**USAF有毒化学品扩散模型——AFTOX**

**中文简要用户使用手册**

**环境保护部环境工程评估中心**

**国家环境保护环境影响评价数值模拟重点实验室**

手册说明

本用户手册基于《USER'S MANUAL for USAF TOXIC CHEMICAL DISPERSION MODEL - AFTOX》(VERSION 4.1) 编写，仅对美国EPA网站所提供的USAF有毒化学品扩散模型——AFTOX的使用方法提供中文版简要说明，更详细的程序使用说明请查阅相关的软件手册及文档，或采用带图形界面版的商业软件。

本手册由环境保护部环境工程评估中心 国家环境保护环境影响评价数值模拟重点实验室负责编写，参与人员包括：易爱华、陈陆霞、胡翠娟、梁昊、杨晔、丁峰等。

本手册版权所有，转载及印刷请与环境保护部环境工程评估中心联系。

本手册所涉及的模型系统及本手册电子版本下载地址：

1. **基本信息**

AFTOX是由美国空军开发的高斯扩散模型，可适用于非浮力中性气体、浮力烟羽扩散。AFTO可处理瞬间的或持续的、地面或具有一定高度的源释放的气体或液体。

1. **文件结构**

AFTOX程序主要包括五个程序文件、三个打印机文件和六个数据文件。在这些数据文件中，四个是输入数据、两个是输出数据文件。此外，还包括三个辅助文件用于编辑三个输入数据文件中的数据。文件清单如表1所示。

**表1 AFTOX中的程序文件清单**

|  |  |
| --- | --- |
| 程序文件 |  |
| AFTOX.EXE | 介绍文件 |
| DSP1.EXE | 定义化学品性质和气象条件 |
| DSP2.EXE | 定义源条件（即排放速度、溢出持续时间和溢出面积） |
| DSPHP.EXE | 定义从烟囱排放的浮力烟羽的源条件 |
| DSP3.EXE | 计算1）风险2面积，2）最大浓度，3）在给定点和时间的浓度 |
| 数据文件 |  |
| SD.DAT | 站点数据 |
| CH.DAT | 化学品名字和数据，以及有毒极限 |
| EVAP.DAT | 用于Vossler挥发模型的化学品数据 |
| AFT.DAT | 当打印机关闭时用于储存所有输入和输出数据的文件 |
| CONCXY.DAT | 用于储存x,y点浓度等值图的文件 |
| DEVICE.DAT | 包括计算机和屏幕类型的信息 |
| 辅助文件 |  |
| SETUP.EXE | 建立计算机和屏幕类型 |
| SDFIL.EXE | 编辑站点数据文件（SD.DAT） |
| CHFIL.EXE | 编辑化学品数据文件（CH.DAT） |
| 打印机文件 |  |
| PSCMX80.COM | 配置EPSON类型打印机系统 |
| PSCOKI.COM | 配置OKIDATA类型打印机系统 |
| PSCMPI.COM | 配置旧Zenith打印机系统 |

* 1. **辅助文件**

**SETUP.EXE**

在第一次运行AFTOX前，需执行SETUP.EXE来确定计算机类型。

**SDFIL.EXE**

SDFIL.EXE文件用于安装站点数据文件SD.DAT。SDFIL允许用户查看、删除、增加和编辑SD.DAT中的数据。文件可包含一个或多个站点。

储存在SD.DAT中的每个站点需要的数据清单如下所示：

站点名称

1-公制 2-英制

风向的标准差(Y/N)

标准差平均时间(min)

纬度 (deg)

经度(deg)

粗糙度(cm)

风速观测的高度(m或ft)

时间差(当地标准格林威治时间)

站点高程(m或ft)

 彼此位置相当近的站点(<50 km)不必分别列出来。但如果站点之间的粗糙度和风速测量高度不同，则需分别列出。

地表粗糙度但建议使用0.5到100cm间的值。

**表2 地表粗糙度**

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

 地形描述 地表粗糙度(cm)

雪、无植被、泥面、无障碍物 0.5

河床、开放平坦地形、草地、少数独立的障碍物 3

矮作物、偶尔出现的大障碍物 10

高作物、分散的障碍物 25

有树丛的开阔草地、灌木、大量障碍物 50

常规大障碍物覆盖（郊区、森林） 100

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**CHFIL.EXE**

CHFIL.EXE用于查看、改变、删除或增加化学品数据文件CH.DAT。当前CH.DAT文件包括130种化学品。化学品按字母顺序列出。

每种化学品数据的组成如下：

化学品数量

化学品名称

时间加权平均（TWA）暴露极限(ppm和mg/m3)

短期暴露极限 (STEL) (ppm和 mg/m3)

分子质量

沸点(K)

临界温度 (K)

临界压力 (atm)

临界体积 (cm3/g-mole)

蒸汽压常数 (3)

液体密度常数 (2)

分子扩散常数 (2)

如果化学品预期在常温下是气体，那么仅需要“沸点”之前的信息。

如果化学品是液体，化学品文件中需包含蒸汽压信息。

* 1. **数据文件**

**EVAP.DAT**

EVAP.DAT是用于Vossler挥发模型中的化学品数据文件。

**CONCXY.DAT**

 CONCXY.DAT是包含最多三个浓度值的x、y坐标信息的输出数据文件。文件中储存的数据包括关注的浓度（以mg/m3或ppm为单位）、瞬时排放或有限时间排放从排放起的时间以及不同下风向距离的等半宽度图，以m或ft为单位。

* 1. **打印机文件**

 AFTOX程序有三个打印文件，从而可将AFTOX的图形进行输出打印。

1. **安装AFTOX**

需执行SETUP.EXE。

1. **运行 AFTOX**
2. 站点数据
3. 日期和时间
4. 排放类型

 AFTOX 处理五种类型的排放：

持续气体释放

持续液体释放

瞬时气体释放

瞬时液体释放

持续浮力烟羽排放

瞬时释放定义为在15秒内。持续释放指任何时间超过15秒的排放。对于持续和瞬时排放，模型根据空气温度与化学品温度的高低关系决定是气体或液体排放。

1. 化学品数据

用户可以输入对应的数字来代表相应的化学品。

1. 气象数据

气象数据由以下数据组成：

 气温

 风向

 风速

 风向标准差和确定标准差的时间段（可选）

 云量

 主导云类型

 地面条件—干、湿、雪覆盖（仅白天）

 逆温层基底高度

 气温是必要的输入参数，但其对结果影响不大。如果不能够读取温度，可以进行合理的猜测。

 模型不允许有静风。如果输入了0的风速，模型将把速度调整为0.5m/s。

1. 泄漏位置的粗糙度
2. 源信息

需要的源信息取决于泄漏的类型—持续、瞬时、气体或液体。

**持续气体排放**

对于持续气体排放，需要以下信息：

 泄漏点在地面以上的高度(m, ft)

 排放的速度(kg/min, lb/min)

 排放的总时间(min)

**持续液体排放**

对于持续液体排放，需要以下信息：

 泄漏速度 (kg/min, m3/min, lb/min, gal/min)

 泄漏总时间(min)

 泄漏面积 (m2, ft2) – 不输入的话将使用默认值

 液池温度—对于使用Clewell 挥发模型的化学品（默认值=气温）

**瞬时气体排放**

对于瞬时气体排放，需要以下信息：

排放高度(m, ft)

 排放量(kg, lb)

**瞬时液体排放**

对于瞬时液体排放，需要以下信息：

 泄漏量(kg, m3, lb, gal)

 泄漏面积(m2, ft2) —不输入的话将使用默认值

 液池温度—对于使用Clewell 挥发模型的化学品（默认值=气温）

**持续浮力烟羽排放**

对于从烟囱中排放的持续浮力烟羽，需要以下信息：

 分子质量（如果可获得的话）Molecular weight (if available)

 排放速度 (kg/min or lbs/min)

 排放时间 (min)

 烟囱高度(m or ft)

 气体温度 (C or F)

 体积流速(m3/min or ft3/min)

1. 浓度平均时间

用户必须指定浓度平均时间。对于持续排放，默认值是15min。对于小于15分钟持续时间的排放，默认平均时间等于排放时间。对于瞬时气体排放，平均时间是1min。用户不能输入小于1min的平均时间。此外，平均时间大于排放时间。

1. 从泄漏开始经过的时间

对于瞬时和有限持续排放，用户必须指定从泄漏开始经过的时间。对于正在进行的持续排放，模型默认一个足够大的经过时间以确保稳态条件（最大风险距离）。对于瞬时液体排放或有限持续排放，默认经过时间等于排放时间，除了短持续时间的泄漏（几分钟），默认时间通常给出最大风险距离。对于瞬时气体排放，默认经过时间可以简单地设置为10min。对于少量的排放，用户可以输入更短的时间。

1. 结果输出

用户可以指定下面三种输出类型之一：

 1. 毒性廊道图

 2. 指定地点和时间的浓度

 3. 给定高度和时间的最大浓度

1. 暴露浓度
2. 置信区间

模型浓度等值线图展示了90%置信水平的风险区域或有毒廊道。

1. **特殊考虑**

 a. 时间输入参数必须是当地标准时间(LST)。如果当地时间变为夏时制，时间输入参数仍应该是LST。

 b. 受程序数值方法限制不允许静风。如果输入了0的风速，模型假设为1 knot (0.5m/s)。

 c. 如果用户不确定粗糙度，应该选择最小的数值，其将给出更保守的结果

 d. 如果存在两个或更多云层，用户应该使用云量最大的云层。如果各层云量相等，使用最低的云层。

 e. 如果用户不确定地面是湿的还是干的，用户应该使用湿的。选择湿地面选项将给出一个更保守的答案。

 f. 如果化学品分子质量或蒸汽压未知，模型将挥发速度设置为等于泄漏速度。这是最坏情景（worst case scenario）。

 g. 如果分子质量未知，浓度等值线图必须以mg/m3为单位。

 h. 浓度平均时间必须大于等于1分钟，但小于60分钟并且小于排放时间。

 i. 当计算指定位置的浓度时，下风向距离必须大于等于30m (约100ft)。

 j. 如果烟筒高度在逆温层高度以上，那么程序将中止，因为地表输入条件很有可能无法用于逆温层以上。