1(r,z,t)\}_r$ от функции g_0 стремится к нулю при $t\to 0+0$. Обозначим $\Delta g(z,t)=\int\limits_0^{+\infty}dr\,|g_1(r,z,t)-g_0(r)|$ (эта величина характеризует отклонение функции $\{g_1(r,z,t)\}_r$ от функции g_0). Обозначим $n''(r,z,t)=\frac{g_1(r,z,t)}{g_0(r)}$ (изучение этой величины позволит нам сравнить величины $g_1(r,z,t)$, $g_0(r)$). Очевидно,

$$n_\infty(z,t)=\int\limits_0^{+\infty}d\tilde{r}\,n'(\tilde{r},z,t)=$$
$$=\int\limits_0^{R_1(z,t)}d\tilde{r}\,n'(\tilde{r},z,t)+\int\limits_{R_1(z,t)}^{+\infty}d\tilde{r}\,n'(\tilde{r},z,t)=$$
$$=\int\limits_0^{R_1(z,t)}d\tilde{r}\,g_0(\tilde{r})\int\limits_0^t d\tilde{s}\,F(\tilde{s})+\int\limits_{R_1(z,t)}^{+\infty}d\tilde{r}\,g_0(\tilde{r})\int\limits_{t-(h-z)/v(\tilde{r})}^{t}d\tilde{s}\,F(\tilde{s})<$$
$$<\int\limits_0^{R_1(z,t)}d\tilde{r}\,g_0(\tilde{r})\int\limits_0^t d\tilde{s}\,F(\tilde{s})+\int\limits_{R_1(z,t)}^{+\infty}d\tilde{r}\,g_0(\tilde{r})\int\limits_0^t d\tilde{s}\,F(\tilde{s})=$$
$$=\int\limits_0^{+\infty}d\tilde{r}\,g_0(\tilde{r})\int\limits_0^t d\tilde{s}\,F(\tilde{s})=\int\limits_0^t d\tilde{s}\,F(\tilde{s}).$$

Пусть $r\leqslant R_1(z,t)$, тогда

$$n''(r,z,t)=\frac{\int\limits_0^t d\tilde{s}\,F(\tilde{s})}{n_\infty(z,t)}>1.$$

Пусть $r>R_1(z,t)$, тогда

$$n''(r,z,t)=\frac{\int\limits_{t-(h-z)/v(r)}^{t}d\tilde{s}\,F(\tilde{s})}{n_\infty(z,t)}.$$

Очевидно, $n''(R_1(z,t),z,t)>1$, $n''(r,z,t)\xrightarrow[r\to+\infty]{}0$, $\{n''(r,z,t)\}_{r\in[R_1(z,t),+\infty)}$ — непрерывная функция,

$\{n''(r,z,t)\}_{r\in[R_1(z,t),+\infty)}$ — убывающая функция. Тогда $\exists!\ r \in (R_1(z,t),+\infty)\,(n''(r,z,t)=1)$. Следовательно, $\exists\ r \in (R_1(z,t),+\infty)\,(n''(r,z,t)=1)$, $\exists!\ r \in (0,+\infty)\,(n''(r,z,t)=1)$. Обозначим через $R_2(z,t)$ решение уравнения $n''(r,z,t)=1$ (по переменной r). Тогда $R_2(z,t) > R_1(z,t)$, $n''(r,z,t) > 1$ при $r < R_2(z,t)$, $n''(r,z,t)=1$ при $r = R_2(z,t)$, $n''(r,z,t) < 1$ при $r > R_2(z,t)$. Следовательно,

$$\Delta g(z,t) = \int\limits_0^{+\infty} dr\,|g_1(r,z,t) - g_0(r)| =$$

$$= \int\limits_0^{R_2(z,t)} dr\,|g_1(r,z,t) - g_0(r)| +$$

$$+ \int\limits_{R_2(z,t)}^{+\infty} dr\,|g_1(r,z,t) - g_0(r)| =$$

$$= \int\limits_0^{R_2(z,t)} dr\,(g_1(r,z,t) - g_0(r)) +$$

$$+ \int\limits_{R_2(z,t)}^{+\infty} dr\,(-1)(g_1(r,z,t) - g_0(r)) =$$

$$= G_1(R_2(z,t),z,t) - G_0(R_2(z,t)) -$$
$$- ((1 - G_1(R_2(z,t),z,t)) - (1 - G_0(R_2(z,t)))) =$$
$$= 2(G_1(R_2(z,t),z,t) - G_0(R_2(z,t))).$$

Так как $R_1(z,t) < R_2(z,t)$ при $t \in (0,+\infty)$; $R_1(z,t) \xrightarrow[t\to 0+0]{} +\infty$, то $R_2(z,t) \xrightarrow[t\to 0+0]{} +\infty$. Тогда $G_0(R_2(z,t)) \xrightarrow[t\to 0+0]{} 1$. Так как $G_0(R_2(z,t)) < G_1(R_2(z,t),z,t) \leqslant 1$ при $t \in (0,+\infty)$, то $G_1(R_2(z,t),z,t) \xrightarrow[t\to 0+0]{} 1$. Тогда $\Delta g(z,t) \xrightarrow[t\to 0+0]{} 0$.

В табл. 1 приведены результаты численных расчетов для величины $\Delta g(z,t)$ $(z = h/2)$.

Таблица 1

$\Delta g(z,t)$ $(z = h/2)$

t	$\Delta g(z,t)$ (UO_2F_2)	$\Delta g(z,t)$ (HF)
10 с	$1.56\cdot 10^{-3}$	$2.91\cdot 10^{-6}$
1 мин	$5.20\cdot 10^{-2}$	$5.10\cdot 10^{-4}$
3 мин	$2.67\cdot 10^{-1}$	$7.43\cdot 10^{-3}$
5 мин	$4.98\cdot 10^{-1}$	$2.28\cdot 10^{-2}$
7 мин	$6.98\cdot 10^{-1}$	$4.41\cdot 10^{-2}$
10 мин	$9.29\cdot 10^{-1}$	$8.13\cdot 10^{-2}$
15 мин	1.18	$1.47\cdot 10^{-1}$
20 мин	1.34	$2.12\cdot 10^{-1}$

На рис. 1, 2 приведены ($z = h/2$, $t = 10$ мин) графики функций $\{g_1(r,z,t)\}_r$ (кривая *1*), g_0 (кривая *2*).

Видно, что для уранил-фторида отклонение $\{g_1(r,z,t)\}_r$ от g_0 перестает быть приемлемым уже через 3 мин после выброса. Для более легких частиц фтористого водорода (HF) отклонение $\{g_1(r,z,t)\}_r$ от g_0 остается приемлемым даже через 15 мин после выброса (чем легче частицы, тем больше величина $R_1(z,t)$, тем больше величина $R_2(z,t)$ и тем меньше величина $\Delta g(z,t)$).

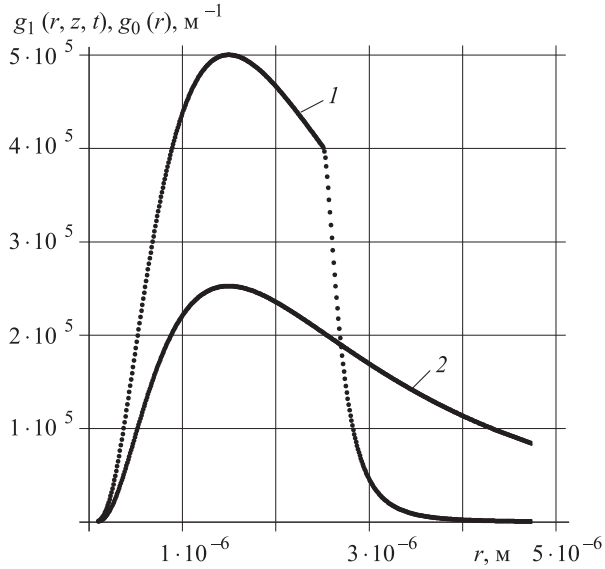

Рис. 1. $g_1(r,z,t)$ (кривая *1*), $g_0(r)$ (кривая *2*) (UO_2F_2, $z = h/2$, $t = 10$ мин)

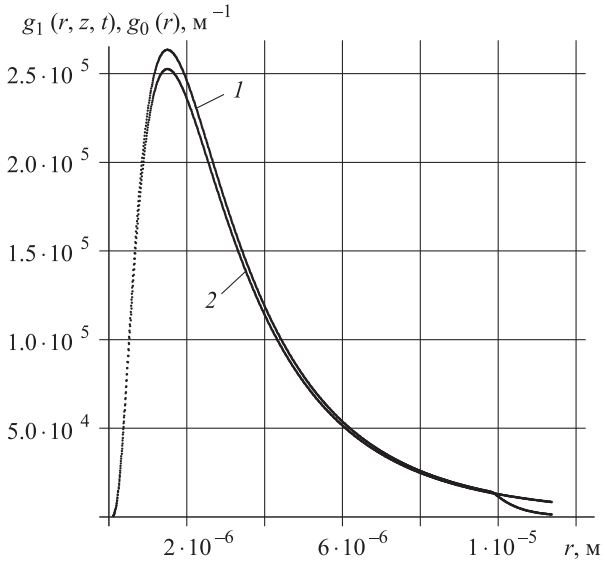

Рис. 2. $g_1(r,z,t)$ (кривая *1*), $g_0(r)$ (кривая *2*) (HF, $z = h/2$, $t = 10$ мин)

2. Повседневные производственные условия

В работе [5] функции G_1, g_1 определяются для повседневных производственных условий. При этом делаются следующие предположения. Имеет место постоянное подтекание ГФУ в воздух рабочего помещения. Имеет место воздухообмен. Диффузией и оседанием газов пренебрегаем. Диффузией аэрозолей пренебрегаем. Имеет место оседание аэрозолей на пол рабочего помещения под действием силы тяжести и силы сопротивления среды. В работе [5] рассматривается следующая система уравнений для газов:

$$\sum_{m=1}^{N} a_{k,m}(K)n_m + F_k = 0, \quad k = \overline{1,N}.$$

Здесь K — кратность воздухообмена (величина K входит в рассматриваемую систему уравнений как параметр); N — число интересующих нас веществ в составе газов; $n_k(K)$ — концентрация молекул вещества с номером k при кратности воздухообмена K; $\{a_{k,m}(K)\}_{m=\overline{1,N}}^{k=\overline{1,N}}$ — коэффициенты, описывающие процессы гидролиза, нуклеации и воздухообмена; F_k — плотность мощности внешних источников молекул вещества с номером k. Мы предполагаем, что $\det\left(\{a_{k,m}(K)\}_{m=\overline{1,N}}^{k=\overline{1,N}}\right) \neq 0$.

В работе [5] рассматривается следующая начальная задача для аэрозолей:

$$v(r)\frac{\partial}{\partial z}n' - Kn' + g_0(r)\sum_{m=1}^{N} b_m n_m(K) = 0,$$
$$z \in (0,h), \quad n'\big|_{z=h} = 0.$$

Здесь r — радиус аэрозольных частиц (величина r входит в рассматриваемую начальную задачу как параметр); h — высота рабочего помещения; $n'(r,z,K)$ — удельная (по радиусам аэрозольных частиц) концентрация атомов токсичного вещества в составе аэрозольных частиц радиуса r на высоте z при кратности воздухообмена K; $v(r)$ — скорость оседания аэрозольных частиц радиуса r (величина $v(r)$ вычисляется так же, как и в аварийной ситуации); $b_1,\ldots,b_N$ — коэффициенты, описывающие процесс нуклеации. Обозначим $F(K) = \sum\limits_{m=1}^{N} b_m n_m(K)$. Мы предполагаем, что $F(K) > 0$. Так как дальше нам придется одновременно использовать логарифмически нормальные законы с разными значениями геометрического среднего, то удобно ввести в рассмотрение следующие функциональные зависимости:

$$\overline{G}(r,u) = \frac{1}{2}\left(1 + \operatorname{erf}\left(\frac{\ln(r) - \ln(u)}{\ln(\beta_g)\sqrt{2}}\right)\right),$$
$$r \in (0,+\infty), \quad u \in (0,+\infty),$$
$$\overline{g}(r,u) = \frac{1}{\ln(\beta_g)\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{r}\exp\left(-\left(\frac{\ln(r) - \ln(u)}{\ln(\beta_g)\sqrt{2}}\right)^2\right),$$
$$r \in (0,+\infty), \quad u \in (0,+\infty).$$

Обозначим $\widetilde{r}_g = \frac{r_g}{\exp(2(\ln\beta_g)^2)}$. Нетрудно доказать, что $\frac{g_0(r)}{v(r)} = \overline{g}(r,\widetilde{r}_g)\frac{\exp(2(\ln\beta_g)^2)}{v(r_g)}$. Решая начальную задачу для аэрозолей методом вариации постоянной, получаем

$$n'(r,z,0) = \frac{g_0(r)}{v(r)}(h-z)F(0) =$$
$$= \overline{g}(r,\widetilde{r}_g)\frac{\exp\left(2(\ln\beta_g)^2\right)}{v(r_g)}(h-z)F(0),$$
$$n'(r,z,K) = \frac{g_0(r)}{K}\left(1 - e^{-K(h-z)/v(r)}\right)F(K), \quad K > 0.$$

Интегрируя функцию n', получаем

$$n(r,z,0) = \left(\int_0^r d\widetilde{r}\,\frac{g_0(\widetilde{r})}{v(\widetilde{r})}\right)(h-z)F(0) =$$
$$= \overline{G}(r,\widetilde{r}_g)\frac{\exp\left(2(\ln\beta_g)^2\right)}{v(r_g)}(h-z)F(0),$$
$$n(r,z,K) = \frac{1}{K}\left(\int_0^r d\widetilde{r}\,g_0(\widetilde{r})\left(1 - e^{-K(h-z)/v(\widetilde{r})}\right)\right)F(K) =$$
$$= \frac{1}{K}\left(G_0(r) - \int_0^r d\widetilde{r}\,g_0(\widetilde{r})e^{-K(h-z)/v(\widetilde{r})}\right)F(K),$$
$$K > 0,$$
$$n_\infty(z,0) = \left(\int_0^{+\infty} d\widetilde{r}\,\frac{g_0(\widetilde{r})}{v(\widetilde{r})}\right)(h-z)F(0) =$$
$$= \frac{\exp\left(2(\ln\beta_g)^2\right)}{v(r_g)}(h-z)F(0),$$
$$n_\infty(z,K) = \frac{1}{K}\left(\int_0^{+\infty} d\widetilde{r}\,g_0(\widetilde{r})\left(1 - e^{-K(h-z)/v(\widetilde{r})}\right)\right)F(K) =$$
$$= \frac{1}{K}\left(1 - \int_0^{+\infty} d\widetilde{r}\,g_0(\widetilde{r})e^{-K(h-z)/v(\widetilde{r})}\right)F(K),$$
$$K > 0.$$

Очевидно,

$$g_1(r,z,0) = \frac{\frac{g_0(r)}{v(r)}}{\int_0^{+\infty} d\widetilde{r}\,\frac{g_0(\widetilde{r})}{v(\widetilde{r})}} = \overline{g}(r,\widetilde{r}_g),$$
$$g_1(r,z,K) = \frac{g_0(r)\left(1 - e^{-K(h-z)/v(r)}\right)}{\int_0^{+\infty} d\widetilde{r}\,g_0(\widetilde{r})\left(1 - e^{-K(h-z)/v(\widetilde{r})}\right)} =$$
$$= \frac{g_0(r)\left(1 - e^{-K(h-z)/v(r)}\right)}{1 - \int_0^{+\infty} d\widetilde{r}\,g_0(\widetilde{r})e^{-K(h-z)/v(\widetilde{r})}}, \quad K > 0.$$

Итак, функция $\{g_1(r,z,0)\}_r$ описывается логарифмически нормальным законом с геометрическим средним $\widetilde{r}_g$ и геометрическим стандартным отклонением β_g. Попробуем рассматривать эту функцию в качестве «базовой» функции распределения. Во-первых, это логарифмически нормальная функция распределения, описывающая процессы дрейфа и нуклеации (функция g_0 описывает только процесс нуклеации). Во-вторых, как будет установлено дальше, отклонение функции $\{g_1(r,z,K)\}_r$ от функции $\{g_1(r,z,0)\}_r$ стремится к нулю при $K \to 0+0$. Обозначим $\Delta g(z,K) = \int_0^{+\infty} dr\,|g_1(r,z,K) - g_1(r,z,0)|$ (эта величина характеризует отклонение функции $\{g_1(r,z,K)\}_r$ от функции $\{g_1(r,z,0)\}_r$). Обозначим $n''(r,z,K) = \frac{g_1(r,z,K)}{g_1(r,z,0)}$ (изучение этой величины позволит нам сравнить величины $g_1(r,z,K)$, $g_1(r,z,0)$). Пусть $K > 0$. Тогда

$$n''(r,z,K) = \frac{1 - e^{-K(h-z)/v(r)}}{K(h-z)/v(r)} \times$$

$$\times \frac{\int\limits_0^{+\infty} d\widetilde{r}\, g_0(\widetilde{r}) \frac{K(h-z)}{v(\widetilde{r})}}{\int\limits_0^{+\infty} d\widetilde{r}\, g_0(\widetilde{r}) \left(1-e^{-K(h-z)/v(\widetilde{r})}\right)} =$$

$$= \frac{1-e^{-K(h-z)/v(r)}}{K(h-z)/v(r)} \frac{\exp\left(2(\ln\beta_g)^2\right) \frac{K(h-z)}{v(r_g)}}{1-\int\limits_0^{+\infty} d\widetilde{r}\, g_0(\widetilde{r}) e^{-K(h-z)/v(\widetilde{r})}}.$$

Обозначим $\varphi(u) = \frac{1-e^{-u}}{u}$ при $u \in (0,+\infty)$. Нетрудно доказать, что $\varphi(u) \xrightarrow[u\to 0+0]{} 1$, $\varphi(u) \xrightarrow[u\to+\infty]{} 0$, φ — непрерывная функция, φ — убывающая функция. Тогда $\varphi(u) \in (0,1)$ при $u \in (0,+\infty)$; $\forall\, v \in (0,1) \exists!\, u \in (0,+\infty)(\varphi(u) = v)$. Обозначим

$$\alpha(z,K) = \frac{\int\limits_0^{+\infty} d\widetilde{r}\, g_0(\widetilde{r}) \left(1-e^{-K(h-z)/v(\widetilde{r})}\right)}{\int\limits_0^{+\infty} d\widetilde{r}\, g_0(\widetilde{r}) \frac{K(h-z)}{v(\widetilde{r})}} =$$

$$= \frac{1-\int\limits_0^{+\infty} d\widetilde{r}\, g_0(\widetilde{r}) e^{-K(h-z)/v(\widetilde{r})}}{\exp\left(2(\ln\beta_g)^2\right) \frac{K(h-z)}{v(r_g)}}, \quad z \in (0,h), \quad K > 0.$$

Тогда $\alpha(z,K) \in (0,1)$, $n''(r,z,K) = \varphi\left(\frac{K(h-z)}{v(r)}\right) / \alpha(z,K)$. Обозначим через $U(z,K)$ решение уравнения $\varphi(u) = \alpha(z,K)$ (по переменной u). Тогда $U(z,K) \in (0,+\infty)$, $\varphi(u) > \alpha(z,K)$ при $u < U(z,K)$; $\varphi(u) = \alpha(z,K)$ при $u = U(z,K)$; $\varphi(u) < \alpha(z,K)$ при $u > U(z,K)$. Обозначим $R_3(z,K) = \sqrt{\frac{K(h-z)}{\gamma U(z,K)}}$. Тогда $R_3(z,K) \in (0,+\infty)$, $\frac{K(h-z)}{v(r)} > U(z,K)$ при $r < R_3(z,K)$; $\frac{K(h-z)}{v(r)} = U(z,K)$ при $r = R_3(z,K)$; $\frac{K(h-z)}{v(r)} < U(z,K)$ при $r > R_3(z,K)$. Следовательно, $n''(r,z,K) < 1$ при $r < R_3(z,K)$; $n''(r,z,K) = 1$ при $r = R_3(z,K)$; $n''(r,z,K) > 1$ при $r > R_3(z,K)$. Тогда

$$\Delta g(z,K) = \int\limits_0^{+\infty} dr\, |g_1(r,z,K) - g_1(r,z,0)| =$$

$$= \int\limits_0^{R_3(z,K)} dr\, |g_1(r,z,K) - g_1(r,z,0)| +$$

$$+ \int\limits_{R_3(z,K)}^{+\infty} dr\, |g_1(r,z,K) - g_1(r,z,0)| =$$

$$= \int\limits_0^{R_3(z,K)} dr\, (-1)(g_1(r,z,K) - g_1(r,z,0)) +$$

$$+ \int\limits_{R_3(z,K)}^{+\infty} dr\, (g_1(r,z,K) - g_1(r,z,0)) =$$

$$= (-1)(G_1(R_3(z,K),z,K) - G_1(R_3(z,K),z,0)) +$$
$$+ (1 - G_1(R_3(z,K),z,K)) - (1 - G_1(R_3(z,K),z,0)) =$$
$$= 2(G_1(R_3(z,K),z,0) - G_1(R_3(z,K),z,K)).$$

Фиксируем число $z \in (0,h)$. Обозначим $\varphi_1(r,0) = \frac{g_0(r)}{v(r)}(h-z)$ при $r \in (0,+\infty)$; $\varphi_1(r,K) = \frac{g_0(r)}{K}\left(1-e^{-K(h-z)/v(r)}\right)$ при $r \in (0,+\infty)$, $K \in (0,+\infty)$; $\varphi_2(K) = \int\limits_0^{+\infty} d\widetilde{r}\, \varphi_1(\widetilde{r},K)$ при $K \in [0,+\infty)$. Нетрудно доказать, что φ_1 — непрерывная функция. Используя оценку $\frac{g_0(r)}{K}\left(1-e^{-K(h-z)/v(r)}\right) < \frac{g_0(r)}{K}\frac{K(h-z)}{v(r)} = \frac{g_0(r)}{v(r)}(h-z)$ при $r \in (0,+\infty)$, $K \in (0,+\infty)$, нетрудно доказать, что φ_2 — непрерывная функция. Используя оценки

$$\frac{g_0(r)}{K}\left(1-e^{-K(h-z)/v(r)}\right) < \frac{g_0(r)}{v(r)}(h-z),$$
$$r \in (0,+\infty), \quad K \in (0,+\infty),$$

$$\frac{g_0(r)}{K}\left(1-e^{-K(h-z)/v(r)}\right) = \frac{g_0(r)}{v(r)}(h-z)\frac{1-e^{-K(h-z)/v(r)}}{\frac{K(h-z)}{v(r)}} \geqslant$$
$$\geqslant \frac{g_0(r)}{v(r)}(h-z)\frac{1-e^{-\frac{K_0(h-z)}{v(r)}}}{\frac{K_0(h-z)}{v(r)}} =$$
$$= \frac{g_0(r)}{K_0}\left(1-e^{-\frac{K_0(h-z)}{v(r)}}\right),$$
$$r \in (0,+\infty), \quad K_0 \in (0,+\infty), \quad K \in (0,K_0],$$

нетрудно доказать, что $\{\Delta g(z,K)\}_{K\in[0,+\infty)}$ — непрерывная функция. Тогда $\Delta g(z,K) \xrightarrow[K\to 0+0]{} 0$.

В табл. 2 приведены результаты численных расчетов для величины $\Delta g(z,K)$ $(z = h/2)$.

Таблица 2

$\Delta g(z,K)$ $(z = h/2)$

K, ч$^{-1}$	$\Delta g(z,K)$ (UO_2F_2)	$\Delta g(z,K)$ (HF)
0.01	$2.57 \cdot 10^{-2}$	$2.08 \cdot 10^{-1}$
0.1	$1.57 \cdot 10^{-1}$	$6.18 \cdot 10^{-1}$
1	$5.29 \cdot 10^{-1}$	$9.97 \cdot 10^{-1}$
3	$7.51 \cdot 10^{-1}$	1.08
5	$8.44 \cdot 10^{-1}$	1.10
7	$8.97 \cdot 10^{-1}$	1.11

На рис. 3, 4 приведены ($z = h/2$, $K = 3$ ч$^{-1}$) графики функций $\{g_1(r,z,K)\}_r$ (синяя кривая), $\{g_1(r,z,0)\}_r$ (красная кривая).

Видно, что для уранил-фторида отклонение $\{g_1(r,z,K)\}_r$ от $\{g_1(r,z,0)\}_r$ перестает быть приемлемым при $K = 1$ ч$^{-1}$. Для более легких частиц фтористого водорода отклонение $\{g_1(r,z,K)\}_r$ от $\{g_1(r,z,0)\}_r$ перестает быть приемлемым уже при $K = 0.01$ ч$^{-1}$ (чем легче частицы, тем дольше они находятся в воздухе рабочего помещения и тем сильнее на них влияет воздухообмен).

Заключение

Сделаем некоторые выводы из проведенной оценки среднего коэффициента прохождения в организм человека атомов токсичного вещества $\xi(g_1)$ (здесь в аварийной ситуации $g_1 = \{g_1(r,z,t)\}_r$, в повседневных производственных условиях $g_1 = \{g_1(r,z,K)\}_r$).

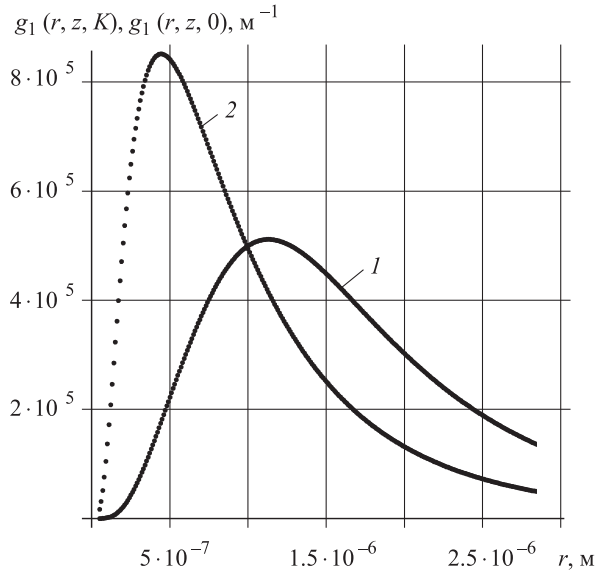

Рис. 3. $g_1(r, z, K)$ (кривая *1*), $g_1(r, z, 0)$ (кривая *2*) (UO_2F_2, $z = h/2$, $K = 3$ ч$^{-1}$)

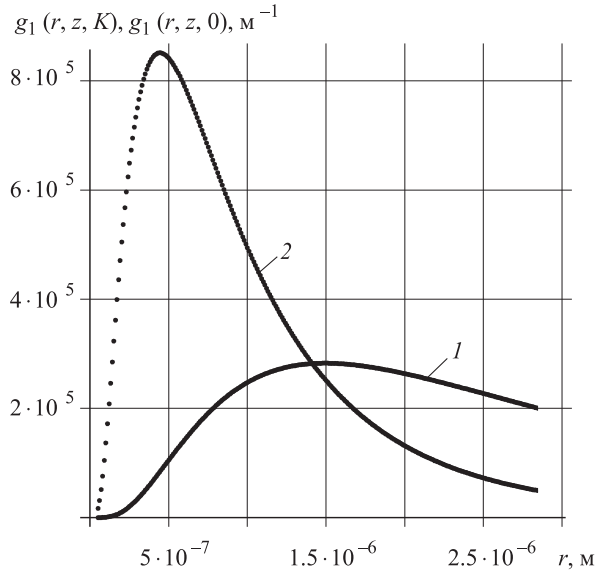

Рис. 4. $g_1(r, z, K)$ (кривая *1*), $g_1(r, z, 0)$ (кривая *2*) (HF, $z = h/2$, $K = 3$ ч$^{-1}$)

Рассматривалась следующая оценка:

$$\xi(g_{\mathrm{LN}}) - \Delta g \leqslant \xi(g_1) \leqslant \xi(g_{\mathrm{LN}}) + \Delta g$$

(здесь в аварийной ситуации $g_{\mathrm{LN}} = g_0$, $\Delta g = \Delta g(z, t)$, в повседневных производственных условиях $g_{\mathrm{LN}} = \{g_1(r, z, 0)\}_r$, $\Delta g = \Delta g(z, K)$). Примененный метод оценки величины $\xi(g_1)$ дает содержательные результаты только для аэрозольных частиц HF и только для аварийной ситуации. При этом величина Δg меняется от $\Delta g = 2.91 \cdot 10^{-6}$ в момент времени $t = 10$ с до $\Delta g = 1.47 \cdot 10^{-1}$ в момент времени $t = 15$ мин. В остальных случаях получены следующие значения величины Δg:

1) $\Delta g = 2.67 \cdot 10^{-1}$ в момент времени $t = 3$ мин (UO_2F_2, аварийная ситуация), на фоне значения $\xi(g_{\mathrm{LN}}) \approx 3.41 \cdot 10^{-1}$ [6] ошибка определения $\xi(g_1)$ велика;

3) $\Delta g = 7.51 \cdot 10^{-1}$ при кратности воздухообмена $K = 3$ ч$^{-1}$ (UO_2F_2, повседневные производственные условия), на фоне значения $\xi(g_{\mathrm{LN}}) \approx 3.85 \cdot 10^{-1}$ [6] ошибка определения $\xi(g_1)$ очень велика;

3) $\Delta g = 1.08$ при кратности воздухообмена $K = 3$ ч$^{-1}$ (HF, повседневные производственные условия), на фоне значения $\xi(g_{\mathrm{LN}}) \approx 2.80 \cdot 10^{-1}$ [6] ошибка определения $\xi(g_1)$ очень велика.

Может оказаться, что величина Δg является сильно завышенной оценкой величины $|\xi(g_1) - \xi(g_{\mathrm{LN}})|$. В этом случае идея замены $\xi(g_1)$ на $\xi(g_{\mathrm{LN}})$ имеет смысл даже при полученных «больших» значениях Δg. Однако улучшение оценки возможно только за счет использования подробной информации о функции ξ', а при наличии такой информации можно уже ставить вопрос о прямом вычислении величины $\xi(g_1)$.

Следует заметить, что изучение величины Δg может представлять интерес даже при отказе от идеи замены $\xi(g_1)$ на $\xi(g_{\mathrm{LN}})$. Величина Δg количественно описывает отклонение функции g_1 от функции g_{LN}, а эти функции являются важными характеристиками газодисперсной среды. Наконец, следует заметить, что величина Δg описывает отклонение функции g_1 от одной конкретной логарифмически нормальной функции распределения, а не от логарифмически нормального закона в целом.

Список литературы

1. Human Respiratory Tract Model for Radiological Protection. ICRP Publ. 66. Ann. ICRP 24. 1994. (1–3).
2. *Бабенко С.П., Бадьин А.В., Бадьин В.И.* // Изв. Академии промышленной экологии. 2002. № 4. С. 70.
3. *Бабенко С.П., Бадьин А.В.* // Атом. энергия. 2005. **99**, № 5. С. 353.
4. *Бабенко С.П., Бадьин А.В.* // Атом. энергия. 2007. **103**, № 3. С. 198.
5. *Бабенко С.П., Бадьин А.В.* // Вестн. МГТУ им. Н.Э. Баумана. Сер. «Естеств. науки». 2007. № 2 (25). С. 14.
6. *Бабенко С.П.* Прогнозирование радиационного и токсического воздействия выбросов гексафторида урана методами математического моделирования: Дисс. ... докт. техн. наук. М., 2008.

Formation of the distribution function of the aerosol-particle radii for the hydrolysis products of uranium hexafluoride in industrial premises

S. P. Babenko[1,a], **A. V. Bad'in**[2,b]

[1] *Department «Physics», Faculty «FS», N. E. Bauman Moscow State Technical University, Moscow 105005, Russia.*
[2] *Department of Mathematics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.*
E-mail: [a] *babenkosvetlana@mail.ru,* [b] *badyin@phys.msu.ru.*

We consider UO_2F_2 and HF aerosol particles that formed in the air of industrial premises at a factory of the nuclear industry. The distribution function g_1 of the aerosol-particle radii at a given space–time point is analyzed. Some of the lognormal distribution functions that are related to a gas-dispersed environment of the working premise are considered. The deviation of g_1 from lognormal distribution functions is estimated. The related problems of calculating the average transmission coefficients of atoms of toxic substances (uranium or fluorine) in the human body during inhalation are discussed.

Keywords: uranium hexafluoride, inhalation, distribution function, transmission coefficient, mathematical model.
PACS: 87.10.–e, 87.53.–j.
Received 28 August 2013.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 1(2014).

Сведения об авторах

1. Бабенко Светлана Петровна — канд. физ.-мат. наук, доктор техн. наук, доцент, профессор; тел.: (499) 263-63-68, e-mail: babenkosvetlana@mail.ru.
2. Бадьин Андрей Валентинович — канд. физ.-мат. наук, доцент; тел.: (495) 939-10-33, e-mail: badyin@phys.msu.ru.