

Моделирование и оценка гипотетических сценариев аварий - ценный инструмент для развития и реализации соответствующих защитных мероприятий и планов локализации и ликвидации аварийных ситуаций. Это требует использования надежных математических моделей, описывающих как поступление токсичных и взрывоопасных веществ, так и их распространение в атмосфере. Для нефтехимических производств одним из наиболее вероятных и опасных вариантов развития аварийных ситуаций, связанных с разгерметизацией оборудования, является горячий пролив легковоспламеняющихся жидкостей (ЛВЖ) и токсичных веществ (ТВ) на подстилающую поверхность с последующими их нестационарным испарением и формированием взрывоопасного или токсичного облака. Известные методики расчета массы токсичного или взрывоопасного облака, определяющей силу взрывного или токсичного воздействия, весьма разноречивы и предназначены только для установившихся процессов испарения опасных веществ. Комплексная модель для описания неблагоприятного события (аварии) может быть грубо разделена на три части: моделирование источника, моделирование распространения и моделирование воздействия на людей. Многие исследователи [1,2,3,4] уделяли внимание моделированию дисперсии облака газа или пара, при этом параметры источника заранее известны и не меняются со временем. Однако, есть недостаток точных моделей, описывающих источник облака пара, который оказывает влияние на предсказанную опасную зону. При аварийных проливах стабильных жидкостей поступление опасного вещества в окружающую среду связано с процессом испарения с поверхности пролива. Модели для определения массового потока с поверхности аварийного пролива при испарении делятся на две категории: упрощенные алгебраические формулы и подход вычислительной гидродинамики. Прямое численное моделирование испарения с использованием многофазной модели, такой как VOF модель [13], требует значительных вычислительных ресурсов из-за разномаштабности задач. Для моделирования поверхностных волн и конвективных структур в слое жидкости размеры вычислительной сетки должны быть порядка нескольких миллиметров, тогда как для расчета последующего распространения газа необходима расчетная область с размерами порядка нескольких километров. В зарубежной практике расчет испарения с поверхности пролива базируется на использовании полуэмпирического соотношения [5]. (1) где τ - время; k - коэффициент массоотдачи, м/с; M - молекулярная масса i -го компонента, кг/моль; T_l - температура жидкой фазы, К; R_0 - газовая постоянная; $P_{g,s}$ - давление насыщенных паров при начальной температуре. Коэффициент массоотдачи k принимаем: $k = 0,0048 \cdot \dots$ - скорость ветра на высоте 10м, м/с; - диаметр пролива, м; В модели [6] расчет массового потока от поверхности пролива в турбулентный пограничный слой осуществляется на основе корреляций Рейнольдса и Шмидта. В отечественных методиках [7, 8] для расчета

интенсивности испарения используется выражение: $J_{g,s} = 10^{-6}(5,83 + 4,1 \cdot U) \cdot P_{g,s} \cdot \sqrt{M}$ (2) где $J_{g,s}$ — интенсивность испарения жидкости, кг/(м²с); M — молекулярный вес вещества, кг/моль; U — скорость движения воздуха, м/с; $P_{g,s}$ — давление насыщенных паров при начальной температуре, мм.рт.ст;

Приведенные эмпирические зависимости не учитывают влияние на процесс испарения следующих факторов и явлений:

- нестационарность поступления вещества из пролива вследствие изменения температуры и состава жидкой фазы;
- изменение движущей силы процесса испарения, связанное с нестационарностью поступления вещества или аккумулярованием испаряющегося компонента над проливом;
- изменение турбулентной структуры потока над зеркалом разлива в случае, когда испаряющийся компонент имеет молекулярную массу M_g , отличающуюся от молекулярной массы окружающего воздуха M_a . При $M_g < M_a$ в некоторый момент времени может возникнуть плотностная конвекция, ускоряющая процесс испарения [9,10], а при $M_g > M_a$ может наблюдаться явление устойчивой стратификации, сопровождающееся подавлением турбулентности и снижением скорости потока паровоздушной смеси над зеркалом разлива [11];
- степень устойчивости атмосферы (распределение температуры воздуха по высоте);
- локальные особенности местонахождения пролива, связанные с наличием застройки, сооружений, перепада высот подстилающей поверхности.

Аналитическая модель испарения, разработанная в FFI, представлена в [12]. Эта модель была реализована в пакете FLUENT. Модель учитывает только тепловые эффекты. При этом предполагается, что пар, образующийся в результате процесса испарения, является нейтральным, то есть не влияет на окружающий поток воздуха. Как уже упоминалось выше, предположение о пассивном поведении примеси, может быть несправедливо, если гравитационные эффекты (например, естественная конвекция) становятся значительными. Использование вычислительной гидродинамики и пристеночных функций для описания процесса испарения позволяет решить проблему учета сложной взаимосвязи распространения пара с испарением пролива. В работах [13, 14] массовый расход от поверхности пролива определялся с помощью стандартных функций с учетом поправки на стефановский поток. Для дискретизации дифференциальных уравнений был использован метод контрольного объема, реализованный в программном комплексе FLUENT. Для учета изменения температуры жидкости при испарении с помощью пользовательских функций введено уравнение теплового баланса для пролива. При расчете последствий проливов многокомпонентных смесей и растворов необходимо также учитывать изменение состава пролива при испарении. Для многокомпонентных жидкостей потеря массы при испарении многокомпонентной жидкости не находится в прямо пропорциональной зависимости от времени из-за различной летучести компонентов. Фингас [15,16] определил эмпирически, что большинство типов сырой нефти и нефтепродуктов

испаряются в логарифмической зависимости от времени, и представил простую модель для прогнозирования доли потери веса при различных температурах. Однако, данные модели не обладают достаточной универсальностью, потому что они получены для ограниченных условий. В работе [17] также представлена эмпирическая модель испарения многокомпонентной смеси с плоской поверхностью. Согласно данной модели, количество образующегося пара выражается логарифмом времени, при этом результаты получены при условии неподвижности воздуха над поверхностью испарения. В настоящее время мало моделей, позволяющих учитывать, как изменение состава жидкости, так и взаимодействие между процессами распространения газа и испарения пролива. В связи с этим, разработка модели нестационарного испарения многокомпонентного пролива представляет большой интерес.