

• 论 著 •

基于 CFD 技术的工作场所苯职业暴露模拟分析

黄德寅¹, 刘茂², 李敏嫣^{1,2}, 胡利明²

(1. 天津渤海化工集团公司劳动卫生研究所, 天津 300051; 2. 南开大学城市公共安全研究中心, 天津 300071)

摘要: 目的 通过对炼油装置工作场所采用计算流体动力学 (CFD) 技术进行苯扩散模拟, 探讨 FLUENT 软件在建设项目职业病危害评价中的应用, 实现跑冒滴漏的浓度场分布的计算机模拟, 从而提高评价技术水平。方法 以某石油化工原油炼制的常减压装置为对象, 对原油炼制工艺进行工程分析及职业暴露调查, 采用 FLUENT 软件进行有害物质苯的扩散模拟。结果 在有风气象条件下, 当轻石脑油采样口发生少量泄漏时, 可对下风向装置区造成较大的污染; 上风向污染较小, 在风力作用下, 污染区域相对较小, 没有无风的影响范围大; 在无风状态下采样泄漏对装置区造成的影响更为严重, 其影响范围更大, 但是对外操室的影响不如有风时严重。结论 采用基于 CFD 方法的 FLUENT 软件可以实现在巡检、采样、跑冒滴漏等复杂条件下的职业有害物质暴露评估及定量分析, 并实现职业暴露评估的可视化。

关键词: 计算流体动力学 (CFD); 职业暴露; 模拟分析; FLUENT 软件

中图分类号: R134; R135.12 文献标识码: A 文章编号: 1002-221X(2012)04-0243-05

CFD-based modeling and analysis of occupational benzene exposure at workplace

HUANG De-yin*, LIU Mao, LI Min-yan, HU Li-ming

(*: Institute of Labor Hygiene Affiliated to Tianjin Bohai Chemical Industry Group Co. Tianjin 300051, China)

Abstract: **Objective** To explore the possibility of using FLUENT software in the occupational hazards evaluation of construction project by modeling the benzene diffusion in oil refining unit based on the CFD technology. **Methods** Taking the atmospheric-vacuum unit of a crude refining factory as study object, the project analysis of the crude refining process was made, and benzene, the occupational exposure to toxic substance was performed as well by modeling its diffusion based on the FLUENT software. **Results** The results showed that a small leak at light naphtha sampling point might cause obvious pollution at the downwind area during wind weather, the polluted area was much smaller at upwind area, but all the pollution status were smaller than that during windless condition. **Conclusion** The results showed that the CFD-based FLUENT software is helpful in evaluating occupational exposure under various complicated conditions such as inspecting, sampling and leaking etc, and in finally realizing the visualization of occupational hazard quantitative evaluation.

Key words: computational fluid dynamics (CFD); occupational exposure; modeling analysis; FLUENT Software

职业暴露评估是风险分析中关键部分, 其结果影响风险评价的准确性和可靠性, 国内外都将职业暴露评估作为职业卫生工作和科研的重点。暴露评价方面的研究主要包括对环境中有害物质浓度的监测, 对暴露个体内剂量或生物效应剂量的测定, 以及基于数学模拟方法对暴露剂量的预测等。

目前, 国外很多国家在污染物扩散评估技术上多采用综合评估技术, 其中数学模型和计算机数值模拟尤其是计算流体动力学 (CFD) 技术的应用上发展很快, CFD 技术由于低成本和较高精度的特点, 得到了国内外学者的广泛应用^[1-3]。其中以应用 FLUENT 实现污染物扩散的三维的计算机模拟, 得出模拟结果

更精确。FLUENT 是目前先进的商业 CFD 软件之一, 广泛的应用于流体计算中。CFD 技术也被应用于健康风险分析的职业暴露评估, 美国学者 2008 年应用 CFD 技术成功进行氯乙烯的车间浓度分布模拟^[1], 验证了 CFD 模拟在职业暴露模拟评估也能取得较好的精度。但目前的研究模拟的毒气泄漏场景大多比较单一, 主要集中在急性中毒事故泄漏的模拟^[4,5], 未能充分考虑正常工况不同操作条件下的跑冒滴漏及扩散规律的影响。本文采用 CFD 技术研究化工炼油装置有害物质在巡检、采样、跑冒滴漏等复杂条件下的职业暴露评估方法, 通过 FLUENT 软件实现有毒气体泄漏后的浓度场分布的计算机模拟, 实现跑冒滴漏的浓度场分布的计算机模拟。

1 对象与方法

1.1 模拟装置简介

某石化企业常减压蒸馏装置加工原油能力为 130

收稿日期: 2012-04-18; 修回日期: 2012-06-05

作者简介: 黄德寅 (1962—), 女, 主任医师, 研究方向: 职业卫生与职业健康风险评估。

万 t/年, 年加工时数为 8 400 h, 主要生产乙烯料、重整料、航煤馏份、柴油馏份及常压重油等。常减压蒸馏生产装置区包括原油预处理及换热系统、初塔系统、常压系统、吸收塔系统等工艺单元及储罐区、泵房等公用工程系统。在平面布置上分为冷换区、热换区、电脱盐、塔区、泵房、框架等区域, 见图 1。

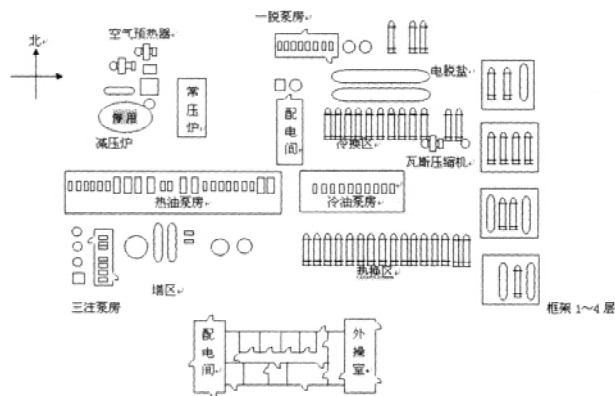


图 1 常减压装置平面布置图

装置区初常顶瓦斯气、轻石脑油、含硫污水, 储罐区凝析油储罐罐顶导向柱内油蒸气、泵排空时油蒸气等每班需要进行采样, 装置内物料定量分析常减压等装置物料/油品蒸气定量检测结果见表 1。

表 1 常减压等装置物料/油品蒸气定量检测结果 mg/m^3

采样地点或样品	苯	甲苯	二甲苯
原料泵排空采样	170	78	未检出
脱前采样	170	60	未检出
初常顶瓦斯气	2 930	110	未检出
19 罐导向柱内	400	290	270
初顶轻石脑油	16.8×10^6	13.1×10^5	未检出
冷凝水 D119	7.3×10^5	5.2×10^5	未检出

1.2 方法

1.2.1 CFD 控制方程 经过几十年的研究, CFD 技术在描述危险性气体流动和扩散的控制微分方程方面已经达成了一致, 各模型所采用的控制微分方程基本上是相同的。目前对于有害气体扩散的数值模拟研究的重点已经转向诸如湍流模型的选择、数值处理方式的选择、初始及边界条件的确定、泄漏源的处理、不同气象条件的处理、障碍以及地形变化对毒气扩散的模拟等方面。选用通用 CFD 软件 FLUENT 的无化学反应的组分输运模型建模, 通过第 i 种物质的对流扩散方程可预估每种物质的质量分数 Y_i 。守恒方程通用形式如下:

$$\frac{\partial(\rho Y_i)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho u Y_i) = -\nabla \cdot J_i + R_i + S_i$$

式中 ∇ 为拉普拉斯算子, Y_i 代表组分 i 的质量分

数, J_i 为组分 i 的扩散通量, R_i 表示系统内由于化学反应而生成或者消耗, 该组分在单位时间内的净生成率, 此处由于是无化学反应的组分运输模型, 则该项为零; S_i 为离散相及用户定义的源项导致的额外产生速率。

1.2.2 FLUENT 软件简介 本文采用目前先进的商业 CFD 软件 FLUENT 进行计算机数值模拟。在进行模拟时, 首先利用 GAMBIT 或者其他前处理器完成模拟对象集合结构的建模以及计算网格的生成与划分, 然后将网格导入 FLUENT 中进行求解计算, 最后对计算结果进行处理和分析。

FLUENT 是目前先进的商业 CFD 软件之一, 广泛的应用于流体计算中。美国 FLUENT Inc. 公司于 1983 年发布。2006 年 2 月 FLUENT Inc. 被 ANSYS Inc. 收购, 后者成为了全球最大的 CAE (computer aided engineering, 计算机辅助工程) 软件公司。FLUENT 是用来模拟和研究复杂几何区域内的流体流动, 它可以支持多种网格格式, 用户可根据自身需求选择使用结构化网格和非结构化网格, 网格格式多种多样。例如在二维问题中, 用户可以选择三角形网格或者四边形网格。而在三维问题中, 可供选择的网格有四面体、六面体、棱锥、楔形和多面体网格, 也可以使用混合网格^[5]。

2 基于 CFD 技术的 FLUENT 模拟

2.1 模拟场景

场景的确定: 初常顶瓦斯气体采样口、脱前采样口、初顶轻石脑油采样口和 D119 含硫污水采样口等采样时发生跑冒滴漏; 气象条件模拟有风及无风两种状态。

模拟场景及模拟气象条件详见表 2、3。

表 2 采样点泄漏模拟场景

采样地点	设备/ 管道压力 (MPa)	温度 (℃)	采样口直径 (mm)	每次采 样时间 (min)
初常顶瓦斯 气体采样口	0.02	30	密闭采样器 DN20 引出	15
脱前采样口	1.1	80~90	密闭采样器 DN20 引出	15
初顶轻石脑油 采样口	1.5	30	密闭采样器 DN20 引出	15
D119 含硫污水 采样口	1.1	40	密闭采样器 DN20 引出	15

表 3 模拟气象条件

场景	风速 (m/s)	风向
气象场景 1	4.5	N
气象场景 2	0	—

2.2 CFD 三维建模

2.2.1 模拟区域 根据所需模拟的常减压装置区布局图即可构建整个模拟区域的三维网格。按照由点到线、由线到面、由面到体的步骤,在 FLUENT 前处理软件 GAMBIT 中从下至上的方法构建了整个模拟区域的网格。网格建立范围为 $180\text{ m} \times 180\text{ m} \times 60\text{ m}$ 。

2.2.2 网格划分 为便于模拟同时更好地划分网格,采用了混合网格划分方法,由于装置区的面与面之间大小差别很大,模型非常不规则,因此只能选用适应性强的非规则网格。在 GAMBIT 中 Elements 选择 Tet/Hybrid 网格,Type 选择 TGrid。对于装置区域外的扩展区域则采用结构化网格划分方法。先划分线,然后划分面(采用的是 Elements 为 Quad 网格,Type 选择 Map),最后划分体(Elements 选择 Hex 网格,Type 选择 Map),划分结果可以看出装置区的网格划分不是结构化网格,网格疏密程度不一致,同时网格也采用了四边形和三角形混合网格划分的方法。如图 2 所示。

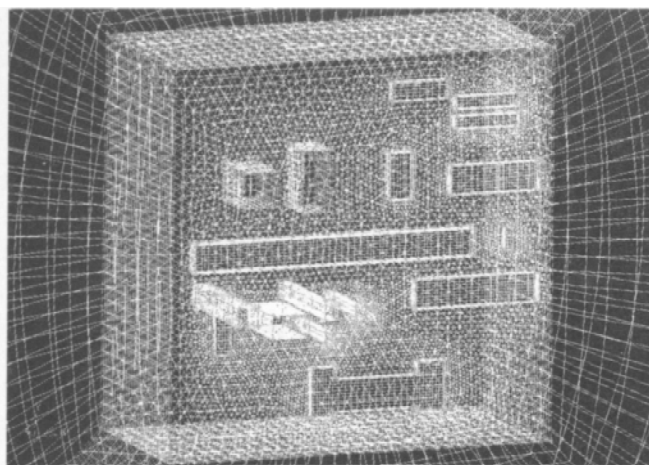


图 2 常减压装置网格划分

2.2.3 边界条件 划分网格后在 GAMBIT 中按照表 4 数据定义各释放面为速度进口 (mass-flow-inlet), 同时将通风系统中进风口也定义为速度进口 (velocity-inlet), 出风口定义为压力出口 (pressure-outlet), 其他的面不用设置, GAMBIT 会在生成网格文件时将设置边界类型的面都设置成为 Wall 类型。

表 4 模拟边界条件

位置	Name	边界类型
003 初顶顶瓦斯气	inlet-1	MASS_FLOW_INLET
006 含硫污水 D119	inlet-2	MASS_FLOW_INLET
002 脱前采样	inlet-3	MASS_FLOW_INLET
005 初顶轻石脑油	inlet-4	MASS_FLOW_INLET

3 结果

3.1 采样点泄漏模拟扩散路径、浓度场等分布 在电脱盐、含硫污水和初顶轻石脑油采样的过程

中,有一些样品泄漏出来,其中包含苯等有害物质。利用 FLUENT 可以得到模拟场景下的速度分布图、压力分布图、扩散路径图及浓度场分布图等,通过分析得到预定模拟场景条件下的模拟结果如下。

(1) 速度分布图显示在北风的作用下,气流大致向南流动,但是由于模拟区域存在着各种构筑物,在一些构筑物的背面存在扩散物的漩涡流。(2) 压力分布图显示装置区的大气压力,在北风的作用下,各处的气压存在较大的差异,在建筑的迎风面压力较大,在背风面压力较小,地面的压力比空中的压力大。(3) 扩散路径图显示污染物的扩散路径,泄漏污染物总体上顺着下风向扩散,由于考虑了重力影响,因此从空中跨越建筑的污染物较少。(4) 浓度场图显示的是苯浓度分布规律: ①在有风气象条件下,当轻石脑油采样口发生微量泄漏时,可对下风向装置区造成较大的污染,上风向污染较小,在风力作用下,污染区域相对较小,没有无风的影响范围大。②在无风状态下采样泄漏对装置区造成的影响更为严重,其影响范围更大,但是对外操室的影响不如有风时严重。

本文因篇幅所限只列出浓度场分布,见图 3、4。

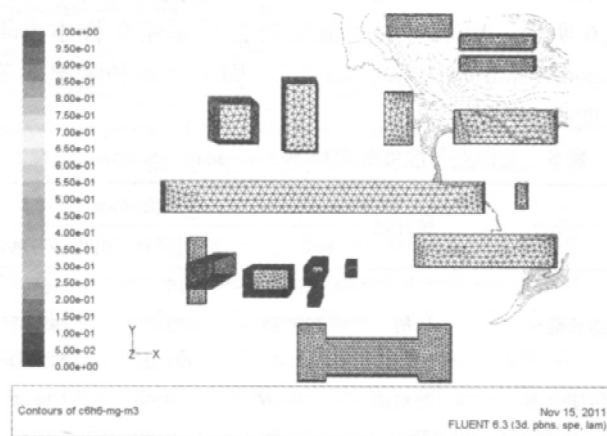


图 3 轻石脑油采样点泄漏苯浓度扩散分布图



图 4 4 个采样点泄漏苯浓度扩散分布图

3.2 基于 FLUENT 计算机模拟的苯暴露浓度值

对于电脱盐、含硫污水和初顶轻石脑油采样时的苯暴露,均匀取距离采样点半径 0.5 m 圆上的 10 个点,各点上苯的浓度值如表 5 所示;对于跑冒滴漏状态下的苯暴露,取 8 个跑冒滴漏位置在无风状态下,巡检路线上的 60 个点。

表 5 距离各采样口 0.5 m 处苯的浓度值采样点泄漏模拟结果 mg/m^3

序号	电脱盐采样	含硫污水采样	初顶轻石脑油采样
1	0.22	126.00	0.32
2	1.11	26.80	1.34
3	42.31	15.80	819.75
4	655.38	18.30	825.42
5	1 415.08	23.80	689.23
6	1 034.31	341.00	301.35
7	501.87	2 380.00	257.00
8	139.72	2 100.00	0.91
9	0.48	1 900.00	0.28
10	0.15	1 160.00	0.28

利用 SPSS 软件分别对各采样口 0.5 m 处苯的浓度采用单样本 Kolmogorov-Smirnov 检验,所得结果如表 6 所示。对苯的浓度值取对数后采用单样本 Kolmogorov-Smirnov 检验,如表 7。则上述各种情况下苯浓度的分布如表 8。

表 6 采样点苯浓度的单样本 Kolmogorov-Smirnov 检验

分布	统计量	采样点苯的浓度值 (mg/m^3)		
		电脱盐	含硫污水	出顶轻石脑油
N		10	10	10
正态参数 ^{a, b}	均值	279.25	285.59	745.67
	标准值	474.47	491.02	285.99
最极端差别	绝对值	0.36	0.40	0.26
	正	0.36	0.40	0.15
	负	-0.28	-0.29	-0.26
Kolmogorov-Smirnov Z		1.14	1.26	0.82
渐近显著性 (双侧)		0.15	0.08	0.51

注: a, 检验分布为正态分布; b, 根据数据计算得到。表 7 同。

表 7 巡检路线上的单样本 Kolmogorov-Smirnov 检验

分布	统计量	样本中苯的浓度 (mg/m^3)
N		60
正态参数 ^{a, b}	均值	0.64
	标准差	0.48
最极端差别	绝对值	0.088
	正	0.075
	负	-0.088
Kolmogorov-Smirnov Z		0.68
渐近显著性 (双侧)		0.74

表 8 苯的浓度分布

模拟	分布	参数	苯的浓度 (mg/m^3)
电脱盐采样	Normal	均值	279.25
		标准差	474.47
含硫污水采样	Normal	均值	285.59
		标准差	491.02
初顶轻石脑油采样	Normal	均值	745.67
		标准差	285.99
跑冒滴漏下的巡检	Lognormal	均值	4.38
		标准差	3.00

4 讨论

FLUENT 软件模拟的结果显示:在有风气象条件下,当轻石脑油采样口发生微量泄漏时,可对下风向装置区造成较大的污染,上风向污染较小,在风力作用下,污染区域相对较小,没有无风的影响范围大;在无风状态下采样泄漏对装置区造成的影响更为严重,其影响范围更大,但是对外操室的影响不如风时严重。模拟结果提示采样时尽量站在采样口的上风向,以减少苯暴露;由于含硫污水和电脱盐采样的苯浓度对于致癌风险的敏感性较高,在这两个位置采样时要更加注意;当跑冒滴漏点和量增加、或者工人操作不当时,各个位置的暴露浓度可能高于假设的模拟数值,相应的致癌风险也会增加,因此工人要严格按照规定操作,如果发生泄漏或者严重的跑冒滴漏,要及时处理和防护。

本研究采用 CFD 方法进行职业危害暴露模拟,利用 FLUENT 软件三维计算机模拟技术揭示原油炼制作业场所空气中苯污染物浓度场分布规律,并且实现了可视化。采用基于 CFD 方法的 FLUENT 软件,实现在职业病危害评价进行中巡检、采样、跑冒滴漏等复杂条件下的职业暴露评估,可以用于有害物质暴露评价的定量分析及实际应用,并且通过计算机技术实现了职业暴露评估的可视化。

本方法与其他常用的几种职业暴露评估方法互相关联,以工程分析和现场职业卫生调查为基础,使用调查表收集工人的职业史以及接触的有害因素、接触时间,也要使用各种检测资料及其相关信息。在目前的职业病危害评价工作中应具体问题具体分析,不能要求一个固定的职业暴露评估模式,应根据资料的性质综合应用各种评估方法,尽量获得准确可靠的评估结果。研究证明一个完善的职业暴露评估不应该仅局限或依赖于空气浓度检测,而应考虑到可能影响暴露剂量的各个方面,通过建立的数学模型,采用计算机

(下转第 254 页)

测结果显示 CD29 阳性率为 99.87%, CD44 阳性率为 99.82%, CD34 阳性率为 1.57%, CD45 阳性率为 0.62%, 符合 hBM-MSCs 的基本特征标志。说明在本研究培养条件下, 获得了高纯度的 hBM-MSCs, 且保持了该细胞原有的特性。

copine 1 和 copine 3 是 copine 蛋白家族成员。copine 蛋白家族是新近发现的一类分布广泛、进化保守的 Ca^{2+} 依赖性磷脂结合蛋白^[5], 该家族成员在胞内信号转导过程中发挥重要作用^[6,7]。有报道从人中性粒细胞中可同时分离出 copine 1 和 copine 3^[8]。copine 1 在中性粒细胞分化成熟的各个阶段都表达, 而 copine 3 以单体形式存在于中性粒细胞胞液里, 它主要出现在幼稚的中性粒细胞前体中。我们的研究证实了 copine 1 和 copine 3 存在于 hBM-MSCs。

哺乳动物的 copine 1 可能在调节 TNF- α 信号途径方面有作用。Tomsig J L 等^[7]发现, copine 1 以钙离子依赖的方式通过激活 NF- κ B 而调节人胚肺 293 细胞中的 TNF- α 信号通路, copine 1 对 NF- κ B 的调节又是通过泛素蛋白酶体系统实现的。泛素蛋白酶体系统与癌症的关系密切^[9]。copine 3 也与肿瘤发生关系密切, 有研究表明 copine 3 在乳腺癌、前列腺癌和卵巢肿瘤中均异常表达。copine 3 通过与 ErbB2、C 激酶 1、粘附蛋白的相互作用, 在乳腺癌细胞的转移中发挥重要作用^[10]。本研究中, 我们用实时定量 PCR 和蛋白质印迹技术分别在 mRNA 水平和蛋白质水平探讨了 1,4-BQ 对 hBM-MSCs 中 copine 1 和 copine 3 表达的影响。结果表明: 1,4-BQ 染毒 24 h, 剂量达到 10 $\mu\text{mol/L}$ 就可引起 copine 1 在 mRNA 水平表达下降, 剂量达到 25 $\mu\text{mol/L}$ 才会引起 copine 3 表达下降。而剂量达到 25 $\mu\text{mol/L}$ 方引起 copine 1 在蛋白质水平表达下降, 50 $\mu\text{mol/L}$ 方引起 copine 3 表达下降。这提示 copine 1 和 copine 3 在苯及其代谢物 1,4-BQ 等所引起的白血病等血液系统疾病中扮演

了重要角色, 但它们究竟如何影响 1,4-BQ 所致血液系统疾病的发生发展, 通过何种信号途径发挥作用仍待进一步澄清。综上所述, copine 1、copine 3 及 copine 家族其他成员与 1,4-BQ 等所致血液系统疾病关系研究将有利于进一步探索苯及其代谢物引起造血系统毒作用机制, 为寻找特异的苯暴露生物标志物提供理论基础。

参考文献:

- [1] 肖芸, 姚耿东, 张幸. 苯及其代谢物血液毒性机制研究进展 [J]. 中国工业医学杂志, 2008, 21 (4): 247-250.
- [2] 肖芸, 朱丽瑾, 鞠莉, 等. 三甲基氯化锡诱导的非洲绿猴肾细胞蛋白质表达谱改变 [J]. 中华劳动卫生职业病杂志, 2011, 29 (10): 721-725.
- [3] Zhao Z G, Li W M, Chen Z C, *et al.* Immunosuppressive properties of mesenchymal stem cells derived from bone marrow of patients with chronic myeloid leukemia [J]. Immunol Invest, 2008, 37 (7): 726-739.
- [4] 余勤, 连俊兰. 间充质干细胞研究进展及应用前景 [J]. 浙江中西医结合杂志, 2005, 15 (2): 130-133.
- [5] Perestenko P V, Pooler A M, Noorbakhshnia M, *et al.* Copines-1, -2, -3, -6 and -7 show different calcium-dependent intracellular membrane translocation and targeting [J]. FEBS J, 2010, 277 (24): 5174-5189.
- [6] Li Y, Gou M, Sun Q, *et al.* Requirement of calcium binding, myristoylation, and protein-protein interaction for the copine BON1 function in Arabidopsis [J]. J Biol Chem, 2010, 285 (39): 29884-29891.
- [7] Tomsig J L, Sohma H, Creutz C E. Calcium-dependent regulation of tumour necrosis factor- α receptor signalling by copine [J]. Biochem J, 2004, 378 (Pt 3): 1089-1094.
- [8] Cowland J B, Carter D, Bjerregaard M D, *et al.* Tissue expression of copines and isolation of copines I and III from the cytosol of human neutrophils [J]. J Leukoc Biol, 2003, 74 (3): 379-388.
- [9] 王青元, 周颖, 凌斌. 泛素蛋白酶体系统组成及其在疾病中的作用 [J]. 中国妇幼保健, 2011, 26 (30): 4789-4791.
- [10] Heinrich C, Keller C, Boulay A, *et al.* Copine III interacts with ErbB2 and promotes tumor cell migration [J]. Oncogene, 2010, 29 (11): 1598-1610.

(上接第 246 页)

手段, 可以得到一个复杂情况下暴露剂量的评估值, 比较准确地预测工作环境中有害物质的暴露水平, 对职业病发生的控制具有参考价值。

参考文献:

- [1] Kassomenos P, Karayannis A, Panagopoulos I, *et al.* Modelling the dispersion of a toxic substance at a workplace [J]. J Environmental Modelling & Software, 2008, 23 (1): 82-89.
- [2] Kwang-Chul Noha, Hyuk-Soon Kimb, Myung-Do Oh. Study on contamination control in a minienvironment inside clean room for yield en-

hancement based on particle concentration measurement and airflow CFD simulation [J]. Building and Environment, 2010, 45 (4): 825-831.

- [3] Choi J I, Edwards J R. Large eddy simulation and zonal modeling of human-induced contaminant transport [J]. Indoor Air, 2008, 18 (3): 233-249.
- [4] 王东东. 基于 FLUENT 的危险性气体泄漏扩散研究 [D]. 南开大学, 2008.
- [5] 刘洪波, 邓特刚, 李小松, 等. 基于 CFD 的污泥脱水机房恶臭扩散分布规律研究 [J]. 环境工程学报, 2009, 3 (5): 875-880.