

Сравнительный анализ результатов моделирования последствий химических аварий с использованием программного комплекса ТОКСИ+^{Risk}



Т.В. Савицкая,
д-р техн. наук, проф.



А.Ф. Егоров,
д-р техн. наук, проф.,
зав. кафедрой



Л.А. Запасная,
аспирантка



А.В. Дементенко,
студент



Ю.А. Карибова,
студентка

Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева

Проведен сравнительный анализ результатов моделирования последствий аварий с выбросом опасных веществ с полным и частичным разрушением оборудования емкостного типа, полученных с использованием программного комплекса ТОКСИ+^{Risk}.

Comparative analysis of the results of modeling accidents consequences with emission of hazardous substances with complete and partial destruction of the equipment using software TOXI+^{Risk} is presented in the Article.

Ключевые слова: моделирование рассеяния (pollution modeling), выбросы опасных веществ, химическая авария, опасный производственный объект, программный комплекс ТОКСИ+^{Risk}.

Предприятия химической, нефтеперерабатывающей и нефтехимической промышленности являются источниками значительного загрязнения окружающей среды. Стационарные источники предприятий химической промышленности ежегодно выбрасывают в атмосферу 350–375 тыс. т загрязняющих веществ [1].

Кроме того, большая опасность для окружающей среды — аварии при производстве, хранении, транспортировании химически опасных веществ. Наибольшее число аварий в мире, в том числе и в России, происходит на предприятиях, где производят или хранят хлор, аммиак, минеральные удобрения, гербициды, продукты органического и нефтеорганического синтеза.

В связи с этим актуальна разработка и выбор моделей для прогнозирования загрязнения воздуха при выбросах с химических предприятий (в том числе в результате производственных аварий) и соответствующего программного обеспечения для компьютерного моделирования и оценки последствий аварий.

В настоящее время сложились три основных подхода к количественному описанию рассеяния выброса в атмосфере [2]:

гауссовские модели рассеяния, называемые также дисперсионными;

модели рассеяния, базирующиеся на интегральных законах сохранения массы, энергии, импульса либо в облаке в целом (залповый выброс), либо в поперечном сечении облака (продолжительный выброс) — модель рассеяния «тяжелого газа»;

модели, построенные на численном решении системы уравнений сохранения массы, энергии, импульса и именуемые моделями или методами прямого численного моделирования.

Указанные подходы к моделированию рассеяния примесей положены в основу рекомендуемых Методики оценки последствий химических аварий (ТОКСИ-2) [3] и Методических указаний по оценке последствий аварийных выбросов опасных веществ (ТОКСИ-3) [4].

Методика оценки последствий химических аварий ТОКСИ-2 предназначена для оценки последст-

вий аварий на опасном производственном объекте (ОПО) с выбросом опасного химического вещества (ОХВ) в атмосферу и распространяется на случаи выброса ОХВ как в однофазном (газ или жидкость), так и в двухфазном (газ и жидкость) состоянии. Данная методика базируется на гауссовой модели распространения примесей (модели «клубка»).

В результате расчетов по методике ТОКСИ-2 определяются:

количество поступивших в атмосферу ОХВ при четырех различных сценариях аварий: с полным или частичным разрушением оборудования, содержащего ОХВ в газообразном или жидком состоянии;

пространственно-временное поле концентраций ОХВ в атмосфере;

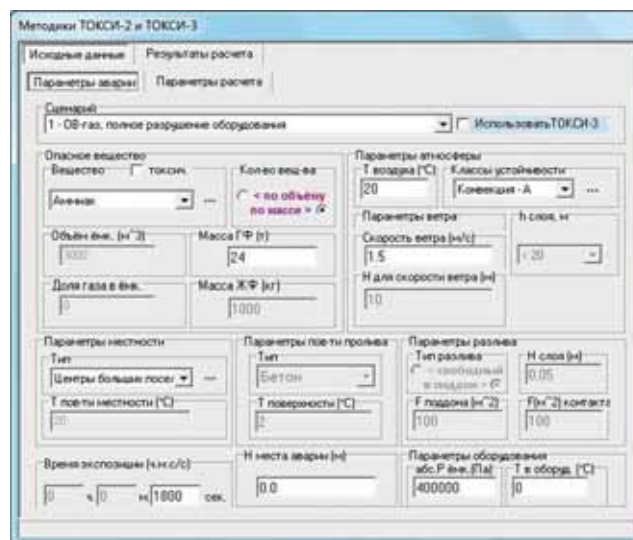
пространственное распределение поля токсодозы; зоны химического поражения людей ОХВ смертельной (летальной) и (или) пороговой токсодозами при ингаляционном воздействии на организм человека [3].

Методика оценки последствий аварийных выбросов опасных веществ ТОКСИ-3 [4] основана на серии одноименных методик [3] и служит для оценки зон распространения опасных веществ (ОВ), плотность которых на месте выброса больше плотности воздуха в соответствующих условиях, т.е. для моделирования рассеяния тяжелых газов. Методика распространяется на случаи выброса ОВ в атмосферу как в однофазном, так и в двухфазном состоянии. Границы зон химического заражения ОВ рассчитывают по смертельной и пороговой токсодозам при ингаляционном воздействии на организм человека либо по пробит-функциям, приведенным в приложении к методике.

Выброс ОВ происходит на уровне земли или площадки, где расположено технологическое оборудование, рассеяние — от поверхности земли. В начальный момент (на месте выброса) первичное облако ОВ имеет форму цилиндра. Облако распространяется над ровной твердой поверхностью, с которой нет обмена массой, а есть только обмен теплом. В начальный момент в облаках (первичном и вторичных) ОВ не разбавлено воздухом. В облаке мгновенно устанавливается фазовое равновесие «газ — жидкость». Фазовые переходы ОВ приводят к изменению высоты облака.

Проведенный авторами сравнительный анализ результатов моделирования источников выброса ОВ выявил ряд достоинств и ограничений применения методик ТОКСИ-2 и ТОКСИ-3 для оценки последствий химических аварий. С использованием программного комплекса ТОКСИ+Risk (версия 4.2.0) [5] выполнен сравнительный анализ возможных последствий аварий при полном разрушении (сценарий 1) и разгерметизации (сценарий 2) хранилищ с газообразным аммиаком массой 24 и 30 т, расположенных на территории промышленного предприятия. Исследование проводилось при изменении скорости ветра от 1 до 4 м/с для всех классов устойчивости атмосферы в соответствии с модифициро-

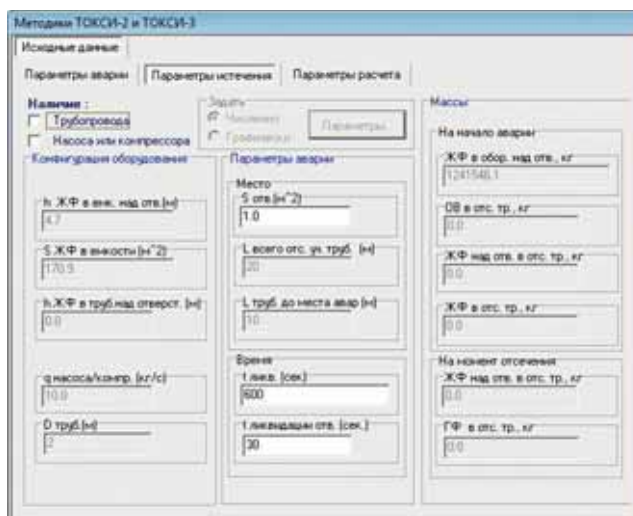
ванными классами по Паскуиллу [4]. Температура воздуха 20 °С. Газообразный аммиак находится в хранилищах при температуре 0 °С и избыточном давлении $P = 0,4$ МПа. Тип подстилающей поверхности — городская застройка — центры больших поселков и городов. Интерфейс пользователя программного комплекса для ввода исходных данных представлен на рис. 1.



▲ Рис. 1. Интерфейс пользователя программного комплекса для ввода исходных данных

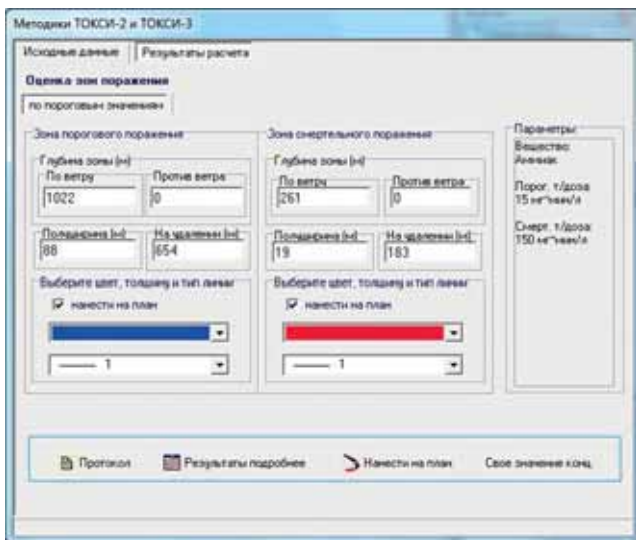
Наряду с перечисленной выше информацией, для расчетов выбирают методику (отмечается галочкой, см. рис. 1), сценарий развития аварии (из выпадающего списка), задают высоту (10 м), на которой замеряют скорость ветра; для расчета полей токсодоз задают время экспозиции (1800 с) и высоту слоя, для которого проводится анализ учета изменения характеристик профиля ветра для заданного типа подстилающей поверхности.

Для сценария 2 — разгерметизация хранилищ с газообразным веществом — необходимо указать площадь отверстия разгерметизации — в примере 1 м² (рис. 2).



▲ Рис. 2. Окно задания параметров истечения

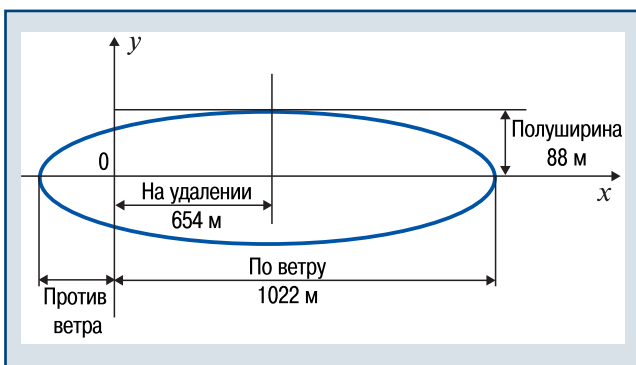
Интерфейс с результатами расчетов полного разрушения оборудования по методике ТОКСИ-2 для хранилища с аммиаком массой 24 т представлен на рис. 3.



▲ Рис. 3. Результаты расчетов по методике ТОКСИ-2

В результате расчетов определяли поля концентраций и токсодоз аммиака, зоны порогового и токсического поражения людей, а также исследовали характеристики облака в процессе рассеяния примесей.

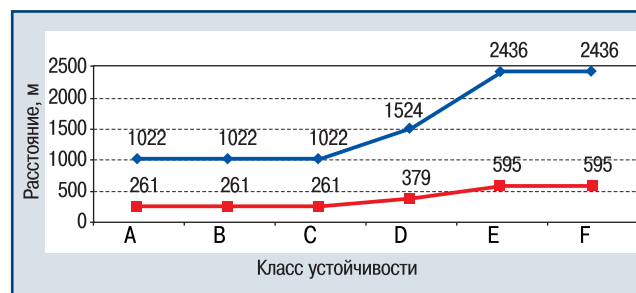
На рис. 4 поясняется определение размеров зон порогового и смертельного поражения (поля: по ветру, против ветра, полуширина, на удалении); точка 0 — источник аварии. Таким образом, зона порогового поражения простирается на 1022 м по ветру и имеет максимальную полуширину 88 м на расстоянии 654 м от эпицентра, а зона смертельного поражения распространяется на расстояние 261 м по ветру и имеет максимальную полуширину 19 м на расстоянии 183 м от источника аварии.



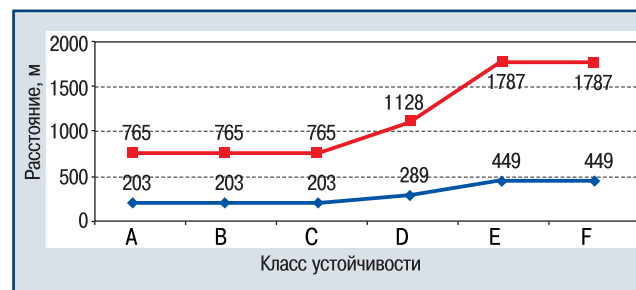
▲ Рис. 4. Определение зон поражения (на примере порогового поражения)

Зависимость изменения зон порогового поражения (верхняя кривая) и смертельного поражения (нижняя кривая) от классов устойчивости атмосферы при полном разрушении хранилища с массой аммиака 24 т при скорости ветра 1 м/с приведена на рис. 5, а сравнительный анализ последствий аварий

при полном разрушении хранилища аммиака (24 и 30 т), полученный с помощью программного комплекса ТОКСИ+Risk по методике ТОКСИ-2, представлен в табл. 1. Аналогичные результаты расчетов получены для разгерметизации хранилища с аммиаком (рис. 6 и табл. 1).



▲ Рис. 5. Зависимость изменения зон порогового и смертельного поражения от классов устойчивости атмосферы для сценария 1



▲ Рис. 6. Зависимости изменения зон порогового и смертельного поражения от классов устойчивости атмосферы для сценария 2

На рис. 5 и 6 видно, что наибольшими зоны поражения оказались при классах устойчивости атмосферы E и F, причем для сценария с полным разрушением все расстояния на несколько десятков метров больше для смертельного поражения и на 300–700 м больше для порогового поражения.

Из расчетов следует, что с увеличением скорости ветра при любом классе устойчивости атмосферы зоны порогового и смертельного поражения уменьшаются, а при скорости ветра 3 м/с зона смертельного поражения и вовсе отсутствует при полном разрушении хранилища. Очевидно, что при увеличении массы газообразного аммиака в хранилище пропорционально увеличиваются зоны поражения для каждого класса устойчивости атмосферы в случае полного разрушения. Наиболее тяжелые последствия наблюдаются в авариях при классах устойчивости атмосферы F и E. Но, как показал расчет, при разгерметизации хранилища зоны поражения, несмотря на изменение массы ОВ, не изменяются, так как истечение происходит с постоянным расходом (формула (10) методики [3]) через заданную площадь отверстия разгерметизации.

Сравнительный анализ оценки последствий аварий с полным разрушением и разгерметизацией хранилища по методике ТОКСИ-3 [4] показал, что при полном разрушении хранилища с ростом массы

Таблица 1

Скорость ветра, м/с	Класс устойчивости атмосферы	Расстояние, на котором токсодоза достигает					
		порогового поражение, м			смертельного поражение, м		
		Полное разрушение		Разгерметизация	Полное разрушение		Разгерметизация
		24 т	30 т		24 т	30 т	
1	A-C	1022	1164	765	261	301	203
	D	1524	1741	1128	379	435	289
	E, F	2436	2798	1787	595	684	449
1,5	A-C	821	935	610	192	225	165
	D	1225	1398	905	276	323	227
	E, F	1966	2252	1432	437	512	342
2	A-C	695	793	518	138	170	145
	D	1038	1188	762	199	244	204
	E, F	1668	1912	1215	330	394	313
3	A-C	547	625	411	0	0	116
	D	810	929	599	0	0	162
	E, F	1296	1500	947	0	0	248

аммиака концентрация в ядре облака убывает медленнее. По результатам можно судить и о влиянии метеоусловий на распространение облака. Так, при скорости ветра 1 м/с и классе устойчивости атмосферы F облако рассеивается гораздо медленнее, чем при той же скорости ветра и классе устойчивости атмосферы A: на расстоянии 2211 м концентрация в ядре облака примерно в 8,4 раза больше при классе устойчивости F, чем при классе A. Для сценария с разгерметизацией в тех же условиях концентрация в ядре облака при классе устойчивости F уже равна нулю.

Значения эффективной высоты (формула (99) методики [4]), эффективного радиуса разлета (формула (100) методики [4]), дисперсии радиуса и высоты, концентрации в ядре облака (формулы (102)–(103) методики [4]) одинаковы для разных масс аммиака при полном разрушении на начальных стадиях развития аварии, но по мере удаления от источника начинают немного различаться.

В случае разгерметизации значения всех параметров не меняются с изменением массы вещества в хранилище. Заметная разница наблюдается в результатах расчета эффективных размеров (радиус разлета и высота) (формулы (98)–(99) методики [4]) для класса устойчивости атмосферы F. При полном разрушении эти значения значительно ниже, чем при разгерметизации. Так, в момент времени 655 с при полном разрушении эффективный радиус ядра облака составляет 48 м, а при разгерметизации — 323 м. Подобная зависимость наблюдается и для дисперсий. Такие значения связаны с зависимостью скорости ветра от высоты α_v для различных классов устойчивости атмосферы, входящей в формулы для определения эффективного радиуса, эффективной высоты, эффективной скорости движения первичного облака (формулы (98)–(100) методики [4]). Последняя величина, а также эффективная скорость движения вторичного облака используются в выра-

жении (19) методики [4] для определения высоты и полуширины вторичного облака.

Расcеяние примеси происходит значительно быстрее в случае разгерметизации, о чем свидетельствуют результаты расчета концентрации в ядре облака. Так, при классе устойчивости атмосферы F в момент времени 1474 с значение концентрации в облаке при разгерметизации равно нулю, в то время как при полном разрушении оно составляет 0,01 кг/м³. На основе полученных полей концентраций с использованием программного комплекса ТОКСИ+^{Risk} рассчитаны зоны смертельного и порогового поражения, определены поля токсодоз по методике ТОКСИ-3 и проведен сравнительный анализ полученных значений (табл. 2) с полученными ранее по методике ТОКСИ-2 (см. табл. 1) для скорости ветра 1 и 2 м/с и класса устойчивости атмосферы A, D, F.

Результаты расчетов по методикам полного разрушения оборудования практически совпадают, например длина зоны смертельного поражения для класса устойчивости F при скорости ветра 1 м/с составила 595 м по методике ТОКСИ-2 и 597 м по методике ТОКСИ-3. Для сценария с разгерметизацией оборудования зоны поражения по методике ТОКСИ-2 протяженнее практически в 2 раза, чем по методике ТОКСИ-3 для всех классов устойчивости атмосферы. Например, в аналогичных условиях длина зоны порогового поражения составила 1787 м по методике ТОКСИ-2, 856 м по методике ТОКСИ-3. Следует отметить, что полуширина зоны порогового поражения при полном разрушении для класса устойчивости F вдвое больше по методике ТОКСИ-2, чем по методике ТОКСИ-3 при любой скорости ветра, причем данные значения достигаются на более близких расстояниях от источника выброса. Это свидетельствует о том, что зоны поражения, прогнозируемые по методике ТОКСИ-3, в целом меньше, чем по методике ТОКСИ-2.

Скорость ветра, м/с (класс устойчивости атмосферы)	Глубина зоны поражения по ветру, м				Полуширина зоны поражения (на удалении), м			
	смертельного		порогового		смертельного		порогового	
	ТОКСИ-2	ТОКСИ-3	ТОКСИ-2	ТОКСИ-3	ТОКСИ-2	ТОКСИ-3	ТОКСИ-2	ТОКСИ-3
Разгерметизация								
1 (A)	203	156	765	402	18 (109)	21 (103)	66 (474)	42 (245)
1 (D)	289	216	1128	579	19 (156)	21 (145)	70 (722)	43 (365)
1 (F)	449	312	1787	856	20 (206)	22 (212)	83 (1144)	46 (540)
2 (A)	145	123	518	383	13 (93)	15 (82)	42 (228)	37 (238)
2 (D)	204	170	762	560	13 (127)	15 (102)	47 (472)	38 (336)
2 (F)	313	259	1215	834	15 (200)	15 (155)	55 (753)	42 (509)
Полное разрушение								
1 (A)	261	264	1022	1025	19 (184)	19 (166)	88 (655)	70 (533)
1 (D)	379	380	1524	1526	20 (258)	19 (228)	95 (975)	66 (748)
1 (F)	595	597	2436	2444	24 (405)	17 (340)	114 (1608)	55 (1173)
2 (A)	138	140	695	698	5 (114)	5 (107)	59 (445)	51 (370)
2 (D)	199	201	1038	1040	5 (164)	5 (151)	63 (663)	48 (541)
2 (F)	330	332	1668	1671	8 (258)	6 (239)	73 (1031)	42 (819)

Значительно различаются длины зон поражения токсодозами и для различных классов устойчивости. Так, длина зон поражения токсодозами в ночное время значительно больше, чем в дневное. Это объясняется тем, что, во-первых, при неустойчивой стратификации условия для рассеяния выброса лучше, чем при устойчивой, так как проницаемость атмосферы выше, а температура воздуха ниже при устойчивой стратификации, и процессы рассеяния протекают медленнее; и, во-вторых, тем, что скорость движения выброса в приземном слое при неустойчивой стратификации выше, чем при устойчивой.

Увеличение скорости ветра при всех классах устойчивости атмосферы способствует более быстрому рассеянию облака. Результаты отличаются примерно в 1,5 раза для скорости ветра 1 и 2 м/с при полном разрушении и разгерметизации. Но при разгерметизации, по методике ТОКСИ-3, влияние скорости ветра на глубину зон рассеивания менее существенно (зоны различаются на несколько десятков метров: при скорости ветра 1 м/с и классе устойчивости А глубина смертельного поражения составила 156 м, при скорости 2 м/с — 123 м).

Сравнение сопоставимых результатов расчетов при аварии с полным разрушением и разгерметизацией (см. табл. 1 и 2) для класса устойчивости А, D и F, скорости ветра 1 и 2 м/с показало, что последствия аварии с разгерметизацией несколько менее опасны.

Неоднократные проверки результатов моделирования выбросов с экспериментальными данными [6] показали, что в методиках, построенных на гауссовской модели, завышаются концентрации на оси выброса по сравнению со значениями, регистри-

руемые в эксперименте. Стандартные методики, построенные на гауссовской модели, не дают возможности с достаточной степенью точности предсказать рассеяние «тяжелого газа», как залпового выброса, так и продолжительного даже сравнительно невысокой мощности: расчетные концентрации на оси выброса оказываются завышенными, а поперечные размеры облаков — заниженными. На более точно результаты эксперимента позволяет описывать методика расчета процесса рассеяния «тяжелого газа» ТОКСИ-3. Хорошее согласование расчетов по ТОКСИ-3 с экспериментальными данными о концентрации рассеиваемого выброса, безусловно, свидетельствует о более точной модели, заложенной в методику.

Выводы

1. Проведен сравнительный анализ отдельных теоретических положений и результатов моделирования по методикам оценки последствий аварий ТОКСИ, который выявил их достоинства и недостатки. В методике ТОКСИ-3 учитывается ряд особенностей, таких как гравитационное растекание облака и теплообмен, которые позволяют сделать вывод о точности методики и приближении результатов к реальному поведению выброса после аварии.

2. Программный комплекс ТОКСИ+Risk (версия 4.2.0) дает возможность выбрать разные расчетные модели и методики, проводить исследования с использованием компьютерного моделирования и оценивать последствия химических аварий в различных гипотетических условиях. Результаты компьютерного моделирования с применением программного комплекса ТОКСИ+Risk могут быть использованы для решения задач реконструкции и проектирования опасных производственных объектов.

3. Полученные результаты использованы при подготовке комплексов лабораторных работ по применению программного комплекса ТОКСИ+Risk в рамках совместных работ с ЗАО «Научно-технический центр исследований проблем промышленной безопасности» и РХТУ им. Д.И. Менделеева. В комплекс входит от трех до пяти лабораторных работ, состоящих из описания, примеров решения типовых задач, вариантов заданий на лабораторные работы. Подготовлено методическое пособие для расчета последствий возможных аварий и оценки риска на ОПО с использованием программного комплекса ТОКСИ+Risk (объем более 300 страниц [7]).

Список литературы

1. Государственный доклад «О состоянии и об охране окружающей среды Российской Федерации в 2009 году». — М.: АНО «Центр международных проектов», 2010. — 523 с.
2. Научно-методические аспекты анализа аварийного риска/ В.Г. Горский, Г.А. Моткин, В.А. Петрунин и др. — М.: Экономика и информатика, 2002. — 260 с.

3. Методика оценки последствий аварий (Методика ТОКСИ в Редакции 2.2.) в сб. Методики оценки последствий аварий на опасных производственных объектах: Сб. документов. — Сер. 27. — Вып. 2. — 3-е изд., испр. и доп. — М.: ФГУП «Научно-технический центр по безопасности в промышленности», 2005. — 208 с.

4. РД-03-26—2007. Методические указания по оценке последствий аварийных выбросов опасных веществ. — Сер. 27. — Вып. 6. — М.: ГУП «Научно-технический центр по безопасности в промышленности», 2008. — 124 с.

5. Использование программного комплекса ТОКСИ+Risk для оценки пожарного риска/ А.А. Агапов, И.О. Лазукина, А.Л. Марухленко, А.С. Софьин // Безопасность труда в промышленности. — 2010. — № 1. — С. 46–52.

6. Лисанов М.В., Пчельников А.В., Сумской С.И. Моделирование рассеяния выбросов опасных веществ в атмосфере // Российский химический журнал. — 2005. — Т. XLIX. — № 4. — С. 18–28.

7. Егоров А.Ф., Савицкая Т.В., Агапов А.А. Об опыте использования программного комплекса ТОКСИ+Risk для подготовки специалистов в Российском химико-технологическом университете им. Д.И. Менделеева // Безопасность труда в промышленности. — 2012. — № 5. — С. 22–24.

savitsk@muctr.ru



ПРАВИЛА ОФОРМЛЕНИЯ И ОПУБЛИКОВАНИЯ НАУЧНО-ТЕХНИЧЕСКИХ СТАТЕЙ В ЖУРНАЛЕ

Без подписанного лицензионного договора и в случае невыполнения пп. 2–5 статьи к публикации в журнале «Безопасность труда в промышленности» не принимаются

1. В связи с введением части четвертой Гражданского кодекса Российской Федерации (раздел VII «Права на результаты интеллектуальной деятельности и средства индивидуализации») представляемые в журнал статьи должны сопровождаться лицензионным договором о передаче ЗАО НТЦ ПБ (издатель журнала) неисключительных авторских прав. Образец лицензионного договора размещен на сайте журнала btpradzog.ru. Его можно получить по электронной почте (redbtp@safety.ru).

2. В связи с требованием Высшей аттестационной комиссии (ВАК) Министерства образования и науки Российской Федерации (информационное сообщение от 14.10.2008 г. № 55.1-132) о необходимости размещения журналов, входящих в Перечень ведущих рецензируемых научных журналов ВАК, в открытом доступе в сети Интернет (в базе данных Российской универсальной научной электронной библиотеки) и наполнения базы данных Российского индекса научного цитирования и других баз данных научного цитирования статья должна содержать: индекс по Универсальной десятичной классификации (УДК); имя, отчество (полностью) и фамилию автора (авторов), место работы и занимаемую должность; ученую степень или звание; название; аннотацию; ключевые слова; текст статьи; список литературы; иллюстрации и подрисовочные подписи; фотографии авторов (TIF, JPG); контактную информацию (адрес электронной почты).

3. Объем статьи (включая иллюстрации, таблицы и список литературы) не должен превышать 12 с. машинописного текста. Текст статьи должен быть напечатан через 1,5 интервала в редакторе WinWord (шрифт Times New

Roman, кегль 12) на одной стороне стандартного листа формата А4.

4. Статья, подписанная автором (авторами), должна быть представлена в электронном (файл WinWord) и в распечатанном виде.

5. В конце статьи следует указать домашний или служебный телефон, почтовый адрес.

6. Единицы измерения величин должны соответствовать Международной системе единиц (СИ), а используемые в статье термины, определения и условные обозначения — действующим ГОСТам.

7. Формулы должны быть набраны в редакторе формул. После формулы следует пояснить входящие в нее параметры в последовательности их упоминания с указанием единиц измерения.

8. Рисунки также представляются отдельными файлами (не вставленными в WinWord): тоновые — в растровом формате (TIF, JPG, разрешение не ниже 300 dpi), графический материал — в векторном формате (WMF, EPS и т.д.) или представлены файлами с расширением, соответствующим графическим редакторам, в которых они выполнены.

9. Список литературы оформляется в соответствии с ГОСТ Р 7.0.5—2008.

10. За публикацию научно-технических статей плата не взимается. Вознаграждение авторам не выплачивается. Один экземпляр журнала с опубликованной статьей высылается каждому автору.

11. Статьи рецензируются. Отрицательные рецензии доводятся до сведения авторов.

12. Материалы, представленные в редакцию, авторам не возвращаются.