

FFI RAPPORT

FORDAMPING FRA OVERFLATER OG DRÅPER

BUSMUNDRUD Odd

FFI/RAPPORT-2005/03538

FORDAMPING FRA OVERFLATER OG DRÅPER

BUSMUNDRUD Odd

FFI/RAPPORT-2005/03538

FORSVARETS FORSKNING SINSTITUTT
Norwegian Defence Research Establishment
Postboks 25, 2027 Kjeller, Norge

FORSVARETS FORSKNING SINSTITUTT (FFI)
Norwegian Defence Research Establishment

UNCLASSIFIED

P O BOX 25
 NO-2027 KJELLER, NORWAY
REPORT DOCUMENTATION PAGE

SECURITY CLASSIFICATION OF THIS PAGE
 (when data entered)

1) PUBL/REPORT NUMBER FFI/RAPPORT-2005/03538 1a) PROJECT REFERENCE FFI-V/859/917	2) SECURITY CLASSIFICATION UNCLASSIFIED 2a) DECLASSIFICATION/DOWNGRADING SCHEDULE -	3) NUMBER OF PAGES 36		
4) TITLE FORDAMPING FRA OVERFLATER OG DRÅPER EVAPORATION FROM SURFACES AND DROPLETS				
5) NAMES OF AUTHOR(S) IN FULL (surname first) BUSMUNDRUD Odd				
6) DISTRIBUTION STATEMENT Approved for public release. Distribution unlimited. (Offentlig tilgjengelig)				
7) INDEXING TERMS IN ENGLISH: <table style="width: 100%; border: none;"> <tr> <td style="width: 50%; vertical-align: top;"> a) <u>Chemical warfare agents</u> b) <u>Evaporation</u> c) <u>Aerosols</u> d) _____ e) _____ </td> <td style="width: 50%; vertical-align: top;"> IN NORWEGIAN: a) <u>Kjemiske stridsmidler</u> b) <u>Fordampning</u> c) <u>Aerosoler</u> d) _____ e) _____ </td> </tr> </table>			a) <u>Chemical warfare agents</u> b) <u>Evaporation</u> c) <u>Aerosols</u> d) _____ e) _____	IN NORWEGIAN: a) <u>Kjemiske stridsmidler</u> b) <u>Fordampning</u> c) <u>Aerosoler</u> d) _____ e) _____
a) <u>Chemical warfare agents</u> b) <u>Evaporation</u> c) <u>Aerosols</u> d) _____ e) _____	IN NORWEGIAN: a) <u>Kjemiske stridsmidler</u> b) <u>Fordampning</u> c) <u>Aerosoler</u> d) _____ e) _____			
THESAURUS REFERENCE: 8) ABSTRACT Simplified theoretical models for evaporation from liquid surfaces and evaporation from spherical droplets and aerosols have been developed and compared to published models. Laboratory experiments have been performed to validate the models and provide data for parameters used in the models. Calculations for evaporation and deposition on the ground for droplets of chemical warfare agent released at high altitudes have been made.				
9) DATE 2005-11-11	AUTHORIZED BY This page only Bjarne Haugstad	POSITION Director of Research		

ISBN 82-464-0997-2

UNCLASSIFIED

SECURITY CLASSIFICATION OF THIS PAGE
 (when data entered)

INNHOOLD

	Side	
1	INNLEDNING	7
2	TEORETISK GRUNNLAG	7
2.1	Fordampning fra fri væskeoverflateoverflate	7
2.1.1	Mer avansert modell for større flater	9
2.1.2	Mer fullstendig løsning av problemet	11
2.1.3	Empirisk formel	12
2.1.4	Diffusjonskoeffisient	12
2.2	Fordampning av dråper	12
2.2.1	Tidsforløpet av fordampning fra dråpe	15
2.3	Fallende dråper	15
3	REGNEEKSEMPLER OG MÅLINGER	17
3.1	Sammenligning av modeller for fordampning fra åpne flater	17
3.1.1	Diffusjonslengden δ	18
3.1.2	Sammenlignende beregninger	19
3.1.3	Betydningen av temperaturen.	20
3.1.4	Betydning av lufthastighet	20
3.1.5	Fordampning som funksjon av lengden på væskedammen	22
3.2	Fordampning fra dråper	22
3.3	Fordampning og deponering fra fallende dråper	24
3.3.1	Spredning fra stor høyde	27
4	OPPSUMMERING	28
4.1	Fordampning fra åpne flater	28
4.2	Fordampning av dråper	29
4.3	Videre arbeid	29
APPENDIKS		
A	MÅLINGER AV DIFFUSJONSKOEFFISIENTER OG DIFFUSJONSAVSTANDER	30
A.1	Fysikalske data brukt i beregningene	30
A.2	Diffusjonskoeffisienter	30
A.3	Diffusjonslengde	31
A.4	Avdamping fra små flater	32
A.4.1	Andre publiserte målinger	34
A.4.2	Empiriske formler for normert avdamping	34
	Litteratur	36

FORDAMPING FRA OVERFLATER OG DRÅPER

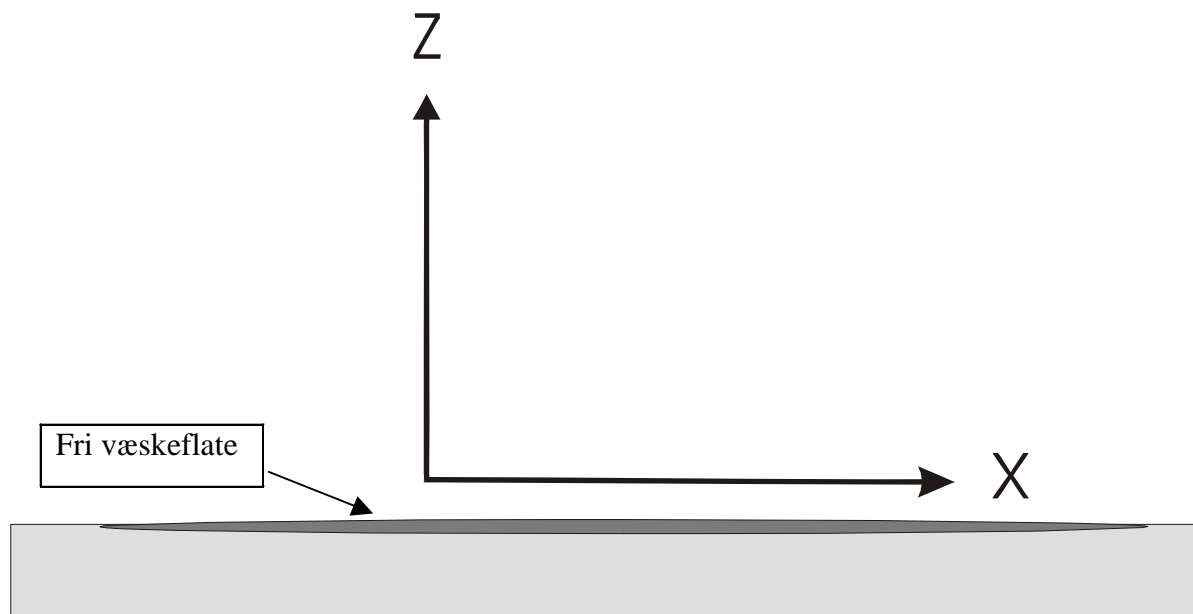
1 INNLEDNING

Fordampning fra væskeoverflater er av betydning ved beregning av trussel fra kjemiske forurensninger og ved dekontaminering av forurensete flater. Det kan her dreie seg om frie væskeoverflater, væske som er absorbert i et annet stoff eller fordampning av aerosoler. Hensikten med denne rapporten er å gi en oversikt over forhold ved fordampning fra frie væskeoverflater og fra aerosoler. Dette er et komplisert saksområde, særlig under praktiske forhold, og en teoretisk framstilling må nødvendigvis være forenklet.

2 TEORETISK GRUNNLAG

2.1 Fordampning fra fri væskeoverflateoverflate

Det kan først være nyttig å se på hva det enkle tilfellet med en fri væskeoverflate. Følgende forenklete modell vist i Figur 2.1 benyttes:

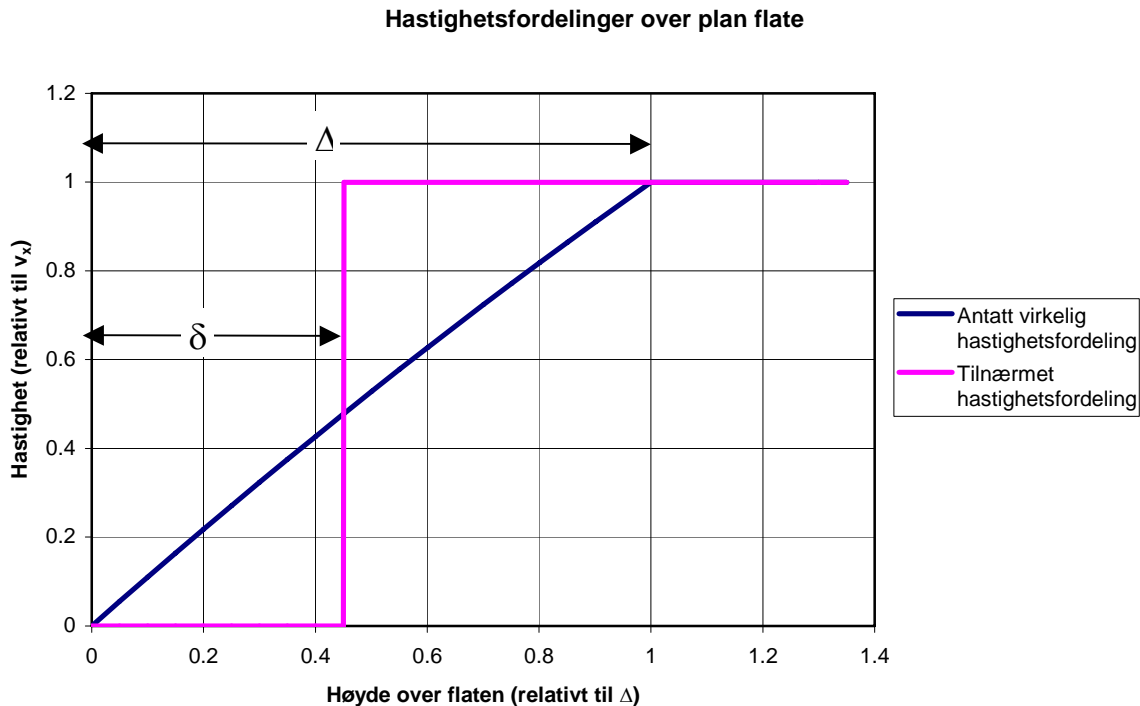


Figur 2.1 Koordinatsystem for fordampning fra overflater

Man antar at det ligger fri væske på en overflate, og det strømmer luft parallelt med overflaten. Vi legger inn et aksesystem der x-aksen er parallell med vindretningen, og z-aksen er normal til overflaten.

Umiddelbart over overflaten er konsentrasjonen i luften lik metningskonsentrasjonen for dampen ved væskeoverflatens temperatur. Dampen transporteres så vekk fra overflaten ved diffusjon gjennom luften, og ved luftens bevegelse. Nær overflaten har luften liten bevegelse, og transporten foregår ved diffusjon. Lenger ute foregår det også transport med luftens bevegelse.

En mer nøyaktig beregning krever at man tar hensyn til hastighetsfordelingen. Her forenkles dette, og hastigheten antas å være null til en avstand δ fra overflaten, og konstant lik v_x ved en større avstand. En mer nøyaktig beregning ville anta at hastigheten økte fra null ved overflaten til v_x i en avstand Δ , og så var konstant lik v_x for $z > \delta$. Tilnærmelsen er vist i Figur 2.2.



Figur 2.2 Teoretisk hastighetsfordeling og hastighetsfordeling brukt i utledningen av uttrykkene for fordampning.

I det stillestående grensesjiktet foregår transporten av damp ved diffusjon, og ifølge Fick's lov kan denne skrives som formel (2.1).

$$j = D \cdot \left(\frac{dC}{dz} \right)_{0 < z < \delta} \quad (2.1)$$

der j er transport pr flateenhet, D diffusjonskoeffisienten i luft og $\left(\frac{dC}{dz} \right)_{0 < z < \delta}$ er konsentrasjonsgradienten i grensesjiktet.

Som en første tilnærming kan man anta at ved $z = \delta$ er konsentrasjonen lik C_δ . Under forutsetning av at diffusjonskoeffisienten D er uavhengig av konsentrasjonen er konsentrasjonsgradienten da gitt ved formel (2.2).

$$\left(\frac{dC}{dz} \right)_{\delta > z > 0} = \frac{C_0 - C_\delta}{\delta} \quad (2.2)$$

der C_0 er metningskonsentrasjonen og C_δ konsentrasjonen ved avstanden δ .

Det enkleste tilfellet er at $C_\delta = 0$, altså at luftstrømmen er kraftig nok til at alt som diffunderer ut fra overflaten til avstanden δ blir fjernet, slik at konsentrasjonen ved $z = \delta$ blir ubetydelig. Man får da:

$$j = D \cdot \frac{C_0(T)}{\delta} \quad (2.3)$$

Total avdamping fra en flate med areal A blir:

$$J = D \cdot \frac{C_0(T)}{\delta} \cdot A \quad (2.4)$$

der $C_0(T)$ er metningskonsentrasjonen ved overflatetemperaturen T . Fordampningen blir da proporsjonal med metningsdampptrykket. Dette er den enkleste formelen for fordampning og er i praksis lik en modell som benyttes ved FOI (1). Formelen som benyttes der er skrevet:

$$q = \frac{C_0 - C(z)}{r_a + r_m} \quad (2.5)$$

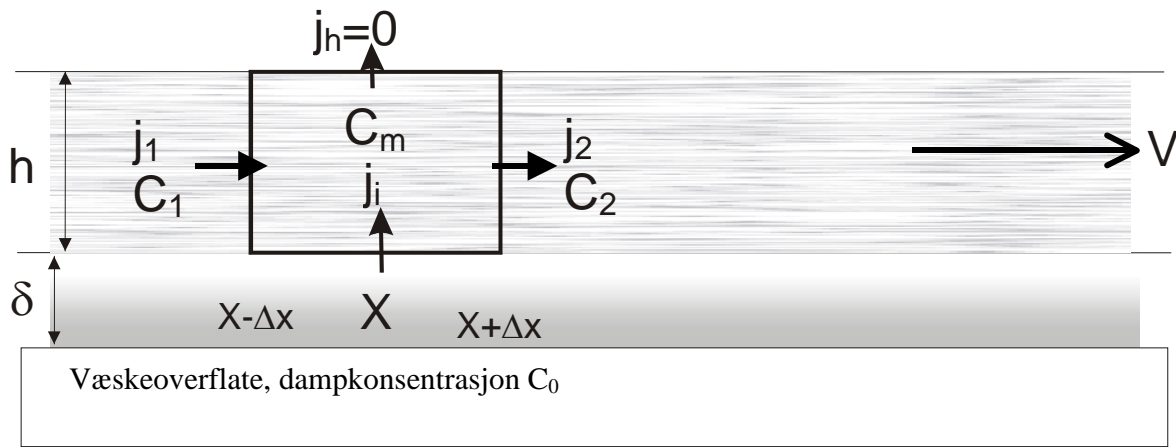
hvor r_a og r_m er henholdsvis motstanden i det viskøse (luft)laget og aerodynamisk motstand og $C(z)$ er konsentrasjonen i luften i avstanden z over væskeflaten. $1/(r_a + r_m)$ har dimensjonen hastighet (m/s) og typiske verdier antas å ligge mellom 10^{-4} og 10^{-2} m/s. For et godt ventilert rom og en lite flyktig væske kan man som første tilnærming sette $C(z)=0$. Da blir formel (2.4) og (2.5) egentlig samme formel, med $\frac{1}{r_a + r_m} = \frac{D}{\delta}$.

Så lenge det er en fri væskeoverflate er metningsdampptrykket bestemt av overflatetemperaturen. Dersom væsken er så lite flyktig at fordampningen ikke senker overflatetemperaturen vesentlig blir fordampningshastigheten konstant med tiden. Den hastighetsbegrensende faktor vil i dette tilfellet være diffusjonen i luften over overflaten og transport ved luftstrømming. (For væsker med lavt kokepunkt, som mange industrikjemikalier, vil avdampningen være så høy at avdampningshastigheten blir begrenset av energitilførselen til væsken.) I det følgende ser vi bort fra denne typen væsker, men betrakter væsker med liten flyktighet, så som tradisjonelle kjemiske stridsmidler som nervegasser og sennepsgass.

Ut fra den enkle modellen gitt i formel (2.4) kan fordampningen finnes ut fra diffusjonskoeffisienten for dampen i luft og tykkelsen på det stillestående laget hvor transporten foregår ved diffusjon. Under de forenklete betingelse som er gitt vil fordampningshastigheten være direkte proporsjonal med metningsdampptrykket av væsken ved den temperatur overflatesjiktet har.

2.1.1 Mer avansert modell for større flater

For en større overflate vil ikke antagelsen av at $C_\delta=0$ være gyldig. Lufta som strømmer langs væskeoverflaten vi bringe med seg damp fra områder høyere opp i strømningsretningen slik at $C_\delta > 0$, og konsentrasjonsgradienten avtar nedover i strømningsretningen. En forenklet modell basert på denne situasjonen er vist i Figur 2.3.



Figur 2.3 Modell for fordampning ved større væskeoverflater.

Her antas det at til avstanden δ fra overflaten foregår transporten kun ved diffusjon. Over dette "diffusjons-sjiktet" er et "transportsjikt" med tykkelse h hvor det foregår en fullstendig blanding av luften, slik at konsentrasjonen i dette sjiktet er uavhengig av avstanden fra væskeoverflaten. Over dette sjiktet antas konsentrasjonen å være null. Dette er en grov forenkling, men kan gi en indikasjon på betydningen av damptransporten fra fordampning oppvinds.

I "transportsjiktet" ser man på massebalansen i et volumelement som strekker seg ut fra $x-\Delta x$ til $x+\Delta x$ i x -retningen og antar at transporten ut av dette på toppen er null. Da må $j_2=j_1+j_i$ der j_2 er transporten med luftstrømmen ut av elementet, j_1 er transporten med luftstrømmen inn i volumelementet og j_i er transporten inn i elementet ved diffusjon. Antar man fullstendig blanding i laget, får man, når bredden av væskeflaten settes lik b :

$$\begin{aligned}
 C_2 \cdot b \cdot h \cdot v &= C_1 \cdot b \cdot h \cdot v + \frac{C_0 - C_m}{\delta} \cdot D \cdot b \cdot 2\Delta x \\
 C_2 - C_1 &= \frac{C_0 - C_m}{\delta} \cdot \frac{D \cdot 2\Delta x}{h \cdot v} \\
 2\Delta x \cdot \frac{dC_m}{dx} &= \frac{C_0 - C_m}{\delta} \cdot \frac{D \cdot 2\Delta x}{h \cdot v} \\
 \frac{dC_m}{dx} &= \frac{C_0 - C_m}{\delta} \cdot \frac{D}{h \cdot v}
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

Vi får altså følgende differensialligning for konsentrasjonen i transport-laget:

$$\frac{dC_m}{dx} + C_m \cdot \frac{D}{\delta \cdot h \cdot v} = C_0 \cdot \frac{D}{\delta \cdot h \cdot v} \tag{2.7}$$

Løsningen på ligning (2.7) er:

$$C_m = C_0 \cdot \left(1 - e^{-\frac{x \cdot D}{\delta \cdot h \cdot v}}\right) \tag{2.8}$$

For en rektangulær flate med bredde b og lengde l , blir total transport Q :

$$Q = C_m(l) \cdot b \cdot h \cdot v = C_0 \cdot \left(1 - e^{-\frac{l \cdot D}{\delta \cdot h \cdot v}}\right) \cdot b \cdot h \cdot v \tag{2.9}$$

For en overflate med så liten utstrekning i x -retningen at $\frac{l \cdot D}{\delta \cdot h \cdot v} \ll 1$ kan dette tilnærmet skrives:

$$Q = C_0 \cdot D \cdot \frac{1 \cdot b}{\delta} \quad (2.10)$$

som er identisk med formel (2.4). Lufthastigheten v kommer da bare inn ved den innflytelsen den har på diffusjonslengden δ . Dette er en sterk forenkling av problemstillingen, og innfører en ukjent parameter h , men kan brukes til å illustrere problemstillingen ved store flater.

2.1.2 Mer fullstendig løsning av problemet

En mer grundig gjennomgang av problemstillingen er gitt av Hummel, Braun og Fehrenbacher (2). Her er det i utgangspunktet antatt at lufthastigheten nær overflaten er proporsjonal med kvadratet av avstanden fra overflaten og den differensialligningen man da får for transporten er løst. Men så har man for å få et enkelt matematisk uttrykk gjort den forenklingen at lufthastigheten er antatt konstant helt ned til flaten uten at gyldigheten av denne forenklingen er drøftet videre. Dette gir følgende uttrykk for avdampingen pr flateenhet:

$$j = 2 \cdot C_0 \cdot \sqrt{\frac{D \cdot v_x}{\pi \cdot \Delta x}} \quad (2.11)$$

der Δx er lengden av væskeflaten i vindretningen og v_x er lufthastigheten.

Ref (2) gir også en teoretisk formel for diffusjonskoeffisienten som vist i formel (2.18) og (2.19) i avsnitt 2.1.4. Innsetting av formel (2.18) i formel (2.11) gir

$$j = 2,30 \cdot 10^{-2} \cdot C_0 \cdot T^{0,95} \left(\frac{1}{MW} + \frac{1}{29} \right)^{0,25} \sqrt{\frac{v_x \cdot MW^{-0,33}}{\Delta x \cdot p}} \quad (2.12)$$

der MW er molekylvekten i g/mol og p er atmosfæretrykket i Pa.

Vanligvis er det lettere å finne tabeller over metningsdamptrykket p_0 enn metningskonsentrasjonen C_0 . Sammenhengen mellom disse er gitt ved

$$C_0 = \frac{p_0 \cdot MW}{RT} \quad (2.13)$$

der R er molar gasskonstant, $R = 8,314 \text{ J}/(\text{mol} \cdot \text{K})$ og T er temperaturen i K.

Innsetting av dette i formel (2.12) gir

$$j = \frac{2,76 \cdot 10^{-3} \cdot MW^{0,835} \cdot p_v \cdot \left(\frac{1}{MW} + \frac{1}{29} \right)^{0,25}}{T^{0,05}} \sqrt{\frac{v_x}{\Delta x \cdot p}} \quad (2.14)$$

j er fordampningen i g/sekund pr m^2 , p_v er metningsdamptrykket for stoffet i Pa, T er temperatur i K, v_x er lufthastigheten i m/s, Δx er lengden av væskedammen i luftstrømmens retning (i m) og p er lufttrykket i Pa.

Størrelsen på væskedammen kommer inn ved at konsentrasjonen i luften øker når luften passerer over flaten, og det forutsettes laminær luftstrøm. Formelen er funnet å stemme bra med forsøk med lufthastighet høyere enn 0,5 m/s. Total avdampning fra en væskeflate finnes ved å multiplisere med arealet. Antar man at arealet er $b \cdot \Delta x$, får man:

$$J = b \cdot \frac{2.76 \cdot 10^{-3} \cdot MW^{0.835} \cdot p_v \cdot (1/MW + 1/29)^{0.25}}{T^{0.05}} \sqrt{\frac{v}{p} \cdot \Delta x} \quad (2.15)$$

der J er total avdamping.

2.1.3 Empirisk formel

En annen modell som det refereres til i (2) er basert på empiriske forsøk med en rekke forskjellige stoffer. Denne gir avdamping pr cm^2 som:

$$j = 1,47 \cdot 10^{-6} \cdot MW \cdot p_0 \cdot v_x^{0,625} \quad (2.16)$$

der p_0 er metningsdamptrykket i atmosfærer, v er lufthastigheten i cm/s og MW er molekylvekten. For lettere å kunne sammenligne med de øvrige formlene kan dette også skrives

$$j = 2,15 \cdot 10^{-5} \cdot C_0 \cdot T \cdot v_x^{0,625} \quad (2.17)$$

Der v er i m/s og C_0 i g/m^3 .

2.1.4 Diffusjonskoeffisient

En tilnærmet formel for diffusjonskoeffisienten D_{AB} av en damp A i en gass B er gitt i (2).

$$D_{AB} = \frac{4,09 \cdot 10^{-5} T^{1,9} \sqrt{1/MW_B + 1/MW_A} \cdot (MW_A)^{-0,33}}{p} \quad (2.18)$$

der T er temperaturen i K, p er lufttrykket i atmosfærer og MW_A og MW_B er molekylvekten (i g/mol) av henholdsvis dampen som diffunderer og gassen den diffunderer i. For luft settes $MW_B=29$ g/mol. Her får D_{AB} dimensjonen cm^2/s . Omregnet til SI-enheter blir formelen:

$$D_{AB} = \frac{4,14 \cdot 10^{-4} T^{1,9} \sqrt{1/MW_B + 1/MW_A} \cdot (MW_A)^{-0,33}}{p} \quad (2.19)$$

hvor D_{AB} er i m^2/s og p i Pa.

En viktig faktor i flere av formlene er størrelsen $C_0 \cdot D$. Når man antar at dampen oppfører seg som en ideell gass er sammenhengen mellom metningskonsentrasjon (i g/m^3) og metningsdamptrykk (i Pa) gitt ved formel (2.13), og produktet $C_0 \cdot D$ kan da også skrives:

$$C_0 D = 4.98 \cdot 10^{-5} \cdot \frac{P_0}{p} \cdot T^{0,9} \sqrt{1/MW_B + 1/MW_A} \cdot (MW_A)^{0,67} \quad (2.20)$$

hvor $C_0 D$ blir gitt i $\text{g}/(\text{s} \cdot \text{m})$. Temperaturavhengigheten av p_0 er gitt ved:

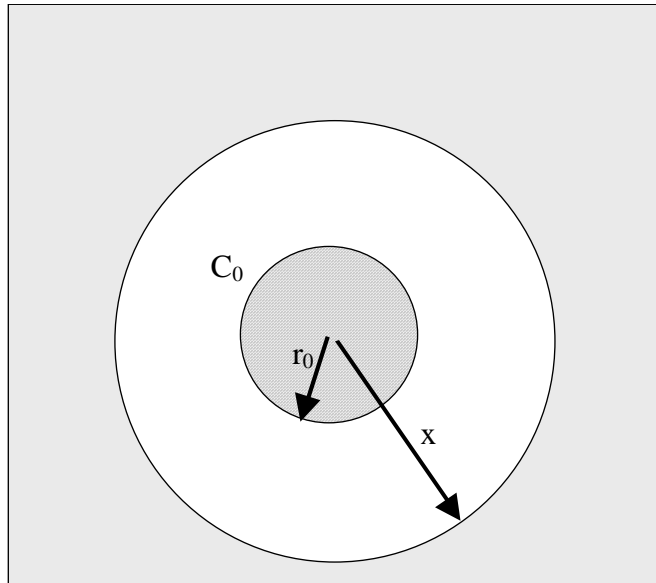
$$p_0(T) = P_0 \cdot e^{-\frac{E}{RT}} \quad (2.21)$$

der P_0 og E er konstanter og R er molar gasskonstant. Størrelsen E/R er typisk 5000 – 7000 K.

2.2 Fordampning av dråper

Ved spredning av væsker ved en eksplosjon eller ved hjelp av sprøyteutstyr vil noe av væske spres som dråper. Det er av interesse å finne hvordan en dråpe fordampes mens den faller ned. En tilnærmet beregning kan gjøres enkelt. En dråpe, i alle fall hvis den er tilstrekkelig liten til at

den holdes sammen av overflatespenningen i væsken, kan betraktes som en kuleflate. Forholdet blir da som vist i Figur 2.4.



Figur 2.4 Væskedråpe omgitt av luft.

Kula har en diameter r_0 , og konsentrasjonen ved kuleoverflaten er C_0 . Vi antar at transporten skjer ved diffusjon til en avstand x fra overflaten, og at transporten derfra foregår ved konveksjon (luftstrømning). Vi antar at konsentrasjonen i lufta i avstanden x fra sentrum av kula er konstant lik C_x . Det antas videre at fordampningen er så liten at dråpens temperatur ikke påvirkes i vesentlig grad. Transporthastigheten i en avstand r fra sentrum av kula er da gitt ved ligning (2.22).

$$j = D \cdot \left(\frac{dC}{dr} \right) \quad (2.22)$$

der D er diffusjonskoeffisienten, og total transport vekk fra dråpen er gitt ved transporthastigheten multiplisert med arealet transporten foregår gjennom.

$$J = D \cdot \left(\frac{dC}{dr} \right) \cdot 4\pi \cdot r^2 \quad (2.23)$$

Så lenge transporten kun foregår ved diffusjon må total massestrøm være uavhengig av avstanden r , og under forutsetning av at diffusjonskoeffisienten D er uavhengig av

konsentrasjonen må $J = D \cdot \left(\frac{dC}{dr} \right) \cdot 4\pi \cdot r^2$ være uavhengig av r . Altså må

$$\frac{dC}{dr} \cdot r^2 = K \quad (2.24)$$

der K er en konstant uavhengig av r . Løsningen på ligning (2.24) er:

$$C(r) = \frac{K}{r} + A \quad (2.25)$$

der A er en konstant. Ved overflaten til dråpen, $r = r_0$, er dampkonsentrasjonen konstant lik metningskonsentrasjonen C_0 ved overflatens temperatur T , og $C(r) = C_0$, altså er $r_0 \cdot C_0 = K + A \cdot r_0$. Antar vi videre at konsentrasjonen i avstanden x er konstant lik C_x , får vi:

$$\boxed{\begin{aligned} C_0 &= \frac{K}{r_0} + A \\ C_x &= \frac{K}{r_0 + x} + A \end{aligned}} \quad (2.26)$$

De to ligningene (2.26) gir til sammen

$$K = (C_0 - C_x) / \left(\frac{1}{r_0} - \frac{1}{x}\right) = \frac{(C_0 - C_x) \cdot r_0 \cdot x}{x - r_0} \quad (2.27)$$

og

$$A = C_0 - \frac{(C_0 - C_x) \cdot x}{x - r_0} \quad (2.28)$$

slik at det fullstendige uttrykket for konsentrasjonen blir:

$$C(r) = \frac{(C_0 - C_x) \cdot r_0 \cdot x}{(x - r_0) \cdot r} + \frac{x \cdot C_x - r_0 \cdot C_0}{x - r_0} \quad (2.29)$$

Transporten fra dråpen blir da:

$$J = 4\pi r^2 \cdot D \cdot \frac{(C_0 - C_x) \cdot r_0 \cdot x}{(x - r_0) \cdot r^2} = 4\pi \cdot D \cdot \frac{(C_0 - C_x) \cdot r_0 \cdot x}{(x - r_0)} = 4\pi \cdot D \cdot \frac{(C_0 - C_x) \cdot r_0}{(1 - r_0/x)} \quad (2.30)$$

Et spesialtilfelle som er av interesse er $x \gg r_0$, som tilsvarer at transporten er diffusjonsbegrenset. Dette vil tilsvare dråper som beveger seg med samme hastighet som den omgivende luften, som f eks en aerosol¹. Da blir transporten:

$$J \approx 4\pi \cdot D \cdot (C_0 - C_x) \cdot r_0 \quad (2.31)$$

For spesialtilfellet med en enkelt stillestående dråpe i luft og ingen dampkonsentrasjon fra andre kilder (altså $C_x = 0$ og $x = \infty$) blir massestrømmen fra dråpen

$$J \approx 4\pi \cdot C_0 \cdot D \cdot r_0 \quad (2.32)$$

Dette vil også være en god tilnærming for avdampingen fra en dråpe som er så liten at fallhastigheten er ubetydelig, altså en aerosoldråpe. I ref (3) er gitt en noe mer komplisert formel hvor temperaturavhengigheten av diffusjonskoeffisienten er tatt i betraktning. For en dråpe av en lite flyktig substans kan det vises at denne formelen går over til formel (2.32). Formel (2.32) ser bort fra temperatursenkningen av dråpen på grunn av fordampningen. For en lite flyktig substans som en nervegass eller hudgass er denne ubetydelig. Formel (2.32) ser også bort fra vekselvirkning mellom dråper i en aerosol på grunn av at dampkonsentrasjonen da ikke vil være null i omgivelsen fordi de andre dråpene som fordampes vil skape damp. I dette tilfellet vil formel (2.30) eller (2.31) måtte komme til anvendelse.

Dersom man antar at i det dråpen beveger seg i forhold til lufta slik at transporten foregår ved diffusjon bare i et lag med tykkelse $\delta = x - r_0$, og så transporteres vekk med luftstrømmen, kan man med fordel skrive formel (2.30) som

¹ Med aerosol menes en samling partikler, væske eller fast stoff, hvor partikkelstørrelsen er så liten at fallhastigheten i den omgivende gassen er ubetydelig sammenlignet med gassens bevegelser. Partiklene vil da bevege seg sammen med gassen og oppføre seg som en gass.

$$J = 4\pi \cdot D \cdot r_0 \cdot (C_0 - C_x) \cdot \frac{r_0 + \delta}{\delta} = 4\pi \cdot D \cdot r_0 \cdot (C_0 - C_x) \cdot \left(1 + \frac{r_0}{\delta}\right) \quad (2.33)$$

Det vil altså bli en korreksjon i forhold til en stillestående dråpe med faktoren $1+r_0/\delta$, hvor δ er tykkelsen av et viskøst lag rundt den fallende dråpen.

2.2.1 Tidsforløpet av fordamning fra dråpe

Massetapet fra dråpen må være lik massestrømmen J , altså:

$$J = -\frac{dM}{dt} = -\frac{d}{dt} \left(\frac{4}{3} \pi \rho r_0^3 \right) = -4\pi \rho r_0^2 \cdot \frac{dr_0}{dt} \quad (2.34)$$

der M er massen av dråpen og ρ er tettheten av væsken i dråpen.

For spesialtilfellet gitt ved ligning (2.32) har man at $J = 4\pi \cdot C_0 \cdot D \cdot r_0$, og dette gir følgende ligning for r_0 :

$$r_0 \cdot \frac{dr_0}{dt} = -\frac{C_0 \cdot D}{\rho} \quad (2.35)$$

der r_0 er en funksjon av tiden.

Løsningen på ligning (2.35) er:

$$\boxed{r_0(t) = \alpha \cdot (\tau - t)^{1/2}} \quad (2.36)$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2C_0 D}{\rho}}, \text{ og } \tau = \frac{r_0^2 \rho}{2C_0 D} = \left(\frac{9}{2\pi^2}\right)^{1/3} \cdot \frac{\rho^{1/3}}{4 \cdot C_0 \cdot D} M_0^{2/3} = 0,19242 \cdot \frac{\rho^{1/3}}{C_0 D} \cdot M_0^{2/3}$$

τ er tiden dråpen bruker på å fordampe helt og M_0 er massen ved $t=0$.

Massen av dråpen som funksjon av tiden blir:

$$M = \frac{4}{3} \pi \alpha^3 \rho (\tau - t)^{3/2} \quad (2.37)$$

2.3 Fallende dråper

For dampkonsentrasjonen fra en utspreddning av dråper er det av interesse å se hvor langt de faller før de fordampes. Fallhastigheten v for en (liten) kule i et viskøst medium med laminær strømning er gitt ved Stokes lov som:

$$v = \frac{2ga^2(\rho - \rho_L)}{9\mu} \quad (2.38)$$

der g er tyngdens akselerasjon, a er radien av kulen, ρ er tettheten av kulen, ρ_L er tettheten av det omgivende mediet (her luft) og μ er dynamisk viskositet for det omgivende mediet. For en væskedråpe hvor fallhastigheten er så liten at massetapet bare er gitt ved diffusjon, vil tidsforløpet av radien tilnærmet være gitt ved ligning (2.36), og fallhastigheten som funksjon av tiden blir:

$$v = \frac{2g\rho}{9\mu} \alpha^2 (\tau - t) = \frac{4gC_0 D}{9\mu} (\tau - t) \quad (2.39)$$

der τ er definert i ligning (2.36).

Tilbakelagt strekning i løpet av tiden t fra utslippet er gitt ved

$$s = \int_0^t v d\tau = \frac{2gC_0D}{9\mu} t(2\tau - t) \quad (2.40)$$

Total fallhøyde blir nådd når hele dråpen har fordampet, altså ved $t=\tau$. Total fallhøyde h blir da

$$h = \frac{2gC_0D}{9\mu} \tau^2 = \frac{gr_0^4 \rho^2}{18C_0D\mu} \quad (2.41)$$

Ved å sette inn $r_0 = \left(\frac{3M_0}{4\pi\rho}\right)^{1/3}$ og forenkle uttrykket mest mulig kan fallhøyden før dråpen

fordamper fullstendig (fordampningshøyden) også skrives:

$$h = \frac{g\rho^{2/3}M_0^{4/3}}{8 \cdot 6^{2/3} \cdot \pi^{4/3} C_0D\mu} = 0,008228 \cdot \frac{g\rho^{2/3}M_0^{4/3}}{C_0D\mu} \quad (2.42)$$

Hvis utspreidningen skjer i lavere høyde enn fordampningshøyden vil falltiden t_f være gitt ved:

$$t_f = \tau - \sqrt{\tau^2 - \frac{9s\mu}{2gC_0D}} \quad (2.43)$$

der s er utspreidningshøyden. Radien av dråpen når den treffer underlaget er da

$$r_f = A\left(\tau^2 - \frac{9s\mu}{2gC_0D}\right)^{1/4} \quad (2.44)$$

og den mengden som deponeres på underlaget er gitt ved

$$M_D = \frac{4}{3}\pi A^3 \rho \left(\tau^2 - \frac{9s\mu}{2gC_0D}\right)^{3/4} \quad (2.45)$$

Beregningen ovenfor er tilnærmet. Det er sett bort fra reduksjon av fordampningen på grunn av varmetap fra dråpen og vekselvirkning med andre dråper, samt økning i fordampning på grunn av at dråpen faller gjennom luften og transporten vekk fra dråpen derfor blir større enn for en helt stillestående dråpe. Disse forholdene vil trekke i motsatt retning. Utledningen for fallhøyde og fallhastighet er bare gyldig ved lave Reynolds tall², i praksis for Reynolds tall lavere enn 1,

² Reynolds tall er en dimensjonsløs størrelse som angir forholdet mellom treghetskraftene og viskositetskraftene for bevegelser i et fluid.

Reynold tall kan skrives som $R_e = \frac{L \cdot v \cdot \rho_L}{\mu} = \frac{L \cdot v}{\eta}$ der L er en karakteristisk lengde for strukturen, v er

hastigheten, σ er tettheten av fluidet, μ er dynamisk viskositet og η er kinematisk viskositet ($\eta = \frac{\mu}{\rho_L}$). R_e er

viktig ved modellforsøk med strømming, da to skalerte strukturer med samme Reynolds tall men forskjellige dimensjoner oppfører seg likt. For en kule som beveger seg i et fluid er karakteristisk lengde L lik diameteren.

noe som vil tilsvare en diameter på ca 0,1 mm. For høyere Reynolds tall blir hastigheten lavere enn ligning (2.38) gir.

3 REGNEEKSEMPLER OG MÅLINGER

3.1 Sammenligning av modeller for fordampning fra åpne flater

Fire modeller med økende kompleksitet er beskrevet i avsnitt 2.1. Det antas en rektangulær væskedam med lengde l (i vindretningen) og bredde b (på tvers av vindretningen). I sine enkleste former kan formlene for avdampningshastigheten (J) fra en flate skrives:

A. (FFI1, formel (2.4): $J = D \frac{C_0(T)}{\delta} \cdot b \cdot l$ Formel

der D er diffusjonskoeffisienten, $C_0(T)$ er metningskonsentrasjonen ved temperaturen T og δ er tykkelsen av luftlaget over overflaten der transporten foregår ved diffusjon.

B. (FFI2, formel (2.9): $J = C_0 \cdot (1 - e^{-\frac{l \cdot D}{\delta \cdot h \cdot v}}) \cdot b \cdot h \cdot v$

der h er en antatt tykkelse av luftlaget som transporterer bort dampen.

C. (FOI, formel (2.5 med $C(z)=0$): $J = \frac{C_0(T)}{r_a + r_m} \cdot b \cdot l$

der r_a og r_m er transportmotstanden som skyldes henholdsvis diffusjon og turbulens.

D. (Hummel & Al, formel (2.11 og (2.1):

$$J = 2 \cdot C_0 \cdot b \cdot \sqrt{\frac{D \cdot v_x \cdot l}{\pi}} = 2,30 \cdot 10^{-2} \cdot C_0 \cdot T^{0,95} \left(\frac{1}{MW} + \frac{1}{29} \right)^{0,25} \cdot b \cdot \sqrt{\frac{v_x \cdot MW^{-0,33} \cdot l}{p}}$$

Her er p atmosfæretrykket som med god tilnærming kan settes til 10^5 Pa ved havflaten, slik at formel D med god tilnærming for de fleste praktiske formål kan skrives:

$$J = 7,25 \cdot 10^{-5} \cdot C_0 \cdot T^{0,95} \left(\frac{1}{MW} + \frac{1}{29} \right)^{0,25} \cdot b \cdot MW^{-0,165} \sqrt{v_x \cdot l}, \text{ der } v_x \text{ er lufthastigheten.}$$

E. (Braun, formel (2.17): $J = 2,15 \cdot 10^{-5} \cdot C_0 \cdot T \cdot v_x^{0,625} \cdot b \cdot l$

Enheter ved bruk av formlene:

For formel A, B, C og første ledd i formel D gjelder at bruken av enheter er valgfri så lenge dette gjøres konsistent, dvs at alle lengder måles med samme enhet. Hvis lengdeenheten som velges er meter (m) må diffusjonskoeffisienten D gis i m^2/tid og metningskonsentrasjonen C_0 gis i masse/m^3 . Dersom man for eksempel velger gram (g) som enhet for masse og sekund (s) som enhet for tid vil avdampningshastigheten J få enheten g/s.

For siste ledd i formel D og formel E gjelder ikke dette da de numeriske konstantene ikke er dimensjonsløse. Her må det benyttes g/m^3 som enhet for C_0 , meter for lengde, m/s for hastighet, Pascal (N/m^2) for trykk og g/mol for molekylvekt. Avdampningshastigheten J får da enheten g/s. Temperaturen T gis i Kelvin (K).

For å sammenligne de forskjellige formlene kan man merke seg at for alle er fordampningen proporsjonal med metningskonsentrasjonen. Denne er sterkt temperaturavhengig, slik at i alle tilfeller er temperaturen en viktig parameter.

I formel A, B og D inngår videre diffusjonskoeffisienten for dampen i luft. Denne kan måles eller beregnes tilnærmet, men ser ut til å variere lite med stofftype og temperatur. Formel D er også gitt på en form som inkluderer en tilnærmet formel for diffusjonskoeffisienten.

I formel A og B inngår videre en diffusjonslengde δ som er å betrakte som tykkelsen av et (tilnærmet) stillestående, viskøst luftlag nær overflaten hvor transporten av stoff foregår ved diffusjon. Størrelsen på parameteren δ er sannsynligvis primært avhengig av lufthastigheten og overflatens beskaffenhet. Formel C inneholder to parametere med verdier som settes ut fra det aktuelle scenariet. Disse kan betraktes som å inneholde både diffusjonskoeffisienten D og diffusjonslengden δ . For parameterne i formel C opereres det med en verdi av overføringshastigheten $1/(r_a+r_m)$ på $7 \cdot 10^{-4}$ m/s innendørs og rundt 10^{-2} m/s utendørs (1). Formel D og E inneholder lufthastigheten som en parameter, mens formel B inneholder både lufthastigheten og en størrelse "h" som angir tykkelsen på et "transportsjikt" med fullstendig blanding over diffusjonslaget. Formel D er utledet med den antagelsen at luftbevegelsen er laminær.

3.1.1 Diffusjonslengden δ

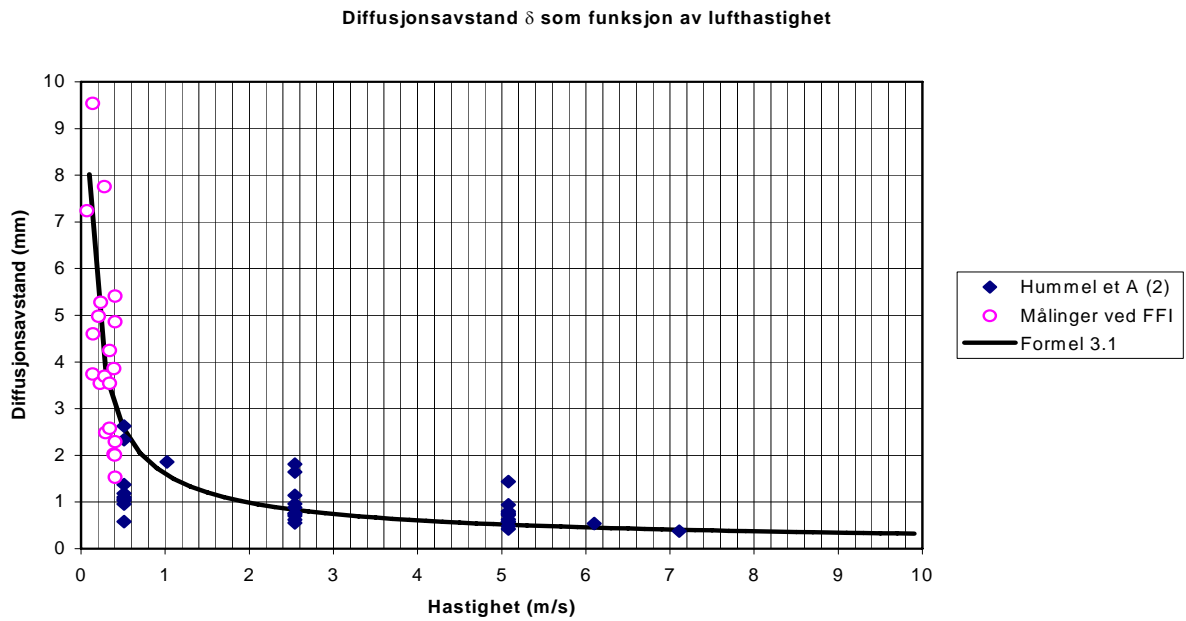
Diffusjonslengden δ som inngår i formlene A og B kan bestemmes ved målinger. Det inverse av diffusjonslengden er avdampingshastighet pr flate dividert med produktet av metningskonsentrasjon og diffusjonskoeffisient. Dette er i det følgende kalt normert avdamping, og det er naturlig å bruke denne størrelsen ved sammenligning av forskjellige målinger. I Appendix A.3 er detaljer ved dette beskrevet.

Noen målinger i hastighetsområdet 0,05 m/s til 0,4 m/s er utført ved FFI. Disse er utført på små flater (55mm x 23 mm), og det kan se ut til at dette introduserer en feil, spesielt ved lave hastigheter (se appendix A.4). Det er derfor forsøkt å korrigere for denne feilen, og sammen med målinger i hastighetsområdet 0,5 til 7 m/s publisert i (2) er beste estimat for δ funnet å være:

$$\delta = 1.6 \cdot 10^{-3} \cdot v_x^{-0.7} \quad (3.1)$$

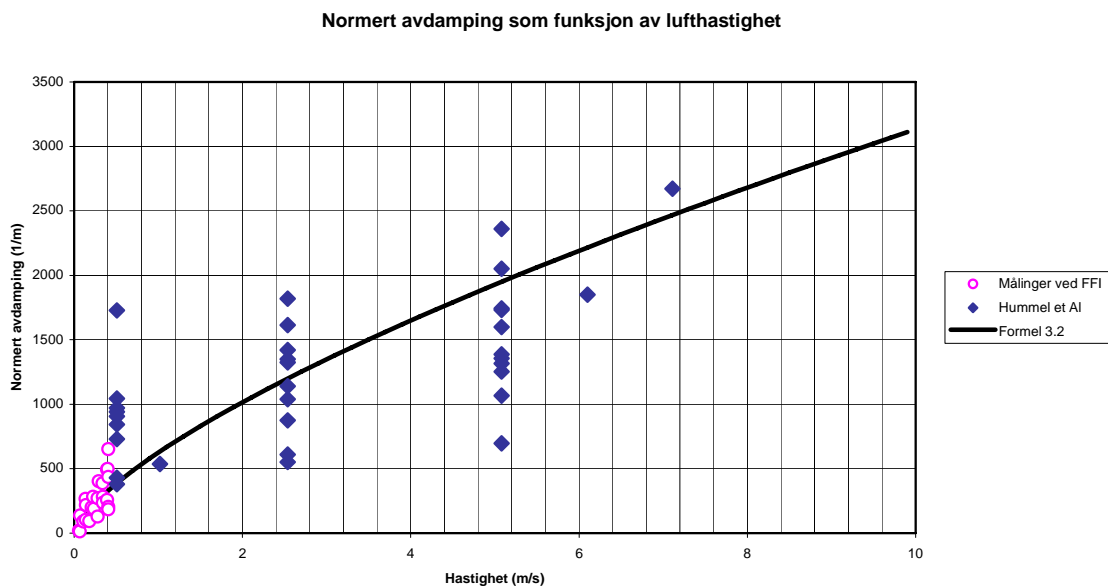
δ er i m, mens v_x er i m/s. Dette gir en hastighetsavhengighet av fordampningen proporsjonal med $v_x^{0.7}$, som er nær hastighetsavhengigheten i den empiriske formel E. Imidlertid er det stor spredningen i de målte data som ligning (3.1) bygger på, slik at tallene i ligningen bare må betraktes som veiledende. Normert avdamping blir

$$q = 625 \cdot v_x^{0.7} \quad (3.2)$$



Figur 3.1 Sammenligning mellom beregnet og målt δ .

Som Figur 3.1 viser gir formel (3.1) relativt godt samsvar over hele hastighetsområde, når FFI-målingene er korrigert for størrelsen av flaten. Tilsvarende blir normert avdampning som vist i Figur 3.2



Figur 3.2 Målt og beregnet normert avdampning som funksjon av lufthastighet.

3.1.2 Sammenlignende beregninger

I avsnitt 3.1.3 til 3.1.5 er det vist noen sammenlignende beregninger for de forskjellige modellene for overflatefordampning. Beregningene er utført for sarin, og følgende parametre er benyttet:

Molekylvekt (MW): 140,1 g/mol

Metningsdamptrykk p gitt ved: $p = \exp(-a/T + b)$, der $a = 5673.42$ K og $b = 24.987$.

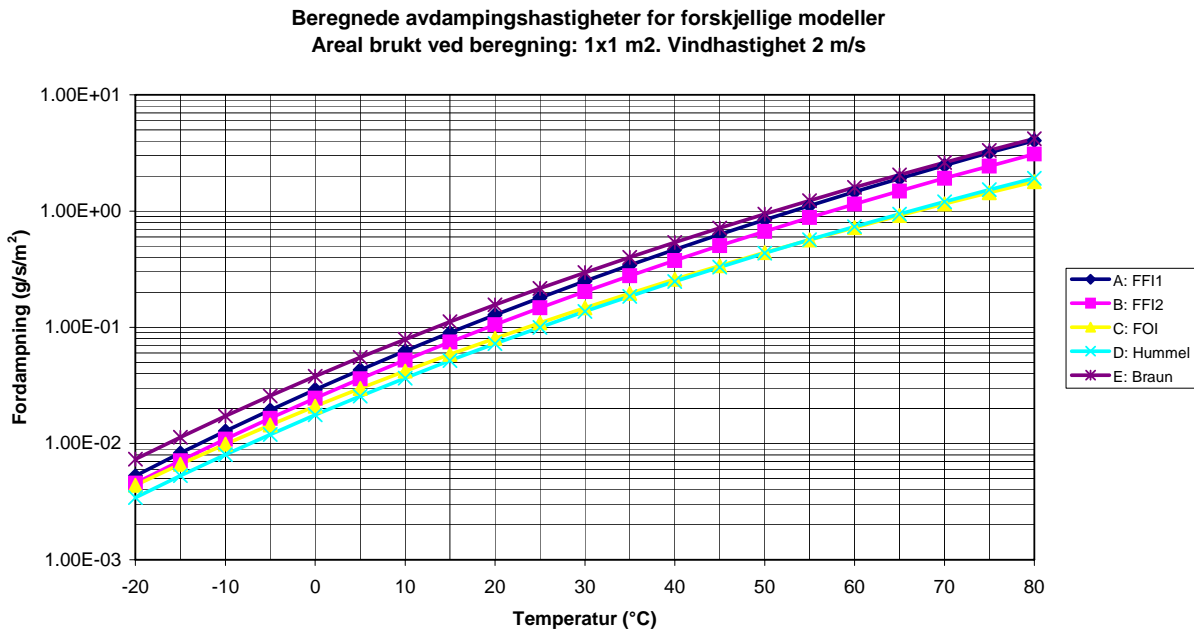
Diffusjonskoeffisient gitt ved formel (2.19).

Diffusjonsavstand δ gitt ved formel (3.1).

For formel C settes overføringshastigheten $1/(r_a+r_m)$ til $7 \cdot 10^{-4}$ m/s for lufthastighet 0,5 – 1,9 m/s, 10^{-3} m/s for lufthastighet 2 – 4,9 m/s og 10^{-2} m/s for lufthastighet >5 m/s.

3.1.3 Betydningen av temperaturen.

I Figur 3.3 er vist avdampning som funksjon av temperatur.

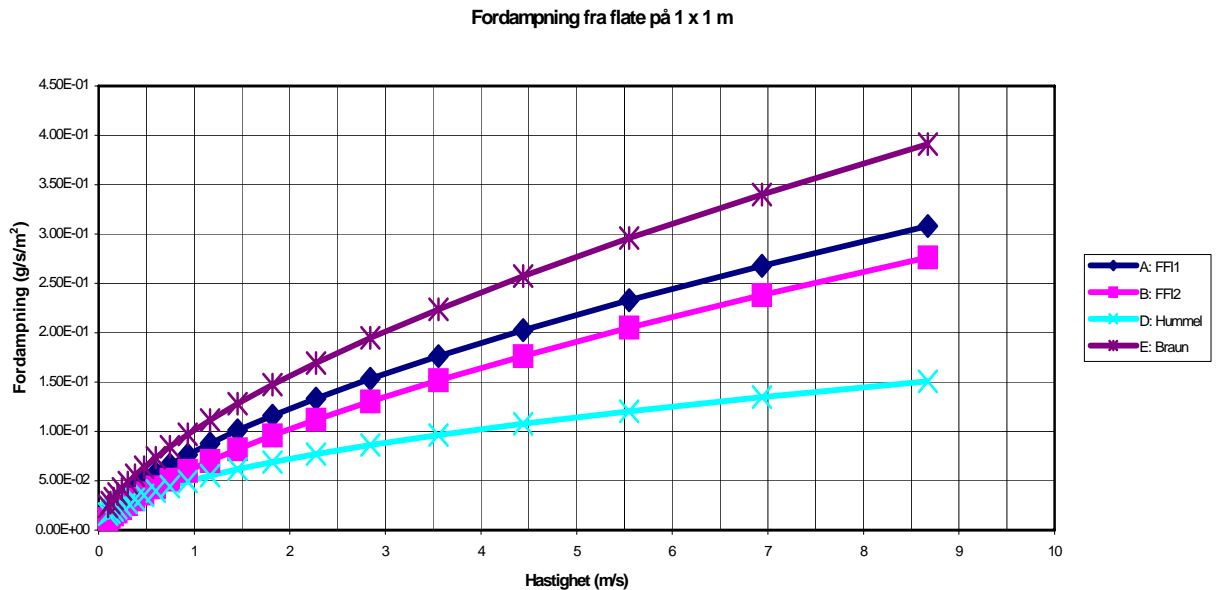


Figur 3.3 Avdampning fra fri overflate med sarin som funksjon av temperatur. Beregningene er foretatt for en overflate på 1 x 1 m. For formel B er parameteren $h=0,01$ m. For formel C er overføringshastigheten satt til 0,005 m/s.

Som Figur 3.3 viser gir alle formlene avdampingshastigheter som ligger nær hverandre, og naturlig nok er temperaturavhengigheten den samme, siden avdampingen hovedsakelig er bestemt av damptrykket.

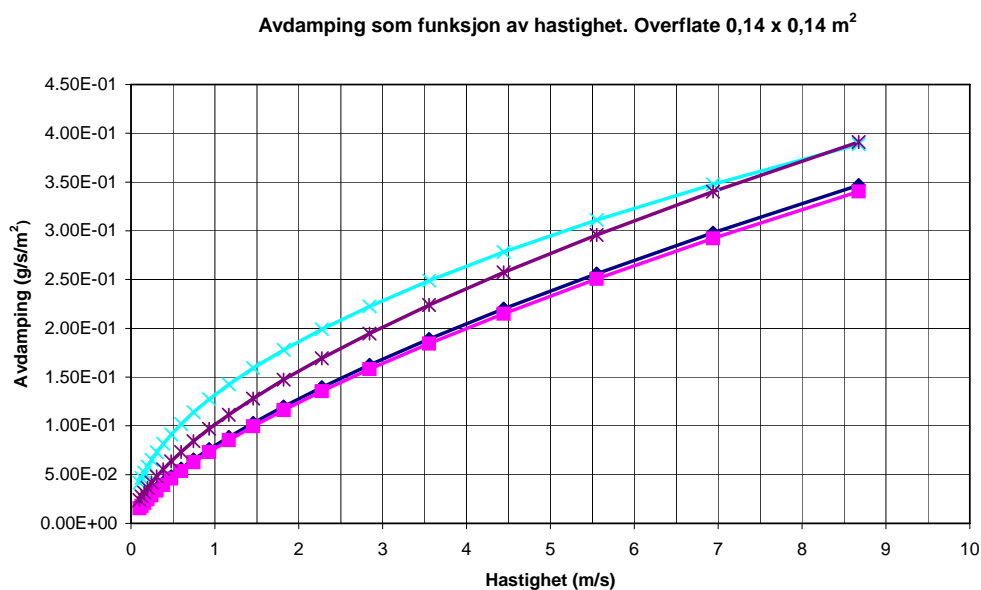
3.1.4 Betydning av lufthastighet

Avhengigheten av lufthastigheten er vist i Figur 3.4.



Figur 3.4 Avdamping som funksjon av lufthastighet. Temperatur 20 °C, overflate 1x1 m. Beregninger for formel C er ikke tatt med her da den ikke er avhengig av lufthastigheten.

Det synes noe overraskende at det er stor forskjell mellom resultatene ved bruk av formel E og de andre. Spesielt er det overraskende at det er stor forskjell mellom D og E, da det i ref (2) er vist en sammenligning mellom disse og målte verdier hvor samsvaret er meget godt, og hvor modellene gir praktisk talt samme resultatet. Imidlertid er disse målingene og beregningene gjort med en overflate på bare 0,14 x 0,14 m². Lengden på overflaten inngår i formel B og D, og i formel D er avdamping pr flateenhet omvendt proporsjonal med kvadratroten av lengden på flaten. For sammenligningens skyld er det derfor også utført en beregning med en overflate på 0,14x0,14 m². Resultatet er vist i Figur 3.5.

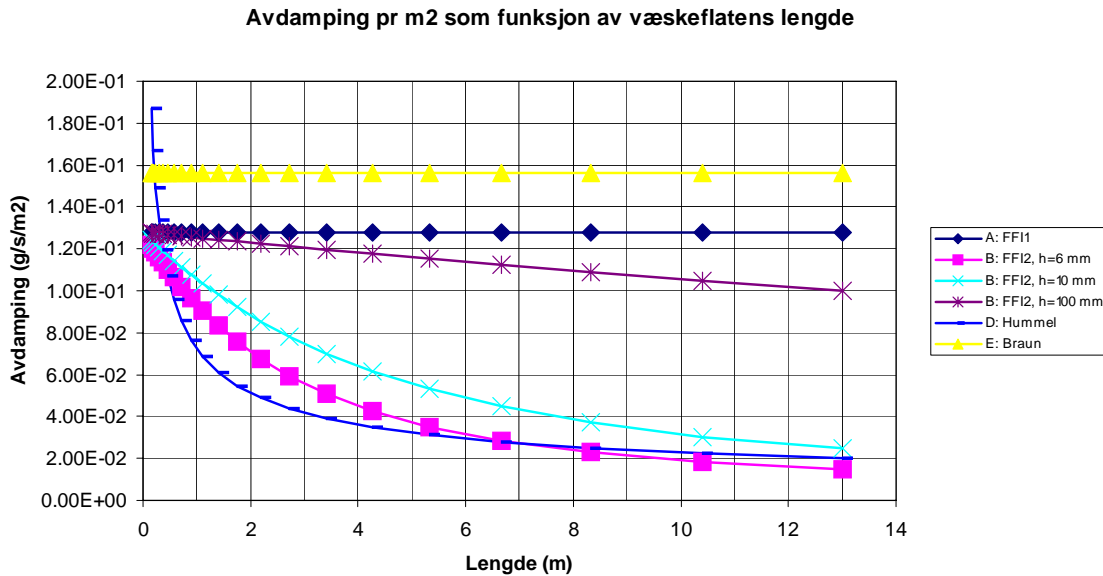


Figur 3.5 Avdamping fra flate på 0.14 x 0.14 m².

Her faller forløpene beregnet med formel D og E nesten sammen, men formel A og B gir lavere avdamping enn de andre.

3.1.5 Fordampning som funksjon av lengden på væskedammen

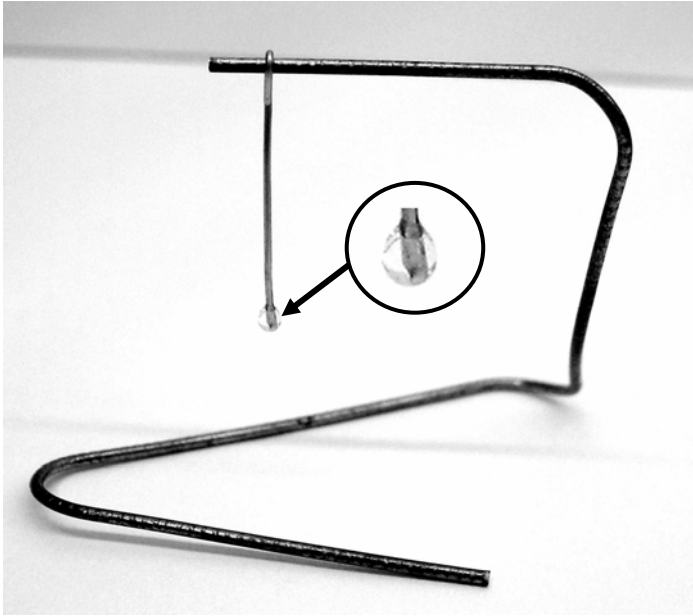
To av formlene (B og D) gir en spesifikk avdampning som er avhengig av lengden på væskedammen. Figur 3.6 viser at formel D, sammen med formel B med små verdier for parameteren h , gir sterk avhengighet av lengden på væskeflaten. Man bør undersøke hvor relevant dette er i praksis, hvor luftstrømmen neppe er fullstendig laminær. Spesielt bør man merke seg at for at formel B skal gi tilnærmet samme resultat som formel D, må $h < 100\text{mm}$. Dette kan synes urealistisk i praksis, muligens med unntak av spredning i meget trange ventilasjonskanaler, hvor utbredningen av luftstrømmen i transversal retning er fysisk begrenset.



Figur 3.6 Fordampningshastighet som funksjon av lengde på væskedam. Lufthastighet 2 m/s. For formel B er det benyttet tre forskjellige verdier for parameteren h .

3.2 Fordampning fra dråper

Som en kontroll av utledningen av uttrykket for fordampning fra dråper ble det utført noen enkle forsøk med en dråpe hengende fra en tråd. Denne ble plassert i en vekt og vekten ble avlest med jevne mellomrom som funksjon av tiden. Oppsettet er som vist i Figur 3.7.



Figur 3.7 Stativ med dråpe av tetrakloretylen.

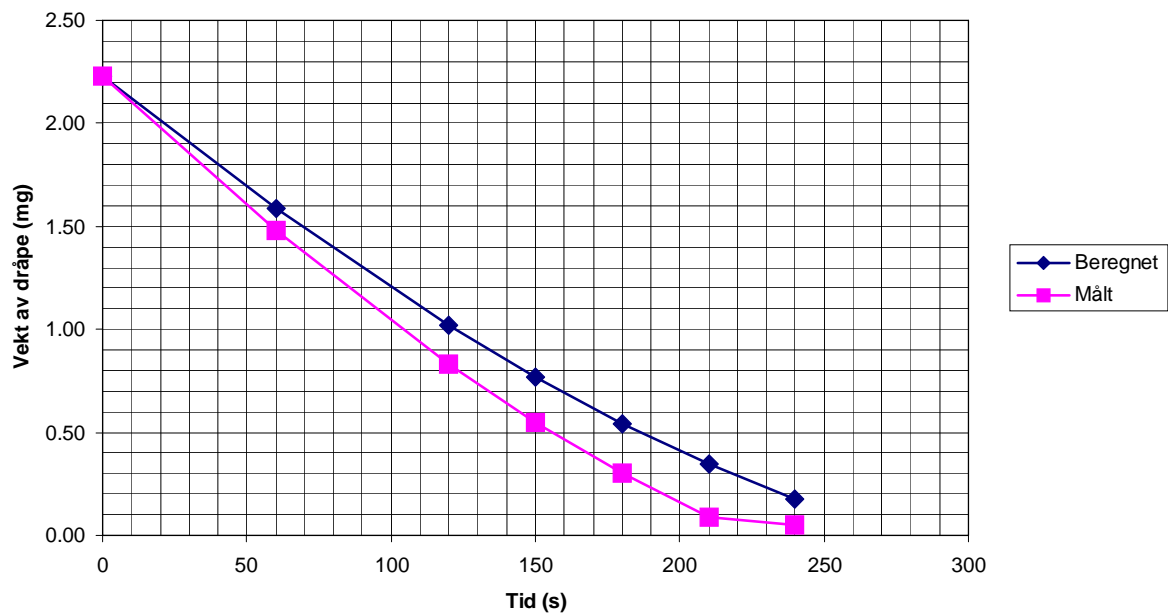
Følgende stoffer ble brukt.

Isopropanol

Tetrakloretylen

Metylsalicylat (MS)

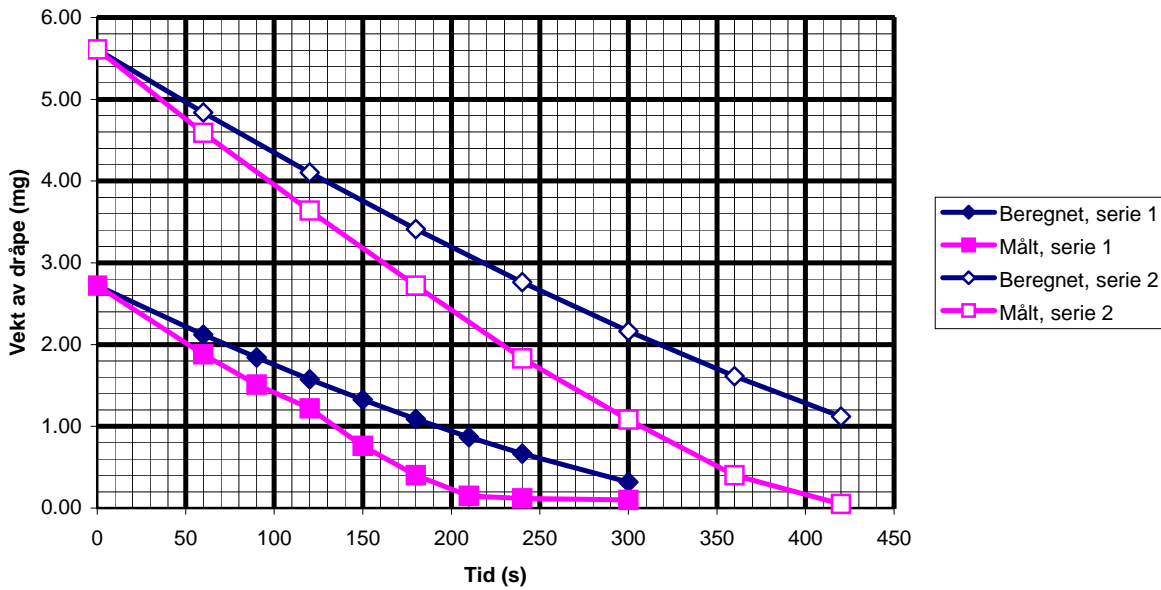
Fordampning av dråpe av isopropanol



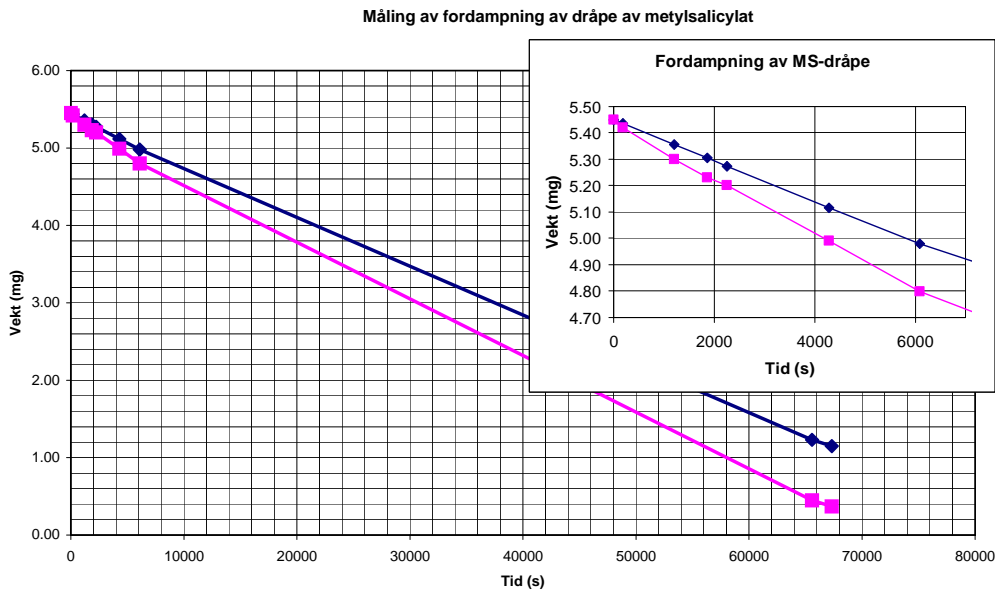
Vekten som funksjon av tid ble beregnet ut fra formel (2.37).

Figur 3.8 Fordampning av fritthengende dråpe isopropanol.

Fordampning av dråpe av tetrakloretylen, to måleserier



Figur 3.9 Fordampning av fritthengende dråpe tetrakloretylen. To måleserier med forskjellig dråpestørrelse.



Figur 3.10 Fordampning av dråpe av metylsalicylat. Det lange oppholdet i målingene skyldes at vektene ble avlest manuelt, og forsøket gikk over to arbeidsdager. Det lille diagrammet viser forløpet første dag av forsøket.

Ved alle forsøkene var målt avdampning noe høyere enn beregnet, men forskjellen er ikke større enn at man kan anta at teorien gir en rimelig forutsigelse av fordampningshastigheten.

3.3 Fordampning og deponering fra fallende dråper

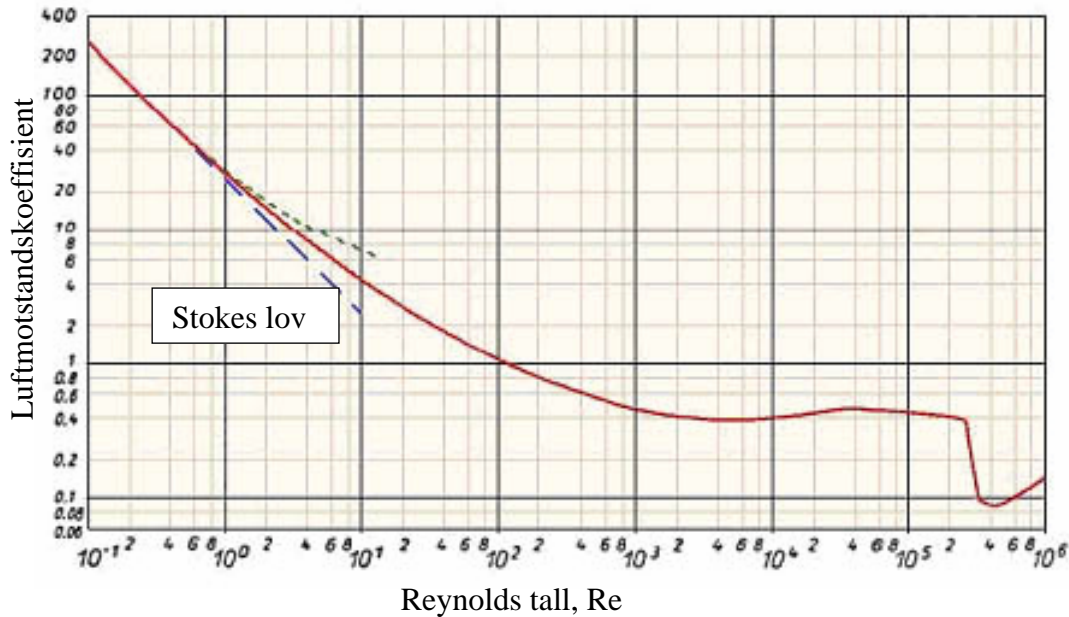
En aerosol består av partikler som er så små at de beveger seg med lufta. For meget små dråper vil fallhastigheten være gitt ved Stokes lov (formel (2.38)). Dette er imidlertid ikke generelt

gyldig. Generelt er luftmotstanden F_m for et legeme gitt ved (6):

$$\underline{F}_m = -\frac{1}{2} \rho_L S C_D v \cdot v \quad (3.3)$$

der ρ_L er luftens tetthet, S er tverrsnittsarealet av legemet vinkelrett på fartsretningen og v er hastigheten. C_D er luftmotstandskoeffisienten som er avhengig av legemets form og hastighet. Generelt kan man skrive C_D som en funksjon av Reynolds tall (se fotnote 2 side 16).

Luftmotstandskoeffisienten for en kuleformet gjenstand som funksjon av Reynolds tall er vist i Figur 3.11 som er gjengitt fra (8).



Figur 3.11 Luftmotstandskoeffisient for kule som funksjon av Reynolds tall. Det plutselige fallet ved $Re \approx 3 \cdot 10^5$ skyldes at luftstrømmen rundt kula går over til å bli turbulent. Figuren er gjengitt fra (8)

En god tilnærming i området $0 < Re < 1000$ er (8):

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0,15 Re^{0,678}) \quad (3.4)$$

For små verdier av Re blir $C_D \approx \frac{24}{Re}$, og innsatt i ligning (3.3) gir dette Stokes lov. For en

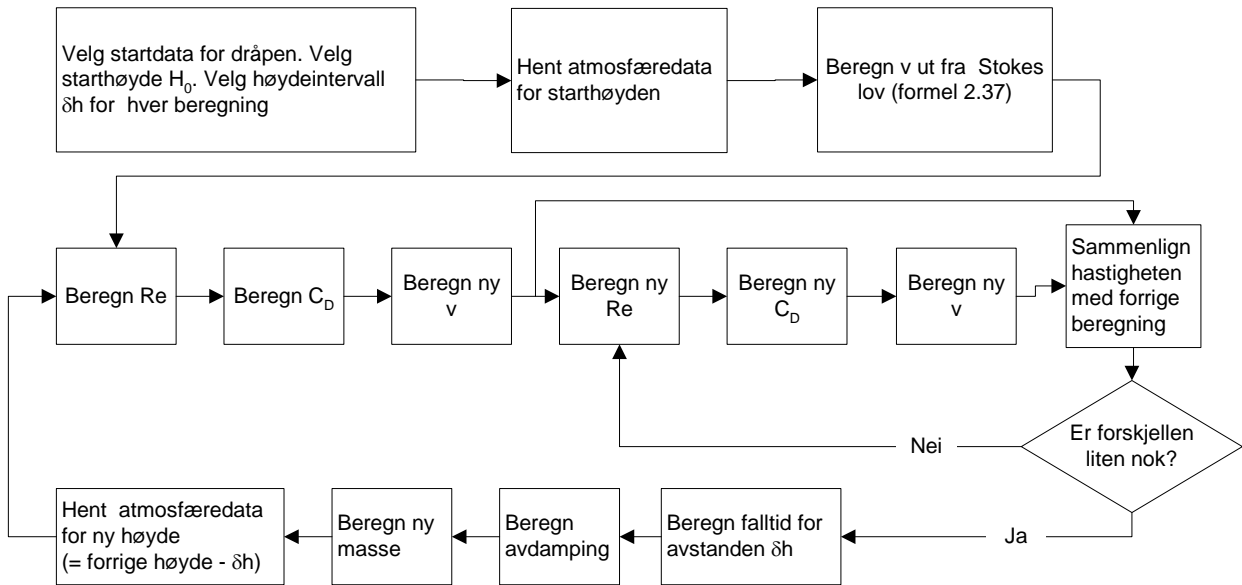
fallende dråpe som har nådd sin terminalhastighet er luftmotstanden lik vekten av kula,

$$F_m = \frac{4}{3} \pi r^3 \rho g, \text{ der } r \text{ er radien, } \rho \text{ er tettheten av det kuleformede legemet og } g \text{ er tyngdens}$$

akselerasjon. Innsatt i ligning (3.3) gir dette følgende uttrykk for fallhastigheten:

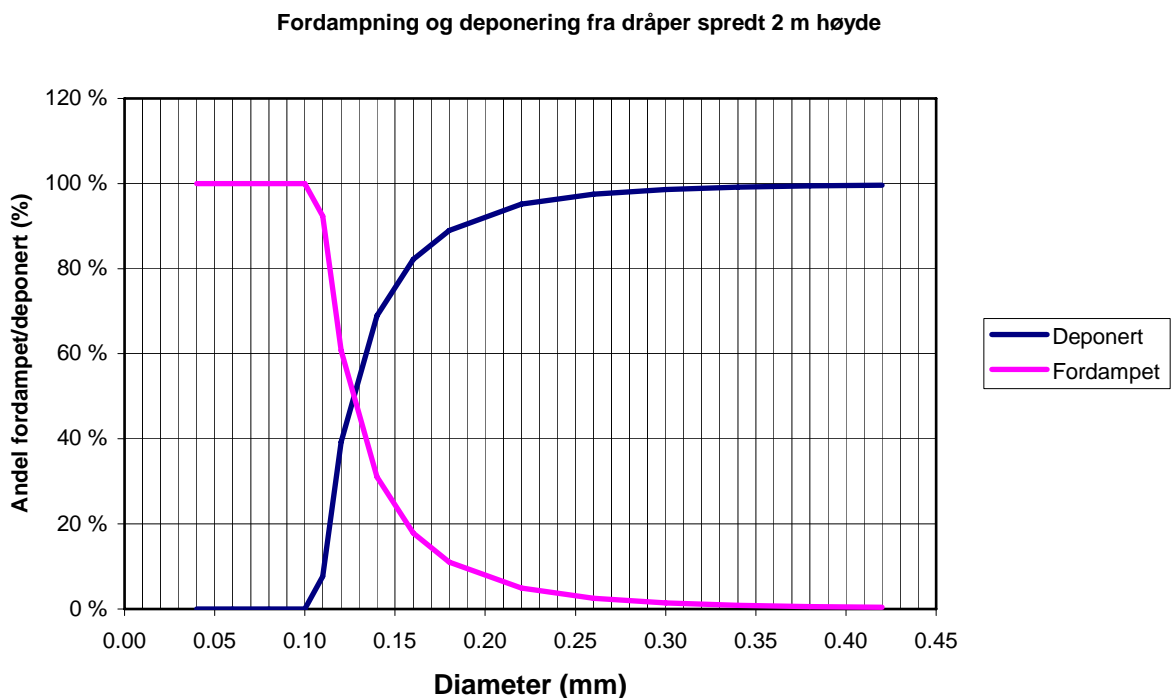
$$v = \sqrt{\frac{8r\rho g}{3\rho_L C_D}} = \sqrt{\frac{r\rho g Re}{9\rho_L (1 + 0,15 Re^{0,678})}} \quad (3.5)$$

Generelt må ligning (3.5) løses ved iterasjon, siden hastigheten v inngår i uttrykket for Re . Fremgangsmåten blir som vist i Figur 3.12:



Figur 3.12 Flytskjema for beregninger av fallende dråpe

Da iterasjonsprosessen konvergerer raskt kunne flytskjemaet lett implementeres i Excel. Resultatet for en starthøyde på 2 m er vist i Figur 3.13. Dette er en situasjon som forekommer ved spredning fra en utplassert aerosolgenerator eller ved sprengning av en beholder med væske. Det siste tilfellet vil imidlertid være mer komplisert, da de enkelte dråpene i dette tilfellet ikke



vil ha null utgangshastighet.

Figur 3.13 Fordampet og deponert mengde ved spredning av sarin som en aerosol. Spredningshøyde 2 m, temperatur 20 °C.

Som Figur 3.13 viser vil dråper mindre enn ca 0,1 mm fordampe totalt, mens større dråper helt eller delvis deponeres på underlaget.

3.3.1 Spredning fra stor høyde

En problemstilling som har dukket opp er om en sprengning av et missil med C-stridsmiddel i stor høyde kan føre til at dråper faller ned på bakken uten å fordampe på veien. Noen enkle beregninger er utført for å se om dette kan være mulig. Det er her benyttet data for atmosfærens egenskaper tatt fra (7). Dataene er vist i Tabell 3.1. Ved beregningene er

Høyde (km)	Temperatur T (K)	Temperatur t (°C)	Luftrykk p (kPa)	Tetthet σ (kg/m ³)	Dynamisk viskositet μ (N·s/m ²)	Kinematisk viskositet η (m ² /s)
10	223	-50	25.6	0.40	$1.46 \cdot 10^{-5}$	$3.65 \cdot 10^{-5}$
9	230	-43	30.8	0.47	$1.49 \cdot 10^{-5}$	$3.17 \cdot 10^{-5}$
8	236	-37	35.7	0.53	$1.53 \cdot 10^{-5}$	$2.89 \cdot 10^{-5}$
7	243	-30	41.1	0.59	$1.56 \cdot 10^{-5}$	$2.64 \cdot 10^{-5}$
6	249	-24	47.2	0.66	$1.60 \cdot 10^{-5}$	$2.42 \cdot 10^{-5}$
5	256	-17	54.0	0.74	$1.63 \cdot 10^{-5}$	$2.20 \cdot 10^{-5}$
4	262	-11	61.7	0.82	$1.66 \cdot 10^{-5}$	$2.02 \cdot 10^{-5}$
3	269	-4	70.1	0.91	$1.69 \cdot 10^{-5}$	$1.86 \cdot 10^{-5}$
2	275	2	79.5	1.01	$1.73 \cdot 10^{-5}$	$1.71 \cdot 10^{-5}$
1	282	9	89.9	1.11	$1.76 \cdot 10^{-5}$	$1.59 \cdot 10^{-5}$
0	288	15	101	1.22	$1.79 \cdot 10^{-5}$	$1.47 \cdot 10^{-5}$

Tabell 3.1 Egenskaper til standard US atmosfære.

Noen beregninger er vist nedenfor. For en fallende dråpe er det neppe riktig å anta at transporten av damp fra dråpen foregår kun ved diffusjon til uendelig avstand. Derfor er formel (2.33) benyttet for beregning av fordampningen, $J = 4\pi \cdot D \cdot r_0 \cdot (C_0 - C_x) \cdot (1 + \frac{r_0}{\delta})$. Basert på målinger med sennepegass er størrelsen r_0/δ er i (9) angitt til

$$\frac{r_0}{\delta} = 180 \cdot \sqrt{r \cdot v} \quad (3.6)$$

der r er radien i m og v er hastighet i m/s.

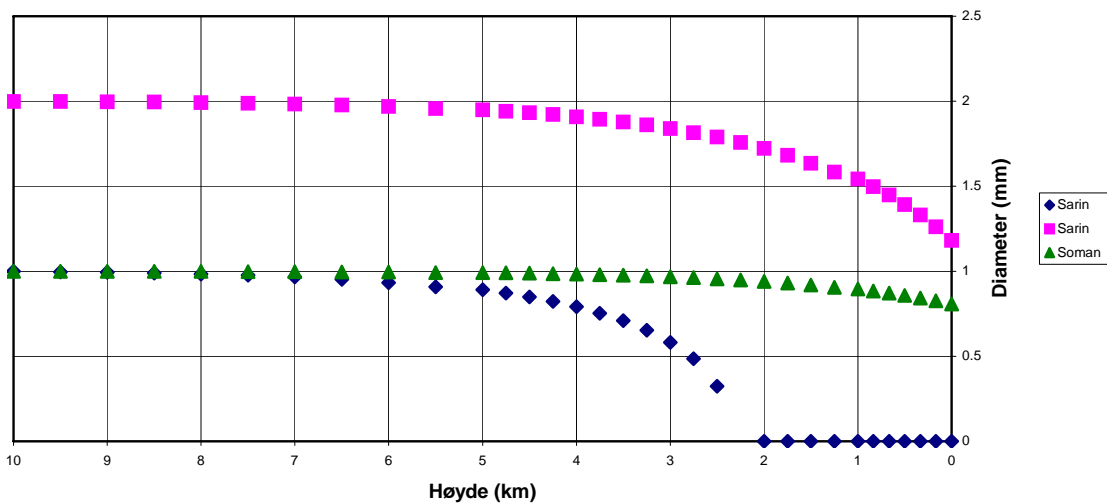
I (10) er et tilsvarende uttrykk

$$\frac{r_0}{\delta} = 0.3 \cdot \text{Re}^{1/2} \cdot \left(\frac{\mu}{\rho_L \cdot D} \right)^{1/3} \quad (3.7)$$

Re er Reynolds tall og det dimensjonsløse tallet $\mu/(\rho_L \cdot D)$ kalles Schmidt-tallet, Sc.

Forsøk utført ved FFI samsvarer rimelig godt med både formel (3.6) og formel (3.7), men ser ut til å stemme litt bedre med (3.7), og denne er derfor benyttet ved beregningene. Disse forsøkene vil bli beskrevet i en egen rapport.

Diameter for fallende dråper fra stor høyde



Figur 3.14 Fallende dråper av sarin og soman.

Som Figur 3.14 viser, vil hele sarindråpen fordampe hvis den er mindre enn 1 mm i diameter, mens noe væske vil nå ned til bakken hvis dråpen har en diameter på 2 mm ved starten.

For soman vil mye av væsken kunne nå bakken også om dråen starter med en diameter 1 mm. Her er det imidlertid en rekke usikkerhetsfaktorer, og følgende spørsmål må besvares før man kan trekke en endelig konklusjon:

- Hvor store vil dråpene bli når en beholder med væske sprenges?
- Hvor stor kan en fallende dråpe være før den splittes i mindre dråper?

Inntil disse spørsmålene er besvart kan man bare si at det ikke kan utelukkes at det å skyte ned et innkommende missil kan vise seg å være en dårlig idé, fordi man da bare oppnår å få stridsmidlet spredt over et større område slik at flere personer rammes.

4 OPPSUMMERING

Det er foretatt teoretiske beregninger ved hjelp av en enkel modell av avdampning fra væskeoverflater og dråper i luft. Beregningene er sammenlignet med publiserte data. Beregningene er til dels underbygget med enkle målinger. De viktigste resultatene er oppsummert nedenfor

4.1 Fordampning fra åpne flater

Teoretiske beregninger understøttet av målinger er foretatt for fordampning fra åpne væskeflater. En praktisk brukbar formel for å beregne avdampningen fra en fri væskeflate ser ut til å være:

$$Q = D \frac{C_0(T)}{\delta} \cdot b \cdot l = 625 \cdot v_x^{0.7} \cdot D \cdot C_0 \cdot A \quad (4.1)$$

der D er diffusjonskoeffisienten, C_0 er metningsdampptrykket, v_x er gjennomsnittlig lufthastighet (i m/s) og A er arealet av væskeoverflaten. For små flater, typisk spredte væskedråper, kan det tenkes at fordampningen vil være større, særlig ved lave vindhastigheter. Dette kan være aktuelt f eks ved en terrorhandling hvor det sprenges eller på annen måte spres en væske som dråper.

Det er ikke undersøkt hvordan turbulent luftstrøm vil påvirke dette. Imidlertid forutsetter alle de teoretiske beregningene at det kun er strømningsmønsteret nær overflaten (i avstander opp til noe få mm) som har betydning, og ved overflaten er grensebetingelsene at lufthastigheten null, både parallelt med (på grunn av viskøs friksjon) og normalt på (fordi overflaten utgjør en barriere for luftbevegelse i den retningen) overflaten. Disse betingelsene vil være oppfylt også om luftbevegelsen i større avstand fra overflaten er turbulent. Turbulensen vil bidra til en større vertikal transport av damp, men man har også i utledningene forutsatt at all damp som diffunderer til en avstand δ fra overflaten effektivt transporteres bort. Det er derfor mulig at turbulens vil ha liten betydning, og at man i formel (4.1) kan benytte gjennomsnittshastigheten for luftbevegelsen. Dette er imidlertid et punkt som bør undersøkes nærmere eksperimentelt.

4.2 Fordampning av dråper

Det er vist at for små dråper som har liten bevegelse relativt til omgivende luft er avdampningen gitt ved:

$$J \approx 4\pi \cdot C_0 \cdot D \cdot r_0 \quad (4.2)$$

Dette gir følgende tidsforløp av avdampningen:

$$r_0(t) = A \cdot (\tau - t)^{1/2}$$

$$\alpha = \sqrt{\frac{2C_0D}{\rho}}, \text{ og } \tau = \frac{r_0^2 \rho}{2C_0D} = \left(\frac{9}{2\pi^2}\right)^{1/3} \cdot \frac{\rho^{1/3}}{4 \cdot C_0 \cdot D} M_0^{2/3} = 0,19242 \cdot \frac{\rho^{1/3}}{C_0D} \cdot M_0^{2/3} \quad (4.3)$$

Massen av dråpen som funksjon av tid er gitt ved

$$M = \frac{4}{3} \pi \alpha^3 \rho (\tau - t)^{3/2} \quad (4.4)$$

Dette gir mulighet for å beregne både levetiden for en aerosoldråpe (τ), og hvor mye som fordamper og hvor mye som deponeres på underlaget etter en hendelse når spredningsmekanismen, stoffdata og meteorologiske data er kjent. For større dråper må man ta hensyn til fallhastigheten, som angitt i kapittel 3.3.1.

4.3 Videre arbeid

Det er nødvendig å foreta eksperimenter for å undersøke holdbarheten av de data og utledninger som er gitt ovenfor. Spesielt bør det foretas prøver med turbulent strømming, både utendørs og innendørs, og målinger med spredte stoffer på forskjellig underlag (jord, sand, betong, asfalt, vegetasjon). Mekanismer ved dråpedannelse ved forskjellige hendelser bør også undersøkes.

APPENDIKS

A MÅLINGER AV DIFFUSJONSKOEFFISIENTER OG DIFFUSJONSAVSTANDER

A.1 Fysikalske data brukt i beregningene

For de stoffene som er brukt ved målinger eller beregninger er følgende data brukt:

	2-propanol	Heptan	Tetraklor-etylen	Metyl-salicylat	1-octanol	DPM*	Sarin
Molekylvekt (g/mol)	60,09	100,21	165,83	152,15	130,23	148,23	140,1
Væsketetthet (kg/m ³)	785,1	683,8	1623	1174	827	951	1093
Temperatur (°C) ved damptrykk:							
1 mm Hg	-26.1	-34	-20.6	54	54	37	9.2
10 mm Hg	2.4	-2.1	13.8	95.3	88.3	78,6	45.7
40 mm Hg	23.8	22.3	40.1	126.2	115.2	109	72.6
100 mm Hg	39.5	41.8	61.3	150	135.2	133	93
400 mm Hg	67.8	78	100	197,5	173.8	174	129
760 mm Hg	82.5	98.4	120.8	223,2	195.2	190	148
Konsentrasjon av mettet damp ved 21 °C (g/m ³)	108.9	110.9	132.2	0.857	0,549	2,74	17,3

Tabell A.1 Data for aktuelle stoffer. Data for sarin er tatt fra (4), de øvrige unntatt DPM fra (5). *DPM=di-propylenglykol mono-metyl-eter har omtrent samme fysikalske egenskaper som nervegassen soman. Damptrykkdata for DPM er tatt fra forskjellige kilder og kan være noe unøyaktige.

For beregning av damptrykket ved andre temperaturer er benyttet beste tilpasning til den teoretiske formelen $p = p_0 e^{-E/kT}$ innen det aktuelle temperaturområdet. For sarin er benyttet beregningsprogrammet som ligger inne i ref (4).

A.2 Diffusjonskoeffisienter



Diffusjonskoeffisienten kan i prinsippet bestemmes ved å måle dampen som strømmer gjennom

et rør med kjente dimensjoner når konsentrasjonsgradienten er kjent. Siden man her bare ønsket å kontrollere at det ikke var store avvik mellom formelverdiene og de målte verdiene ble dette gjort på en enkel måte.

Målekolber med lang hals (se bildet til venstre) ble fylt med de aktuelle væskene, plassert i avtrekkskap og veid med jevne mellomrom.

Diffusjonskoeffisienten ble så bestemt ut fra vekttapet, kjent metningskonsentrasjon for dampene og dimensjonene på halsen på kolbene ut fra uttrykket

$$D = \frac{J \cdot l}{C_0 \cdot A}, \text{ de } J \text{ er massetransporten pr tidsenhet, } l \text{ er lengden på kolbeholden, } A \text{ er tverrsnittet}$$

og C_0 er metningskonsentrasjonen ved gjeldende temperatur. I dette tilfellet var $l=0,073$ m og $A=7,5 \cdot 10^{-5}$ m². Enheten for D blir da m²/s når J måles i g/s og C_0 i g/m³.

Fire stoffer er undersøkt, isopropanol, metylsalicylat (som har fysiske egenskaper som ligner på sennepsgass), heptan og tetrakloretylen. For metylsalicylat måtte målingene pågå over flere dager før avdampingshastigheten ble stabil, sannsynligvis inneholdt stoffet en flyktig komponent som først måtte fordampe. For alle stoffene unntatt metylsalicylat ble det også foretatt målinger ved + 50 °C og 0 °C. De målte verdiene er sammenlignet med verdier beregnet med formel (2.19). Resultatet er vist i Tabell A.2.

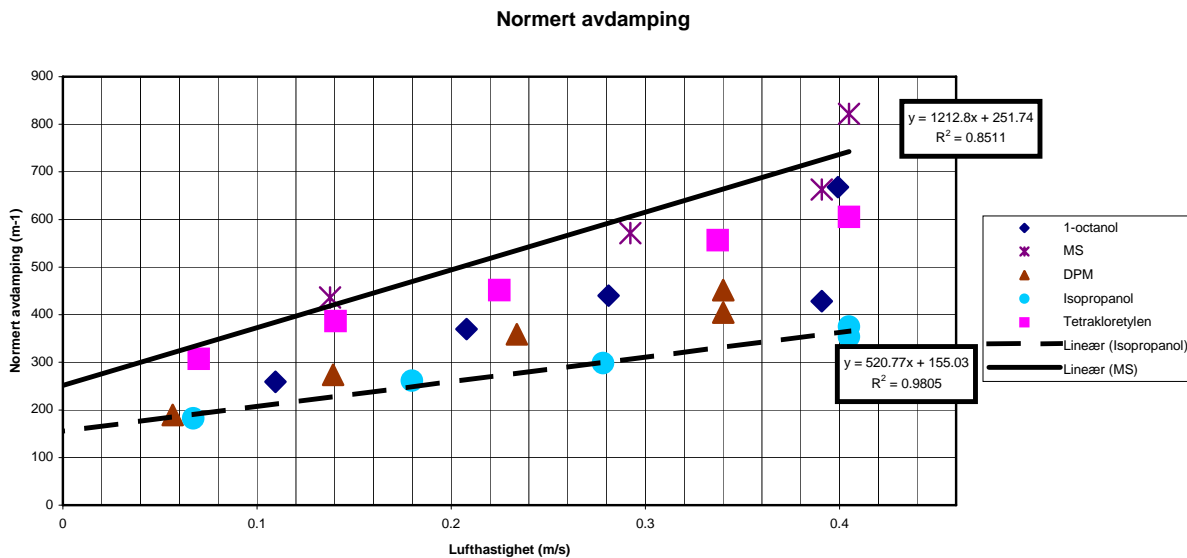
	0 °C		21 °C		50 °C	
	Målt (m ² /s)	Beregnet (m ² /s)	Målt (m ² /s)	Beregnet (m ² /s)	Målt (m ² /s)	Beregnet (m ² /s)
2-propanol	9,96·10 ⁻⁰⁶	1,02·10 ⁻⁰⁵	9,27·10 ⁻⁰⁶	1,17·10 ⁻⁰⁵	1,10·10 ⁻⁰⁵	1,40·10 ⁻⁰⁵
Heptan	9,96·10 ⁻⁰⁶	8,02·10 ⁻⁰⁶	7,88·10 ⁻⁰⁶	9,23·10 ⁻⁰⁶	9,96·10 ⁻⁰⁶	1,10·10 ⁻⁰⁵
Tetrakloretylen	1,22·10 ⁻⁰⁵	6,48·10 ⁻⁰⁶	8,47·10 ⁻⁰⁶	7,46·10 ⁻⁰⁶	1,05·10 ⁻⁰⁵	8,92·10 ⁻⁰⁶
MS			7,69·10 ⁻⁰⁶	7,73·10 ⁻⁰⁶		

Tabell A.2 Målte og beregnede verdier for diffusjonskoeffisienter.

Som tabell A.2 viser er det rimelig godt samsvar mellom målte og beregnede verdier, ingen avviker mer enn en faktor to fra hverandre. Det kan derfor synes rimelig å benytte formel (2.19) til beregning av diffusjonskoeffisienter der disse ikke er kjent, med mindre man skal foreta beregninger der kravene til nøyaktighet er spesielt store.

A.3 Diffusjonslengde

Den andre faktoren som inngår eksplisitt i noen av formlene er diffusjonslengden δ . Denne kan i prinsippet måles ved å måle avdamping fra væsker ved aktuelle temperaturer og lufthastigheter. Her er det gjort noen enkle målinger med metylsalicylat, dipropylenglykolmonometyleter, isopropanol, 1-oktanol og tetrakloretylen som representative testsubstanser. For å få til fri luftstrøm over væskeoverflater ble det benyttet flere lag filterpapir på et underlag av aluminiumsfolie. Størrelsen på prøvene var 5,5 cm x 2,3 cm. Papiret ble helt mettet med væsken. (Det viste seg at ved å fylle væske i en petriskål ble avdampingen lavere, sannsynligvis fordi kanten på skålen skjermet for luftstrømmen.) Prøvene ble så plassert i et rør med diameter 5,5 cm med en lufthastighet på mellom 0,05 og 0,4 m/s. Prøvene ble tatt ut og veid med jevne mellomrom og spesifikk avdampingshastighet (i g/s/m²) beregnet. For å sammenligne målingene for forskjellige substanser ble spesifikk avdamping normert ved å dividere med $C_0 \cdot D$. Normert spesifikk avdamping blir da det samme som den inverse diffusjonsavstanden δ i formel (2.3). Resultatet av målingene er vist i Figur A2.



Figur A.1 Normert avdampning (avdampingshastighet dividert med $(C_0 \cdot D\text{-areal})$ som funksjon av lufthastighet. Regresjonslinjene for isopropanol og metylsalicylat er lagt inn for å illustrere spennet i målingene.

Som det fremgår av figur A.1 faller målingene sammen i rimelig grad, og ser ut til å kunne tilnærmes med en rett linje. Målingene er imidlertid foretatt over et begrenset hastighetsområde, og det er ikke tatt hensyn til temperatursenkningen ved fordampningen. For de mest flyktige substansene kan dette ha betydning, spesielt kan dette gjelde isopropanol.

A.4 Avdampning fra små flater

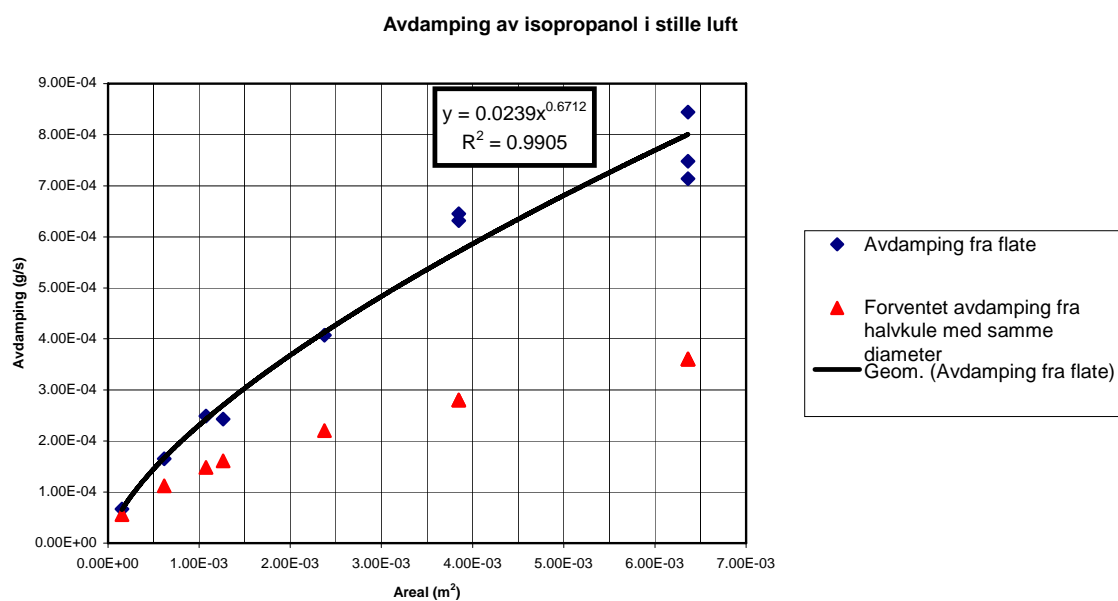
Som vist i figur A.1 kan det se ut til at avdampningen ved null hastighet ikke er null, slik man burde ventet av modellen for transport ved diffusjon. Ved null vindhastighet skulle man forvente at diffusjonsavstanden δ ble uendelig. Dette vil imidlertid bare gi null damptransport for en uendelig stor flate. For en flate av endelig størrelse vil det alltid være kanteffekter som vil gi en avdampning større en null, selv om transport ved konveksjon ikke finner sted. For å undersøke transport i stillestående luft ble det gjort noen enkle forsøk med avdampning av isopropanol.

Fire lag med filterpapir ble lagt på hverandre i en følsom vekt, og gjennomfuktet med isopropanol. Det ble satt to skåler med aktivt kull i vekthuset (for å absorbere isopropanoldampen), huset ble lukket og vekten avlest med 15 sekunder mellomrom. Dette ble gjort for sirkulært filterpapir med diameter 14, 28, 37, 55, 70 og 90 mm, samt med rektangulært filterpapir med størrelse 55x23 mm (samme størrelse som ble brukt ved avdampingsmålingene i rørvnen). Avdampingshastigheten i de forskjellige tilfellene er vist i tabell A.3. I samme tabell er også vist hva man skulle forvente fra halvkule med samme diameter ut fra formlene i avsnitt 2.2. For små flater kan det se ut til at avdampningen vil bli omtrent det samme som for en tilsvarende stor halvkule i stille luft.

Diameter (mm)	Areal (m ²)	Avdamping (g/s)	Forventet avdamping fra fra kule av samme diameter (g/s)
14	1.54E-04	6.69E-05	5.61E-05
28	6.16E-04	1.65E-04	1.12E-04
37	1.08E-03	2.49E-04	1.48E-04
55	2.38E-03	4.07E-04	2.21E-04
70	3.85E-03	6.45E-04	2.81E-04
70	3.85E-03	6.32E-04	2.81E-04
90	6.36E-03	7.14E-04	3.61E-04
90	6.36E-03	7.48E-04	3.61E-04
90	6.36E-03	8.44E-04	3.61E-04
55x23*	1.27E-03	2.43E-04	1.61E-04

Tabell A.3 Avdamping av isopropanol fra liten flate.
*) Rektangulær prøve.

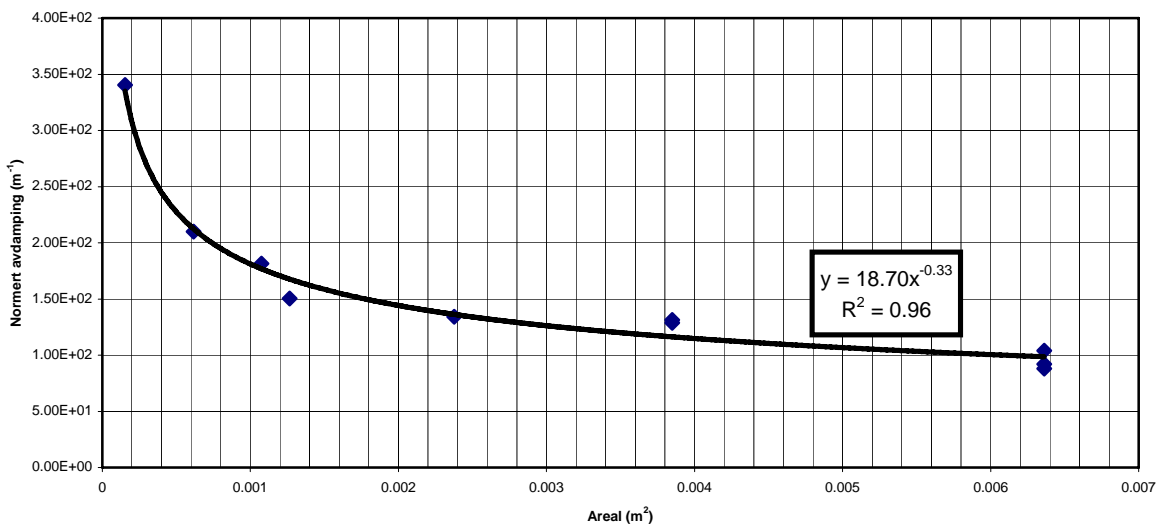
I figur A.2 er tabell A.3 vist grafisk.



Figur A.2 Avdamping av isopropanol

For sammenligning med målingene i figur A.1 er normert avdamping (avdamping pr m² dividert med produktet av metningskonsentrasjon og diffusjonskoeffisient) beregnet og vist i figur A.3.

Normert avdamping av isopropanol i stille luft



Figur A.3 Normert avdamping av isopropanol i stille luft.

Som man ser, kan normert avdamping med god tilnærming beskrives med formelen

$$j_0 = 18,7 \cdot A^{-0,33} \quad (\text{A.1})$$

der j_0 er normert avdamping ved null hastighet og A er arealet i m^2 . For en flate på 55×23 mm, som er det som ble brukt ved målingene av avdamping, gir dette $j_0 = 169 \text{ m}^{-1}$. Dette tilsvarer omtrent det konstante leddet i den lineære trendlinjen for målingene med isopropanol som vist i figur A.1. Ved bestemmelsen av de beste empiriske formlene for å beskrive avdamping som funksjon av lufthastighet er målingene ved FFI fratrukket denne verdien for j_0 .

A.4.1 Andre publiserte målinger

I (2) er det gitt en del målinger foretatt i en vindtunnel med en rekke substanser. Vindtunnelen hadde en bredde på 20 cm og en høyde på 10 cm. Fordampningen ble målt fra et kar på $14 \times 14 \text{ cm}^2$. Følgende stoffer ble benyttet: Hastigheten varierte mellom 0,5 og 7,1 m/s, og temperaturen mellom 275 K og 317 K. Følgende stoffer ble benyttet

1-heptanol, 1-heksanol, 2-oktanol, 2-oktanon, bensen, metanol, metyletylketon, n-heptan, n-pentanol, n-Propanol, oktan, toluen og xylen.

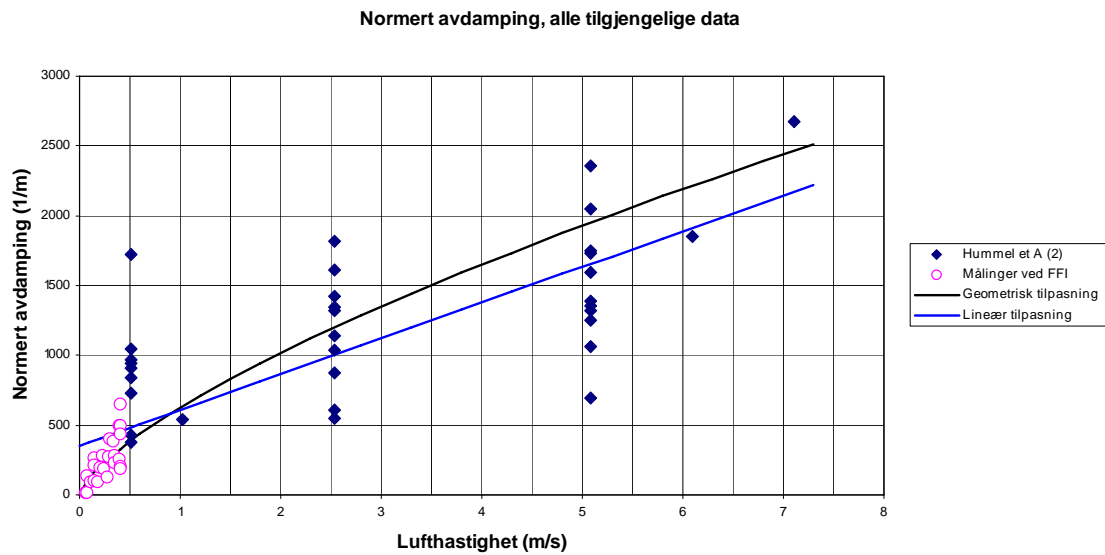
For noen av dataene som var oppgitt ble det funnet at de oppgitte temperaturene og dampprykkene ikke stemte overens, eller andre diskrepanser. Dette gjelder målinger med Xylen samt måling med 1-heptanol ved den høyeste hastigheten. Disse er derfor utelatt i den videre behandlingen her.

A.4.2 Empiriske formler for normert avdamping

Etter normering på samme måte som målingene ved FFI ble det forøkt å tilpasse to forskjellige kurver til dataene, en lineær tilpasning og en geometrisk. Tilpasningen ble gjort ved å legge inn trendlinjer i Excel. Følgende beste tilpasninger ble funnet:

- Geometrisk: $q = 625 \cdot v^{0,7}$, $R^2 = 0,72$
- Lineær: $q = 256 \cdot v + 353$, $R^2 = 0,66$

I figur A.4 er målingene vist sammen med de to kurvetilpasningene.



Figur A.4 Normert avdamping, alle tilgjengelige data.

Totalt sett er det den geometriske kurven som gir best tilpasning over hele området, og det er derfor denne som er valgt i regneeksemplene foran. Imidlertid er usikkerheten store, men denne formelen gir rimelig god tilpasning over hele området, og bør derfor kunne brukes, men med fornuft og forsiktighet.

Litteratur

- (1) E Karlsson, T Berglund, E Näslund, B Koch and P Runn (1995): Consequences of release of the nerve agent sarin in restricted areas , Conference Proceedings, 5th International Symposium Protection Against Chemical and Biological Warfare Agents, Stockholm , proceedings, Supplement, pp173-180., Stockholm, 11-16 June 1995.
- (2) Hummel A. A., Braun K. O. og Fehrenbacher M. C. (1996): Evaporation of a Liquid in a flowing Airstream, *American Industrial Hygiene Assocoation Journal* **57**, 519 - 525.
- (3) Kukkonen J, Vesala T and Kulmala M (1989): The interdependence of evaporation and settling for airborne freely falling droplets, *J. Aerosol Science* **20**, 7, 749-763.
- (4) Blanch Jan H, Ukkelberg Åsmund (2001): CW Database and Prediction programs, CD utgitt ved FFI.
- (5) (1981 - 1982): CRC Handbook of Chemistry and Physics (Eds Weast Robert C.), CRC Press, Inc., Boca Raton, Florida.
- (6) Fraunfelder P, Huber P (1963): Einführung in die Physik, Ernst Reinhardt Verlag AG, Basel, 289 - 296.
- (7) (1990): American Institute of Physics Handbook (Coordinating Editor Dwight E. Gray), McGraw-Hill Book Company. Tabellen også lagt ut på:
<http://www.braeunig.us/space/atmos.htm>.
- (8) Goodarz Ahmadi, Department of Mechanical and Aeronautical Engineering, Clarkson University på: http://www.clarkson.edu/fluidflow/courses/me637/02_Pastsphere.pdf.
- (9) P. Watts (1980): FACTORS PERTINENT TO THE EVAPORATION OF CHEMICAL WARFARE AGENTS. PART I. AN HISTORICAL PERSPECTIVE AND REVIEW OF THE LITTERATURE. Technical Paprt No. 286, Chemical Defence Establishment, Porton Down, Salisbury, Wilts. , UK.
- (10) Bird, B. B; Stewart, W. W; Lightfoot, E. N. (1960): Transport Phenomena, John Wiley & Sons.