

MODELOVÁNÍ DISPERZE NEBEZPEČNÝCH LÁTEK V INTERIÉRU POMOCÍ COMSOL MULTIPHYSICS

MODELLING THE DISPERSION OF HAZARDOUS SUBSTANCES IN THE INTERIOR USING COMSOL MULTIPHYSICS

Markéta Švedová^{a*}

^a ÚCHOP, VŠCHT Praha, Technická 5, 166 28 Praha 6, Česká republika

*Korespondující autor. e-mail: svedovam@vscht.cz, tel.: +420 220 444 191

Abstrakt

Únik toxického plynu ve vnitřním prostředí průmyslového objektu často vede k závažnému dopadu na lidské zdraví a životní prostředí. Pro zabezpečení daného prostoru a potenciálně exponovaných osob je klíčové účinné navržení a optimalizace dekontaminační technologie, k čemuž může být využito komplexních numerických simulací. Cílem práce bylo provedení numerických simulací krizových scénářů úniku zvolených kontaminantů ve vnitřních prostorech průmyslového objektu. Tento výzkum slouží jako podpora při verifikaci uplatnění technologie Plazmicat pro čištění nebezpečných vzdušín, kdy s pomocí těchto simulací budou specifikovány některé klíčové parametry pilotních testů technologie při různých krizových scénářích. Matematické simulace jsou založeny na aplikaci výpočetního nástroje COMSOL Multiphysics.

Klíčová slova: *plynný kontaminant, disperze, vnitřní prostředí, CFD, dekontaminační technologie*

Abstract

Toxic gas leakage in the indoor environment of an industrial facility often has serious impacts on human health and the environment. Effective design and optimization of decontamination technology is crucial to protect the area and potentially exposed persons, for which complex numerical simulations can be used. This work aimed to perform numerical simulations of accident scenarios for the release of selected contaminants in indoor areas of an industrial facility. This research serves as a support for the verification of the application of Plazmicat technology for hazardous air cleanup, where with the help of these simulations some key parameters of pilot tests of the technology will be specified in different crisis scenarios. Mathematical simulations are based on the application of the COMSOL Multiphysics calculation tool.

Key words: *gas contaminant, dispersion, indoor environment, CFD, decontamination technology*

1. ÚVOD

Únik toxického plynu ve vnitřním prostoru průmyslového či jiného objektu může nastat jako důsledek poruchy či netěsnosti na části zařízení, případně vlivem lidské chyby a typicky vede k závažnému dopadu na zdraví exponovaných osob a životní prostředí [1]. Pro odstranění nebezpečných látek z ovzduší, a tudíž zamezení či předcházení ohrožení, je nutná aplikace vhodného technického řešení a souvisejících opatření. Zároveň je také nezbytná specifikace

potenciálního krizového scénáře, charakterizace hrozby a popis šíření polutantu, které lze do jisté míry předvídat matematickými modely [2].

Existují různé typy disperzních modelů popisujících tok a rozptyl toxických těžkých plynů běžných pro průmyslové havárie [3]. Nejsofistikovanější z nich, „Computational Fluid Dynamics“ (CFD) modely, se staly populárními mimo jiné díky jejich užitečnosti pro popis pohybu vzduchu v uzavřených prostorech [4] typických komplexní geometrií způsobenou např. přítomnými překážkami atd. [2, 5, 6]. Navíc jsou díky nim poskytnuty relativně přesné výpočty rozmístění toxických mraků (koncentrační pole), časového a prostorového vývoje toku plynu, rychlostního a teplotního pole apod. [7].

Běžně aplikované CFD modely pro simulace rozptylu těžkých plynů jsou „Reynolds Averaged Navier-Stokes“ (RANS). RANS modely řeší rovnice pro střední vlastnosti proudění (Navier-Stokesovy rovnice vyjadřující zákon zachování hybnosti, hmoty a energie) se zahrnutím modelování turbulence [3].

Doposud bylo CFD modelování poměrně rozsáhle využíváno při studiu šíření toxického plynu ve vnějším prostředí městských nebo průmyslových oblastí [8, 9]. Náhled na šíření toxického plynu ve vnitřním prostředí přinesla analýza vývoje havarijního scénáře úniku chloru a amoniaku z cisterny uvnitř tunelu ze studie R. Bubbico et al. [10].

V uzavřeném prostoru je únik toxických plynů těžších než vzduch nebezpečný z důvodu setrvávání plynných mraků v nižší, a tedy inhalační úrovni. Proto je modelování těchto plynů klíčovým bodem v analýze rizika. I přes poměrně velkou dostupnost těchto modelů a metod byla pouze malá část z nich modifikována pro komplexní prostor vnitřního prostředí [7]. Disperzní model byl aplikován k analýze rizika uvolněného chloru z porušeného potrubí ve vnitřním prostoru průmyslového objektu v práci M. Siddiqui et al. [11] včetně navržených zmírňujících opatření zohledňujících vzorce pohybu mraku plynu a zahrnujících zejména efektivně navržený systém ventilace.

Opatření k odstranění nebezpečných látek z ovzduší nebo snížení jejich následků se zaměřují na různé typy překážek [12-14] či posílení ventilačního výkonu [4, 11]. Výsledky numerických simulací probíhajících procesů v rámci různě definovaných krizových scénářů provedené v tomto projektu budou sloužit k rozhodnutím ohledně optimalizace potenciálních dekontaminačních opatření.

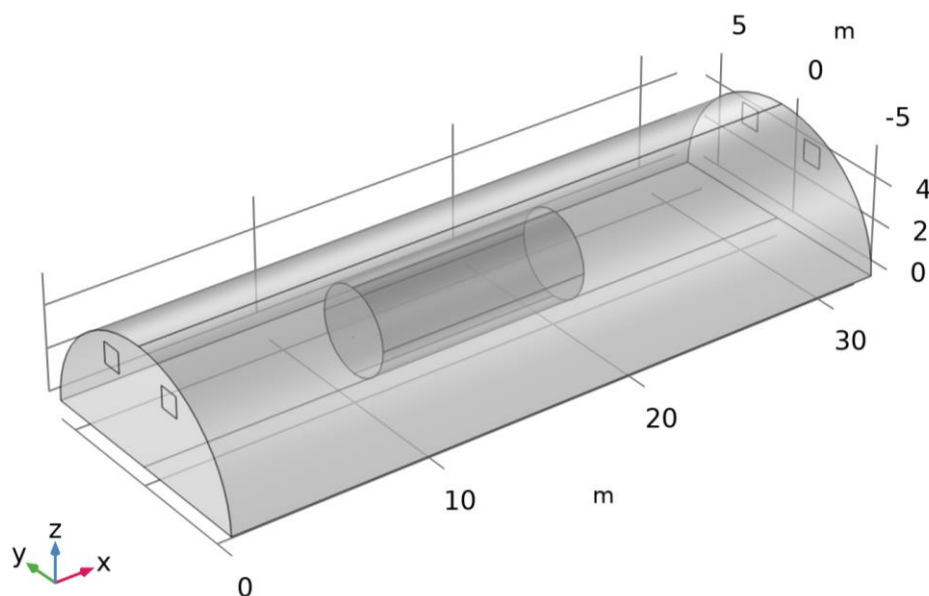
2. MATEMATICKÝ MODEL

Předběžný simulační model byl vytvořen na základě podoby jedné z testovacích hal, která bude později využita při validaci modelu. Vnitřní prostor byl tedy definován podle reálných rozměrů prostoru s přidanými prvky přítomných překážek, zdroje kontaminantu a rozmístění ventilace, které budou mít vliv na disperzní šíření plynného kontaminantu.

Zájem byl směřován na nejrelevantnější scénáře v ČR a EU s ohledem na odvětví průmyslu apod. Byla vybrána skupina rizikových scénářů a modeloval se kontinuální únik kontaminantu ze zdroje po dobu dvaceti minut. Válcová nádoba představující zdroj byla opatřena úzkým otvorem simulující prasklinu či narušení, ze které unikal plynný SF₆ (modelová látka simulující plynnou kontaminaci s větší hustotou než vzduch) a byla umístěna ve středové části haly ve výšce 1,5 m nad zemí. Zároveň tak poté představovala překážku při pohybu plynu. Rozměry haly

jsou 12 m na šířku, 32 m na délku s půdorysem ve tvaru poloviny elipsy s výškou 5,5 m. Objem haly tak vychází na 1809,6 m³. Geometrie je zobrazena na Obrázek 1. Zdroj/překážka je podélně položený válec o průměru 4 m a výšce 10 m. Ventilace byla umístěna na protějších stěnách jako dva čtverce o straně 1 m podél každé stěny ve výšce 4 m. Modelovaly a porovnávaly se dva případy, kdy bylo vypnuto a zapnuto větrání.

Obrázek 1: Geometrie modelované haly



Model byl vytvořen využitím softwaru COMSOL Multiphysics, který umožňuje popis systému pomocí parciálních diferenciálních rovnic a jejich numerické řešení metodou konečných prvků. K definovanému prostoru byla vytvořena patřičná geometrie a její diskretizace zohledňují probíhající fyzikální děje. Kontinuum řešené oblasti tak bylo rozděleno na konečný počet podoblastí (prvků, elementů), které oblast spojitě a jednoznačně vyplňují.

Při matematickém popisu se vycházelo z disperzního RANS modelu pro sledování turbulentního toku plynu. RANS model zahrnuje rovnici kontinuity:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0 \quad (1)$$

a rovnici zachování hybnosti:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\mu \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \rho \overline{u'_i u'_j} \right) \quad (2)$$

kde ρ je hustota, t je čas, u_i a u_j jsou složky rychlosti ve směrech x_i a x_j , p je tlak a μ je dynamická viskozita. Poslední člen v rovnici (2) vyjadřuje Reynoldsovo namáhání. Tento člen se typicky velmi různí a jeho časová a prostorová závislost nelze jednoduše algebraicky vyjádřit. Bez povědomí o proměnlivosti tohoto členu pak není možné rovnici zachování hybnosti vyřešit. Proto turbulentní tok vyžaduje tzv. modelování turbulentního uzávěru. V případě k - ϵ turbulentního modelu, ve kterém je Reynoldsovo namáhání popsáno členem turbulentní nebo vířivé viskozity (μ_t), lze jeho vztah ke středním gradientům rychlosti zapsat jako:

$$-\overline{\rho u_i' u_j'} = \mu_t \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\rho k + \mu_t \frac{\partial u_i}{\partial x_i} \right) \delta_{ij} \quad (3)$$

kde δ_{ij} Kroneckerova delta. Turbulentní kinetická energie (k) a její míra rozptylu (ε) vyjadřující μ_t jsou získány z transportních rovnic. Turbulentní viskozita je pak spočítáno jako:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4)$$

kde C_μ je konstanta (součástí všech turbulentních modelů jsou empiricky odvozené koeficienty).

Koncentrace plynného kontaminantu Y_i je vypočtena využitím konvekčně-difuzní rovnice:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_i) + \nabla \cdot (\rho u_i Y_i) = -\nabla \cdot J_i \quad (5)$$

Difuzní člen J_i je pro turbulentní tok vyjádřen jako:

$$J_i = - \left(\rho D_i + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \nabla Y_i \quad (6)$$

kde D_i je difuzní koeficient a Sc_t je turbulentní Schmidtovo číslo. První člen na pravé straně rovnice (6) vyjadřuje molekulární difuzi, druhý poté turbulentní difuzi.

Jako materiál prostoru domény byl zvolen suchý vzduch, pro překážky byla vybrána ocel a zdroj kontaminantu obsahoval plyn SF₆ s definovanými hodnotami viskozity, hustoty a měrné tepelné kapacity. Materiálové vlastnosti potřebné pro výpočet byly převzaty z materiálové knihovny COMSOL Multiphysics. Veličiny jsou v knihovně definovány jako funkce teploty a tlaku v podobě interpolačních polynomů, díky čemuž je dosaženo reálné odezvy simulace na tepelné a tlakové změny.

Popsaný systém rovnic byl doplněn vhodně zvolenými okrajovými a počátečními podmínkami. Okrajové podmínky zohledňují vliv části prostředí mimo hranici řešené oblasti na děje probíhající uvnitř této oblasti a sledují celou dobu procesu. Počáteční podmínky popisují stav pouze na začátku řešení problému a zahrnovaly počáteční teplotu 20 °C a atmosférický tlak uvnitř haly a nulovou rychlost proudícího vzduchu.

Pro simulaci turbulentního proudění bylo aplikováno několik okrajových podmínek. První z nich popisuje situaci na stěnách tzv. „neskluzovou“ podmínkou a říká, že relativní rychlost tekutiny vůči stěně je nulová. Dále je předepsána hodnota objemového toku na vstupu $u_0 = 5 \cdot 10^{-3}$ kg/s v případě úniku kontaminantu a $u_0 = 0$ ve zbylém čase. V modelu zahrnujícím ventilaci je navíc na vstupu přidána podmínka statického tlaku $p_0 = 1$ atm a referenční turbulentní rychlost $U_{ref} = 3$ m/s. Na výstupu je předepsán tlak $p_0 = 1$ atm v modelu bez ventilace a při zahrnutí odsávání je podmínka rychlosti vycházející z $U_0 = 0,30159$ m/s (vypočteno na základě šesti výměn vzduchu objemu haly hodinově ventilací). V oblasti transportu kontaminantu byla specifikována okrajová podmínka nulového toku, která říká, že skrze nepropustné hranice domény neproudí tekutina. Okrajová podmínka, která předepisuje konvenční odtok tekutiny byla aplikována na hranice ventilace na protějších stěnách haly. Okrajová podmínka přítoku na hranici trhliny na nádobě zdroje kontaminantu definuje složení směsi (kontaminant/vzduch) a měla hmotnostní zlomek $w_{0,SF6} = 1$ v čase úniku plynu.

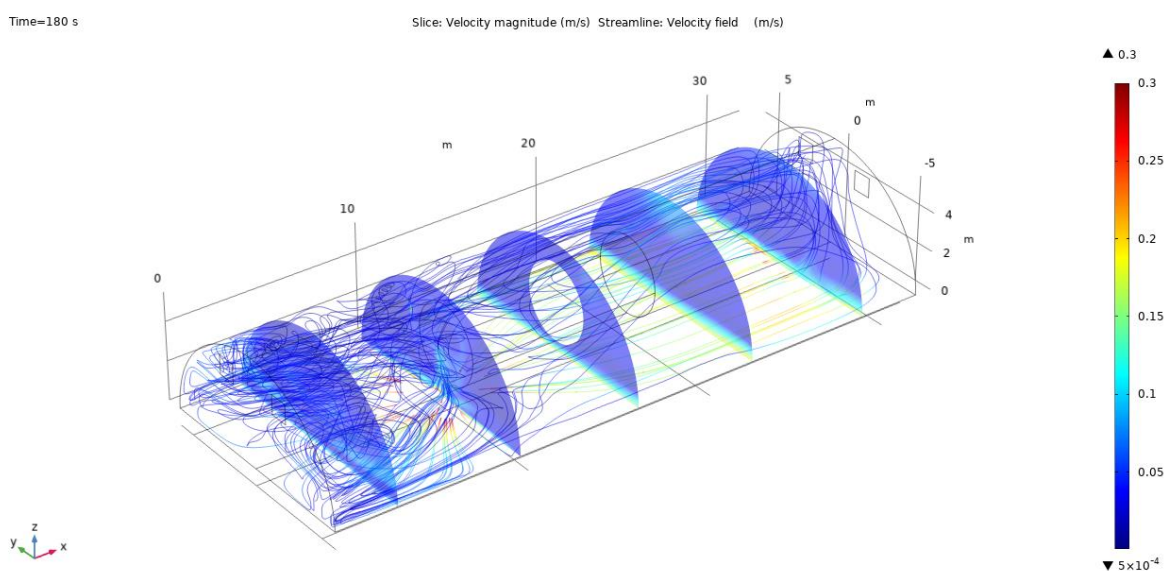
Děj je rozdělený na tři úseky. Na dobu první minuty, kdy je přítomné pouze případné větrání, dále od druhé do dvacáté první minuty, kdy kontinuálně uniká kontaminant, a nakonec znovu pouze ventilace.

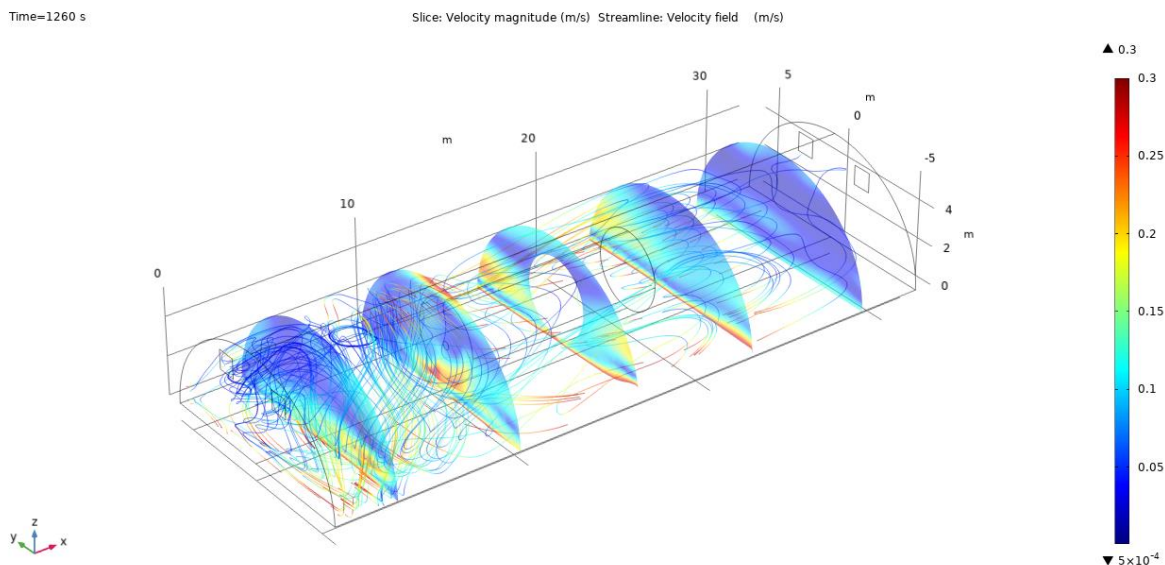
Výpočetní síť zasazená do vytvořené geometrie prostoru haly obsahuje buňky ve tvaru libovolných mnohostěnů s převahou čtyřstěnů a kvádrů. Navíc při hranicích pro přítok a odtok bylo vytvořeno pět tzv. „boundary layers“ (mezní vrstvy), které jsou v CFD běžně používány pro vylepšení konvergence řešení.

3. VÝSLEDKY A DISKUZE

Byl sledován a hodnocen rychlostní profil turbulentního proudění vzduchu ve vnitřním prostředí testovací haly a trajektorie a koncentrace unikajícího kontaminantu v čase. Srovnávaly se dva případy se zapnutou a vypnutou ventilací v předběžných modelech se zjednodušenou geometrií. Na Obrázek 2 lze sledovat proudové pole pro variantu bez zapnutého odsávání v čase 3 a 21 minut. Jasně zřetelný turbulentní profil proudění je převažující na straně haly bližší ke zdroji unikajícího kontaminantu.

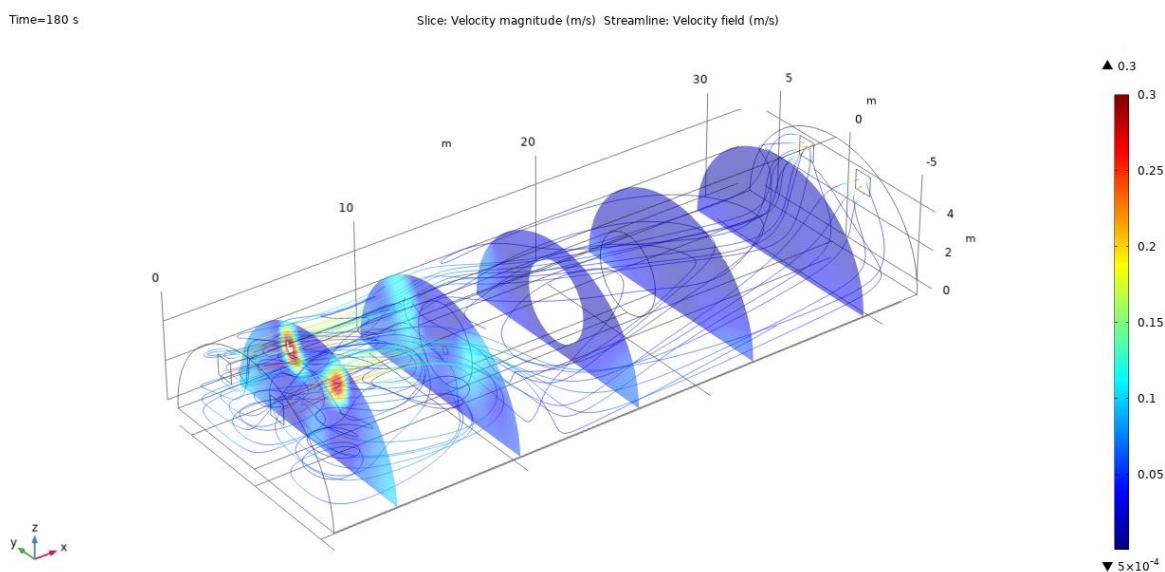
Obrázek 2: Proudové pole bez ventilace v čase 3 a 21 min





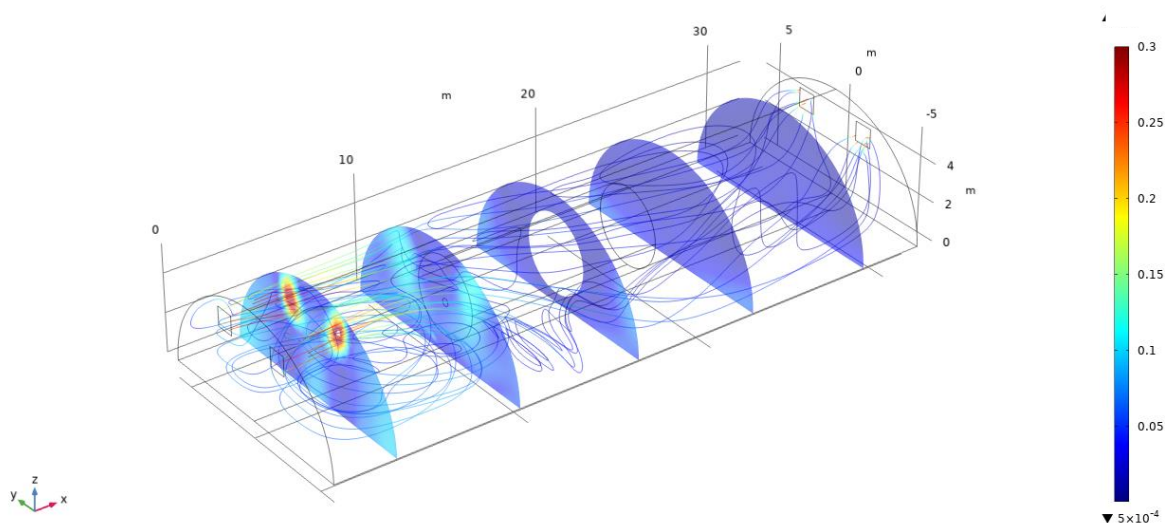
Na Obrázek 3 jsou pro stejné časy jako v předchozím případě zobrazena proudová pole v modelu zahrnujícím ventilaci. Dá se usoudit určité usměrnění ve směru odtahu plynu. Zřetelná je bezpochyby větší rychlost proudění podél odvětrávání, která je vidět na prvním průřezu zleva.

Obrázek 3: Proudové pole s ventilací v čase 3 a 21 min



Time=1260 s

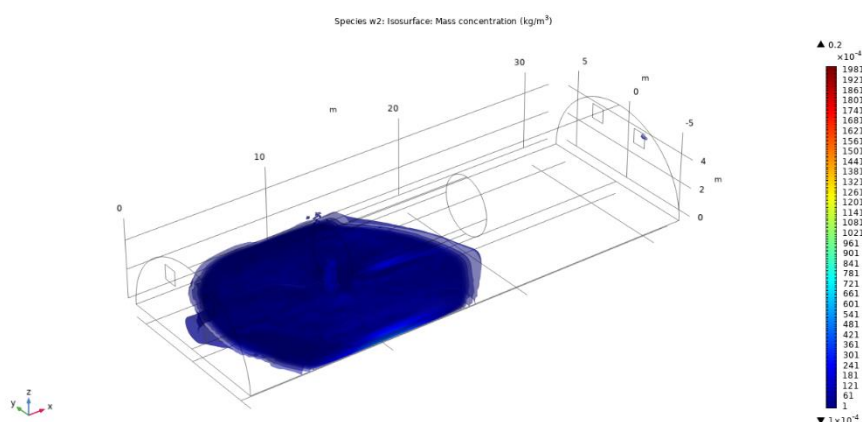
Slice: Velocity magnitude (m/s) Streamline: Velocity field (m/s)

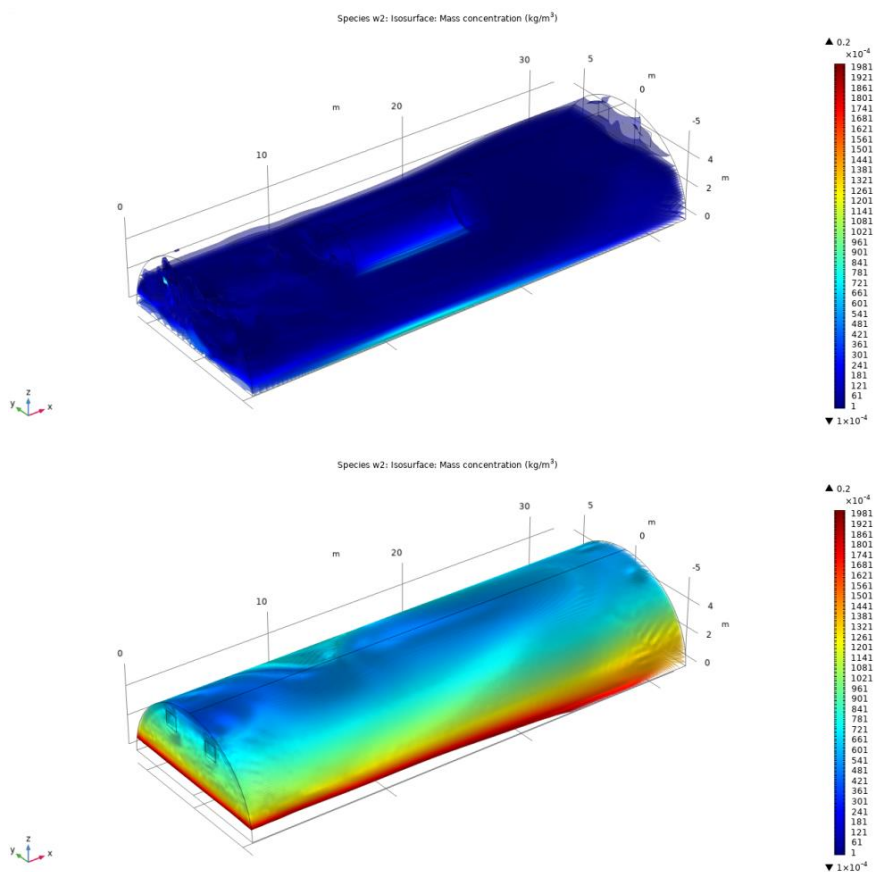


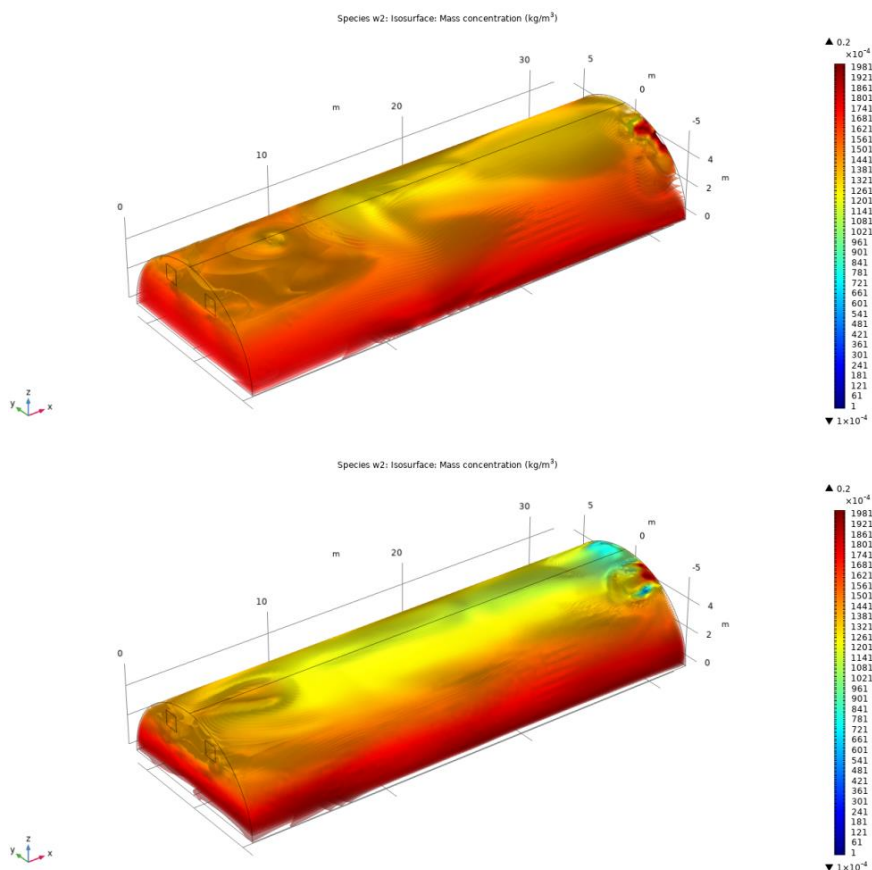
Rozložení koncentrace unikajícího SF₆ v čase je znázorněna na

Obrázek 4 pro variantu modelu s vypnutou ventilací. Obrázek 5 představuje vývoj koncentrace v čase v modelu včetně ventilace. Obecně lze pro oba případy vidět postupný přechod mraku od místa úniku ze zdroje s převažující hustotou na jedné straně haly do celé místnosti a setrvávání vyšších koncentrací těžkého plynu na nižší úrovni haly.

Obrázek 4: Koncentrace kontaminantu v časech 90, 300, 1200, 2100, 3600 s bez ventilace

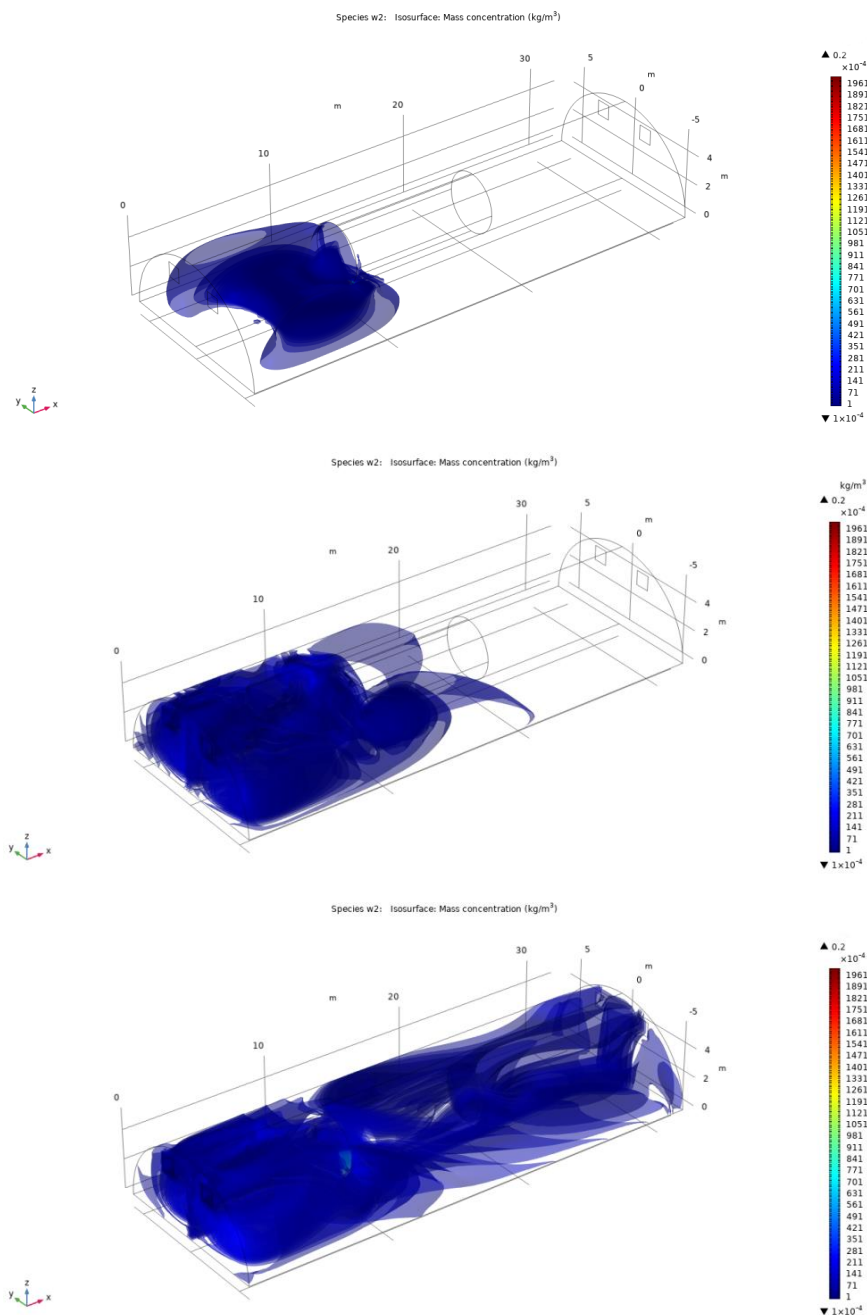


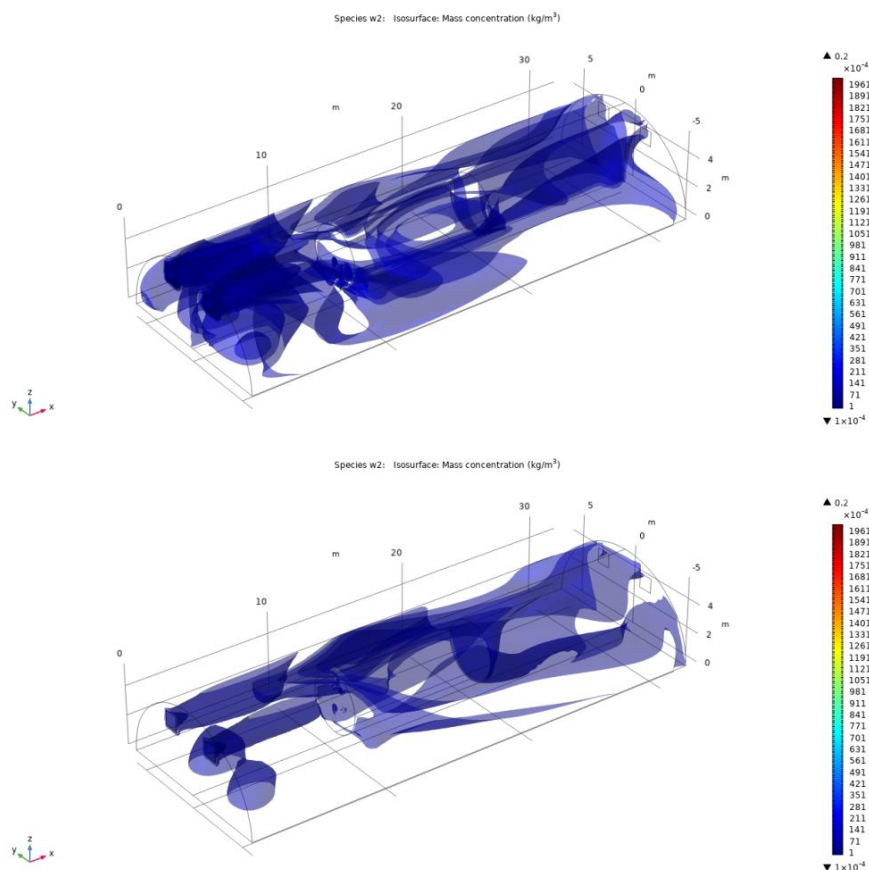




Při vzájemném posouzení lze zaznamenat jasný nárůst koncentrace v místnosti v čase při vypnuté ventilaci. Naopak při zapnuté ventilaci je trend nejprve mírně se zvyšující koncentrace při zaplňování místnosti, ale jejímu postupnému snížení, které je nejvíce patrné po dvacáté minutě, kdy kontaminant nadále ze zdroje neuniká a je zapnutá pouze ventilace.

Obrázek 5: Koncentrace kontaminantu v časech 90, 300, 1200, 2100, 3600 s při zapnuté ventilaci





4. ZÁVĚR

Byly zkoumány vybrané krizové scénáře úniku plynného toxického kontaminantu ve vnitřním prostředí průmyslového objektu. Pomocí numerických simulací v sestaveném modelu využitím softwaru COMSOL Multiphysics se sledoval a porovnával profil proudění v interiéru a vývoj koncentrace v čase za definovaných podmínek. V modelu byl zahrnut popis proudění tekutiny a transportu těžkých plynů. Při matematickém popisu se vycházelo z disperzního RANS modelu pro sledování turbulentního toku plynu. Koncentrace plynného kontaminantu byla vypočtena využitím konvekčně-difuzní rovnice. Všechny zmíněné rovnice byly doplněny vhodně zvolenými počátečními a okrajovými podmínkami.

Vytvořená geometrie 3D struktury na základě zjednodušené podoby testovací haly byla převedena na výpočetní síť. Samotné numerické simulace byly provedeny v prostředí simulačního nástroje metodou konečných prvků.

Výstupy simulací budou nadále sloužit pro optimalizaci dekontaminační technologie Plazmicat pro čištění nebezpečných vzdušín, kdy budou mimo jiné specifikovány některé klíčové parametry pilotních testů.

Poděkování

Výzkum byl podpořen z projektu VB01000054 „Pokročilý systém prevence a snížení následků šíření nebezpečného vzduchu v rámci IZS“.

Použitá literatura

- [1] WANG, J. et al. A dynamic approach for evaluating the consequences of toxic gas dispersion in the chemical plants using CFD and evacuation modelling. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2020, sv. 65, s. 104156. ISSN 0950-4230.
- [2] DONG, L. et al. Simulation of heavy gas dispersion in a large indoor space using CFD model. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2017, sv. 46, s. 1-12. ISSN 0950-4230.
- [3] MARKIEWICZ, M. A review of mathematical models for the atmospheric dispersion of heavy gases. Part I. A classification of models. *Ecological Chemistry and Engineering*, 2012, sv. 19, č. 3, s. 297. ISSN 1898-6196.
- [4] KASSOMENOS, P. et al. Modelling the dispersion of a toxic substance at a workplace. *Environmental Modelling & Software*, 2008, sv. 23, č. 1, s. 82-89. ISSN 1364-8152.
- [5] SCARGIALI, F. et al. Heavy Gas Dispersion Modelling Over a Topographically Complex Mesoscale. *Process Safety and Environmental Protection*, 2005, sv. 83, č. 3, s. 242-256. ISSN 0957-5820.
- [6] ZHANG, Q. et al. Transport characteristics of dense gaseous contaminants in a large space in the presence of obstacles. *Building and Environment*, 2022, sv. 207, s. 108411. ISSN 0360-1323.
- [7] SHEN, R. et al. Recent application of Computational Fluid Dynamics (CFD) in process safety and loss prevention: A review. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2020, sv. 67, s. 104252. ISSN 0950-4230.
- [8] PONTIGGIA, M. et al. Hazardous gas releases in urban areas: Assessment of consequences through CFD modelling. *Journal of Hazardous Materials*, 2010, sv. 176, č. 1-3, s. 589-596. ISSN 0304-3894.
- [9] ZHANG, B. a CHEN, G.-M. Quantitative risk analysis of toxic gas release caused poisoning—A CFD and dose–response model combined approach. *Process Safety and Environmental Protection*, 2010, sv. 88, č. 4, s. 253-262. ISSN 0957-5820.
- [10] BUBBICO, R. et al. CFD analysis of the dispersion of toxic materials in road tunnels. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2014, sv. 28, s. 47-59. ISSN 0950-4230.
- [11] SIDDIQUI, M. et al. CFD analysis of dense gas dispersion in indoor environment for risk assessment and risk mitigation. *Journal of Hazardous Materials*, 2012, sv. 209-210, s. 177-185. ISSN 0304-3894.
- [12] JUNG, S. et al. An approach for risk reduction (methodology) based on optimizing the facility layout and siting in toxic gas release scenarios. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2010, sv. 23, č. 1, s. 139-148. ISSN 0950-4230.
- [13] LIM, H. et al. A study on effective mitigation system for accidental toxic gas releases. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2017, sv. 49, s. 636-644. ISSN 0950-4230.
- [14] MIN, D. S. et al. Numerical modelling for effect of water curtain in mitigating toxic gas release. *Journal of Loss Prevention in the Process Industries*, 2020, sv. 63, s. 103972. ISSN 0950-4230.