МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ 2010 год, том 22, номер 4, стр. 129-146

МОДЕЛИРОВАНИЕ ТЕХНОГЕННЫХ АВАРИЙ СО СЖИЖЕННЫМИ ТОКСИЧЕСКИМИ И ГОРЮЧИМИ ГАЗАМИ

© *2010 г.* ***А.А. Кулешов****, ***Н.М. Идальго Диас****, ***Г.М. Махвиладзе*****, ***С.Е. Якуш******

* Институт математического моделирования РАН, Москва;
e-mail: andrew_kuleshov@mail.ru
** University of Central Lancashire, Preston, UK
*** Институт проблем механики им. А.Ю. Ишлинского РАН, Москва

Рассматриваются задачи моделирования техногенных аварий со сжиженными токсическими и горючими газами. Распространение облаков тяжелых нереагирующих газов над неоднородной подстилающей поверхностью описывается двумерной моделью с осреднением по высоте облака. Проведено численное моделирование токсических аварий с распространением облаков хлора в городской застройке с определением количества пораженных людей. На основе двумерных осесимметричных уравнений Навье-Стокса, осредненных по Фавру, проведено численное моделирование горения газовоздушных топливных облаков в режиме огненного шара с расчетом теплового поражения людей.

Ключевые слова*:* техногенные аварии, токсические и горючие газы, распространение облаков тяжелых газов, огненный шар, оценка ущерба, численное моделирование

MODELLING OF INDUSTRIAL ACCIDENTS WITH LIQUEFIED TOXIC AND FLAMMABLE GASES

A.A. Kuleshov*, N.M. Hidalgo Dias*, G.M. Makhviladze**, S.E. Yakush***

* Institute for Mathematical Modeling of RAS, Moscow
** University of Central Lancashire, Preston, UK
*** Ishlinskii Institute for Problems in Mechanics of RAS, Moscow

Modeling of industrial accidents with liquefied toxic and flammable gases is considered. Propagation of non-reacting heavy gas clouds over complex terrains is described by a two-dimensional model with averaging over the cloud height. Numerical simulation of a toxic accident initiated by chlorine release in the urban environment has been performed and the number of injured people has been computed. A two-dimensional axisymmetric model based on the Favre-averaged Navier-Stokes equations is used to model the fireballs occurring upon combustion of hydrocarbon fuel-air clouds. Zones of various thermal hazards for people have been obtained.

Key words*:* industrial accidents, toxic and flammable gases, heavy gas clouds propagation, fireball, consequence analysis, numerical simulation

Введение

Аварии на объектах транспортировки и хранения сжиженных токсических и горючих газов представляют большую опасность как для персонала на этих объектах, так и для населения прилегающих районов и наносят большой экономический ущерб [1], поэтому изучение таких аварий является весьма актуальным. Поскольку проведение пол-

номасштабных натурных экспериментов сопряжено с большими трудностями, основным инструментом исследования является метод математического моделирования, с помощью которого можно прогнозировать динамику вероятных аварий, проводить оценку их возможных последствий, а также проводить реконструкцию событий и анализ уже произошедших аварий.

Ниже будут рассмотрены два типа техногенных аварий со сжиженными газами: аварии с токсическими тяжелыми газами, для которых проведено моделирование распространения образовавшегося газовоздушного облака под действием гравитационных сил и ветра в городской застройке с определением токсического поражения населения, и аварии со сгоранием топливовоздушных облаков в режиме огненного шара с расчетом зон термического поражения.

В качестве опасных веществ в работе рассматриваются горючие и токсические газы, хранящиеся в сжиженном состоянии при повышенном давлении и при температуре окружающей среды. При разгерметизации (разрушении) резервуара или трубопровода сжиженный газ практически мгновенно испаряется из разлития и образует облако газовоздушной смеси. В работе рассматриваются так называемые тяжелые газы, истинная плотность которых при атмосферном давлении выше плотности воздуха. Это достаточно широкий класс опасных газов, к которым относятся все горючие нефтяные газы − пропан, бутан и их смеси, и самый широко используемый в промышленном производстве токсический газ – хлор. При моделировании огненных шаров в настоящей работе в качестве топлива рассматривается бутан.

Возникающие при реальных аварийных выбросах турбулентные течения носят сложный трехмерный характер, что существенно осложняет их численное моделирование. Однако для целей оперативной оценки развития аварийных ситуаций необходимы модели, с помощью которых можно на персональных ЭВМ проводить быстрые расчеты динамики рассматриваемых техногенных аварий и оценивать их последствия. При построении таких моделей целесообразно использовать упрощенные двумерные постановки задач с учетом особенностей, присущих течениям различных типов. Для сведения пространственной задачи к двумерной в модели распространения облаков тяжелых нереагирующих газов проведено осреднение по вертикальной координате, а для горения облаков пренебрегается влиянием ветра и вводится предположение о симметрии течения относительно вертикальной оси.

1. Моделирование токсических аварий со сжиженными газами

Математическая модель. Для описания процесса распространения облаков тяжелых газов над неоднородной подстилающей поверхностью была использована разработанная ранее двумерная модель [2, 3], построенная методом осреднения по высоте течения исходных трехмерных уравнений гидродинамики в эйлеровых переменных. Эта модель является обобщением известной модели течения несжимаемой жидкости со свободной поверхностью – модели мелкой воды [4] на случай гидродинамических течений с переменными плотностью и массовыми концентрациями компонентов газовой среды. Данные параметры позволяют судить о достижении предельно допустимых концентраций (ПДК) в облаке и оценивать вероятность токсического поражения персонала промышленных объектов и населения прилегающих жилых районов.

Система уравнений двумерной модели [2, 3] рассматривается в декартовых координатах в прямоугольной области $\Omega = \{0 \le x \le l_1, 0 \le y \le l_2\}$ на горизонтальной плоскости *XY*

$$\frac{\partial \overline{\rho}\delta}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\,\overline{u}\delta}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\rho}\,\overline{v}\delta}{\partial y} = Q, \tag{1.1}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\overline{u}\delta}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\overline{u}^2\delta}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\rho}\overline{u}\overline{v}\delta}{\partial y} = -\frac{g\delta^2}{2}\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial x} - g(\overline{\rho}-\rho_0)\delta\frac{\partial(z_0+\delta)}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\tau}_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\tau}_{yx}}{\partial y} + \overline{F}_1 + F_{1H} + F_{1z_0}, \tag{1.2}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\overline{v}\delta}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\overline{u}\overline{v}\delta}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\rho}\overline{v}^2\delta}{\partial y} = -\frac{g\delta^2}{2}\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial y} - g(\overline{\rho}-\rho_0)\delta\frac{\partial(z_0+\delta)}{\partial y} + \frac{\partial \overline{\tau}_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\tau}_{yy}}{\partial y} + \overline{F}_2 + F_{2H} + F_{2z_0}, \tag{1.3}$$

$$\frac{\partial \overline{\rho}\overline{C}\delta}{\partial t} + \frac{\partial \overline{\rho}\overline{u}\overline{C}\delta}{\partial x} + \frac{\partial \overline{\rho}\overline{v}\overline{C}\delta}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_t\frac{\partial \overline{C}\delta}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(D_t\frac{\partial \overline{C}\delta}{\partial y}\right) + J_C + Q_C, \tag{1.4}$$

$$\overline{\rho} = \frac{\rho_0}{1+(M_0/M-1)\overline{C}}, \tag{1.5}$$

где $\overline{\rho}, \overline{u}, \overline{v}, \overline{C}$ – плотность, компоненты скорости $\overline{\mathbf{V}} = (\overline{u}, \overline{v})^T$ и относительная массовая концентрация газа, осредненные по толщине облака δ, которая также определяется при решении системы (1.1)-(1.5). Градиент давления в уравнениях (1.2) и (1.3) выражен через члены с градиентами плотности, толщины облака и функции $z_0(x, y)$, задающей рельеф подстилающей поверхности. g – ускорение силы тяжести, M – молекулярная масса газа, ρ_0, M_0 – плотность и молекулярная масса окружающего атмосферного воздуха соответственно. Поступление газа из поверхностных источников в (1.1) и (1.4) задается источниковыми членами Q и $Q_C = C_0 Q$, где C_0 – относительная массовая концентрация газа в поверхностном источнике. Осредненные по толщине облака компоненты тензора вязких напряжений равны

$$\overline{\tau}_{ik} = \mu_t\left(\frac{\partial \overline{V}_i\delta}{\partial x_k} + \frac{\partial \overline{V}_k\delta}{\partial x_i}\right), \quad i,k = 1,2, \quad x_1 = x, \quad x_2 = y, \quad \overline{V}_1 = \overline{u}, \quad \overline{V}_2 = \overline{v}, \tag{1.6}$$

для коэффициента турбулентной вязкости был использован двумерный аналог модели [5]

$$\mu_t = \frac{\overline{\rho}l^2}{2}\left\{\left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{v}}{\partial x}\right)^2 + 2\left[\left(\frac{\partial \overline{u}}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial \overline{v}}{\partial y}\right)^2\right]\right\}^{1/2}, \tag{1.7}$$

где длина пути перемешивания l полагалась равной толщине облака $l = \delta(x, y, t)$. Коэффициент турбулентной диффузии определяется формулой $D_t = \mu_t / \mathrm{Pr}_t$, где Pr_t=0.7 – турбулентное число Прандтля. Взаимодействие облака с окружающей средой описыва-

ется источниковыми членами в уравнениях (1.2)–(1.4), где $\overline{\mathbf{F}} = -\xi\delta\overline{\rho}\overline{\mathbf{V}}\,|\,\overline{\mathbf{V}}\,|$, $\overline{\mathbf{F}} = (\overline{F}_1, \overline{F}_2)^T$ – объемная сила трения вещества облака на поверхности препятствий, $\xi = c_d s$ [м$^{-1}$] – коэффициент трения, включающий коэффициент аэродинамического сопротивления c_d (учитывающий шероховатость поверхности препятствий) и удельную поверхность препятствий s [м$^{-1}$] в рассматриваемом объеме среды, $\mathbf{F}_H$ – сила трения вещества облака и атмосферного воздуха на верхней границе облака при наличии ветра, имеющего скорость $\mathbf{V}_0 = (u_0, v_0)$, $\mathbf{F}_H = -\xi_0\rho_0(\overline{\mathbf{V}} - \mathbf{V}_0)\,|\,\overline{\mathbf{V}} - \mathbf{V}_0\,|$, $\mathbf{F}_H = (F_{1H}, F_{2H})^T$; ξ_0 – безразмерный эмпирический коэффициент трения вещества облака и атмосферного воздуха на верхней границе облака, $\mathbf{F}_{z_0}$ – сила трения вещества облака на подстилающей поверхности $\mathbf{F}_{z_0} = -\xi_1\overline{\rho}\overline{\mathbf{V}}\,|\,\overline{\mathbf{V}}\,|$, $\mathbf{F}_{z_0} = (F_{1z_0}, F_{2z_0})^T$, ξ_1 – безразмерный коэффициент трения, учитывающий шероховатость подстилающей поверхности. Источниковый член J_C описывает разбавление газа в облаке окружающим воздухом в результате процесса турбулентной диффузии на верхней границе облака $J_C = -\xi_0\rho_0\,|\,\overline{\mathbf{V}} - \mathbf{V}_0\,|\,\overline{C}$.

Граничные и начальные условия

Для осредненной по высоте системы уравнений граничные условия задаются только на открытой боковой границе: $\left.\dfrac{\partial\varphi}{\partial n}\right|_{\Gamma} = 0$, $\varphi = (\overline{\rho}, \overline{u}, \overline{v}, \overline{C})$, n – нормаль к границе Γ области Ω.

Начальные значения параметров вне исходного облака − это параметры окружающей среды, а в исходном облаке в начальный момент времени задается относительная массовая концентрация газа $\overline{C}^0$ и из уравнения состояния (1.5) находится значение плотности газа $\overline{\rho}^0$, начальная скорость в облаке полагается равной нулю $\overline{\mathbf{V}}^0 = 0$.

Таким образом, модель (1.1)-(1.7) учитывает все основные физические явления, происходящие в рассматриваемом процессе: гравитационное растекание, турбулентность, трение о подстилающую поверхность и препятствия, разбавление облака воздухом на верхней границе и наличие ветра.

Методика оценки токсического поражения при химических авариях. При оценке токсического поражения была применена методика [6]. В результате численного моделирования по двумерной модели распространения облаков тяжелых газов (1.1)-(1.7) определяются поля средних по высоте значений концентрации $\overline{C}(x, y, t)$ и плотности газа $\overline{\rho}(x, y, t)$ в облаке, а также высота облака $\delta(x, y, t)$. Осредненная по высоте относительная массовая концентрация газа в облаке газовоздушной смеси равна $\overline{C} = \overline{\rho}_G / \overline{\rho}$, где $\overline{\rho}_G$ [г/м^3] – осредненная парциальная плотность газа (масса газа в единице объема). Тогда, зная $\overline{C}$ и $\overline{\rho}$, находим $\overline{\rho}_G = \overline{\rho}\overline{C}$. Зная $\overline{\rho}_G(x, y, t)$, можем рассчитать поле распределения токсодоз $D(x, y, t)$ [г·с/м^3] за время t по формуле $D(x, y, t) = \int_0^t \overline{\rho}_G(x, y, \tau)d\tau$, причем при вычислении интеграла учитываются лишь те промежутки времени, когда толщина облака является достаточной для достижения органов дыхания человека: $\delta(x, y, t) \geq H_D$.

На основе поля распределения токсодоз рассчитывается поле распределения токсоэффектов $\mathbf{T} = (T_0, T_1, T_2, T_3, T_4)$ – безразмерный пятикомпонентный вектор по степеням поражения человека: 0 – смертельная степень поражения, 1 – тяжелая, 2 – средняя, 3 – легкая, 4 – пороговая, компоненты которого определяются по формуле $T_k(x,y,t) = D(x,y,t)/D_k^{50}$, $k = \overline{0,4}$, где $\mathbf{D}^{50} = (D_0^{50}, D_1^{50}, D_2^{50}, D_3^{50}, D_4^{50})$ – вектор средних токсодоз, вызывающих соответствующую степень поражения человека. Например, для хлора $\mathbf{D}_{Cl_2}^{50} = (1726, 1086, 734, 382, 126)$ [г·с/м^3].

Затем по значениям поля токсоэффектов определяется поле вероятности поражения $\mathbf{P}(x,y,t)$, $\mathbf{P} = (P_0, ..., P_4)$ – также пятикомпонентное векторное поле по степеням поражения человека $P_k(x,y,t) = F[T_k(x,y,t)]$, где функция F задана таблично [7]:

Таблица 1.

T	0.05	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
P	0.001	0.003	0.01	0.02	0.035	0.06	0.10	0.20	0.30	0.40

T	1	1.5	2	2.5	3	3.5	4	4.5	5	>5
P	0.50	0.67	0.79	0.87	0.92	0.95	0.97	0.98	0.99	1.0

Распределение вероятности поражения людей на площади поражения (координатный закон поражения) характеризует масштабы поражения при химической аварии.

На основе координатного закона поражения определяется приведенная зона поражения $\boldsymbol{S}^P(t)$ как интеграл от поля вероятности поражения по площади поражения $S(t)$:

$$\mathbf{S}^P(t) = \int\limits_{S(t)} \mathbf{P}(x,y,t)\,dxdy\,, \quad \mathbf{S}^P(t) = (S_0^P, ..., S_4^P)\,.$$

Приведенная зона поражения является основной характеристикой поражающего действия токсических веществ при химических авариях. Используя значения приведенной зоны поражения, рассчитанные для различной степени тяжести поражения людей, определяются значения медико-санитарных последствий: величины безвозвратных потерь (летальные поражения) и санитарных потерь (поражений различной степени тяжести: тяжелых, средних, легких, пороговых).

Пусть $n(t)$ – количество людей в момент времени t, находящихся на площади поражения $S(t)$, тогда $N(t) = n(t)/S(t)$ – плотность людей в зоне поражения. Количество пораженных людей по степеням поражения определяется как произведение плотности людей на приведенную зону поражения для соответствующей степени поражения

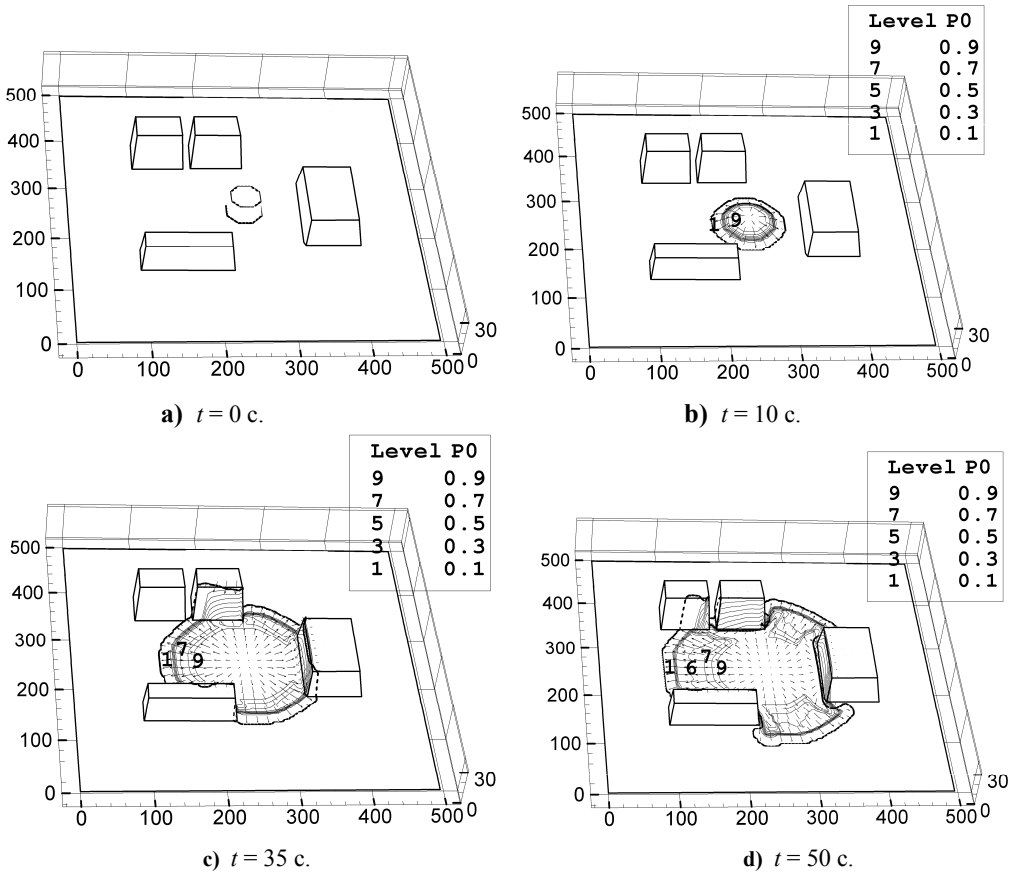
$$\mathbf{N}^P(t) = N(t)\mathbf{S}^P(t), \quad \mathbf{N}^P = (N_0^P, ..., N_4^P)\,.$$

На основе разработанного ранее алгоритма численного решения задачи (1.1)–(1.7), основанного на методе расщепления по физическим процессам с решением возникающих при этом подсистем уравнений разностным методом на прямоугольных сетках (см. [2,3]), была создана новая версия программного комплекса на языке С++. В программ-

ный комплекс был включен модуль для вычисления токсического поражения при химических авариях по приведенной выше методике.

Результаты численного моделирования аварии с распространением хлора. Моделирование распространения облака хлора в городской застройке проводилось при отсутствии ветра. Моделируемая область – квадрат размером 500×500м^2, представляющий собой фрагмент городской застройки, высота зданий составляет 20 и 30 м. В центре области расположен источник, имеющий форму цилиндра высотой 15 м и диаметром 50 м. Относительная массовая концентрация хлора в источнике в начальный момент времени составляет 10%, ветер отсутствует. Плотность людей на местности равна 1 человек/50 м^2, общее количество людей – 5000 человек.

На рис.1.1a показана форма облака в начальный момент времени. На рис.1.1b,c,d показаны результаты расчетов: граница облака (внешний контур) и распределение вероятности смертельного поражения людей P0 (внутренние контуры) в моменты времени 10, 35 и 50 с. Векторами показано поле скорости течения. Токсическое поражение людей рассчитывается, когда толщина облака превышает $H_D = 1$ м.



a) $t = 0$ с. **b)** $t = 10$ с.

c) $t = 35$ с. **d)** $t = 50$ с.

Рис.1.1. Граница облака газовоздушной смеси (внешний контур) и вероятность смертельного поражения людей P0 в моменты времени $t = 0, 10, 35, 50$ с.

На рис.1.2 приведена зависимость от времени числа пораженных людей различной степени тяжести, из которой видно, что при заданной начальной концентрации хлора 10% количество погибших значительно превышает количество людей с другими степенями поражения.

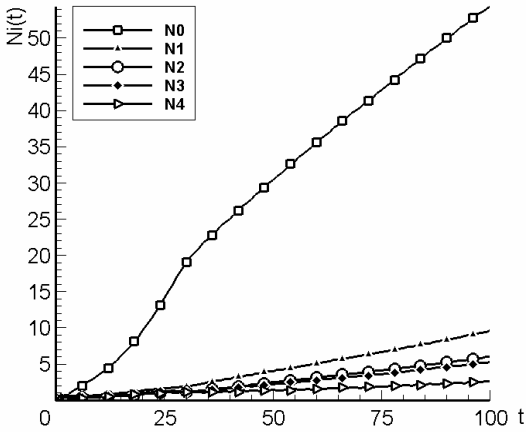


Рис.1.2. Число людей с токсическими поражениями различной степени тяжести.

2. Моделирование горения топливовоздушных облаков

Рассмотрим процессы, происходящие при сгорании топливовоздушного облака, образующегося в результате разрушения резервуара с находящимся под высоким давлением углеводородным топливом.

Разрушение оболочки резервуара со сжиженным газом приводит к выделению внутренней энергии вскипающей жидкости и образованию двухфазного парокапельного облака, сопровождающемуся сильной турбулизацией потока. Как показывают эксперименты, при взрывном вскипании сжиженных нефтяных газов образуются капли диаметром 10-100 мкм, испарение капель топлива в насыщенном облаке контролируется процессами турбулентного смешения с воздухом и происходит за времена, гораздо меньшие, чем время выгорания облака [8,9] (для типичных аварий время горения топлива в режиме огненного шара составляет от нескольких секунд до 10-20 секунд, тогда как время полного испарения мелких капель сжиженного пропана на порядок величины меньше). Поэтому в работе рассматривается однофазная модель процесса, существенно упрощающая численные расчеты [10,11].

Математическая модель. Горение облака топливовоздушной смеси, образующегося при мгновенном разрушении резервуара высокого давления, моделируется путем решения двумерных осесимметричных уравнений Навье-Стокса, осредненных по Фавру, для замыкания которых используется стандартная $k-\varepsilon$ модель турбулентности (см. [8-11]). Система определяющих уравнений имеет вид

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\nabla\cdot\left(\rho\mathbf{U}\right)=0, \qquad (2.1)$$

$$\frac{\partial \rho \mathbf{U}}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{U} \mathbf{U} \right) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \left(\rho - \rho_a \right) \mathbf{g}, \tag{2.2}$$

$$\frac{\partial \rho h}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{U} h \right) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{\mathrm{Pr}_t} \nabla h \right) + Q_F w - S_R, \tag{2.3}$$

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{U} Y_i \right) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{\mathrm{Sc}_t} \nabla Y_i \right) + w_i, \quad i = 1, \ldots, N-1, \tag{2.4}$$

$$\frac{\partial \rho k}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{U} k \right) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{\sigma_k} \nabla k \right) + G - \rho \varepsilon, \tag{2.5}$$

$$\frac{\partial \rho \varepsilon}{\partial t} + \nabla \cdot \left(\rho \mathbf{U} \varepsilon \right) = \nabla \cdot \left(\frac{\mu}{\sigma_\varepsilon} \nabla \varepsilon \right) + \frac{\varepsilon}{k} \left(C_1 G - C_2 \rho \varepsilon \right), \tag{2.6}$$

$$P_a = \rho R^0 T \sum_{i=1}^{N} \frac{Y_i}{m_i}, \tag{2.7}$$

$$\sum_{i=1}^{N} Y_i = 1, \quad \sum_{i=1}^{N} w_i = 0, \tag{2.8}$$

где все переменные являются функциями цилиндрических координат (r, z) и времени t, ρ – плотность, $\mathbf{U} = (u, v)$ – вектор скорости, $\nabla \cdot \mathbf{U} = \frac{1}{r} \frac{\partial ru}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z}$, P – давление, $p = P - P_a$ – избыточное давление, P_a, ρ_a – давление и плотность невозмущенной атмосферы, $\mathbf{g} = (0, -g)$ – ускорение силы тяжести. Газ состоит из $N = 5$ компонент (топливо, O_2, CO_2, H_2O, N_2) с относительными массовыми концентрациями Y_i, теплоемкостями $C_{p,i}$ и молекулярными массами m_i, $h = \sum_{i=1}^{N} Y_i \int_{T_a}^{T} C_{p,i} dT$ – энтальпия, T – температура. Уравнения переноса (2.4) решаются для всех компонент, кроме нейтрального газа (N_2), массовая доля последнего определяется из первого балансного соотношения (2.8). Уравнение состояния газа (2.7) записано в приближении существенно дозвуковых течений, для которых $|p| \ll P_a$: в левой части (2.7) стоит давление атмосферы P_a, а не полное давление $P = P_a + p$. Тем самым, в уравнениях оказываются «отфильтрованными» звуковые волны, несущественные для данной задачи, но усложняющие процедуру ее численного решения.

Эффективная вязкость газа μ является суммой ламинарной μ_l и турбулентной μ_t составляющих, последняя находится как функция турбулентной кинетической энергии k и скорости ее диссипации ε. Тензор вязких напряжений $\boldsymbol{\tau}$ выражается через градиенты скорости и турбулентные характеристики как

$$\boldsymbol{\tau} = \mu\left(\nabla\mathbf{U} + (\nabla\mathbf{U})^T - \frac{2}{3}(\nabla\cdot\mathbf{U})\mathbf{I}\right) - \frac{2}{3}\rho k\mathbf{I}, \quad \mu = \mu_l + \mu_t, \quad \mu_t = C_\mu\rho\frac{k^2}{\varepsilon}, \tag{2.9}$$

где $\mathbf{I}$ – единичный тензор. При вычислении скорости генерации турбулентной энергии G учитывается влияние сил плавучести:

$$G = \mu_t\left(\left|\nabla\mathbf{U} + (\nabla\mathbf{U})^T\right|^2 - \frac{2}{3}(\nabla\cdot\mathbf{U})^2\right) - \frac{2}{3}\rho k(\nabla\cdot\mathbf{U}) + \frac{\mu_t g}{\rho}\frac{\partial\rho}{\partial z}. \tag{2.10}$$

Используется стандартный набор констант, входящих в модель турбулентности (2.5), (2.6), (2.9): $C_\mu = 0.09$, $C_1 = 1.44$, $C_2 = 1.92$, $\sigma_k = 1.0$, $\sigma_\varepsilon = 1,3$, $\mathrm{Pr}_t = \mathrm{Sc}_t = 0.7$.

Горение топлива описывается одностадийной необратимой брутто-реакцией

$$1 \text{ кг топлива} + \nu_{O_2} \text{ кг } O_2 \Rightarrow \nu_{CO_2} \text{ кг } CO_2 + \nu_{H_2O} \text{ кг } H_2O,$$

где ν_i – массовые стехиометрические коэффициенты (здесь и ниже в качестве индекса i используются обозначения соответствующих химических компонент, топливо обозначается индексом F). Скорость турбулентного горения описывается моделью дробления вихрей (Eddy Breakup model) [12], согласно которой скорость горения при высокой температуре не зависит от кинетики реакций, а определяется исключительно скоростью турбулентного смешения компонент. Массовая скорость потребления топлива в единице объема выражается как

$$w = \rho A\frac{\varepsilon}{k}\min\left(Y_F, \frac{Y_{O_2}}{\nu_{O_2}}, \frac{B(Y_{CO_2} + Y_{H_2O})}{\nu_{CO_2} + \nu_{H_2O}}\right), \tag{2.11}$$

где $A = 4$, $B = 0.5$. Скорость тепловыделения в правой части уравнении (2.3) равна произведению скорости реакции (2.11) на теплоту сгорания топлива Q_F. Скорости образования или потребления индивидуальных компонент в уравнении (2.4) выражаются через скорость w и массовые стехиометрические коэффициенты как $w_i = \pm\nu_i w$, где знак "плюс" берется для продуктов реакции, знак "минус" – для топлива и окислителя, при этом $\nu_F = 1$ по определению w.

Метод численного решения. Задача (2.1)–(2.11) аппроксимировалась методом конечного объема на ортогональной сетке, при этом компоненты скорости определялись на соответствующих границах ячеек, остальные переменные – в центрах ячеек («разнесенная» сетка). Общая процедура решения состоит в решении уравнений движения с вычисленным на предыдущем временном шаге полем давления, с последующей коррекцией давления и скорости для устранения невязки уравнения неразрывности [13]. В отличие от известного метода SIMPLE, при использовании приближения существенно дозвуковых течений уравнение неразрывности (2.1) в явном виде не решается, плотность газа определяется из уравнения состояния (2.7) по рассчитанным концентрациям компонент и температуре, тогда как уравнение неразрывности (2.1) используется для получения эллиптического уравнения для поправки давления. Все уравнения переноса аппрок-

симировались по неявной схеме первого порядка по времени и решались методом продольно-поперечных прогонок. Эллиптическое уравнение для поправки давления решалось методом многосеточной релаксации, обеспечивающим равномерную сходимость независимо от размеров сетки. Расчетная программа реализована на языке C++.

Расчет радиационного теплопереноса и тепловых потоков от огненного шара. В уравнение энергии (2.3) входит источниковый член S_R, описывающий процессы радиационного теплопереноса. Оптические свойства продуктов горения описывались моделью взвешенной суммы серых газов; перенос излучения рассчитывался для каждого серого газа либо по модели объемного высвечивания, либо на основе P_1-приближения метода сферических гармоник (более подробно используемая модель описана в [11], решение уравнений второго порядка для плотности энергии излучения осуществлялось многосеточным методом). Такой подход позволяет рассчитать перенос тепла излучением в самом огненном шаре, однако обе эти модели не дают необходимую точность на больших расстояниях от огненного шара. Поэтому для расчета тепловых потоков и зон поражения использовался метод Монте-Карло.

Метод Монте-Карло основан на моделировании процессов переноса энергии тепловым излучением путем отслеживания большого количества представительных групп фотонов. Фотоны распределяются по ячейкам расчетной сетки, при этом количество фотонов в *i*-й ячейке пропорционально количеству энергии, высвечиваемой в этой ячейке в единицу времени $n_i \approx k_i \sigma T_i^4 \Delta V_i$, здесь k_i – коэффициент поглощения, σ – постоянная Стефана-Больцмана, T_i – температура, V_i – объем *i*-й ячейки. Каждому фотону назначается энергия $Q_{ph} = k_i \sigma T_i^4 \Delta V_i / n_i$, так что сумма по всем фотонам дает полную энергию, излучаемую в расчетной области в единицу времени. Затем отслеживаются процессы испускания, распространения и поглощения каждого фотона (рассеяние излучения в расчет не принимается). Заметим, что при использовании модели взвешенной суммы серых газов вычисления проводятся для каждого серого раза отдельно, а не для среднего по всем серым газам коэффициента поглощения.

Суммирование энергий всех фотонов, поглощенных в ячейке сетки, дает после деления на объем этой ячейки плотность мощности поглощаемого излучения. Соответственно, суммированием по всем фотонам, пересекшим грань ячейки на границе области, и делением на площадь этой ячейки можно получить поток энергии, падающей на единицу поверхности в единицу времени.

В отличие от уравнений гидродинамики, которые при осесимметричной постановке задачи решаются в двумерной области, расчет переноса излучения требует рассмотрения полной трехмерной геометрии, а отслеживание точек пересечения траектории фотона с координатными поверхностями сопряжено со значительным объемом вычислений (более детальное описание реализации метода см. в [11]).

Методика определения ущерба от теплового поражения. Особенностью теплового излучения от огненных шаров является кратковременность воздействия (для типичных промышленных аварий время горения огненного шара с массой топлива порядка нескольких тонн составляет около десяти секунд), так что опасность теплового излучения зависит как от величины теплового потока, так и от продолжительности воздейст-

вия. Как показали исследования, эффекты воздействия теплового излучения определяются произведением теплового потока в степени 4/3 и времени экспозиции.

Воздействие теплового излучения на людей не является детерминированным, а носит вероятностный характер. Например, при заданном тепловом потоке q_s (Вт/м^2) и времени экспозиции t с определенной вероятностью может произойти как летальный исход, так и могут быть получены лишь ожоги первой или второй степени. Для количественной характеристики вероятности тех или иных последствий в настоящее время широко применяются модели, основанные на использовании пробит-функций [14, 15].

Пробит-функция Pr связана с вероятностью наступления заданных последствий P_i по следующей формуле:

$$P_i = 50\left[1+\frac{\mathrm{Pr}-5}{|\mathrm{Pr}-5|}\,\mathrm{erf}\left(\frac{|\mathrm{Pr}-5|}{\sqrt{2}}\right)\right], \qquad (2.12)$$

где вероятность P_i выражена в процентах. Связь между характеристиками воздействия и пробит-функцией устанавливается отдельно для различных последствий. Для нестационарного воздействия теплового излучения в литературе приведены следующие соотношения: вероятность достижения ожогов первой степени соответствует пробит-функции $\mathrm{Pr}_I = -39.83 + 3.0186\ln\left(q_s^{4/3}t\right)$; вероятность достижения ожогов второй степени соответствует пробит-функции $\mathrm{Pr}_{II} = -43.14 + 3.0188\ln\left(q_s^{4/3}t\right)$; вероятность летального исхода для незащищенных специальным костюмом людей соответствует пробит-функции $\mathrm{Pr}_L = -36.38 + 2.56\ln\left(q_s^{4/3}t\right)$ (в этих формулах тепловой поток q_s измеряется в Вт/м^2, время экспозиции t - в секундах).

Применение указанных формул для пробит-функций к результатам численных расчетов осложняется тем, что получаемые в расчетах потоки не являются постоянными во времени. Фактически, по результатам расчетов устанавливается термическая доза $I_s = \int_0^t q_s(\tau)\,d\tau$, выражаемая в Дж/м^2. Поэтому для вычисления пробит-функции принимается следующее приближение: $q_s^{4/3}t \approx I_s^{4/3}t_{FB}^{-1/3}$, где t_{FB} – время горения огненного шара, определяемое по зависимости суммарной скорости тепловыделения от времени.

Результаты численного моделирования горения газовоздушных топливных облаков.

Численное моделирование огненного шара при горении 2 тонн бутана

Данный сценарий соответствует параметрам натурного эксперимента [16], в котором огненный шар возникал при разрушении резервуара со сжиженным бутаном с массой топлива $M_0 = 2000$ кг. Содержимое резервуара предварительно нагревалось до температуры 100°С ($T_0 = 373$ K, что соответствует давлению насыщенных паров $P_0 = 15$ бар). Расчеты проводились на неравномерных сетках, содержащих 100×200 ячеек в радиальном и вертикальном направлениях.

После разгерметизации по механизму BLEVE (Boiling Liquid Expanding Vapor Explosion), топливо разлетается, смешиваясь с окружающим воздухом. Возникающее топливовоздушное облако зажигается вблизи источника топлива, в результате в атмосфере возникает огненный шар. В численных расчетах начальные условия задавались по результатам моделирования процесса образования облака при мгновенном разрушении резервуара. Затем в течение короткого времени ($\Delta t_i = 0.5$ с) расчет проводился без зажигания; за это время происходило согласование полей переменных и дополнительное смешение топлива с воздухом за счет турбулентной диффузии. По окончании данной стадии осуществлялось зажигание топлива в очаге, расположенном в начале координат.

На рис.2.1 показана структура горящего облака в моменты времени t = 1 – 8 секунд после зажигания.

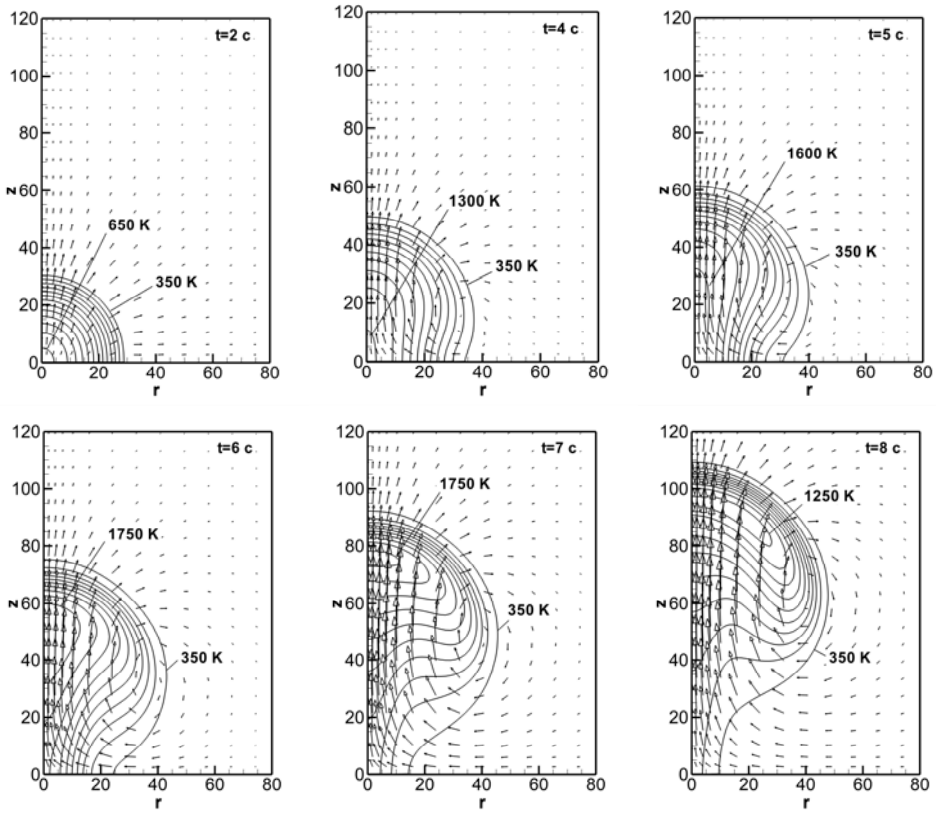


Рис.2.1. Структура горящего облака при полном разрушении резервуара со сжиженным бутаном с массой топлива $M_0 = 2 \cdot 10^3$ кг в различные моменты времени.

Для каждого момента времени изолиниями показано поле температур, векторами здесь же показано поле скорости. Воспламенение образующейся топливовоздушной смеси в центре облака приводит на начальном этапе к радиальному распространению волны горения по перемешанной смеси ($t = 1$ с). Поле скорости на этом этапе также име-

ет радиальный характер, соответствующий простому расширению газа. Поскольку облако переобогащено топливом, в распространяющейся по облаку волне горения происходит выгорание кислорода, а оставшаяся часть топлива догорает затем в диффузионном режиме, смешиваясь с кислородом по внешней оболочке огненного шара. Под действием сил плавучести горячие продукты начинают всплывать вверх, поле скорости приобретает вихревой характер, а полусферическое облако отрывается от земли и трансформируется в грибовидный огненный шар ($t = 4$ с). По мере догорания топлива температура газа падает, а продукты поднимаются в атмосфере в виде термика ($t = 8$ с).

Интегральные характеристики огненного шара, полученные в расчетах, хорошо согласуются с экспериментальными данными работы [16]. Так, максимальный диаметр огненного шара, определенный по изотерме $T = 500$ K, составил в расчетах 80 м, а в экспериментах – 85 м. Время начала отрыва огненного шара от поверхности составило 3 с, а в экспериментах – 3.6 с, полное время горения – 7 с, а в экспериментах – 6.5 с.

Для данного эксперимента полная энергия сгорания топлива составляет $Q_{tot} = 9.15 \cdot 10^{10}$ Дж. На рис.2.2 представлены рассчитанные зависимости от времени скорости тепловыделения dQ/dt (где Q – энергия горения топлива, выделившаяся к моменту времени t), а также доли полной выделившейся энергии Q/Q_{tot} (последняя величина также характеризует массовую долю топлива, сгоревшую в огненном шаре к моменту времени t). Общая продолжительность горения огненного шара для данных параметров задачи составляет $t_{FB} = 7.5$ с (с учетом задержки зажигания Δt_i; за время t_{FB} сгорает 95% массы топлива).

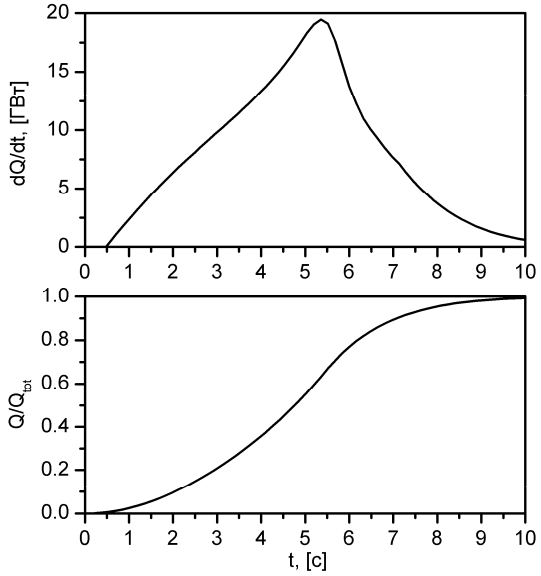


Рис.2.2. Зависимости от времени полной скорости тепловыделения *dQ/dt* (*верхний рисунок*) и доли выделившейся теплоты Q/Q_{tot} (*нижний рисунок*) при горении бутанового огненного шара с массой топлива $M_0 = 2 \cdot 10^3$ кг.

На рис.2.3 представлены радиальные распределения тепловых потоков от огненного шара в различные моменты времени $q_s(r,t)$, а также радиальное распределение термической дозы $I_s(r)$, полученное путем интегрирования тепловых потоков по времени. Для обоих графиков использован логарифмический масштаб по оси ординат. Видно, что на начальной стадии горения, когда огненный шар касается земной поверхности, наиболее интенсивные тепловые потоки достигаются непосредственно под самим огненным шаром. По мере того как горящее облако увеличивается в размерах и удаляется от поверхности, тепловой поток оказывается распределенным по радиусу более равномерно. После выгорания большей части топлива тепловые потоки резко ослабляются.

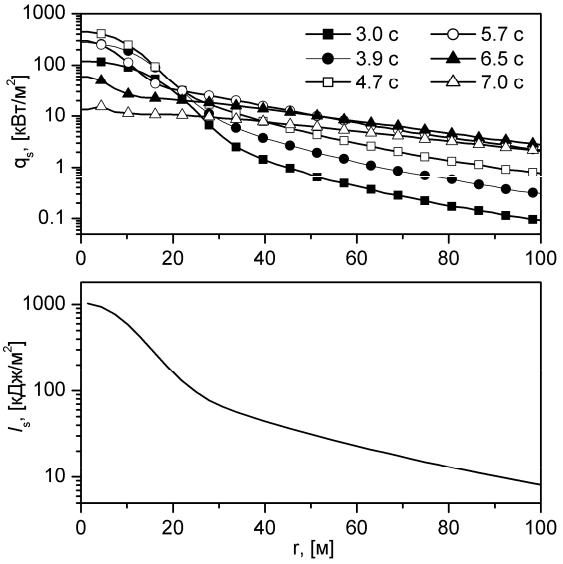


Рис.2.3. Радиальные распределения тепловых потоков q_S от огненного шара при горении $2 \cdot 10^3$ кг бутана в различные моменты времени (*верхний рисунок*) и распределение термической дозы на поверхности I_S (*нижний рисунок*).

Вероятности поражений различной степени тяжести можно получить по рассчитанной термической дозе и времени существования огненного шара при помощи пробит-функции (2.12). На рис.2.4 построены радиальные распределения вероятности ожогов первой и второй степени, а также летального исхода от воздействия теплового излучения огненного шара (вероятности поражения выражены в процентах), а на рис.2.5 – соответствующие зоны поражения. Отметим, что в данной работе рассчитаны тепловые потоки на горизонтальную поверхность. Вероятность поражения стоящего человека может быть получена аналогично, но требует специальных расчетов.

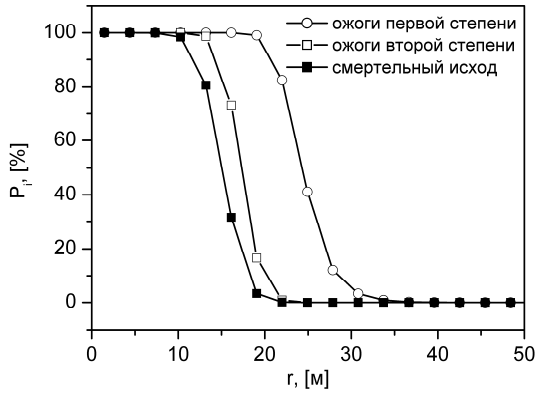


Рис.2.4. Вероятность поражений различной степени тяжести от теплового излучения огненного шара с массой бутана $M_0 = 2 \cdot 10^3$ кг.

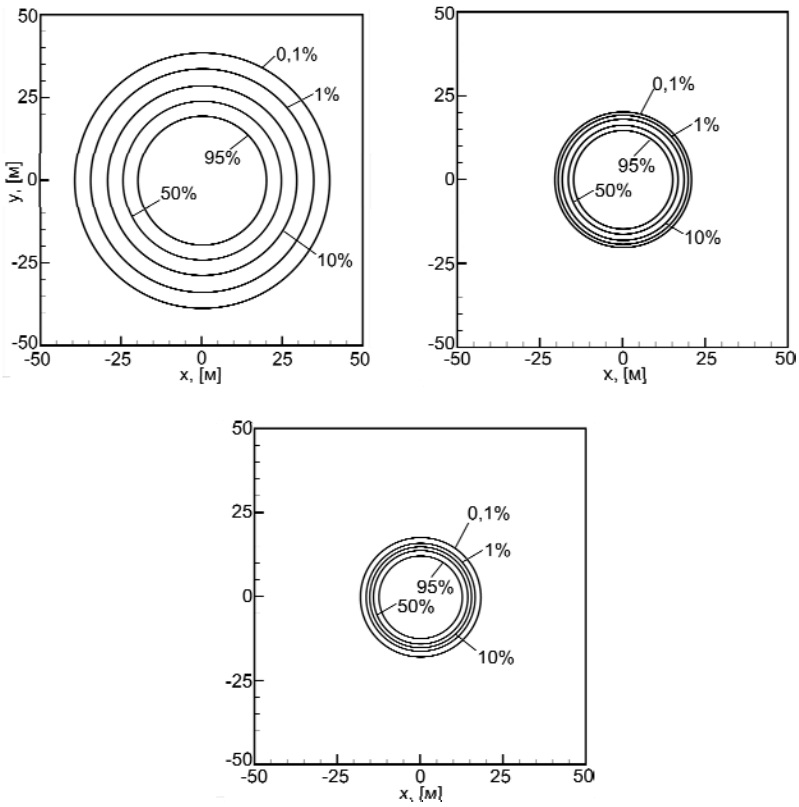


Рис.2.5. Зоны поражения различной степени тяжести при горении $2 \cdot 10^3$ кг бутана (слева направо): ожоги первой степени, ожоги второй степени, смертельный исход. На каждом рисунке показаны пять концентрических окружностей, соответствующих вероятностям поражения 0.1, 1, 10, 50 и 95%.

Численное моделирование огненного шара при горении 50 тонн бутана

Для данного сценария полная энергия сгорания топлива в огненном шаре (M_0= $= 5 \cdot 10^4$ кг) составляет $Q_{tot} = 2.29 \cdot 10^{12}$ Дж. Качественно эволюция огненного шара аналогична представленной на рис. 2.1 для меньшей массы топлива – в процессе горения наблюдается трансформация первоначально полусферического облака в грибовидный огненный шар.

На рис. 2.6 представлены рассчитанные зависимости от времени скорости тепловыделения dQ/dt и доли полной выделившейся энергии Q/Q_{tot} от времени t. Общая продолжительность горения огненного шара для данных параметров составляет t_{FB}=15 с (с учетом задержки зажигания Δt_i; за время t_{FB} сгорает 95% массы топлива). На рис.2.7 представлены радиальные распределения тепловых потоков от огненного шара в различные моменты времени $q_s(r,t)$, а также радиальное распределение термической дозы $I_s(r)$, полученное путем интегрирования тепловых потоков по времени. Для обоих графиков использован логарифмический масштаб по оси ординат. Видно, что на начальной стадии горения, когда огненный шар касается земной поверхности, наиболее интенсивные тепловые потоки достигаются непосредственно под самим огненным шаром. По мере того как горящее облако увеличивается в размерах и удаляется от поверхности, тепловой поток оказывается распределенным по радиусу более равномерно. После выгорания большей части топлива тепловые потоки резко ослабляются.

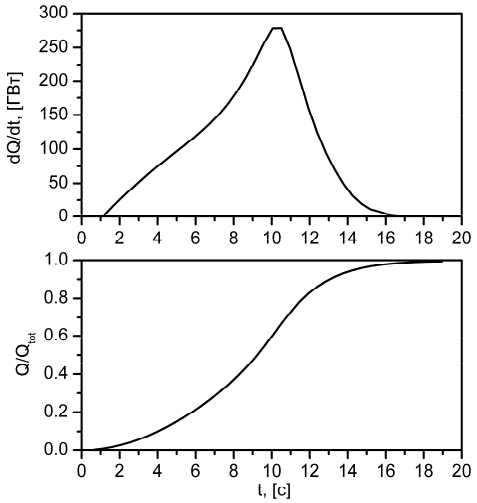


Рис.2.6. Зависимости от времени полной скорости тепловыделения dQ/dt (*верхний рисунок*) и доли выделившейся теплоты Q/Q_{tot} (*нижний рисунок*) при горении бутанового огненного шара с массой топлива $M_0 = 5 \cdot 10^4$ кг.

На рис.2.8 построены радиальные распределения вероятности ожогов первой и второй степени, а также летального исхода от воздействия теплового излучения огненного шара (вероятности поражения выражены в процентах). Как и в предыдущем расчете, вследствие малой продолжительности теплового импульса зона вероятного получе-

ния ожогов второй степени и смертельных ожогов расположена в непосредственной близости от места аварии, тогда как зона вероятного получения ожогов первой степени для массы топлива 50 т является значительно более протяженной (например, радиус зоны, соответствующей вероятности 10%, составляет 43 м, тогда как для массы топлива 2 т от составил 28 м).

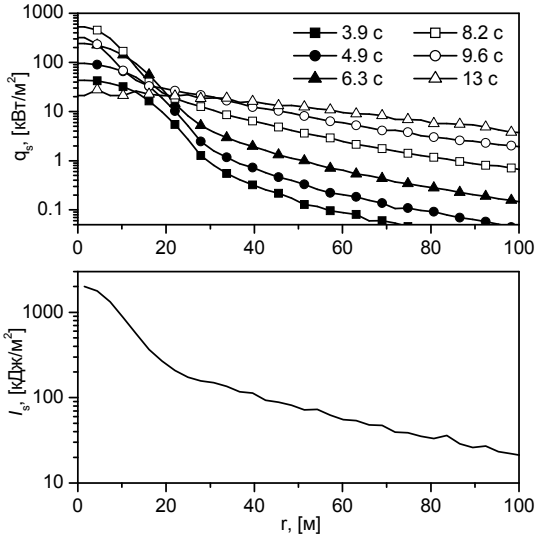


Рис.2.7. Радиальные распределения тепловых потоков q_S от огненного шара при горении $M_0 = 5 \cdot 10^4$ кг бутана в различные моменты времени (*верхний рисунок*) и распределение термической дозы на поверхности I_S (*нижний рисунок*).

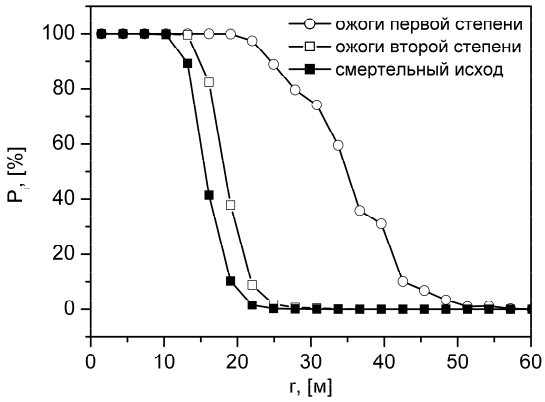


Рис.2.8. Вероятность поражений различной степени тяжести от теплового излучения огненного шара с массой топлива $M_0 = 5 \cdot 10^4$ кг.

Заключение

Представленные в настоящей работе математические модели и созданные на их основе программные комплексы позволяют моделировать аварии с распространением облаков токсических газов на местности с неоднородным рельефом, а также аварии с го-

рением топливовоздушных облаков в режиме огненного шара. Приведенные примеры расчетов развития аварии с выбросом хлора в условиях городской застройки и бутанового огненного шара показывают, что на основе данных моделей и программных средств возможно оценивать области токсического и термического поражения. Используемое двумерное приближение значительно сокращает вычислительные затраты, что делает данные модели пригодными для использования как при научных исследованиях, так и в инженерной практике при оценке опасностей и рисков техногенных аварий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Маршалл В.* Основные опасности химических производств. – М.: Мир, 1989.
2. *Доброчеев О.В., Кулешов А.А., Савенкова Н.П., Филиппова С.В.* Двумерная модель рассеяния тяжелых газов на орографически неоднородной поверхности земли // Математическое моделирование, 1996, т.8, №5, с.91–105.
3. *Кулешов А.А.* Математическое моделирование в задачах промышленной безопасности и экологии // Информационные технологии и вычислительные системы, 2003, №4, с.56-70.
4. *Стокер Дж.Дж.* Волны на воде. Математическая теория и приложения. – М.: Иностр. лит., 1959.
5. *Penner I.E.*, *Haselman L.C., Edwards L.L.* Buoyancy plume calculation // AIAA Pap., 1985, №459, p.1-9.
6. *Воронцов И.В., Янушевский А.К. и др.* Методические документы по организации ликвидации медико-санитарных последствий химических аварий. Всероссийский центр Медицины катастроф «Защита», 2001.
7. Химическое оружие вероятного противника. Сб. ред. А.Н.Калитаев. – М.: Изд-во Военной акад. хим. защиты, 1977.
8. *Makhviladze G.M., Roberts J.P., Yakush S.E.* Combustion of two-phase hydrocarbon fuel clouds released into the atmosphere // Combustion and Flame, 1999, v.118, p. 583-605.
9. *Makhviladze G.M., Yakush S.E.* Modelling of formation and combustion of accidentally released fuel clouds. Hazards XVIII: Process safety – sharing best practice. IChemE Symp. Series, 2004, v.150, paper 106, 12 p.
10. *Махвиладзе Г.М., Робертс Дж.П., Якуш С.Е.* Огненный шар при горении выбросов углеводородного топлива. I: Структура и динамика подъема // Физика горения и взрыва, 1999, т.35, № 3, с.7–19.
11. *Махвиладзе Г.М., Робертс Дж.П., Якуш С.Е.* Огненный шар при горении выбросов углеводородного топлива. II: Тепловое излучение // Физика горения и взрыва, 1999, т. 35, № 4, с.12–23.
12. *Magnussen B.F., Hjertager B.H.* On the Mathematical Modelling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion. 16th Symp. (Int.) on Combustion, Pittsburgh, PA, The Combustion Inst., 1976, p. 711–729.
13. *Махвиладзе Г. М., Мелихов В. И.* Численный метод исследования процессов медленного горения газов // Матем. моделирование, 1989, т. 1, № 6, с.146–157.
14. Безопасность России. Правовые, социально-экономические и научно-технические аспекты. Ч. 1, с. 192-195. – М.: МГФ «Знание», 1998.
15. CCPS Guidelines for chemical process quantitative risk analysis. New York: American Institute of Chemical Engineers, 2000.
16. *Johnson D.M., Pritchard M.J.* Large-scale experimental study of boiling liquid expanding gas explosions (BLEVEs). 14th Int. LNG/LPG Conference & Exhibition, Gastech, 1990, p. 1-30.

Поступила в редакцию 26.10.2009.