**ІНСТИТУТ ПРОБЛЕМ МАТЕМАТИЧНИХ МАШИН І СИСТЕМ**
**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ**

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

**СМАЛІЙ ВАСИЛЬ ВІКТОРОВИЧ**

УДК 004.942:504.06:614.8: 519.876.2

**ДИСЕРТАЦІЯ**

# ІНФОРМАЦІЙНА ТЕХНОЛОГІЯ ВИЗНАЧЕННЯ ПОЧАТКОВИХ УМОВ ФОРМУВАННЯ АВАРІЙНИХ СИТУАЦІЙ ПРИ ВИКИДАХ НЕБЕЗПЕЧНИХ РЕЧОВИН

Спеціальність: 122 «Комп’ютерні науки»
Галузь знань: 12 «Інформаційні технології»

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей, результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

 В.В. Смалій

Науковий керівник Бєгун Василь Васильович, доктор технічних наук, доцент

КИЇВ – 2025

# АНОТАЦІЯ

*Смалій В.В.* Інформаційна технологія визначення початкових умов формування аварійних ситуацій при викидах небезпечних речовин. – Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття ступеня доктора філософії за спеціальністю 122 «Комп'ютерні науки». – Інститут проблем математичних машин і систем Національної академії наук України, Київ, 2025.

Дисертація присвячена вирішенню актуального наукового завдання, сутність якого полягає у створенні у відповідності до діючих європейських і міжнародних стандартів нових моделей, методів та програмного забезпечення оцінки параметрів початкових умов формування аварійних ситуацій, як невід'ємної частини інформаційної технології безпеки, для мінімізації похибки кількісної оцінки наслідків реалізації аварійних ситуацій на виробництві, що дозволить більш ефективно розподіляти ресурси на елементи системи безпеки промислового об'єкта.

Хімічна і нафтохімічна промисловість відрізняється високим рівнем складності архітектури систем і створюваних ними загроз, що зумовлює нагальну потребу у ефективному вирішенні завдань з мінімізації як потенційних збитків, так і витрат на системи безпеки (за умови дотримання прийнятного рівня ризику) за допомогою сучасних інформаційних технологій безпеки, які дозволяють в автоматизованому режимі здійснювати логіко-імовірнісне моделювання виникнення аварій, а також обчислення багатьох фізико-хімічних явищ, які супроводжують аварійний сценарій. Отримана таким методом інформація про безпеку хімічного виробництва дозволяє приймати управлінські рішення стосовно рівнів ризику на об'єкті підвищеної небезпеки.

Джерелами небезпеки хіміко-технологічних систем як правило стають ємнісні апарати – реактори, абсорбери, рефлюксні ємності, ємності зберігання, теплообмінні апарати, колони та ін. Такі апарати характеризуються складно передбачуваною поведінкою у разі відхилення параметра процесу від цілі проєкту,

і особливо під час розгерметизації. Практично неможливо встановити таку поведінку на підставі думки експерта, не підкріплену розрахунками.

Високий рівень складності процесів у хімічному обладнанні зумовлює відсутність відповідних моделей, методів серед національних, а у деяких випадках і міжнародних стандартів. Також спостерігається обмеженість наявних на ринку програмного забезпечення інформаційних технологій безпеки, які могли б у достатній мірі забезпечувати потреби експерта у адекватному і автоматизованому моделюванні початкових умов формування аварійних ситуацій.

Наведені вище фактори ускладнюють розробку інформаційних технологій безпеки для галузі хімічної промисловості і зумовлюють низку науково-технічних задач, які стосуються:

- створення верифікованої методичної основи прогнозування початкових умов формування аварійних ситуацій, яка би відповідала парадигмі сучасного кількісного аналізу і оцінки ризику з урахуванням рекомендацій міжнародної нормативно-правової документації;
- створення відповідних моделей, програмних модулів, як частини інформаційної технології промислової безпеки з необхідних рівнем автоматизації передачі інформації і гнучкості застосування.

Отже, постає необхідність створення у відповідності до діючих європейських і міжнародних стандартів нових моделей, методів та алгоритмів (як частини інформаційної технології безпеки) для оцінки параметрів граничного стану настання аварії та аварійного викиду, які реалістично відображають дійсний процес розгерметизації ємнісного обладнання хімічного та нафтохімічного сектору і дають змогу точніше і швидше здійснювати оцінку розповсюдження небезпечних речовин, формування та впливу уражаючих факторів на реципієнтів.

Метою даної дисертаційної роботи є уточнення розрахункових параметрів процесу аварійної розгерметизації технологічного устаткування хімічного та нафтохімічного сектору шляхом розроблення інтегрованої інформаційної технології, що містить набір необхідних для моделювання розгерметизації моделей

(програмних модулів) і забезпечує автоматизоване передавання даних між модулями.

У відповідності до сформованої мети для вирішення зазначеного науково-прикладного завдання підвищення точності і автоматизації моделювання початкових умов формування аварійних ситуацій при викидах небезпечних речовин, у роботі були отримані такі наукові результати:

1. Вперше розроблено взаємопов'язані динамічні моделі процесу аварійної розгерметизації апарата з багатокомпонентною хімічною сумішшю, які дозволяють організувати відповідність і автоматизацію передачі даних між моделями.

2. Вперше розроблено інформаційну технологію динаміки процесу аварійної розгерметизації апарата, що містить багатокомпонентну хімічну суміш, для двох сценаріїв: розрив оболонки апарату і витік через аварійний отвір.

3. Подальшого розвитку набула процедура HAZOP-дослідження, яка завдяки формалізації і аналізу моделі інформаційних потоків процедури HAZOP та інтеграції динамічної моделі апарату з багатокомпонентною хімічною сумішшю і фазовою рівновагою, дозволила квантифікувати відхилення і їх вплив на параметри фазової рівноваги в апараті, а також визначити параметри граничного стану, що передує аварії.

4. Подальшого розвитку набула інформаційна технологія безпеки, яка, завдяки застосуванню динамічних моделей фізико-хімічних процесів аварійної розгерметизації апарата з багатокомпонентними сумішами, дозволила уточнити параметри розгерметизації у порівнянні з іншими спрощеними і поширеними аналогами.

5. Вдосконалено математичну модель випаровування аварійного виливу, яка, на відміну від існуючих, дозволяє визначати параметри випаровування багатокомпонентної суміші;

6. Вдосконалено модель кипіння перегрітої рідини, яка на відміну від існуючих дозволяє визначати параметри випаровування багатокомпонентної суміші в результаті кипіння.

У вступі обґрунтовані актуальність теми дисертаційного дослідження, визначено мету, задачі, об’єкт і предмет дослідження, визначені основні положення, а також наукова і практична цінність отриманих результатів та зазначено особистий внесок автора.

У першому розділі проведено аналіз рівня розвитку методів, моделей, та інформаційних технологій визначення початкових умов формування аварійних ситуацій, який показав потребу в Україні та світі у створенні наступного покоління групи моделей аварійної розгерметизації (ADM). Показано основні етапи прогнозування початкових умов формування аварійних ситуацій. Сформульовані основні задачі моделювання аварійної розгерметизації, які необхідно вирішити для досягнення поставленої мети.

Відмічено ключову роль моделі ємнісного обладнання на етапах визначення граничних умов настання аварійної розгерметизації і параметрів аварійного викиду. Зазначено важливість врахування багатокомпонентного складу суміші речовин, фазової рівноваги і динаміки процесу аварійної розгерметизації.

Розглянуто наявне на ринку програмне забезпечення у контексті визначення початкових умов формування аварійних ситуацій, визначено його основні методичні і функціональні недоліки, які були враховані у дисертаційному дослідженні. За результатами аналізу функціональних недоліків, було розроблено концептуальну схему елементу архітектури інформаційної технології безпеки, яка вирішує сформульовані функціональні задачі.

У другому розділі проаналізовано моделі і методи оцінки граничних умов настання аварійної розгерметизації. Формалізовано і описано динамічну математичну модель технологічної ємності з врахуванням багатокомпонентного складу хімічної системи в апараті і фазової рівноваги типу пара/рідина.

На прикладі діючого виробництва було досліджено задачу інтеграції моделювання технологічного процесу хімічного виробництва та процедури HAZOP. Виявлено недостатність інформації рядка HAZOP без застосування моделювання аварійного процесу для подальшого визначення можливих наслідків, а також низький ступінь довіри до результатів HAZOP-сесії. Виявлено необхідність

не лише моделювання відхилень параметрів процесу з метою визначення можливих наслідків протягом HAZOP-сесії, а й отримання необхідного та достатнього переліку значень параметрів стану апарата в момент розгерметизації для забезпечення подальшого кількісного визначення наслідків реалізації аварії. Виявлені недоліки HAZOP було вирішено шляхом суміщення математичного моделювання відхилень технологічних параметрів апарата з сесією HAZOP.

У третьому розділі проаналізовано моделі і методи обчислення масштабів викидів небезпечних речовин під час розгерметизації хімічного обладнання. Розглянуто два сценарії розгерметизації: витік через аварійний отвір (часткова розгерметизація) і розрив оболонки апарата (повна розгерметизація). Для моделювання обох типів розгерметизації були запропоновані схеми даних, які показують порядок виконання моделей і тип даних, що передаються між моделями. У відповідності до кожної схеми даних було розроблено і верифіковано групу моделей, серед яких є модель витоку через аварійний отвір, модель квазіміттєвого руйнування апарата, модель кипіння потоків, моделі формування і випаровування виливу рідини, модель усереднення газових потоків. Кожна модель враховує багатокомпонентний склад суміші, динаміку процесу аварійної розгерметизації, фазову рівновагу в апараті і можливість пароутворення за рахунок кипіння потоку перегрітої рідини при його потрапляння у навколишнє середовище.

Сформульовано вимоги до бази даних фізико-хімічних властивостей речовин для забезпечення можливості використання розробленої групи моделей оцінки параметрів процесу аварійної розгерметизації.

У четвертому розділі продемонстровано результати практичної реалізації групи модулів аварійної розгерметизації у вигляді прикладного програмного забезпечення, як частини інформаційної технології безпеки. Продемонстровано вимоги до інтерфейсу і функціоналу інформаційної технології безпеки у контексті моделювання аварійних викидів небезпечних речовин.

Продемонстровано інтеграцію групи модулів аварійної розгерметизації у загальну схему даних визначення результатів дії уражаючих факторів на реципієнтів. Сфокусовано увагу на місце і ключову необхідність модулів

визначення початкових умов формування аварійних ситуацій у інформаційній системі безпеки.

Узагальнюючим результатом дисертаційного дослідження є моделі визначення граничних умов розгерметизації і параметрів аварійного викиду із обладнання хімічних виробництв, як елемент діючої інформаційної технології безпеки. Розроблені моделі відповідають європейському і міжнародному законодавству у галузі кількісних методів аналізу ризиків, є верифікованими і на відміну від аналогів є більш точними за рахунок врахування динаміки процесу розгерметизації, багатокомпонентного складу хімічної суміші, яка бере участь у викиді, фазовій рівновазі, яка спостерігається в апараті. Отримані результати відповідають актуальним потребам забезпечення допустимого рівня ризику на об'єктах хімічного і нафтохімічного сектору із оптимальним розподілом витрат на системи безпеки.

Дисертація виконувалася в Інституті проблем математичних машин і систем НАН України.

Результати наукових досліджень були використані під час наукової і науково-технічної діяльності Інституту математичних машин і систем НАН України в рамках виконання за державним замовленням науково-дослідних робіт: шифр «Моделі, методи та засоби створення та аналізу відмовостійких, надійних і безпечних систем критичного застосування: оцінка можливості продовження періоду експлуатації з допустимими значеннями ризиків» (№ 0120U000212, ІПММС, м. Київ), прийняті до реалізації у науково-дослідній діяльності ТОВ «НЦДР «Різікон» з метою визначення наслідків реалізацій аварійних ситуацій на об'єктах підвищеної небезпеки з подальшою оптимізацію розподілу матеріальних ресурсів на системи безпеки підприємств.

**Ключові слова:** інформаційна технологія, аналіз ризиків, динамічне моделювання, HAZOP, аварійна ситуація, розгерметизація, багатокомпонентна суміш, фазова рівновага, модель випаровування виливу, модель витоку небезпечної речовини, апарат, прогнозування наслідків, управління ризиком, системи підтримки прийняття рішень, забруднення атмосфери.

# ABSTRACT

*Smalii V.V.* Information technology for determining the initial conditions of the formation of emergency situations due to emissions of hazardous substances. – Qualification scientific work based on manuscript rights.

Dissertation for the degree of Doctor of Philosophy in speciality 122 “Computer Science”. – Institute of Mathematical Machines and Systems Problems of the National Academy of Sciences of Ukraine, Kyiv, 2025.

The dissertation is devoted to solving an urgent scientific problem, the essence of which is to create, in accordance with the latest European and international standards, new models, methods and software for assessing the parameters of the initial conditions for the formation of emergencies, as an integral part of safety information technology, to minimise the error in quantifying the consequences of the occurences of emergencies in production which allows more efficient allocation of resources to the elements of the industrial facility safety system.

The chemical and petrochemical industry is characterised by high level of complexity in the architecture of systems and the threats they pose, which creates an urgent need to effectively address the challenges of minimising both potential losses and the costs of security systems (subject to an acceptable level of risk) using modern safety information technologies that allow an automated logical and probabilistic modelling of accidents, as well as the calculation of many physical and chemical phenomena that accompany an emergency scenario. The information on chemical production safety obtained in this way allows making managerial decisions on risk levels at a high-risk facility.

The sources of hazards in chemical and technological systems are usually capacitive devices such as reactors, absorbers, reflux tanks, storage tanks, heat exchangers, columns, etc. Such vessels are characterised by difficult to predict behaviour in case of deviation of the process parameter from the design intent, and especially during

depressurisation. It is virtually impossible to establish such behaviour on the basis of an expert opinion that is not supported by calculations.

The high level of complexity of processes in chemical equipment results in the absence of appropriate models and methods among national and, in some cases, international standards. There is also a limited number of safety information technologies available on the software market that could sufficiently meet the needs of an expert in adequate and automated modelling of the initial conditions for the formation of emergencies.

The above factors complicate the development of safety information technologies for the chemical industry and cause a number of scientific and technical problems related to:

- creation of a verified methodological basis for forecasting the initial conditions for the formation of emergency situations, which would correspond to the paradigm of modern quantitative analysis and risk assessment, taking into account the recommendations of international regulatory documents;
- creation of appropriate models and software modules as part of industrial safety information technology with the required level of automation of information transfer and flexibility of application.

Thus, there is a need to create new models, methods and algorithms (as part of the safety information technology) in accordance with the latest European and international standards to assess the parameters of the accident limit state and accidental release, which realistically reflect the actual process of depressurisation of the chemical and petrochemical sector's tank equipment and allow for a more accurate and faster assessment of the spread of hazardous substances, the formation and impact of damaging factors on recipients.

The aim of this thesis is to clarify the design parameters of the process of emergency depressurisation of technological equipment in the chemical and petrochemical sector by developing an integrated information technology containing a set of models (software modules) necessary for modelling depressurisation and providing automated data transfer between modules.

In accordance with the stated goal, to solve this scientific and applied problem of improving the accuracy of modelling the initial conditions for the formation of emergencies during the release of hazardous substances from the mass and heat exchange equipment of chemical production, the following scientific results were obtained:

1. For the first time, interconnected dynamic models of emergency depressurization process of an apparatus with a multicomponent chemical mixture were developed, which allow organizing the correspondence and automation of data transfer between models.

2. For the first time, an information technology for the dynamics of the process of emergency depressurization of an apparatus containing a multicomponent chemical mixture was developed for two scenarios: shell rupture and leakage throughout an emergency hole.

3. The HAZOP study procedure was further developed, which, due to the formalization and analysis of the information flow model of the HAZOP procedure and the integration of the dynamic model of the apparatus with a multicomponent chemical mixture and phase equilibrium, made it possible to quantify deviations and their impact on the parameters of phase equilibrium in the apparatus, as well as to determine the parameters of the limit state preceding the accident.

4. The safety information technology was further developed, which, due to the use of dynamic models of physical and chemical processes of emergency depressurization of the apparatus with multicomponent mixtures, made it possible to clarify the depressurization parameters in comparison with other simplified and common analogues.

5. The mathematical model of evaporation of an accidental release was improved, which, unlike the existing ones, allows determining the parameters of evaporation of a multicomponent mixture;

6. The model of boiling of superheated liquid was improved, which, unlike the existing ones, allows determining the parameters of evaporation of a multicomponent mixture as a result of boiling.

The introduction substantiates the relevance of the topic of the dissertation research, defines the purpose, objectives, object and subject of the study, identifies the

main provisions, as well as the scientific and practical value of the results obtained, and indicates the author's personal contribution.

The first section analyses the level of development of methods, models, and information technologies for determining the initial conditions for the formation of emergency situations, which showed the need in Ukraine and the world to create the next generation of a group of accidental depressurisation models. The main stages of forecasting the initial conditions for the formation of emergency situations are shown. The main problems of modelling emergency depressurisation and the range of tasks that need to be solved to achieve this goal are formulated.

The key role of the model of capacitive equipment at the stages of determining the boundary conditions for the onset of emergency depressurisation and the parameters of emergency release is noted. The importance of taking into account the multicomponent composition of the mixture of substances, phase equilibrium and dynamics of the emergency depressurisation process is noted.

The chapter considers software available on the market in the context of determining the initial conditions for the formation of emergency situations, identifies their main methodological and functional disadvantages, which were taken into account in the dissertation research. Based on the results of the analysis of functional shortcomings, a conceptual diagram of the safety information technology architecture element was developed, which solves the formulated functional tasks.

The second chapter analyses models and methods for assessing the boundary conditions for the onset of emergency depressurisation. A dynamic mathematical model of the process vessel is formalised and described, taking into account the multicomponent composition of the chemical system in the apparatus and the vapour/liquid phase equilibrium.

The problem of integrating the modelling of the chemical production process and the HAZOP procedure has been studied on the example of an existing production facility. The insufficiency of the information obtained via HAZOP (without the use of accidental process modelling) for further determination of possible consequences, as well as the low degree of confidence in the results of the HAZOP session, was revealed. The necessity of

not only modelling deviations of process parameters in order to determine possible consequences during the HAZOP session, but also obtaining a necessary and sufficient list of values of the parameters of the apparatus state at the moment of depressurisation to ensure further quantification of the consequences of the accident was identified. Identified shortcomings of HAZOP were resolved by combining mathematical modelling of deviations in the process parameters of the apparatus with the HAZOP session.

The third section analyses models and methods for calculating the scale of hazardous substance emissions during depressurisation of chemical equipment. Two depressurisation scenarios are considered: leakage through an emergency hole (partial depressurisation) and rupture of the vessel shell (complete depressurisation). To simulate both types of depressurisation, data schemes were proposed that show the order of model execution and the type of data transferred between models. In accordance with each data scheme, a group of models was developed and verified, including a model of leakage through an emergency hole, a model of quasi-instantaneous failure of the apparatus, a model of boiling flows, models of formation and evaporation of a liquid outflow, and a model of averaging gas flows. Each model takes into account multicomponent composition of the mixture, the dynamics of the emergency depressurisation process, phase equilibrium in the emergency apparatus and the possibility of vapour formation due to the boiling of the superheated liquid flow when it enters the environment.

The requirements for the database of physical and chemical properties of substances are formulated to ensure the possibility of using the group of models developed in this research for estimating the parameters of the emergency depressurisation process.

Section 4 demonstrates the results of the practical implementation of a group of emergency depressurisation modules in the form of applied software as a part of the safety information technology. The requirements for the interface and functionality of the safety information technology in the context of modelling emergency emissions from the technological equipment of chemical production facilities are demonstrated.

The integration of a group of emergency depressurisation modules into the general data scheme for determining the results of the impact of damaging factors on recipients

is demonstrated. Attention is focused on the place and key necessity of modules for determining the initial conditions for the formation of emergency situations in the safety information system.

The generalised result of the dissertation research is the models for determining the limit conditions for depressurisation occurence and the parameters of emergency release from heat and mass transfer equipment of chemical production facilities as an element of the existing safety information technology. The developed models comply with European and international legislation in the field of quantitative risk analysis methods, are verified and, unlike analogues, are more accurate due to the consideration of the dynamics of the depressurisation process, the multicomponent composition of the chemical system involved in the release, and the phase equilibrium observed in the apparatus. The obtained results meet the current needs of ensuring an acceptable level of risk at chemical and petrochemical facilities with an optimal distribution of costs for safety systems.

The dissertation was carried out at the Institute of Mathematical Machines and Systems Problems of the National Academy of Sciences of Ukraine.

The results of scientific research were used in the scientific and scientific-technical activities of the Institute of Mathematical Machines and Systems of the National Academy of Sciences of Ukraine within the framework of the state order research work: code “Models, methods and means of creating and analysing fault-tolerant, reliable and safe systems of critical application: assessment of the possibility of extending the period of operation with acceptable risk values” (№ 0120U000212, IPMS, Kyiv), adopted for implementation in the research activities of LLC “Scientific Center of Risk Investigation “Rizikon” to determine the consequences of accidents at high-risk facilities with further optimisation of the distribution of material resources for enterprise security systems.

**Keywords:** information technology, risk analysis, dynamic modeling, HAZOP, emergency situation, depressurization, multicomponent mixture, phase equilibrium, pool evaporation model, hazardous substance release model, apparatus, consequence prediction, risk management, decision support systems, air pollution.

## СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

### Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:

1. Smalii V., Tolok E. Model of multicomponent liquid pool evaporation formed due accidental spills. *Ecological Safety and Balanced Use of Resources*. 2022. Vol. 2, No 26. P. 122–132. DOI:10.31471/2415-3184-2022-2(26)-122-132. *(Vernadsky National Library of Ukraine, Professional Publications of Ukraine, Directory of Open Access Journals, Google Scholar, CrossRef).*

2. Смалій В., Бєгун В. Аналіз сучасного стану інформаційних технологій безпеки: актуальні задачі і шляхи їх вирішення. *Кібербезпека: освіта, наука, техніка*. 2025. Вип. 4, № 28. С. 490–497. DOI: 10.28925/2663-4023.2025.28.819. *(Index Copernicus, Vernadsky National Library of Ukraine, Semantic Scholar, Directory of Research Journals Indexing, Google Scholar, CrossRef).*

3. Смалій В.В. Інтеграція математичного моделювання і HAZOP-дослідження з метою квантифікації наслідків впливу відхилень на параметри стану джерел небезпеки. *Математичні машини і системи.* 2025. № 2. С. 60–66. DOI: 10.34121/1028-9763-2025-2-60-66. *(WorldCat, Google Scholar, CrossRef, Open Ukrainian Citation Index (OUCI), Ulrich's Periodicals Derictory).*

### Праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:

4. Смалій В. В., Бєгун В. Розвиток ризик-орієнтованого підходу у період цифровізації суспільства. *Безпека людини у сучасних умовах* : зб. доп. 15-ї Міжнар. наук.-метод. конф. та Міжнар. наук. конф. Європ. Асоц. наук з безпеки (EAS), м. Харків, 7-8 груд. 2023. Харків. С. 111-113. URL: https://repository.kpi.kharkov.ua/items/71906213-7831-4c8f-b9fb-f5ea7ae28081. *(Google Scholar).*

**Наукові праці, які додатково відображають результати дисертації:**

5. Шмелев О. С., Смалий В. В. Гидравлические сети в производствах с непрерывным циклом работы: формирование и расчёт. *Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2019* : зб. наук. статей Шостої міжнар. наук.-практ. конф., м. Київ, 6-8 трав. 2019. Київ. С. 389–395. URL: https://ela.kpi.ua/handle/123456789/27846.

# ЗМІСТ

**ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ** ..... 5
**ВСТУП** ..... 6
**РОЗДІЛ 1 АНАЛІЗ ІСНУЮЧИХ МЕТОДІВ І ТЕХНОЛОГІЙ ОЦІНКИ ПОЧАТКОВИХ УМОВ ФОРМУВАННЯ АВАРІЙНИХ СИТУАЦІЙ ПРИ ВИКИДАХ НЕБЕЗПЕЧНИХ РЕЧОВИН** ..... 16
1.1 Етапи прогнозування початкових умов формування аварійних ситуацій ..... 16
1.2 Методи оцінки параметрів граничного стану джерел небезпеки під час HAZOP-сесії ..... 21
1.3 Методи оцінки параметрів аварійної розгерметизації під час викиду небезпечних речовин у навколишнє середовище ..... 25
1.4 Аналіз сучасних інформаційних технологій безпеки для об'єктів хімічного і нафтохімічного сектору ..... 32
1.5 Висновки до розділу 1 ..... 39
**РОЗДІЛ 2 МОДЕЛІ І МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ГРАНИЧНИХ УМОВ РОЗГЕРМЕТИЗАЦІЇ ХІМІЧНОГО ОБЛАДНАННЯ** ..... 42
2.1 Аналіз моделі інформаційних потоків HAZOP-дослідження ..... 42
2.2 Метод інтеграції HAZOP і моделювання ..... 49
2.2.1 Математичний опис моделі апарата (джерела небезпеки) ..... 49
2.3 Розрахунковий експеримент ..... 56
2.4 Результати і обговорення ..... 59
2.4.1 Етап виходу на стаціонар ..... 61
2.4.2 Моделювання відмови системи охолодження ..... 63
2.5 Висновки до розділу 2 ..... 68
**РОЗДІЛ 3 МОДЕЛІ І МЕТОДИ ОБЧИСЛЕННЯ МАСШТАБУ ВИТОКІВ НЕБЕЗПЕЧНИХ РЕЧОВИН ПРИ АВАРІЙНІЙ РОЗГЕРМЕТИЗАЦІЇ ХІМІЧНОГО ОБЛАДНАННЯ** ..... 70

3.1 Структура модуля розрахунку часткової розгерметизації хімічного обладнання ..... 73
3.2 Структура модуля розрахунку викиду у результаті розриву оболонки хімічного обладнання ..... 76
3.3 Модель хімічної ємності (джерело небезпеки) ..... 79
3.4 Модель витоку газу через аварійний отвір на корпусі ємності ..... 80
3.4.1 Математичний опис моделі витоку газу через аварійний отвір ..... 80
3.4.2 Верифікація ..... 83
3.4.3 Валідація ..... 84
3.4.4 Результати і обговорення ..... 86
3.4.5 Висновки за результатами верифікації і валідації моделі витоку газу через аварійний отвір на корпусі ємності ..... 90
3.5 Модель витоку рідини через аварійний отвір на корпусі ємності ..... 91
3.5.1 Верифікація ..... 94
3.5.2 Висновки за результатами верифікації моделі потоку рідини через аварійний отвір ..... 95
3.6 Модель квазіміттєвого руйнування апарата (розрив оболонки) ..... 95
3.6.1 Математичний опис моделі квазіміттєвого руйнування апарата ..... 95
3.6.2 Обчислювальні експерименти. Валідація ..... 102
3.6.3 Результати та обговорення ..... 104
3.7 Модель кипіння потоків перегрітої рідини ..... 107
3.7.1 Математичний опис моделі кипіння потоку перегрітої рідини ..... 107
3.7.2 Обчислювальні експерименти ..... 111
3.7.3 Висновки за результатами верифікації моделі кипіння потоків перегрітої рідини ..... 112
3.8 Модель формування виливу небезпечної рідини ..... 112
3.8.1 Математичний опис моделі ..... 112
3.8.2 Верифікація ..... 114
3.9 Модель випаровування виливу небезпечної рідини ..... 120
3.9.1 Математичний опис моделі ..... 121

3.9.2 Порівняння з експериментом Kawamura&Mackay 1987 ..... 128
3.9.3 Дослідження кипіння кріогенної рідини ..... 131
3.9.4 Випаровування етанолу та циклогексану в режимі без кипіння ..... 133
3.10 Усереднення результуючого газового потоку за часом ..... 137
3.10.1 Математичний опис процедури складання та усереднення газових потоків ..... 137
3.10.2 Обчислювальні експерименти. Верифікація ..... 140
3.11 Вимоги до інформаційного наповнення бази даних фізико-хімічних властивостей речовин. Рекомендації до реалізації інтерфейсу користувача..... 143
3.12 Висновки до розділу 3 ..... 145
**РОЗДІЛ 4 ПРАКТИЧНА РЕАЛІЗАЦІЯ ІНФОРМАЦІЙНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ВИЗНАЧЕННЯ ПОЧАТКОВИХ УМОВ ФОРМУВАННЯ АВАРІЙНИХ СИТУАЦІЙ**..... 147
4.1 Програмне забезпечення для визначення початкових умов формування аварійних ситуацій ..... 147
4.2 Аспекти практичного застосування комплексу модулей оцінки параметрів аварійної розгерметизації під час розрахунку показників ризику для сценарію аварійного викиду горючих речовин ..... 162
4.3 Висновки до розділу 4 ..... 165
**ВИСНОВКИ** ..... 167
**СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ** ..... 170
**ДОДАТКИ**..... 181
Додаток А Акт впровадження результатів дисертаційного дослідження..... 182
Додаток Б Дані за результатами верифікації і валідації розроблених математичних моделей..... 183
Додаток В Список публікацій здобувача за темою дисертації ..... 272

# ПЕРЕЛІК УМОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

ADM – Accidental Depressurisation Module.

APDM – Accidental Partial Depressurisation Module.

ARDM – Accidental Rupture Depressurisation Module.

QRA – Quantitative Risk Assessment.

ІТБ – Інформаційна технологія безпеки.

НС – надзвичайна ситуація.

НДР – науково-дослідна робота.

РОП – ризик-орієнтований підхід.

BLEVE – Boiling Liquid Expanding Vapour Explosion.

ССГ – судина зі стисненим газом.

РОП – ризик-орієнтований підхід.

ГФ – газова фаза.

РФ – рідка фаза.

FTA – Fault Tree Analysis (аналіз дерев відмов).

ETA – Event Tree Analysis (аналіз дерев подій).

СУРПД – система управління розрахунками і передачею даних.

ПЗ – програмне забезпечення.

MAPE – Mean Absolute Percentage Error.

# ВСТУП

**Актуальність теми**

Наразі система стандартів з управління ризиками розглядає всі загрози щодо життя та здоров'я громадян, живих організмів, навколишнього природного середовища, майна фізичних та юридичних осіб, працездатності технологічної системи та функціонування економіки підприємства.

Мінімізація людських та матеріальних втрат шляхом запобігання аваріям або мітигації їх наслідків у хімічній промисловості є одним із ключових завдань керівництва підприємства. На даний момент відомо кілька стратегій запобігання аваріям, серед яких є такі:

- суворе дотримання правил;
- уникнення потенційно небезпечної діяльності;
- ризик-орієнтований підхід (РОП).

Суворе дотримання правил зазвичай допомагає уникнути типових небезпек, проте не знімає відповідальності в разі виникнення непередбачених стандартом або законом аварій. Оскільки технології та види виробничих процесів розвиваються значно швидше, ніж оновлюються та публікуються закони та підзаконні акти, то очевидною стає необхідність додаткового аналізу потенційних загроз як перед початком, так і в процесі нової діяльності. Водночас і саме невиконання правил також є імовірною подією.

Уникнення потенційно небезпечної діяльності є ефективним рішенням з погляду запобігання небезпекам, однак унеможливлює діяльність, пов'язану з роботою потенційно небезпечних промислових об'єктів, які здебільшого є життєво необхідними для суспільства.

Одним із відомих актуальних підходів є ризик-орієнтований, який з наукового погляду має ґрунтуватися на кількісній оцінці ризику (QRA), що містить у собі системний аналіз небезпечного об'єкта, побудову логіко-імовірнісних моделей, досконале розуміння технологічних процесів, здатність прогнозувати

наслідки аварій із застосуванням математичного моделювання та теорії ймовірності. Ризик у цьому контексті являє собою комбінацію ймовірності та наслідків. Наслідок має бути визначено за допомогою кількісних показників (кількість загиблих, сума фінансових втрат тощо). QRA є важливим кроком у циклі управління ризиком, оскільки він надає числові значення параметрів небезпечних процесів, чинників та обставин аварійної ситуації з погляду їхньої значущості, а отже, і можливості управління ризиком.

Отже, основна мета QRA – посилити безпеку виробничих процесів шляхом управління ризиком, вираженим у кількісних показниках, а також підтримка промисловості шляхом надання методів кількісної оцінки ризиків і управління ними [1].

На кожному середньому та великому підприємстві кількість джерел небезпеки, що підлягають системному аналізу, може становити кілька сотень. Беручи до уваги, що для кількісних аналізу та оцінки ризиків необхідно застосовувати відповідні математичні методи, то, зі збільшенням складності небезпечного об'єкта і точності застосовуваних методів оцінки наслідків потенційних сценаріїв аварій, значно збільшується потреба в кількості розрахункових ресурсів. Експерт уже не має фізичної можливості виконувати таку кількість розрахунків вручну або із застосуванням поширених розрахункових програм (таблиці Excel, Matlab, Mathcad). Саме тому виникає необхідність розроблення систем підтримки прийняття рішень – програмних комплексів, що складаються із сучасних, оновлюваних математичних моделей обчислення показників ризику, є зручними та зрозумілими у використанні й дають змогу швидко виконувати розрахунок необхідної кількості потенційних аварійних сценаріїв.

Інформаційні технології безпеки (ІТБ) є складовою сучасного інформаційного суспільства. Моделювання виникнення та розвитку аварійних процесів і надзвичайних ситуацій (НС) стає основою для запобігання великим аваріям і катастрофам, а також законодавчою вимогою розвиненої держави. ІТБ дає змогу адаптивно управляти ризиками та процесами реагування на надзвичайні

ситуації. Інформаційні процеси управління безпекою на основі концепції РОП представлені в [2]. Сучасна інформаційна технологія безпеки складається з декількох моделей з автоматизованим передаванням даних між розрахунковими блоками, і однією з них є модель аварійної розгерметизації.

Модель аварійної розгерметизації джерела небезпеки, яким найчастіше в хімічній промисловості є технологічний резервуар, є ключовою моделлю ІТБ під час визначення техногенного ризику, адже саме вона визначає основні параметри викиду небезпечної речовини в навколишнє середовище [3].

Прогнозування витоку та розповсюдження небезпечних речовин під час аварійних викидів досліджується в роботах Мадерича В.С. [4], Ковальця І.В. [5], Лифаря В.О. [6, 7], C. J. H. Van den Bosch [8], R. Pula [3], M.-C. Teng [9], D. Yuhua [10], J. M. Tseng [11], CCPS [12]. Досить велика кількість праць, присвячених моделюванню викиду небезпечних речовин із тепло- та масообмінного обладнання, резервуарів зберігання, мереж трубопроводів хімічних підприємств, хоча й дає змогу одержати необхідну інформацію щодо умов викиду, проте не забезпечує належного рівня повноти оцінювання параметрів аварійного викиду через суттєві спрощення моделей джерел небезпеки. Часто багатокомпонентні суміші речовин замінюють одним псевдокомпонентом, хоча комплексний склад суміші безпосередньо впливає на фазову рівновагу досліджуваної системи та інші її фізико-хімічні параметри. У контексті аварійної розгерметизації прийнято розглядати модель апарата з фіксованими в часі параметрами стану хімічної системи всередині апарата, хоча це грубе припущення, що здатне надалі призвести як до суттєвої переоцінки, так і недооцінки ризику. Існує невизначеність із початковими параметрами граничного стану в апараті, які призводять до розгерметизації. Умоглядний, якісний підхід не здатен правильно визначити параметри фазової рівноваги на момент втрати цілісності корпусу технологічного обладнання. Процес витоку небезпечних речовин у навколишнє середовище часто обчислюють без урахування багатокомпонентності потоків, можливих ефектів фазового переходу під час різкої зміни тиску, що призводить або до суттєвої переоцінки, або до суттєвої недооцінки масштабів викиду.

Міжнародний стандарт [13] розглядає створення та застосування моделей для оцінювання ризиків і зазначає, що модель має бути побудована на принципах відповідності реальному явищу, області застосування, теоретичні основи та математичні викладки мають бути добре зрозумілими, є результати верифікації та валідації моделі на основі перевірочних розрахунків і фізичних експериментів.

В Україні існують стандарти оцінювання ризику [14] та оцінки викиду небезпечних речовин [15], що регламентують оцінку наслідків аварій, але не відповідають наведеним вище вимогам до розроблення та впровадження математичних моделей ІТБ.

Водночас підхід Європейського Союзу, визначений у Директиві SEVESO III [16] вимагає гармонізації національного законодавства всіх країн ЄС задля об'єднання методів, критеріїв, законодавчих актів і нормативів, що стосуються менеджменту ризиком, на єдиній методологічній та інформаційній платформах [7].

Відзначається відсутність методичної основи прогнозування початкових умов формування аварійних ситуацій, яка би відповідала парадигмі сучасного кількісного аналізу і оцінки ризику з урахуванням рекомендацій міжнародної нормативно-правової документації, що трансформується у необхідність створення відповідних моделей, програмних модулів, як частини ІТБ.

Отже, постає необхідність створення у відповідності до діючих європейських і міжнародних стандартів нових моделей, методів та алгоритмів, як частини ІТБ, для оцінки параметрів граничного стану настання аварії та аварійного викиду, які реалістично відображають дійсний процес розгерметизації ємнісного обладнання хімічного та нафтохімічного сектору і дають змогу точніше здійснювати оцінку розповсюдження небезпечних речовин, формування та впливу уражаючих факторів на реципієнтів.

Наведені вище підстави додатково обґрунтовують актуальність дисертаційної роботи як для міжнародної спільноти, так і для України. Успішне розв'язання сформульованого завдання дасть змогу мінімізувати похибку кількісної оцінки наслідків реалізації аварійних ситуацій на виробництві, що дасть

змогу більш ефективно розподіляти ресурси на елементи системи безпеки промислового об'єкта.

Сформульоване завдання було розв'язано шляхом математичної формалізації явищ, що супроводжують розгерметизацію хімічного та нафтохімічного обладнання, та представлення теоретико-математичних викладок у вигляді розроблених алгоритмів моделей і методів та побудови на їхній основі ІТБ оцінювання параметрів аварійних викидів небезпечних речовин.

**Зв’язок роботи з науковими програмами, планами, темами**

Представлена дисертація виконувалася відповідно до тематичних планів, наведених нижче.

Назва теми (та назва і № етапу, якщо звіт за етапом теми): «Моделі, методи та засоби створення та аналізу відмовостійких, надійних і безпечних систем критичного застосування: оцінка можливості продовження періоду експлуатації з допустимими значеннями ризиків».

Виконується за (постанова, розпорядження, рішення Вченої ради, з ким договір та № договору) розпорядженням Президії НАН України від 26.09.2019 №517 та рішенням Вченої ради ІПММС НАН України від 17.04.2019, пр. №5.

Державний реєстраційний номер теми 0120U000212.

Термін виконання (теми та етапу): з 01.2020 р. по 12.2024 р.

Теми договорів ТОВ «НЦДР «Різікон», у яких автор брав участь:

1) аналіз небезпеки та працездатності за методом HAZOP для газофракційної установки;

2) аналіз небезпеки та працездатності із застосуванням методу HAZOP при проєктуванні автоматизованої системи управління технологічними процесами видобутку газу;

3) аналіз небезпеки та працездатності (HAZOP) та визначення вимог систем безпеки на основі аналізу ризику комплексу з виробництва ароматичних вуглеводнів;

4) розробка обґрунтування безпеки виробництва метанолу у складі проєктної документації;

5) визначення оптимальних умов безпечної експлуатації виробництва капролактаму.

Методи, запропоновані автором у результаті виконання НДР, становлять основу дисертаційної роботи і отримані в результаті:

- аналізу можливих аварійних процесів технологічного обладнання хімічного та нафтохімічного сектору;
- розроблення схеми даних структурних модулів інформаційної технології визначення початкових умов формування аварійних ситуацій під час викидів небезпечних речовин;
- формалізації фізико-хімічних процесів, що супроводжують розгерметизацію;
- розроблення методів і алгоритмів моделей фізико-хімічних процесів, що супроводжують розгерметизацію;
- верифікації та валідації розроблених моделей;
- участі в розробленні модулів у контексті моделювання аварійної розгерметизації.

**Мета і завдання дослідження**

Метою даної дисертаційної роботи є уточнення параметрів процесу аварійної розгерметизації технологічного устаткування хімічного та нафтохімічного сектору шляхом розроблення ІТБ, що містить набір необхідних для моделювання розгерметизації моделей (програмних модулів) і забезпечує автоматизоване передавання даних між модулями.

Поставленої науково-практичної мети було досягнуто завдяки вирішенню таких основних завдань:

1) аналізу сучасного стану методів і інформаційних технологій оцінки масштабів аварійних викидів хімічного та нафтохімічного секторів;

2) розроблення схеми даних ІТБ визначення початкових умов формування аварійних ситуацій під час викидів небезпечних речовин;

3) формалізації фізико-хімічних процесів у ємнісному обладнанні хімічних підприємств і розробка моделі апарата;

4) розроблення методу визначення параметрів граничного стану ємнісного обладнання безпосередньо перед розгерметизацією;

5) формалізації фізико-хімічних процесів, що супроводжують аварійну розгерметизацію, з подальшим розробленням низки математичних моделей, що відповідають вимогам представленої раніше схеми даних;

6) проведення верифікації та валідації розроблених моделей і методів відповідно до вимоги міжнародного стандарту [13];

7) практична реалізація підходів, методів і моделей шляхом створення інформаційної технології визначення початкових умов формування аварійних ситуацій під час викидів небезпечних речовин і безпосереднє застосування технології в хімічному та нафтохімічному секторі.

**Об'єктом дослідження** є інформаційні процеси визначення початкових умов формування аварійних ситуацій, що зумовлюють викиди небезпечних речовин.

**Предметом дослідження** є моделі, методи та інформаційні технології визначення початкових умов формування аварійних ситуацій під час викидів небезпечних речовин в контексті QRA та управління техногенними ризиками.

**Методи дослідження**

Під час виконання НДР було застосовано такі методи:

- системний аналіз для створення інформаційної технології визначення початкових умов формування аварійних;
- теорія графів, математична логіка, теорія алгоритмів, методи оптимізації, математичне моделювання для формалізації, проєктування та розроблення математичних моделей процесів аварійної розгерметизації;
- теорія алгоритмів для управління створенням ІТБ визначення початкових умов формування аварійних ситуацій при викидах небезпечних речовин.

**Наукова новизна отриманих результатів**

Були отримані такі нові результати:

*Вперше:*

- розроблено взаємопов'язані динамічні моделі процесу аварійної розгерметизації апарата з багатокомпонентною хімічною сумішшю, які дозволяють організувати відповідність і автоматизацію передачі даних між моделями;
- розроблена інформаційна технологія динаміки процесу аварійної розгерметизації апарата, що містить багатокомпонентну хімічну суміш, для двох сценаріїв: розрив оболонки апарату і витік через аварійний отвір.

*Отримали подальший розвиток:*

- процедура HAZOP-дослідження, яка завдяки формалізації і аналізу моделі інформаційних потоків процедури HAZOP та інтеграції динамічної моделі апарату з багатокомпонентною хімічною сумішшю і фазовою рівновагою, дозволила квантифікувати відхилення і їх вплив на параметри фазової рівноваги в апараті, а також визначити параметри граничного стану, що передує аварії;
- інформаційна технологія безпеки, яка, завдяки застосуванню динамічних моделей фізико-хімічних процесів аварійної розгерметизації апарата з багатокомпонентними сумішами, дозволила уточнити параметри розгерметизації у порівнянні з іншими спрощеними і поширеними аналогами.

*Вдосконалено:*

- математичну модель випаровування аварійного виливу, яка, на відміну від існуючих, дозволяє визначати параметри випаровування багатокомпонентної суміші;
- модель кипіння перегрітої рідини, яка на відміну від існуючих дозволяє визначати параметри випаровування багатокомпонентної суміші в результаті кипіння.

**Практичне значення отриманих результатів**

Теоретичні та практичні роботи автора в галузі моделювання початкових умов формування аварійних процесів, виконані протягом 2018 – 2024 років, були узагальнені та систематизовані у цій дисертаційній роботі. Отримані методи, моделі та алгоритми є універсальними, взаємопоєднаними та застосовними для

широкого спектра завдань оцінки параметрів аварійної розгерметизації на хімічних та нафтохімічних виробництвах у контексті QRA як етапу управління ризиком. Результати роботи автора були втілені в такий спосіб:

1. Обґрунтовано, формалізовано, розроблено та верифіковано методи, моделі та алгоритми, необхідні для оцінки початкових умов формування аварійних ситуацій при викидах небезпечних речовин з урахуванням міжнародного стандарту [13] та фізики процесу розгерметизації.

2. Розроблено інформаційно-аналітичну систему для автоматизованої оцінки параметрів граничних станів обладнання хімічних виробництв та процесу викиду небезпечної речовини у навколишнє середовище з урахуванням можливості подальшого приєднання моделей оцінки поширення небезпечної речовини у просторі та оцінки вражаючих факторів.

3. Обґрунтовано необхідні вимоги до структури та наповнення бази даних фізико-хімічних властивостей речовин. База даних отримала інтерфейс, який дозволяє редагувати представлені параметри для більш ніж 5000 речовин, доповнювати новими речовинами, а також застосовувати БД як довідковий інструмент інженера незалежно від QRA.

4. Результати дисертаційного дослідження були впроваджені у промисловості: Акт впровадження (Додаток А)

**Особистий внесок здобувача**

Усі наукові результати, викладені в дисертації, отримані здобувачем особисто. У працях, опублікованих у співавторстві, здобувачу належать: [17] – запропоновано та розроблено математичний опис моделі випаровування аварійного виливу багатокомпонентної суміші, запропоновано та розроблено модель одновимірної задачі теплопередачі у підстилаючому шарі ґрунту, виконані пошук та систематизація експериментальних даних для валідації моделі; [18] – запропоновано, концептуальну схему елементу архітектури інформаційної технології безпеки, яка забезпечує автоматизацію передачі даних і гнучкість застосування; [19] – запропоновано, розроблено і реалізовано модель гідравлічної мережі у парадигмі теорії графів, окремі елементи якої були застосовані для

моделювання процесів у контексті ідентифікації небезпек і оцінки масштабу аварійної розгерметизації; [20] – запропоновано модель інформаційних потоків типового HAZOP-дослідження, розроблено алгоритм виконання HAZOP-дослідження з інтеграцією математичного моделювання впливу відхилень на параметри джерела небезпеки; [21] – показано ефекти застосування математичної моделі апарата у поєднанні з методикою HAZOP-дослідження з метою виявлення загроз під час відхилення параметру вхідного потоку апарата.

**Апробація результатів дисертації**

Отримані результати дисертаційної роботи обговорювалися на міжнародній науковій конференції:

- XV Міжнародна науково-методична конференція Національного технічного університету “Харківський політехнічний інститут” та Міжнародної наукової конференції Європейської Асоціації наук з безпеки (EAS) «БЕЗПЕКА ЛЮДИНИ У СУЧАСНИХ УМОВАХ», 7 – 8 грудня 2023 р., НТУ «ХПІ», Харків.

**Публікації**

За темою дисертаційного дослідження було опубліковано 5 наукових праць, у тому числі 4 професійних публікації, з яких 3 роботи у наукових фахових виданнях України, 1 теза доповідей і 1 стаття у збірниках матеріалів та праць конференцій.

**Структура та обсяг дисертації**

Дисертаційна робота складається зі вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел із 104 найменувань та 3 додатків. Загальний обсяг роботи становить 273 сторінок, у тому числі 169 сторінок основного тексту. Дисертація містить 80 рисунків та 51 таблицю.

# РОЗДІЛ 1
# АНАЛІЗ ІСНУЮЧИХ МЕТОДІВ І ТЕХНОЛОГІЙ ОЦІНКИ ПОЧАТКОВИХ УМОВ ФОРМУВАННЯ АВАРІЙНИХ СИТУАЦІЙ ПРИ ВИКИДАХ НЕБЕЗПЕЧНИХ РЕЧОВИН

## 1.1 Етапи прогнозування початкових умов формування аварійних ситуацій

При управлінні безпекою, що ґрунтується на РОП для всіх об'єктів підвищеної небезпеки в Україні необхідно оцінити рівень ризику на основі якісних чи кількісних методів залежно від рівня небезпеки і складності об’єкта дослідження. Враховуючи значний обсяг роботи, який необхідно виконати у зв'язку з переходом від домінуючої парадигми 100% безпеки до парадигми РОП, на даному етапі існує можливість значної економії державних бюджетних фондів та коштів приватних підприємств шляхом розвитку та впровадження нових сучасних інформаційних технологій, що значно прискорить та знизить вартість оцінок ризику [2].

Перед тим як розпочинати розробку методів та моделей оцінки початкових умов формування аварійних ситуацій, необхідно розглянути процес управління ризиком більш детально. Згідно з міжнародним стандартом [22], структура циклу управління ризиком має такий вигляд, представлений на рис. 1.1.

Безпосередня увага в рамках даного дослідження сфокусована на етапах ідентифікації загроз і аналізу ризику блоку оцінки ризику, що є ключовими етапами життєвого циклу безпеки технологічної системи.

Ідентифікація загроз – це систематичний процес виявлення якомога більшої множини відхилень від цілі проєкту у рамках виділеного часу і ресурсів задля подальшого встановлення причин таких відхилень і наслідків їх реалізації [23]. Для складних систем, якими є об’єкти хімічної і нафтохімічної промисловостей, рекомендується застосовувати такі деталізовані, послідовні і ретельні методи, як

FMEA (Failure Modes and Event Analysis), HAZOP (HAZard and OPerability study) [13].

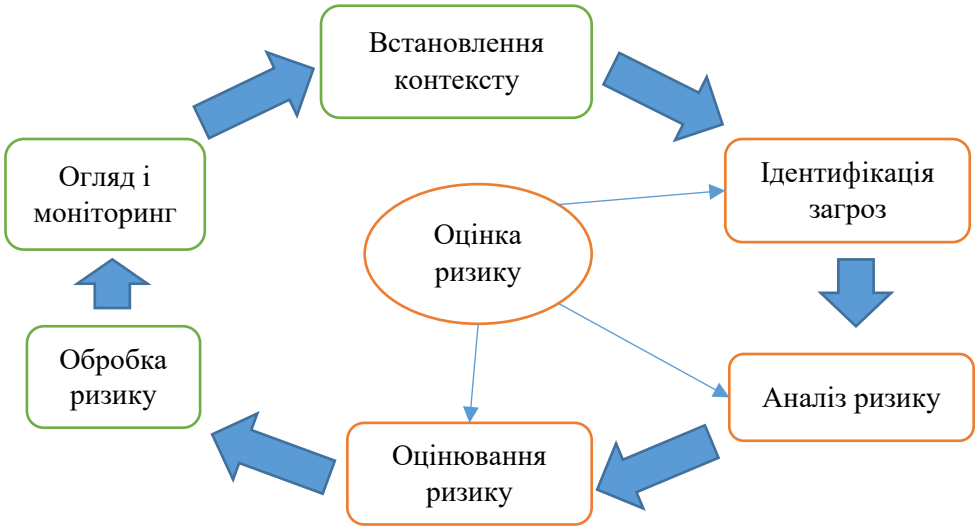



Рисунок 1.1 – Процес управління ризиком [22]

Метод HAZOP це покроковий підхід, який дозволяє методами мозкового штурму встановлювати відхилення параметрів технологічного процесу, їх причини і наслідки за допомогою застосування управляючих слів до параметрів процесу [24]. Результати HAZOP зводяться у табличну форму, зручну для подальшого аналізу.

Аналіз ризиків – це процес визначення імовірності появи небезпечних подій і наслідків їх реалізації. Для визначення імовірності небезпечних подій у складних технічних системах застосовуються більш детальні методи, серед яких розповсюдженими є дерева відмов, дерева подій, мережі Байєса, Марківські ланцюги [13, 25 – 27]. Наслідки реалізації небезпечних подій останнім часом все більше оцінюються кількісно з застосуванням математичного моделювання спектру явищ, що супроводжують аварійний процес [28]. Поширеною небезпечною подією на об’єктах хімічної і нафтохімічної промисловості є аварійна розгерметизація, яка відзначається втратою цілісності корпусу апарата із подальшим надходженням небезпечної речовини у навколишнє середовище (зрідка потрапляння повітря в середину апарата у разі процесів під пониженим тиском).

Source models (моделі початкових умов формування аварійних ситуацій) призначені для оцінки параметрів аварійного викиду небезпечної речовини і є ключовими для подальшого моделювання наслідків реалізації аварій [3, 29].

Вочевидь, що для оцінки параметрів процесу аварійної розгерметизації, слід враховувати параметри граничного стану, що передує порушенню цілісності оболонки ємнісного устаткування хімічного підприємства. Під час ідентифікації загроз зручно встановити початкові параметри формування аварійних ситуацій на етапі HAZOP-сесії [24, 30]. Параметри граничного стану можна оцінити з урахуванням думки експерта, чи регламентованих значень параметрів стану процесу. Однак часто параметри стану в устаткуванні будуть суттєво відрізнятися від регламентних значень та обумовлені численними факторами фізико-хімічної природи аналізованого процесу. Виникають ситуації, коли експерт не здатний умоглядним методом правильно врахувати принаймні найважливіші фактори та взаємозалежності стану складної, часто гетерофазної, хімічної системи в аварійному апараті під час відхилення параметра процесу [30].

Отже, виникає необхідність застосування математичного моделювання для визначення параметрів граничного стану обладнання хімічного підприємства, як було показано в [30].

Більш деталізовано етап аналізу ризику з урахуванням попередніх міркувань подано на рис. 1.2, де, зокрема, пропонується визначати параметри граничного стану апарата на основі математичного моделювання хімічного обладнання із застосуванням сучасних інформаційних технологій.

На етапі HAZOP можливий аналіз впливу збурення технологічного параметра на параметри стану в ємнісному апараті. Для цього необхідно мати динамічну модель апарата з можливістю, принаймні, враховувати вплив вхідних і вихідних потоків на матеріальний і тепловий баланси в апараті. Для окремого потоку має бути здатність генерувати збурення технологічного параметра, наприклад, температури, тиску, хімічного складу суміші, що рухається трубопроводом у ємність. У експерта має бути можливість отримати часові тренди зміни всіх параметрів стану хімічної системи в апараті унаслідок впливу збурення,

на підставі яких можна зробити висновок про ступінь відхилення від цілі проєкту, або настання розгерметизації.




Рисунок 1.2 – Принципова схема етапів кількісного аналізу та оцінки ризику

Аналіз ризику містить, як ключовий етап, моделювання процесу аварійної розгерметизації, метою якого є визначення необхідних параметрів газового потоку або витоку рідини для забезпечення можливості подальшого моделювання дисперсії та уражаючих факторів. Цей процес є досить складним, адже необхідно розглядати такі феномени, як зміна параметрів стану хімічної системи в апараті під час розгерметизації у часі, можливе кипіння перегрітої рідини при потраплянні у середовище з атмосферним тиском, формування та випаровування виливу рідкої фази під дією теплових потоків від ґрунту, сонця, повітря та ін. Складність цього початкового етапу формування аварії зумовлює відсутність адекватної інформаційної автоматизованої системи, яка б враховувала множинність феноменів, багатомодельність та різноманітність даних, що передаються між моделями.

Виникає закономірний висновок, що модель джерела небезпеки (аварійного резервуара) може бути застосована мінімум на двох етапах процедури оцінки ризику: ідентифікації небезпек та аналізу ризику і має забезпечувати доступ до даних за результатами моделювання як для експерта, так і для наступних у ланцюзі розрахунків програмних модулів.

Водночас, існують певні обмеження стосовно складності алгоритмів моделювання, оскільки на QRA відводиться доволі обмежений час, а кількість джерел небезпеки може складати декількох сотень для великих об’єктів хімічної промисловості. Час виконання процесу моделювання має дозволяти експерту отримувати дані з прийнятним ступенем довіри, достатньо швидко, щоб не сповільнювати процедуру ідентифікації небезпек, або розрахунки, пов’язані з оцінкою наслідків реалізації аварійних ситуацій.

Також рівень складності моделей має відповідати можливостям експерта знайти і надати необхідні вхідні дані. Особливо це стосується фізико-хімічних властивостей речовин. Для складних але більш реалістичних моделей може виникнути ситуація відсутності ряду характеристик речовини, що може змусити експерта виконувати додаткові складні розрахунки на базі молекулярної теорії [31]. Відповідно, така задача може не відповідати рівню кваліфікації експерта, або вимагати великих витрат часу на виконання, що може бути неприйнятним під час процедури QRA.

Застосування відносно спрощених моделей вирішує проблему надмірної складності алгоритмів і відсутності вхідних даних, але вимагає ретельної верифікації і валідації задля забезпечення представлення експертом рівня довіри до отримуваних даних: ступеня перевищення або заниження величин у порівнянні із фізичними експериментами, відповідність моделей базовому теоретичному підґрунтю.

Отже, дане дисертаційне дослідження сфокусовано на розгляді двох загальних завдань моделювання: визначенні параметрів граничного стану джерела небезпеки та моделюванні процесу розгерметизації з урахуванням вимог до складності алгоритмів і ступеня довіри до отримуваних результатів.

## 1.2 Методи оцінки параметрів граничного стану джерел небезпеки під час HAZOP-сесії

Ідентифікація небезпеки є важливим етапом у процесах управління ризиком. Зазвичай цей етап виконується експертами, сучасні стандарти, міжнародні (IEC 31010:2019), рекомендують використовувати такі методи: checklists, FME(C)A, HAZOP, Scenario Analysis, SWIFT [13]. Процедура вивчення небезпеки та працездатності (HAZOP) — один із найкращих та найретельніших методів виявлення небезпек та проблем із працездатністю на хімічному підприємстві. Процедура HAZOP формально досліджує крок за кроком обладнання, а також відхилення від умов його нормальної роботи та розглядає можливі несправності. Звіт HAZOP включає всі відхилення, їх причини, наслідки в роботі обладнання, аналіз таких наслідків, реалізовані системи захисту (активні та/або пасивні) та підсумкові пропозиції [30]. Дослідження HAZOP, як поєднання методів системного аналізу небезпечного об'єкта з мозковим штурмом, є, на наш погляд, найбільш об'єктивним. Проте оцінка небезпеки відхилення навіть групою фахівців, які мають великий досвід експлуатації та проєктування небезпечних об'єктів, не може гарантувати коректності прогнозу наслідків. Причому (зазначимо), застосування експертних методів в Україні поки що некоректне (або обмежено можливе) через відсутність нормативного механізму атестації експертів галузі, і, відповідно, механізму відповідальності експерта за результати, якщо існує великий ризик порушення прогнозу [32].

HAZOP вимагає багатогодинної роботи команди досвідчених інженерів, і нелегко записувати (непросто формалізувати) інженерні міркування, основну вхідну інформацію чи результати [30]. Для складних технологічних систем небезпека відхилення параметрів процесу у обладнанні навіть групою досвідчених фахівців без розрахунків не може бути виявлена однозначно. Тому зазвичай для подолання невизначеності приймається консервативна оцінка, що призводить іноді

до суттєвих надлишкових витрат на зниження ризику до допустимого його значення.

Отже, без застосування сучасних інформаційних технологій, що дозволяють моделювати складні технологічні системи [1], часові витрати, необхідні на виконання кількісних оцінок експертом, стають неприпустимо більшими порівняно з часом, виділеним на проведення процедури HAZOP, а точність експертного висновку про зміну технологічних параметрів в устаткуванні суттєво знижується [33].

Для виправлення зазначених недоліків процедури HAZOP, рекомендується застосовувати комп'ютерні технології, що базуються на базі знань [34, 35] і засновані на математичному моделюванні структурно складної технологічної системи [30, 33, 36]. Підхід, заснований на моделях, набуває останніми роками дедалі більшого значення. Моделювання технології дозволяє мінімізувати людський фактор, досконально формалізує відхилення та надає необхідні дані для подальшого моделювання наслідків, що важливо у разі подальшої кількісної оцінки ризику [30].

Наприклад, у роботі [30] було досліджено інтеграцію математичного моделювання процесів установки синтезу метил трет-бутилового етеру (MTBE) і процедури HAZOP з метою виявлення потенційних загроз і встановлення причин їх появи. У результаті застосування типових для процедури HAZOP «управляючих слів», формувалося і квантифікувалося відхилення певного параметра процесу. Наступним кроком було застосування математичної моделі реакційної установки синтезу MTBE, що дало змогу отримати адекватні наслідки впливу збурень параметрів процесу. У якості параметрів збурення розглядалися характеристики вхідних потоків реакційної установки: температура, витрата, хімічний склад потоку. У якості аналізованих параметрів використовувалася ступінь конверсії ізобутену (IB) у реакторі і колоні реакційної дистиляції. Була встановлена комплексна поведінка ступеню конверсії під час зміни параметрів вхідних потоків, що дало змогу квантифікувати зв’язки типу причина-наслідок і зрозуміти, за яких відхилень досягаються небажані стани в обладнанні.

У роботі [30] наголошується важливість квантифікації відхилень під час процедури ідентифікації небезпек (що часто є відсутнім у більшості звітів HAZOP сесій) для складних систем, адже виключно такий підхід дає змогу оцінювати динаміку зміни параметрів стану в апараті адекватно із застосуванням моделюванням.

Автори [1] також наголошують, що з точки зору дослідження безпеки процесу, корисним виглядає поєднання етапів аналізу ризику з моделюванням технологічного процесу, що дає можливість оцінити стійкість процесу до переходу у небезпечний стан під час збурень вхідних параметрів (наприклад, температури чи складу вхідного потоку апарата).

Взаємозв’язок між аналізом HAZOP і математичним моделюванням технологічних процесів досліджувався у [37]. Було показано вплив відхилень параметрів вхідних потоків на параметри стану в апараті і наголошено на необхідності розгляду автоматизованих систем регулювання процесу (PID-регулятори) як можливої причини виходу технологічних параметрів апарата за допустимі межі. Було наголошено, що тільки моделювання дозволило повноцінно сформулювати рекомендації за результатами HAZOP-сесії. Особливо це прослідковується для нелінійних систем, якими є технологічні апарати, у тому числі і ємнісні.

Хоча і спостерігається поступове вдосконалення методів інтеграції HAZOP і моделювання процесів, однак, наявні дослідження концентрують основну увагу на вивченні відхилення параметрів стану суміші в апараті, але не на умовах досягнення граничного стану системи всередині апарата, що призводять до його розгерметизації. Також не розглядається які саме параметри необхідні для оцінки наслідків розгерметизації. Хоча й існують дослідження [3, 38], присвячені технологіям оцінки наслідків, вони не розглядають можливість поєднання та автоматизації виконання процедури HAZOP, моделювання високоенергетичних процесів у ємнісному обладнанні та оцінки наслідків настання розгерметизації. При сучасному розвитку комп'ютерних технологій таке моделювання, на наш

погляд, є позитивним вектором розвитку логічного ланцюжка системного підходу в аналізі та оцінці ризику.

Отже, постає задача створення порівняно простої математичної моделі ємнісного обладнання хімічної галузі з урахуванням тепло та масообмінних процесів, яка в системі інформаційної технології аналізу ризику в процесі дослідження HAZOP дозволяла б учасникам сесії, задаючи відхилення характеристик вхідних потоків від цілей проєкту, виявляти ті з них, які можуть призводити або до порушення цілісності обладнання, або до порушень технологічного процесу, що призводять до суттєвих фінансових втрат. Модель повинна дозволяти прогнозувати поведінку основних параметрів стану хімічної системи, необхідних для оцінки можливості настання граничного стану обладнання (ємності), що призводить до розгерметизації (рис. 1.3).

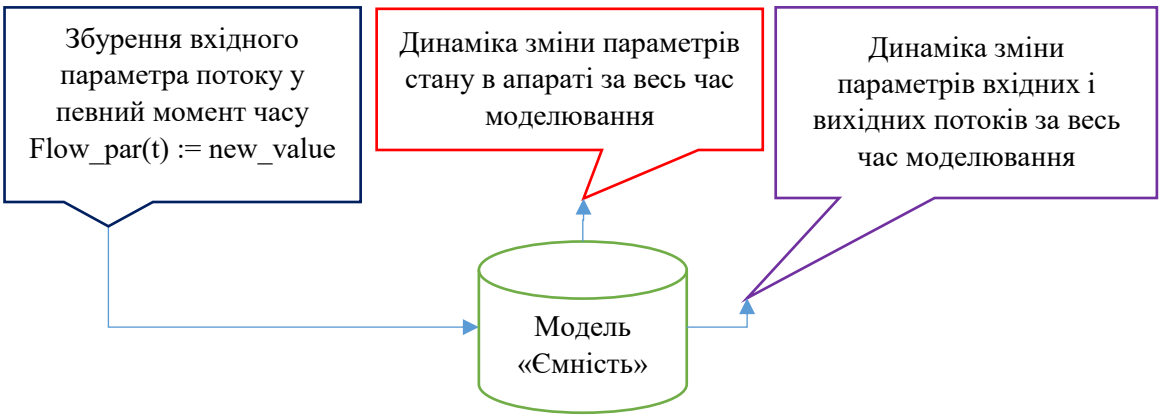



Рисунок 1.3 – Концепція моделі «Ємність» у частині моделювання досягненні граничного стану, що передує розгерметизації

Враховуючи перспективу розвитку сфери застосування моделі, що розробляється в галузі прогнозування наслідків аварійного викиду, необхідно враховувати багатокомпонентний склад хімічної суміші, що знаходиться всередині апарата. Це важливо для багатьох сучасних феноменологічних моделей прогнозування надходження небезпечної речовини в атмосферу, наприклад, для випаровування аварійного виливу багатокомпонентної рідкої фази [17].

## 1.3 Методи оцінки параметрів аварійної розгерметизації під час викиду небезпечних речовин у навколишнє середовище

Моделі аварійної розгерметизації слід використовувати для оцінки швидкості потоку або кількості небезпечних речовин, що вивільняються в результаті аварійної розгерметизації технологічного обладнання, а також інших фізичних та хімічних характеристик суміші, що вивільняється. Такі моделі відіграють ключову роль у визначенні розміру хмари, що розсіюється, і масштабів можливих наслідків летальних подій, наприклад, пожежі, вибуху, токсичного ураження [3].

Моделювання аварійної розгерметизації джерела небезпеки, яким найчастіше є технологічні резервуари, рефлюксні ємності, абсорбери, реактори та ін., є необхідною задачею під час визначення наслідків впливу на реципієнтів уражаючих факторів аварії.

У роботі [28] авторами проведено огляд 38 літературних джерел якісних методів аналізу ризиків, 29 джерел напівкількісних методів та 65 джерел, що описують кількісні методи аналізу ризиків. Автори [28] відзначають тенденцію до збільшення кількості досліджень, присвячених кількісним та напівкількісним методам моделювання наслідків. Це свідчить про те, що кількісна оцінка наслідків із застосуванням математичного моделювання стає все більш значущою практикою та супроводжується постійним удосконаленням моделей. Серед розглянутих досліджень [28] є робота [30], автори якої застосовують деталізоване математичне моделювання процесів і апаратів ще на етапі HAZOP-сесії з метою обґрунтувати експертну думку щодо причинно-наслідкових зв'язків типу «відхилення» – «наслідок». HAZOP є набагато більш раннім етапом кількісної оцінки ризику, ніж оцінка наслідків. Якщо є тенденція застосування практик математичного моделювання складної технологічної системи на етапі мозкового штурму, а також є взаємозв'язок явищ витоку з процесами в апаратах, то, в такому випадку, має сенс

розробка системи моделей, які застосовуються як для перевірки гіпотез експертів під час HAZOP-сесії, так і для прогнозування наслідків.

Одним із найбільш поширених та надійних літературних джерел, присвячених оцінці вихідних параметрів викидів небезпечних речовин, є [8]. У цій роботі розглядається логічна розрахункова схема оцінки витікання речовин у навколишнє середовище (рис. 1.4).

Запропонований у [8] набір розрахункових методів є найповнішим із представлених в інших джерелах. Автори враховують рівняння стану ідеального газу, фазову рівновагу у ємностях, динаміку зміни рівня рідкої фази в ємності та температури при розгерметизації, квазіміттєвий перехід фракції киплячої рідини в газовий стан при падінні тиску до атмосферного. Розглядається адіабатне витікання газів, а також витікання рідин та двофазних сумішей через отвори. Окремо представлена модель випаровування виливу рідкої фази, яка також є джерелом надходження газоподібної небезпечної речовини до навколишнього середовища.

Першим недоліком роботи [8] є те, що автори не розглядають багатокомпонентну суміш, яка досить часто бере участь у процесах хімічних та нафтохімічних виробництв. Склад суміші надає визначальний вплив (крім температури та, у деяких випадках, тиску) на фізико-хімічні властивості газів та рідин. Концентрації компонентів суміші здатні змінюватися в часі, що тягне за собою і зміну параметрів суміші під час аварійного викиду.

Також автори [8] не розглядають формування аварійного виливу, як результат адитивної дії потоків рідких фаз і первинного виливу. Аналогічно не розглядається сумаційний (адитивний) ефект дії газових потоків, що формують вторинну хмару тривалого викиду [8]. Очевидно, що неврахування сумаційної дії джерел емісії газоподібних речовин може призвести до суттєвої недооцінки наслідків реалізації уражаючих факторів і до недооцінки значення ризику у цілому.

Ще одним недоліком у [8] є відсутність рішення задачі газової та/або гідравлічної мережі, що підведена до аварійного апарата. Гідравлічна мережа враховує специфічну поведінку потоків під час зміни тиску в аварійному апараті,

зумовлює матеріальний та тепловий баланс в апараті, можливий зворотний напрямок потоків, як наведено у роботі [19].

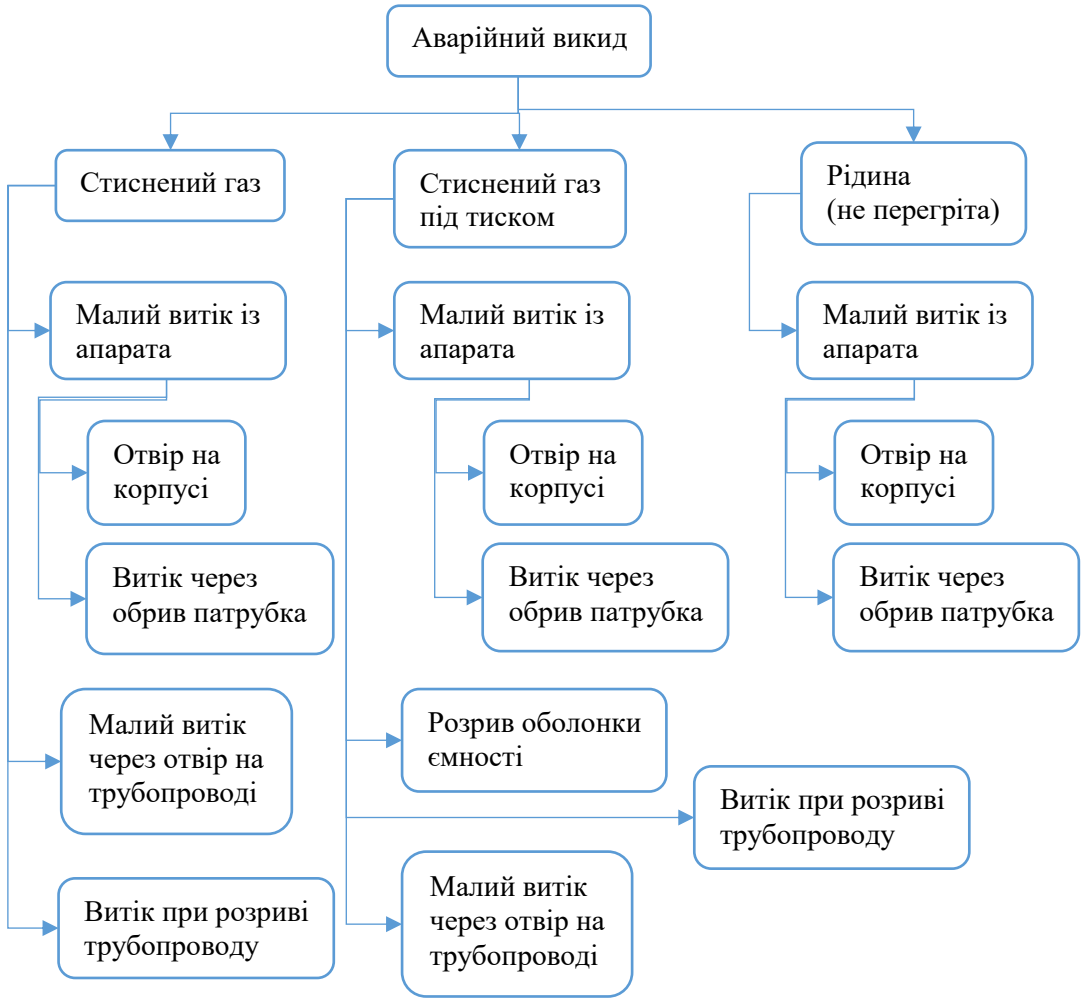



Рисунок 1.4 – Схематичне зображення розрахункової схеми моделювання аварійного витоку, згідно з [8]

Повертаючись до теми застосування псевдокомпонентів під час розрахунку аварійних витоків із ємнісного обладнання, автори [39] виконують динамічне моделювання аварійної розгерметизації апарата з фазовою рівновагою багатокомпонентної суміші і відзначають суттєву різницю у складі рівноважних парової і рідкої фаз. Так, парова фаза виявляється більше збагачена легколетучими компонентами, наприклад метаном і етаном, що у свою чергу суттєво впливає на подальший процес дисперсії газу в атмосфері, концентраційні границі поширення полум’я і енергію згоряння небезпечної речовини. Широко відома досить різна

сприйнятливість газів до детонації, що є важливим у певних моделях вибуху газоповітряних сумішей.

Робота [12] на відміну від [8] представляє логічну схему розрахунку витоку небезпечної речовини, яка включає безпосередньо випаровування виливу рідкої фази, а також розсіювання хмари газу. Автори [12] наводять спрощені методи моделювання викидів із ємності з урахуванням рівня рідкої фази, реакції та експозиції ємності до впливу полум'я пожежі. Зазначається розгляд кипіння потоку перегрітої рідини у разі його викиду. Однак у цій роботі [12] не розглядається фазова рівновага, багатокомпонентний склад суміші, і квазіміттєвий викид внаслідок розриву оболонки корпусу апарата.

Робота [40] багато у чому повторює роботу [12], проте не містить логічної схеми застосування моделей, що ускладнює адекватне моделювання процесу викиду. Робота [40] також не розглядає багатокомпонентність сумішей і викид при розриві оболонки.

Автори [41] проводять поглиблене дослідження дисперсії хмари за допомогою методу CFD і намагаються знайти кореляцію між розмірами газової хмари та такими параметрами, як швидкість потоку викиду і конвективний потік повітря. Викид газу моделюється як адіабатичний процес і розраховується швидкість потоку і температура газового потоку, що викидається. Однак автори [41] не враховують, що аварійний викид є інваріантним у часі, динамічним процесом, безпосередньо пов'язаним з параметрами стану в деяких випадках навіть багатофазних і багатокомпонентних сумішей всередині апарата. Отже, співвідношення, запропоноване [41] застосовується лише для постійних швидкості, температури та складу аварійного викиду.

Автори [42] досліджують викид легкозаймистої та отруйної суміші вуглеводнів та сірководню. Для моделювання дисперсії газової хмари використовують передові методи CFD. Однак сам викид моделюється дуже спрощеними методами. Хоча була отримана динамічна швидкість потоку, вона не відображає реалістичної залежності швидкості потоку розгерметизації від часу, оскільки не враховується падіння тиску в апараті в перші моменти після

розгерметизації (постійна швидкість потоку протягом перших секунд викиду згідно з даними, продемонстрованими авторами). Витіснена суміш є багатокомпонентною, але можливість існування рідкої фази в апараті, незважаючи на присутність відносно важкого пентану, частка якого досягає 23%, не розглядається. Температурна динаміка потоку газу також невідома, хоча температура має прямий вплив на густину хмари, що диспергується, а отже, на осідання, спливання або нейтральну плавучість хмари. Автори [42] використовують сучасний метод CFD для моделювання дисперсії, точність якого сильно спотворюється спрощеною технікою моделювання викиду.

Комплекси методів розрахунку аварійної розгерметизації, запропоновані у роботах [8, 43] одні із найповніших серед тих, що представлені в інших джерелах. Автори враховують фазову рівновагу в технологічному обладнанні, динаміку зміни рівня рідкої фази в технологічному резервуарі, а також зміну температури під час розгерметизації, квазіміттєвий перехід киплячої рідкої фракції в газоподібний стан при падінні тиску до атмосферного. Розглянуто адіабатне витікання газів, а також витікання рідини через аварійні отвори. Окремо представлена модель випаровування виливу рідкої фази, яка також є джерелом надходження газоподібних небезпечних речовин до навколишнього середовища.

У той самий час автори [8, 43] не розглядають багатокомпонентні суміші, які часто беруть участь у процесах хімічних і нафтохімічних виробництв. Склад суміші надає визначальний вплив на фізико-хімічні властивості газів та рідин. Зміст компонентів суміші здатний змінюватися з часом, що тягне зміну параметрів суміші під час аварійного викиду.

Також автори [8, 43] не враховують спільну дію газових потоків, що формують вторинну хмару.

У роботі [12] наведено блок-схему для розрахунку викиду небезпечної речовини, яка включає безпосередньо випаровування рідкого виливу, а також розсіювання газової хмари. Подано спрощені методи моделювання викидів з ємності, які враховують рівень рідкої фази. Однак автори цієї роботи не враховують фазову рівновагу та багатокомпонентний склад суміші.

Робота [40] подібна до [12] але не містить блок-схеми процесу розрахунку, що ускладнює адекватне моделювання процесу вивільнення. Робота [40] також не розглядає багатокомпонентні суміші.

Аналогічно вимогам до моделі ємності для етапу прогнозування параметрів граничного стану настання аварійної розгерметизації, для оцінки процесів викиду необхідно так само дотримуватися балансу між складністю алгоритмів, точністю моделей і можливістю експерта знайти вихідні дані для розрахунку. Якщо передбачається застосування моделей в єдиній системі, то має здійснюватися відповідність вхідних і вихідних даних моделей задля забезпечення обміну цих даних між ними [44].

Отже, у загальному вигляді вимоги до моделей і методів оцінки початкових умов формування аварійних ситуацій можна представити, як показано на рис. 1.5.

Враховуючи виконаний аналіз робіт, присвячених моделям і методам оцінки параметрів аварійної розгерметизації, існує низка невирішених задач у галузі моделювання процесу розгерметизації технологічних резервуарів у контексті інформаційної технології QRA:

- поширене застосування псевдокомпонентів, що негативно впливає на точність визначення фізичних та хімічних властивостей небезпечної середовища і процесу розгерметизації загалом;
- неможливість забезпечення визначення граничних умов настання розгерметизації внаслідок відхилень параметрів процесу і відмов систем безпеки за рахунок стаціонарних моделей апаратів;
- неврахування безпосередньої залежності параметрів процесу аварійного витоку від динаміки зміни параметрів стану фазової рівноваги всередині технологічної ємності для кожного моменту часу;
- складність моделювання сценаріїв витоку за участю різних фаз (рідина, газ), можливість раптового закипання потоку витоку, що передбачає утворення нового двофазного потоку, а також врахування сумаційного ефекту надходження

газоподібних речовин в атмосферу з декількох джерел емісії, що можуть діяти одночасно [45, 46].

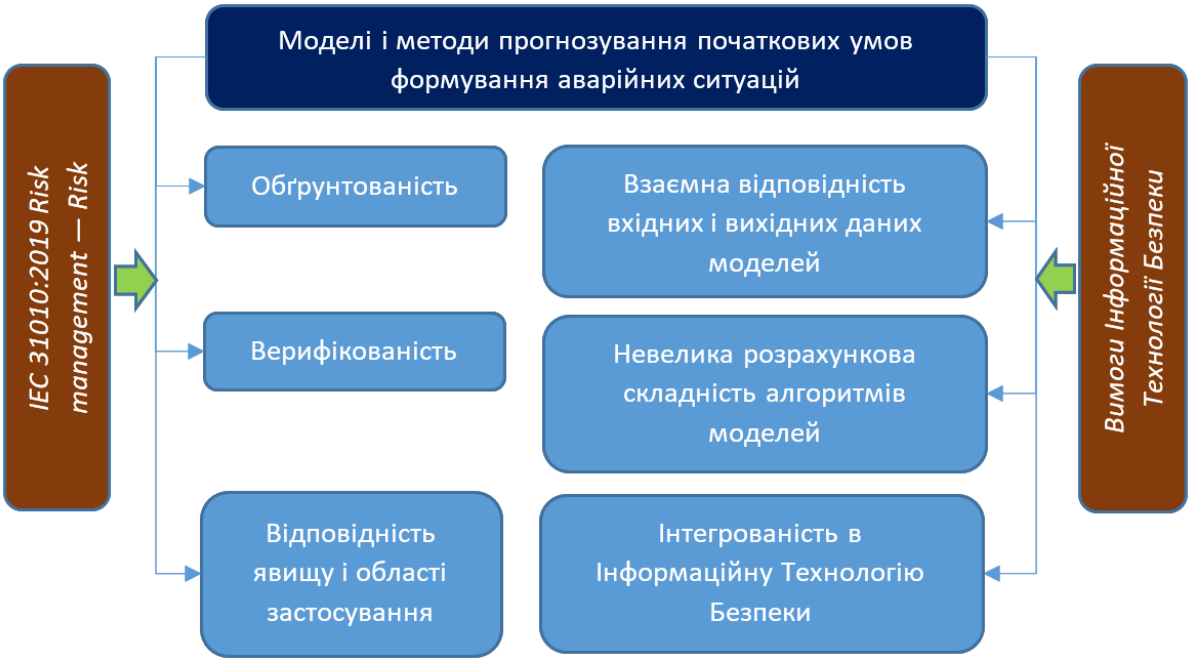



Рисунок 1.5 – Загальні вимоги до моделей і методів прогнозування початкових умов розгерметизації

Для досягнення поставленої мети необхідно вирішити такі завдання:

- розробити, верифікувати і інтегрувати в ІТБ динамічну математичну модель ємнісного обладнання з урахуванням фазової рівноваги, матеріального, теплового балансів багатокомпонентної хімічної суміші;
- розробити, верифікувати і інтегрувати в ІТБ математичну модель витоку багатокомпонентної суміші через аварійний отвір на корпусі ємнісного обладнання з урахуванням параметрів стану в апараті, що змінюються у часі, а також можливого кипіння перегрітої рідини, формування та випаровування виливу рідкої фази та врахування сумаційного ефекту декількох джерел емісії газоподібних речовин;
- розробити, верифікувати і інтегрувати в ІТБ математичну модель аварійної розгерметизації при розриві оболонки обладнання з урахуванням подальшого тривалого надходження речовини через обриви трубопровідної обв'язки апарата;

- врахувати можливість впливу зовнішніх систем захисту на хід розгерметизації.

Вирішення зазначених вище завдань можливе шляхом розробки інтегрального елементу сучасної ІТБ для оцінки граничних умов виникнення аварійної розгерметизації, а також розрахунку процесу викиду небезпечної речовини в навколишній простір із застосуванням уточнених моделей фізичних явищ, що супроводжують розгерметизацію.

## 1.4 Аналіз сучасних інформаційних технологій безпеки для об’єктів хімічного і нафтохімічного сектору

Важливою частиною дисертаційного дослідження є аналіз рівня розвитку сучасного прикладного програмного забезпеченння (ПЗ) для кількісного аналізу ризику у частині моделювання початкових умов формуваннях при викидах з ємнісного обладнання хімічних підприємств. Кожна інформаційна технологія розглядатиметься з двох аспектів:

- моделі і методи розрахунку процесу аварійної розгерметизації;
- особливості функціоналу програми.

З точки зору моделей і методів, особлива увага приділятиметься таким аспектам моделювання початкових умов формування аварійних ситуацій, як:

- можливість роботи з багатокомпонентними сумішами;
- врахування фазової рівноваги;
- динамічне моделювання процесів, що супроводжують аварійну розгерметизацію;
- можливість динамічного моделювання реакції параметрів стану системі в апараті на вплив зовнішнього збурення;

- наявність БД фізико-хімічних властивостей речовин (у тому числі їх температурних залежностей), яка містить достатню кількість базових речовин.

Аспекти функціоналу будуть досліджуватися і вимоги до них формуватися на основі наявних даних про сучасні ІТБ.

Одним із найкращих представників ІТ-продукції у галузі QRA є комерційний програмний комплекс Phast & Safeti норвезької компанії DNV [47, 48]. У контексті моделювання початкових умов формування аварійних ситуацій дане ПЗ дозволяє розглядати розгерметизацію ємнісного обладнання, трубопроводів, випаровування виливів. Також забезпечується автоматизація передачі даних між модулями і можливість побудови примітивної схеми розрахунку у вигляді списка. Характерним є те, що Phast може розглядати багатокомпонентні суміші і враховувати фазову рівновагу в апараті під час розгерметизації [49]. Підхід, заснований на багатокомпонентних сумішах, дозволяє на відміну від псевдокомпонентного або одногокомпонентного підходів здійснювати:

- більш точну оцінку фізико-хімічних параметрів суміші;
- розглядати двофазні рівноважні системи;
- враховувати суттєву різницю у складі рівноважних парової і рідкої фаз.

Однак вагомими недоліками продукту Phast є відсутність динамічного моделювання викиду багатокомпонентної суміші, неврахування фазового переходу перегрітої рідини під час її потрапляння до навколишнього середовища, неможливість врахувати вплив трубопровідної обв’язки апарата на процес розгерметизації, а також неможливість застосування моделювання ємнісного апарата у разі відхилень технологічних параметрів на етапі сесії HAZOP з метою виявлення граничних умов настання розгерметизації [49]. Наповненість БД фізико-хімічних властивостей речовин є малою і складає 103 речовини [50].

З точки зору інтерфейсу користувача і функціоналу основними недоліками Phast є нездатність побачити взаємозв’язки між модулями розрахункової схеми (мають вигляд простого списку), неможливість побачити склад суміші, що розсіюється і неможливість приєднати модуль випаровування

багатокомпонентного виливу у автоматизовану схему розрахунку для багатокомпонентної суміші [51].

Доволі відомою інформаційною технологію QRA є безкоштовне американське ПЗ ALOHA [52]. Програма дозволяє враховувати сценарії розриву оболонки апарата або витоку через аварійний отвір. Реалізована динамічна модель витоку через аварійний отвір. Врахована зміна положення рівня рідкої фази відносно відмітки аварійного отвору з часом, що адекватно впливає на інтенсивність викиду [53].

З іншого боку ALOHA повторює перелічені вище недоліки Phast, відсутнє моделювання з урахуванням багатокомпонентних сумішей, а функціонал є набагато більш мінімалістичним [52].

Продукт FLACS (FLame ACceleration Simulator) компанії GEXCON представляє собою середовище CFD-моделювання поширення небезпечних речовин у навколишньому середовищі з подальшою реалізацією уражаючих факторів [54]. ПЗ має здатність враховувати багатокомпонентний склад суміші речовин, однак модель витоку стаціонарна [55]. Програма застосовується для поглибленого вивчення окремих нетривіальних сценаріїв поширення домішок (наприклад, з метою оптимального встановлення газоаналізаторів) і має інтерфейс специфічний для програм класу CFD.

Робота [56] присвячена питанню безпосереднього моделювання витоку небезпечних речовин через аварійний отвір. Наголошується, що такі симулятори хіміко-технологічних процесів як UNISIM з допомогою незначних модифікацій можуть успішно застосовуватися у якості динамічних моделей аварійних викидів у галузі QRA. Показано, що для деяких випадків динамічне моделювання витоку через аварійний отвір може давати значно більший час існування уражаючого фактора (пожежа типу факел) у порівнянні зі стаціонарними моделями, що обумовлює необхідність поступового переходу на динамічні моделі апаратів, як ключовий елемент ІТБ.

У роботах [30, 57] було застосовано комп’ютерний код DYNHAZ, який побудований на динамічних математичних моделях хіміко-технологічного

обладнання, такого, як ємності, реактори і має інтегроване середовище для автоматизованого застосування управляючих слів процедури HAZOP до параметрів процесу. Відхилення параметрів генеруються у діапазоні від -100% до +100% з певним кроком. Однак ПЗ DYNHAZ неможливо знайти у вільному доступі, чи на комерційній основі, а матеріали стосовно валідації моделей і інтерфейсу програмного середовища відсутні, що унеможливлює подальший аналіз і оцінку застосовності цього коду як повноцінного інструмента експерта.

Інформаційна технологія BREEZE Incident Analyst американської компанії Trinity [58] дозволяє здійснювати моделювання аварійних викидів із врахуванням багатокомпонентних сумішей, фазової рівноваги. Однак у ПЗ відсутня можливість врахування підведених до аварійної ємності потоків. Чи моделюється динамічний процес аварійного викиду виявити не вдалося. Існує певна автоматизація передачі даних, можливість побудови довільних ланцюжків розрахункових модулів відсутня.

Існує ще багато інших інформаційних технологій, таких як SafeSite3g (Baker Risk), EFFECTS (GEXCON), ExTool V5 (Swiss Re), SHEPHERD (Shell, GEXCON) які моделюють початкові умови формування аварійних ситуацій, але інформація про методичні основи, закладені у наведені програмні продукт, як і особливості функціоналу, у вільному доступі не була знайдена.

Слід зазначити важливість наявності комбінації моделювання впливу збурень у параметрах потоків на параметри стану в апараті і процесу аварійної розгерметизації в одному програмному продукті, що пояснюється фінансовим фактором: до наявних інформаційних технологій QRA доводиться докуповувати складні і дороговартісні системи математичного моделювання хімічної технології (HYSIS, CHEMCAD, PRO II та ін.), які на даному етапі можуть потребувати доопрацювання, що суттєво здорожчує витрати організації, яка займається кількісним аналізом ризиків.

Результати огляду сучасного ПЗ у галузі QRA у контексті методичних базисів і функціоналу представлені у табл. 1.1.

Таблиця 1.1 – Порівняння поширених сучасних інформаційних технологій, що застосовуються у галузі QRA

| | Phast | ALOHA | FLACS | UNISIM | DYN HAZ | BREEZE Incident Analyst |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Динамічне моделювання ємнісних апаратів у контексті розгерметизації | + | + | - | - | - | ? |
| Динамічне моделювання ємнісних апаратів у контексті впливу збурень вхідних параметрів процесу на параметри стану в апараті | - | - | - | + | + | - |
| Вплив трубопровідної обв'язки на матеріальний і тепловий баланси в апараті | + | - | - | + | + | - |
| Багатокомпонентні суміші | + | - | + | + | + | + |
| Наявність БД речовин | + | + | + | + | ? | + |
| Фазова рівновага | + | + | - | + | + | + |
| Випаровування багатокомпонентного виливу, інтегрованого як частина схеми розрахунку | - | - | - | - | - | - |
| Врахування кипіння потоку перегрітої рідини під час викиду в атмосферу | + | - | - | - | - | + |
| Врахування сумаційного ефекту від декількох джерел надходження газу у навколишнє середовище (напр. випаровування виливу + витік через отвір) | - | - | - | - | - | - |
| Можливість побудови автоматизованої схеми розрахунків на основі бібліотеки модулів | + | - | - | - | - | - |

| Умовні позначення | |
|---|---|
| + | наявне |
| - | відсутнє |
| ? | наявність або відсутність не встановлені |

На підставі виконаного вище аналізу ПЗ, можна сформулювати загальні невирішені на даний момент методичні і функціональні задачі ІТБ у частині моделювання початкових умов формування аварійних ситуацій, що стосуються усіх досліджених ІТБ:

*методичні:*

- неврахування сумаційного (адитивного) ефекту декількох джерел емісії газоподібних речовин у атмосферу під час реалізації одного аварійного сценарію;

*функціональні:*

- нереалізованість можливості створення достатньої для виконання розрахунку процесу розгерметизації схеми розрахунку за участю багатокомпонентних сумішей на основі бібліотеки модулів і можливості встановлювати зв’язки між модулями для забезпечення автоматизації передачі даних.

Відповідно кожна розглянута ІТБ має набагато більше невирішених індивідуальних задач (ніж наведених загальних), які можуть бути вирішені в інших ІТБ і навпаки. Покращена ІТБ має реалізовувати всі позитивні сторони окремих розглянутих програмних продуктів і вирішувати загальні для всіх них недоліки.

Сучасна інформаційна технологія QRA має відповідати певному рівню автоматизації і гнучкості середовища, яке дозволяє експерту виконувати широкий спектр задач у короткі терміни. Такі вимоги у загальному вигляді представлені на рис. 1.6.

На нашу думку, одним з найкращих підходів може бути можливість побудови довільної схеми розрахунку експертом з автоматизованою передачею даних між модулями, як було частково реалізовано у Phast (DNV). Допускається, що експерт за допомогою розробленого ПЗ матиме здатність обирати з бібліотеки необхідні розрахункові модулі, візуально впорядковувати їх і поєднувати специфічними для цих модулів зв’язками, що забезпечують автоматизовану передачу даних між модулями. Така розрахункова схема представлятиме собою однонаправлений граф, а отже явно характеризуватиме порядок виконання модулів.




Рисунок. 1.6 – Загальні вимоги до інформаційної технології безпеки

Отже, виникає необхідність синтезу концептуальної схеми архітектури ІТБ з урахуванням перелічених вище вимог і рекомендацій (рис. 1.7).

Після того, як експерт розмістив на робочому полі набір модулів (Модулі 1 – 4, рис. 1.7) і поєднав їх потоками інформації, що передається послідовно від одного модуля до іншого, розрахункова схема проєкту QRA сформована. Оскільки джерела небезпеки певним чином розміщені на території об’єкта підвищеної небезпеки, експерт має можливість за допомогою модуля «Редактор мапи» (рис. 1.7) розмістити аварійні резервуари на карті-підкладинці, і, заразом вказати параметри реципієнтів, які можуть бути у зоні ураження під час реалізації аварійної ситуації. Модуль «Суміші» відіграє ключову роль під час конфігурації багатокомпонентних сумішей, що беруть участь у розрахунках, і пов’язаний як з БД фізико-хімічних властивостей речовин, так і з системою управління розрахунками і передачі даних (СУРПД). У свою чергу СУРПД забезпечує передачу даних між модулями, відслідковуючи при цьому ступінь їх виконання, щоб уникнути критичних помилок під час роботи програми. Також СУРПД відповідає за збереження налаштувань проєкту і результатів розрахунків до БД проєктів. Сервіс формування звітів за результатами моделювання містить інтерфейс, який дозволяє експерту отримати доступ до результатів розрахунків і спряжений з СУРПД програми. Модулі «Переглядач речовин» і «Редактор речовин» (рис. 1.7) забезпечують доступ до БД

речовин, і, відповідно, виключно перегляд даних, що стосуються речовин, або і перегляд і редагування даних.




Рисунок 1.7 – Концептуальна схема елементу архітектури інформаційної технології безпеки, яка забезпечує автоматизацію передачі даних і гнучкість застосування

У даному підрозділі на основі результатів аналізу сучасного ПЗ у галузі QRA, було сформульовано основні вимоги до функціоналу і побудована концептуальна схема архітектури ІТБ для прогнозування початкових умов формування аварійних ситуацій.

## 1.5 Висновки до розділу 1

Показано основні етапи прогнозування початкових умов формування аварійних ситуацій, серед яких акцент дисертаційного дослідження сфокусовано на таких:

- визначення параметрів граничного стану джерела небезпеки (HAZOP+моделювання);
- моделювання процесу розгерметизації.

З’ясовано, що на даний момент існує низка невирішених задач у галузі моделювання процесу розгерметизації технологічних резервуарів у контексті інформаційної технології QRA:

- поширене застосування псевдокомпонентів, що негативно впливає на точність визначення фізичних та хімічних властивостей небезпечної суміші і процесу розгерметизації загалом [39];
- неможливість забезпечення визначення граничних умов настання розгерметизації внаслідок відхилень параметрів процесу і відмов систем безпеки за рахунок стаціонарних моделей апаратів;
- неврахування безпосередньої залежності параметрів процесу аварійного витоку від динаміки зміни параметрів стану фазової рівноваги всередині технологічної ємності для кожного моменту часу;
- складність моделювання сценаріїв витоку за участю різних фаз (рідина, газ), можливість раптового закипання потоку витоку, що передбачає утворення нового двофазного потоку [45, 46].

Аналіз рівня розвитку методів, моделей та технік визначення початкових умов формування аварійних ситуацій показав потребу в Україні та світі у створенні наступного покоління групи моделей аварійної розгерметизації (ADM). Такі моделі мають враховувати:

- динаміку початкових умов формування аварійних ситуацій;
- умови фазової рівноваги в аварійному апараті;
- процес кипіння перегрітої рідини при попаданні в середовище з атмосферним тиском;
- багатокомпонентний склад хімічних сумішей, що беруть участь у розгерметизації.

Основою групи модулів ADM є динамічна модель ємнісного апарата, що дозволяє застосовувати її як на етапі ідентифікації небезпек (HAZOP), так і у процесі моделювання аварійного викиду. Під час процедури HAZOP доцільно застосовувати саме динамічні моделі апаратів як для перевірки наслідків відхилення параметрів технологічного процесу, так і для остаточного визначення граничних умов в апараті, що призводять до розгерметизації.

Було сформульований спектр завдань, які необхідно вирішити для досягнення поставленої мети:

- розробити, верифікувати і інтегрувати в ІТБ динамічну математичну модель ємнісного обладнання з урахуванням фазової рівноваги, матеріального, теплового балансів багатокомпонентної хімічної суміші;
- розробити, верифікувати і інтегрувати в ІТБ математичну модель витоку багатокомпонентної суміші через аварійний отвір на корпусі ємнісного обладнання з урахуванням параметрів стану в апараті, що змінюються у часі, а також можливого кипіння перегрітої рідини, формування та випаровування виливу рідкої фази та врахування сумаційного ефекту декількох джерел емісії газоподібних речовин;
- розробити, верифікувати і інтегрувати в ІТБ математичну модель аварійної розгерметизації при розриві оболонки обладнання з урахуванням подальшого тривалого надходження речовини через обриви трубопровідної обв'язки апарата;
- врахувати можливість впливу зовнішніх систем захисту на хід розгерметизації;
- в ІТБ реалізувати особливості запропонованої архітектури, яка базується на можливості задавати довільну розрахункову схему за допомогою бібліотеки модулів і встановлення зв’язків між модулями, і достатньої для оцінки початкових умов формування аварійних ситуацій.

Матеріали розділу опубліковані у роботах автора [18, 19].

# РОЗДІЛ 2
# МОДЕЛІ І МЕТОДИ ВИЗНАЧЕННЯ ГРАНИЧНИХ УМОВ РОЗГЕРМЕТИЗАЦІЇ ХІМІЧНОГО ОБЛАДНАННЯ

## 2.1 Аналіз моделі інформаційних потоків HAZOP-дослідження

Типова процедура HAZOP-дослідження, описана стандартом [24], не передбачає деталізованої моделі інформаційних потоків, а лише дає загальний опис процедури отримання відхилень із застосуванням керуючих слів до параметрів джерел небезпеки. Відсутня формалізація процесу визначення наслідків дії відхилень, лише наявні деякі рекомендації, наприклад, застосування погодженої експертної думки за методом Дельфі [59]. У свою чергу, математичне моделювання небезпечних процесів дає можливість отримані квантифіковані наслідки дії відхилень параметрів процесу на джерело небезпеки, що, на відміну від поширеної практики, дозволяє приймати рішення, керуючись кількісними показниками, а також отримувати повний набір параметрів для подальшого моделювання наслідків аварійної розгерметизації [18, 33]. Але інтеграція математичного моделювання з HAZOP є ускладненою через комплексну ієрархічну модель інформаційних потоків процедури HAZOP.

Виникає необхідність у формалізації моделі інформаційних потоків HAZOP-дослідження, що дозволить зрозуміти місце і умови застосування математичного моделювання впливу відхилень параметрів процесу на інші параметри стану джерела небезпеки.

Модель інформаційних потоків HAZOP-дослідження може бути виражена у вигляді орієнтованого графа (рис. 2.1) [60].

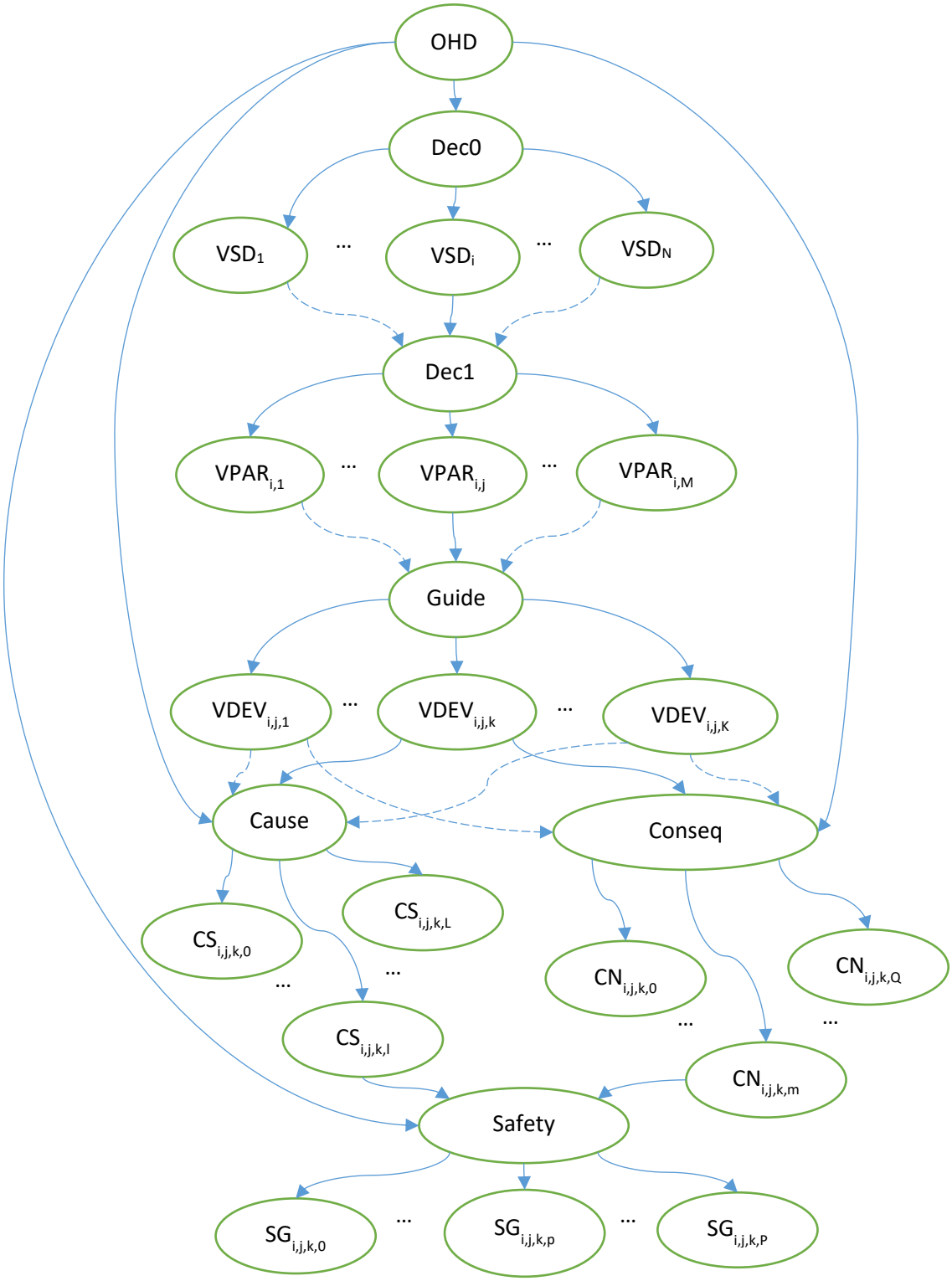



Рисунок 2.1 – Модель інформаційних потоків типового HAZOP-дослідження

Отриманий орієнтований граф HAZOP-дослідження можна представити у вигляді

$$G1 = (V,E),$$

де V – множина вузлів кожного рівня орграфа; E – множина спрямованих ребер, що з'єднують вузли графа як у межах рівня, так і між рівнями.

У свою чергу множина V складається з підмножин і відображень (рис. 2.1)

$$V = \{OHD, VSD, VPAR, VDEV, CS, CN, SG, Dec0, Dec1, Guide, Cause, Consequence, Safeguard\},$$

де OHD – об'єкт підвищеної небезпеки (Object of High Danger); VSD – множина джерел небезпеки (Sources of Danger); $VPAR_i$ – множина параметрів i-го джерела небезпеки; $VDEV_{i,j}$ – множина відхилень j-го параметра i-го джерела небезпеки; $CS_{i,j,k}$ – множина причин k-го відхилення j-го параметра i-го джерела небезпеки; $CN_{i,j,k}$ – множина наслідків k-го відхилення j-го параметра i-го джерела небезпеки; $SG_{i,j,k}$ – множина захисних заходів для k-го відхилення j-го параметра i-го джерела небезпеки; Dec0 – функція декомпозиції об'єкта підвищеної небезпеки, представленого множиною OHD, на джерела небезпеки, представлених множиною VSD; Dec1 – функція декомпозиції джерела небезпеки, представленого підмножиною $VSD_i$ на параметри джерела небезпеки, представлених підмножиною $PAR_i$; Guide – функція генерації відхилень, представленого множиною кортежів $VDEV_{i,j}$, шляхом впливу керуючих слів на j-параметр i-го джерела небезпеки: $PAR_{i,j}$; Cause – функція генерації причин відхилення $PAR_{i,j,k}$, представлених у вигляді множини кортежів $CS_{i,j,k}$; Conseq – функція генерації наслідків відхилення $PAR_{i,j,k}$, представлених у вигляді множини кортежів $CN_{i,j,k}$; Safety – функція генерації захисних заходів, представлених у вигляді множини кортежів $SG_{i,j,k}$.

Вершина OHD графау G1 містить у собі необхідну і достатню структуровану множину інформації про об'єкт підвищеної небезпеки для забезпечення можливості виконання дослідження HAZOP. Нехай, розглядається потенційний вплив уражаючих факторів на споруди і людей. Тоді представимо вершину OHD як множину у загальному вигляді

$$OHD = \{MAP, SD, PAR, SGE, PPL, OBJ),$$

де MAP – параметри просторового розподілу на місцевості джерел небезпеки, людей, споруд; SD – множина унікальних ідентифікаторів (назв) джерел небезпеки; PAR – множина параметрів, які описують джерела небезпеки і характеризуються числовим значенням, розмірністю і назвою; SGE – множина існуючих на об'єктів систем захисту; PPL – параметри груп людей, які можуть бути у зоні підвищеної небезпеки дії уражаючих факторів аварій; OBJ – параметри споруд, які можуть бути у зоні підвищеної небезпеки дії уражаючих факторів аварій.

Формально, процедуру формування множини VSD можна представити у вигляді

$$VSD = \{x|x = Dec0(OHD)\} = \{(SD_1,PAR_1),\ldots,(SD_i,PAR_i),\ldots,(SD_N,PAR_N)\},$$

де $SD_i$ – унікальний ідентифікатор і-го джерела небезпеки; $PAR_i$ – кортеж параметрів, що описують і-те джерело небезпеки.

Процедуру формування підмножини $VPAR_i$ можна представити у вигляді

$$VPAR_i = \{x|x = Dec1(VSD_i)\} = \{(SD_i, PAR_{i,1}),\ldots,(SD_i, PAR_{i,j})\ldots,(SD_i, PAR_{i,Mi})\},$$

де $PAR_{i,j}$ – j-й параметр і-го джерела небезпеки; $M_i$ – кількість параметрів, що описують і-те джерело небезпеки.

Процедуру формування підмножини $VDEV_{i,j}$ можна представити у вигляді

$$VDEV_{i,j} = \{x|x = Guide(VPAR_{i,j})\} = \{(PAR_{i,j}, GuideWord_1, SD_i),\ldots,(PAR_{i,j}, GuideWord_k, SD_i),\ldots,(PAR_{i,j}, GuideWord_{Ki,j}, SD_i\},$$

де $GuideWord_k$ – k-те керуюче слово, що застосовується до j-го параметра і-го джерела небезпеки; $K_{i,j}$ – кількість керуючих слів, що застосовна до j-го параметра і-го джерела небезпеки.

Процедуру формування підмножини $CS_{i,j,k}$ можна представити у вигляді

$$CS_{i,j,k} = \{x|x = Cause(OHD, VDEV_{i,j,k})\} = \{(Cause_1, VDEV_{i,j,k}, SD_i),\ldots,(Cause_l, VDEV_{i,j,k}, SD_i),\ldots,(Cause_L, VDEV_{i,j,k}, SD_i)\},$$

де $Cause_l$ – l-та причина відхилення $VDEV_{i,j,k}$ у джерелі небезпеки $SD_i$; L – кількість причин, що спричинюють відхилення $VDEV_{i,j,k}$.

Процедуру формування підмножини $CN_{i,j,k}$ можна представити у вигляді

$$CN_{i,j,k} = \{x|x = Conseq(OHD, VDEV_{i,j,k})\} = \{(VDEV_{i,j,k}, SD_i, Consequence_1),\ldots,(VDEV_{i,j,k}, SD_i, Consequence_m),\ldots,(VDEV_{i,j,k}, SD_i, Consequence_Q)\},$$

де $Consequence_m$ – m-й наслідок, спричинений відхиленням $VDEV_{i,j,k}$ у джерелі небезпеки $SD_i$; Q – кількість наслідків, що можуть бути спричинені відхиленням $VDEV_{i,j,k}$ у джерелі небезпеки $SD_i$.

Процедуру формування підмножини $SG_{i,j,k}$ можна представити у вигляді

$$SG_{i,j,k} = Optimize(Safeguard(CS_{i,j,k} \times CN_{i,j,k}), Price, Risk, Redundancy),$$

де $CS_{i,j,k} \times CN_{i,j,k}$ – декартовий добуток, що надає усі можливі комбінації причин і наслідків відхилення; $Safeguard(CS_{i,j,k} \times CN_{i,j,k})$ – функція, що генерує множину систем захисту для усіх можливих комбінацій причина-наслідок для окремого відхилення; $Optimize(Safeguard(CS_{i,j,k} \times CN_{i,j,k}), Price, Risk, Redundancy)$ – функція оптимізації множини отриманих за допомогою функції Safeguard систем захисту за критеріями мінімізації вартості Price, не перевищення допустимого ризику Risk та не перевищення критерію надлишковості Redundancy.

Маючи достатню описову частину ієрархічної структури даних HAZOP-дослідження, можна сфокусуватися на інтеграції моделювання під час процедури HAZOP. За процедуру моделювання відповідає функція Conseq (рис. 2.1), вона ж надає можливість вибору між застосуванням експертної думки чи математичного моделювання. Стає очевидним, що для можливості застосування математичної моделі джерела небезпеки, необхідна квантифікація кортежу відхилення

$$VDEV_{i,j,k} = Quant((PAR_{i,j}, GuideWord_1, SD_i)) \rightarrow (PAR_{i,j}, GuideWord_1, Disturbance_{i,j,k}, SD_i),$$

де $Disturbance_{i,j,k}$ – значення параметра j джерела небезпеки і у результаті відхилення k.

Проведена математична формалізація процедури HAZOP дозволяє у повній мірі побачити структуру інформаційних потоків, сформулювати вимоги до інтеграції функції математичного моделювання на етапі визначення впливу відхилень на наслідки. На основі проведеного аналізу, була побудована блок-схема алгоритму (рис. 2.2), яка враховує модель інформаційних потоків HAZOP (рис. 2.1).

Дослідивши інформаційний потік $<VDEV_{i,j,k}$, Conseq>, стає зрозумілим, що для коректного аналізу впливу відхилення, необхідно вивести динамічну математичну модель апарата (джерела небезпеки) на стаціонар, що відповідає регламентним значенням параметрів процесу. Оскільки вихід моделі на стаціонар є ресурсоємним процесом, то виконання даної процедури під час емуляції кожного відхилення є неприйнятним під час HAZOP.

Більш ефективним виглядає налаштування моделі на стаціонар після декомпозиції ОПН на джерела небезпеки, збереження і подальша мультиплікація цього стану для кожного окремого відхилення параметра процесу (рис. 2.2).

Декомпозиція ОПН і налаштування моделі джерела небезпеки шляхом виведення її на стаціонар може виконуватися у якості підготовчого етапу перед HAZOP-сесією.

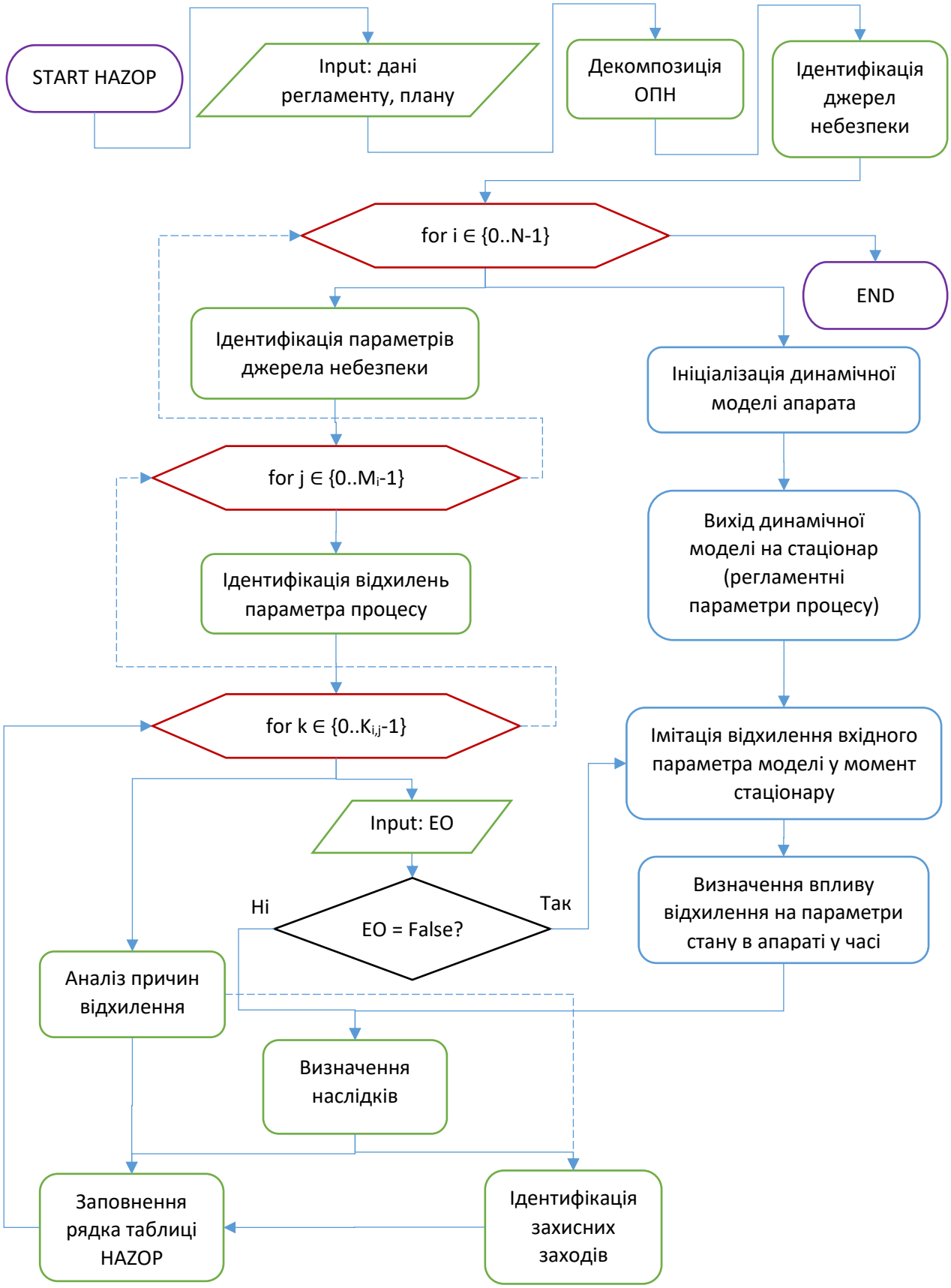



Рисунок 2.2 – Блок-схема алгоритму виконання HAZOP-дослідження з інтеграцією математичного моделювання впливу відхилень на інші параметри джерела небезпеки

Водночас збережена можливість вибору між методом визначення наслідків впливу відхилення експертною думкою, що забезпечується відповідною процедурою умови на основі значення параметра ЕО:

- ЕО = “True” – вплив відхилення параметра процесу на наслідки визначається експертними методами (Дельфі чи інші);
- ЕО = “False” – вплив відхилення параметра процесу на наслідки визначається шляхом динамічного моделювання.

Запропонована модель інформаційних потоків процедури HAZOP дозволила розробити метод аналізу впливу відхилення параметра процесу на параметри стану апарата на основі динамічної математичної моделі апарата. Результати застосування методу для аналізу одного відхилення параметра процесу наведено у подальших підрозділах. Отриманий підхід є масштабованим і реалізованим, як частина інформаційної технології безпеки, і інтегрується у HAZOP-сесію як додатковий інструмент підтримки роботи експерта у ситуаціях невизначеності.

## 2.2 Метод інтеграції HAZOP і моделювання

### 2.2.1 Математичний опис моделі апарата (джерела небезпеки)

Модель високоенергетичних процесів у ємності є детермінованою, динамічною і дозволяє визначити параметри стану двофазної системи (суміші речовин) усередині ємності у будь-який момент часу (рис. 2.3).

Приймаються такі припущення, типові для хімічних технологій:

- апарат – порожнистий, теплоізольований тонкостінний об'єкт (ємність), що характеризується об'ємом V [$м^3$] та лінійними розмірами, формою (рис. 2.3);
- в ємності знаходиться багатокомпонентна (2 і більше хімічних сполук) суміш речовин, що утворює однофазну (тільки рідина або тільки газ) або двофазну (пар/рідина) рівноважну термодинамічну систему (рис. 2.3);

• суміш всередині ємності характеризується параметрами стану: температурою T [K], тиском парової фази P [Па], об'ємом, рівним об'єму ємності V, вектором складу пароріднної суміші C, вираженим у мольних частках і мольною часткою парової фази E (рис. 2.3);

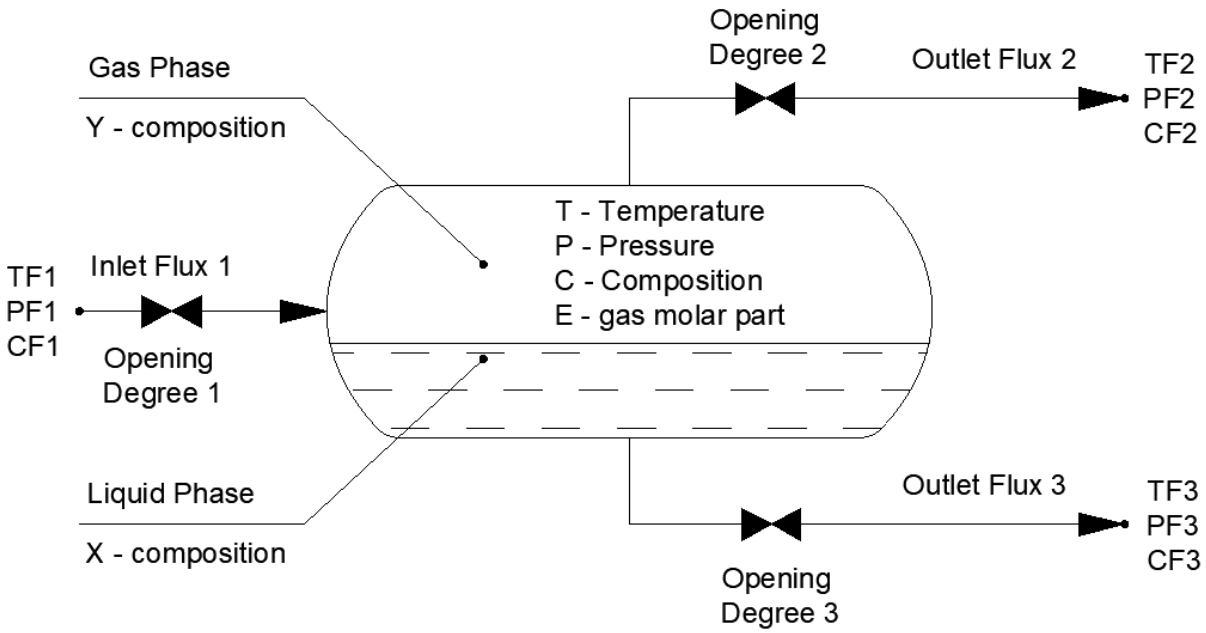



Рисунок 2.3 – Схема ємнісного апарата у концепції моделі «Ємність»

• до ємності підведені n потоків, які утворюють гідравлічну мережу [19] і можуть бути як вхідними так і вихідними і характеризуються векторами складів CF1-CFn [мольні частки], температурами TF1-TFn, зовнішнім тиском (напором) PF1-PFn, а також коефіцієнтами опору, діаметрами та ступенями відкриття регулюючих вентилів (рис. 2.3);

• кожен потік може бути перекритий у заданий експертом час у відповідності до встановлених систем безпеки.

Додатково відомі температурні залежності тиску насиченої пари та щільності рідкої фази для кожного компонента системи, молекулярні маси компонентів.

Запишемо рівняння Rachford-Rice для фазової рівноваги двофазної системи [61, 62]

$$\sum_{i=1}^{K} \frac{C_i(k_i-1)}{1+E\cdot(k_i-1)} = 0, \quad (2.1)$$

де $k_i$ – коефіцієнт розподілу; $E$ – мольна частка парової фази.

Параметр $k_i$ визначається законом Рауля-Дальтона (ідеальні суміші)

$$k_i = \frac{p_i^0(T)}{P}, \quad (2.2)$$

де $p_i^0(T)$ – тиск [Па] насиченої пари і-го компонента над чистим і-м компонентом при температурі Т [63, 64].

За допомогою рівняння (2.1) можна визначити мольну частку пари Е при відомих температурі, тиску і складі суміші, застосовуючи, наприклад, метод Ньютона-Рафсона або метод бісекції [65]. Рекомендується ввести допоміжні температури: $T_{boil}, T_{cond}$ – температури «початку кипіння і конденсації» відповідно [66]. $T_{boil}$ визначаємо з рівняння (2.1), прирівняючи Е до 0. $T_{cond}$ визначаємо з рівняння (2.1), прирівнявши Е до 1. Розглянемо випадки

$$T \le T_{boil} \rightarrow E = 0, \quad (2.3)$$

$$T_{boil} < T < T_{cond} \rightarrow E = root\left(\sum_{i=1}^{K} \frac{C_i(k_i-1)}{1+E\cdot(k_i-1)} = 0\right), \quad (2.4)$$

$$T_{cond} \le T \rightarrow E = 1. \quad (2.5)$$

Визначимо мольний об’єм суміші в ємності

$$V_M = \frac{ERT}{P} + (1-E)\sum_{i=1}^{K} \frac{X_i\cdot M_i}{\rho_i(T)}, \quad (2.6)$$

де R – газова стала 8,314 [Дж/(моль·К)]; $\rho_i(T)$ – густина [кг/м$^3$] і-го компонента при температурі Т [65]; $X_i$ – мольна частка і-го компонента у рідкій фазі; $M_i$ – молярна маса [кг/моль] і-го компонента суміші.

Визначимо мольні частки $X_i$ компонентів у рідкій фазі за допомогою рівняння

$$X_i = \frac{C_i}{1+E\cdot(k_i-1)}. \tag{2.7}$$

Визначимо мольні частки $Y_i$ компонентів у паровій фазі

$$Y_i = \frac{C_i k_i}{1+E\cdot(k_i-1)}. \tag{2.8}$$

Кількість суміші в ємності можна визначити як

$$N_\Sigma = \frac{V}{V_M}. \tag{2.9}$$

Об'єм рідкої фази визначимо за допомогою формули

$$V_l = \sum_{i=1}^{K} \frac{X_i(1-E)N_\Sigma\cdot M_i}{\rho_i(T)} = (1-E)N_\Sigma \sum_{i=1}^{K} \frac{X_i\cdot M_i}{\rho_i(T)}, \tag{2.10}$$

де $\rho_i(T)$ – густина [кг/м$^3$] і-го компонента при температурі Т [67]; $M_i$ – молекулярна маса [кг/моль] і-го компонента.

Об’єм рідкої фази у поєднанні з геометрією резервуара визначає рівень рідкої фази в апараті і гідродинаміку процесу надходження чи витоку потоків, спряжених з апаратом.

Густина рідкої фази визначається як [64]

$$\rho_l = \frac{\sum_{i=1}^{K}(X_i M_i)}{\sum_{i=1}^{K}\left(\frac{X_i M_i}{\rho_i(T)}\right)}. \quad (2.11)$$

Запишемо рівняння загального матеріального балансу у диференціальному вигляді

$$\frac{\mathrm{d}N_\Sigma}{\mathrm{d}\tau} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{l}} \mathrm{F}_{income,\mathrm{i}} - \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{m}} \mathrm{F}_{outcome,\mathrm{j}}, \quad (2.12)$$

де l – кількість потоків, що втікають в апарат; m – кількість потоків, що витікають з апарата; $N_\Sigma$ – кількість речовини в апараті, [моль]; $\mathrm{F}_{\mathrm{income,i}}$ – інтенсивність надходження i-го потоку через патрубок в апарат, [моль/с]; $\mathrm{F}_{\mathrm{outcome,j}}$ – інтенсивність надходження j-го потоку через патрубок з апарата, [моль/с] [19].

Запишемо рівняння матеріального балансу за компонентом

$$\frac{\mathrm{d}(N_\Sigma \cdot \mathrm{C_s})}{\mathrm{d}\tau} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{\mathrm{l}} \left(\mathrm{F}_{income,\mathrm{i}} \cdot \mathrm{C}_{\mathrm{F_inc_{i,s}}}\right) - \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{m}} \left(\mathrm{F}_{outcome,\mathrm{j}} \cdot \mathrm{C}_{\mathrm{F_out_{j,s}}}\right), \quad (2.13)$$

де $\mathrm{C_s}$ – мольна концентрація s-го компонента парорідинної суміші; $\mathrm{C}_{\mathrm{F_inc_{i,s}}}$ – мольна концентрація s-го компонента в i-му потоці, що входить в апарат; $\mathrm{C}_{\mathrm{F_}out_{\mathrm{j,s}}}$ – мольна концентрація s-го компонента в j-му потоці, що виходить з апарата.

Тепловий баланс описується рівнянням

$$\frac{\mathrm{dH}}{\mathrm{d}\tau} = \sum_{\mathrm{i}=1}^{l}\left(\mathrm{F}_{income,\mathrm{i}} \cdot h_{F_inc_i}\right) - \sum_{\mathrm{j}=1}^{\mathrm{m}}\left(\mathrm{F}_{outcome,\mathrm{j}} \cdot h_{F_out_i}\right), \quad (2.14)$$

де $h_{F_inc_i}$ – мольна ентальпія [Дж/моль] i-го потоку, що надходить у апарат; $h_{F_out_i}$ – мольна ентальпія [Дж/моль] j-го потоку, що виходить з апарата.

Систему рівнянь (2.12 – 2.14) передбачається вирішувати ітераційно. Рішення в кінцевих різницях має загальний вигляд

$$N_{\Sigma}{}^{\tau+\Delta\tau} = \mathrm{f1}(N_{\Sigma}{}^{\tau}, \mathrm{F}_{income}, \mathrm{F}_{outcome}, \Delta\tau), \tag{2.15}$$

$$\mathrm{C}_{\mathrm{j}}^{\tau+\Delta\tau} = \mathrm{f2}\left(\mathrm{C}_{\mathrm{j}}^{\tau}, N_{\Sigma}, \mathrm{F}_{income}, \mathrm{C}_{\mathrm{F_inc}}, \mathrm{F}_{outcome}, \mathrm{C}_{\mathrm{F_out}}, \Delta\tau\right), \tag{2.16}$$

$$\mathrm{H}^{\tau+\Delta\tau} = \mathrm{f3}\left(\mathrm{H}^{\tau}, \mathrm{F}_{income}, h_{F_inc}, \mathrm{F}_{outcome}, h_{F_out}, \Delta\tau\right). \tag{2.17}$$

Рекомендується застосовувати метод Рунге-Кутти 4-го порядку з автопідбором кроку [68]. У разі уповільнення обчислень можна застосовувати методи Ейлера (явний/неявний) [65].

На підставі даних, отриманих з (2.15), визначимо мольний обсяг суміші для наступного моменту часу

$$V_M = \frac{V}{N_{\Sigma}{}^{\tau+\Delta\tau}}. \tag{2.18}$$

На підставі даних, отриманих з (2.15) і (2.17), можна визначити мольну ентальпію суміші в наступний момент часу

$$h_{\Sigma} = \frac{\mathrm{H}^{\tau+\Delta\tau}}{N_{\Sigma}{}^{\tau+\Delta\tau}}. \tag{2.19}$$

З іншого боку, мольна ентальпія суміші розраховується так:

$$h_{\Sigma} = (1-E)\sum_{i=1}^{K}\left(h_{l_i}(T)\cdot X_i\right) + E\sum_{i=1}^{K}\left(h_{g_i}(T)\cdot Y_i\right). \tag{2.20}$$

Рівняння (2.5) і (2.20) утворюють систему рівнянь із двома невідомими P і $T$ (врахуємо, що E це функція температури, тиску і складу; $X_i$, $Y_i$ це функції мольної частки пари, температури, тиску і складу)

$$\begin{cases} V_M = \mathrm{E}\frac{RT}{P} + (1-E)\sum_{i=1}^{K}\frac{X_i \cdot M_i}{\rho_i(T)} \\ h_\Sigma = (1-E)\sum_{i=1}^{K}\left(h_{l_i}(T)\cdot X_i\right) + E\sum_{i=1}^{K}\left(h_{g_i}(T)\cdot Y_i\right) \end{cases}. \quad (2.21)$$

Визначивши значення $P$ і $T$ для наступного моменту часу, визначаємо інші необхідні параметри за допомогою формул (2.3 – 2.5), (2.7 – 2.8), (2.10), прийнявши при цьому

$$N_\Sigma = {N_\Sigma}^{\tau+\Delta\tau}, \quad (2.22)$$

$$C_j = \mathrm{C_j}^{\tau+\Delta\tau}. \quad (2.23)$$

Вихідними даними моделі «Ємність» є такі динамічні параметри, обчислені для кожного моменту часу моделювання:

- $T$ – температура [K] суміші у ємності;
- $p_\Sigma$ – тиск [Па] парової фази суміші в ємності;
- $X$, $Y$ – вектори рівноважних складів (у мольних частках) рідкої та парової фаз відповідно;
- $Y_{LL}$ – рівень [м] рідкої фази в ємності.

На підставі вищевикладеного математичного опису моделі було розроблено алгоритм розрахунку чисельних параметрів високоенергетичних процесів у ємнісному обладнанні хімічних підприємств.

Для апарата, що розглядається, незалежно від його конфігурації відомо розрахунковий тиск, який визначається із запасом. Для будь-якої судини незалежно від її геометрії задається тиск гідравлічного випробування, як правило, рівний 1,25 розрахункового з деякими поправками та винятками. Тиск і температура (граничний стан), при якому починається деформація, як правило, суттєво вищі.

У разі відсутності паспортних даних про тиск випробування апарата оцінку досягнення граничного стану для горизонтальної циліндричної ємності (рис. 2.3) можна здійснити за формулою такого типу [69]:

$$P_{burst} = 2\sigma_u \cdot \frac{W}{D_t}, \quad (2.24)$$

де $W$ – товщина стінки ємності; $D_t$ – діаметр ємності (циліндрична ємність); $\sigma_u$ – межа міцності при температурі стінки апарата.

## 2.3 Розрахунковий експеримент

Як об'єкт дослідження було обрано ємність зрошення Е-5 стабілізаційної колони К-3 установки ізомеризації. Верхній продукт стабілізаційної колони К-3 охолоджується та конденсується в повітряному холодильнику-конденсаторі стабілізаційної колони ХВ-6/1-3, у водяному холодильнику-конденсаторі стабілізаційної колони Х-6 і надходить у ємність зрошення стабілізаційної колони Е-5 (рис. 2.4).

У ємності зрошення стабілізаційної колони Е-5 відбувається відокремлення вуглеводневого газу від рідкої фази.

Вуглеводневий газ прямує до паливної мережі.

Зріджений газ з ємності Е-5 насосом Н-8А/В подається як зрошення в стабілізаційну колону К-3.

Склад суміші, що надходить із колони К-3 в ємність зрошення Е-5 такий:

- водень – 20.0 % мольні частки;
- етан – 10.0 % мольні частки;
- пропан – 30.0 % мольні частки;
- н-бутан – 40.0 % мольні частки.

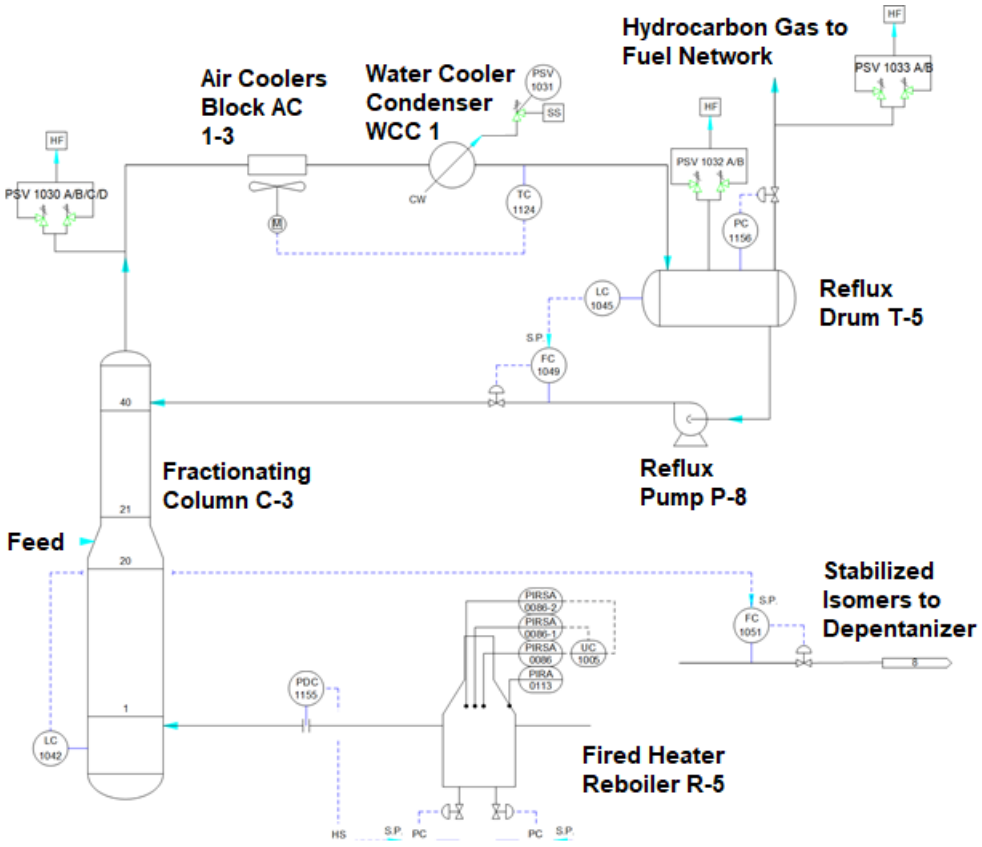



Рисунок 2.4 – Технологічна схема процесу стабілізації установки ізомеризації, ємність зрошення Е-5 стабілізаційної колони К-3 установки ізомеризації [70]

Норми технічного режиму ємності зрошення Е-5 наведено у табл. 2.1.

Таблиця 2.1 – Норми технічного режиму ємності зрошення Е-5

| № п/п | Найменування стадії процесу, апарати, показники режиму | Номер позиції приладу на схемі | Одиниця виміру | Допустимі межі технологічних параметрів | Необхідний клас точності вимірювальних приладів |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | Трубопровід 100 Р19-1002 Витрата вуглеводневого газу з Е-5 у паливну мережу | FQIR 1048 | $м^3$/год при с. у. | 1180 ÷ 3500 | 1.0 % |
| 2 | Ємність Е-5 Рівень зрідженого газу | LIRCA 1045 | % діап. | 25 ÷ 75 | 1.0 % |
| 3 | Трубопровід 100 Р19-1002 Тиск вуглеводневого газу з Е-5 у паливну мережу | PI 1210 | МПа (надл.) | Не більше 0.637 | 0.5 % |

Продовження таблиці 2.1

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 4 | Ємність Е-5<br>Тиск у ємності | PIRCA 1156 | МПа (надл.) | 1.411 ÷ 1.450 | 0.5 % |
| 5 | Трубопровід 100 Р19-1002<br>Температура вуглеводневого газу з Е-5 у паливну мережу | ТІ 1249 | °С | 30 ÷ 40 | 1.0 % |
| 6 | Трубопровід 250 Р17-1003<br>Температура зрідженого газу Е-5 | TIRCA 1124 | °С | 40 ÷ 45 | 1.0 % |

Технічні параметри ємності зрошення Е-5 наведено у табл. 2.2.

Таблиця 2.2 – Технічні параметри ємності зрошення Е-5

| Матеріал | Розрахункова температура, °С | Розрахункове значення тиску, МПа | Діаметр, м | Довжина, м |
|---|---|---|---|---|
| 16ГС | 120 | 1.9 | 2.4 | 7.2 |

Було проведено процедуру HAZOP методом мозкового штурму [24]. З метою спрощення розглянемо лише один рядок таблиці HAZOP, що призводить до розгерметизації (табл. 2.3).

Однак рядок HAZOP (табл. 2.3), не містить відомостей, необхідних та достатніх для моделювання наслідків розвитку аварії. Відомо лише, що тиск в апараті перевищив 1,6 МПа, але невідомо, за якої температури це було досягнуто і яким методом було отримано таке значення тиску. З метою усунення невизначеності щодо параметрів граничного стану в ємності зрошення, був проведений обчислювальний експеримент, згідно з розробленою моделлю ємності.

Таблиця 2.3 – HAZOP ємності зрошення Е-5 [24]

| Елемент<br>Характе-ристика – керуюче слово | Причини | Відхи-лення | Наслідки | Засоби захис-ту |
|---|---|---|---|---|
| Тиск – БІЛЬШЕ | Ріст тиску у Е-5 через відмову системи охолодження у ХВ-6/1-3, Х-6 | Тиск у Е-5 більше 1,6 МПа | *Безпека*<br>Руйнування Е-5, викид, вибух, пожежа<br>*Екологія*<br>Забруднення навколишнього середовище (С)<br>*Експлуатація*<br>Перерва у виробництві (В) | -ППК PSV 1032A B;<br>-СУ PIRC 1156; |

## 2.4 Результати і обговорення

Проведено моделювання поведінки параметрів стану всередині ємності Е-5 за нестандартних умов ведення процесу, а саме відмова блоку повітряних холодильників та водяного холодильника-конденсатора. Згідно з регламентом, температура верху колони становить 368 К. З метою недопущення заниження показників ризику, приймемо значення температури верху колони, що дорівнює 400 К. Отже, у разі відмови системи охолодження, в ємність надійде суміш із температурою 400 К.

Вихідні параметри стану ємності наведено у табл. 2.4.

Таблиця 2.4 – Параметри стану в ємності у вихідний момент часу

| № п/п | Назва параметра | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| 1 | Тиск | 1511000 | Па |
| 2 | Температура | 308 | К |
| 3 | Композиційний склад суміші в апараті, загальний | | |
| 3.1 | Водень | 0.2 | Мольні частки |
| 3.2 | Етан | 0.1 | |
| 3.3 | Пропан | 0.3 | |
| 3.4 | Бутан | 0.4 | |
| 4 | Рівноважна частка пари | 0.462 | Мольні частки |
| 5 | Рівноважний склад рідкої фази | | |
| 5.1 | Водень | 3.867E-10 | Мольні частки |
| 5.2 | Етан | 0.048 | |
| 5.3 | Пропан | 0.327 | |
| 5.4 | Бутан | 0.626 | |
| 6 | Рівноважний склад газової фази | | |
| 6.1 | Водень | 0.433 | Мольні частки |
| 6.2 | Етан | 0.161 | |
| 6.3 | Пропан | 0.269 | |
| 6.4 | Бутан | 0.137 | |

Параметри вхідних та вихідних потоків наведені у табл. 2.5.

Таблиця 2.5 – Вхідні та вихідні потоки

| № п\п | Назва параметра | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| 1 | Вхідний потік 1 з верху колони | | |
| 1.1 | Тиск вхідний | 1811000 | Па |
| 1.2 | Температура потоку | 300 | К |
| 1.3 | Агрегатний стан | Газ | - |
| 1.4 | Діаметр трубопроводу | 250 | мм |
| 1.5 | Ступінь відкриття вентиля | 0.1 | - |
| 2 | Вихідний потік 2 газової фази ємності Е-5 у паливну мережу | | |
| 2.1 | Тиск вихідний | 737000 | Па |
| 2.2 | Агрегатний стан | Газ | - |
| 2.3 | Діаметр трубопроводу | 100 | мм |
| 2.4 | Ступінь відкриття вентиля | 0.2 | - |
| 3 | Вихідний потік 3 рідкої фази ємності Е-5 на зрошення колони К-3 | | |
| 3.1 | Тиск вихідний | 811000 | Па |
| 3.2 | Агрегатний стан | Рідина | - |

Продовження таблиці 2.5

| | | | |
|---|---|---|---|
| 3.3 | Діаметр трубопроводу | 150 | мм |
| 3.4 | Ступінь відкриття вентиля | 0.0065 | - |

Час моделювання поведінки ємності 2000 с., Крок 1 с., 1 вхідний потік, 2 вихідних. У момент часу 1000 с моделюється відмова апарата повітряного охолодження та водяного теплообмінника, що призводить до зростання температури у вхідному потоці з 300 К до 400 К. Результати розрахунків наведені на графіках нижче.

### 2.4.1 Етап виходу на стаціонар

Помітне зростання тиску в апараті на 2 атмосфери за час приблизно 200 с в результаті сполучення з вхідним потоком, що перебуває під тиском більше 18 атмосфер, що значно більше за вихідний тиск в апараті (порядку 15 атмосфер) (рис. 2.5).

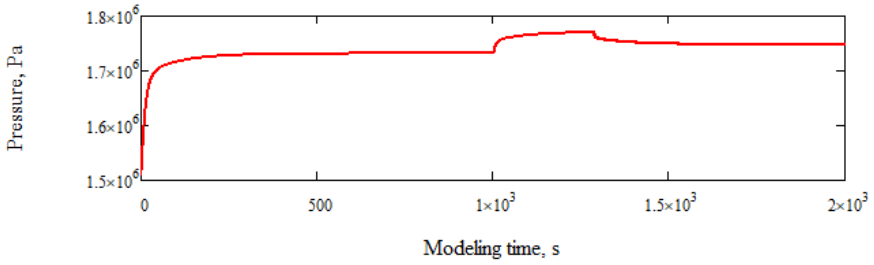



Рисунок 2.5 – Залежність тиску в апараті від часу

Оскільки процес адіабатний, зростання тиску супроводжується зростанням температури на 22 К. У проміжку від 200 до 1000 з модельного часу спостерігається стаціонування процесу, що протікає в апараті: тиск, температура, частка пари і кількість суміші в апараті залишаються незмінними у часі (рис. 2.6 – 2.8).

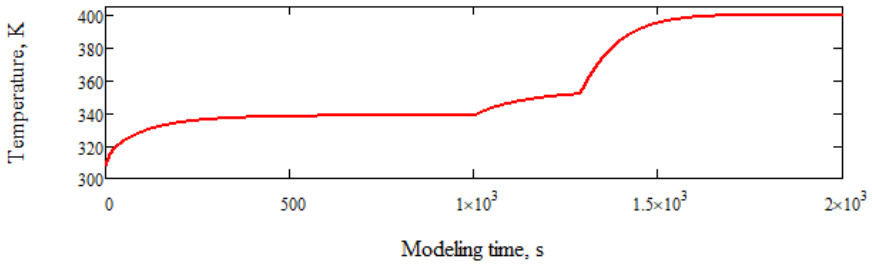



Рисунок 2.6 – Залежність температури в апараті від часу

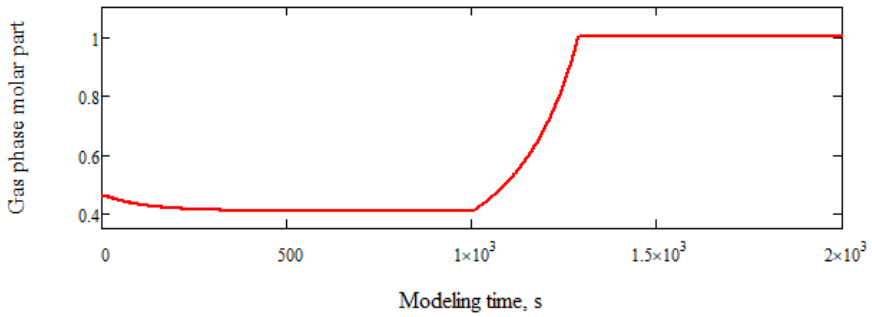



Рисунок 2.7 – Залежність мольної частки пари в апараті від часу

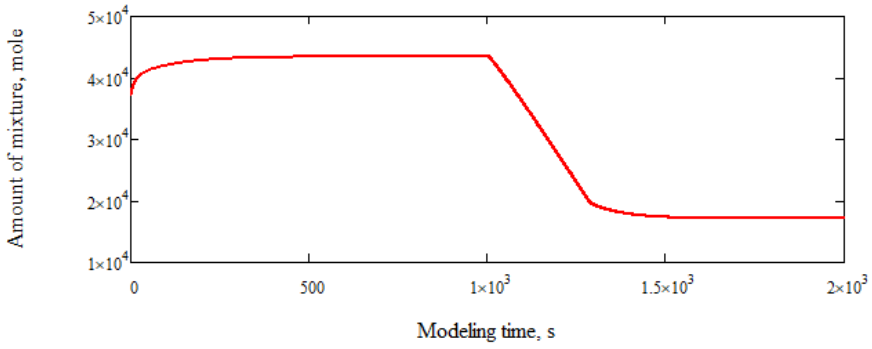



Рисунок 2.8 – Залежність кількості речовини суміші в апараті від часу

Аналогічно у тому ж часовому діапазоні залишаються незмінними інтенсивності надходження (рис. 2.9).

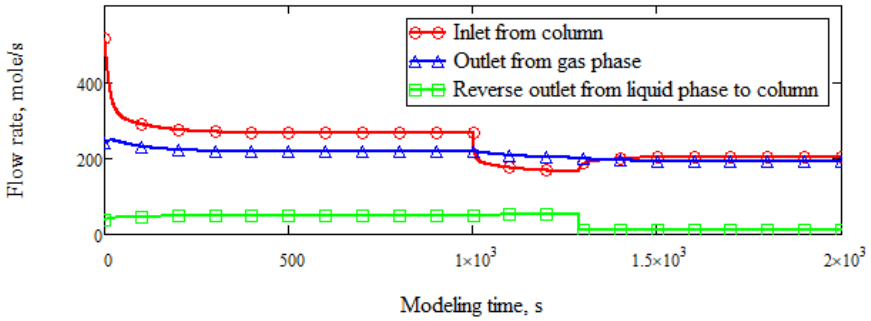



Рисунок 2.9 – Графіки залежностей витрат вхідного та вихідного потоків від часу

### 2.4.2 Моделювання відмови системи охолодження

У момент часу 1000 с температура вхідного потоку від верху колони стрибкоподібно підвищилася з 300 До 400 К (рис. 2.6). Ця подія супроводжується збільшенням температури, тиску до значень 352 К і 1781000 Па відповідно (рис. 2.5 – 2.6), а також стрімкого зростання частки пари до 1 (рис. 2.7) в результаті прогріву рідкої фази та її більш інтенсивного випаровування на момент часу 1319 с. Також помітно зменшення кількості речовини в апараті (рис. 2.8), що також узгоджується з фізикою процесу: збільшення температури потоку призводить до інтенсифікації випаровування, а зростання тиску у свою чергу збільшує витрати вихідних потоків та зменшує інтенсивність надходження вхідного потоку (рис. 2.9). Ефект зростання температури вхідного потоку також відбився на мольному об’ємі та мольній ентальпії суміші (рис. 2.10 – 2.11).

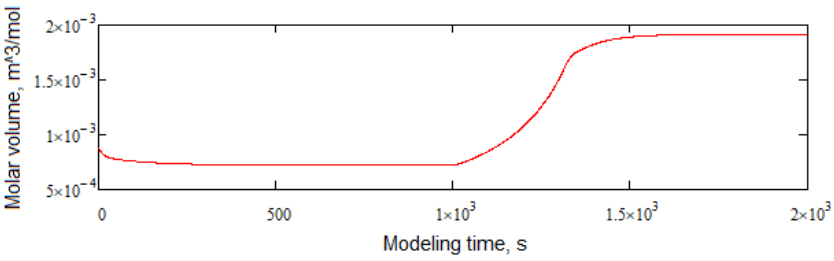



Рисунок 2.10 – Залежність мольного об’єму суміші в апараті від часу

Збільшення мольного об'єму починаючи з моменту часу 1000 з узгоджується зі зменшенням кількості суміші в замкнутому обсязі апарата.

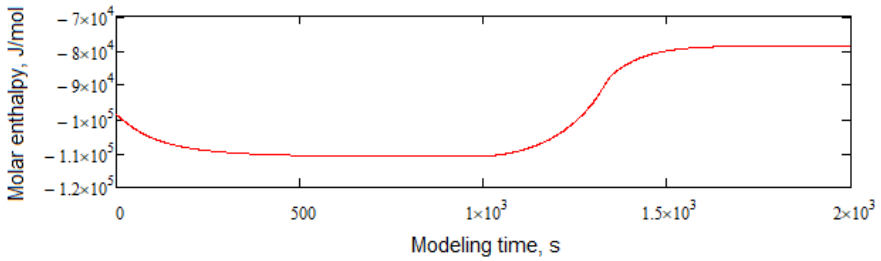



Рисунок 2.11 – Залежність мольної ентальпії суміші в апараті від часу

Зростання мольної ентальпії узгоджується зі збільшенням температури суміші, а також накопиченням парової фази, ентальпія якої більша за ентальпію рідкої фази за рахунок явища переходу з рідини в газ в результаті випаровування.

Як тільки частка пари в апараті склала 1, почалося незначне падіння тиску з 1781000 Па до 1702000 Па, а також тривало зростання температури до 404 До моменту часу 1749 с. Незначне падіння тиску можна пояснити тим, що зникла рідка фаза, яка за рахунок постійного випаровування раніше була здатна підтримувати додатковий тиск рівноважної пари. Як тільки в ємності залишився виключно газ, відбулося скидання тиску до моменту виходу на стаціонар параметрів стану та вирівнювання балансу вхідного та вихідних потоків.

Зміна повного композиційного складу суміші іноді відображено на рис. 2.12.

У момент зростання температури вхідного потоку за рахунок відмови системи охолодження помітно суттєве зменшення висококиплячого компонента – бутану. Цей ефект відбувся, оскільки значно збільшився тиск, що призвело до збільшення інтенсивності витікання рідкого потоку зрошення, склад якого в більшій частині був визначений висококиплячим компонентом – бутаном.

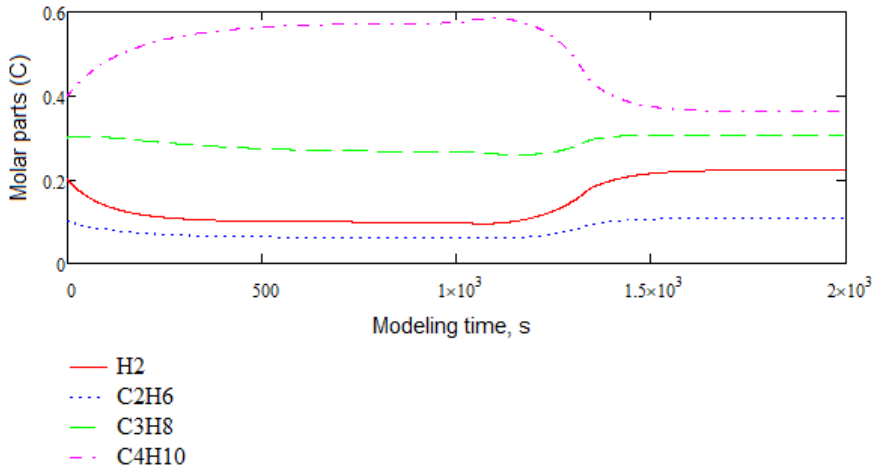



Рисунок 2.12 – Графік залежностей мольних часток компонентів від часу у всій суміші, що знаходиться в апараті

Графіки залежностей складів рідкої та газової фаз від часу зображені на рис. 2.13 і рис. 2.14 та відображають картину фазової рівноваги в кожний момент модельного часу.

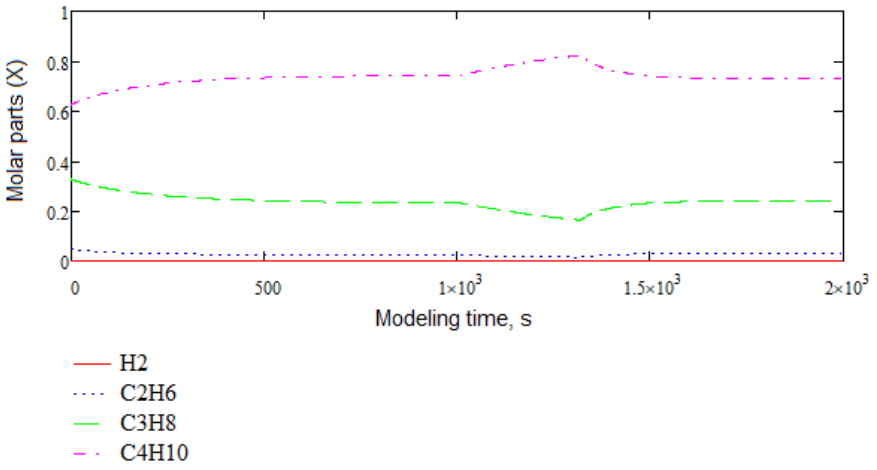



Рисунок 2.13 – Графік залежностей мольних часток компонентів від часу в рідкій фазі в апараті

Помітно вкрай малий вміст висококиплячих компонентів водню та етану в рідкій фазі та помітний їх вміст у газовій фазі.

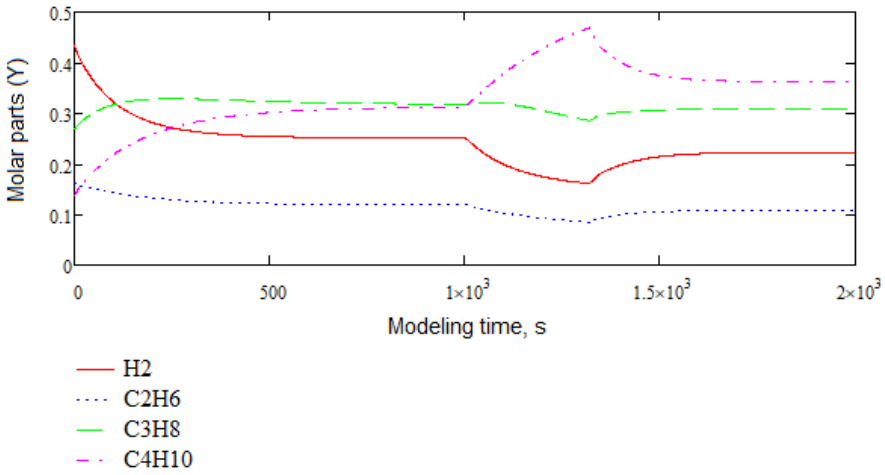



Рисунок 2.14 – Графік залежностей мольних часток компонентів від часу в газовій фазі в апараті

Протилежну картину можна спостерігати для висококиплячих компонентів: пропан і бутан в основному зосереджені в рідкій фазі і представлені в паровій фазі. Перелічені ефекти узгоджуються із застосованим у моделі об'єднаним законом Рауля-Дальтона.

Максимальний тиск, що спостерігається, становив 1781000 Па при температурі 352 К і частки пари 1 (інші параметри стану наведені у табл. 2.6.

Таблиця 2.6 – Інші параметри стану, що відповідають максимальному тиску, що спостерігається в апараті

| № п\п | Найменування параметра | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| 1 | Момент часу | 1319 | с |
| 2 | Склад суміші в апараті | | |
| 2.1 | Водень | 0.161 | мольні частки |
| 2.2 | Етан | 0.085 | |
| 2.3 | Пропан | 0.285 | |
| 2.4 | Бутан | 0.469 | |
| 3 | Кількість речовини | 19830 | моль |

Отриманий максимальний тиск менший за тиск випробування, який становить 1.9 МПа, тому в даному випадку розгерметизація вкрай малоймовірна, оскільки необхідно додатково врахувати ймовірність наявності дефектів матеріалу

ємності, що знижують міцність корпусу до тиску 1781000 Па, на додаток до ймовірності відмови блоку охолодження. Рядок HAZOP (табл. 2.3) набуде вигляду, представленого у табл. 2.7.

Таблиця 2.7 – Рядок HAZOP ємності зрошення Е-5, доповнений даними, отриманими в результаті моделювання зміни параметрів стану елемента технологічної схеми в результаті зовнішнього збурення

| Елемент<br>Характерис-тика – керуюче слово | Причини | Відхилення | Наслідок | Заходи захисту |
|---|---|---|---|---|
| Тиск – БІЛЬШЕ | Зростання тиску в Е-5 через відмову системи охолодження в ХВ-6/1-3, Х-6 та подальшого підвищення температури вхідного потоку до 400 К | Тиск в Е-5 1,781 МПа, температура 352 К, склад:<br>H2 – 0.161<br>C2H6 – 0.085<br>C3H8 – 0.285<br>C4H10 – 0.469<br>кількість речовини:<br>19830 моль | *Безпека*<br>-<br>*Екологія*<br>-<br>*Експлуатація*<br>Можливе відхилення якості продукції від норми | -ППК PSV 1032AB;<br>-СУ PIRC 1156; |

Для забезпечення можливості моделювання наслідків аварійної розгерметизації, параметри стану, отримані у цій роботі, є необхідними та достатніми. Однак, враховуючи варіативність (множинність) можливих видів відхилень технологічних параметрів процесу, у джерела небезпеки (ємності) може спостерігатися безліч станів аварійної розгерметизації, які призводять до різних наслідків (табл. 2.7).

Для забезпечення можливості моделювання наслідків аварійної розгерметизації, параметри стану, отримані у цій роботі, є необхідними та достатніми. Однак, враховуючи варіативність (множинність) можливих видів відхилень технологічних параметрів процесу, у джерела небезпеки (ємності) може спостерігатися безліч станів аварійної розгерметизації, які призводять до різних наслідків.

Якщо врахувати можливість розгерметизації ємності при різних технологічних параметрах процесу, отриманих в результаті комп'ютерного моделювання безлічі типів відхилень, можна отримати точніший результат оцінки наслідків у контексті системного підходу до кількісного аналізу та оцінки ризику, а також виявити більшу кількість загроз з високим ступенем точності.

## 2.5 Висновки до розділу 2

Досліджено задачу інтеграції моделювання технологічного процесу хімічного виробництва та процедури HAZOP. Виявлено необхідність не лише моделювання частини відхилень параметрів процесу з метою визначення можливих наслідків протягом HAZOP-сесії, а й отримання необхідного та достатнього переліку значень параметрів стану апарата в момент розгерметизації для забезпечення подальшого кількісного визначення наслідків реалізації аварій.

На прикладі діючого виробництва було піддано аналізу рядок таблиці HAZOP для ємності зрошення стабілізаційної колони. Виявлено недостатність інформації рядка HAZOP щодо визначення можливих наслідків, а також низький ступінь довіри до даних щодо відхилення технологічних параметрів процесу.

Щоб усунути недостатність інформації процедури HAZOP для апарата, була розроблена динамічна модель ємності із застосуванням середовища Mathcad і виконаний обчислювальний експеримент, що полягав в симуляції збурення у вигляді стрибкоподібного зростання температури вхідного потоку в результаті

відмови блоку охолодження. Результати експерименту показали, що тиск зріс недостатньо для того, щоб сталося руйнування ємності, що не узгоджується з висновком експерта під час HAZOP-сесії та свідчить про необхідність застосування моделювання для підвищення достовірності результатів аналізу.

Поєднання процедури HAZOP та моделювання дозволяє перейти до детермінованого підходу під час визначення відхилень, виявити непередбачені експертом відхилення, а також значно зменшує час, необхідний для виявлення загрози.

В результаті моделювання отримано перелік необхідного і достатнього набору даних для моделювання наслідків розгерметизації, що включає максимально можливий тиск, відповідні значення температури, частки пари, кількості і складу суміші.

Ще однією перевагою розглянутого підходу є можливість аналізу динаміки зміни параметрів стану в апараті, що потенційно дозволяє оцінити ефективність систем захисту, передбачених проєктом.

Варіативність (множинність) типів можливих відхилень параметрів технологічного процесу обумовлює безліч можливих граничних станів ємнісного обладнання, що призводять до розгерметизації. Отже, виникає необхідність урахування безлічі аварійних станів апарата, що супроводжуються різними масштабами наслідків, під час виконання кількісної оцінки ризику. Виникла невизначеність масштабу наслідків у разі розгерметизації за різних параметрів граничного стану джерела небезпеки, що вимагає специфічного варіативного підходу в контексті технології аналізу та оцінки ризику.

Матеріали розділу опубліковані у роботах автора [20, 21].

# РОЗДІЛ 3
# МОДЕЛІ І МЕТОДИ ОБЧИСЛЕННЯ МАСШТАБУ ВИТОКІВ НЕБЕЗПЕЧНИХ РЕЧОВИН ПРИ АВАРІЙНІЙ РОЗГЕРМЕТИЗАЦІЇ ХІМІЧНОГО ОБЛАДНАННЯ

Потрапляння небезпечної речовини у довкілля здійснюється у вигляді розгерметизації. Розгерметизація буває повною чи частковою. При частковій розгерметизації корпусу резервуара (рис. 3.1) аварійний витік відбувається через отвір на корпусі небезпечного об'єкта. При цьому через отвір може витікати як рідка, так і газова фази.

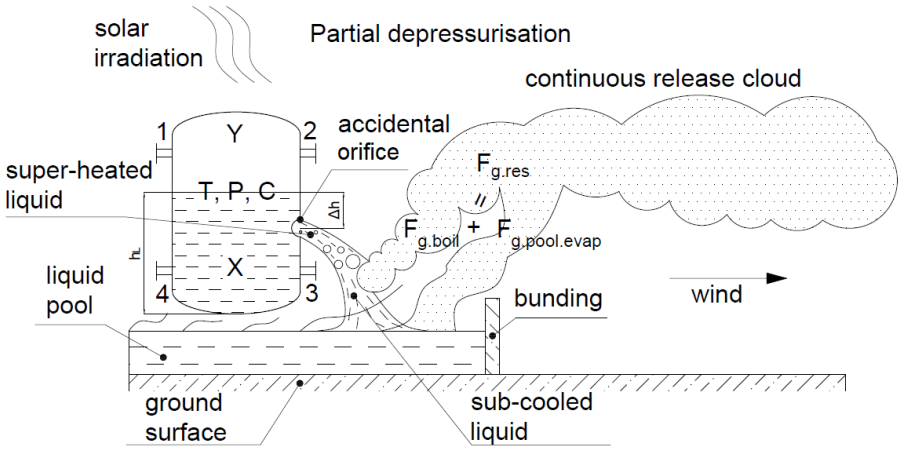



Рисунок 3.1 – Схема розвитку сценарію часткової розгерметизації з викидом перегрітої рідини

Апарат характеризується параметрами стану хімічної системи: температурою (T), тиском (P), загальним складом двофазної суміші (C), складі рідкої (X) і газової (Y) фаз і є змінними у часі. Потоки 1 – 4 (зображені цифрами, рис. 3.1) разом з аварійним отвором визначають матеріальний і енергетичний баланси системи в аварійному апараті для кожного моменту часу. У свою чергу параметри стану T, P, X, Y, визначають положення рівня рідкої фази $h_L$ відносно днища корпусу апарата і гідродинаміку усіх потоків, пов’язаних з аварійним

апаратом. Так, для даного прикладу, тиск на рівні отвору, визначатиметься тиском рівноважної парової фази P і тиском стовпа рідини висотою Δh і густиною, що відповідає температурі T і складу X рідкої фази в апараті (рис. 3.1).

При цьому, у разі викиду через отвір перегрітої рідкої фази (super-heated liquid), формується два потоки:

- газовий потік, який характеризується набором динамічних параметрів $F_{g.boil}$ і отриманий у результаті кипіння перегрітого рідкого потоку;
- потік охолодженої рідини (sub-cooled liquid).

Потік залишкової, охолодженої рідини формує аварійний вилив, який, у свою чергу може випаровуватися з інтенсивністю $F_{g.pool.evap}$ у двох режимах: кипіння або поверхневе випаровування за рахунок дифузійного переносу. На процес випаровування аварійного виливу впливають такі зовнішні фактори, як інсоляція, швидкість вітру, температура навколишнього середовища, температура підстилаючої поверхні та інші.

Для моменту викиду через отвір перегрітої рідини, який зафіксовано на (рис. 3.1), можна спостерігати два одночасно діючих джерел емісії газоподібних речовин: потоку газу $F_{g.boil}$ утвореного у результаті кипіння потоку перегрітої рідини і потоку $F_{g.pool.evap}$, утвореного у результаті випаровування виливу. Сумаційний ефект цих двох джерел важливо враховувати для забезпечення точності прогнозування поширення небезпечних речовин у навколишньому середовищі (рис. 3.1).

Результуючий потік газової фази $F_{g.res}$, що утворений у результаті додавання за певними правилами двох потоків $F_{g.boil}$ і $F_{g.pool.evap}$, визначає процес розсіювання хмари тривалого викиду (Continuous release cloud).

При повній розгерметизації (повному руйнуванні корпусу, розриві оболонки) відбувається майже миттєвий викид деякої кількості речовини, яка містилася всередині корпусу небезпечного об'єкта і подальше надходження потоків газових або рідких фаз у навколишнє середовище через фланці, які раніше підводили або відводили потоки, спряжені з небезпечним об'єктом (рис. 3.2).

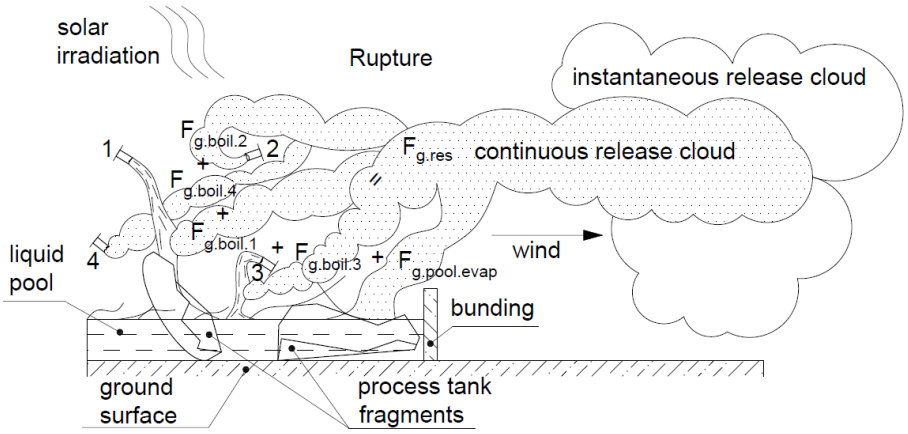



Рисунок 3.2 – Схема розвитку сценарію розриву оболонки апарата

У момент часу t+Δt (t->0) розриву оболонки апарата, відбувається квазіміттєва зміна параметра тиску в апараті P до атмосферного значення. Відповідно, у разу наявності перегрітої рідкої фази в апараті, у момент повної розгерметизації практично миттєво відбувається значне пароутворення з утворенням первісного виливу і первісної хмари. Первісна хмара розсіюється відповідно до моделей розсіювання миттєвого викиду (instantaneous lerease cloud, рис. 3.2). Первісний вилив враховується під час подальшого формування аварійного виливу за рахунок надходження рідини з обривів трубопроводів.

Відповідно до попереднього випадку часткової розгерметизації, може утворитися аварійний вилив, що випаровується, а для зображеного випадку, кількість джерел емісії газоподібних речовин у атмосферу сягає 5 (рис. 3.2):

- газові потоки з обривів труб 2, 4;
- газові потоки, утворені внаслідок кипіння потоків перегрітої рідини 1, 3;
- газовий потік, утворений у результаті випаровування виливу.

Результуючий потік утворений у результаті сумаційного ефекту 5 джерел емісії і визначає процес розсіювання хмари тривалого викиду. Постає актуальна задача врахування сумаційного ефекту одночасного існування хмар двох типів викиду: миттєвого і тривалого (рис. 3.2), що виходить за рамки даного дисертаційного дослідження.

За моделювання обох сценаріїв відповідає група модулів ADM (Accidental Depressurisation Modules), до якої входять:

- APDM (Accidental Partial Depressurisation Modules) – група модулів часткової аварійної розгерметизації, що відповідає за моделювання процесів викиду через аварійний отвір, як зображено на рис. 3.1;
- ARDM (Accidental Rupture Depressurisation Modules) – група модулів аварійної розгерметизації у результаті розриву оболонки апарата, як зображено на рис. 3.2.

## 3.1 Структура модуля розрахунку часткової розгерметизації хімічного обладнання

Розглянемо структуру підмодуля APDM модуля ADM для тривалого витоку через аварійний отвір (рис. 3.3).

Додаткові пояснення щодо діаграми схеми даних (рис. 3.3) наведено нижче:

- G – геометрія ємності <Fig, L, R>, де Fig – геометрична фігура подібності, L – довжина, R – радіус (параметри демонструються на прикладі горизонтального циліндра, у загальному випадку набір параметрів повинен бути достатнім для визначення об'єму апарата та рівня рідкої фази в апараті);
- $P_{State0}$ – вихідні параметри <T, P, C> небезпечного стану в апараті безпосередньо перед розгерметизацією, де T – температура, P – тиск, C – вектор складу пароріднинної суміші в апараті;
- $P_{hole}$ – параметри отвору розгерметизації <$H_{hole}$, $D_{hole}$>, де $H_{hole}$ – висота розташування аварійного отвору щодо найнижчої точки апарата, $D_{hole}$ – діаметр аварійного отвору;

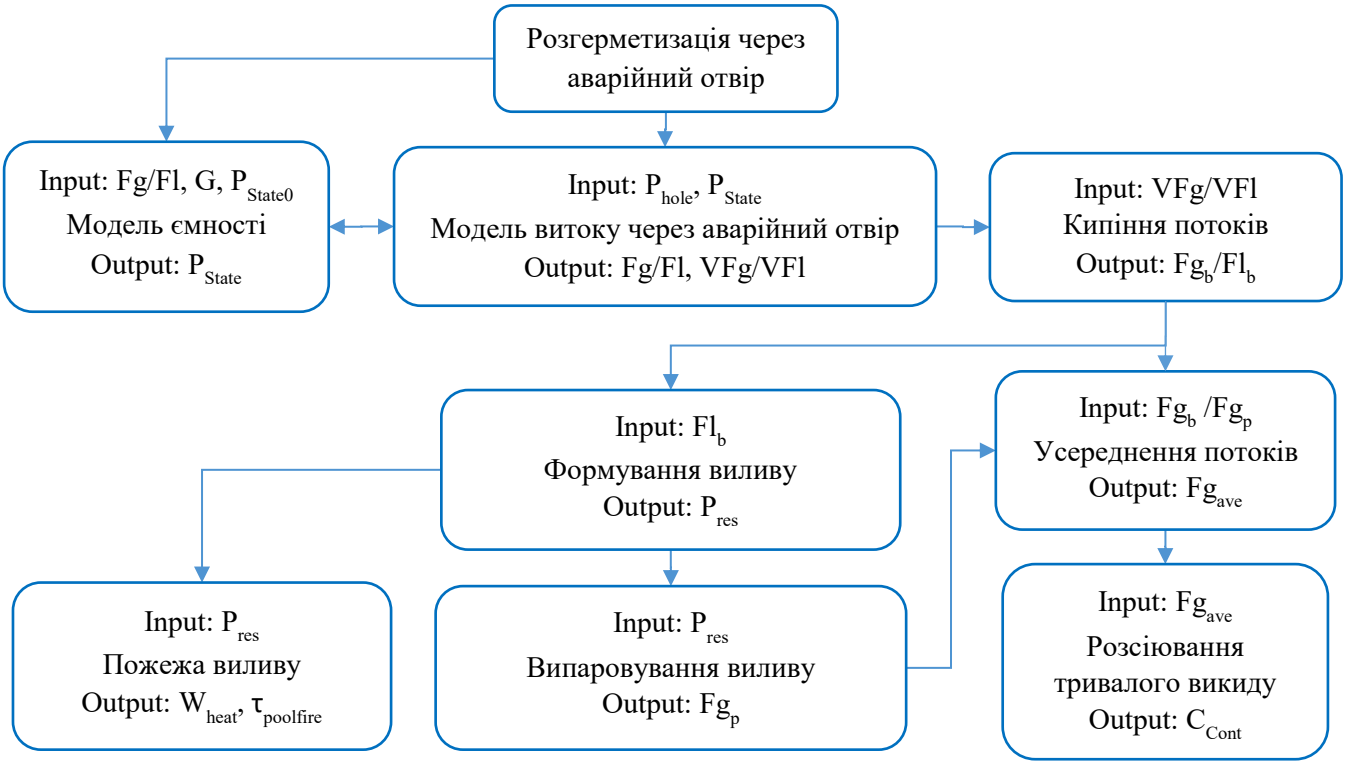



Рисунок 3.3 – Схема даних APDM (режим викиду небезпечної речовини через аварійний отвір)

- Fg – параметри газового потоку викиду через аварійний отвір $<F_\tau, T_\tau, Y_\tau>$ які відповідають моменту часу τ, де $F_\tau$ – витрата потоку, $T_\tau$ – температура потоку, $Y_\tau$ – хімічний склад потоку;
- Fl – параметри рідкого потоку викиду через аварійний отвір $<F_\tau, T_\tau, X_\tau>$ які відповідають моменту часу τ, де $F_\tau$ – витрата потоку, $T_\tau$ – температура потоку, $X_\tau$ – хімічний склад потоку;
- $P_{State}$ – параметри стану $<T_\tau, P_\tau, H_{liq,\tau}, X_\tau, Y_\tau>$ хімічної системи в аварійному апараті, що відповідають моменту часу τ, де $T_\tau$ – температура, $P_\tau$ – тиск, $H_{liq,\tau}$ – висота рівня рідкої фази в апараті щодо нижньої точки апарата, $X_\tau$ – склад рівноважної рідкої фази, $Y_\tau$ – склад рівноважної парової фази;
- VFg – масив параметрів $<VF_\tau, VT_\tau, VY_\tau>$ потоку газової фази викиду через отвір для всіх моментів часу моделювання;
- VFl – масив параметрів $<VF_\tau, VT_\tau, VX_\tau>$ потоку рідкої фази викиду через отвір для всіх моментів часу моделювання;

- $Fg_b$ – масив параметрів потоку газу <$VF_{b,\tau}$, $VT_{b,\tau}$, $VY_{b,\tau}$> після кипіння перегрітої рідини для всіх моментів часу моделювання;
- $Fl_b$ – масив параметрів потоку рідини <$VF_{b,\tau}$, $VT_{b,\tau}$, $VX_{b,\tau}$> після кипіння перегрітої рідини для всіх моментів часу моделювання;
- $P_{res}$ – параметри <$N_{spill_0}$, $x_{spill_0}$, $T_{spill_0}$, $S_{pool}$> виливу рідини, що утворився в результаті викиду з аварійного отвору, де $N_{spill_0}$ – початкова кількість виливу; $x_{spill_0}$ – початковий склад виливу рідкої фази; $T_{spill_0}$ – початкова температура виливу рідкої фази; $S_{pool}$ – площа поверхні виливу;
- $Fg_p$ – масив параметрів <$VF_{p,\tau}$, $VT_{p,\tau}$, $VY_{p,\tau}$> газового потоку, що утворюється в результаті випаровування аварійного виливу для всіх моментів часу моделювання;
- $Fg_{ave}$ – усереднені за часом параметри <$F_{res,ave}$, $T_{res,ave}$, $Y_{res,ave}$> результуючого потоку газу;
- $C_{Cont}$ – поле концентрацій C(x, y, z, τ), отримане за допомогою моделюванню атмосферного розсіювання шкідливих домішок для тривалого (continuous) викиду;
- $W_{heat}$ – поле теплового навантаження $W_{heat}$ (x, y) від пожежі виливу та тривалість пожежі $\tau_{poolfire}$.

Параметри всіх потоків, що надходять у навколишнє середовище визначаються модулями «Модель витоку через аварійний отвір» і «Модель ємності», що працюють синхронно в контексті рішення єдиної динамічної задачі про викид через аварійний отвір на корпусі технологічного резервуара (рис. 3.3). У разі викиду перегрітої рідкої фази проводиться розрахунок кипіння потоку перегрітої рідини і наступного розпаду на переохолоджений потік рідини і утворений внаслідок випаровування газовий потік. Вилив утворюється внаслідок витоку рідини через аварійний отвір на корпусі технологічного резервуара. Моделювання випаровування виливу рідини дозволяє отримати інтенсивність, температуру та склад газового потоку, що утворюється в результаті випаровування. Оскільки існує можливість одночасного випаровування виливу та надходження

газового потоку через аварійний отвір, необхідно враховувати спільний вплив таких газових потоків (у вигляді результуючого газового потоку) на масштаб викиду.

Параметри виливу з модуля «Формування виливу рідини» можуть бути передані в модуль «Пожежа виливу», якщо суміш у розливі легкозаймиста і з'являється джерело займання (рис. 3.3).

Параметри результуючого газового потоку можуть використовуватися в моделях дисперсії, що працюють як з динамічним потоком газу, так і стаціонарним потоком. Для стаціонарних дисперсійних моделей необхідно провести усереднення результуючого потоку газу за часом моделювання.

## 3.2 Структура модуля розрахунку викиду у результаті розриву оболонки хімічного обладнання

Розглянемо структуру підмодуля ARDM модуля ADM для випадку розриву оболонки апарата (рис. 3.4).

Речовина, що викидається при повній розгерметизації небезпечного об'єкта (розрив оболонки апарата), характеризується такими вихідними параметрами: температурою (одна і та ж для всіх можливих фаз), кількостями фаз, мольними частками компонентів у фазах, тиском газової фази в момент до розгерметизації. Далі, якщо рідина була перегріта по відношенню до температури кипіння при атмосферному тиску, відбувається кипіння рідини і утворення газоподібної частини первинної хмари. Друга частина газоподібної хмари формується при адіабатному розширенні кількості газової фази, що була в ємності до розгерметизації. Обидві газові частини об'єднуються і формують первинну хмару, яка є вихідним станом системи при моделюванні розсіювання квазіміттєвого викиду речовини. Рідка ж частина, що залишилася після кипіння (якщо таке було), утворює первинний вилив, який надалі поповнюватиметься рідкими потоками.

Розрахунок параметрів первинних хмари і виливу виконує модуль «Квазіміттєве руйнування» (рис. 3.4).

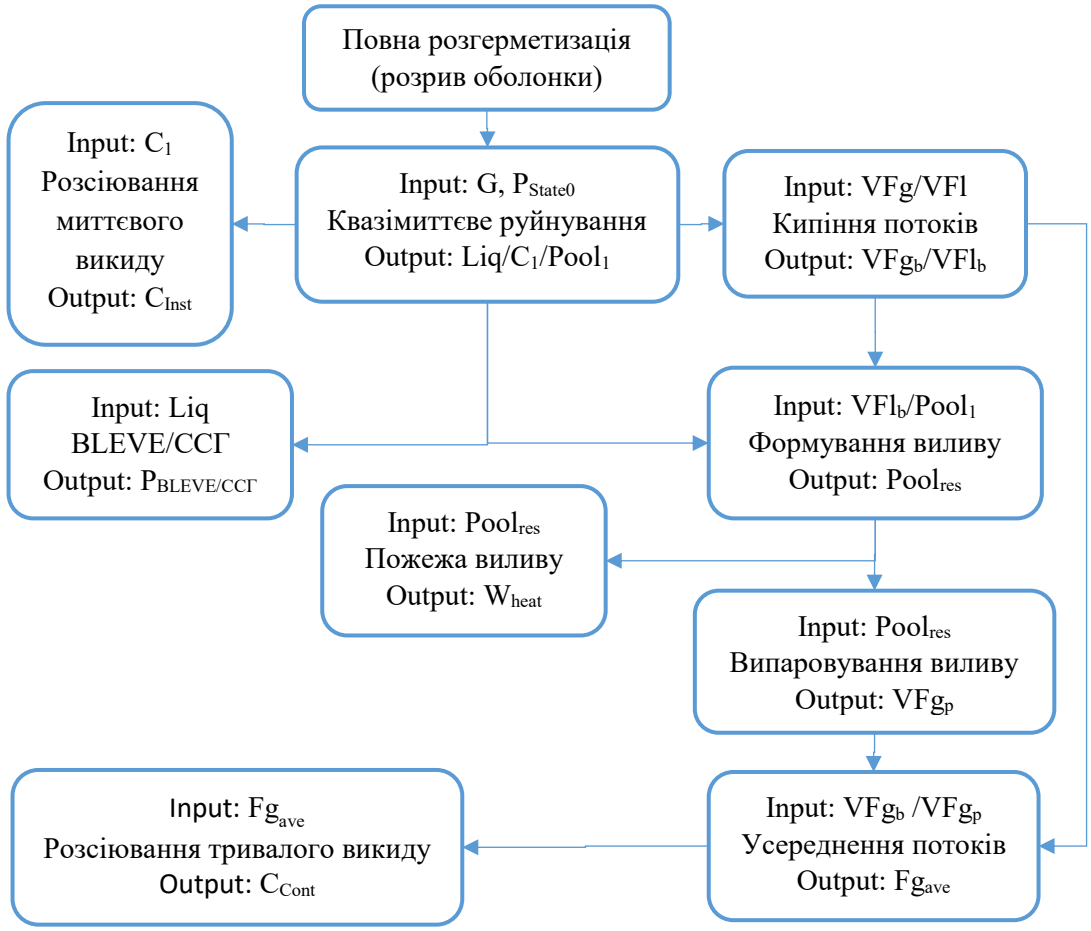



Рисунок 3.4 – Схема даних блоку ARDM (режим розриву оболонки апарата)

Додаткові пояснення щодо діаграми потоку даних (рис. 3.4) наведено у списку нижче:

- G – геометрія ємності <Fig, L, R>, де Fig – геометрична фігура подоби, L – довжина, R – радіус (параметри демонструються на прикладі горизонтального циліндра, у загальному випадку набір параметрів повинен бути достатнім для визначення об'єму апарата та рівня рідкої фази в апараті);
- $P_{State0}$ – вихідні параметри <T, P, C> небезпечного стану в апараті безпосередньо перед розгерметизацією, де T – температура, P – тиск, C – вектор складу пароріднинної суміші в апараті;

- Liq – параметри рідкої фази в апараті перед розгерметизацією (температура, кількість, склад);
- VFg – масив параметрів <$VF_\tau$, $VT_\tau$, $VY_\tau$> витоку газової фази для кожного обриву патрубка та для всіх моментів часу моделювання;
- VFl – масив параметрів <$VF_\tau$, $VT_\tau$, $VX_\tau$> витоку рідкої фази для кожного обриву патрубка та для всіх моментів часу моделювання;
- $VFg_b$ – масив параметрів потоку газу <$VF_{b,\tau}$, $VT_{b,\tau}$, $VY_{b,\tau}$> після кипіння перегрітої рідини для всіх моментів часу моделювання;
- $VFl_b$ – масив параметрів залишкового потоку рідини <$VF_{b,\tau}$, $VT_{b,\tau}$, $VX_{b,\tau}$> після кипіння для всіх моментів часу моделювання;
- $Pool_1$ – параметри <$N_{spill_{0,1}}$, $x_{spill_{0,1}}$, $T_{spill_{0,1}}$, $S_{pool,1}$> первинного виливу рідини, що утворився в результаті розриву оболонки апарата за рахунок наявної в апараті рідкої фази, де $N_{spill_{0,1}}$ – кількість первинного виливу; $x_{spill_{0,1}}$ – склад первинного виливу рідкої фази; $T_{spill_{0,1}}$ – температура первинного виливу рідкої фази; $S_{pool,1}$ – площа поверхні первинного виливу;
- $Pool_{res}$ – параметри <$N_{spill_{0,res}}$, $x_{spill_{0,res}}$, $T_{spill_{0,res}}$, $S_{pool,res}$> виливу рідини, що утворився в результаті підсумовування первинного виливу та залишкових потоків рідкої фази з обривів патрубків, де $N_{spill_{0,res}}$ – кількість остаточно сформованого виливу; $x_{spill_{0,res}}$ – склад остаточно сформованого виливу рідкої фази; $T_{spill_{0,res}}$ – температура остаточно сформованого виливу рідкої фази; $S_{pool,res}$ – площа поверхні остаточно сформованого виливу;
- $VFg_p$ – масив параметрів <$VF_{p,\tau}$, $VT_{p,\tau}$, $VY_{p,\tau}$> газового потоку, що утворюється в результаті випаровування виливу для всіх моментів часу моделювання;
- $Fg_{ave}$ – усереднені параметри <$F_{res,ave}$, $T_{res,ave}$, $Y_{res,ave}$> результуючого потоку газу;

- $C_1$ – параметри хмари в початковий момент часу (обсяг, температура та ін.), що утворилася в результаті миттєвого (залпового) викиду;
- $C_{Inst}$ – поле концентрацій C(x, y, z, τ), отримане в результаті моделювання атмосферного розсіювання домішок для тривалого викиду;
- $C_{Cont}$ – поле концентрацій C(x, y, z, τ), отримане внаслідок моделювання атмосферного розсіювання шкідливих домішок для миттєвого (залпового) викиду;
- $W_{heat}$ – поле теплового навантаження $W_{heat}$ (x, y) від пожежі виливу та тривалість пожежі $\tau_{poolfire}$.
- $P_{BLEVE/ССГ}$ – поле ударно-хвильових навантажень внаслідок реалізації вражаючого фактора BLEVE/ССГ.

Параметри рідкої фази, що знаходиться в апараті до розгерметизації, у разі реалізації сценарію розриву оболонки можуть бути передані модулю розрахунку вражаючих факторів типу BLEVE/ССГ.

Параметри сформованого аварійного виливу з модуля «Формування виливу» можуть бути передані в модуль «Пожежа виливу», якщо суміш у розливі легкозаймиста і з'являється джерело займання (рис. 3.4).

Параметри результуючого газового потоку можуть використовуватися в моделях дисперсії, що працюють як з динамічним, так і зі стаціонарним потоком газу. Для стаціонарних дисперсійних моделей необхідно провести усереднення результуючого потоку газу за часом моделювання.

## 3.3 Модель хімічної ємності (джерело небезпеки)

Параметри стану всередині технологічної ємності безперервно змінюються за часом у процесі розгерметизації. Для кожного моменту часу моделювання повинні бути відомі такі параметри системи всередині технологічної ємності:

- температура суміші;

- тиск парової фази;
- рівень рідкої фази;
- склад газової фази;
- склад рідкої фази.

Наведені параметри стану визначають рівень рідкої фази, властивості газової і рідкої фаз і гідродинаміку потоків у спряжених з аварійним апаратом потоках і потоку через аварійний отвір.

У деяких випадках необхідно враховувати вхідні та вихідні потоки. Математичний опис динамічної моделі технологічного резервуара показаний в розділі 2.

## 3.4 Модель витоку газу через аварійний отвір на корпусі ємності

### 3.4.1 Математичний опис моделі витоку газу через аварійний отвір

Витік газу через аварійний отвір для адіабатного процесу описується рівнянням Сен-Венана-Вантцеля [8, 71].

Вхідні дані:

1) $d_H$ – діаметр [м] отвору надходження речовини в довкілля (отвір розгерметизації прийнято круглим);

2) $\mu$ – коефіцієнт витрати форми отвору (консервативно прийнятий 1);

3) $T$ – температура [K] системи у ємності;

4) $p_1$ – тиск [Па] парової фази в ємності;

5) $Y$ – вектор складу парової фази в ємності, вираженого в мольних частках;

6) $Y_{LFH}$ – висота [м] розташування отвору щодо крайньої нижньої точки ємнісного апарата;

7) $Y_{LL}$ – рівень [м] рідкої фази щодо крайньої нижньої точки ємнісного апарата;

8) $p_2$ – тиск [Па] у приймачі (атмосфера);

9) $K$ – кількість хімічних компонентів, що беруть участь у процесі аварійної розгерметизації;

10) $M$ – вектор молекулярних мас компонентів, що беруть участь у процесі.

Вихідні дані:

1) $F_{LEAK}$ – інтенсивність [моль/с] надходження речовини з апарата до навколишнього простору;

2) температура [К] суміші потоку на виході з отвору консервативно прийнята рівною температурі парової фази в апараті в силу специфіки процесу витоку (можливий теплообмін газового потоку з повітрям, корпусом апарата та нагрівання газу за рахунок в'язкого тертя, що складно враховувати в розрахунках);

3) склад [мольні частки] суміші потоку (визначається модулем «Суміші»).

**Математичний опис моделі**

Модель витоку парогазової фази в навколишній простір виконується за умови

$$Y_{LFH} > Y_{LL}. \tag{3.1}$$

Площа отвору надходження газоподібної речовини до навколишнього середовища визначається як

$$f = \frac{\pi {d_H}^2}{4}. \tag{3.2}$$

Молекулярна маса парової суміші в апараті визначається як

$$M_Y = \sum_{j=1}^{K} Y_j M_j. \tag{3.3}$$

Коефіцієнт $\psi$ дорівнює [71]

$$\psi = \sqrt{2 \cdot \frac{k}{k-1} \cdot \left[\beta^{\frac{2}{k}} - \beta^{\frac{k+1}{k}}\right]}, \quad (3.4)$$

де $\beta$ визначається залежно від швидкісного режиму витоку таким чином [71]:

а) дозвукова область витоку якщо: $\beta_{crit} \leq \frac{p_2}{p_1}$, то: $\beta = \frac{p_2}{p_1}$;

б) звукова область витоку якщо: $\beta_{crit} > \frac{p_2}{p_1}$, то $\beta = \beta_{crit}$,

де $p_1$ – тиск [Па] у джерелі витоку; $p_2$ – тиск [Па] у приймачі, тобто у просторі, в який відбувається витік.

Показник адіабати визначається так [8, 71]

$$k = \frac{c_p}{c_v}, \quad (3.5)$$

де $c_p$, $c_v$ – теплоємності [Дж/(моль·К)] газової суміші при постійних тиску та об'ємі відповідно.

Найчастіше у довідкових даних наведено лише теплоємність при постійному тиску. У такому разі пропонується розраховувати теплоємність при постійному об'ємі через співвідношення Майєра [72]

$$c_v = c_p - R. \quad (3.6)$$

Теплоємність газоподібної суміші відомого складу можна розрахувати за адитивною формулою [73]:

$$c_{p,mix} = \sum_{i=1}^{K} c_{p_i}(T) \cdot Y_i, \quad (3.7)$$

$\beta_{crit}$ визначається як [71]:

$$\beta_{crit} = \left(\frac{2}{k+1}\right)^{\frac{k}{k-1}}. \quad (3.8)$$

Питомий об'єм [м$^3$/кг] парогазової суміші можна визначити за допомогою рівняння Менделєєва-Клапейрона як

$$v_1 = \frac{RT}{M_Y p}. \quad (3.9)$$

Миттєва витрата газу $L^g$ [моль/с] при витіканні з ємності обмеженого розміру [71]

$$L^{gLEAK} = \frac{\mu \cdot f \cdot \psi}{M_Y} \cdot \sqrt{\frac{p_1}{v_1}}, \quad (3.10)$$

де $\mu$ – коефіцієнт витрати аварійного отвору [74]; $f$ – площа перерізу аварійного отвору (м$^2$); $p_1$ – тиск газу в ємності (Па); $v_1$ – питомий об'єм [м$^3$/кг] газоподібної суміші у ємності; М – молярна маса [кг/моль] газової суміші в апараті.

### 3.4.2 Верифікація

**Розрахункові експерименти. Витік газу через аварійний отвір**

Розрахунок витоку газової фази в програмному модулі Витік із отвору порівнювався з розрахунками за відповідними формулами (3.1 – 3.10) для різних

параметрів стану та сумішей в апараті. Розрахункова схема тестового розрахунку у інформаційній системі оцінки ризику наведено на (рис. 3.5).




Рисунок 3.5 – Розрахункова схема проєкту для моделювання аварійного витоку через отвір

Вихідні дані та результати верифікації моделі витоку газу через аварійний отвір наведені в табл. Б.1. Відносна похибка склала менше 1% за модулем.

### 3.4.3 Валідація

**Опис фізичного експерименту**

Для валідації моделі ємності були використані результати серії випробувань із вуглеводнями [75].

Вихідні дані апарата відображені у табл. Б.2. У цьому дослідженні передбачалося, що ємність виготовлена з нержавіючої сталі.

Оскільки наявні дані експерименту для динаміки зміни параметрів стану в апараті у часі, то можливо з’ясувати, наскільки кількісно кращим є метод обчислення витоку через аварійний отвір за допомогою динамічної моделі з урахуванням фазової рівноваги багатокомпонентної суміші у порівнянні з підходом, заснованому на стаціонарній моделі з псевдокомпонентом. Серед показників для оцінки якості прогнозу моделі можна зосередитися на таких [76]:

- середня абсолютна похибка у відсотках (MAPE);
- коефіцієнт невідповідності Тейла.

Показник MAPE розраховується за формулою [76]

$$MAPE = 100 \cdot \frac{1}{n} \sum_{i=1}^{n} \frac{|\hat{y}_i - y_i|}{|y_i|}, \tag{3.11}$$

коефіцієнт невідповідності Тейла ($U_1$) розраховується за формулою [76]

$$U_1 = \frac{\sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} (\hat{y}_i - y_i)^2}}{\sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} \hat{y}_i{}^2} + \sqrt{\frac{1}{n} \cdot \sum_{i=1}^{n} y_i{}^2}}, \tag{3.12}$$

де $n$ – кількість вимірів; $\hat{y}_i$ – значення прогнозу, отримане за допомогою моделі; $y_i$ – фактичне значення.

**Опис чисельного експерименту з псевдокомпонентом і стаціонарною моделлю витоку**

Враховуючи склад і температуру сумішей на початку експерименту для випадків 1 – 3 (табл. Б.2), розрахуємо фізичні властивості псевдокомпоненту, необхідні для оцінки витоку газу, за допомогою стандартних адитивних формул (3.3), (3.7), властивостей індивідуальних речовин, наведених у довіднику [77]. Приймаємо, що у апараті може бути лише одна газова фаза, а отже, кількість речовини в апараті на початок експерименту визначається рівнянням ідеального газу. Об’єм апарата визначається лінійними розмірами апарата (табл. Б.2). Час витоку із аварійного отвору визначається відношенням початкової кількості псевдокомпоненту в апараті до витрати. Отримані результати представлені у табл. Б.3.

### 3.4.4 Результати і обговорення

Для проведення обчислювального експерименту, в режимі проєкту Користувача інформаційної системи оцінки ризику була створена наступна розрахункова схема (рис. 3.5).

В експерименті були використані три випадки витоку з отвору з різними сумішами вуглеводнів. Результати експерименту розгерметизації судини під тиском [75] порівнювалися з результатами, отриманими при моделюванні ємності за допомогою розробленої інформаційної технології оцінки ризиків, що дозволило оцінити адекватність моделі. На рис. 3.6 – 3.8 представлена динаміка зміни тиску всередині апарата під час аварійного витоку, отримана в результаті обчислювального експерименту в інформаційній системі оцінки ризику та з експериментальних даних.

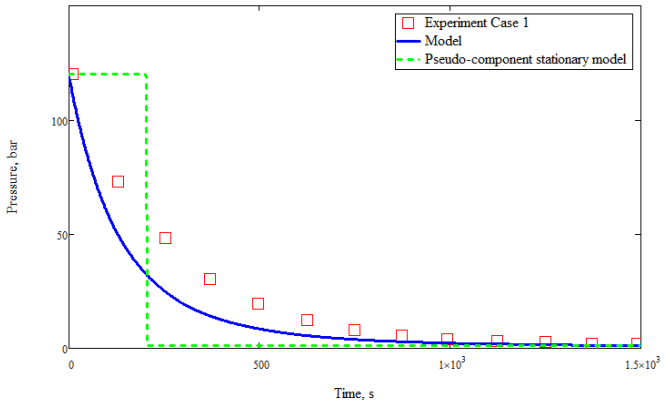



Рисунок 3.6 – Графік залежності тиску всередині ємності від часу для випадку 1

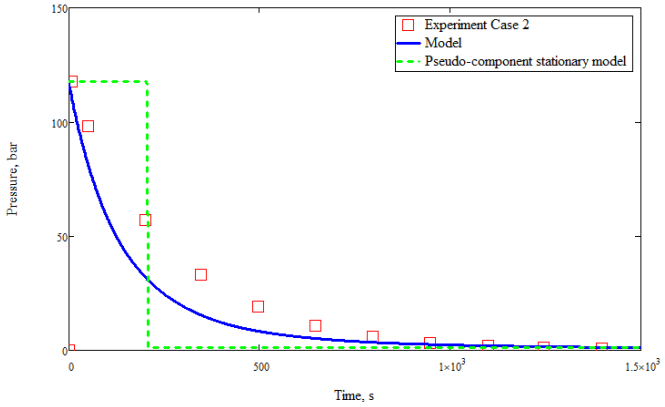



Рисунок 3.7 – Графік залежності тиску всередині ємності від часу для випадку 2

Чисельні показники похибок за результатами чисельних експериментів, проведених за допомогою запропонованої моделі і стаціонарної моделі з псевдокомпонентом для залежності тиску від часу наведені у табл. Б.4 – Б.6.

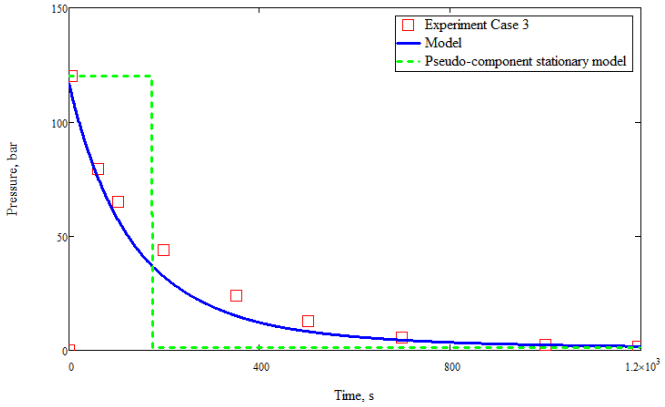



Рисунок 3.8 – Графік залежності тиску всередині ємності від часу для випадку 3

Середні значення MAPE і показника невідповідності Тейла $U_1$ для випадків 1 – 3 (зміна тиску в апараті із часом) для запропонованої моделі і для стаціонарної моделі з псевдокомпонентом наведені у табл. 3.1.

Динаміка зміни тиску всередині апарата, отримана із застосуванням інформаційної системи оцінки ризику, показала кращу збіжність з експериментом у порівнянні зі стаціонарною моделлю витоку з псевдокомпонентом: показник MAPE у 2.22 разів менше, показник невідповідності Тейла у 2.09 разів менший.

Таблиця 3.1 – Середні значення MAPE і показника невідповідності Тейла U1 для залежності тиску в апараті від часу для випадків 1 – 3

| Середнє значення (для залежності тиску від часу для випадків 1 – 3) | Запропонована модель | Стаціонарна модель із псевдокомпонентом |
|---|---|---|
| MAPE, % | 29.25 | 65.06 |
| показника невідповідності Тейла $U_1$ | 0.1058 | 0.2213 |

Графіки залежностей температури всередині ємності від часу, побудовані за допомогою розробленої інформаційної технології і експериментальні значення наведені на рис. 3.9 – 3.11.

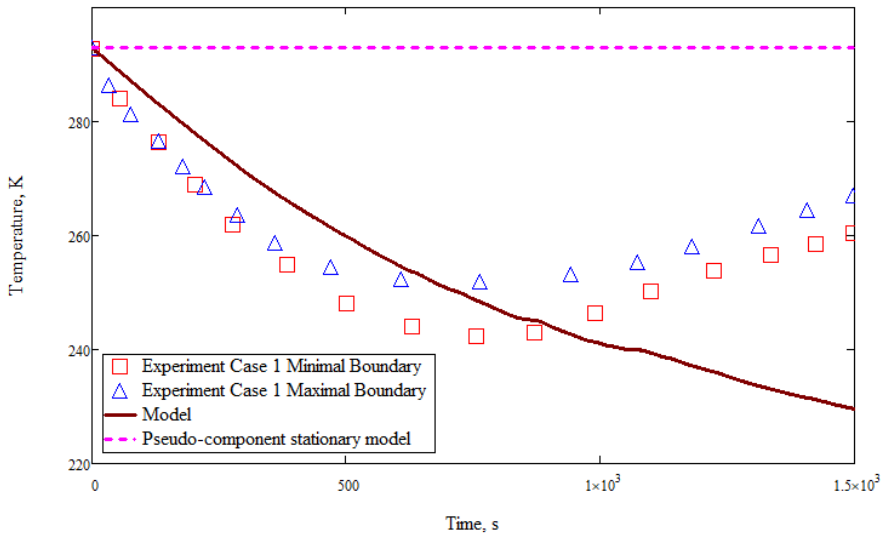



Рисунок 3.9 – Графік залежності температури всередині ємності від часу для випадку 1

Чисельні показники похибок за результатами чисельних експериментів, проведених за допомогою запропонованої моделі і стаціонарної моделі з псевдокомпонентом для залежності тиску від часу наведені у табл. Б.7 – Б.9.

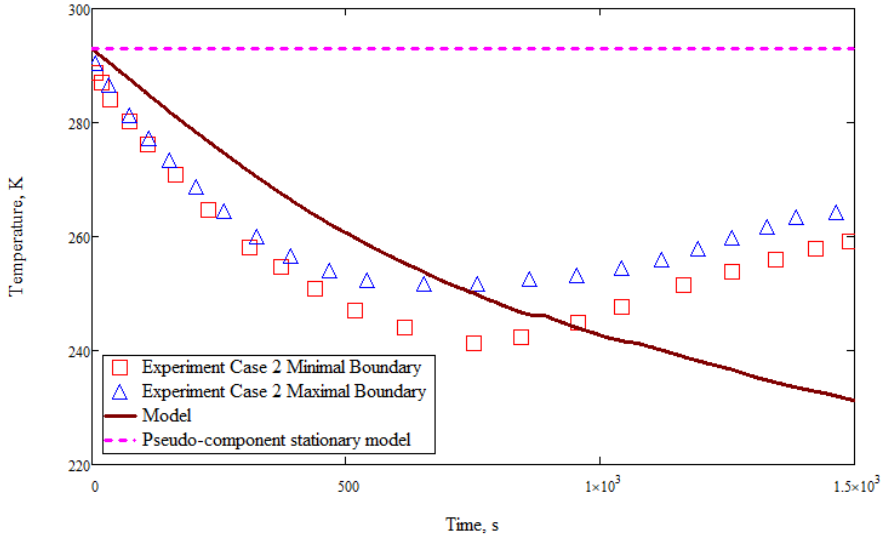



Рисунок 3.10 – Графік залежності температури всередині ємності від часу для випадку 2

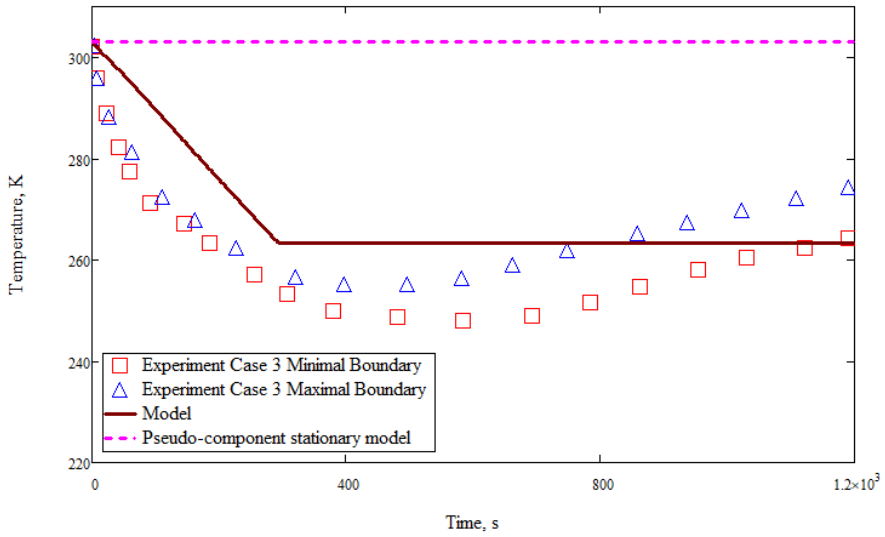



Рисунок 3.11 – Графік залежності температури всередині ємності від часу для випадку 3

Середні значення MAPE і показника невідповідності Тейла $U_1$ для випадків 1 – 3 (зміна температури в апараті із часом) для запропонованої моделі і для стаціонарної моделі з псевдокомпонентом наведені у табл. 3.2.

Таблиця 3.2 – Середні значення MAPE і показника невідповідності Тейла U1 для залежності температури в апараті від часу для випадків 1 – 3

| Середнє значення (для залежності температури від часу для випадків 1 – 3) | Запропонована модель | Стаціонарна модель з псевдокомпонентом |
|---|---|---|
| MAPE, % | 4.11 | 12.62 |
| показника невідповідності Тейла $U_1$ | 0.0250 | 0.0631 |

Порівняння показників MAPE і невідповідності Тейла $U_1$ демонструє кращу збіжність запропонованої моделі з експериментальними даними у порівнянні зі стаціонарною моделлю з псевдокомпонентом: MAPE у 3.07 разів менше, невідповідності Тейла – у 2.52 разів менше.

Відповідно до експериментальних даних спостерігається спочатку монотонне зменшення температури суміші в ємності, а потім, після досягнення мінімуму, монотонне зростання температури. Оскільки в моделі «Витік із отвору» не враховується теплообмін суміші з навколишнім середовищем, спостерігається монотонне зменшення температури суміші в апараті протягом всього часу витоку (на відміну від експерименту). Для випадку 3 температура згідно з моделлю досягає стаціонарного стану в момент часу, коли повністю зникає рідка фаза, оскільки після цієї точки не відбувається витрати внутрішньої енергії системи на пароутворення.

### 3.4.5 Висновки за результатами верифікації і валідації моделі витоку газу через аварійний отвір на корпусі ємності

У результаті валідації моделі ємності, заснованої на експериментальних даних витоку газу через отвір ємнісного обладнання, можна зробити такі висновки:

- за результатами верифікації відносна похибка у порівнянні з повірочними розрахунками склала менше 1% за модулем;
- запропонована модель демонструє кращу збіжність залежності зміни тиску від часу з даними експериментів у порівнянні зі стаціонарною моделлю з псевдокомпонентом (MAPE у 2.22 разів менше і складає 29.25%, показник невідповідності Тейла у 2.09 разів менший і складає 0.1058), однак необхідне уточнення дійсного коефіцієнту витрати отвору за допомогою краще спланованих фізичних експериментів;
- отримана модель ємності дозволяє передбачати тиск усередині ємності в різні моменти часу та витрати витоку речовини у залежності від різних початкових параметрів (початковий тиск, температура, склад суміші, діаметр отвору тощо);
- зміна температури з часом у запропонованій моделі з більшою точністю відображає реальну ситуацію у порівнянні зі стаціонарною моделлю з псевдокомпонентом (MAPE у 3.07 разів менше і складає 4.11%, невідповідності Тейла – у 2.52 разів менше і складає 0.0250), проте необхідно розвивати модель у сторону врахування теплообміну з навколишнім середовищем для кращої відповідності фізичному експерименту.

## 3.5 Модель витоку рідини через аварійний отвір на корпусі ємності

Витік рідини через аварійний отвір описується рівнянням Бернуллі [19, 78].

**Математичний опис моделі витоку рідини через отвір**

Вхідні дані:

1) $d_H$ – діаметр [м] отвору надходження речовини до навколишнього середовища (отвір розгерметизації прийнято круглим);
2) $T$ – температура [K] системи у ємності;
3) $p_\Sigma$ – тиск [Па] парової фази;

4) $X$ – вектор складу рідкої фази в ємнісному апараті, мольні частки;

5) коефіцієнти температурних залежностей ентальпії та густини рідкої фази для кожного компонента потоку;

6) $\rho_l$ – густина [кг/м$^3$] рідкої фази, що знаходиться в апараті;

7) $Y_{LFH}$ – висота [м] розташування отвору щодо крайньої нижньої точки ємнісного апарата;

8) $Y_{LL}$ – рівень [м] рідкої фази щодо крайньої нижньої точки ємнісного апарата;

9) $p$ – тиск [Па] парової фази в ємнісному апараті у даний момент часу;

10) $K$ – кількість компонентів, що беруть участь у моделюванні аварійного витоку;

11) $M$ – вектор молекулярних мас компонентів, що беруть участь у моделюванні.

Вихідні дані:

1) $F_{LEAK}$ – інтенсивність [моль/с] надходження речовини з апарата до навколишнього простору;

2) мольна ентальпія [Дж/(моль·К)] суміші потоку (визначається модулем «Суміші»);

3) склад [мольні частки] потоку суміші (визначається модулем «Суміші»).

Основна частина

Модель витоку рідкої фази в навколишній простір виконується за умови

$$Y_h \leq Y_{LL}, \tag{3.13}$$

де $Y_{LL}$ – рівень рідкої фази в апараті; $Y_h$ – відмітка положення аварійного отвору на корпусі апарата.

Площа отвору надходження і-го потоку із ємності визначається як

$$f = \frac{\pi {d_H}^2}{4}, \tag{3.14}$$

де $d_H$ – діаметр аварійного отвору.

Витікання нестисненої рідини з обладнання через отвори розгерметизації відбувається внаслідок дії внутрішнього тиску в устаткуванні та (або) під дією стовпа рідини над рівнем отвору розгерметизації (рис. 3.12).

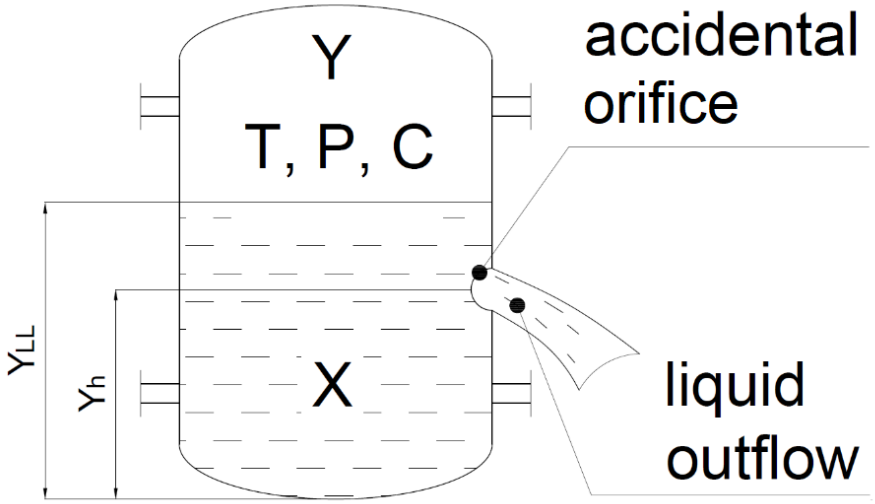



Рисунок 3.12 – Схематичне зображення задачі про витік рідкої фази через отвір розгерметизації на корпусі апарата

Витік відбувається при змінному або постійному тиску через отвори у газове середовище.

Для «малого отвору» об'ємна витрата (м$^3$/с) складає [78]

$$v_{sLEAK} = \mu \cdot f \cdot \sqrt{2 \cdot g \cdot \left(Y_{LL} - Y_h + \frac{p-p_2}{\rho_l \cdot g}\right)}, \quad (3.15)$$

де f – площа отвору витоку (м$^2$); $\rho_l$ – густина [кг/м$^3$] рідкої фази; $p$ – тиск [Па] над поверхнею рідини (в апараті); $p_2$ – тиск [Па] у зовнішньому середовищі (куди відбувається витік); $\mu$ – коефіцієнт витрати (докладніші відомості про гідравлічні

опори можна знайти в [78]); $Y_{LL}$ – рівень рідкої фази в апараті; $Y_h$ – відмітка положення аварійного отвору на корпусі апарата.

Молекулярна маса рідкої суміші в апараті визначається як

$$M_X = \sum_{j=1}^{K} X_j M_j. \tag{3.16}$$

Витрату рідкої фази з отвору розгерметизації, виражену в [моль/с], визначимо так:

$$F_{LEAK} = \frac{v_{sLEAK} \cdot \rho_l}{M_X}, \tag{3.17}$$

де $M_X$ – молекулярна маса [кг/моль] рідкої суміші в апараті.

### 3.5.1 Верифікація

**Обчислювальні експерименти. Витік рідини**

Розрахунок витікання рідкої фази в модулі Витік з отвору порівнювалося з розрахунками за відповідними формулами (3.13 – 3.17) для різних параметрів стану та сумішей в апараті. Розрахункова схема проєкту для моделювання витоку через аварійний отвір наведена на рис. 3.5. Вихідні дані та результати наведені у табл. Б.10. Відносна похибка за результатами верифікації склала менше 1% за модулем.

### 3.5.2 Висновки за результатами верифікації моделі потоку рідини через аварійний отвір

За результатами верифікації алгоритмів розрахунку витоку рідини через аварійний отвір встановлено практично повну відповідність перевірочним розрахункам (відносна похибка менше 1%).

## 3.6 Модель квазіміттєвого руйнування апарата (розрив оболонки)

### 3.6.1 Математичний опис моделі квазіміттєвого руйнування апарата

При повній, квазіміттєвій (практично миттєвій) розгерметизації апарата, відбувається повне руйнування корпусу апарата, а в навколишнє середовище, взагалі кажучи, потрапляє суміш речовин у рідкій та паровій фазах [79]. У деяких випадках температура перебування рідкої фази в ємності може бути такою, що тиск насиченої пари при даній температурі перевищує атмосферний тиск. У таких випадках, при потраплянні рідкої фази в середовище з атмосферним тиском, відбувається інтенсивне пароутворення (кипіння) і частина рідкої фази швидко переходить у газоподібний стан [80]. У визначенні наслідків аварії при аналізі техногенного ризику важливо враховувати перехід частини такої рідини в пароподібний стан, знати кількості, склади та температури фаз після переходу. Також слід враховувати об'єднання обсягу газу, що знаходився над поверхнею рідини в ємності до повного руйнування та обсягу газу, що утворився в результаті кипіння рідкої фази. Дана інформація про фази речовин, викинутих у навколишнє середовище, знаходить застосування при моделюванні формування аварійного виливу, розсіювання миттєвого та тривалого викидів.

Отже, завдання моделі квазіміттєвого руйнування апарата полягає в тому, щоб визначити кількості, хімічні склади та температури первинних виливу та хмари.

Вхідні дані:

1) $T_{l0}$ – вихідна температура [K] в апараті (температура рідкої фази);
2) $P_{gv}$ – вихідний тиск [Па] в апараті;
3) $V_{gv}$ – вихідний мольний об'єм [м$^3$/моль] газової фази в апараті;
4) $x_0$ – вектор вихідного складу [мольні частки] рідкої фази в апараті;
5) $Y_{gv}$ – вектор вихідного складу [мольні частки] газової фази в апараті;
6) $N_{lv0}$ – вихідна кількість [моль] рідкої фази в апараті;
7) $N_{gv}$ – вихідна кількість [моль] газової фази в апараті;
8) $P_{atm}$ – атмосферний тиск [Па].

Вихідні дані:

1) $T_{primCloud}$ – температура [K] первинної хмари;
2) $Y_{primCloud}$ – склад [мольні частки] первинної хмари;
3) $N_{primCloud}$ – кількість [моль] первинної хмари;
4) $N_{primSpill}$ – кількість [моль] первинного виливу;
5) $T_{primSpill}$ – температура [K] первинного виливу;
6) $X_{primSpill}$ – склад [мольні частки] первинного виливу.

**Адіабатне розширення вихідної газової фази**

Приймемо, що процес переходу з ємності в довкілля газової фази, що знаходиться над рідкою фазою в ємності до руйнування корпусу, можна описати процесом адіабатного розширення газу.

Мольний об’єм газу після адіабатного розширення можна визначити так [67]:

$$V_{gatm} = \left(\frac{P_{gv} \cdot V_{gv}{}^{\gamma}}{P_{atm}}\right), \tag{3.18}$$

де $P_{atm}$ – атмосферний тиск [Па]; $\gamma$ – показник адіабати [71]; $V_{gv}$ – мольний об'єм [м$^3$/моль] газової фази над поверхнею рідкої фази в ємності до настання руйнування корпусу апарата; $P_{gv}$ – тиск [Па] газової фази в апараті до розгерметизації.

Температуру газової фази після адіабатного розширення у навколишнє середовище можна визначити так [67]:

$$T_{gatm} = \frac{P_{atm} \cdot V_{gatm}}{R}. \quad (3.19)$$

Занизька температура газової фази у результаті адіабатного розширення може спричинити її часткову конденсацію. Отже, у деяких випадках з метою спрощення подальших розрахунків, температуру газової фази можна консервативно прийняти рівною температурі навколишнього середовища.

**Кипіння вихідної перегрітої рідкої фази**

Кипіння – процес інтенсивного пароутворення, який відбувається в рідині, як на її вільній поверхні, так і всередині її структури [67]. При цьому в обсязі рідини виникають межі поділу фаз, тобто на стінках судини утворюються бульбашки, які містять повітря та насичену пару. Кипіння, як і випаровування, є одним із способів пароутворення. На відміну від випаровування, кипіння може відбуватися лише за певної температури та тиску. Температура, коли відбувається кипіння рідини, що під постійним тиском, називається температурою кипіння. Як правило, температура кипіння за нормального атмосферного тиску наводиться як одна з основних характеристик хімічно чистих речовин [71].

Кипіння є фазовим переходом першого роду. Кипіння відбувається набагато інтенсивніше, ніж випаровування з поверхні, через присутність осередків пароутворення, обумовлених як вищою температурою, що досягається у процесі кипіння, так і наявністю домішок [67].

У звичайній рідині (не очищеної від дрібних бульбашок газів) при термодинамічній рівновазі парціальний тиск пари в бульбашці дорівнює тиску

насичених пар при цій температурі. Так як дотримується рівність тисків всередині та зовні бульбашки, то тиск усередині бульбашки дорівнює атмосферному тиску (гідростатичним тиском нехтують) [67].

Запишемо тепловий баланс для рідкої фази киплячої за рахунок власної внутрішньої енергії [8]

$$H_{evap}(T_l, y) \cdot dN_{inst_evap} = -N_{lv} \cdot C_{plmix}(T_l, x) \cdot dT_l, \tag{3.20}$$

де $H_{evap}(T_l)$ – питома теплота випаровування [Дж/моль] рідкої фази при температурі рідкої фази $T_l$ [K]; $N_{inst_evap}$ – кількість [моль] випареної суміші; $N_{lv}$ – кількість [моль] рідкої фази суміші; $C_{plmix}(T_l)$ – теплоємність [Дж/(моль·К)] рідкої фази при температурі T [K].

Задамо умову фазової рівноваги між рідкою фазою та парою. Запишемо слідство законів Рауля та Дальтона

$$y_i = k_i x_i, \tag{3.21}$$

де $x_i$ – вміст [мольні частки] і-го компонента в рівноважній рідкій фазі; $y_i$ – зміст [мольні частки] і-го компонента в рівноважній паровій фазі; $k_i$ – коефіцієнт розподілу.

Коефіцієнт розподілу визначається як

$$k_i = \frac{P_{sat_i}(T_l)}{P_\Sigma}, \tag{3.22}$$

де $P_{sat_i}(T_l)$ – тиск [Па] насиченої пари і-го компонента при температурі $T_l$; $P_\Sigma$ – сумарний тиск [Па] рівноважної парової фази.

Сумарний тиск рівноважної парової фази можна визначити, виходячи із закону Рауля

$$P_{\Sigma} = \sum_{i=1}^{nsubst}\left(P_{sat_i}(T_l) \cdot x_i\right), \tag{3.23}$$

де $nsubst$ – кількість компонентів у суміші.

Загальне рівняння матеріального балансу має вигляд

$$dN_{lv} = -dN_{inst_evap}. \tag{3.24}$$

Запишемо рівняння матеріального балансу за компонентами

$$d(N_{lv} \cdot x_i) = -y_i \cdot d\left(N_{inst_evap}\right). \tag{3.25}$$

Розкривши ліву частину рівняння (3.22) отримаємо

$$N_{lv}dx_i + x_i dN_{lv} = -y_i \cdot d\left(N_{inst_evap}\right). \tag{3.26}$$

З урахуванням (3.21) і (3.24), отримаємо модифіковане рівняння (3.26)

$$N_{lv}dx_i - x_i dN_{inst_evap} = -x_i k_i dN_{inst_evap}, \tag{3.27}$$

звідки отримуємо рівняння

$$\frac{dx_i}{dN_{inst_evap}} = \frac{x_i(1-k_i)}{N_{lv}}. \tag{3.28}$$

Аналогічно з (3.20) випливає

$$\frac{dT_l}{dN_{inst_evap}} = -\frac{H_{evap}(T_l,y)}{N_{lv} \cdot C_{plmix}(T_l,x)}. \tag{3.29}$$

З рівняння (3.24) також слідує

$$\frac{dN_{lv}}{dN_{inst_evap}} = -1. \quad (3.30)$$

Запишемо рівняння теплового балансу для утвореної внаслідок випаровування газової фази

$$N_{lv}C_{pg}(T_g, Y)dT_g = -C_{pg}(T_l, y)(T_g + dT_g - T_l)dN_{inst_evap}, \quad (3.31)$$

де $C_{pg}(T_g, Y)$ – питома теплоємність [Дж/(моль·К)] утвореної в результаті випаровування газової фази при температурі $T_g$ та складі $Y$; $T_g$ – температура утвореної газової фази.

З рівняння (3.31) випливає

$$\frac{dT_g}{dN_{inst_evap}} = \frac{C_{pg}(T_l,y)(T_l - T_g)}{N_{inst_evap}C_{pg}(T_g,Y) + C_{pg}(T_l,y)dN_{inst_evap}}. \quad (3.32)$$

Матеріальний баланс по компонентах для утвореної газової фази має вигляд

$$Y_i N_{inst_evap} + x_i N_{lv} = x_{0_i} N_{lv0}, \quad (3.33)$$

де $Y_i$ – мольна частка і-го компонента в утвореній результаті кипіння газовій фазі; $x_{0_i}$ – мольна частка і-го компонента в рідкій фазі у початковий момент; $N_{lv0}$ – вихідна кількість [моль] перегрітої рідкої фази в апараті.

З рівняння (3.33) випливає

$$Y_i = \frac{x_{0_i}N_{lv0} - x_i N_{lv}}{N_{inst_evap}}. \quad (3.34)$$

Система алгебро-диференціальних рівнянь (3.28 – 3.30), (3.32), (3.34) описує спрощену модель квазіміттєвого випаровування перегрітої рідини, надаючи можливість визначити кількості газової $N_{inst_evap}$ і рідкої $N_{lv}$ фаз, температури газової $T_g$ і рідкої $T_l$ фаз, а також склади газової $Y$ та рідкої $x$ фаз в результаті квазіміттєвого випаровування. Вирішення такої системи рівнянь слід зупинити при виконанні такої умови (умова припинення процесу кипіння)

$$P_\Sigma < P_{atm}, \tag{3.35}$$

де $P_{atm}$ – атмосферний тиск.

**Параметри первинної хмари**

Визначимо кількість первинної хмари

$$N_{primCloud} = N_{gv} + N_{inst_evap}. \tag{3.36}$$

Визначимо температуру первинної хмари

$$T_{primCloud} = \frac{T_{gatm} \cdot N_{gv} \cdot c_{pgatm} + T_g \cdot N_{inst_evap} \cdot c_{pginst_evap}}{N_{gv} \cdot c_{pgatm} + N_{inst_evap} \cdot c_{pginst_evap}}, \tag{3.37}$$

де $T_g$ – температура [K] газової фази, що утворилася в результаті кипіння рідкої фази; $N_{inst_evap}$ – кількість [моль] газової фази, що утворилася в результаті кипіння рідкої фази.

Вектор складу, вираженого в мольних частках, первинної хмари можна визначити як

$$Y_{primCloud} = \frac{N_{gv} \cdot Y_{gv} + N_{inst_evap} \cdot Y}{N_{gv} + N_{inst_evap}}. \tag{3.38}$$

Об'єм первинної хмари можна визначити як

$$V_{primCloud} = \frac{N_{primCloud} \cdot R \cdot T_{primCloud}}{P_{atm}}. \quad (3.39)$$

**Параметри первинного виливу**

Кількість первинного виливу можна визначити як

$$N_{primSpill} = N_{lv}. \quad (3.40)$$

Температуру первинної виливу можна визначити як

$$T_{primSpill} = T_l. \quad (3.41)$$

Вектор складу, виражений у мольних частках, первинного виливу можна визначити як

$$X_{primSpill} = X. \quad (3.42)$$

### 3.6.2 Обчислювальні експерименти. Валідація

Розрахунок викиду при розриві оболонки апарата в модулі Квазіміттєве руйнування порівнювався з експериментальними даними, представленими у [81] для різних параметрів стану та сумішей в апараті.

Автор роботи [81] проводив серію дослідів з руйнування скляних сфер (колб об'ємом 100, 1000 і 2000 мл), що містять перегріті рідини, такі як: 2 типи холодоагентів R-114 та R-12, пропан та бутан. У роботі наведені різні кількісні показники як парової хмари, що утворилася в результаті інтенсивного пароутворення в результаті кипіння, і первинного виливу залишкової охолодженої

рідкої фази. Відомості про те, якою є частка % виливу рідкої фази стосовно вихідної кількості рідкої фази в колбі, наведені у табл. 3.3 і табл. 3.4 [81].

Таблиця 3.3 – Середня частка % виливу для пропану. Висота викиду: 1 м

| | Об'єм колби | 1000 мл | 2000 мл |
|---|---|---|---|
| | Ступінь заповнення (за рідкою фазою) | 50% | 50% |
| Вихідна температура (у колбі, ℃) | | | |
| 47.4 | | 49 | 49 |
| 54.24 | | 31 | 39 |
| 60.4 | | 35 | 38 |

Таблиця 3.4 – Середня частка % виливу для холодоагентів R-114 та R-12. Висота викиду: наземний та піднесений (5 діаметрів колби). Об'єм колби – 100 мл

| | | Висота викиду | Наземний | Піднесений |
|---|---|---|---|---|
| | | Ступінь заповнення (по рідкій фазі) | 50% | 50% |
| Речовина | Вихідна температура (у колбі, ℃) | | | |
| R-114 | 26.6 | | 65 | 57 |
| | 36.6 | | 37 | 60 |
| | 46.6 | | 32 | 33 |
| R-12 | 22 | | 36 | 39 |

Порівняння з експериментами зі 100% заповненням не проводилося з тієї причини, що оскільки при руйнуванні відбувалося об'ємне закипання всієї рідини, рідка фаза набувала значного імпульсу в горизонтальному напрямку, що призводило до суттєвого розбризкування рідини та потрапляння в піддон малої її частини [81].

Розрахункову схему тестового розрахунку в інформаційній системі оцінки ризику наведено на рис. 3.13.




Рисунок 3.13 – Розрахункова схема проєкту для моделювання квазіміттєвого руйнування (квазіміттєвого викиду при розриві оболонки апарата)

Вихідні дані та результати моделювання наведені у табл. Б.11. Оскільки частка виливу рідкої фази є інтенсивним параметром відповідно до теоретичної моделі, то для перевірки цього слідства, у якості судин розгерметизації були прийняті сфери радіусом 1 і 20 м (досліди 1 і 2, табл. Б.11). Подальші випробування проводяться із сферою радіусом 1 м. Формула розрахунку частки виливу має такий вигляд:

$$x_{pool} = \frac{m_{pool}}{m_{0liq}}, \tag{3.43}$$

де $m_{pool}$ – маса [кг] виливу рідкої фази, що утворилася; $m_{0liq}$ – вихідна маса [кг] рідкої фази в посудині до розгерметизації.

Оскільки у вихідний момент часу система в апараті знаходиться в стані фазової рівноваги, що описується рівнянням Речфорда-Райса, потрібно додати ще один компонент в дуже малих кількостях, щоб система рівнянь вирішилася. Пропонується додати інерт – азот з мольною часткою 0.001.

### 3.6.3 Результати та обговорення

Графічне подання результатів порівняння розрахункових значень частки виливу та експериментальних для пропану наведено на рис. 3.14.

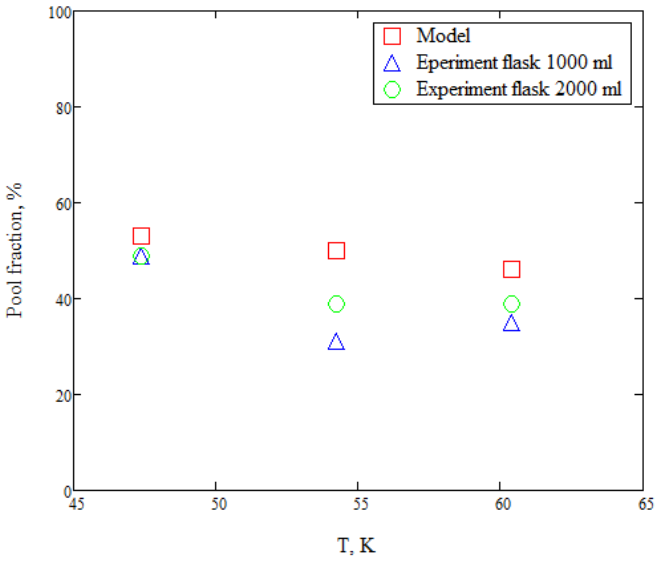



Рисунок 3.14 – Експериментальна та розрахункова залежності частки виливу від вихідної температури речовини для випробувань із пропаном

У цілому спостерігається збіг поведінки моделі квазіміттєвого викиду та всіх експериментів: у разі підвищення вихідної температури перегрітої речовини, частка виливу зменшується. Також спостерігається аналогічне зменшення частки виливу рідкої фази при випробуваннях з легколетучою речовиною. Хороший збіг результатів моделювання з експериментом спостерігається для дослідів із пропаном. Дещо гірший збіг для дослідів з холодоагентами (рис. 3.15, табл. Б.11) може бути пояснено малим обсягом колби (100 мл), що вносить значно більшу похибку в процесі вимірювання кількості виливу рідкої фази.

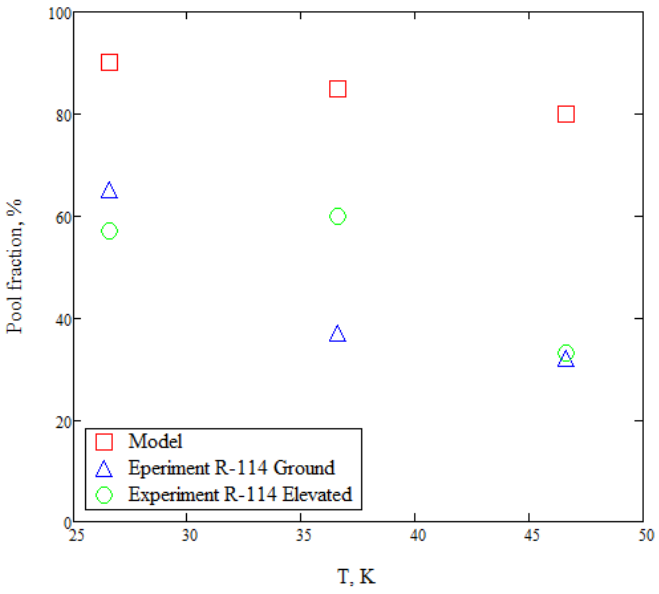



Рисунок 3.15 – Експериментальні та розрахункова залежності частки виливу від вихідної температури речовини для випробувань з холодоагентом R-114

Загалом, відносна похибка моделі у порівнянні з експериментами склала від 8.16% до 150% (табл. Б.11).

Слід враховувати, що автор [81] стикався з нормативними обмеженнями щодо дослідів з холодоагентами, що спричинило спочатку обмеження за розміром колби (не більше 100 мл), а потім і до вимушеної зупинки дослідів, що могло призвести до недостатнього розміру вибірки проведених випробувань і, отже, позначилося на якості отриманих даних.

Слід враховувати, що автор [81] не наводить відомостей про те, скільки речовини було отримано у формі крапель та аерозолю, що також ускладнює визначення справжньої кількості рідкої фази після вибухового закипання.

Температури виливів рідкої фази для всіх обчислювальних експериментів мають початкову температуру рівну температурі кипіння відповідної речовини при 1 атм, що узгоджується з дослідженням [81].

## 3.7 Модель кипіння потоків перегрітої рідини

### 3.7.1 Математичний опис моделі кипіння потоку перегрітої рідини

При частковій розгерметизації апарата в довкілля протягом певного часу витікають потоки газів і рідин. Газові потоки формують вторинну газову хмару (хмара тривалого викиду). Рідкі потоки у свою чергу формують вилив рідкої фази. Однак, якщо тиск рівноважної пари рідкого потоку перевищує атмосферний тиск, відбувається кипіння потоку і частина рідкої фази переходить у парову фазу. Оскільки спалахове кипіння (flash boiling) відбувається за короткий час, теплообмін із навколишнім середовищем не розглядається. Теплообмін потоку газової фази, що розсіюється, з повітрям пізніше може враховуватися в моделях розсіювання.

Вхідні дані:

1) $T_{l0}$ – температура вихідного рідкого потоку для всіх моментів часу моделювання витоку;

2) $F_{lmix0}$ – витрата [моль/с] вихідного рідкого потоку для всіх моментів часу моделювання витоку;

3) $x_0$ – вектор складу [мольні частки] вихідного рідкого потоку для кожного моменту часу моделювання витоку;

4) $P_{atm}$ – атмосферний тиск [Па].

Вихідні дані:

1) $F_{lmix}$ – витрата [моль/с] охолодженого після кипіння потоку рідкої фази для кожного моменту часу моделювання витоку;

2) $F_{evap}$ – витрата [моль/с] газового потоку, що утворився в результаті кипіння для кожного моменту часу витоку;

3) $T_g$ – температура [K] газового потоку, що утворився в результаті кипіння для кожного моменту часу витоку;

4) $T_l$ – температура [K] охолодженого після кипіння потоку рідкої фази для кожного моменту часу моделювання витоку;

5) $Y$ – склад [мольні частки] газового потоку, що утворився в результаті кипіння для кожного моменту часу моделювання;

6) $x$ – склад [мольні частки] охолодженого після кипіння потоку рідкої фази для кожного моменту часу моделювання витоку.

**Кипіння вихідної перегрітої рідкої фази**

Запишемо тепловий баланс для рідкої фази киплячої за рахунок власної внутрішньої енергії [8]

$$H_{evap}(T_l, y) \cdot dF_{evap} = -F_{lmix} \cdot C_{plmix}(T_l, x) \cdot dT_l, \tag{3.44}$$

де $H_{evap}(T_l, y)$ – питома теплота випаровування [Дж/моль] рідкої фази при температурі рідкої фази $T_l$ [К] та складу суміші $y$; $F_{evap}$ – потік [моль/с] випареної суміші; $F_{lmix}$ – потік [моль] рідкої фази суміші; $C_{plmix}(T_l)$ – теплоємність [Дж/(моль·К)] рідкої фази за температури $T_l$ [К].

Задамо умову фазової рівноваги між рідкою фазою та парою. Запишемо слідство законів Рауля та Дальтона

$$y_i = k_i x_i, \tag{3.45}$$

де $x_i$ – вміст [мольні частки] і-го компонента в рівноважній рідкій фазі; $y_i$ – вміст [мольні частки] і-го компонента в рівноважній паровій фазі; $k_i$ – коефіцієнт розподілу.

Коефіцієнт розподілу визначається як

$$k_i = \frac{P_{sat_i}(T_l)}{P_\Sigma}, \tag{3.46}$$

де $P_{sat_i}(T_l)$ – тиск [Па] насиченої пари і-го компонента при температурі $T_l$; $P_\Sigma$ – сумарний тиск [Па] рівноважної парової фази.

Сумарний тиск рівноважної парової фази можна визначити, виходячи із закону Рауля

$$P_{\Sigma} = \sum_{i=1}^{nsubst}\left(P_{sat_i}(T_l) \cdot x_i\right), \tag{3.47}$$

де $nsubst$ – кількість компонентів у суміші.

Загальне рівняння матеріального балансу має вигляд

$$dF_{lmix} = -dF_{evap}. \tag{3.48}$$

Запишемо рівняння матеріального балансу за компонентами

$$d(F_{lmix} \cdot x_i) = -y_i \cdot d\left(F_{evap}\right). \tag{3.49}$$

Розкривши ліву частину рівняння (3.49), отримаємо

$$F_{lmix}dx_i + x_i dF_{lmix} = -y_i \cdot d\left(F_{evap}\right). \tag{3.50}$$

З урахуванням (3.45) і (3.48), отримаємо

$$F_{lmix}dx_i - x_i dF_{evap} = -x_i k_i dF_{evap}, \tag{3.51}$$

звідки отримуємо рівняння

$$\frac{dx_i}{dF_{evap}} = \frac{x_i(1-k_i)}{F_{lmix}}. \tag{3.52}$$

Аналогічно з (3.44) випливає

$$\frac{dT_l}{dF_{evap}} = -\frac{H_{evap}(T_l,y)}{F_{lmix}\cdot C_{plmix}(T_l,x)}. \quad (3.53)$$

З рівняння (3.48) також випливає

$$\frac{dF_{lmix}}{dF_{evap}} = -1. \quad (3.54)$$

Запишемо рівняння теплового балансу для утвореної внаслідок випаровування газової фази

$$F_{evap}C_{pg}(T_g,Y)dT_g = -C_{pg}(T_l,y)(T_g + dT_g - T_l)dF_{evap}, \quad (3.55)$$

де $C_{pg}(T_g,Y)$ – питома теплоємність [Дж/(моль·К)] утвореної в результаті випаровування газової фази при температурі $T_g$ та складі $Y$; $T_g$ – температура утвореної газової фази.

З рівняння (3.55) випливає

$$\frac{dT_g}{dF_{evap}} = \frac{C_{pg}(T_l,y)(T_l-T_g)}{F_{evap}C_{pg}(T_g,Y)+C_{pg}(T_l,y)dF_{evap}}. \quad (3.56)$$

Матеріальний баланс щодо компонентів для утвореної газової фази має вигляд

$$Y_iF_{evap} + x_iF_{lmix} = x_{0_i}F_{lmix0}, \quad (3.57)$$

де $Y_i$ – мольна частка і-го компонента в утвореній у результаті кипіння газовій фазі; $x_{0_i}$ – мольна частка і-го компонента в рідкій фазі у початковий момент часу; $N_{lv0}$ – вихідна кількість [моль] перегрітої рідкої фази в апараті.

З рівняння (3.57) випливає

$$Y_i = \frac{x_{0_i} F_{lmix0} - x_i F_{lmix}}{F_{evap}}. \quad (3.58)$$

Система алгебро-диференціальних рівнянь (3.52 – 3.54), (3.56), (3.58) описує спрощену модель квазіміттєвого випаровування перегрітої рідини, надаючи можливість визначити кількості газової $F_{evap}$ і рідкої $F_{lmix}$ фаз, температури газової $T_g$ і рідкої $T_l$ фаз, а також склади газової $Y$ та рідкої $x$ фаз в результаті квазіміттєвого випаровування. Вирішення такої системи рівнянь слід зупинити при виконанні наступної умови (умова припинення процесу кипіння)

$$P_\Sigma < P_{atm}, \quad (3.59)$$

де $P_{atm}$ – атмосферний тиск.

### 3.7.2 Обчислювальні експерименти

Розрахунок закипання потоку перегрітої рідини в модулі кипіння потоків порівнювався з розрахунком, виконаним за формулами (3.44 – 3.59). Вихідні дані наведено у табл. Б.12.

Розрахункову схему тестового розрахунку в інформаційній системі оцінки ризику наведено на рис. 3.16.

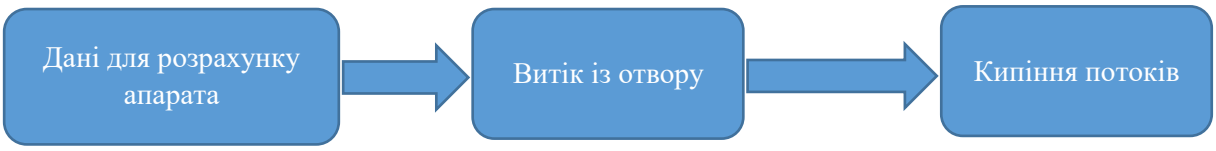



Рисунок 3.16 – Розрахункова схема проєкту для моделювання квазіміттєвого руйнування (квазіміттєвого викиду при розриві оболонки апарата)

Результати розрахунку витоку для кожної секунди розрахункового часу наведені у табл. Б.13.

Результати розрахунку кипіння потоків для кожної секунди розрахункового часу із застосуванням інформаційної системи оцінки ризику, а також порівняння з повірочним розрахунком за формулами (3.44 – 3.59) наведено у табл. Б.14 і табл. Б.15 для охолодженого рідкого та утвореного газового потоків відповідно.

### 3.7.3 Висновки за результатами верифікації моделі кипіння потоків перегрітої рідини

Отримані результати показують відповідність розрахунків у модулі кипіння потоків інформаційної системи оцінки ризику розрахункам, заснованим на теоретичних викладках (3.44 – 3.59). Температура охолодженого потоку рідкої фази по всьому проміжку моделювання відповідає температурі кипіння пропану 231 K при 1 атм. Нульовий вміст азоту в рідкому потоці також говорить про переважне випаровування азоту внаслідок його значно більшої летючості, ніж пропану. Витрата початкового потоку перегрітої рідини дорівнює сумі потоків газу та рідини, отриманих в результаті кипіння протягом усього модельного часу, що підтверджує закон збереження матерії.

## 3.8 Модель формування виливу небезпечної рідини

### 3.8.1 Математичний опис моделі

Нижче наведено методику розрахунку основних вихідних параметрів виливу, що утворюється під час витоку рідкої фази з аварійного отвору. Ці параметри

необхідні для розрахунку параметрів наступного тривалого випаровування рідкої фази.

Загальна кількість рідкої фази у виливі, моль

$$N_{pool} = \int_0^{\tau_f} F_{liq}(\tau) d\tau, \tag{3.60}$$

де $\tau$ – час [с]; $\tau_f$ – час [с] моделювання викиду через аварійний отвір; $F_{liq}(\tau)$ – функція залежності витрати [моль/с] залишкової охолодженої рідкої фази від часу (після кипіння перегрітої рідини).

Кількість рідкої фази в басейні за компонентами, моль

$$N_{pool,comp_i} = \int_0^{\tau_f} F_{liq}(\tau) \cdot x_i(\tau) d\tau, \tag{3.61}$$

де $x_i(\tau)$ – функція залежності мольної частки і-го компонента в потоці рідкої фази від часу.

Мольні частки компонентів суміші у виливі

$$x_{pool_i} = \frac{N_{pool,comp_i}}{N_{pool}}. \tag{3.62}$$

Щоб визначити початкову температуру виливу, необхідно знайти молярну ентальпію суміші у басейні

$$H_{pool} = \frac{1}{N_{pool}} \cdot \sum_{i=1}^{nsubst} \int_0^{\tau_f} F_{liq}(\tau) \cdot x_{F_i}(\tau) \cdot H_i\left(T_{liq,\tau}\right) d\tau, \tag{3.63}$$

де $x_{F_i}(\tau)$ – мольна частка і-го компонента в залишковому потоці рідини в момент часу $\tau$; $H_i\left(T_{liq,\tau}\right)$ – молярна ентальпія і-го компонента в залишковому потоці рідини при температурі потоку $T_{liq,\tau}$ у момент часу $\tau$.

З іншого боку, молярна ентальпія рідкого виливу визначається як

$$H_{pool} = \sum_{i=1}^{nsubst} x_{pool_i} \cdot H_i\left(T_{pool}\right). \quad (3.64)$$

З (3.63) і (3.64) можна отримати рівняння з одним невідомим $T_{pool}$ – початковою температурою (як вихідної величини для моделі випаровування) рідкого виливу, що утворився

$$\sum_{i=1}^{nsubst} x_{spill_i} \cdot H_i\left(T_{pool}\right) =$$
$$= \frac{1}{N_{spill}} \cdot \sum_{i=1}^{nsubst} \int_0^{\tau_f} F_{liq}(\tau) \cdot x_{F\,i}(\tau) \cdot H_i\left(T_{liq,\tau}\right) d\tau. \quad (3.65)$$

Площа поверхні виливу залежить від наявності чи відсутності дамби (обвалування). За наявності дамби площа виливу обмежується площею, обмеженою дамбою. За відсутності дамби вилив є вільним і його площа залежить від властивостей рідини та підстилаючої поверхні.

### 3.8.2 Верифікація

**Вихідні дані**

Для проведення обчислювальних експериментів в інформаційній системі оцінки ризиків було зібрано розрахункову схему (рис. 3.17), відповідну сценарію квазіміттєвого руйнування апарата (розрив оболонки).




Рисунок 3.17 – Розрахункова схема для перевірки адекватності моделі формування виливу

Параметри джерела небезпеки наведено у табл. Б.16.

Параметри розрахунку наведено у табл. 3.5.

Таблиця 3.5 – Додаткові параметри розрахунку викиду через аварійний отвір

| № п/п | Найменування параметра | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| 1 | Час моделювання | 300 | с |
| 2 | Крок за часом | 1 | с |
| 3 | Перекриття Вхідного потоку 1 | не відбувається | - |
| 4 | Перекриття Вхідного потоку 2 | не відбувається | - |
| 5 | Перекриття вихідного потоку 3 | не відбувається | - |
| 6 | Площа обвалування | 1000 | $м^2$ |
| 7 | Висота стін обвалування | 2 | м |

**Опис перевірочних розрахунків**

Перевірка матеріального та теплового балансів здійснюється на підставі даних, отриманих за допомогою модулів Квазіміттєве руйнування, Кипіння потоків, Формування виливу.

Матеріальний баланс

Кількість [моль] сформованого виливу визначається як

$$N_{tot} = N_{initial_pool} + N_{leak}, \tag{3.66}$$

де $N_{initial_pool}$ – кількість [моль] первинного виливу, що розраховується за допомогою програмного модуля; $N_{leak}$ – кількість [моль] рідкої фази, що надійшла у вилив через витікання з обривів патрубків.

Модуль Кипіння потоків містить витрату результуючого потоку рідкої фази. У контексті даної моделі витрата, температура та склад даного потоку є незмінними у часі. Тоді

$$N_{leak} = F_{\Sigma_boiled_liq_leak} \cdot t, \tag{3.67}$$

де $F_{\Sigma_boiled_liq_leak}$ – витрата [моль/с] результуючого рідкого потоку, що утворився в результаті складання залишкових рідких потоків з патрубків після кипіння; $t$ – час [с] моделювання.

Вектор кількостей компонентів у первинному виливі визначається як

$$N_{comp_initial_pool} = N_{initial_pool} \cdot X_{initial_pool}, \tag{3.68}$$

де $X_{initial_pool}$ – вектор складу [мольні частки] первинного виливу, одержуваний за допомогою модуля Квазіміттєве руйнування.

Вектор кількостей компонентів, що надійшли у вилив разом із потоком, визначається як

$$N_{comp_flow} = N_{leak} \cdot X_{leak}, \tag{3.69}$$

де $X_{leak}$ – вектор складу [мольні частки] результуючого рідкого потоку, одержуваний за допомогою модуля Квазіміттєве руйнування.

Вектор кількостей компонентів у сформованому виливі визначається як

$$N_{comp_tot} = N_{comp_initial_pool} + N_{comp_flow}. \quad (3.70)$$

Вектор складу сформованого виливу можна визначити як

$$X_{tot} = \frac{N_{comp_tot}}{N_{tot}}. \quad (3.71)$$

Тепловий баланс

Температуру сформованого виливу можна приблизно оцінити так

$$T_{tot} = \frac{N_{initial_pool} \cdot c_{initial_pool} \cdot T_{initial_pool} + N_{leak} \cdot c_{leak} \cdot T_{leak}}{N_{initial_pool} \cdot c_{initial_{pool}} + N_{leak} \cdot c_{leak}}, \quad (3.72)$$

де $c_{initial_pool}$, $c_{leak}$ – питомі теплоємності [Дж/(моль·К)] первинного виливу та результуючого рідкого потоку, що утворився в результаті складання залишкових рідких потоків з патрубків після кипіння відповідно; $T_{initial_pool}, T_{leak}$ – температури [К] первинного виливу та результуючого рідкого потоку, що утворився в результаті складання залишкових рідких потоків з патрубків після кипіння відповідно.

Теплоємності (3.72) визначаються з урахуванням складів відповідних сумішей, а також їх температур.

**Об'єм виливу**

Обсяг виливу, що утворився, можна оцінити таким чином

$$V_{pool} = \frac{m_{pool}}{\rho_{pool}}, \quad (3.73)$$

де $m_{pool}$ – маса [кг] виливу; $\rho_{pool}$ – густина [кг/м$^3$] виливу.

Густину виливу можна визначити за загальновідомою формулою

$$\rho_{pool} = \frac{M_{pool}}{\sum_{i=1}^{nsubst} \frac{X_{tot_i} M_i}{\rho_i}}, \tag{3.74}$$

де $M_{pool}$ – молярна маса [кг/моль] виливу; $nsubst$ – кількість індивідуальних компонентів виливу; $X_{tot_i}$ – мольна частка і-го компонента у виливі; $M_i$ – молярна маса [кг/моль] і-го компонента; $\rho_i$ – густина і-го компонента.

Маса виливу визначається як

$$m_{pool} = M_{pool} \cdot N_{tot}. \tag{3.75}$$

Глибина виливу визначається так

$$h_{pool} = \frac{V_{pool}}{S_{pool}}, \tag{3.76}$$

де $S_{pool}$ – площа, обмежена обвалуванням.

**Аналіз отриманих результатів**

Результати порівняння перевірочних розрахунків матеріального балансу за формулами (3.66 – 3.71) та обчислень, виконаних в інформаційній системі оцінки ризику, наведено у табл. 3.6.

Таблиця 3.6 – Порівняння перевірочних розрахунків та обчислень у програмному модулі для матеріального балансу

| | Модуль Формування виливу | Перевірочний розрахунок | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| Кількість виливу, моль | $6.67 \cdot 10^6$ | $6.66 \cdot 10^6$ | 0.15015 |
| Мольна частка азоту | 0 | 0 | 0 |
| Мольна частка пропану | 0.763 | 0.764 | -0.13089 |

Продовження таблиці 3.6

| | | | |
|---|---|---|---|
| Мольна частка бутану | 0.191 | 0.190 | 0.526316 |
| Мольна частка гексану | 0.046 | 0.046 | 0 |

Спостерігається практично повна відповідність обчислень програмного модуля повірочним розрахункам у частині матеріального балансу.

Результати порівняння перевірочного розрахунку теплового балансу за формулою (3.72) та обчислень, виконаних у програмному модулі, наведено у табл. 3.7.

Таблиця 3.7 – Порівняння перевірочних розрахунків та обчислень у програмному модулі для теплового балансу

| | Модуль Формування виливу | Перевірочний розрахунок | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| Температура виливу, К | 236.63 | 238.525 | -0.79447 |

Спостерігається достатня відповідність обчислень у програмному модулі повірочним розрахункам для теплового балансу.

Результати порівняння перевірочного розрахунку обсягу та глибини виливу за формулами (3.73 – 3.76) та обчислень, виконаних у програмному модулі, наведено у табл. 3.8.

Таблиця 3.8 – Порівняння перевірочних розрахунків та обчислень у програмному модулі для об'єму та глибини виливу

| | Модуль Формування виливу | Перевірочний розрахунок | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| Об'єм виливу, $м^3$ | 531.6 | 532.0 | -0.07518797 |
| Глибина виливу, м | 0.532 | 0.532 | 0 |

Спостерігається практично повна відповідність обчислень у програмному модулі повірочним розрахункам для об'єму та глибини виливу.

## 3.9 Модель випаровування виливу небезпечної рідини

Модель призначена для оцінки динаміки витрати, температури та складу потоку газу, що утворюється в результаті випаровування виливу рідкої фази з поверхні виливу за рахунок дифузійного механізму або за рахунок процесу кипіння.

Модель реалізована відповідно до [17], оскільки враховує багатокомпонентний склад розливу, теплообмін із ґрунтом, атмосферою та надходження тепла за рахунок сонячної радіації. Розглядається вплив швидкості вітру на інтенсивність випаровування з поверхні виливу (рис. 3.18).

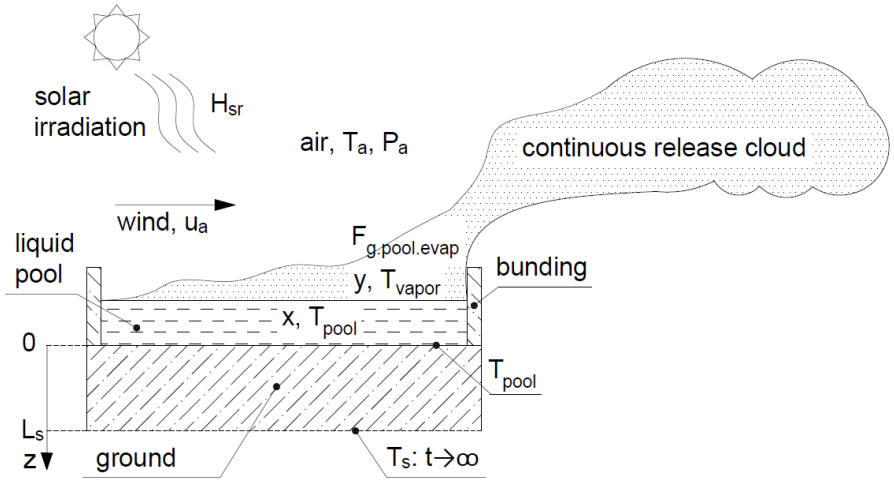



Рисунок 3.18 – Модель випаровування багатокомпонентного виливу

Моделі випаровування, наведені в [8, 12, 82 – 84] не розглядають випаровування багатокомпонентної суміші, тому їх не можна використовувати в контексті задач дисертації.

### 3.9.1 Математичний опис моделі

Наведена нижче модель враховує наступне:

1) виконується умова $h_0 << d$, де $h_0$ [м] товщина рідкого виливу в початковий момент часу, d [м] діаметр виливу;

2) потоки енергії, що впливають на процес випаровування, такі як: потік тепла від атмосферного повітря, потік тепла від ґрунту (від поверхні, що підстилає), потік випромінювання від Сонця (вся радіація поглинається рідкою фазою);

3) теплообмін між рідким виливом та навколишнім середовищем через бічну поверхню виливу не враховується (з п. 1);

4) температура рідини рівномірна і однакова у всьому шарі рідини, що відповідає повному та швидкому перемішування (з п. 1);

5) математична модель враховує вплив багатокомпонентного складу рідкої фази для кожного моменту часу на властивості суміші, а також подальшу зміну складу внаслідок процесу випаровування;

6) модель враховує залежність фізичних властивостей компонентів рідини від температури.

Температурні залежності фізичних властивостей рідких компонентів визначалися відповідно до [77].

Фізичні властивості суміші визначалися за відповідними адитивними формулами [73].

Молекулярна маса суміші [кг/моль] визначається за формулою

$$M_{mix} = \sum_{i=0}^{N} x_i M_i. \tag{3.77}$$

Теплоємність суміші [Дж/(моль·К)] визначається за формулою

$$C_{pL_mix} = \sum_{i=0}^{N} x_i C_{pL}^{i}. \tag{3.78}$$

Густина [кг/м$^3$] визначається за формулою

$$\rho_{L_mix} = \frac{M_{mix}}{\sum_{i=0}^{N} \frac{x_i M_i}{\rho_i}}. \quad (3.79)$$

Теплота пароутворення [Дж/моль] визначається за формулою

$$L_{v_mix} = \sum_{i=0}^{N} x_i L_v^i. \quad (3.80)$$

Тиск насиченої пари [Па] визначається за формулою

$$P_{sv_mix} = \sum_{i=0}^{N} x_i P_{sv}^i. \quad (3.81)$$

Коефіцієнт дифузії пари у повітря [м$^2$/с] визначається за формулою

$$D_{v_mix} = \sum_{i=0}^{N} x_i D_v^i, \quad (3.82)$$

де $x_i$ – мольна частка і-го компонента суміші [моль/моль]; (N-1) – число компонентів суміші.

***Математичний опис рівнянь збереження***

Примітка: у цьому розділі для фізичних параметрів, що визначають властивості рідини, індекс позначення суміші опускається (наприклад: $D_{v_mix} \rightarrow D_v$).

Рівняння теплового балансу та балансу маси описані нижче [8]

$$\frac{d(h \cdot \rho_L \cdot C_{pL} \cdot T)}{dt} = H_s + H_a + H_{sr} - q_{v_m} \cdot L_v, \quad (3.83)$$

$$\frac{dh}{dt} = -\frac{q_v}{\rho_L}, \quad (3.84)$$

де h – товщина шару рідини [м]; $C_{pL}$ – теплоємність рідини [Дж/(кг·К)]; $\rho_L$ – густина рідини [кг/м$^3$]; $L_v$ – теплота пароутворення [Дж/кг]; T – температура рідини [К]; $H_s$ – тепловий потік ґрунт-рідина [Дж/(м$^2$·с)]; $H_a$ – тепловий потік повітря-рідина [Дж/(м$^2$·с)]; $H_{sr}$ – тепловий потік сонячного випромінювання [Дж/(м$^2$·с)]; $q_{v_m}$ – масова швидкість випаровування з одиниці поверхні [кг/(м$^2$·с)].

Додаткове рівняння балансу маси для всього рідкого виливу, пов'язане з молярною інтенсивністю випаровування

$$\frac{dN_{mol}}{dt} = -q_{v_{mol}} \cdot S, \tag{3.85}$$

де $N_{mol}$ – кількість речовини у рідині [моль]; t – час [с]; $q_{v_{mol}}$ – інтенсивність випаровування з поверхні виливу [моль/(м$^2$·с)].

Баланс маси для і-го компонента можна виразити як

$$\frac{d(N_{mol} \cdot x_i)}{dt} = -q_{v_{mol}} \cdot S \cdot y_i, \tag{3.86}$$

де $x_i$ – молярна частина і-го компонента рідкої фази (РФ); $y_i$ – молярна частина і-го компонента газової фази (ГФ).

Розкриємо диференціал у рівнянні (3.86)

$$N_{mol} \frac{dx_i}{dt} + x_i \frac{dN_{mol}}{dt} = -q_{v_{mol}} \cdot S \cdot y_i. \tag{3.87}$$

Після підстановки рівняння (3.85) в (3.87) отримаємо

$$\frac{dx_i}{d\tau} = \frac{q_{v_{mol}} \cdot S}{N_{mol}} \cdot (x_i - y_i) = \frac{q_{v_m}}{h \cdot \rho_L} \cdot (x_i - y_i). \tag{3.88}$$

Запишемо закон Рауля [67]

$$P_i(T) = P_{sv}^i(T) \cdot x_i, \tag{3.89}$$

де $P_i(T)$ – парціальний тиск [Па] і-го компонента в рівноважній ГФ (тут розглядається тільки рівновага ГФ/РФ) за температури Т [К]; $P_{sv}{}^i(T)$ – тиск [Па] насиченої пари і-го компонента при температурі Т [К].

Тиск насиченої пари за даної температури визначається різними видами температурних залежностей, серед яких часто застосовується рівняння Антуана.

Запишемо наслідок рівняння Дальтона [67]

$$P_i(T) = P_{tot}(T) \cdot y_i, \tag{3.90}$$

де $P_{tot}(T)$ – повний тиск [Па] ГФ, що випаровується з поверхні виливу.

Повний тиск [Па] ГФ, що випаровується з поверхні виливу, можна розрахувати таким чином

$$P_{tot}(T) = \sum_{i=0}^{N} P_i(T), \tag{3.91}$$

де $P_i(T)$ – парціальний тиск [Па] і-го компонента.

З рівнянь (3.90) та (3.91) випливає [67]

$$y_i = \frac{P_i(T)}{\sum_{i=0}^{N} P_i(T)}. \tag{3.92}$$

З рівнянь (3.89) та (3.92) випливає

$$y_i = \frac{P_{sv}^i(T)}{\sum_{i=0}^{N}(P_{sv}^i(T) \cdot x_i)} \cdot x_i = k_i(T) \cdot x_i, \tag{3.93}$$

де $k_i(T)$ коефіцієнт розподілу речовини між ГФ та РФ при температурі Т [К].

Тоді з (3.88), з урахуванням (3.93), випливає, що

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{q_{v_{mol}}}{N_{mol}} \cdot (x_i - k_i(T) \cdot x_i) = \frac{q_{v_m}}{h \cdot \rho_L} \cdot (x_i - k_i(T) \cdot x_i). \quad (3.94)$$

Важливо перевіряти наявність процесу кипіння суміші у кожний момент часу моделювання, щоб правильно вибрати формулу для розрахунку швидкості випаровування.

Відомо, що кипіння – інтенсивний процес пароутворення, який досягається за умови, що тиск насиченої пари суміші, що випаровується, дорівнює або перевищує атмосферний тиск [8]. Тому температура кипіння $T_b$ [K] суміші заданого складу при атмосферному тиску визначається чисельно з рівняння

$$P_a = \sum_{i=0}^{N} x_i P_{sv}^i(T_b). \quad (3.95)$$

**Тепловий потік від ґрунту**

Тепловий потік $H_s$ [J/(m$^2$·s})] від ґрунту можна визначити, розглянувши загальновідому одновимірну задачу теплопровідності

$$\frac{\partial T}{\partial t} = a_s \frac{\partial^2 T}{\partial z^2}, \quad (3.96)$$

де T(x,t) – температура [K] ґрунту у певній точці у відомий момент часу; z – координата [м] точки в товщі ґрунту (z = 0 м відповідає поверхні землі); t – час [c]; $a_s$ – коефіцієнт температуропровідності ґрунту.

Вихідні умови

$$T(z, 0) = T_s \text{ для } \forall z \in [0; L_s). \quad (3.97)$$

Граничні умови

$$T(0, t) = T_p;\ T(L_s, t) = T_s \text{ для } \forall t \in [0; +\infty], \quad (3.98)$$

де $T_s$ – температура ґрунту [К] у точці з координатою $L_s$ [м]; $T_p$ – температура [К] рідини; $L_s$ – глибина [м] у товщі ґрунту, для якої температура $T_s$ залишається незмінною в часі в умовах випаровування виливу.

Приймемо $L_s=10\cdot h_0$, де $h_0$ початкова глибина [м] виливу рідкої фази.

Тоді тепловий потік від ґрунту до виливу дорівнює

$$q(t) = \lambda_s \cdot \frac{\partial T(0,t)}{\partial x}. \tag{3.99}$$

Тепловий потік $H_a$ [W/m$^2$] від атмосферного повітря до виливу визначається за формулами [8]

$$Pr_a = \frac{\upsilon_a}{D_v}, \tag{3.100}$$

$$Re = \frac{u_a d}{\upsilon_a}, \tag{3.101}$$

$$Nu = 0.037 \cdot Pr_a^{\frac{1}{3}} \cdot Re^{0.8}, \tag{3.102}$$

$$k_a = Nu \cdot \frac{\lambda_a}{d}, \tag{3.103}$$

$$H_a = k_a(T_a - T), \tag{3.104}$$

де $\upsilon_a$ – кінематична в'язкість [м$^2$/с] повітря; $D_v$ – коефіцієнт дифузії [м$^2$/с] парів у повітрі; $u_a$ – швидкість вітру [м/с] на висоті h = 10 м; d – діаметр [м] виливу; $\lambda_a$ – коефіцієнт теплопровідності [Вт/(м·К)] повітря; $k_a$ – коефіцієнт теплопередачі [Вт/(м$^2$·К)]; $T_a$ – температура повітря [К]; T – температура [К] рідини; $Pr_a$ – критерій Прандтля для повітря; Re – критерій Рейнольдса; Nu – критерій Нуссельта.

Примітка: коефіцієнт дифузії парів у повітря $D_v$ розрахований для середньої температури $T_{mid}=0.5\cdot(T_a+T)$ [83].

**Інтенсивність випаровування**

Масова швидкість випаровування [кг/(м$^2$·с)] визначається за формулами [8, 82]

$$k_m = C_m \cdot u_a^{0.78} \cdot d^{-0.11} \cdot Sc^{-0.67}, \tag{3.105}$$

$$q_{v_m} = k_m \cdot \frac{P_{sv} M}{RT}, \tag{3.106}$$

де $C_m = 0.004786$ – константа; $u_a$ – швидкість вітру [м/с] на висота h = 10 м; d – діаметр [м] виливу; Sc = 0.8 – число Шмідта; $P_{sv}$ – тиск [Па] насиченої пари; M – молекулярна маса [кг/моль] парів; R = 8.314 – газова постійна [Дж/(моль·K)]; T – температура [K] рідини у виливі.

Масова швидкість випаровування [кг/(м$^2$·с)] для рідини, що кипить при температурі кипіння $T_b$, визначається за формулою [8]

$$q_{v_m} = \frac{H_s(T_b)+H_a(T_b)+H_{sr}}{L_v(T_b)}. \tag{3.107}$$

Мольна швидкість випаровування суміші визначається за формулою

$$q_{v_{mol}} = \frac{q_{v_m}}{M}. \tag{3.108}$$

Молярна швидкість випаровування і-го компонента суміші визначається за формулою

$$q^i_{v_{mol}} = X_i \cdot q_{v_{mol}}. \tag{3.109}$$

Молярна інтенсивність випаровування і-го компонента суміші з усієї поверхні виливу визначається за формулою

$$q^{i}_{v_{mol_s}} = S \cdot X_i \cdot q_{v_{mol}}, \quad (3.110)$$

де S – площа [$m^2$] поверхні виливу.

Припускаємо, що температура утворюваної в результаті випаровування газової фази дорівнює температурі виливу (наслідок наявності фазової рівноваги у шарі розташованому безпосередньо над поверхнею виливу). Таке припущення є адекватним для випадку випаровування за рахунок кипіння, але може працювати значно гірше для випаровування за рахунок дифузійного переносу, особливо за високої складової турбулентної дифузії і градієнту концентрацій речовини, що випаровується, у повітрі. Подальшим розвитком даної моделі може бути усунення цієї неадекватності за рахунок врахування підмішування повітря у пограничному шарі над поверхнею виливу у випадку випаровування за рахунок дифузійного переносу.

### 3.9.2 Порівняння з експериментом Kawamura&Mackay 1987

У роботі [82] описані експерименти, в яких вимірювалися швидкості випаровування семи летких хімічних речовин з поверхні виливу за відомих метеорологічних умов, включаючи літні та зимові температури. Однак тільки для одного експерименту з випаровуванням пентану в наявності були всі необхідні для моделювання вихідні дані.

Вихідні дані експерименту [82] з випаром пентану наведено у табл. 3.9.

Таблиця 3.9 – Вихідні дані експерименту з вивчення процесу випаровування пентану

| № п/п | Найменування параметра | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| 1 | Речовина | пентан | - |
| 2 | Об'єм виливу | 7 | л |
| 3 | Площа поверхні випаровування виливу | 0.162 | $м^2$ |
| 4 | Діаметр виливу | 0.454 | м |
| 5 | Тривалість вимірів | 1.07 | год |
| 6 | Температура повітря | 23 | °С |
| 7 | Швидкість вітру на висоті 10 м | 17800 | м/год |
| 8 | Характер підстилаючої поверхні | просочений водою пісок | - |
| 9 | Теплопровідність просоченого водою піску | 7.5 | кДж/(м·год·°С) |
| 10 | Температуропровідність просоченого водою піску | 0.00252 | $м^2$/год |

Для проведення обчислювальних експериментів в інформаційній системі оцінки ризику було зібрано розрахункову схему (рис. 3.1).

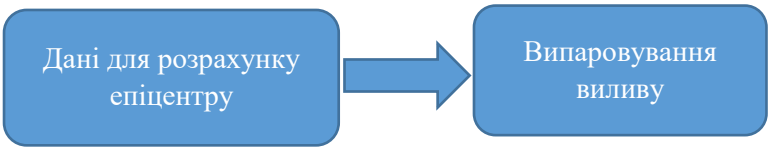



Рисунок 3.19 – Розрахункова схема для перевірки адекватності моделі випаровування

Графічна залежність питомої інтенсивності випаровування, отримана з допомогою інформаційної системи, наведено на рис. 3.20.

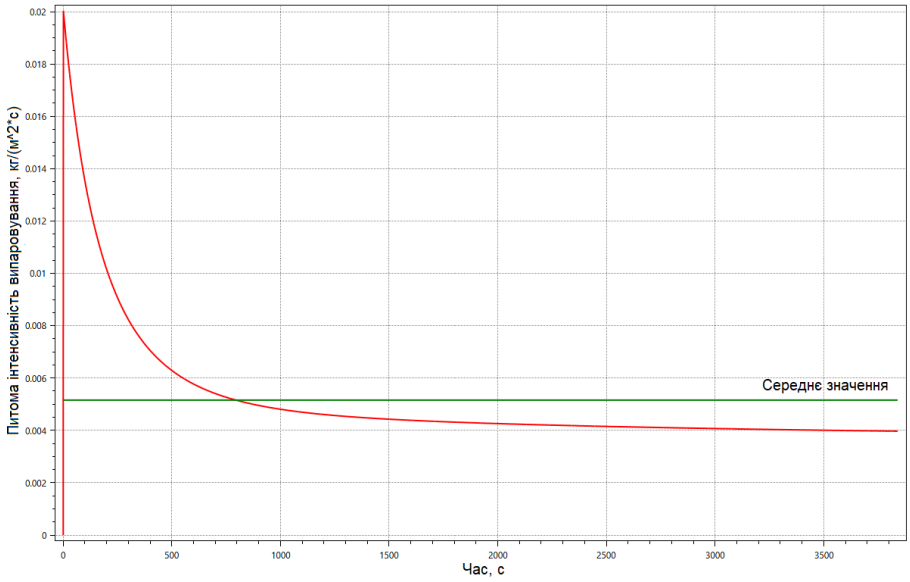



Рисунок 3.20 – Залежність питомої інтенсивності випаровування пентану від часу

Результати порівняння обчислювального експерименту з модулем Випаровування виливу та реального експерименту представлені у табл. 3.10.

Таблиця 3.10 – Порівняння розрахунку в інформаційній системі та експерименту

| Інтенсивність випаровування кг/(м$^2$·год) середня за час випробування | | Відносна похибка, % |
|---|---|---|
| Модель Випаровування виливу | Експеримент | |
| 18.576 | 23.00 | -19.2348 |

Отримано прийнятний результат. Варто зазначити, що параметри теплопровідності та температуропровідності було взято авторами дослідження [82] з літературних джерел. Насправді ці значення можуть відрізнятися, що може вплинути на результати моделювання та ступінь наближення розрахункових параметрів до істинних.

### 3.9.3 Дослідження кипіння кріогенної рідини

Експеримент проводився з рідким азотом (LN2), пролитим на полістирол [83]. Внутрішній розмір боксу становив 0.48 м х 0.48 м х 0.1 м. Товщина стінок та основи – 0.15 м. Бокс був повністю виготовлений з полістиролу, тому втратами тепла через стінки можна знехтувати через малу теплопровідність полістиролу. Основа та стінки боксу були оснащені вбудованими термопарами. Для подачі LN2 полістироловий бокс використовувалася відвідна трубка. Аналіз розпочинався після припинення заповнення. Сам бокс був поміщений в аеродинамічну трубу шириною 2.04 м, висотою 0.855 м і завдовжки 12 м, яка була спеціально розроблена для ізоляції боксу від природного вітру та забезпечення контрольованого та стабільного повітряного потоку. Вихідні дані експерименту з випаровування рідкого азоту представлені нижче (табл. 3.11).

Таблиця 3.11 – Вихідні дані експерименту з випаровування кріогенної рідини (азоту)

| № п/п | Параметр | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| 1 | Температура повітря | 309 | K |
| 2 | Атмосферний тиск | 101325 | Па |
| 3 | Швидкість вітру на висоті 10 м | 6.2 | м |
| 4 | Інсоляція | 0 | Вт/м$^2$ |
| 5 | Площа виливу | 0.23 | м$^2$ |
| 6 | Вихідна температура виливу | 77.35 | K |
| 7 | Вихідна товщина виливу | 0.08 | м |
| 8 | Мольна частка азоту | 1 | - |
| 9 | Тривалість експерименту | 600 | с |

Залежність температури виливу від часу, отримана із застосуванням інформаційної системи оцінки ризику, наведено на рис. 3.21.

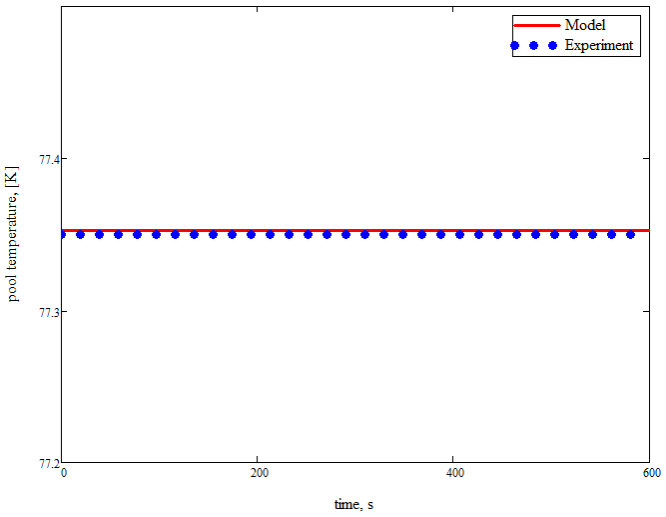



Рисунок 3.21 – Зміна температури виливу в часі: розрахунок у модулі Випаровування виливу та експеримент

Помітно практично повну відповідність температури виливу азоту даним експерименту (відносна похибка <1%) [83].

Зіставлення експерименту та розрахунку у модулі Випаровування виливу для зміни маси виливу у часі наведено на рис. 3.22.

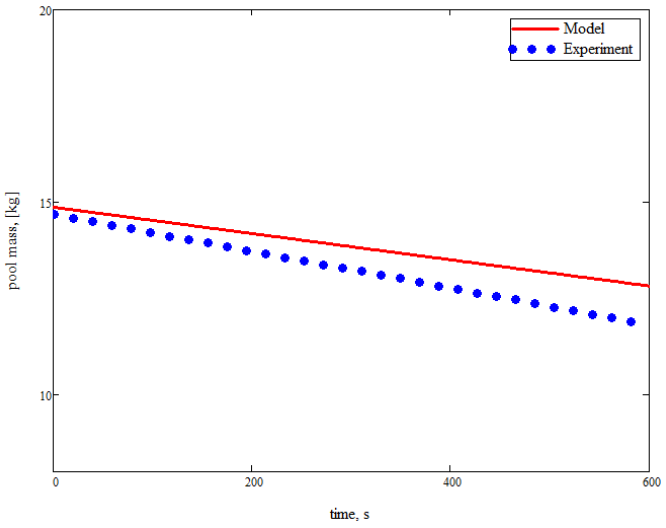



Рисунок 3.22 – Зміна маси виливу у часі: розрахунок у модулі Випаровування виливу та експеримент

Графік зміни маси виливу у часі показує хорошу відповідність розрахунку, виконаного в інформаційній системі оцінки ризику, експериментальним даним на рівні відносної похибки від 3.2% до 25.2% (табл. Б.17).

### 3.9.4 Випаровування етанолу та циклогексану в режимі без кипіння

Для перевірки моделі у разі випаровування органічних речовин у режимі без кипіння було проведено порівняння з експериментальними даними [84]. Були проведені експерименти з випаровування етанолу та циклогексану у виливі. Діаметр виливу – 0,74 м. Дослідження проводились на відкритому повітрі. Вилив нагрівався за допомогою водонагрівального змійовика, а масовий потік випаровування визначався шляхом зважування вмісту рідини до і після експерименту в кореляції з тривалістю експерименту. Дві термопари К-типу були поміщені в рідину: одна поблизу міжфазної зони, інша на дні басейну. Як температуру рідини використовувалося середнє значення обох температур. Швидкість вітру на висоті 10 м була надана метеорологічною службою Німеччини із вимірювальної станції на майданчику.

Результати порівняння розробленої моделі та експериментальних даних [84] для випаровування етанолу при різних температурах та швидкостях вітру представлені на рис. 3.23 – 3.25.

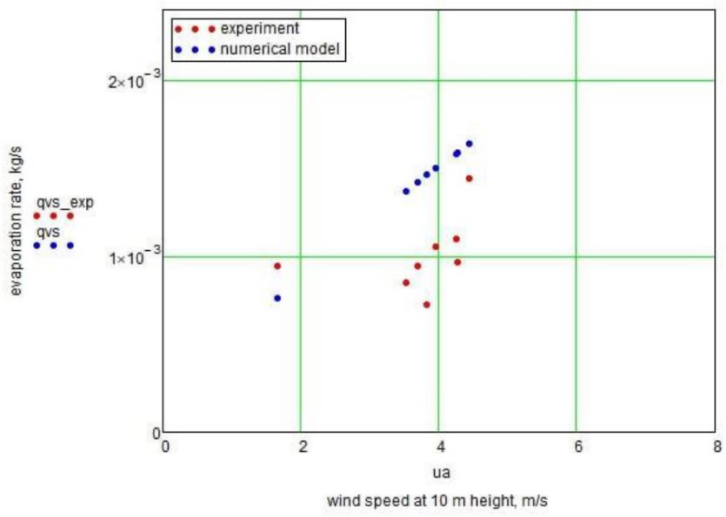



Рисунок 3.23 – Залежність швидкості випаровування від швидкості вітру (етанол, 303K)

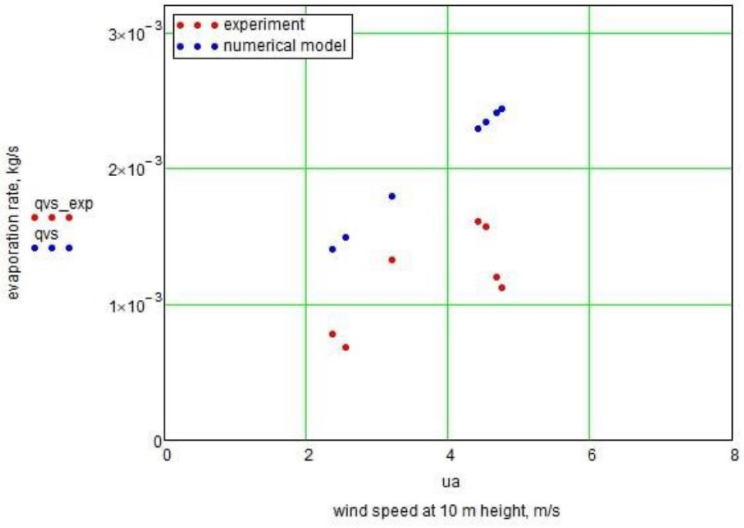



Рисунок 3.24 – Залежність швидкості випаровування від швидкості вітру (етанол, 310K)

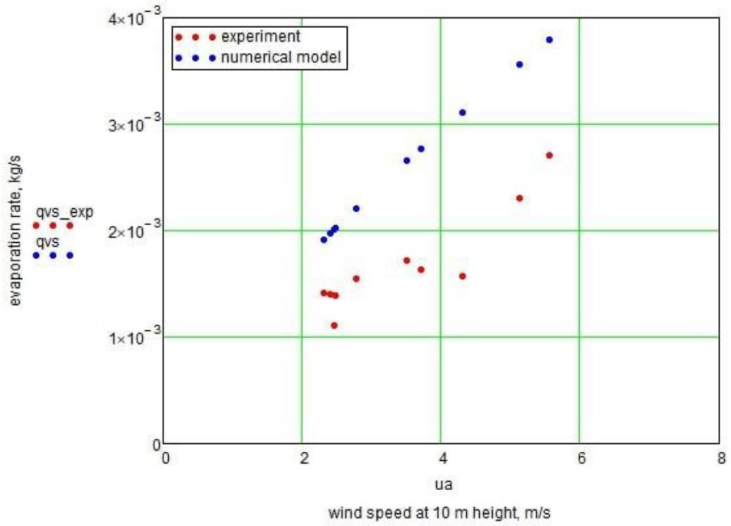



Рисунок 3.25 – Залежність швидкості випаровування від швидкості вітру (етанол, 317K)

Результати порівняння розробленої моделі та експериментальних даних для випаровування циклогексану при різних температурах та швидкостях вітру представлені на рис. 3.26 – 3.28.

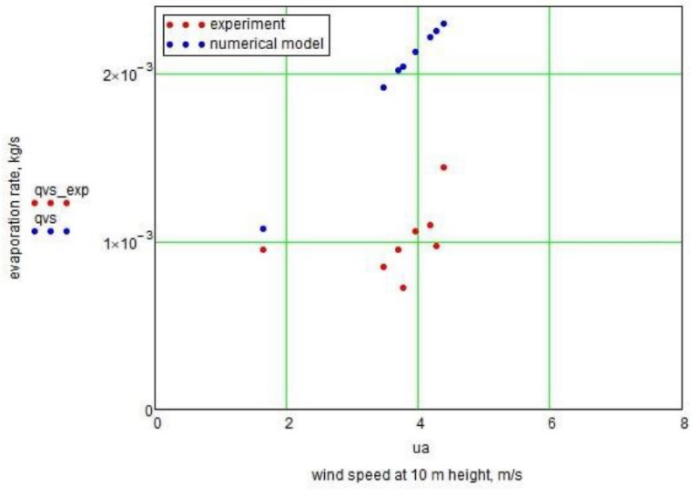



Рисунок 3.26 – Залежність швидкості випаровування від швидкості вітру (циклогексан, 303K)

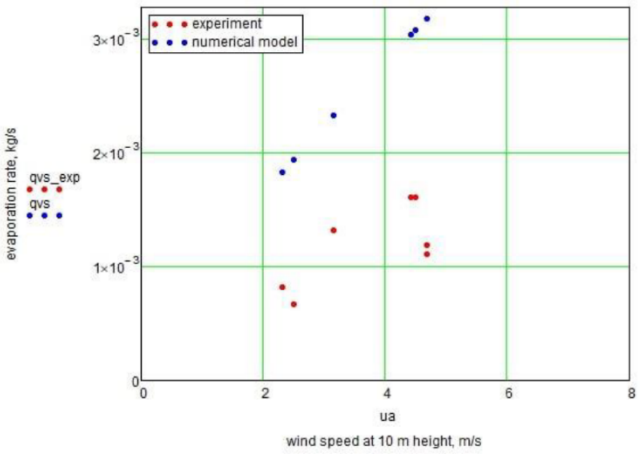



Рисунок 3.27 – Залежність швидкості випаровування від швидкості вітру (циклогексан, 310К)

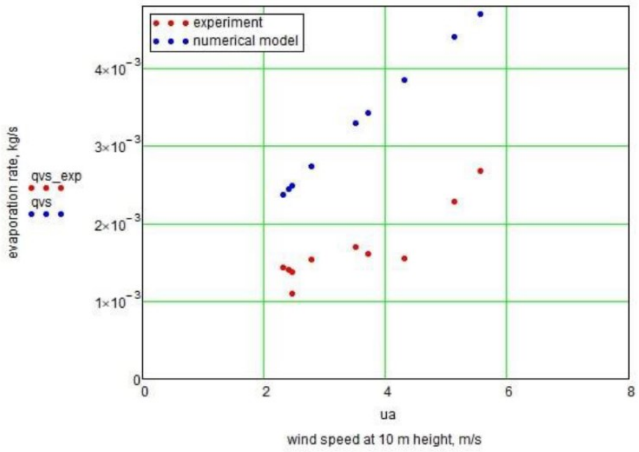



Рисунок 3.28 – Залежність швидкості випаровування від швидкості вітру (циклогексан, 317К)

Спостерігається практично однаковий кут нахилу лінійної залежності як експериментальних даних, так і даних математичної моделі випаровування виливу (рис. 3.23 – 3.28). Відносна похибка розрахунку для етанолу коливається у межах 13.92% – 120% (табл. Б.18 – Б.20).

Відносна похибка розрахунку для циклогексану коливається у межах 13.97% – 186.87% (табл. Б.21 – Б.23).

Слід зазначити, що експериментальні дані відзначаються низькою якістю (досить великий розкид інтенсивності випаровування для практично одного

значення швидкості вітру). Це свідчить про те, що не було задокументовано певного фактора, який здійснює такий істотний вплив на результати експерименту. Отже, необхідний пошук кращих експериментальних даних, або проведення експериментів з кращим плануванням і виконанням.

## 3.10 Усереднення результуючого газового потоку за часом

### 3.10.1 Математичний опис процедури складання та усереднення газових потоків

При повній чи частковій розгерметизації небезпечного об'єкта, у довкілля може надходити кілька газових потоків, параметри яких, взагалі кажучи, певним чином змінюються у часі. Багато спрощених моделей тривалого розсіювання газів (наприклад, Гаусові) не можуть працювати, по-перше, з кількома газовими потоками, по-друге, зі змінними в часі параметрами цих потоків.

Отже, завдання усереднення параметрів газових потоків полягає в тому, щоб визначити параметри результуючого газового потоку, як суперпозиції окремих потоків, і, шляхом усереднення за часом, визначити середні інтенсивність надходження, склад і температуру результуючого газового потоку.

Вхідні дані:

1) $R_{gas}$ – витрати [моль/с] всіх газових потоків для кожного моменту часу моделювання аварійної розгерметизації;

2) $Y$ – вектори складу [мольні частки] всіх газових потоків, що беруть участь у задачі, для кожного моменту часу моделювання аварійного витоку;

3) $T_{gas}$ – температури [K] всіх газових потоків для кожного моменту часу моделювання аварійного витоку.

Вихідні дані:

1) $R_{\Sigma gas}$ – витрата [моль/с] результуючого газового потоку для кожного моменту часу моделювання витоку;

2) $C_{\Sigma gas}$ – вектор складу [мольні частки] результуючого газового потоку для кожного моменту часу моделювання витоку;

3) $T_{\Sigma gas}$ – температура [K] результуючого газового потоку для кожного моменту часу моделювання витоку;

4) $R_{\Sigma gave}$ – середня за часом витрата [моль/с] результуючого газового потоку;

5) $T_{gave}$ – середня за часом температура [K] результуючого газового потоку;

6) $C_{\Sigma gave}$ – середній за часом склад [мольні частки] результуючого газового потоку.

**Визначення параметрів результуючого газового потоку**

Отримані масиви, що містять параметри газових потоків, потребують подальшої обробки: масиви параметрів газових фаз повинні бути складені за правилами адитивності для ідеальних сумішей і сформувати результуючий потік.

Визначимо інтенсивність результуючого газового потоку для моменту часу $i \cdot \Delta\tau$ таким чином

$$R_{\Sigma gas_i} = \sum_{j=1}^{n_{gf}} R_{gas_{i,j}}, \tag{3.111}$$

де $R_{gas_{i,j}}$ – інтенсивність [моль/с] надходження j-го газового потоку на момент часу $i \cdot \Delta\tau$ [с]; $n_{gf}$ – кількість газових потоків.

Визначимо концентрацію j-го компонента (у мольних частках) результуючого потоку газової фази за допомогою правил адитивності для ідеальних сумішей у момент часу $i \cdot \Delta\tau$

$$C_{\Sigma gas_{i,j}} = \frac{\sum_{k=1}^{n_{gf}} \left( Y_{i,j,k} \cdot R_{gas_{i,j}} \right)}{R_{\Sigma gas_i}}, \quad (3.112)$$

де $Y_{i,j,k}$ – мольна частка j-го компонента в k-му потоці в момент часу $i \cdot \Delta\tau$.

Визначимо температуру результуючого потоку газової фази за допомогою правил адитивності ідеальних сумішей у момент часу $i \cdot \Delta\tau$

$$T_{\Sigma gas_i} = \frac{\sum_{j=1}^{n_{gf}} \left( R_{gas_{i,j}} T_{gas_{i,j}} c_{gas_{i,j}} \right)}{\sum_{j=1}^{n_{lf}} \left( R_{gas_{i,j}} c_{gas_{i,j}} \right)}, \quad (3.113)$$

де $R_{gas_{i,j}}$ – інтенсивність [моль/с] витоку j-го потоку газу в момент часу $i \cdot \Delta\tau$; $T_{gas_{i,j}}$ – температура [К] j-го газового потоку на момент часу $i \cdot \Delta\tau$; $c_{gas_{i,j}}$ – теплоємність [Дж/(моль·К)] j-го газового потоку в момент часу $i \cdot \Delta\tau$.

**Визначення усереднених за часом параметрів результуючого газового потоку**

Отриманий масив, що містить параметри результуючого газового потоку, потребує подальшої обробки: масив параметрів повинен бути усереднений за часом.

Визначимо кількість [моль] результуючого газового потоку, яка витекла за час *time*

$$N_{\Sigma gf} = \sum_{i=0}^{\frac{time}{\Delta\tau}} \left( R_{\Sigma gas_i} \cdot \Delta\tau \right), \quad (3.114)$$

де $time$ – час [с] моделювання надходження газоподібної речовини до навколишнього середовища; $\Delta\tau$ – крок моделювання за часом [с] надходження газоподібної речовини до навколишнього середовища; $R_{\Sigma gas_i}$– інтенсивність надходження [моль/с] результуючого газового потоку в момент часу $i \cdot \Delta\tau$.

Визначимо кількості [моль] компонентів результуючого газового потоку, накопичених у навколишньому просторі за час моделювання витоку time

$$N_i = \sum_{j=0}^{\frac{time}{\Delta\tau}} \left( R_{\Sigma gas_j} \cdot C_{\Sigma gas_{i,j}} \cdot \Delta\tau \right), \quad (3.115)$$

де $C_{\Sigma gas_{i,j}}$ – мольна частка j-го компонента в результуючому газовому потоці в момент часу $i \cdot \Delta\tau$.

Вектор усереднених у часі концентрацій можна визначити як

$$C_{\Sigma gave} = \frac{N}{N_{\Sigma gf}}. \quad (3.116)$$

Середня температура результуючого газового потоку визначається як

$$T_{gave} = \frac{\sum_{i=0}^{\frac{time}{\Delta\tau}} \left( R_{\Sigma gas_i} \cdot T_{\Sigma gas_i} \cdot c_{p\Sigma gas_i} \cdot \Delta\tau \right)}{\sum_{i=0}^{\frac{time}{\Delta\tau}} \left( R_{\Sigma gas_i} \cdot c_{p\Sigma gas_i} \cdot \Delta\tau \right)}. \quad (3.117)$$

Визначимо усереднену інтенсивність надходження результуючого потоку в навколишній простір

$$R_{\Sigma gave} = \frac{N_{\Sigma gf}}{time}. \quad (3.118)$$

### 3.10.2 Обчислювальні експерименти. Верифікація

Розрахунок підсумовування газових потоків, а також їх усереднення проводився в модулі Усереднення потоків і порівнювався з розрахунком, виконаним за формулами (3.111 – 3.118). Було обрано сценарій – квазіміттєву руйнацію судини зі стислим газом. Потоки підібрані так, що речовини, що

витікають, є газами за умов навколишнього середовища. Початкові дані для моделювання наведені у табл. Б.24.

Розрахункова схема тестового розрахунку інформаційної системи оцінки ризику наведено на рис. 3.29.




Рисунок 3.29 – Розрахункова схема проєкту для моделювання усереднення газових потоків

Результати розрахунку витоку для кожного фланця наведено в табл. Б.25 – Б.27.

Усереднені за часом параметри результуючого газового потоку наведено у табл. 3.12.

Таблиця 3.12 – Усереднені за часом параметри результуючого газового потоку

| № п/п | Найменування величини | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| 1 | Витрата | 610.60 | моль/с |
| 2 | Температура | 295.37 | K |
| 4 | Мольна частка метану | 0.4522 | - |
| 5 | Мольна частка етану | 0.5473 | - |
| 6 | Мольна частка азоту | 0.0006 | - |

**Перевірка спрацювання систем перекриття потоків**

Відповідно до часів перекриття потоків, наведених у табл. Б.24, перекриття потоків повинні відбутися у такій послідовності:

- «Метан 99.9» на 10 секунді модельного часу;
- «Етан 99.9» на 20 секунді модельного часу;
- «Вихід метан етан» на 30 секунді модельного часу.

Дані, наведені у табл. Б.25, що відповідають результатам моделювання витоку з фланця "Метан 99.9", демонструють нульову витрату потоку на 10 секунді модельного часу.

Дані у табл. Б.26 для фланця «Етан 99.9» демонструють нульову витрату на 20 секунді, а дані у табл. Б.27 для фланця «Вихід метан етан» на 30 секунді відповідно. Отже, виконується коректне моделювання перекриття потоків системами безпеки у встановлений час.

**Перевірка матеріального балансу**

Сума витрат усіх газових потоків (табл. Б.25 – Б.27) для кожного моменту часу моделювання дорівнює витраті результуючого потоку (табл. Б.28).

Аналогічно сума витрат по кожному з компонентів для кожного газового потоку дорівнює покомпонентній витраті результуючого потоку.

У табл. Б.29 наведено розрахунок суми витрат газових потоків (формули (3.111), (3.112)) та витрати результуючого потоку, отримані за допомогою інформаційної системи оцінки ризику. У результаті порівняння розрахункових перевірочних даних з даними результуючого потоку, отриманими за допомогою інформаційної системи оцінки ризику, можна зробити висновок, що дотримання матеріального балансу виконується.

**Перевірка теплового балансу**

Проведемо перевірку теплового балансу при складанні вихідних потоків і розрахунку температури результуючого потоку відповідно до формули (3.113). Результати порівняння температур перевірочного розрахунку та розрахунку в інформаційній системі оцінки ризику наведено у табл. Б.30.

**Перевірка параметрів усередненого результуючого потоку**

Перевірка параметрів усередненого результуючого потоку здійснюється порівнянням з параметрами визначеними за формулами (3.114 – 3.118). Результати порівняння представлені у табл. 3.13.

Таблиця 3.13 – Перевірка параметрів усередненого за часом результуючого газового потоку

| № п/п | Найменування величини | Перевірочний розрахунок, моль/с | Значення, отримане із застосуванням програмного модуля, моль/с | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|---|
| 1 | Витрата | 610.6 | 610.60 | 0 |
| 2 | Температура | 295.37 | 295.37 | 0 |
| 4 | Мольна частка метану | 0.4522 | 0.4522 | 0 |
| 5 | Мольна частка етану | 0.5473 | 0.5473 | 0 |
| 6 | Мольна частка азоту | 0.0006 | 0.0006 | 0 |

Отримані результати показують відповідність розрахунків у модулі Усереднення газових потоків розрахункам, що ґрунтуються на теоретичних викладках (3.111 – 3.118). Дотримуються тепловий та матеріальний баланси, у тому числі й матеріальний баланс за компонентами. Усереднення відбувається відповідно до теоретичних викладок.

## 3.11 Вимоги до інформаційного наповнення бази даних фізико-хімічних властивостей речовин. Рекомендації до реалізації інтерфейсу користувача

База даних фізико-хімічних властивостей речовин (БД речовин) є невід’ємною, інтегрованою складовою інформаційної технології аналізу і оцінки ризиків. Інтерфейс користувача БД речовин має бути реалізований у двох типах:

- 1-й тип дозволяє отримувати доступ без можливості редагування (є можливість побачити коефіцієнти і вид температурних залежностей властивостей індивідуальних речовин, робити пошук і фільтрування, будувати графічні залежності властивостей від температури та інших параметрів);
- 2-й тип має всі ознаки 1-го типу, але дозволяє редагувати вміст БД речовин.

Розподіл інтерфейсу БД речовин на 2 типи спричинений тим, що можливість редагувати БД повинна бути у кваліфікованого спеціаліста, призначеного для ведення БД речовин, а отже і відповідального за якість її наповнення. Звичайний користувач має отримати змогу повного доступу до збереженої інформації, але без редагування, щоб уникнути людського фактора некомпетентного втручання у роботу БД.

Для можливості моделювання початкових умов формування аварійних ситуацій при викидах небезпечних речовин на основі розробленого у дисертаційному дослідженні методу, БД властивостей речовин має містити такий мінімально необхідний набір даних:

- реєстраційний номер речовини CAS [77, 85, 86];
- назва речовини (за номенклатурою IUPAC) [77, 87, 88];
- молекулярна формула речовини [77, 89];
- молекулярна маса речовини [77];
- коефіцієнти залежності Антуана (для насиченої пари чистої речовини) [77, 90, 91];
- критична температура [77, 92];
- стандартна теплота утворення газової фази [77, 93];
- коефіцієнти температурної залежності теплоємності для рідкої і газової фаз [77, 94, 95];
- коефіцієнти температурної залежності теплопровідності для рідкої і газової фаз [77, 96, 97];
- коефіцієнти температурної залежності коефіцієнта дифузії речовини у повітрі [29, 77, 98, 99];

- коефіцієнти температурної залежності в’язкості для рідкої і газової фаз [77, 100, 101];
- коефіцієнти температурної залежності густини для рідкої фази [77, 102];
- коефіцієнти температурної залежності теплоти випаровування для індивідуальної речовини [77, 103];
- коефіцієнти температурної залежності поверхневого натягу для рідкої і газової фаз [77, 104].

Особливості практичної реалізації інтерфейсу користувача БД речовин буде продемонстровано у наступному розділі. У якості початкового джерела інформації для наповнення БД речовин, можна скористатися довідником Карла Явса [77], де в останніх редакціях містяться температурні залежності властивостей більш ніж 5000 органічних і декількох сотень неорганічних сполук.

## 3.12 Висновки до розділу 3

Запропоновано концептуальну схему даних блоку модулів ADM оцінки динамічних параметрів процесу розгерметизації для двох ступенів розгерметизації: утворення аварійного отвору та розриву оболонки апарата.

Застосовано та верифіковано поширену модель витоку багатокомпонентної газової або рідкої фаз через аварійний отвір на корпусі ємності. Враховано вплив положення рівня рідкої фази в апараті на процес витоку речовини через отвір. Запропонована модель краща у порівнянні зі стаціонарною моделлю з псевдокомпонентом за показниками:

- MAPE – у 2.22 разів менше для динаміки зміни тиску в апараті й у 3.07 разів менше для динаміки зміни температури в апараті;
- невідповідності Тейла $U_1$ – 2.09 разів менший для динаміки зміни тиску в апараті й у 2.52 разів менше для динаміки зміни температури в апараті.

Розроблено та верифіковано модель квазіміттєвого руйнування апарата (розриву оболонки). Враховано багатокомпонентний склад суміші в цілому та перегрітої рідини зокрема. У процесі валідації було застосовано фізичні експерименти з дослідження руйнування скляних колб, заповнених пропаном чи фреонами.

Розроблено та верифіковано модель кипіння потоків аварійної рідини. Враховано багатокомпонентний склад потоків. Модель здатна враховувати кілька витоків, наприклад, після розриву оболонки, де залишаються додаткові джерела викиду у вигляді обривів патрубків.

Розроблено та верифіковано модель формування та випаровування аварійної багатокомпонентного виливу рідкої фази. Враховано вплив вітру, теплових потоків від сонця, атмосфери та ґрунту. Модель була верифікована на базі кількох фізичних експериментів.

Розроблено та верифіковано модель усереднення результуючого газового потоку, призначену для врахування сумаційного ефекту від кількох джерел викиду газу на формування хмари небезпечної речовини.

Розроблено математичну модель газової мережі та продемонстровано її роботу на прикладі розгерметизації трубопроводу, що поєднує дві ємності. Модель може створювати необмежену за рівнем складності газову (або гідравлічну) мережу, що дозволить враховувати складний вплив параметрів вершин та вузлів мережі на процес аварійного витоку.

Матеріали розділу опубліковані у роботах автора [17, 19].

# РОЗДІЛ 4
# ПРАКТИЧНА РЕАЛІЗАЦІЯ ІНФОРМАЦІЙНОЇ ТЕХНОЛОГІЇ ВИЗНАЧЕННЯ ПОЧАТКОВИХ УМОВ ФОРМУВАННЯ АВАРІЙНИХ СИТУАЦІЙ

## 4.1 Програмне забезпечення для визначення початкових умов формування аварійних ситуацій

Розробка програмного забезпечення для визначення початкових умов формування аварійних ситуацій здійснювалася у Науковому центрі вивчення ризиків Різікон (2019 – 2022) і в Інституті проблем математичних машин та систем НАН України (2023 – 2025) за участю кваліфікованих спеціалістів та програмістів при постановці завдання та керівництві розробкою автором дисертаційного дослідження (Акт впровадження, Додаток А).

В основі розробки покладена можливість поєднувати програмні модулі у вигляді спрямованого графа (рис. 4.1). Такий граф визначає послідовність роботи модулів, передачу даних між модулями. Зібравши один раз, подібний шаблон можна застосовувати необмежену кількість разів у різних проєктах.

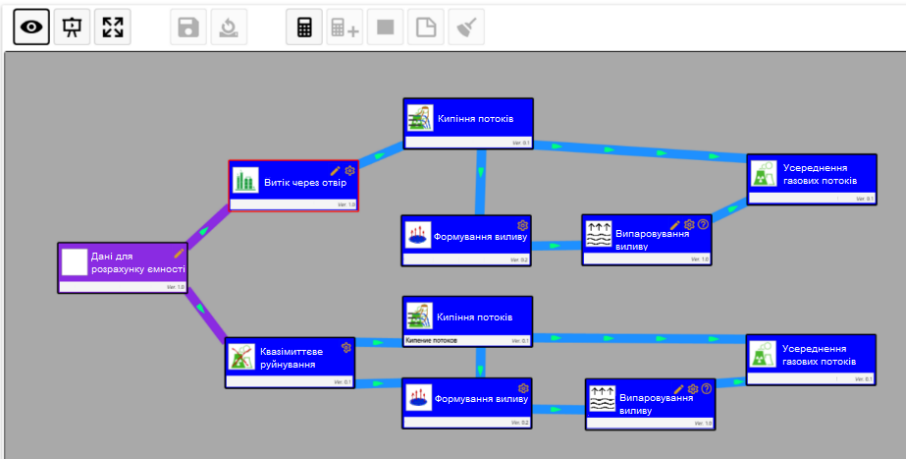



Рисунок. 4.1 – Інтерфейс модуля Розрахунки, де відображається схема даних для моделювання аварійного викиду в результаті двох сценаріїв: утворення аварійного отвору та розриву оболонки

Для створення небезпечної суміші речовин застосовується однойменний модуль (рис. 4.2).

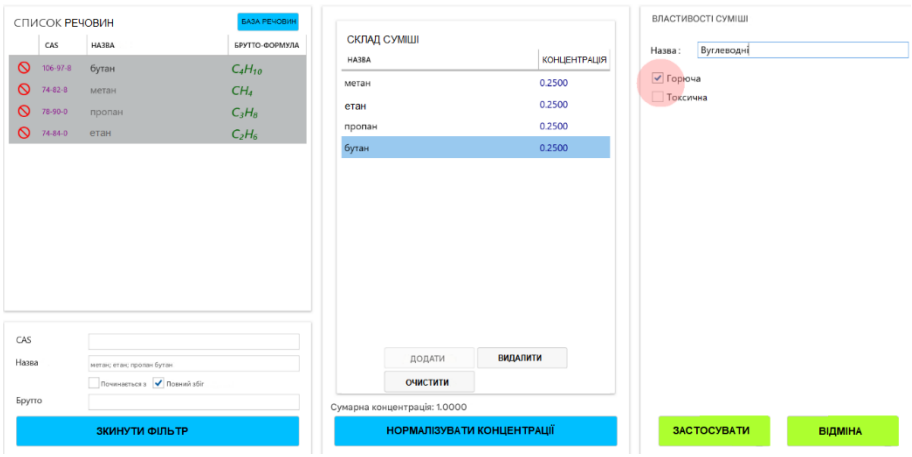



Рисунок 4.2 – Інтерфейс модуля Суміші

З бази даних більш ніж на 5000 речовин [77] вибираються необхідні речовини, вказуються їх мольні частки, тип небезпечної суміші та назва суміші. Усього існує 4 типи небезпечних сумішей:

- горюча;
- токсична;
- і горюча і токсична;
- не горюча і не токсична (проте здатна утворювати вражаючі фактори типу BLEVE, фрагментації).

База даних фізико-хімічних властивостей речовин має спеціалізований інтерфейс (рис. 4.3 – 4.4), що дозволяє експерту отримати доступ до параметрів речовин, а спеціалісту, відповідальному за ведення цієї БД, можливість редагувати її зміст.

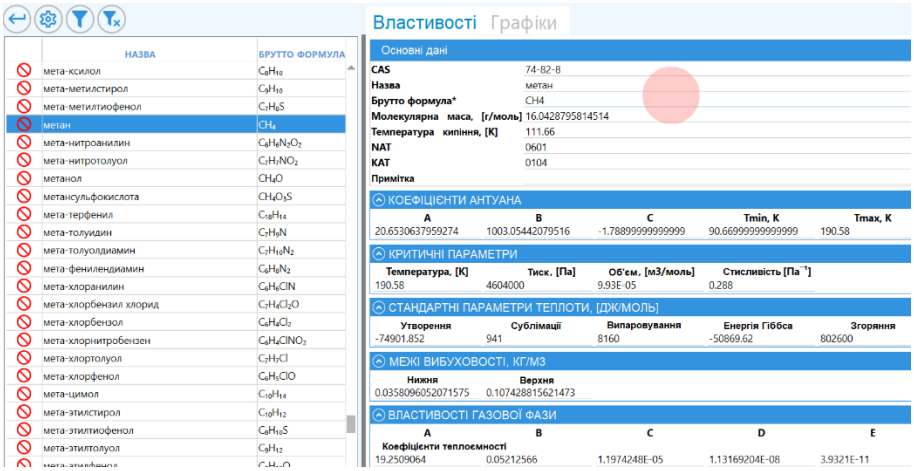



Рисунок 4.3 – Інтерфейс БД фізико-хімічних властивостей речовин. Дані про речовину

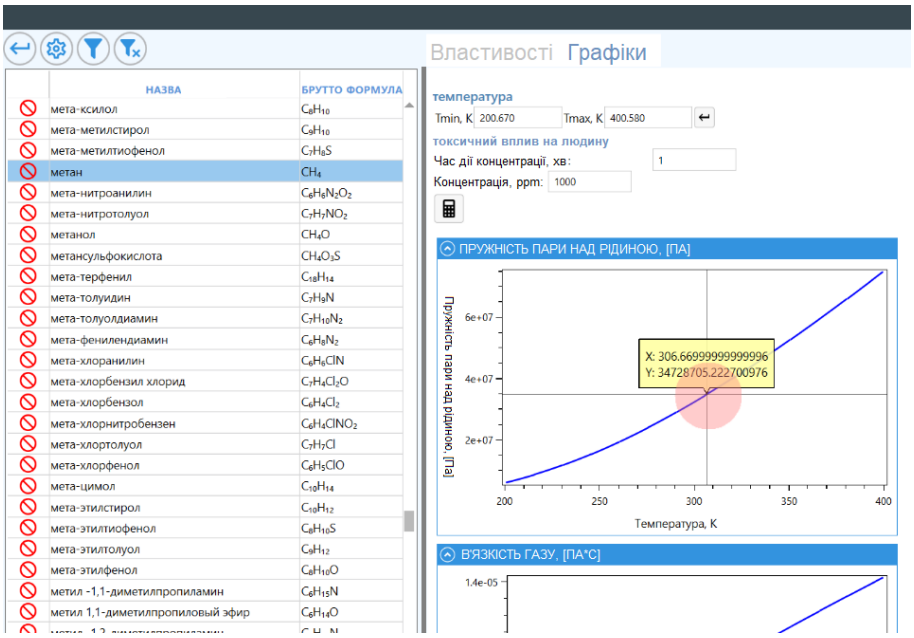



Рисунок 4.4 – Інтерфейс БД фізико-хімічних властивостей речовин. Можливість побудови температурних залежностей властивостей речовин та визначення їх величин у заданій точці

Інтерфейс БД фізико-хімічних властивостей речовин має інструментарій, який корисний фахівцю навіть поза рамками аналізу ризику. Розробка дозволяє експерту будувати графіки температурних залежностей фізико-хімічних властивостей речовин і визначати їх значення для конкретної температури (рис. 4.4).

Джерело небезпеки визначається за допомогою спеціалізованого модуля, як показано на рис. 4.5.

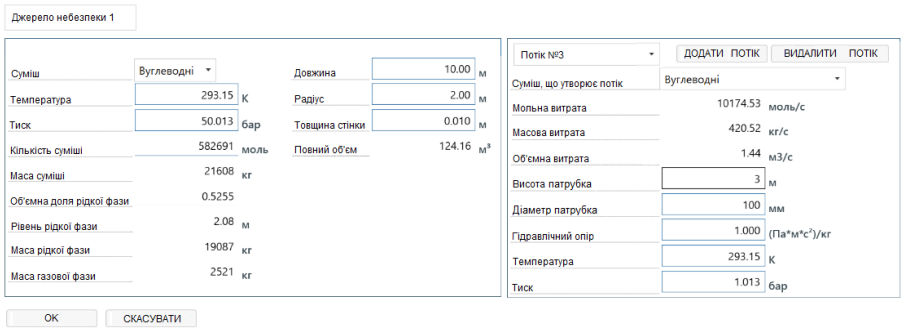



Рисунок 4.5 – Введення вихідних умов джерела небезпеки

У джерелі небезпеки задаються його геометрія, параметри стану і суміш, що знаходиться в апараті. Також вказуються характеристики вхідних та вихідних потоків.

Окремо вказується час спрацювання систем перекриття вхідних/вихідних потоків (рис. 4.6), якщо такі системи є в наявності.

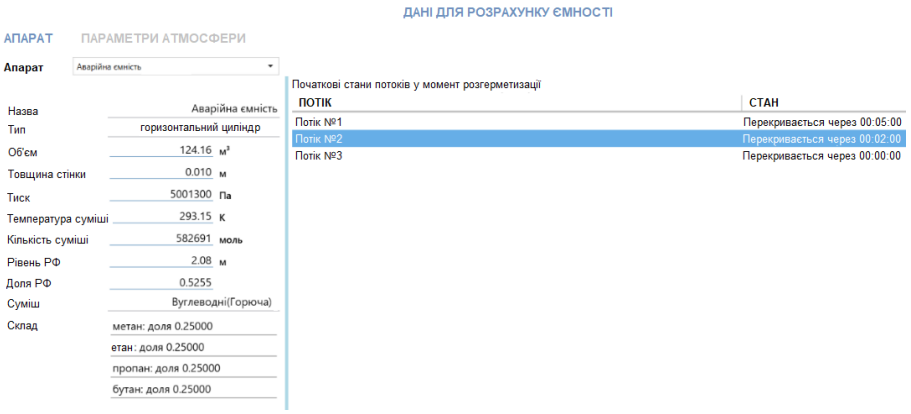



Рисунок 4.6 – Задання часу перекриття вхідних/вихідних потоків, пов'язаних із джерелом небезпеки

Після запуску розрахунків відстежується прогрес виконання поставленого завдання (рис. 4.7).

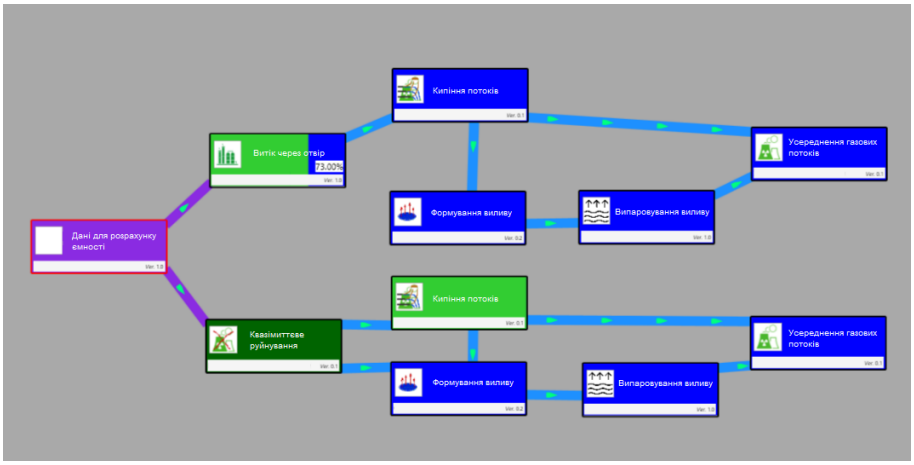



Рисунок 4.7 – Процес виконання алгоритму

Результати розрахунку наведені для кожного окремого модуля. Зміна динамічних параметрів стану в ємності отримано за допомогою модуля Виток через отвір і наведено на рис. 4.8 – 4.13.

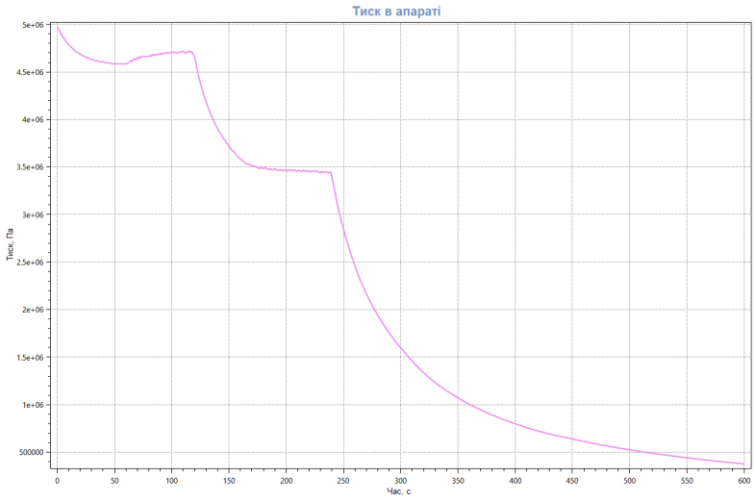



Рисунок 4.8 – Графік зміни тиску в апараті під час моделювання

Зміна тиску в апараті відрізняється нелінійністю, поступовим зменшенням значення (рис. 4.8). У моменти часу 120 с і 240 с (час перекриття 1-го та 2-го вхідних потоків) спостерігається стрибкоподібне зниження тиску, що відповідає фізиці процесу: апарат продовжує спустошуватись набагато швидше, ніж наповнюватися. У свою чергу, температура в апараті (рис. 4.9) змінюється також динамічно і повторює форму кривої тиску. Рушійною силою зміни температури в апараті є

випаровування рідкої фази при зменшенні тиску, а також теплообмін за рахунок змішування із вхідними потоками.

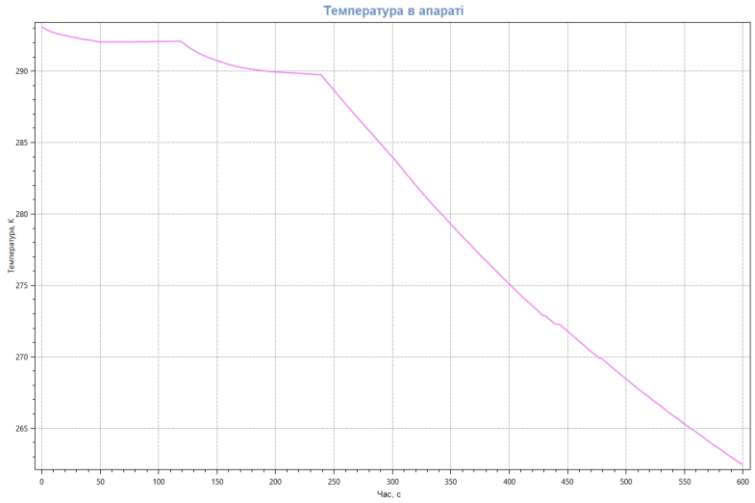



Рисунок 4.9 – Графік зміни температури в апараті під час моделювання

Графіки зміни мольної та об'ємної часток парової фази демонструють, що на початку розгерметизації відбулося певне накопичення рідкої фази в апараті з виходом на стаціонар і навіть перекриття 1-го вхідного потоку не змінило значно загальної картини (рис. 4.10). Однак, у момент перекриття 2-го вхідного потоку почалося швидке зменшення рівня рідини в апараті через втрату основних джерел надходження речовини в апарат.

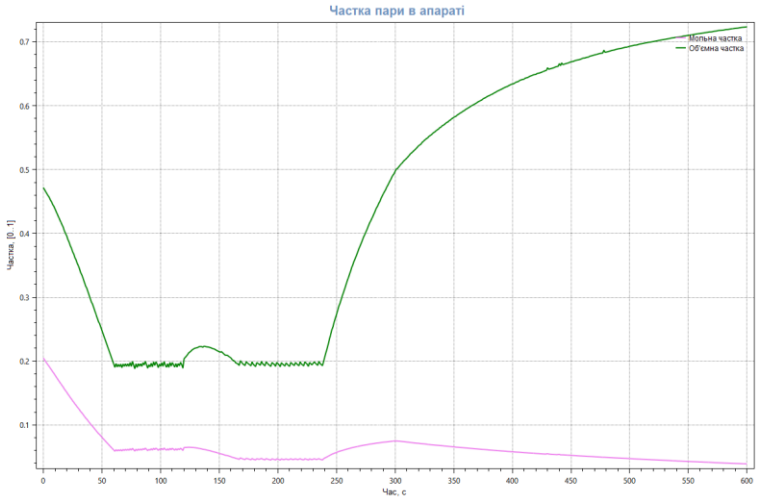



Рисунок 4.10 – Графік зміни мольних та об'ємних часток пари в апараті за час моделювання

Динаміка рівня рідини в апараті відповідає динаміці частки парової фази та в цілому адекватно описує поведінку параметрів стану при розгерметизації (рис. 4.11).

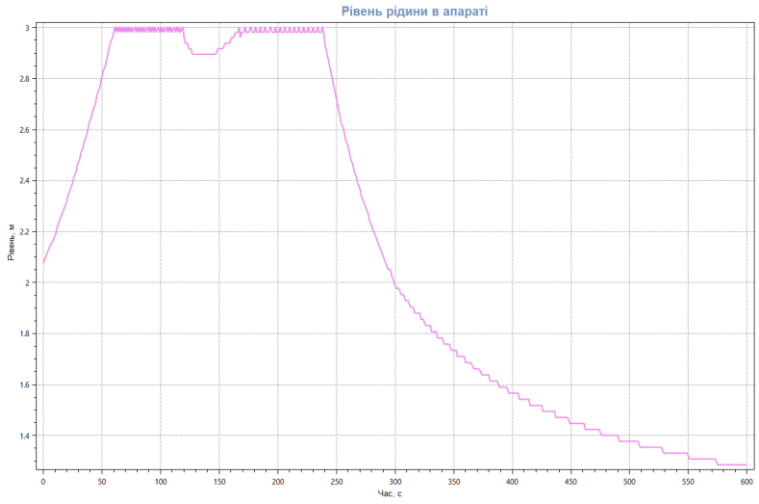



Рисунок 4.11 – Графік зміни рівня рідкої фази в апараті під час моделювання

На особливу увагу заслуговують залежності мольних часток компонентів у рідкій (рис. 4.12) і парової (рис. 4.13) фазах. У рідкій фазі протягом усього часу моделювання спостерігається збагаченість більш важкими компонентами (пропан, бутан), тоді як газова фаза відрізняється збагаченістю легкими компонентами (метан, етан), що відповідає фізиці фазової рівноваги. Очевидне стаціонарне плато складу як рідкої, і парової фаз на початку розгерметизації припиняє своє існування у момент перекриття 1-го вхідного потоку (рис. 4.12 – 4.13).

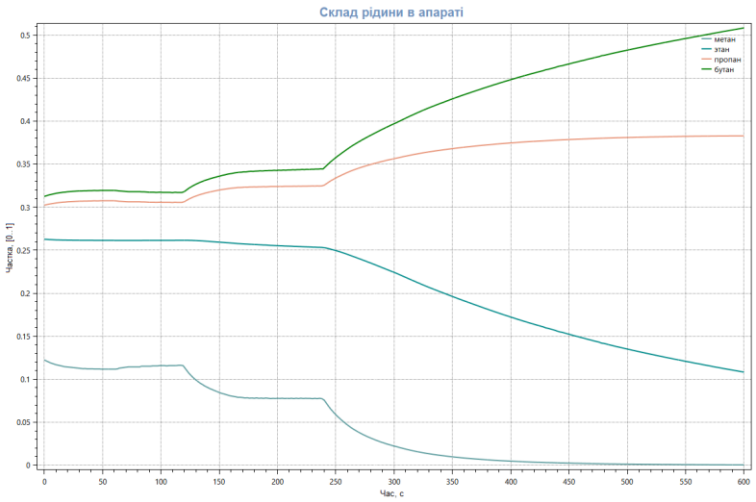



Рисунок 4.12 – Графік зміни складу рідкої фази в апараті під час моделювання

Суттєве падіння тиску в момент 120 с призвело до значного вивільнення метану з рідкої фази та подальшого збагачення важкими пропаном та бутаном (рис. 4.12). У газовій фазі спостерігається різке падіння вмісту метану та суттєве підвищення вмісту етану. Причиною тому є зміна умов фазової рівноваги: падіння тиску і температури рідкої фази, а також помірний і водночас поперемінний відбір вихідним потоком газової або рідкої фази (пилоподібний вид залежності рівня від часу, рис. 4.11).

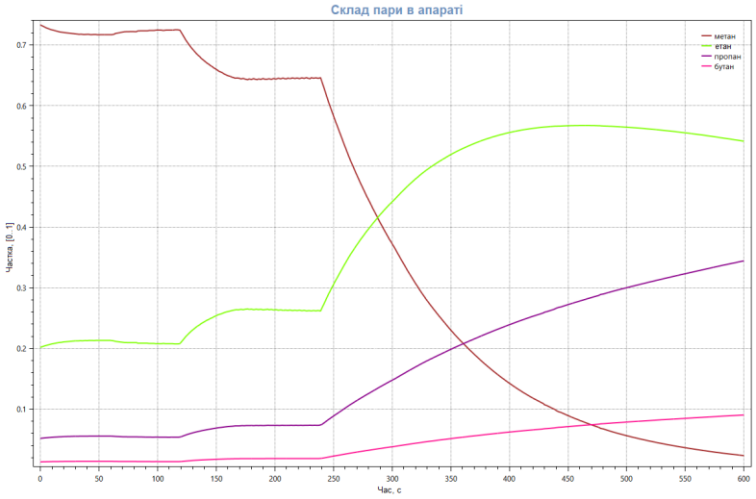



Рисунок 4.13 – Графік зміни складу газової фази в апараті під час моделювання

У момент часу близько 300 с спостерігається перетин рівнем рідини позначки аварійного отвору, що призвело до зміни фази, що витікає. Витік газової фази призвів до ще більш різкого збіднення вмісту метану в паровій фазі апарата (рис. 4.13). Мольна частка етану хоч і збільшувалася, але досягнувши максимуму, почала також монотонно спадати (рис. 4.13).

Стає очевидним, що умоглядним підходом експерт не здатний оцінити вплив фізико-хімічних процесів на параметри стану хімічної системи в аварійному апараті. Навіть відносно нескладний тип апарата – ємність може демонструвати досить нелінійну та непередбачувану поведінку параметрів стану багатокомпонентної суміші, що підтверджує необхідність впровадження принаймні рівноважних моделей апаратів у кількісний аналіз ризиків хіміко-технологічних систем.

Зміна динамічних параметрів стану аварійного витоку з ємності отримано за допомогою модуля Витік через отвір і наведено на рис. 4.14 – 4.18.

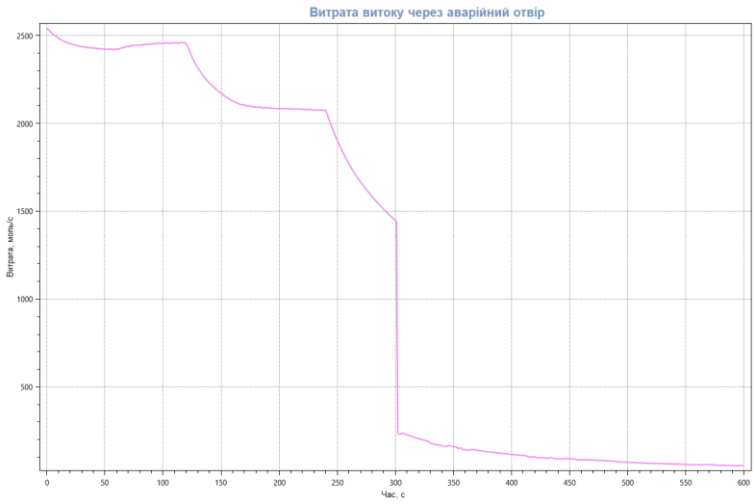



Рисунок 4.14 – Залежність витрати аварійного витоку через отвір від часу

Очевидно, що рушійною силою витрати аварійного потоку викиду є тиск в апараті. Оскільки тиск монотонно зменшується, то й зменшується витрата аварійного витоку (рис. 4.14). У момент 300 с (зміна фази витоку) відбувається

суттєве зменшення витрати аварійного викиду через те, що газова фаза має щільність набагато меншу, ніж рідина (рис. 4.14 – 4.15).

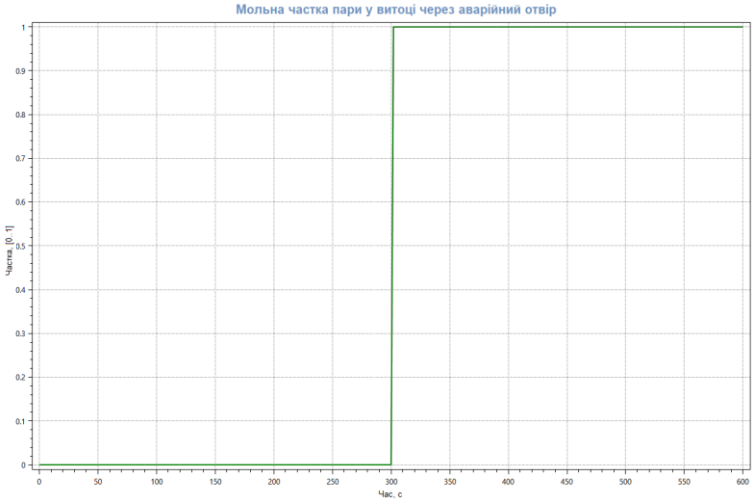



Рисунок 4.15 – Зміна фази аварійного викиду у часі

Температура викиду визначається температурою в апараті (поки не враховується випаровування за рахунок кипіння), як показано на рис. 4.9 і рис. 4.16.

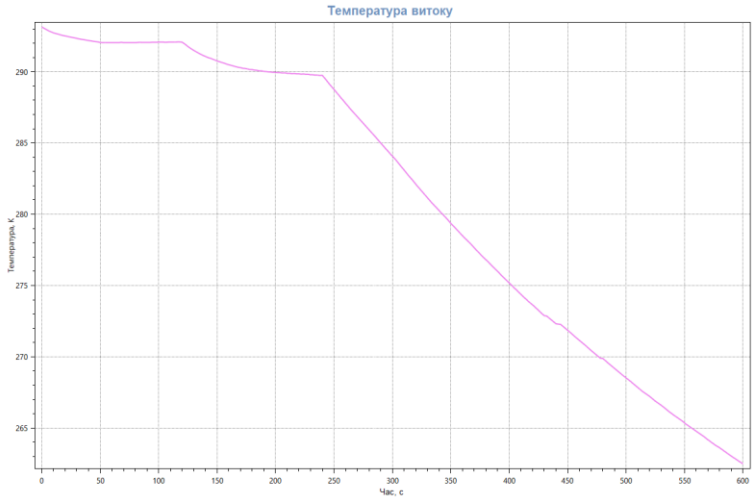



Рисунок 4.16 – Залежність температури аварійного викиду від часу

Аналогічно склад аварійного викиду визначається хімічним складом рідкої чи парової фаз в апараті (рис. 4.12 – 4.13 та рис. 4.17 – 4.18).

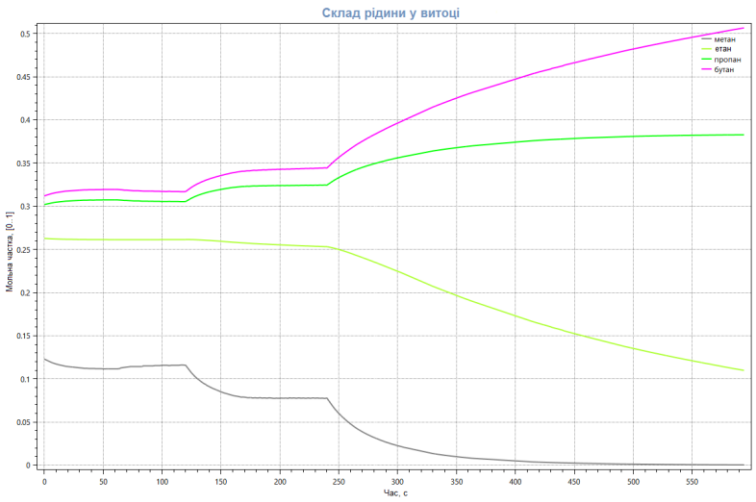



Рисунок 4.17 – Зміна складу потоку в часі (для витоку рідкої фази)

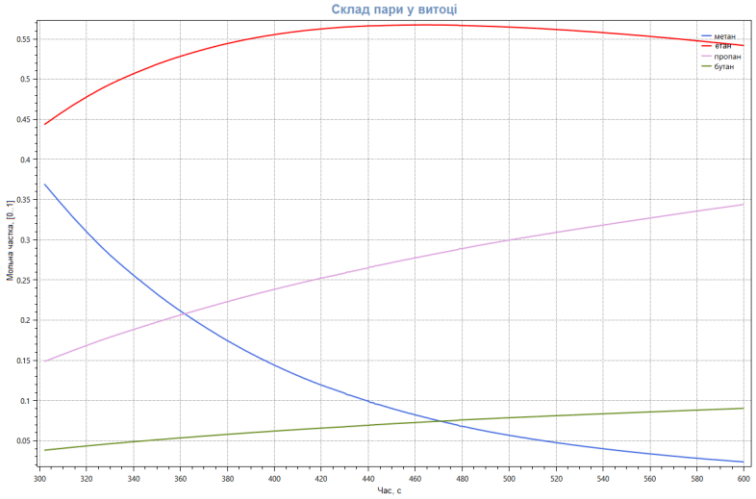



Рисунок 4.18 – Зміна складу потоку в часі (для витоку парової фази)

Модуль квазіміттєвого руйнування формує дані про первинний вилив та первинну хмару, а також параметри витоків з обривів патрубків (рис. 4.19).

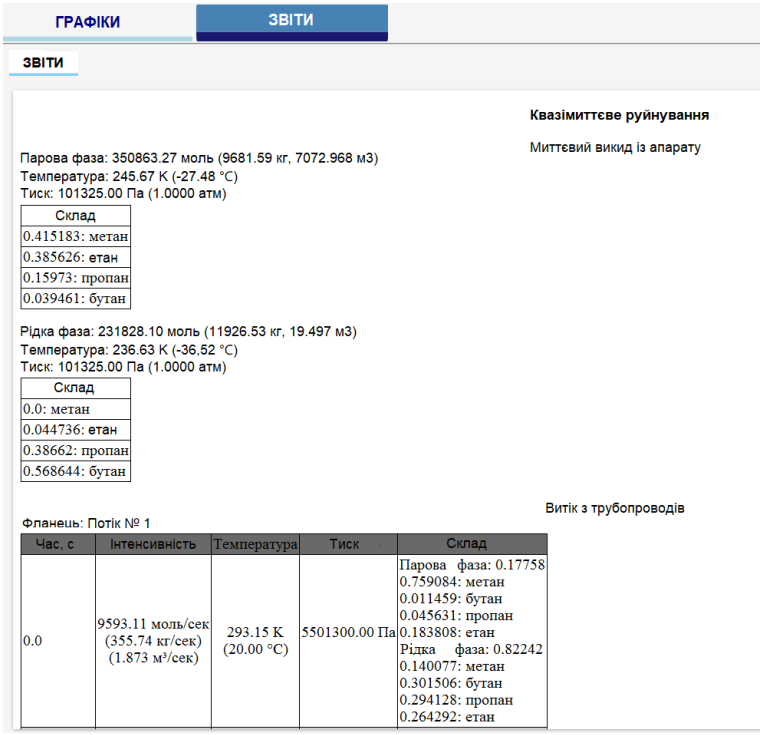



Рисунок 4.19 – Результати роботи модуля Квазіміттєве руйнування

Модуль кипіння потоків формує результати врахування можливого кипіння перегрітої рідини за умови потрапляння в середовище з атмосферним тиском. Дані подано у вигляді текстового звіту (рис. 4.20).

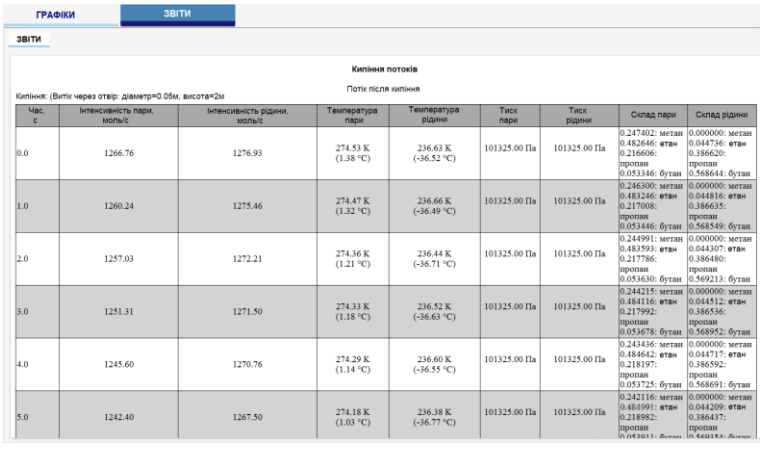



Рисунок 4.20 – Результати роботи модуля Кипіння потоків

Результати роботи модуля Кипіння потоків містять витрату, температуру і хімічний склад охолодженого результуючого рідкого потоку і результуючого газового потоку, що утворився в результаті кипіння.

Модуль формування аварійного виливу представляє всі параметри сформованого виливу у вигляді звіту (рис. 4.21), які надалі автоматично передаються до модуля Випаровування виливу.

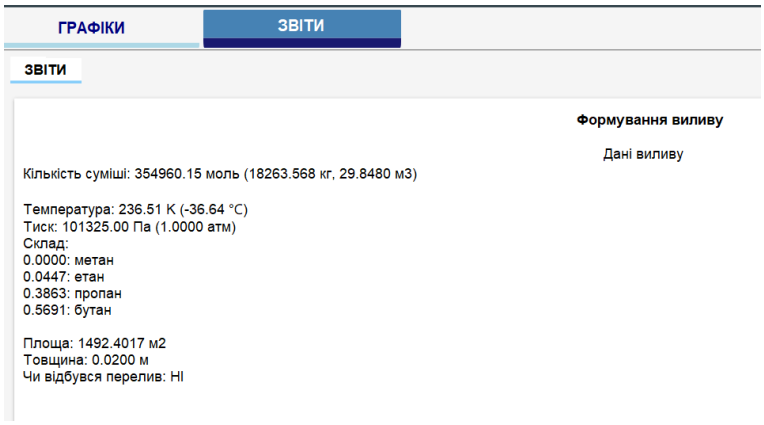



Рисунок 4.21 – Результати роботи модуля Формування аварійного виливу

Результати моделювання випаровування аварійного виливу, отриманого для сценарію витоку через аварійний отвір, також формуються програмою у вигляді графіків (рис. 4.22 – 4.25).

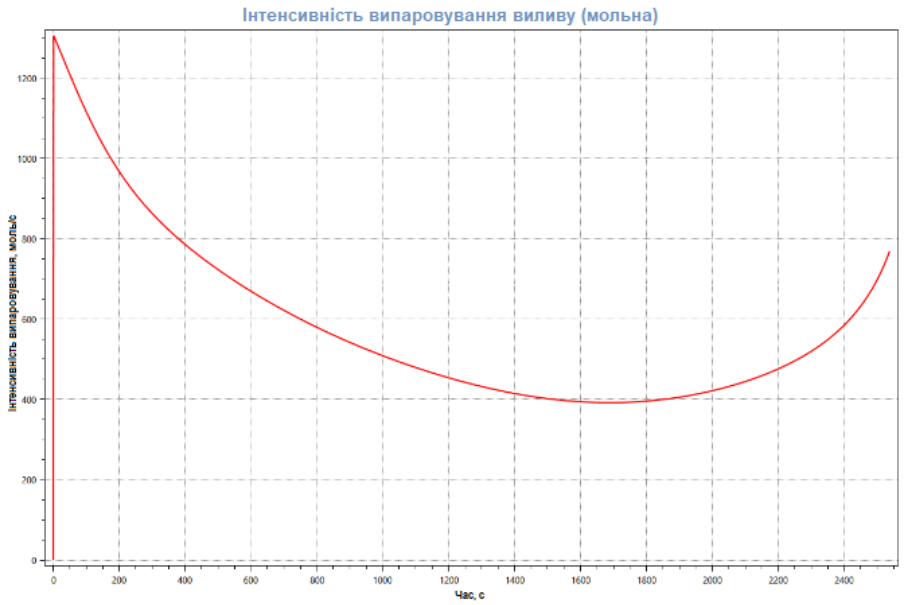



Рисунок 4.22 – Інтенсивність випаровування [моль/с] від часу [с]

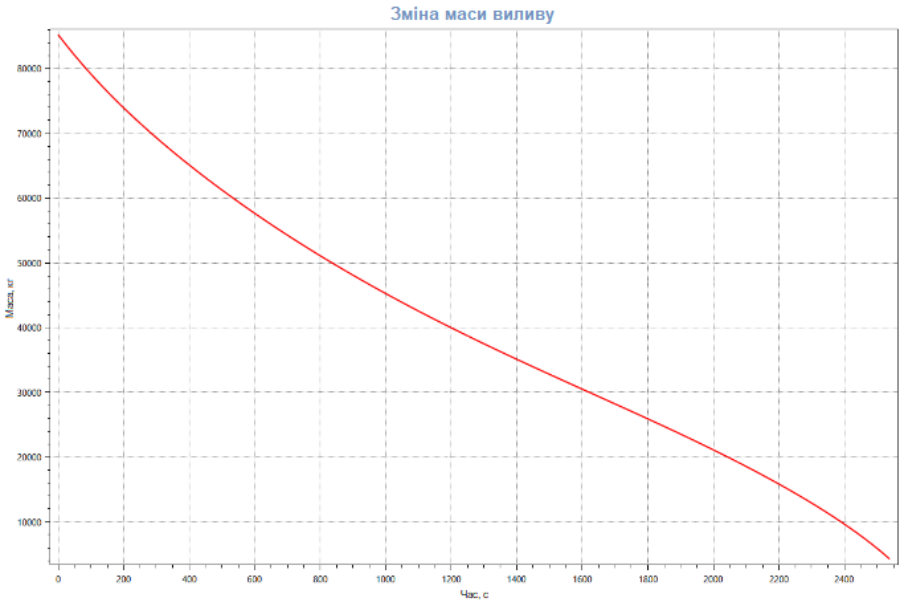



Рисунок 4.23 – Маса виливу [кг] від часу [с]

Спостерігається нелінійна динаміка поведінки параметрів стану аварійного виливу, що безпосередньо визначають інтенсивність випаровування. На рис. 4.25 спостерігається збагачення аварійного виливу більш важким бутаном і майже повна відсутність метану та етану, що відповідає природі явища фазової рівноваги.

Результати виконання модуля Усереднення потоків з урахуванням нелінійності всіх аварійних процесів розгерметизації представлені у вигляді текстового звіту на рис. 4.26.

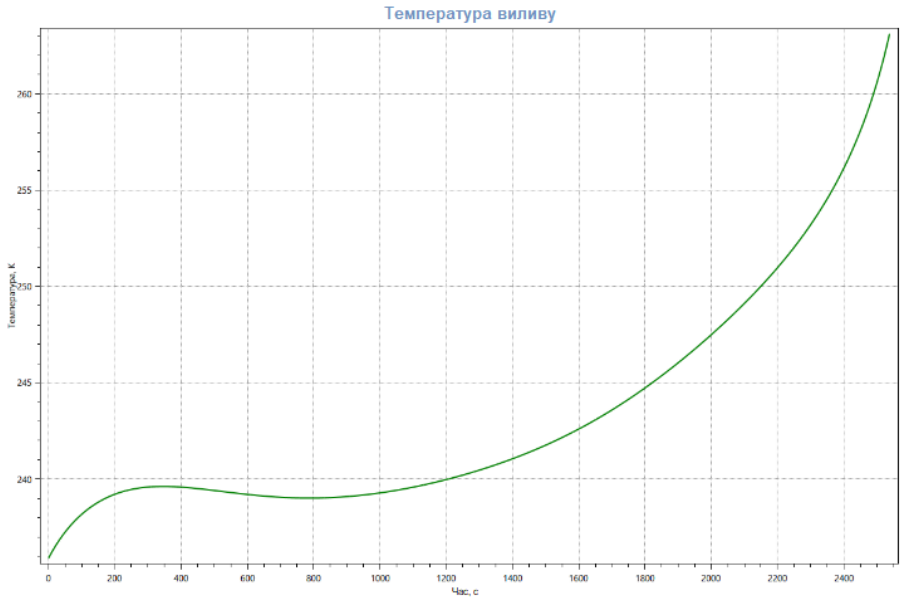



Рисунок 4.24 – Температура виливу [K] від часу [c]

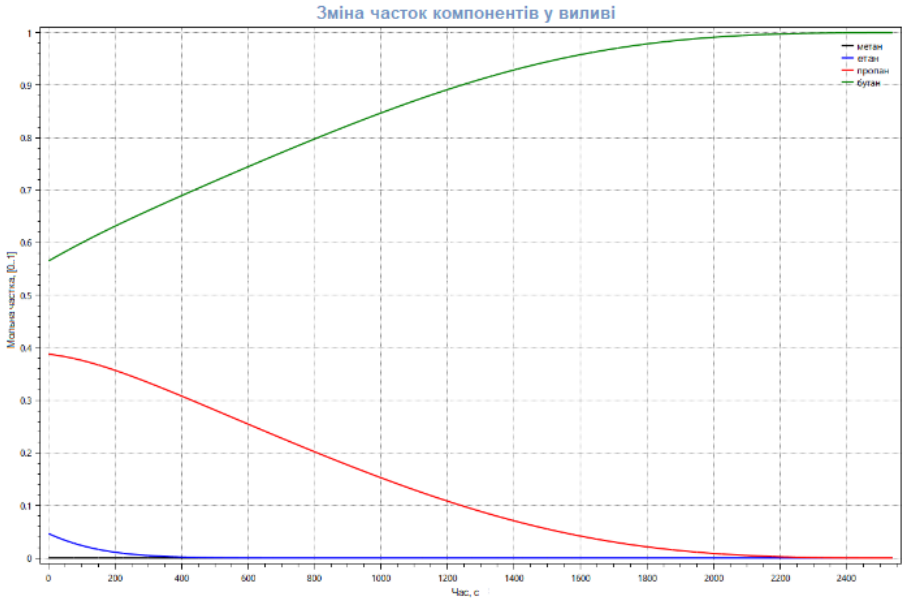



Рисунок 4.25 – Хімічний склад виливу [мольні частки] від часу [c]

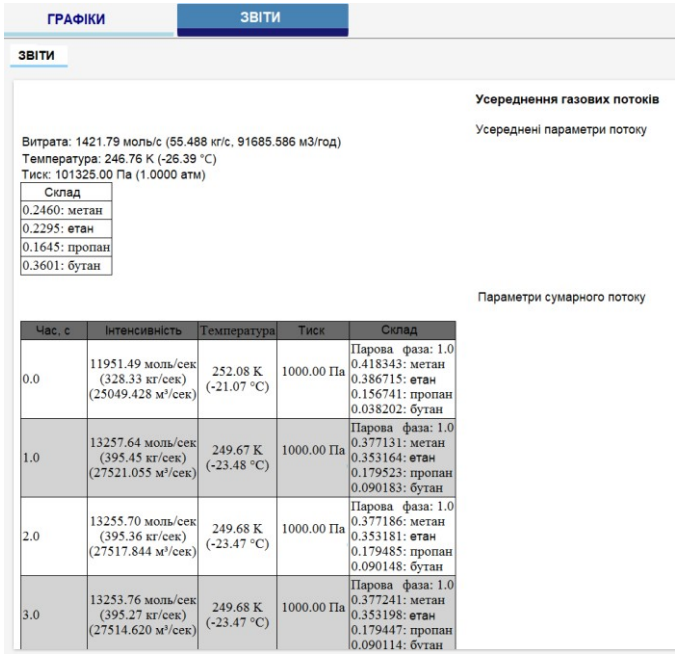



Рисунок 4.26 – Параметри усередненого за часом результуючого потоку газу

Було продемонстровано інформаційну та програмну складову комплексу модулів ADM (Accidental Depressurisation Module), призначених для моделювання початкових умов формування аварійної ситуації. Показано, що складну фізику процесу аварійної розгерметизації експерт не можна оцінити без подібного типу допоміжних інформаційних технологій. Наступний розділ присвячений периферії ядра моделювання аварійної розгерметизації, де буде показано взаємодію з наступними за логікою сценарію аварії модулями та місце групи модулів ADM у існуючій інформаційній технології кількісної оцінки ризику.

## 4.2 Аспекти практичного застосування комплексу модулей оцінки параметрів аварійної розгерметизації під час розрахунку показників ризику для сценарію аварійного викиду горючих речовин

Для демонстрації інтеграції модуля ADM було побудовано схему розрахунку (односпрямований граф) для двох сценаріїв аварії (рис. 4.27):

- витік горючої суміші через отвір на корпусі аварійного апарата;
- розрив оболонки апарата, що містить горючу суміш.

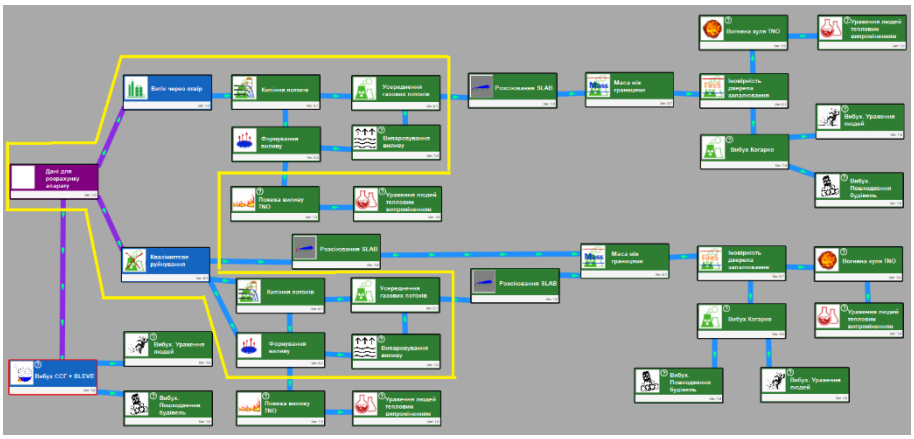
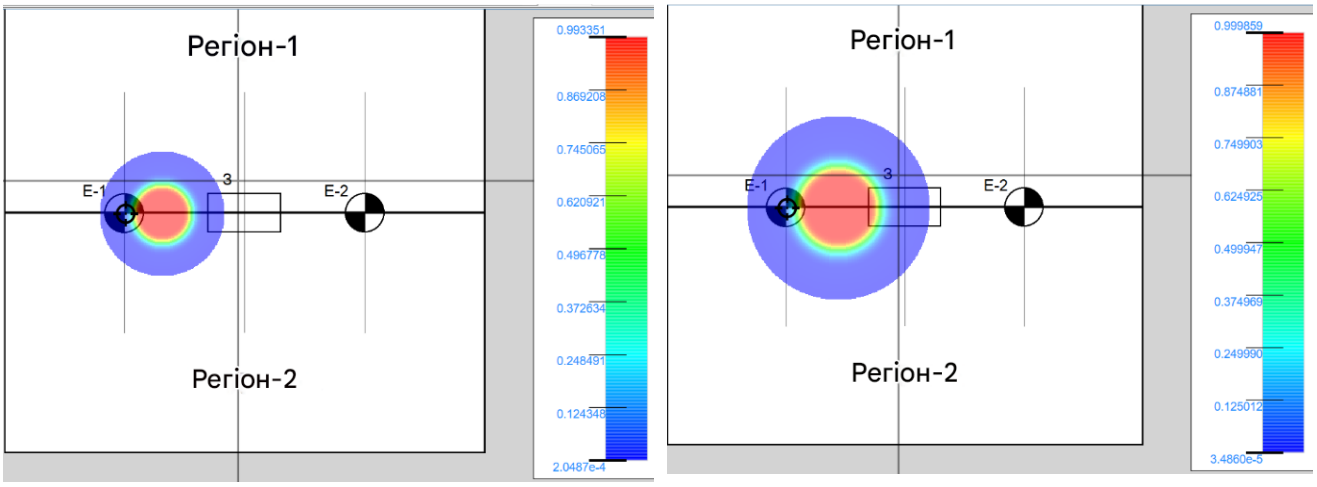


Рисунок 4.27 – Схема розрахунку двох сценаріїв аварії викиду горючих сумішей: витік через аварійний отвір та розрив оболонки апарата (жовтим контуром виділено модулі, що становлять ADM)

Добре видно, що група модулів ADM (виділена жовтим контуром, рис. 4.27), призначених для оцінки параметрів процесу розгерметизації, знаходиться на початку графа розрахунків наслідків реалізації сценаріїв аварії. Отже, ця група є ключовою і формує початкову інформацію, необхідну для оцінки дисперсії речовини в навколишньому середовищі та впливу вражаючих факторів на реципієнтів.

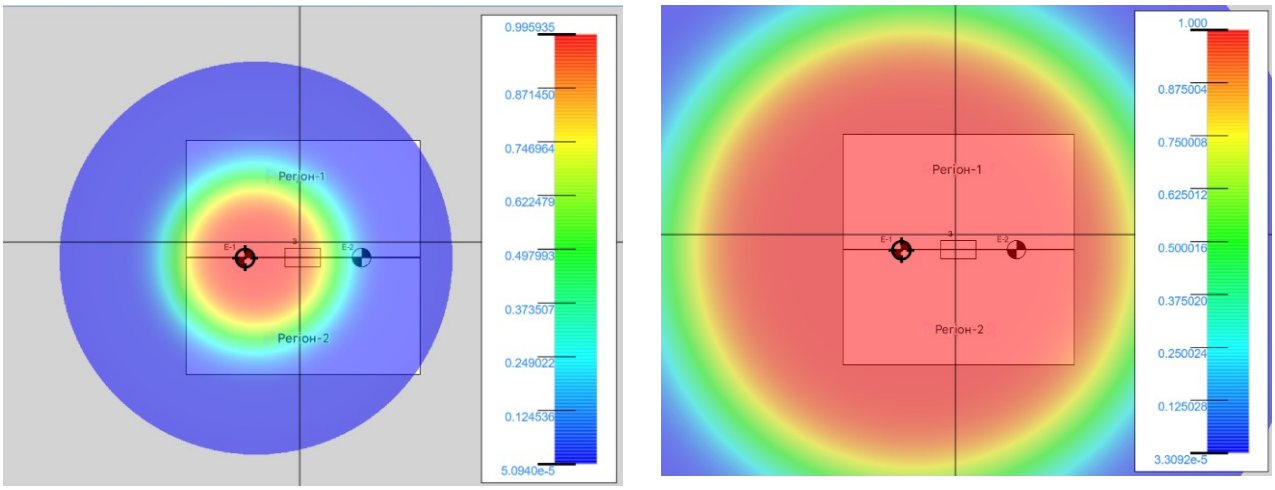
В результаті виконання проєкту з розрахунку наслідків реалізації аварійної ситуації (викид з відкладеним підпаленням горючої хмари) з урахуванням групи модулів ADM за шаблоном, представленим на рис. 4.27, були отримані кількісні характеристики ризику, як показано на рис. 4.28 – 4.30.




а) б)

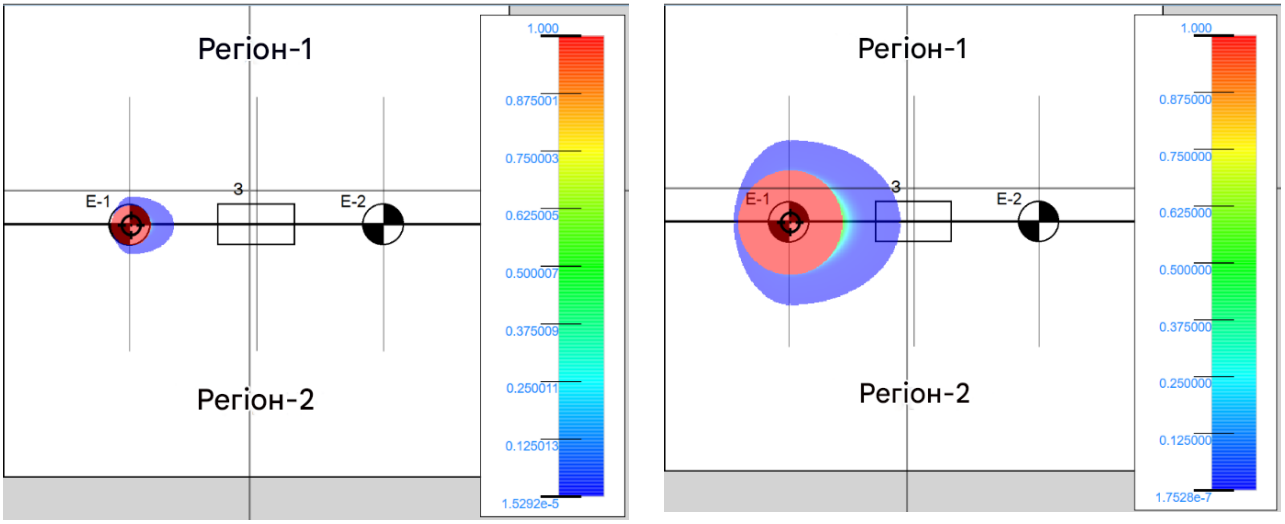
Рисунок 4.28 – Поле ймовірностей загибелі від дії вибуху: а) витікання через аварійний отвір; б) розрив оболонки апарата

Спостерігається прямий вплив ступеня розгерметизації на наслідки: для розриву оболонки зони ураження значно більше, ніж для сценарію витоку речовини через аварійний отвір. Загалом, група модулів ADM коректно інтегрована як частина дослідної інформаційної технології кількісної оцінки ризиків та підтримки рішень при управлінні техногенними ризиками.




а) б)

Рисунок 4.29 – Поле ймовірностей загибелі від вогняної кулі: а) витікання через аварійний отвір; б) розрив оболонки апарата




а) б)

Рисунок 4.30 – Поле ймовірностей смертельного ураження людини від пожежі вільного виливу: а) витікання через аварійний отвір; б) розрив оболонки апарата

Гнучкість модульного підходу дозволяє будувати необмежену кількість розрахункових схем різної структури та функціонального призначення, але потребує чіткого розуміння архітектором схеми сфери застосування кожної моделі та даних, які можна і необхідно передавати між модулями. Здається теоретично можливим задання безлічі розрахункових схем, відповідних всім можливим типам сценаріїв аварій і автоматизація не тільки передачі даних між окремими модулями, але й формування сценаріїв аварій як вихідних даних, що визначають, за якою розрахунковою схемою піде процес розрахунку кількісних показників ризику, і навіть автоматичний розрахунок усіх можливих на об'єкті підвищеної небезпеки сценаріїв аварій.

## 4.3 Висновки до розділу 4

Описано програмне забезпечення, як елемент інформаційної технології безпеки, що забезпечує визначення початкових умов формування аварійних ситуацій при викидах небезпечних речовин.

Було продемонстровано можливість визначення параметрів аварійної розгерметизації в повному обсязі для двох ступенів розгерметизації: витік через аварійний отвір та розрив оболонки апарата.

Нелінійність та непередбачуваність параметрів процесу розгерметизації показала необхідність застосування експертом розробленого ПЗ, яке складається з блоку модулів ADM. ПЗ дозволяє експерту задавати довільну схему даних розрахунку можливих сценаріїв, які можуть стосуватися як повного сценарію аварії з вражаючими факторами та їх впливом на реципієнтів, так і окремого випадку оцінки окремих параметрів, пов'язаних з аварійними ситуаціями.

Очевидною є перспектива подальшого розвитку шаблону з модульною структурою до рівня автоматизованої інтелектуальної системи підтримки рішень при управлінні ризиком, що автоматично вибирає або збирає найкращу схему даних для конкретної описаної експертом задачі.

Серед найближчих перспектив розвитку функціоналу запропонованого програмного засобу є:

- інтеграція розрахунку аварійного витоку через отвір на трубопровідній обв'язці або при гільйотинному її руйнуванні;
- інтеграція методів розрахунку магістральних трубопроводів;
- інтеграція моделі технологічної установки з урахуванням безлічі елементарних апаратів, об'єднаних єдиною гідро-або газовою мережею;
- інтеграція систем штучного інтелекту для фасилітації прийняття оптимальних рішень з управління ризиком на основі математичного моделювання.

Програмні засоби пройшли верифікацію та були застосовані для визначення наслідків аварійних ситуацій на об'єктах підвищеної небезпеки, серед яких ПрАТ «Азот» (м. Черкаси).

Матеріали розділу опубліковані у роботі автора [18].

# ВИСНОВКИ

В результаті виконання науково-дослідної роботи та практичного впровадження її результатів було вирішено актуальне наукове завдання, яке полягає у розробці моделей, методів і програмного забезпечення для уточнення параметрів початкових умов формування аварійних ситуацій при викидах небезпечних речовин. Розроблене ПЗ є невід'ємною частиною вдосконаленої інформаційної технології безпеки, що досягнуто завдяки застосуванню розроблених математичних моделей явищ аварійної розгерметизації та інструментів багатомодельної побудови розрахункових схем, які описують аварійні процеси, а також адаптацію інформаційних технологій до дійсних завдань хімічного та нафтохімічного комплексу.

Під час виконання дисертаційного дослідження було отримано такі наукові теоретичні та практичні результати та зроблено такі висновки:

1. Аналіз сучасного рівня розвитку методів, моделей та технік визначення початкових умов формування аварійних ситуацій показав потребу в Україні та світі у створенні наступного покоління групи моделей аварійної розгерметизації (ADM), що враховують складну динамічну природу процесу розгерметизації, а також багатокомпонентні хімічні суміші та фазову рівновагу у джерелі небезпеки.

2. Вперше розроблено взаємопов'язані динамічні моделі процесу аварійної розгерметизації апарата з багатокомпонентною хімічною сумішшю, які дозволяють організувати відповідність і автоматизацію передачі даних між моделями.

3. Вперше розроблена інформаційна технологія динаміки процесу аварійної розгерметизації апарата, що містить багатокомпонентну хімічну суміш, для двох сценаріїв: розрив оболонки апарату і витік через аварійний отвір. Такий підхід дозволив значно уточнити параметри розгерметизації відповідно до актуального рівня техніки QRA.

4. Розроблено математичний опис динамічної моделі апарата та здійснено її верифікацію на основі наявних фізичних експериментів. Враховано фазову

рівновагу багатокомпонентної хімічної суміші в апараті на кожному кроці моделювання за часом. Продемонстровано спектр прикладних завдань застосування моделі ємнісного апарата, серед яких визначення граничних умов появи розгерметизації та динамічних параметрів процесу розгерметизації. Показано, що експерт не здатний коректно враховувати всі перелічені явища без застосування верифікованих моделей апаратів технологічної системи, що досліджується. На основі даних фізичних експериментів, було встановлено, що запропонована модель краща у порівнянні зі стаціонарною моделлю з псевдокомпонентом за показниками:

- MAPE – 29.25% для динаміки зміни тиску в апараті, що у 2.22 разів менше у порівнянні зі стаціонарною моделлю з псевдокомпонентом;
- MAPE – 4.11% для динаміки зміни температури в апараті, що у 3.07 разів менше у порівнянні зі стаціонарною моделлю з псевдокомпонентом;
- невідповідності Тейла $U_1$ – 0.1058 для динаміки зміни тиску в апараті, що у 2.09 разів менший у порівнянні зі стаціонарною моделлю з псевдокомпонентом;
- невідповідності Тейла $U_1$ – 0.0250 для динаміки зміни температури в апараті, що у 2.52 разів менше у порівнянні зі стаціонарною моделлю з псевдокомпонентом.

5. Розроблено математичний опис та верифікацію ряду моделей фізичних явищ, які відповідають сучасному стану QRA і можливостям комплексу експерт-ІТБ, і, на відміну від існуючих, враховують найбільш повний спектр фізичних явищ, що супроводжують аварійну розгерметизацію: витік газової або рідкої багатокомпонентних фаз через аварійний отвір, викид мультифазної системи при розриві оболонки апарата, процес кипіння потоків перегрітої рідини, формування та подальше випаровування виливу рідкої фази, сумаційний ефект від кількох одночасно діючих джерел викиду газоподібних сумішей.

6. Набір модулів ADM був застосований при вирішенні ряду прикладних завдань щодо визначення наслідків аварійної розгерметизації на хімічних та нафтохімічних підприємствах. Виявлено нелінійність та непередбачуваність

процесів розгерметизації для найпростіших апаратів та показано велику чутливість наслідків аварії до багатьох параметрів моделей. Це наочно демонструє велику потребу експерта у подібному класі інформаційних технологій.

7. Набула подальшого розвитку інформаційна технологія безпеки, яка на відміну від існуючих аналогів, дозволяє експерту створювати схеми розрахунків для широкого спектру чисельних експериментів у галузі техногенної безпеки з позначенням взаємозв’язків між модулями для забезпечення можливості автоматизованої передачі даних, що усуває недолік, пов’язаний з неможливістю пов’язати деякі послідовні за логікою розрахунку модулі у наявних ІТБ.

8. Удосконалено математичну модель випаровування аварійного виливу, що, на відміну від існуючих, дозволяє визначати параметри випаровування багатокомпонентної суміші, а отже точніше визначає небезпечні параметри хмари відомого складу.

9. Удосконалено модель кипіння перегрітої багатокомпонентної рідини, що на відміну від існуючих дозволяє врахувати нерівномірний розподіл концентрацій індивідуальних речовин у паровій та рідкій фазах на основі понять фазової рівноваги.

Виконана за результатами даного дисертаційного дослідження апробація методів та програмного забезпечення показала значне уточнення параметрів складного процесу аварійної розгерметизації, а отже, зменшила похибку оцінки наслідків реалізації аварійних ситуацій на промислових об'єктах хімії та нафтохімії. Такий результат дозволив значно ефективніше розподіляти ресурси щодо елементів системи безпеки підприємств із дотриманням прийнятного значення техногенного ризику.

# СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Pasman H., Reniers G. Past, present and future of Quantitative Risk Assessment (QRA) and the incentive it obtained from Land-Use Planning (LUP). *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2014. Vol. 28. P. 2–9. DOI:10.1016/j.jlp.2013.03.004.

2. Бєгун В. В. Методологічні основи інформаційної технології управління безпекою на основі ризик-орієнтованого підходу : дис. … д-ра техн. наук : 05.13.06 / Інститут проблем математичних машин і систем НАН України. Київ, 2020. 553 с. URL: http://www.immsp.kiev.ua/postgraduate/Dysertaciji/dis_Begun_2020.pdf (accessed 09/09/2023).

3. Pula R., Khan F. I., Veitch B. et al. A Grid Based Approach for Fire and Explosion Consequence Analysis. *Process Safety and Environmental Protection*. 2006. Vol. 84, No 2. P. 79–91. DOI:10.1205/psep.05063.

4. Maderich V., Bezhenar R. Modelling study of the potential release of contaminated water from storage tanks at the Fukushima Dai-ichi NPP into marine environment. *EGU21*. Copernicus Meetings. Materials of EGU General Assembly (19–30 Apr 2021). 2021. DOI:10.5194/egusphere-egu21-10690.

5. Kovalets I. V., Bespalov V. P., Maistrenko S. Y. та ін. The use of environmental decision support systems for modeling of atmospheric pollution following the chemical accidents. *System Research & Information Technologies*. 2022. No 3. P. 57–70. DOI:https://doi.org/10.20535%2FSRIT.2308-8893.2022.3.04.

6. Лифар В. О. Моделі надзвичайних ситуацій та метод оцінки техногенного ризику в автоматизованій системі забезпечення безпеки виробництва : дис. … канд. техн. наук : 05.13.06 / Національний аерокосмічний університет ім. МЄ Жуковського. Харків. 2007. 278 с. URL: http://w.disser.com.ua/modeli-nadzvychajnykh-sytuatsiy-ta-metod-otsinky-tekhnohennoho-ryzyku-v.html (дата звернення: 19.10.2024).

7. Лифар В. О. Моделі, методи та інформаційні технології оцінки техногенного ризику об’єктів підвищеної небезпеки : дис. … д-ра техн. наук : 05.13.06 / Східноукраїнський національний університет ім. В. Даля. Сєвєродонецьк. 2017. 309 с. URL: https://chmnu.edu.ua/wp-content/uploads/2016/04/Disertatsiya-Lifar.pdf (дата звернення: 07.04.2023).

8. Methods for the calculation of physical effects due to releases of hazardous materials (liquids and gases) : handbook / Van den Bosch C. J. H. et al. The Hague : Third edition Second revised print : Committee for the Prevention of Disasters, 2005. 870 p.

9. Teng M.-C., Ke S.-S. Disaster impact assessment of the underground hazardous materials pipeline. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2021. Vol. 71. P. 1–14. DOI:10.1016/j.jlp.2021.104486.

10. Yuhua D., Huilin G., Jing’en Z. et al. Evaluation of gas release rate through holes in pipelines. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2002. Vol. 15, No 6. P. 423–428. DOI:10.1016/S0950-4230(02)00041-4.

11. Tseng J. M., Su T. S., Kuo C. Y. Consequence Evaluation of Toxic Chemical Releases by ALOHA. *Procedia Engineering* : materials of 2012 International Symposium on Safety Science and Technology (2012). Vol. 45. 2012. P. 384–389. DOI:10.1016/j.proeng.2012.08.175.

12. CCPS Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis : handbook. New York : Second edition : Center for Chemical Process Safety, 2000. 769 c. URL: https://www.aiche.org/resources/publications/books/guidelines-chemical-process-quantitative-risk-analysis-2nd-edition (дата звернення: 09.04.2023).

13. IEC 31010:2019. Risk management — Risk assessment techniques. (First edition 01.07.2019). URL: https://www.iso.org/standard/72140.html (accessed 09/09/2023).

14. Про затвердження Методики оцінювання ризиків виникнення надзвичайних ситуацій техногенного характеру та пожеж. *Офіційний вебпортал парламенту України*. URL: https://zakon.rada.gov.ua/go/z1905-23 (дата звернення: 19.10.2024).

15. Про затвердження Методики прогнозування наслідків виливу (викиду) небезпечних хімічних речовин під час аварій на хімічно небезпечних об’єктах і транспорті. *Офіційний вебпортал парламенту України*. URL: https://zakon.rada.gov.ua/go/z0440-20 (дата звернення: 19.10.2024).

16. Directive 2012/18/EU of the European Parliament and of the Council of 4 July 2012 on the control of major-accident hazards involving dangerous substances, amending and subsequently repealing Council Directive 96/82/EC  Text with EEA relevance. (First edition 04.07.2012). URL: http://data.europa.eu/eli/dir/2012/18/oj/eng (дата звернення: 19.10.2024).

17. Smalii V., Tolok E. Model of multicomponent liquid pool evaporation formed due accidental spills. *Ecological Safety and Balanced Use of Resources*. 2022. Vol. 2, N 26. P. 122–132. DOI:10.31471/2415-3184-2022-2(26)-122-132.

18. Смалій В., Бєгун В. Аналіз сучасного стану інформаційних технологій безпеки: актуальні задачі і шляхи їх вирішення. *Кібербезпека: освіта, наука, техніка.* 2025. Вип. 4, № 28. С. 490–497. DOI: 10.28925/2663-4023.2025.28.819.

19. Шмелев О. С., Смалий В. В. Гидравлические сети в производствах с непрерывным циклом работы: формирование и расчёт. *Комп’ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2019* : зб. наук. статей Шостої міжнар. наук.-практ. конф., м. Київ, 6-8 трав. 2019. Київ. С. 389–395. URL: https://ela.kpi.ua/handle/123456789/27846.

20. Смалій В.В. Інтеграція математичного моделювання і HAZOP-дослідження з метою квантифікації наслідків впливу відхилень на параметри стану джерел небезпеки. Математичні машини і системи. 2025. № 2. С. 60–66. DOI: 10.34121/1028-9763-2025-2-60-66.

21. Смалій В. В., Бєгун В. Розвиток ризик-орієнтованого підходу у період цифровізації суспільства. *Безпека людини у сучасних умовах* : зб. доп. 15-ї Міжнар. наук.-метод. конф. та Міжнар. наук. конф. Європ. Асоц. наук з безпеки (EAS), м. Харків, 7-8 груд. 2023. Харків. С. 111-113.

22. ДСТУ ISO 31000:2018. Менеджмент ризиків. Принципи та настанови (ISO 31000:2018, IDT). [чинний від 01.01.2019]. URL:

https://online.budstandart.com/ua/catalog/doc-page.html?id_doc=80322 (дата звернення: 09/11/2024).

23. A Practical Approach to Hazard Identification for Operations and Maintenance Workers : handbook / CCPS (Center for Chemical Process Safety) : John Wiley & Sons, 2010. 316 p. ISBN 978-0-470-64263-4.

24. Standards E. BS EN 61882:2016 Hazard and operability studies (HAZOP studies). Application guide. *https://www.en-standard.eu*. URL: https://www.en-standard.eu/bs-en-61882-2016-hazard-and-operability-studies-hazop-studies-application-guide/ (дата звернення: 09.09.2023).

25. IEC 61025:2006 - Fault tree analysis (FTA). *iTeh Standards*. URL: https://standards.iteh.ai/catalog/standards/iec/46e5ff05-4815-499e-9b05-4bf395d1714d/iec-61025-2006 (дата звернення: 01.10.2023).

26. Commission I. E. IEC 61165 Ed. 2.0 b:2006, Application of Markov techniques. Multiple. Distributed through American National Standards Institute, 2007. 76 c.

27. Pereira J. C., Fragoso M. D., Todorov M. G. Risk Assessment using Bayesian Belief Networks and Analytic Hierarchy Process applicable to Jet Engine High Pressure Turbine Assembly : materials of the 8th IFAC Conference on Manufacturing Modelling, Management and Control MIM (2016). 2016. Vol. 49, Issue 12. P. 133–138. DOI:10.1016/j.ifacol.2016.07.563.

28. Khan F., Rathnayaka S., Ahmed S. Methods and models in process safety and risk management: Past, present and future. *Process Safety and Environmental Protection*. 2015. Vol. 98. P. 116–147. DOI:10.1016/j.psep.2015.07.005.

29. CCPS Guidelines for Consequence Analysis of Chemical Releases. New York : Wiley-AIChE, 1999. 352 p. ISBN 978-0-8169-0786-1.

30. Labovský J., Švandová Z., Markoš J. et al. Model-based HAZOP study of a real MTBE plant. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2007. Vol. 20, No 3. P. 230–237. DOI:10.1016/j.jlp.2007.03.015.

31. Hirschfelder J. O., Curtiss C. F., Bird R. B. The Molecular Theory of Gases and Liquids : handbook : John Wiley & Sons, 1964. 1283 p. ISBN 978-0-471-40065-3.

32. Культура безопасности в ядерной энергетике : учебник / Бегун В. В. та ін. Київ : КПІ, 2012. 569 с. URL: https://ela.kpi.ua/handle/123456789/2404 (дата звернення: 09.09.2023).

33. Elhosary E. Automation for HAZOP study: A state-of-the-art review and future research directions. *Journal of Information Technology in Construction*. 2024. No 29. P. 750–777. DOI:10.36680/j.itcon.2024.033.

34. Shimada Y., Suzuki K., Sayama H. Computer-aided operability study. *Computers & Chemical Engineering* : materials of the Fifth International Symposium on Process Systems Engineering (1996). 1996. Vol. 20, No 6. P. 905–913. DOI:10.1016/0098-1354(95)00187-5.

35. Weatherill T., Cameron I. T. A prototype expert system for hazard and operability studies. *Computers & Chemical Engineering* : materials of the Third Conference on Process Systems Engineering (1989). 1989. Vol. 13, No 11. P. 1229–1234. DOI:10.1016/0098-1354(89)87028-0.

36. Danko M., Janošovský J., Labovský J. et al. Integration of process control protection layer into a simulation-based HAZOP tool. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2019. Vol. 57. P. 291–303. DOI:10.1016/j.jlp.2018.12.006.

37. Jelemenský Ľ. Use of LOPA Concept to Support Automated Simulation-Based HAZOP Study. *Chemical Engineering Transactions*. 2018. Vol. 67. P. 283–288.

38. Labovský J., Labovská Z., Danko M. et al. Smart software framework for the prediction of accidents consequences in process industries. *Computer Aided Chemical Engineering*. 2017. P. 583–588. DOI:10.1016/B978-0-444-63965-3.50099-4.

39. Stene J., Harper M., Henk W. M. W. Modelling Transient Leaks of Multi-Component Fluids Including Time-Varying Phase Composition. *Chemical Engineering Transactions*. 2016. Vol. 48. P. 169–174. DOI:10.3303/CET1648029.

40. Crowl D. A., Louvar J. F. Chemical Process Safety: Fundamentals with Applications : handbook. Boston, MA : 4th edition : Pearson, 2019. 656 с. ISBN 978-0-13-485777-0.

41. Silgado-Correa K. J., Ferreira T. D., Vianna S. S. V. Leak release momentum and the convective flow influence on the calculation of flammable cloud. *Journal of Loss*

*Prevention in the Process Industries*. 2020. Vol. 65. P. 1–12. DOI:10.1016/j.jlp.2020.104123.

42. Yang D., Chen G., Dai Z. Accident modeling of toxic gas-containing flammable gas release and explosion on an offshore platform. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2020. Vol. 65. P. 1–9. DOI:10.1016/j.jlp.2020.104118.

43. Ziomas I. C., Zerefos C. S., Bais A. F. Design of a system for real-time modelling of the dispersion of hazardous gas releases in industrial plants. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 1989. Vol. 2, No 4. P. 194–199. DOI:10.1016/0950-4230(89)80033-6.

44. Severance F. L. System Modeling and Simulation: An Introduction : handbook. New York : Wiley, 2001. 528 c. ISBN 978-0-471-49694-6.

45. Stelzenmüller V., Fock H. O., Gimpel A. et al. Quantitative environmental risk assessments in the context of marine spatial management: current approaches and some perspectives. *ICES Journal of Marine Science*. 2015. Vol. 72, No 3. P. 1022–1042. DOI:10.1093/icesjms/fsu206.

46. Tang H., Pan X., Mei Y. et al. Morphological characteristics and flashing mechanism of superheated liquid jets released from rectangular breaches. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*. 2022. Vol. 79. DOI:10.1016/j.jlp.2022.104840.

47. Consequence analysis with Phast. *DNV*. URL: https://www.dnv.com/software/services/plant/consequence-analysis-phast/ (дата звернення: 18.03.2025).

48. Quantitative risk analysis with Safeti software tools. *DNV*. URL: https://www.dnv.com/software/services/plant/quantitative-risk-analysis-safeti/ (дата звернення: 18.03.2025).

49. Phast Multi-Component Extension - Atmospheric dispersion modelling software. *DNV*. URL: https://www.dnv.com/Default (дата звернення: 07.04.2023).

50. How to use the new methods in Safeti 8.4 for storing the risk results database. *DNV*. URL: https://www.dnv.com/videos/how-to-upgrade-custom-materials-to-phast-safeti-8-4-195033/ (дата звернення: 18.03.2025).

51. How to create a CFD dispersion source scenario from a classic scenario in Phast 9.0. *DNV*. URL: https://www.dnv.com/videos/how-to-run-multiple-cfd-scenarios-in-phast-9-0-25082632/ (дата звернення: 18.03.2025).

52. US EPA O. ALOHA Software. 14.03.2013. URL: https://www.epa.gov/cameo/aloha-software (дата звернення: 18.03.2025).

53. Department of Commerce/National Oceanic and Atmospheric Administration (NOAA). *The Bulletin of the Ecological Society of America*. Вип. 67, № 1. С. 16–19. DOI:10.2307/20166482.

54. FLACS Software. URL: https://www.gexcon.com/us/products-services-index/FLACS-Software/4/en (дата звернення: 18.03.2025).

55. Zappone M. Validation of FLACS CFD code for risk assessment of propane horizontal jet fires : Bachelor thesis. Universitat Politècnica de Catalunya, 2021. 72 с. URL: https://upcommons.upc.edu/handle/2117/345183 (дата звернення: 18.03.2025).

56. Crowley C. Review of Source Term Modelling for Hydrocarbon Releases using Process Dynamic Simulation. *HAZARDS 25*. С. 1–10.

57. Jelemenský Ľ. Safety analysis and risk identification for a tubular reactor using the HAZOP methodology. *Chemical Papers*. 2006. Vol. 60 No 6. P. 454–459.

58. BREEZE Incident Analyst | Trinity Consultants. URL: https://www.trinityconsultants.com/software/hazard/incident-analyst (accessed 20/03/2025).

59. RAND Methodological Guidance for Conducting and Critically Appraising Delphi Panels : handbook / Khodyakov D. et al. Santa Monica, CA : RAND Corporation, 2023. 72 с. URL: https://www.rand.org/pubs/tools/TLA3082-1.html (дата звернення: 19.04.2025).

60. West D. B. Introduction to Graph Theory : handbook. Subsequent edition. Upper Saddle River, NJ : Pearson College Div, 2000. 588 с. ISBN 978-0-13-014400-3.

61. Gaganis V., Marinakis D., Varotsis N. A general framework of model functions for rapid and robust solution of Rachford–Rice type of equations. *Fluid Phase Equilibria*. 2012. Vol. 322–323. P. 9–18. DOI:10.1016/j.fluid.2012.03.001.

62. Dalton J. Essay IV. On the expansion of elastic fluids by heat. *Memoirs of the Literary and Philosophical Society of Manchester.* The Society. 1802. P. 595–602.

63. Brignole E. A., Pereda S. Phase Equilibrium Engineering : handbook. Newnes, 2013. 347 c. ISBN 978-0-444-59471-6.

64. Poling B. E., Prausnitz J. M., O'Connell J. P. The Properties of Gases and Liquids : handbook / New York : Fifth edition : McGraw-Hill, 2001. 803 p.

65. Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing : handbook / Press W. H. et al. Cambridge : Second Edition : Cambridge University Press, 1992. 994 c. ISBN 978-0-521-43108-8.

66. Bonilla-Petriciolet A., Acosta-Martínez A., Bravo-Sánchez U. et al. Bubble and dew point calculations in multicomponent and multireactive mixtures. *Chemical and Biochemical Engineering Quarterly*. 2006. Vol. 20. P. 93–100.

67. Atkins P. W., Paula J. de Atkins' Physical Chemistry : hanbook. Oxford : OUP Oxford, 2014. 1035 c. ISBN 978-0-19-969740-3.

68. Mathematical Modeling in Chemical Engineering : handbook / Rasmuson A. et al. Cambridge : Cambridge University Press, 2014. 196 p.

69. Salzano E., Picozzi B., Vaccaro S. et al. Hazard of Pressurized Tanks Involved in Fires. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 2003. Vol. 42, No 8. P. 1804–1812. DOI:10.1021/ie020606r.

70. T. R. Biyanto, T. Suhartanto, B. L. Widjiantoro et al. Predicting Liquid-Vapor (LV) composition at distillation column. *Songklanakarin Journal of Science and Technology*. 2007. Vol. 29. P. 575–581.

71. Schmidt A. Technical Thermodynamics for Engineers: Basics and Applications : handbook. Springer Cham, 2019. 813 c. ISBN 978-3-030-20397-9.

72. Cengel Y., Boles M. Thermodynamics: An Engineering Approach : handbook. New York : 8th edition : McGraw-Hill Education, 2014. 1024 c. ISBN 978-0-07-339817-4.

73. McAllister S., Chen J.-Y., Fernandez-Pello A. C. Fundamentals of Combustion Processes : handbook. Springer Science & Business Media, 2011. 315 c. ISBN 978-1-4419-7943-8.

74. Baker R. C. Flow Measurement Handbook : handbook. Cambridge : Cambridge University Press, 2016. 793 c. ISBN 978-1-107-04586-6.

75. Park A., Ko Y., Ryu S. et al. Numerical modeling of rapid depressurization of a pressure vessel containing two-phase hydrocarbon mixture. *Process Safety and Environmental Protection*. 2018. Vol. 113. P. 343–356. DOI:10.1016/j.psep.2017.10.017.

76. Демчик Я. М., Розен В. П. Оцінки похибки прогнозних моделей та прогнозів спожитої електричної енергії на об'єктах енергетичного ринку. *Енергетика: економіка, технології, екологія*. 2019. № 4. С. 69–78. DOI:https://doi.org/10.20535/1813-5420.4.2019.200489.

77. Yaws C. L. Yaws Handbook of Thermodynamic Properties : handbook. Elsevier Science, 2006. 794 c. ISBN 978-1-933762-07-4.

78. Idelchik I. E. Handbook of Hydraulic Resistance : handbook. Mumbai : Jaico Publishing House, 2000. 790 c. ISBN 978-81-7992-118-0.

79. Gyenes Z., Wood M. H., Struckl M. Handbook of Scenarios for Assessing Major Chemical Accident Risks : handbook. Luxembourg : Publications Office of the European Union, 2017. 116 c. DOI:10.2760/642382.

80. Schmidli Y., Yadigaroglu G. Sudden releases of superheated liquids. Villigen PSI (Switzerland) : Paul Scherrer Institut, 1993. P. 39–44. 1993.

81. Schmidli J. The initial phase of sudden releases of superheated liquid : Doctoral Thesis. ETH Zurich, 1993. 160 c. DOI:10.3929/ethz-a-000930998.

82. Kawamura P. I., Mackay D. The evaporation of volatile liquids. *Journal of Hazardous Materials*. 1987. Vol. 15, No 3. P. 343–364. DOI:10.1016/0304-3894(87)85034-3.

83. Waqas N. Modeling of the Cryogenic Liquid Pool Evaporation and the Effect of the Convective Heat Transfer from Atmosphere : Master Thesis. Office of Graduate and Professional Studies of Texas A&M University, 2014. 105 c. URL: https://core.ac.uk/reader/79648530 (дата звернення: 04.12.2023).

84. Habib A., Schalau B. Pool Evaporation – Experimental Data Collection and Modeling. *Chemical Engineering & Technology*. 2019. Vol. 42, No 11. P. 2450–2457. DOI:10.1002/ceat.201800093.

85. CAS REGISTRY. URL: https://www.cas.org/cas-data/cas-registry (дата звернення: 23.04.2025).

86. Jacobs A., Williams D., Hickey K. et al. CAS Common Chemistry in 2021: Expanding Access to Trusted Chemical Information for the Scientific Community. *Journal of Chemical Information and Modeling*. 2022. Vol. 62, No 11. P. 2737–2743. DOI:10.1021/acs.jcim.2c00268.

87. International Union of Pure and Applied Chemistry. *IUPAC | International Union of Pure and Applied Chemistry*. 20.05.2025. URL: https://iupac.org/ (дата звернення: 23.04.2025).

88. Currie L. A. In pursuit of accuracy: Nomenclature, assumptions, and standards. *Pure & Appl. Chem. 1992.* Vol. 64, No 4. P. 455–472. DOI:10.1351/pac199264040455.

89. Verkade P. E. A History of the Nomenclature of Organic Chemistry. D. Reidel ; Delft University Press, 1985. 534 c. ISBN 978-90-277-1643-9.

90. Antoine Ch. Tensions des vapeurs: Nouvelle relation entre les tensions et les temperatures. *Comptes Rendus des Séances de l'Académie des Sci*. 1888. No 107. P. 681–684.

91. Haynes W. M. CRC Handbook of Chemistry and Physics : handbook. Boca Raton : 93rd Edition : CRC Press, 2012. 2657 c. ISBN 978-1-4398-8049-4.

92. Stanley H. E. Introduction to phase transitions and critical phenomena : handbook. New York : Oxford University Press, 1987. 308 c. URL: http://catdir.loc.gov/catdir/enhancements/fy0603/87012357-t.html (дата звернення: 24.04.2025).

93. Green D., Perry R. Perry’s Chemical Engineers’ Handbook : handbook. McGraw-Hill Professional, 2007. 2728 p. URL: http://gen.lib.rus.ec/book/index.php?md5=56922a09296734a00173712a6533827d (дата звернення: 19.02.2024).

94. National Institute of Standards and Technology NIST Chemistry WebBook. URL: https://webbook.nist.gov/chemistry/ (дата звернення: 24.04.2025).

95. Wilhelm E., Letcher T. M. Heat Capacities: Liquids, Solutions and Vapours : handbook. Cambridge : RSC, 2010. 531 c. ISBN 978-1-84755-979-1.

96. Raznjevic K. Handbook of thermodynamic tables and charts : handbook. McGraw-Hill Interamericana, 1976. 392 c.

97. Daubert T. E., Danner R. P., Daubert Physical And Thermodynamic Properties Of Pure Chemicals : handbook. Taylor & Francis, 1993. 300 c. ISBN 978-1-56032-281-8.

98. Lugg G. A. Diffusion coefficients of some organic and other vapors in air. *Analytical Chemistry*. 1968. Vol. 40, No 7. P. 1072–1077. DOI:10.1021/ac60263a006.

99. W. Elliot R., Watts H. Diffusion of Some Hydrocarbons in Air: A Regularity in the Diffusion Coefficients of a Homologous Series. *Canadian Journal of Chemistry*. 1972. Vol. 50, No 1. P. 31–34. DOI:10.1139/v72-005.

100. Wohlfarth C. Viscosity of Pure Organic Liquids and Binary Liquid Mixtures : handbook. Springer Berlin Heidelberg, 2016. 398 c. ISBN 978-3-662-49216-1.

101. Gokel G. W. Dean’s Handbook of Organic Chemistry : handbook. 2nd edition : McGraw-Hill Professional, 2003. 800 c. ISBN 978-1-59124-862-0.

102. Vargaftik N. B., Vinogradov Y. K., Yargin V. S. Handbook of Physical Properties of Liquids and Gases : handbook. Danbury CT : New Augmented and Revised Edition of the Classic Reference : Begell House, 1996. 1378 c. ISBN 978-1-56700-063-4.

103. Kolarik Z., Gmelin L. Gmelin handbook of inorganic chemistry : handbook. Springer, 1985. 260 c. ISBN 978-0-387-93520-1.

104. Lautrup B. Physics of Continuous Matter: Exotic and Everyday Phenomena in the Macroscopic World : handbook. Boca Raton : 2nd edition : CRC Press, 2011. 696 p. DOI:10.1201/9781439894200.

# ДОДАТКИ

# Додаток А

## Акт впровадження результатів дисертаційного дослідження

Rizikon НАУКОВИЙ ЦЕТР ВИВЧЕННЯ РИЗИКІВ“РІЗІКОН” ISO OSCert 9001

**АКТ**

про впровадження результатів дисертаційного дослідження

СМАЛІЯ Василя Вікторовича

на тему «Інформаційна технологія визначення початкових умов формування аварійних ситуацій при викидах небезпечних речовин»

Цим актом підтверджується, що розроблені автором методи визначення умов формування аварійних ситуацій з урахуванням динаміки зміни складу та фазової рівноваги при порушеннях режимів роботи технологічного обладнання та надходження небезпечних речовин в навколишній простір при порушеннях його цілісності, розрахункові схеми та розроблені за його участю інформаційні технології аналізу ризику були застосовані для обгрунтування безпеки та пошуку оптимальних рішень під час виконання робіт на різних стадіях життєвого циклу структурно-складних технологічних систем

Зазначені вище результати розробок та досліджень автора із застосуванням інформаційних технологій дозволили виконати роботи відповідно до вимог міжнародних стандартів «IEC 61882:2016 Dependability in technics. Hazard and operability studies (HAZOP studies)»; «IEC 61508-1-2012 Functional safety of electrical, electronic, programmable electronic safety-related systems. Part 1-7»; «IEC 61511-2 Functional safety. Safety instrumented systems for the process industry sector. Part 1-3» для визначення оптимальних умов безпечної експлуатації газофракційної установки, виробництва капролактама, комплексу виробництва ароматичних вуглеводнів. Було визначено вимоги до проектованих систем управління, що забезпечують зниження ризику до допустимих значень для процесів видобутку газу, виконано обгрунтування проектних рішень, що забезпечують безпеку виробництва метанолу.

В.О. Генерального директора Гриневич О.Є. Ph.D.

25.04.2025 р.

Товариство з обмеженою відповідальністю "НАУКОВИЙ ЦЕНТР ВИВЧЕННЯ РИЗИКІВ" "РІЗІКОН" Rizikon і.к.13396577 Україна Сєвєродонецька Луганської обл.

# Додаток Б

## Дані за результатами верифікації і валідації розроблених математичних моделей

Таблиця Б.1 – Верифікація розрахунку витікання газу через отвір у модулі «Витік із отвору»

| № п/п | Найменування вхідного параметра | Значення вхідного параметра | Розмірність вхідного параметра | Витрата, розрахована модулем «Витік із отвору», моль/с | Витрата, отримана внаслідок повірочного розрахунку, моль/с | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Дослід 1 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 62.47 | 62.471 | -0.0848 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | горизонтальний циліндр | - | | | |
| 6 | довжина апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |

Продовження таблиці Б.1

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 9 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 2 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 62.47 | 62.471 | -0.0848 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |

Продовження таблиці Б.1

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 3 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 62.47 | 62.471 | -0.0848 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр з конічним днищем | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | висота конуса | 1 | м | | | |
| 9 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 10 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 11 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 12 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 13 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 4 | | | | | | |

Продовження таблиці Б.1

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 62.47 | 62.471 | -0.0848 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 5 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.1 | - | 52.72 | 52.72 | 0 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.9 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |

Продовження таблиці Б.1

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 6 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.9 | - | 80.56 | 80.566 | -0.0074 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.1 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |

Продовження таблиці Б.1

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Дослід 7 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 72.96 | 72.966 | -0.0082 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 300 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 8 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 55.43 | 55.43 | 0 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 500 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |

Продовження таблиці Б.1

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 9 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 8.12 | 8.125 | -0.0615 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.11 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |

Продовження таблиці Б.1

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 10 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 124.94 | 124.941 | -0.0008 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 1.0 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 11 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 62.47 | 62.471 | -0.0016 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |

Продовження таблиці Б.1

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 15 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 12 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 249.88 | 249.882 | -0.0008 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.1 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 15 | м | | | |

Продовження таблиці Б.1

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 13 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 562.22 | 562.234 | -0.0025 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.15 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 15 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| Дослід 14 | | | | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - | 999.50 | 999.526 | -0.0026 |
| 2 | мольна частка пропану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 400 | К | | | |

Продовження таблиці Б.1

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 4 | тиск суміші | 0.5 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.2 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 15 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| | | | | | | |

Таблиця Б. 2 – Вихідні дані про апарат

| № п/п | Найменування параметра | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| 1 | Фігура подоби | Вертикальний циліндричний скрубер | - |
| 2 | Довжина | 3.24 | м |
| 3 | Внутрішній діаметр | 1.13 | м |
| 4 | Товщина стінки | 59 | мм |
| 5 | Матеріал корпусу | Сталь нержавіюча SS 304 | - |

Продовження таблиці Б.2

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6 | Відносна густина матеріалу корпусу (щодо густини води) при 300 К | 7.9 | - |
| 7 | Теплоємність матеріалу корпусу при 300 К | 477 | Дж/(кг·К) |
| 8 | Теплопровідність матеріалу корпусу при 300 К | 14.9 | Вт/(м·К) |
| 9 | Діаметр аварійного отвору (вгорі корпусу апарата) | 10 | мм |
| Випадок 1 | | | |
| 10 | Початковий тиск | 120 | бар |
| 11 | Вихідна температура | 293 | К |
| 12 | Вихідна мольна частка метану | 0.665 | - |
| 13 | Вихідна мольна частка етану | 0.035 | - |
| 14 | Вихідна мольна частка пропану | 0.3 | - |
| Випадок 2 | | | |
| 15 | Початковий тиск | 117.508 | бар |
| 16 | Вихідна температура | 293 | К |
| 17 | Вихідна мольна частка метану | 0.64 | - |
| 18 | Вихідна мольна частка етану | 0.06 | - |
| 19 | Вихідна мольна частка пропану | 0.28 | - |
| 20 | Вихідна мольна частка бутану | 0.02 | - |
| Випадок 3 | | | |

Продовження таблиці Б.2

| | | | |
|---|---|---|---|
| 21 | Початковий тиск | 120 | бар |
| 22 | Вихідна температура | 303 | К |
| 23 | Вихідна мольна частка метану | 0.855 | - |
| 24 | Вихідна мольна частка етану | 0.045 | - |
| 25 | Вихідна мольна частка пропану | 0.1 | - |

Таблиця Б.3 Фізичні властивості псевдокомпонента і результати обчислення витоку для випадків 1 – 3. Коефіцієнт витрати отвору прийнято рівним 1

| № п/п | Назва параметра псевдокомпонента | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| Випадок 1 | | | |
| 1 | Молекулярна маса | 0.025 | кг/моль |
| 2 | Питома теплоємність газоподібної фази $c_p$ | 48.004 | Дж/(моль·К) |
| 3 | Вихідна кількість речовини | $1.601 \cdot 10^4$ | моль |
| 4 | Витрата викиду через аварійний отвір | 78.624 | моль/с |
| 5 | Час викиду (до вирівнювання тиску в апараті з атмосферним) | 203.583 | с |
| Випадок 2 | | | |
| 6 | Молекулярна маса | 0.026 | кг/моль |
| 7 | Питома теплоємність газоподібної фази $c_p$ | 48.93 | Дж/(моль·К) |

Продовження таблиці Б.3

| | | | |
|---|---|---|---|
| 8 | Вихідна кількість речовини | $1.567 \cdot 10^4$ | моль |
| 9 | Витрата викиду через аварійний отвір | 75.928 | моль/с |
| 10 | Час викиду (до вирівнювання тиску в апараті з атмосферним) | 206.435 | с |
| Випадок 3 | | | |
| 11 | Молекулярна маса | 0.019 | кг/моль |
| 12 | Питома теплоємність газоподібної фази $c_p$ | 41.202 | Дж/(моль·К) |
| 13 | Вихідна кількість речовини | $1.548 \cdot 10^4$ | моль |
| 14 | Витрата викиду через аварійний отвір | 88.608 | моль/с |
| 15 | Час викиду (до вирівнювання тиску в апараті з атмосферним) | 174.682 | с |

Таблиця Б.4 – Залежність тиску в апараті від часу. Моделювання і експеримент. Випадок 1

| Час, с | Тиск (експеримент), бар | Тиск (модель), бар | Тиск (псевдокомпонент, стаціонарна модель), бар | Відносна похибка (модель), % | Відносна похибка (псевдокомпонент, стаціонарна модель), % |
|---|---|---|---|---|---|
| 9 | 120.2454 | 112.5767 | 120 | -6.37755 | -0.20408 |
| 127 | 73.19709 | 51.53374 | 120 | -29.5959 | 63.94094 |
| 251 | 48.48554 | 25.46012 | 1.01 | -47.4892 | 147.4965 |
| 367 | 30.54974 | 14.72393 | 1.01 | -51.8034 | -100 |

Продовження таблиці Б.4

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 494 | 19.78826 | 8.895706 | 1.01 | -55.0455 | -100 |
| 622 | 12.61393 | 5.828221 | 1.01 | -53.7954 | -100 |
| 746 | 8.229627 | 4.294479 | 1.01 | -47.8169 | -100 |
| 872 | 5.521472 | 3.374233 | 1.01 | -38.8889 | -100 |
| 990 | 4.294479 | 2.453988 | 1.01 | -42.8571 | -100 |
| 1120 | 3.464863 | 2.453988 | 1.01 | -29.1751 | -100 |
| 1247 | 3.06629 | 2.147239 | 1.01 | -29.9727 | -100 |
| 1372 | 2.760736 | 1.533742 | 1.01 | -44.4444 | -100 |
| 1489 | 2.453988 | 1.533742 | 1.01 | -37.5 | -100 |
| MAPE | | | | 39.59709 | 73.21005 |
| $U_1$ (показник невідповідності Тейла) | | | | 0.137302 | 0.237117 |

Таблиця Б.5 – Залежність тиску в апараті від часу. Моделювання і експеримент. Випадок 2

| Час, с | Тиск (експеримент), бар | Тиск (модель), бар | Тиск (псевдокомпонент, стаціонарна модель), бар | Відносна похибка (модель), % | Відносна похибка (псевдокомпонент, стаціонарна модель), % |
|---|---|---|---|---|---|

Продовження таблиці Б.5

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 9 | 117.418 | 111.2705 | 117.508 | -5.2356 | 0.076649 |
| 48 | 97.7459 | 82.68443 | 117.508 | -15.4088 | 20.21783 |
| 200 | 56.55738 | 32.58197 | 117.508 | -42.3913 | 107.7678 |
| 345 | 32.58197 | 14.7541 | 1.01 | -54.717 | -96.9001 |
| 497 | 18.75 | 7.991803 | 1.01 | -57.377 | -94.6133 |
| 647 | 10.45082 | 4.918033 | 1.01 | -52.9412 | -90.3357 |
| 796 | 5.532787 | 3.07377 | 1.01 | -44.4444 | -81.7452 |
| 948 | 2.766393 | 1.844262 | 1.01 | -33.3333 | -63.4904 |
| 1098 | 1.844262 | 1.536885 | 1.01 | -16.6667 | -45.2355 |
| 1245 | 0.922131 | 1.229508 | 1.01 | 33.33333 | 9.528906 |
| 1397 | 0.922131 | 0.922131 | 1.01 | 0 | 9.528906 |
| MAPE | | | | 32.34988 | 56.31275 |
| $U_1$ (показник невідповідності Тейла) | | | | 0.116343 | 0.200343 |

Таблиця Б.6 – Залежність тиску в апараті від часу. Моделювання і експеримент. Випадок 3

| Час, с | Тиск (експеримент), бар | Тиск (модель), бар | Тиск (псевдокомпонент, стаціонарна модель), бар | Відносна похибка (модель), % | Відносна похибка (псевдокомпонент, стаціонарна модель), % |
|---|---|---|---|---|---|
| 7 | 120.1844 | 110.3484 | 120 | -8.18414 | -0.15343 |
| 63 | 79.30328 | 75.30738 | 120 | -5.03876 | 51.31783 |
| 105 | 64.85656 | 57.47951 | 120 | -11.3744 | 85.02369 |
| 200 | 43.64754 | 31.96721 | 1.01 | -26.7606 | -97.686 |
| 353 | 23.66803 | 14.7541 | 1.01 | -37.6623 | -95.7326 |
| 504 | 12.60246 | 7.991803 | 1.01 | -36.5854 | -91.9857 |
| 699 | 5.532787 | 4.610656 | 1.01 | -16.6667 | -81.7452 |
| 1001 | 2.151639 | 2.151639 | 1.01 | 0 | -53.059 |
| 1196 | 1.536885 | 1.536885 | 1.01 | 0 | -34.2827 |
| MAPE | | | | 15.80802 | 65.66513 |
| $U_1$ (показник невідповідності Тейла) | | | | 0.063679 | 0.226641 |

Таблиця Б.7 – Залежність температури в апараті від часу. Моделювання і експеримент. Випадок 1

| Час, с | Температура середня (експеримент), K | Температура (модель), K | Температура (псевдокомпонент, стаціонарна модель), K | Відносна похибка (модель), % | Відносна похибка (псевдокомпонент, стаціонарна модель), % |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 292.9626 | 292.9626 | 293 | 0 | 0.012766 |
| 49 | 284.1205 | 288.8691 | 293 | 1.671317 | 3.125258 |
| 126 | 276.2608 | 282.9743 | 293 | 2.430122 | 6.059202 |
| 199 | 269.0561 | 278.2257 | 293 | 3.408071 | 8.899222 |
| 273 | 262.8339 | 272.8222 | 293 | 3.800249 | 11.47725 |
| 379 | 255.6292 | 266.4362 | 293 | 4.227631 | 14.61914 |
| 493 | 251.0444 | 259.8865 | 293 | 3.522142 | 16.71242 |
| 626 | 247.6057 | 253.828 | 293 | 2.512965 | 18.3333 |
| 750 | 246.2958 | 248.9157 | 293 | 1.063718 | 18.96265 |
| 864 | 247.9332 | 245.4771 | 293 | -0.99065 | 18.17699 |
| 984 | 249.5707 | 241.5472 | 293 | -3.21489 | 17.4016 |
| 1096 | 252.8455 | 239.7461 | 293 | -5.18082 | 15.88104 |
| 1219 | 256.4479 | 236.3075 | 293 | -7.85361 | 14.25323 |
| 1331 | 259.0678 | 233.6876 | 293 | -9.79675 | 13.09781 |
| 1419 | 261.3602 | 231.5589 | 293 | -11.4024 | 12.10582 |

Продовження таблиці Б.7

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 1495 | 263.8163 | 229.7577 | 293 | -12.91 | 11.06213 |
| MAPE | | | | 4.624078 | 12.51124 |
| $U_1$ (показник невідповідності Тейла) | | | | 0.029838 | 0.06234 |

Таблиця Б.8 – Залежність температури в апараті від часу. Моделювання і експеримент. Випадок 2

| Час, с | Температура середня (експеримент), K | Температура (модель), K | Температура (псевдокомпонент, стаціонарна модель), K | Відносна похибка, % | Відносна похибка (псевдокомпонент, стаціонарна модель), % |
|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 289.8518 | 292.6355 | 293 | 0.960366 | 1.086141 |
| 12 | 287.3957 | 291.653 | 293 | 1.481348 | 1.950029 |
| 30 | 285.4307 | 290.3431 | 293 | 1.721015 | 2.651887 |
| 67 | 280.8459 | 287.8869 | 293 | 2.507058 | 4.327676 |
| 104 | 276.7523 | 285.1033 | 293 | 3.01747 | 5.870846 |
| 159 | 271.84 | 281.1734 | 293 | 3.433409 | 7.783991 |
| 223 | 265.6178 | 276.5886 | 293 | 4.130301 | 10.30887 |
| 304 | 259.2318 | 271.3488 | 293 | 4.674202 | 13.02626 |
| 368 | 255.7932 | 267.9102 | 293 | 4.737037 | 14.54566 |

Продовження таблиці Б.8

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 435 | 252.5183 | 263.8166 | 293 | 4.47425 | 16.03119 |
| 515 | 249.4072 | 259.8868 | 293 | 4.201797 | 17.47857 |
| 609 | 247.4423 | 255.3019 | 293 | 3.176372 | 18.41144 |
| 745 | 245.9686 | 250.0622 | 293 | 1.664273 | 19.1209 |
| 841 | 247.1148 | 246.7873 | 293 | -0.13252 | 18.56837 |
| 949 | 248.7522 | 244.1674 | 293 | -1.84313 | 17.7879 |
| 1037 | 251.2084 | 241.875 | 293 | -3.71539 | 16.63623 |
| 1159 | 254.1557 | 239.0913 | 293 | -5.92723 | 15.28366 |
| 1256 | 256.6119 | 236.7989 | 293 | -7.72098 | 14.18021 |
| 1340 | 258.7406 | 234.5065 | 293 | -9.36615 | 13.24083 |
| 1419 | 260.7055 | 233.0328 | 293 | -10.6145 | 12.38735 |
| 1486 | 262.5067 | 231.3954 | 293 | -11.8516 | 11.6162 |
| MAPE | | | | 4.350027 | 12.01401 |
| $U_1$ (показник невідповідності Тейла) | | | | 0.026428 | 0.060649 |

Таблиця Б.9 – Залежність температури в апараті від часу. Моделювання і експеримент. Випадок 3

| Час, с | Температура середня (експеримент), K | Температура (модель), K | Температура (псевдокомпонент, стаціонарна модель), K | Відносна похибка, % | Відносна похибка (псевдокомпонент, стаціонарна модель), % |
|---|---|---|---|---|---|
| 3 | 302.1928 | 302.928 | 303 | 0.243305 | 0.267114 |
| 11 | 296.3108 | 302.009 | 303 | 1.923048 | 2.257494 |
| 25 | 289.3259 | 300.1709 | 303 | 3.748353 | 4.726193 |
| 44 | 283.6277 | 297.7813 | 303 | 4.990199 | 6.830186 |
| 61 | 279.2162 | 295.5755 | 303 | 5.859023 | 8.518059 |
| 95 | 273.1504 | 290.9802 | 303 | 6.527483 | 10.9279 |
| 146 | 268.1874 | 283.9953 | 303 | 5.894349 | 12.9807 |
| 186 | 264.1435 | 277.9295 | 303 | 5.219117 | 14.71038 |
| 256 | 258.4453 | 268.3712 | 303 | 3.840615 | 17.23951 |
| 309 | 254.4015 | 263.4083 | 303 | 3.540399 | 19.10307 |
| 381 | 252.3795 | 263.4083 | 303 | 4.369914 | 20.05729 |
| 482 | 251.6443 | 263.4083 | 303 | 4.674861 | 20.40805 |
| 585 | 252.3795 | 263.2245 | 303 | 4.297082 | 20.05729 |
| 693 | 254.4015 | 263.2245 | 303 | 3.468146 | 19.10307 |
| 785 | 257.1587 | 263.4083 | 303 | 2.430265 | 17.82607 |
| 863 | 259.732 | 263.5921 | 303 | 1.486174 | 16.65871 |

Продовження таблиці Б.9

| | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|
| 954 | 262.8569 | 263.4083 | 303 | 0.209787 | 15.27185 |
| 1030 | 265.4302 | 263.5921 | 303 | -0.69251 | 14.1543 |
| 1121 | 267.4522 | 263.5921 | 303 | -1.44327 | 13.29127 |
| 1191 | 269.6579 | 263.5921 | 303 | -2.24945 | 12.36459 |
| MAPE | | | | 3.355366 | 13.33766 |
| $U_1$ (показник невідповідності Тейла) | | | | 0.018901 | 0.066202 |

Таблиця Б.10 – Верифікація розрахунку витоку рідини через отвір у модулі «Витік із отвору»

| № п/п | Найменування вхідного параметра | Значення вхідного параметра | Розмірність вхідного параметра | Витрата, розрахована модулем «Витік із отвору», моль/с | Витрата, отримана в результаті повірочного розрахунку, моль/с | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Дослід 1 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.5 | - | 435.68 | 436.581 | -0.2063 |
| 2 | мольна частка гексану | 0.5 | - | | | |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 3 | температура суміші | 326.15 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 1 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 13 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 4.40 | м | | | |
| Дослід 2 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.5 | - | 429.87 | 430.762 | -0.2071 |
| 2 | мольна частка гексану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 326.15 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 2 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 13 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 4.40 | м | | | |
| Дослід 3 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.5 | - | 423.97 | 424.862 | -0.2100 |
| 2 | мольна частка гексану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 326.15 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - | | | |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 3 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 13 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 4.40 | м | | | |
| Дослід 4 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.5 | - | 418.00 | 418.88 | -0.2101 |
| 2 | мольна частка гексану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 326.15 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 4 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 13 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 4.40 | м | | | |
| Дослід 5 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.5 | - | 1742.72 | 1746 | -0.1879 |
| 2 | мольна частка гексану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 326.15 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.1 | м | | | |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 10 | висота положення аварійного отвору | 1 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 13 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 4.40 | м | | | |
| Дослід 6 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.5 | - | 3921.11 | 3929 | -0.2008 |
| 2 | мольна частка гексану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 326.15 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.15 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 1 | м | | | |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 13 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 4.40 | м | | | |
| Дослід 7 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.5 | - | 6970.87 | 6985 | -0.2023 |
| 2 | мольна частка гексану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 326.15 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.2 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 1 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 13 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 4.40 | м | | | |
| Дослід 8 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.05 | - | 267.06 | 267.326 | -0.0995 |
| 2 | мольна частка гексану | 0.95 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 356.15 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.2 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 1 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 13 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 3.25 | м | | | |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| Дослід 9 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.95 | - | 509.73 | 509.97 | -0.0471 |
| 2 | мольна частка гексану | 0.05 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 306.25 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 1 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 13 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 3.06 | м | | | |
| Дослід 10 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.5 | - | 440.38 | 441.296 | -0.2076 |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 2 | мольна частка гексану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 326.15 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр з конічним днищем | - | | | |
| 6 | висота апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | висота конічної частини | 1.0 | м | | | |
| 9 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 10 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 11 | висота положення аварійного отвору | 1 | м | | | |
| 12 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 13 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 14 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 5.22 | м | | | |
| Дослід 11 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.5 | - | 417.63 | 418.518 | -0.2122 |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 2 | мольна частка гексану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 326.15 | К | | | |
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | горизонтальний циліндр | - | | | |
| 6 | довжина апарата | 10 | м | | | |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м | | | |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 9 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 10 | висота положення аварійного отвору | 1 | м | | | |
| 11 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 12 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 13 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 1.34 | м | | | |
| Дослід 12 | | | | | | |
| 1 | мольна частка бутану | 0.5 | - | 462.59 | 463.553 | -0.2077 |
| 2 | мольна частка гексану | 0.5 | - | | | |
| 3 | температура суміші | 326.15 | К | | | |

Продовження таблиці Б.10

| | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 4 | тиск суміші | 0.3 | МПа | | | |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - | | | |
| 6 | радіус апарата | 10 | м | | | |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.025 | м | | | |
| 8 | діаметр отвору | 0.05 | м | | | |
| 9 | висота положення аварійного отвору | 1 | м | | | |
| 10 | коефіцієнт витрати отвору | 1 | - | | | |
| 11 | атмосферний тиск | 101325 | Па | | | |
| 12 | розрахунковий рівень рідкої фази в апараті | 9.21 | м | | | |

Таблиця Б.11 – Верифікація та валідація розрахунку квазіміттєвого викиду із застосуванням модуля «Квазіміттєве руйнування»

| № п/п | Найменування параметра | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| Дослід 1 | | | |
| Вхідні дані: | | | |
| 1 | мольна частка пропану у двофазній суміші | 0.999 | - |
| 2 | мольна частка азоту у двофазній суміші | 0.001 | - |
| 3 | температура суміші | 320.55 | К |
| 4 | тиск суміші | 1680100 | Па |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - |

Продовження таблиці Б.11

| | | | |
|---|---|---|---|
| 6 | радіус апарата | 1 | м |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.001 | м |
| Параметри стану системи до розриву оболонки: | | | |
| 8 | об'ємна частка рідкої фази | 0.5 | - |
| 9 | маса парової фази | 58 | кг |
| ***10*** | ***маса рідкої фази*** | ***945*** | ***кг*** |
| Параметри стану газової фази після розриву оболонки: | | | |
| 11 | маса | 497.90 | кг |
| 12 | температура | 281.58 | K |
| 13 | мольна частка пропану | 0.997988 | - |
| 14 | мольна частка азоту | 0.002012 | - |
| Параметри стану рідкої фази після розриву оболонки: | | | |
| ***15*** | ***маса*** | ***504.46*** | ***кг*** |
| ***16*** | ***температура*** | ***231.03*** | ***K*** |
| 17 | мольна частка пропану | 1.0 | - |
| 18 | мольна частка азоту | 0.0 | - |
| ***19*** | ***частка виливу розрахункова*** | ***53*** | ***%*** |
| ***20*** | ***частка виливу експериментальна (колба 1000 мл)*** | ***49*** | ***%*** |
| ***21*** | ***частка виливу експериментальна (колба 2000 мл)*** | ***49*** | ***%*** |
| ***22*** | ***температура кипіння пропану за 1 атм.*** | ***231.05*** | ***K*** |
| ***23*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 20*** | ***+8.16*** | ***%*** |
| ***24*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 21*** | ***+8.16*** | ***%*** |
| Дослід 2 | | | |
| Вхідні дані: | | | |
| 1 | мольна частка пропану у двофазній суміші | 0.999 | - |
| 2 | мольна частка азоту у двофазній суміші | 0.001 | - |
| 3 | температура суміші | 320.55 | K |
| 4 | тиск суміші | 1680100 | Па |

Продовження таблиці Б.11

| | | | |
|---|---|---|---|
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - |
| 6 | радіус апарата | 20 | м |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.001 | м |
| Параметри стану системи до розриву оболонки: | | | |
| 8 | об'ємна частка рідкої фази | 0.5 | - |
| 9 | маса парової фази | 463632 | кг |
| ***10*** | ***маса рідкої фази*** | ***7578125*** | ***кг*** |
| Параметри стану газової фази після розриву оболонки: | | | |
| 11 | маса | ***3994567.86*** | кг |
| 12 | температура | 281.58 | K |
| 13 | мольна частка пропану | 0.997988 | - |
| 14 | мольна частка азоту | 0.002012 | - |
| Параметри стану рідкої фази після розриву оболонки: | | | |
| ***15*** | ***маса*** | ***4047189.49*** | ***кг*** |
| ***16*** | ***температура*** | ***231.03*** | ***K*** |
| 17 | мольна частка пропану | 1.0 | - |
| 18 | мольна частка азоту | 0.0 | - |
| ***19*** | ***частка виливу розрахункова*** | ***53*** | ***%*** |
| ***20*** | ***частка виливу експериментальна (колба 1000 мл)*** | ***49*** | ***%*** |
| ***21*** | ***частка виливу експериментальна (колба 2000 мл)*** | ***49*** | ***%*** |
| ***22*** | ***температура кипіння пропану за 1 атм.*** | ***231.05*** | ***K*** |
| ***23*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 20*** | ***+8.16*** | ***%*** |
| ***24*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 21*** | ***+8.16*** | ***%*** |
| Дослід 3 | | | |
| Вхідні дані: | | | |
| 1 | мольна частка пропану у двофазній суміші | 0.999 | - |
| 2 | мольна частка азоту у двофазній суміші | 0.001 | - |
| 3 | температура суміші | 327.39 | K |

Продовження таблиці Б.11

| | | | |
|---|---|---|---|
| 4 | тиск суміші | 1944900 | Па |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - |
| 6 | радіус апарата | 1 | м |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.001 | м |
| Параметри стану системи до розриву оболонки: | | | |
| 8 | об'ємна частка рідкої фази | 0.5 | - |
| 9 | маса парової фази | 66 | кг |
| ***10*** | ***маса рідкої фази*** | ***916*** | ***кг*** |
| Параметри стану газової фази після розриву оболонки: | | | |
| 11 | маса | 525.59 | кг |
| 12 | температура | 296.84 | K |
| 13 | мольна частка пропану | 0.998132 | - |
| 14 | мольна частка азоту | 0.001868 | - |
| Параметри стану рідкої фази після розриву оболонки: | | | |
| ***15*** | ***маса*** | ***456.43*** | ***кг*** |
| ***16*** | ***температура*** | ***231.15*** | ***K*** |
| 17 | мольна частка пропану | 1.0 | - |
| 18 | мольна частка азоту | 0.0 | - |
| ***19*** | ***частка виливу розрахункова*** | ***50*** | ***%*** |
| ***20*** | ***частка виливу експериментальна (колба 1000 мл)*** | ***31*** | ***%*** |
| ***21*** | ***частка виливу експериментальна (колба 2000 мл)*** | ***39*** | ***%*** |
| ***22*** | ***температура кипіння пропану за 1 атм.*** | ***231.05*** | ***K*** |
| ***23*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 20*** | ***+61.29*** | ***%*** |
| ***24*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 21*** | ***+28.21*** | ***%*** |
| Дослід 4 | | | |
| Вхідні дані: | | | |
| 1 | мольна частка пропану у двофазній суміші | 0.999 | - |
| 2 | мольна частка азоту у двофазній суміші | 0.001 | - |

Продовження таблиці Б.11

| | | | |
|---|---|---|---|
| 3 | температура суміші | 333.55 | К |
| 4 | тиск суміші | 2207300 | Па |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - |
| 6 | радіус апарата | 1 | м |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.001 | м |
| Параметри стану системи до розриву оболонки: | | | |
| 8 | об'ємна частка рідкої фази | 0.5 | - |
| 9 | маса парової фази | 73 | кг |
| ***10*** | ***маса рідкої фази*** | ***892*** | ***кг*** |
| Параметри стану газової фази після розриву оболонки: | | | |
| 11 | маса | 550.78 | кг |
| 12 | температура | 290.85 | К |
| 13 | мольна частка пропану | 0.998249 | - |
| 14 | мольна частка азоту | 0.001751 | - |
| Параметри стану рідкої фази після розриву оболонки: | | | |
| ***15*** | ***маса*** | ***413.74*** | ***кг*** |
| ***16*** | ***температура*** | ***230.78*** | ***К*** |
| 17 | мольна частка пропану | 1.0 | - |
| 18 | мольна частка азоту | 0.0 | - |
| ***19*** | ***частка виливу розрахункова*** | ***46*** | ***%*** |
| ***20*** | ***частка виливу експериментальна (колба 1000 мл)*** | ***35*** | ***%*** |
| ***21*** | ***частка виливу експериментальна (колба 2000 мл)*** | ***38*** | ***%*** |
| ***22*** | ***температура кипіння пропану за 1 атм.*** | ***231.05*** | ***К*** |
| ***23*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 20*** | ***+31.43*** | ***%*** |
| ***24*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 21*** | ***+21.05*** | ***%*** |
| Дослід 5 | | | |
| Вхідні дані: | | | |
| 1 | мольна частка R-114 у двофазній суміші | 0.999 | - |

Продовження таблиці Б.11

| | | | |
|---|---|---|---|
| 2 | мольна частка азоту у двофазній суміші | 0.001 | - |
| 3 | температура суміші | 299.75 | К |
| 4 | тиск суміші | 242800 | Па |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - |
| 6 | радіус апарата | 1 | м |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.001 | м |
| Параметри стану системи до розриву оболонки: | | | |
| 8 | об'ємна частка рідкої фази | 0.5 | - |
| 9 | маса парової фази | 33 | кг |
| ***10*** | ***маса рідкої фази*** | ***2956*** | ***кг*** |
| Параметри стану газової фази після розриву оболонки: | | | |
| 11 | маса | 342.76 | кг |
| 12 | температура | 288.03 | К |
| 13 | мольна частка R-114 | 0.991335 | - |
| 14 | мольна частка азоту | 0.008665 | - |
| Параметри стану рідкої фази після розриву оболонки: | | | |
| ***15*** | ***маса*** | ***2646.30*** | ***кг*** |
| ***16*** | ***температура*** | ***276.78*** | ***К*** |
| 17 | мольна частка R-114 | 1.0 | - |
| 18 | мольна частка азоту | 0.0 | - |
| ***19*** | ***частка виливу розрахункова*** | ***90*** | ***%*** |
| ***20*** | ***частка виливу експериментальна (наземний викид)*** | ***65*** | ***%*** |
| ***21*** | ***частка виливу експериментальна (піднесений викид)*** | ***57*** | ***%*** |
| ***22*** | ***температура кипіння R-114 за 1 атм.*** | ***276.65*** | ***К*** |
| ***23*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 20*** | ***+38.46*** | ***%*** |
| ***24*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 21*** | ***+57.90*** | ***%*** |
| Дослід 6 | | | |
| Вхідні дані: | | | |

Продовження таблиці Б.11

| | | | |
|---|---|---|---|
| 1 | мольна частка R-114 у двофазній суміші | 0.999 | - |
| 2 | мольна частка азоту у двофазній суміші | 0.001 | - |
| 3 | температура суміші | 309.75 | К |
| 4 | тиск суміші | 327000 | Па |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - |
| 6 | радіус апарата | 1 | м |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.001 | м |
| Параметри стану системи до розриву оболонки: | | | |
| 8 | об'ємна частка рідкої фази | 0.5 | - |
| 9 | маса парової фази | 43 | кг |
| ***10*** | ***маса рідкої фази*** | ***2920*** | ***кг*** |
| Параметри стану газової фази після розриву оболонки: | | | |
| 11 | маса | 480.81 | кг |
| 12 | температура | 293.55 | К |
| 13 | мольна частка R-114 | 0.993863 | - |
| 14 | мольна частка азоту | 0.006137 | - |
| Параметри стану рідкої фази після розриву оболонки: | | | |
| ***15*** | ***маса*** | ***2482.58*** | ***кг*** |
| ***16*** | ***температура*** | ***276.96*** | ***К*** |
| 17 | мольна частка R-114 | 1.0 | - |
| 18 | мольна частка азоту | 0.0 | - |
| ***19*** | ***частка виливу розрахункова*** | ***85*** | ***%*** |
| ***20*** | ***частка виливу експериментальна (наземний викид)*** | ***37*** | ***%*** |
| ***21*** | ***частка виливу експериментальна (піднесений викид)*** | ***60*** | ***%*** |
| ***22*** | ***температура кипіння R-114 за 1 атм.*** | ***276.65*** | ***К*** |
| ***23*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 20*** | ***+129.73*** | ***%*** |
| ***24*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 21*** | ***+41.67*** | ***%*** |
| Дослід 7 | | | |

Продовження таблиці Б.11

| | | | |
|---|---|---|---|
| Вхідні дані: | | | |
| 1 | мольна частка R-114 у двофазній суміші | 0.999 | - |
| 2 | мольна частка азоту у двофазній суміші | 0.001 | - |
| 3 | температура суміші | 319.75 | К |
| 4 | тиск суміші | 432400 | Па |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - |
| 6 | радіус апарата | 1 | м |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.001 | м |
| Параметри стану системи до розриву оболонки: | | | |
| 8 | об'ємна частка рідкої фази | 0.5 | - |
| 9 | маса парової фази | 56 | кг |
| ***10*** | ***маса рідкої фази*** | ***2858*** | ***кг*** |
| Параметри стану газової фази після розриву оболонки: | | | |
| 11 | маса | 615.90 | кг |
| 12 | температура | 302.03 | К |
| 13 | мольна частка R-114 | 0.995283 | - |
| 14 | мольна частка азоту | 0.004717 | - |
| Параметри стану рідкої фази після розриву оболонки: | | | |
| ***15*** | ***маса*** | ***2298.44*** | ***кг*** |
| ***16*** | ***температура*** | ***276.94*** | ***К*** |
| 17 | мольна частка R-114 | 1.0 | - |
| 18 | мольна частка азоту | 0.0 | - |
| ***19*** | ***частка виливу розрахункова*** | ***80*** | ***%*** |
| ***20*** | ***частка виливу експериментальна (наземний викид)*** | ***32*** | ***%*** |
| ***21*** | ***частка виливу експериментальна (піднесений викид)*** | ***33*** | ***%*** |
| ***22*** | ***температура кипіння R-114 за 1 атм.*** | ***276.65*** | ***К*** |
| ***23*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 20*** | ***+150.00*** | ***%*** |
| ***24*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 21*** | ***+142.42*** | ***%*** |

Продовження таблиці Б.11

| Дослід 8 | | | |
|---|---|---|---|
| Вхідні дані: | | | |
| 1 | мольна частка R-12 у двофазній суміші | 0.999 | - |
| 2 | мольна частка азоту у двофазній суміші | 0.001 | - |
| 3 | температура суміші | 295.15 | K |
| 4 | тиск суміші | 637900 | Па |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - |
| 6 | радіус апарата | 1 | м |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.001 | м |
| Параметри стану системи до розриву оболонки: | | | |
| 8 | об'ємна частка рідкої фази | 0.5 | - |
| 9 | маса парової фази | 64 | кг |
| ***10*** | ***маса рідкої фази*** | ***2718*** | ***кг*** |
| Параметри стану газової фази після розриву оболонки: | | | |
| 11 | маса | 786.50 | кг |
| 12 | температура | 274.26 | K |
| 13 | мольна частка R-12 | 0.99647 | - |
| 14 | мольна частка азоту | 0.00353 | - |
| Параметри стану рідкої фази після розриву оболонки: | | | |
| ***15*** | ***маса*** | ***1995.34*** | ***кг*** |
| ***16*** | ***температура*** | ***243.33*** | ***K*** |
| 17 | мольна частка R-12 | 1.0 | - |
| 18 | мольна частка азоту | 0.0 | - |
| ***19*** | ***частка виливу розрахункова*** | ***73*** | ***%*** |
| ***20*** | ***частка виливу експериментальна (наземний викид)*** | ***36*** | ***%*** |
| ***21*** | ***частка виливу експериментальна (піднесений викид)*** | ***39*** | ***%*** |
| ***22*** | ***температура кипіння R-12 за 1 атм.*** | ***243.35*** | ***K*** |
| ***23*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 20*** | ***+102.78*** | ***%*** |

Продовження таблиці Б.11

| | | | |
|---|---|---|---|
| ***24*** | ***відносна похибка для рядків 19 і 21*** | ***+87.18*** | ***%*** |

Таблиця Б.12 – Вихідні параметри стану джерела небезпеки

| № п/п | Найменування параметра | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| Вихідні дані: | | | |
| 1 | мольна частка пропану у двофазній суміші | 0.999 | - |
| 2 | мольна частка азоту у двофазній суміші | 0.001 | - |
| 3 | температура суміші | 320.55 | К |
| 4 | тиск суміші | 1680100 | Па |
| 5 | фігура подоби апарата | вертикальний циліндр | - |
| 6 | висота апарата | 10 | м |
| 7 | радіус апарата | 1.5 | м |
| 8 | товщина стінки апарата | 0.025 | м |
| Параметри стану системи до розгерметизації: | | | |
| 9 | об'ємна частка рідкої фази | 0.5 | - |
| 10 | рівень рідкої фази (стосовно нижньої частини апарата) | 5 | м |
| 11 | маса парової фази | 706 | кг |
| 12 | маса рідкої фази | 16276 | кг |
| Параметри аварійного отвору: | | | |
| 13 | діаметр | 0.05 | м |
| 14 | висота розташування | 1 | м |
| Параметри розрахунку: | | | |
| 15 | модельний час | 30 | с |
| 16 | крок за часом | 1 | с |

Таблиця Б.13 – Результати моделювання витоку за допомогою модуля Витік із отвору

| Час, сек | Інтенсивність | Температура | Тиск | Склад |
|---|---|---|---|---|
| 0.0 | 1460.34 моль/сек | 306.25 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000336: азот<br>0.999663: пропан |
| 1.0 | 1460.01 моль/сек | 306.24 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000335: азот<br>0.999664: пропан |
| 2.0 | 1459.75 моль/сек | 306.22 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000335: азот<br>0.999665: пропан |
| 3.0 | 1459.28 моль/сек | 306.20 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000333: азот<br>0.999666: пропан |
| 4.0 | 1459.01 моль/сек | 306.19 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000333: азот<br>0.999667: пропан |
| 5.0 | 1458.75 моль/сек | 306.18 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000332: азот<br>0.999668: пропан |
| 6.0 | 1458.47 моль/сек | 306.17 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000331: азот<br>0.999669: пропан |
| 7.0 | 1458.02 моль/сек | 306.14 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.00033: азот<br>0.999671: пропан |
| 8.0 | 1457.75 моль/сек | 306.13 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000329: азот<br>0.999671: пропан |

Продовження таблиці Б.13

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 9.0 | 1457.49 моль/сек | 306.12 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000328: азот<br>0.999672: пропан |
| 10.0 | 1457.02 моль/сек | 306.10 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000327: азот<br>0.999673: пропан |
| 11.0 | 1456.75 моль/сек | 306.09 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000326: азот<br>0.999674: пропан |
| 12.0 | 1456.49 моль/сек | 306.08 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000326: азот<br>0.999675: пропан |
| 13.0 | 1456.22 моль/сек | 306.06 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000325: азот<br>0.999675: пропан |
| 14.0 | 1455.75 моль/сек | 306.04 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000324: азот<br>0.999677: пропан |
| 15.0 | 1455.49 моль/сек | 306.03 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000323: азот<br>0.999676: пропан |
| 16.0 | 1455.03 моль/сек | 306.01 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000322: азот<br>0.999679: пропан |
| 17.0 | 1454.77 моль/сек | 306.00 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000321: азот<br>0.999679: пропан |

Продовження таблиці Б.13

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 18.0 | 1454.30 моль/сек | 305.97 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.00032: азот<br>0.999679: пропан |
| 19.0 | 1453.85 моль/сек | 305.95 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000319: азот<br>0.999681: пропан |
| 20.0 | 1453.59 моль/сек | 305.94 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000319: азот<br>0.999681: пропан |
| 21.0 | 1453.12 моль/сек | 305.92 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000317: азот<br>0.999682: пропан |
| 22.0 | 1452.85 моль/сек | 305.90 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000317: азот<br>0.999683: пропан |
| 23.0 | 1452.59 моль/сек | 305.89 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000316: азот<br>0.999684: пропан |
| 24.0 | 1452.32 моль/сек | 305.88 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000315: азот<br>0.999684: пропан |
| 25.0 | 1452.05 моль/сек | 305.87 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000315: азот<br>0.999685: пропан |
| 26.0 | 1451.58 моль/сек | 305.85 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000313: азот<br>0.999687: пропан |

Продовження таблиці Б.13

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 27.0 | 1451.32 моль/сек | 305.84 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000312: азот<br>0.999687: пропан |
| 28.0 | 1451.05 моль/сек | 305.82 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000312: азот<br>0.999688: пропан |
| 29.0 | 1450.78 моль/сек | 305.81 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.000311: азот<br>0.999689: пропан |
| 30.0 | 1450.52 моль/сек | 305.80 K | 1329891.88 Па | Рідка фаза: 1.0<br>0.00031: азот<br>0.999689: пропан |

Таблиця Б.14 – Порівняння параметрів охолодженого рідкого потоку, отриманих із застосуванням інформаційної системи оцінки ризику та в результаті перевірочних розрахунків

| Модельний час, с | Витрата рідкого потоку після кипіння, прогр. модуль, моль/с | Витрата рідкого потоку після кипіння, перевірочний розрахунок, моль/с | Відносна похибка для витрати, % | Температура рідкого потоку після кипіння, прогр. модуль, K | Температура рідкого потоку після кипіння перевірочний розрахунок, K | Відносна похибка для температури, % | Мольна частка $N_2$ у рідкому потоці після кипіння, прогр. | Мольна частка $N_2$ у рідкому потоці після кипіння перевірочний розрахунок | Мольна частка $C_3H_8$ в рідкому потоці після кипіння, прор. модуль | Мольна частка $C_3H_8$ у рідкому потоці після кипіння перевірочний розрахунок |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 889.34 | 889.34706 | -0.000793841 | 231.02 | 231.02373 | -0.001614553 | 0 | 5.811E-33 | 1 | 0.9999984 |
| 1 | 889.15 | 889.14609 | 0.000439748 | 231 | 231.00715 | -0.003095142 | 0 | 5.621E-33 | 1 | 0.9999984 |
| 2 | 888.99 | 888.98775 | 0.000253097 | 230.98 | 230.97461 | 0.0023335 9 | 0 | 5.295E-33 | 1 | 1 |
| 3 | 888.7 | 888.70152 | -0.000171036 | 230.94 | 230.94133 | -0.000575904 | 0 | 4.951E-33 | 1 | 0.9999984 |
| 4 | 888.54 | 888.53709 | 0.000327505 | 230.92 | 230.92512 | -0.002217169 | 0 | 4.806E-33 | 1 | 1 |

Продовження таблиці Б.14

| | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 5 | 888.38 | 888.37875 | 0.000140706 | 230.91 | 230.9085 4 | 0.000632285 | 0 | 4.647E-33 | 1 | 1 |
| 6 | 888.21 | 888.20823 | 0.000199278 | 230.89 | 230.8919 6 | -0.000848882 | 0 | 4.494E-33 | 1 | 1 |
| 7 | 889.39 | 889.3922 | -0.00024736 | 231.16 | 231.1556 9 | 0.001864544 | 0 | 8.008E-33 | 1 | 1.0000016 |
| 8 | 889.23 | 889.2275 | 0.000281143 | 231.14 | 231.1390 1 | 0.000428314 | 0 | 7.744E-33 | 1 | 1 |
| 9 | 889.07 | 889.0689 | 0.000123725 | 231.12 | 231.1224 6 | -0.001064371 | 0 | 7.491E-33 | 1 | 1 |
| 10 | 888.78 | 888.7822 | -0.00024753 | 231.09 | 231.0896 | 0.000173093 | 0 | 7.035E-33 | 1 | 1 |
| 11 | 888.62 | 888.6175 | 0.000281336 | 231.07 | 231.0730 5 | -0.001319929 | 0 | 6.804E-33 | 1 | 1 |
| 12 | 888.46 | 888.4589 | 0.00012381 | 231.05 | 231.0568 7 | -0.002973294 | 0 | 6.607E-33 | 1 | 1.0000016 |
| 13 | 888.3 | 888.2942 | 0.000652937 | 231.03 | 231.0238 9 | 0.002644748 | 0 | 6.201E-33 | 1 | 1 |
| 14 | 888.01 | 888.0075 | 0.000281529 | 230.99 | 230.9911 6 | -0.000502184 | 0 | 5.822E-33 | 1 | 1.0000016 |
| 15 | 887.85 | 887.8489 | 0.000123895 | 230.97 | 230.9743 6 | -0.001887655 | 0 | 5.628E-33 | 1 | 0.999998 4 |

Продовження таблиці Б.14

| | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 16 | 887.57 | 887.5683 | 0.000191535 | 230.94 | 230.94175 | -0.000757767 | 0 | 5.285E-33 | 1 | 1.0000016 |
| 17 | 887.41 | 887.4097 | 3.38063E-05 | 230.92 | 230.92508 | -0.002199848 | 0 | 5.109E-33 | 1 | 1 |
| 18 | 887.12 | 887.123 | -0.000338172 | 230.88 | 230.8758 | 0.00181916 | 0 | 4.652E-33 | 1 | 0.9999984 |
| 19 | 888.31 | 888.30235 | 0.000861193 | 231.16 | 231.15541 | 0.001985677 | 0 | 8.529E-33 | 1 | 1 |
| 20 | 888.14 | 888.14349 | -0.000392955 | 231.14 | 231.13913 | 0.000376397 | 0 | 8.281E-33 | 1 | 1 |
| 21 | 887.85 | 887.85632 | -0.000711827 | 231.1 | 231.10596 | -0.002578904 | 0 | 7.747E-33 | 1 | 0.9999984 |
| 22 | 887.69 | 887.69135 | -0.00015208 | 231.08 | 231.07352 | 0.002804302 | 0 | 7.303E-33 | 1 | 1 |
| 23 | 887.53 | 887.53249 | -0.000280553 | 231.06 | 231.057 | 0.001298381 | 0 | 7.064E-33 | 1 | 1 |
| 24 | 887.37 | 887.36752 | 0.000279478 | 231.04 | 231.04036 | -0.000155817 | 0 | 6.83E-33 | 1 | 0.9999984 |
| 25 | 887.2 | 887.20255 | -0.00028742 | 231.02 | 231.0242 | -0.001817991 | 0 | 6.632E-33 | 1 | 1 |

Продовження таблиці Б.14

| | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 26 | 886.92 | 886.91538 | 0.000520907 | 230.99 | 230.9916 | -0.000502184 | 0 | 6.203E-33 | 1 | 1 |
| 27 | 886.75 | 886.75652 | -0.000735264 | 230.97 | 230.9745 2 | -0.001956926 | 0 | 5.997E-33 | 1 | 0.999998 4 |
| 28 | 886.59 | 886.59155 | -0.000174827 | 230.95 | 230.9420 9 | 0.003425101 | 0 | 5.652E-33 | 1 | 1 |
| 29 | 886.43 | 886.42658 | 0.000385819 | 230.93 | 230.9255 7 | 0.001918367 | 0 | 5.465E-33 | 1 | 1 |
| 30 | 886.27 | 886.26772 | 0.000257259 | 230.91 | 230.9089 3 | 0.000463386 | 0 | 5.284E-33 | 1 | 0.999998 4 |

Таблиця Б.15 – Порівняння параметрів газового потоку, що утворився в результаті кипіння, отриманих із застосуванням інформаційної системи оцінки ризику та в результаті перевірочних розрахунків

| Модельний час, с | Витрата газового потоку після кипіння, прогр. модуль, моль/с | Витрата газового потоку після кипіння перевірочний розрахунок, моль/с | Відносна похибка для витрати, % | Температура газового потоку після кипіння, прогр. модуль, K | Температура газового потоку після кипіння, перевірочний розрахунок, K | Відносна похибка для температури, % | Мольна частка $N_2$ у газовому потоці після кипіння, прогр. модуль | Мольна частка $N_2$ у газовому потоці після кипіння, перевірочний розрахунок | Мольна частка $C_3H_8$ у газовому потоці після кипіння, прогр. модуль | Мольна частка $C_3H_8$ у газовому потоці після кипіння, перевірочний розрахунок |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 570.99 | 570.99294 | -0.00051 | 275.93 | 275.93637 | -0.00231 | 0.00086 | 0.0008593 | 0.9991 4 | 0.9991407 |
| 1 | 570.86 | 570.86391 | -0.00068 | 275.92 | 275.92373 | -0.00135 | 0.000858 | 0.0008568 | 0.999142 | 0.9991432 |
| 2 | 570.76 | 570.76225 | -0.00039 | 275.9 | 275.89875 | 0.000453 | 0.000856 | 0.0008568 | 0.999144 | 0.9991432 |
| 3 | 570.58 | 570.57848 | 0.00026 6 | 275.87 | 275.87342 | -0.00124 | 0.000853 | 0.0008517 | 0.999147 | 0.9991483 |
| 4 | 570.47 | 570.47291 | -0.00051 | 275.86 | 275.86095 | -0.00034 | 0.000851 | 0.0008517 | 0.999149 | 0.9991483 |

Продовження таблиці Б.15

| | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 5 | 570.37 | 570.37125 | -0.00022 | 275.85 | 275.84831 | 0.00061 3 | 0.00084 9 | 0.0008491 | 0.99915 1 | 0.9991509 |
| 6 | 570.26 | 570.26177 | -0.00031 | 275.83 | 275.83567 | -0.00206 | 0.00084 6 | 0.0008465 | 0.99915 4 | 0.9991535 |
| 7 | 568.63 | 568.6278 | 0.00038 7 | 275.91 | 275.90027 | 0.00352 7 | 0.00084 5 | 0.0008462 | 0.99915 5 | 0.9991538 |
| 8 | 568.52 | 568.5225 | -0.00044 | 275.89 | 275.88759 | 0.00087 4 | 0.00084 4 | 0.0008436 | 0.99915 6 | 0.9991564 |
| 9 | 568.42 | 568.4211 | -0.00019 | 275.88 | 275.87496 | 0.00182 7 | 0.00084 2 | 0.000841 | 0.99915 8 | 0.999159 |
| 10 | 568.24 | 568.2378 | 0.00038 7 | 275.85 | 275.84983 | 6.16E-05 | 0.00083 8 | 0.0008385 | 0.99916 2 | 0.9991615 |
| 11 | 568.13 | 568.1325 | -0.00044 | 275.83 | 275.83719 | -0.00261 | 0.00083 7 | 0.0008359 | 0.99916 3 | 0.9991641 |
| 12 | 568.03 | 568.0311 | -0.00019 | 275.82 | 275.82473 | -0.00171 | 0.00083 5 | 0.0008359 | 0.99916 5 | 0.9991641 |
| 13 | 567.93 | 567.9258 | 0.00074 | 275.8 | 275.79956 | 0.00016 | 0.00083 3 | 0.0008333 | 0.99916 7 | 0.9991667 |
| 14 | 567.74 | 567.7425 | -0.00044 | 275.78 | 275.77446 | 0.00200 9 | 0.00083 | 0.0008308 | 0.99917 | 0.9991692 |
| 15 | 567.64 | 567.6411 | -0.00019 | 275.76 | 275.76175 | -0.00063 | 0.00082 8 | 0.0008282 | 0.99917 2 | 0.9991718 |
| 16 | 567.46 | 567.4617 | -0.0003 | 275.73 | 275.7367 | -0.00243 | 0.00082 5 | 0.0008256 | 0.99917 5 | 0.9991744 |
| 17 | 567.36 | 567.3603 | -5.3E-05 | 275.72 | 275.72403 | -0.00146 | 0.00082 4 | 0.0008231 | 0.99917 6 | 0.9991769 |
| 18 | 567.18 | 567.177 | 0.00052 9 | 275.69 | 275.68635 | 0.00132 4 | 0.00082 1 | 0.0008205 | 0.99917 9 | 0.9991795 |

Продовження таблиці Б.15

| | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 19 | 565.55 | 565.54765 | 0.00041<br>6 | 275.76 | 275.76346 | -0.00125 | 0.00082<br>1 | 0.0008201 | 0.99917<br>9 | 0.9991799 |
| 20 | 565.45 | 565.44651 | 0.00061<br>7 | 275.75 | 275.75097 | -0.00035 | 0.00082 | 0.0008201 | 0.99918 | 0.9991799 |
| 21 | 565.26 | 565.26368 | -0.00065 | 275.72 | 275.72568 | -0.00206 | 0.00081<br>6 | 0.0008149 | 0.99918<br>4 | 0.9991851 |
| 22 | 565.16 | 565.15865 | 0.00023<br>9 | 275.71 | 275.70073 | 0.00336<br>2 | 0.00081<br>4 | 0.0008149 | 0.99918<br>6 | 0.9991851 |
| 23 | 565.06 | 565.05751 | 0.00044<br>1 | 275.69 | 275.68811 | 0.00068<br>6 | 0.00081<br>2 | 0.0008123 | 0.99918<br>8 | 0.9991877 |
| 24 | 564.95 | 564.95248 | -0.00044 | 275.68 | 275.67545 | 0.00165 | 0.00081<br>1 | 0.0008098 | 0.99918<br>9 | 0.9991902 |
| 25 | 564.85 | 564.84745 | 0.00045<br>1 | 275.66 | 275.66299 | -0.00108 | 0.00080<br>9 | 0.0008098 | 0.99919<br>1 | 0.9991902 |
| 26 | 564.67 | 564.66462 | 0.00095<br>3 | 275.63 | 275.63775 | -0.00281 | 0.00080<br>5 | 0.0008046 | 0.99919<br>5 | 0.9991954 |
| 27 | 564.56 | 564.56348 | -0.00062 | 275.62 | 275.62509 | -0.00185 | 0.00080<br>3 | 0.0008021 | 0.99919<br>7 | 0.9991979 |
| 28 | 564.46 | 564.45845 | 0.00027<br>5 | 275.61 | 275.60014 | 0.00357<br>8 | 0.00080<br>1 | 0.0008021 | 0.99919<br>9 | 0.9991979 |
| 29 | 564.36 | 564.35342 | 0.00116<br>6 | 275.59 | 275.58752 | 0.0009 | 0.0008 | 0.0007995 | 0.9992 | 0.9992005 |
| 30 | 564.25 | 564.25228 | -0.0004 | 275.58 | 275.57486 | 0.00186<br>5 | 0.00079<br>8 | 0.0007969 | 0.99920<br>2 | 0.9992031 |

Таблиця Б.16 – Параметри джерела небезпеки

| № п/п | Найменування параметра | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| 1 | Тип апарата | Сфера | - |
| 2 | Радіус | 5 | м |
| 3 | Товщина стінки | 0.01 | м |
| 4 | Мольна частка азоту | 0.001 | - |
| 5 | Мольна частка пропану | 0.997 | - |
| 6 | Мольна частка бутану | 0.001 | - |
| 7 | Мольна частка гексану | 0.001 | - |
| 8 | Температура | 293.15 | K |
| 9 | Тиск | 9.013 | бар |
| Вхідний потік 1 | | | |
| 10 | Мольна частка бутану | 0.95 | - |
| 11 | Мольна частка гексану | 0.05 | - |
| 12 | Температура суміші | 293.15 | K |
| 13 | Тиск | 10.013 | бар |
| 14 | Висота штуцера | 0 | м |
| 15 | Номінальний діаметр штуцера | 100 | мм |

Продовження таблиці Б.16

| | | | |
|---|---|---|---|
| 16 | Гідравлічний опір | 1 | Па·м·с$^2$/кг |
| Вхідний потік 2 | | | |
| 17 | Мольна частка азоту | 0.001 | - |
| 18 | Мольна частка пропану | 0.997 | - |
| 19 | Мольна частка бутану | 0.001 | - |
| 20 | Мольна частка гексану | 0.001 | - |
| 21 | Температура суміші | 293.15 | K |
| 22 | Тиск | 10.013 | бар |
| 23 | Висота штуцера | 0 | м |
| 24 | Номінальний діаметр штуцера | 100 | мм |
| 25 | Гідравлічний опір | 1 | Па·м·с$^2$/кг |
| Вихідний потік 3 | | | |
| 26 | Мольна частка пропану | 0.6 | - |
| 27 | Мольна частка бутану | 0.2 | - |
| 28 | Мольна частка гексану | 0.2 | - |
| 29 | Температура суміші | 293.15 | K |
| 30 | Тиск | 8.013 | бар |
| 31 | Висота штуцера | 0 | м |

Продовження таблиці Б.16

| | | | |
|---|---|---|---|
| 32 | Номінальний діаметр штуцера | 100 | мм |
| 33 | Гідравлічний опір | 1 | Па·м·с$^2$/кг |

Таблиця Б.17 – Порівняльна таблиця для динаміки зміни маси, отриманої за допомогою моделі і в результаті експерименту

| Час, с | Маса виливу (експеримент), кг | Маса виливу (модель), кг | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| 0.907716 | 11.1501 | 11.53996 | 3.496503 |
| 39.03177 | 10.87719 | 11.22807 | 3.225806 |
| 78.06354 | 10.52632 | 11.03314 | 4.814815 |
| 117.0953 | 10.17544 | 10.79922 | 6.130268 |
| 157.0348 | 9.902534 | 10.60429 | 7.086614 |
| 196.0666 | 9.551657 | 10.33138 | 8.163265 |
| 233.2829 | 9.239766 | 10.09747 | 9.2827 |
| 271.407 | 8.966862 | 9.902534 | 10.43478 |
| 310.4387 | 8.693957 | 9.668616 | 11.21076 |
| 350.3782 | 8.421053 | 9.434698 | 12.03704 |
| 388.5023 | 8.031189 | 9.239766 | 15.04854 |
| 427.534 | 7.719298 | 9.005848 | 16.66667 |
| 465.6581 | 7.48538 | 8.77193 | 17.1875 |

Продовження таблиці Б.17

| | | | |
|---|---|---|---|
| 504.6899 | 7.095517 | 8.576998 | 20.87912 |
| 543.7216 | 6.822612 | 8.382066 | 22.85714 |
| 581.8457 | 6.510721 | 8.148148 | 25.1497 |

Таблиця Б.18 – Порівняльна таблиця залежності швидкості випаровування виливу етанолу від швидкості вітру для моделі і експерименту. Температура виливу етанолу 303 K

| Швидкість вітру, м/с | Швидкість випаровування (експеримент), кг/с | Швидкість випаровування (модель), кг/с | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| 1.644371 | 0.000948 | 0.000758 | -20.1087 |
| 3.510604 | 0.000845 | 0.001366 | 61.58537 |
| 3.680261 | 0.000938 | 0.001423 | 51.64835 |
| 3.823817 | 0.000716 | 0.001464 | 104.3165 |
| 3.941272 | 0.001052 | 0.001505 | 43.13725 |
| 4.241436 | 0.001093 | 0.001582 | 44.81132 |
| 4.254486 | 0.000964 | 0.001593 | 65.24064 |
| 4.424144 | 0.001443 | 0.001644 | 13.92857 |

Таблиця Б.19 – Порівняльна таблиця залежності швидкості випаровування виливу етанолу від швидкості вітру для моделі і експерименту. Температура виливу етанолу 310 K

| Швидкість вітру, м/с | Швидкість випаровування (експеримент), кг/с | Швидкість випаровування (модель), кг/с | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| 2.363636 | 0.000791 | 0.001411 | 78.44828 |
| 2.545455 | 0.000682 | 0.0015 | 120 |
| 3.207792 | 0.001323 | 0.0018 | 36.08247 |
| 4.415584 | 0.001616 | 0.002291 | 41.77215 |
| 4.519481 | 0.001575 | 0.002345 | 48.91775 |
| 4.662338 | 0.001207 | 0.002414 | 100 |
| 4.74026 | 0.001118 | 0.002455 | 119.5122 |

Таблиця Б.20 – Порівняльна таблиця залежності швидкості випаровування виливу етанолу від швидкості вітру для моделі і експерименту. Температура виливу етанолу 317 K

| Швидкість вітру, м/с | Швидкість випаровування (експеримент), кг/с | Швидкість випаровування (модель), кг/с | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| 2.313725 | 0.001422 | 0.001919 | 34.93976 |
| 2.392157 | 0.001405 | 0.00197 | 40.2439 |
| 2.444444 | 0.001113 | 0.002004 | 80 |
| 2.48366 | 0.001388 | 0.00203 | 46.2963 |

Продовження таблиці Б.20

| | | | |
|---|---|---|---|
| 2.771242 | 0.00155 | 0.00221 | 42.54144 |
| 3.503268 | 0.001722 | 0.002655 | 54.22886 |
| 3.699346 | 0.001627 | 0.002775 | 70.52632 |
| 4.300654 | 0.001567 | 0.003118 | 98.9071 |
| 5.124183 | 0.002313 | 0.003563 | 54.07407 |
| 5.555556 | 0.002715 | 0.003794 | 39.74763 |

Таблиця Б.21 – Порівняльна таблиця залежності швидкості випаровування виливу циклогексану від швидкості вітру для моделі і експерименту. Температура виливу циклогексану 303 К

| Швидкість вітру, м/с | Швидкість випаровування (експеримент), кг/с | Швидкість випаровування (модель), кг/с | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| 1.623568 | 0.000954 | 0.001087 | 13.97849 |
| 3.456628 | 0.000856 | 0.001923 | 124.5509 |
| 3.692308 | 0.000954 | 0.002021 | 111.828 |
| 3.770867 | 0.000733 | 0.002046 | 179.021 |
| 3.954173 | 0.001067 | 0.002133 | 100 |
| 4.163666 | 0.001108 | 0.002215 | 100 |
| 4.255319 | 0.000979 | 0.002256 | 130.3665 |
| 4.373159 | 0.001451 | 0.002303 | 58.65724 |

Таблиця Б.22 – Порівняльна таблиця залежності швидкості випаровування виливу циклогексану від швидкості вітру для моделі і експерименту. Температура виливу циклогексану 310 K

| Швидкість вітру, м/с | Швидкість випаровування (експеримент), кг/с | Швидкість випаровування (модель), кг/с | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| 2.294872 | 0.000829 | 0.001829 | 120.6612 |
| 2.474359 | 0.000678 | 0.001945 | 186.8687 |
| 3.128205 | 0.001315 | 0.002336 | 77.60417 |
| 4.397436 | 0.00161 | 0.003034 | 88.51064 |
| 4.461538 | 0.001616 | 0.003082 | 90.67797 |
| 4.653846 | 0.001192 | 0.003171 | 166.092 |
| 4.679487 | 0.001116 | 0.003185 | 185.2761 |

Таблиця Б.23 Порівняльна таблиця залежності швидкості випаровування виливу циклогексану від швидкості вітру для моделі і експерименту. Температура виливу циклогексану 317 K

| Швидкість вітру, м/с | Швидкість випаровування (експеримент), кг/с | Швидкість випаровування (модель), кг/с | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| 2.302439 | 0.001432 | 0.002384 | 66.42857 |
| 2.380488 | 0.001412 | 0.002445 | 73.18841 |
| 2.43252 | 0.001371 | 0.002476 | 80.59701 |

Продовження таблиці Б.23

| | | | |
|---|---|---|---|
| 2.471545 | 0.001095 | 0.002506 | 128.972 |
| 2.770732 | 0.001535 | 0.002752 | 79.33333 |
| 3.486179 | 0.001698 | 0.003294 | 93.9759 |
| 3.707317 | 0.001606 | 0.003437 | 114.0127 |
| 4.305691 | 0.001555 | 0.003867 | 148.6842 |
| 5.125203 | 0.002281 | 0.004419 | 93.72197 |
| 5.554472 | 0.00268 | 0.004716 | 75.9542 |

Таблиця Б.24 Початкові параметри стану джерела небезпеки

| № п/п | Найменування параметра | Значення | Розмірність |
|---|---|---|---|
| Вихідні дані апарата | | | |
| 1 | мольна частка метану | 0.5 | - |
| 2 | мольна частка етану | 0.5 | - |
| 3 | температура суміші | 295.15 | К |
| 4 | тиск суміші | 637900 | Па |
| 5 | фігура подоби апарата | сфера | - |
| 6 | радіус апарата | 1 | м |
| 7 | товщина стінки апарата | 0.001 | м |
| Параметри вхідного потоку "Метан 99.9" | | | |
| 8 | мольна частка метану | 0.999 | - |
| 9 | мольна частка етану | 0.001 | - |
| 10 | номінальний діаметр штуцера | 100 | мм |
| 11 | висота розташування штуцера | 0.5 | м |

Продовження таблиці Б.24

| | | | |
|---|---|---|---|
| 12 | гідравлічний опір | 1 | (Па*м*с2)/кг |
| 13 | температура потоку | 283.15 | K |
| 14 | тиск у газовій мережі (тиск суміші) | 701325 | Па |
| Параметри вхідного потоку "Етан 99.9" | | | |
| 15 | мольна частка метану | 0.999 | - |
| 16 | мольна частка етану | 0.001 | - |
| 17 | номінальний діаметр штуцера | 100 | мм |
| 18 | висота розташування штуцера | 0.5 | м |
| 19 | гідравлічний опір | 1 | (Па*м*с2)/кг |
| 20 | температура потоку | 293.15 | K |
| 21 | тиск у газовій мережі (тиск суміші) | 701325 | Па |
| Параметри вихідного потоку «Вихід метан етан» | | | |
| 22 | мольна частка метану | 0.5 | - |
| 23 | мольна частка етану | 0.5 | - |
| 24 | номінальний діаметр штуцера | 100 | мм |
| 25 | висота розташування штуцера | 0.5 | м |
| 26 | гідравлічний опір | 1 | (Па*м*с2)/кг |
| 27 | температура потоку | 303.15 | K |
| 28 | тиск у газовій мережі (тиск суміші) | 501325 | Па |
| Параметри систем перекриття потоків | | | |
| 29 | час перекриття потоку "Метан 99.9" | 10 | с |
| 30 | час перекриття потоку "Етан 99.9" | 20 | с |
| 31 | час перекриття потоку «Вихід метан етан» | 30 | с |
| Параметри розрахунку | | | |
| 32 | час розрахунку | 40 | с |
| 33 | крок розрахунку за часом | 1 | с |

Таблиця Б.25 – Результати моделювання витоку з фланця «Метан 99.9» за допомогою модуля Квазіміттєве руйнування

| Час, сек | Інтенсивність | Температура | Тиск | Склад |
|---|---|---|---|---|
| 0.0 | 598.82 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 1.0 | 598.82 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 2.0 | 598.82 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 3.0 | 598.82 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 4.0 | 598.82 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 5.0 | 598.82 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 6.0 | 598.82 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |

Продовження таблиці Б.25

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 7.0 | 598.82 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 8.0 | 598.82 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 9.0 | 598.82 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 10.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 11.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 12.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 13.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 14.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 15.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |

Продовження таблиці Б.25

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 16.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 17.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 18.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 19.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 20.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 21.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 22.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 23.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 24.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |

Продовження таблиці Б.25

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 25.0 | 0.00 моль/сек (0.00 кг/сек) | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 26.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 27.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 28.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 29.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 30.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 31.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 32.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 33.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |

Продовження таблиці Б.25

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 34.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 35.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 36.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 37.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 38.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 39.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |
| 40.0 | 0.00 моль/сек | 283.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.999: метан<br>0.001: азот |

Таблиця Б.26 – Результати моделювання витоку з фланця «Етан 99.9» за допомогою модуля Квазімиттєве руйнування

| Час, сек | Інтенсивність | Температура | Тиск | Склад |
|---|---|---|---|---|
| 0.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 1.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 2.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 3.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 4.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 5.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 6.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 7.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |

Продовження таблиці Б.26

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 8.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 9.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 10.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 11.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 12.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 13.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 14.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 15.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 16.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |

Продовження таблиці Б.26

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 17.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 18.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 19.0 | 415.67 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 20.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 21.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 22.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 23.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 24.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 25.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |

Продовження таблиці Б.26

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 26.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 27.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 28.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 29.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 30.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 31.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 32.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 33.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 34.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |

Продовження таблиці Б.26

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 35.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 36.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 37.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 38.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 39.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |
| 40.0 | 0.00 моль/сек | 293.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.001: азот<br>0.999: етан |

Таблиця Б.27 – Результати моделювання витоку з фланця «Вихід метан етан» за допомогою модуля Квазіміттєве руйнування

| Час, сек | Інтенсивність | Температура | Тиск | Склад |
|---|---|---|---|---|
| 0.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 1.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 2.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 3.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 4.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 5.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 6.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |

Продовження таблиці Б.27

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 7.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 8.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 9.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 10.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 11.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 12.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 13.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 14.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 15.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |

Продовження таблиці Б.27

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 16.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 17.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 18.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 19.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 20.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 21.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 22.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 23.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 24.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |

Продовження таблиці Б.27

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 25.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 26.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 27.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 28.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 29.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 30.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 31.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 32.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 33.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |

Продовження таблиці Б.27

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 34.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 35.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 36.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 37.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 38.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 39.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |
| 40.0 | 0.00 моль/сек | 303.15 K | 501325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: етан<br>0.5: метан |

Таблиця Б.28 – Результуючий потік, розрахований за допомогою програмного модуля «Усереднення газових потоків»

| Час, сек | Інтенсивність | Температура | Тиск | Склад |
|---|---|---|---|---|
| 0.0 | 1351.91 моль/сек | 292.13 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.567294: метан<br>0.00075: азот<br>0.431955: етан |
| 1.0 | 1351.91 моль/сек | 292.13 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.567294: метан<br>0.00075: азот<br>0.431955: етан |
| 2.0 | 1351.91 моль/сек | 292.13 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.567294: метан<br>0.00075: азот<br>0.431955: етан |
| 3.0 | 1351.91 моль/сек | 292.13 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.567294: метан<br>0.00075: азот<br>0.431955: етан |
| 4.0 | 1351.91 моль/сек | 292.13 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.567294: метан<br>0.00075: азот<br>0.431955: етан |
| 5.0 | 1351.91 моль/сек | 292.13 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.567294: метан<br>0.00075: азот<br>0.431955: етан |

Продовження таблиці Б.28

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 6.0 | 1351.91 моль/сек | 292.13 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.567294: метан<br>0.00075: азот<br>0.431955: етан |
| 7.0 | 1351.91 моль/сек | 292.13 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.567294: метан<br>0.00075: азот<br>0.431955: етан |
| 8.0 | 1351.91 моль/сек | 292.13 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.567294: метан<br>0.00075: азот<br>0.431955: етан |
| 9.0 | 1351.91 моль/сек | 292.13 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.567294: метан<br>0.00075: азот<br>0.431955: етан |
| 10.0 | 753.08 моль/сек | 297.26 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.224019: метан<br>0.000552: азот<br>0.775429: етан |
| 11.0 | 753.08 моль/сек | 297.26 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.224019: метан<br>0.000552: азот<br>0.775429: етан |

Продовження таблиці Б.28

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 12.0 | 753.08 моль/сек | 297.26 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.224019: метан<br>0.000552: азот<br>0.775429: етан |
| 13.0 | 753.08 моль/сек | 297.26 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.224019: метан<br>0.000552: азот<br>0.775429: етан |
| 14.0 | 753.08 моль/сек | 297.26 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.224019: метан<br>0.000552: азот<br>0.775429: етан |
| 15.0 | 753.08 моль/сек | 297.26 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.224019: метан<br>0.000552: азот<br>0.775429: етан |
| 16.0 | 753.08 моль/сек | 297.26 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.224019: метан<br>0.000552: азот<br>0.775429: етан |
| 17.0 | 753.08 моль/сек | 297.26 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.224019: метан<br>0.000552: азот<br>0.775429: етан |

Продовження таблиці Б.28

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 18.0 | 753.08 моль/сек | 297.26 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.224019: метан<br>0.000552: азот<br>0.775429: етан |
| 19.0 | 753.08 моль/сек | 297.26 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.224019: метан<br>0.000552: азот<br>0.775429: етан |
| 20.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: метан<br>0.0: азот<br>0.5: етан |
| 21.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: метан<br>0.0: азот<br>0.5: етан |
| 22.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: метан<br>0.0: азот<br>0.5: етан |
| 23.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: метан<br>0.0: азот<br>0.5: етан |

Продовження таблиці Б.28

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 24.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: метан<br>0.0: азот<br>0.5: етан |
| 25.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: метан<br>0.0: азот<br>0.5: етан |
| 26.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: метан<br>0.0: азот<br>0.5: етан |
| 27.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: метан<br>0.0: азот<br>0.5: етан |
| 28.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: метан<br>0.0: азот<br>0.5: етан |
| 29.0 | 337.41 моль/сек | 303.15 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.5: метан<br>0.0: азот<br>0.5: етан |

Продовження таблиці Б.28

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 30.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |
| 31.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |
| 32.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |
| 33.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |
| 34.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |
| 35.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |

Продовження таблиці Б.28

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 36.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |
| 37.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |
| 38.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |
| 39.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |
| 40.0 | 0.00 моль/сек | 296.24 K | 701325.00 Па | Парова фаза: 1.0<br>0.49975: метан<br>0.0005: азот<br>0.49975: етан |

Таблиця Б.29 – Перевірка матеріального балансу (результ. потік = результуючий потік, розрах. = розрахункова, прогр. = програмний)

| Час, с | Сума витрат окремих газових потоків (розрах.), моль/с | Витрата результ. газового потоку (прогр. модуль), моль/с | Відносна похибка для загальної витрати, % | Розрах. сумарна витрата $CH_4$ (розрах), моль/с | Витрата $CH_4$ у результ. потоці (прогр. модуль), моль/с | Відносна похибка для витрати $CH_4$, % | Розрах. сумарна витрата $C_2H_6$ (розрах), моль/с | Витрата $C_2H_6$ у результ. потоці (прогр. модуль), моль/с | Відносна похибка для витрати $C_2H_6$, % | Розрах. сумарна витрата $N_2$ (розрах), моль/с | Витрата $N_2$ у результ. потоці (прогр. модуль), моль/с | Відносна похибка для витрати $N_2$, % |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 1351.9 | 1351.91 | 0.00074 | 766.92618 | 766.93043 | 0.000554 | 583.95933 | 583.96428 | 0.000848 | 1.01449 | 1.013925 | -0.05495 |
| 1 | 1351.9 | 1351.91 | 0.00074 | 766.92618 | 766.93043 | 0.000554 | 583.95933 | 583.96428 | 0.000848 | 1.01449 | 1.013925 | -0.05495 |
| 2 | 1351.9 | 1351.91 | 0.00074 | 766.92618 | 766.93043 | 0.000554 | 583.95933 | 583.96428 | 0.000848 | 1.01449 | 1.013925 | -0.05495 |
| 3 | 1351.9 | 1351.91 | 0.00074 | 766.92618 | 766.93043 | 0.000554 | 583.95933 | 583.96428 | 0.000848 | 1.01449 | 1.013925 | -0.05495 |
| 4 | 1351.9 | 1351.91 | 0.00074 | 766.92618 | 766.93043 | 0.000554 | 583.95933 | 583.96428 | 0.000848 | 1.01449 | 1.013925 | -0.05495 |
| 5 | 1351.9 | 1351.91 | 0.00074 | 766.92618 | 766.93043 | 0.000554 | 583.95933 | 583.96428 | 0.000848 | 1.01449 | 1.013925 | -0.05495 |
| 6 | 1351.9 | 1351.91 | 0.00074 | 766.92618 | 766.93043 | 0.000554 | 583.95933 | 583.96428 | 0.000848 | 1.01449 | 1.013925 | -0.05495 |

Продовження таблиці Б.29

| | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 7 | 1351.9 | 1351.91 | 0.00074 | 766.92618 | 766.93043 | 0.000554 | 583.95933 | 583.96428 | 0.000848 | 1.01449 | 1.0139325 | -0.05495 |
| 8 | 1351.9 | 1351.91 | 0.00074 | 766.92618 | 766.93043 | 0.000554 | 583.95933 | 583.96428 | 0.000848 | 1.01449 | 1.0139325 | -0.05495 |
| 9 | 1351.9 | 1351.91 | 0.00074 | 766.92618 | 766.93043 | 0.000554 | 583.95933 | 583.96428 | 0.000848 | 1.01449 | 1.0139325 | -0.05495 |
| 10 | 753.08 | 753.08 | 0 | 168.705 | 168.70423 | -0.00046 | 583.95933 | 583.96007 | 0.000127 | 0.41567 | 0.4157002 | 0.007265 |
| 11 | 753.08 | 753.08 | 0 | 168.705 | 168.70423 | -0.00046 | 583.95933 | 583.96007 | 0.000127 | 0.41567 | 0.4157002 | 0.007265 |
| 12 | 753.08 | 753.08 | 0 | 168.705 | 168.70423 | -0.00046 | 583.95933 | 583.96007 | 0.000127 | 0.41567 | 0.4157002 | 0.007265 |
| 13 | 753.08 | 753.08 | 0 | 168.705 | 168.70423 | -0.00046 | 583.95933 | 583.96007 | 0.000127 | 0.41567 | 0.4157002 | 0.007265 |
| 14 | 753.08 | 753.08 | 0 | 168.705 | 168.70423 | -0.00046 | 583.95933 | 583.96007 | 0.000127 | 0.41567 | 0.4157002 | 0.007265 |
| 15 | 753.08 | 753.08 | 0 | 168.705 | 168.70423 | -0.00046 | 583.95933 | 583.96007 | 0.000127 | 0.41567 | 0.4157002 | 0.007265 |
| 16 | 753.08 | 753.08 | 0 | 168.705 | 168.70423 | -0.00046 | 583.95933 | 583.96007 | 0.000127 | 0.41567 | 0.4157002 | 0.007265 |
| 17 | 753.08 | 753.08 | 0 | 168.705 | 168.70423 | -0.00046 | 583.95933 | 583.96007 | 0.000127 | 0.41567 | 0.4157002 | 0.007265 |
| 18 | 753.08 | 753.08 | 0 | 168.705 | 168.70423 | -0.00046 | 583.95933 | 583.96007 | 0.000127 | 0.41567 | 0.4157002 | 0.007265 |
| 19 | 753.08 | 753.08 | 0 | 168.705 | 168.70423 | -0.00046 | 583.95933 | 583.96007 | 0.000127 | 0.41567 | 0.4157002 | 0.007265 |
| 20 | 337.41 | 337.41 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Продовження таблиці Б.29

| | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 21 | 337.41 | 337.41 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 22 | 337.41 | 337.41 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 23 | 337.41 | 337.41 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 24 | 337.41 | 337.41 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 25 | 337.41 | 337.41 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 26 | 337.41 | 337.41 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 27 | 337.41 | 337.41 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 28 | 337.41 | 337.41 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 29 | 337.41 | 337.41 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 168.705 | 168.705 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 30 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 31 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 32 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 33 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 34 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 35 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 36 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 37 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 38 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 39 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Продовження таблиці Б.29

| | | | | | | | | | | | | |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 40 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Таблиця Б.30 Перевірка теплового балансу

| Час, с | Розрахункове значення температури, K | Температура результуючого потоку (прогр. модуль), K | Відносна похибка, % |
|---|---|---|---|
| 0 | 292.14458 | 292.13 | -0.00499 |
| 1 | 292.14458 | 292.13 | -0.00499 |
| 2 | 292.14458 | 292.13 | -0.00499 |
| 3 | 292.14458 | 292.13 | -0.00499 |
| 4 | 292.14458 | 292.13 | -0.00499 |
| 5 | 292.14458 | 292.13 | -0.00499 |
| 6 | 292.14458 | 292.13 | -0.00499 |
| 7 | 292.14458 | 292.13 | -0.00499 |
| 8 | 292.14458 | 292.13 | -0.00499 |
| 9 | 292.14458 | 292.13 | -0.00499 |
| 10 | 297.26027 | 297.26 | -9.1E-05 |
| 11 | 297.26027 | 297.26 | -9.1E-05 |
| 12 | 297.26027 | 297.26 | -9.1E-05 |
| 13 | 297.26027 | 297.26 | -9.1E-05 |
| 14 | 297.26027 | 297.26 | -9.1E-05 |
| 15 | 297.26027 | 297.26 | -9.1E-05 |
| 16 | 297.26027 | 297.26 | -9.1E-05 |
| 17 | 297.26027 | 297.26 | -9.1E-05 |
| 18 | 297.26027 | 297.26 | -9.1E-05 |
| 19 | 297.26027 | 297.26 | -9.1E-05 |
| 20 | 303.15 | 303.15 | 0 |

Продовження таблиці Б.30

| | | | |
|---|---|---|---|
| 21 | 303.15 | 303.15 | 0 |
| 22 | 303.15 | 303.15 | 0 |
| 23 | 303.15 | 303.15 | 0 |
| 24 | 303.15 | 303.15 | 0 |
| 25 | 303.15 | 303.15 | 0 |
| 26 | 303.15 | 303.15 | 0 |
| 27 | 303.15 | 303.15 | 0 |
| 28 | 303.15 | 303.15 | 0 |
| 29 | 303.15 | 303.15 | 0 |

## Додаток В

## Список публікацій здобувача за темою дисертації

**Наукові праці, в яких опубліковані основні наукові результати дисертації:**

1. Smalii V., Tolok E. Model of multicomponent liquid pool evaporation formed due accidental spills. *Ecological Safety and Balanced Use of Resources*. 2022. Vol. 2, No 26. P. 122–132. DOI:10.31471/2415-3184-2022-2(26)-122-132. *(Vernadsky National Library of Ukraine, Professional Publications of Ukraine, Directory of Open Access Journals, Google Scholar, CrossRef).*

2. Смалій В., Бєгун В. Аналіз сучасного стану інформаційних технологій безпеки: актуальні задачі і шляхи їх вирішення. *Кібербезпека: освіта, наука, техніка*. 2025. Вип. 4, № 28. С. 490–497. DOI: 10.28925/2663-4023.2025.28.819. *(Index Copernicus, Vernadsky National Library of Ukraine, Semantic Scholar, Directory of Research Journals Indexing, Google Scholar, CrossRef).*

3. Смалій В.В. Інтеграція математичного моделювання і HAZOP-дослідження з метою квантифікації наслідків впливу відхилень на параметри стану джерел небезпеки. *Математичні машини і системи.* 2025. № 2. С. 60–66. DOI: 10.34121/1028-9763-2025-2-60-66. *(WorldCat, Google Scholar, CrossRef, Open Ukrainian Citation Index (OUCI), Ulrich's Periodicals Derictory).*

**Праці, які засвідчують апробацію матеріалів дисертації:**

4. Смалій В. В., Бєгун В. Розвиток ризик-орієнтованого підходу у період цифровізації суспільства. Безпека людини у сучасних умовах : зб. доп. 15-ї Міжнар. наук.-метод. конф. та Міжнар. наук. конф. Європ. Асоц. наук з безпеки (EAS), м. Харків, 7-8 груд. 2023. Харків. С. 111-113. URL: https://repository.kpi.kharkov.ua/items/71906213-7831-4c8f-b9fb-f5ea7ae28081. *(Google Scholar).*

**Наукові праці, які додатково відображають результати дисертації:**

5. Шмелев О. С., Смалий В. В. Гидравлические сети в производствах с непрерывным циклом работы: формирование и расчёт. *Комп'ютерне моделювання в хімії та технологіях і системах сталого розвитку – КМХТ-2019* : зб. наук. статей Шостої міжнар. наук.-практ. конф., м. Київ, 6-8 трав. 2019. Київ. С. 389–395. URL: https://ela.kpi.ua/handle/123456789/27846.