

Turbulent strøming og fordampning av væske i sjakt

Thomas Vik, Kim Åge Martinussen og Bjørn Anders Pettersson Reif

Forsvarets forskningsinstitutt (FFI)

26. januar 2009

FFI-rapport 2008/02243

1048, 1112

P: ISBN 978-82-464-1537-6

E: ISBN 978-82-464-1538-3

Emneord

Fordampning

Turbulent strømning

Kjemiske stridsmidler

Godkjent av

Monica Endregard

Prosjektleder

Jan Ivar Botnan

Avdelingssjef

Sammendrag

Formålet med denne studien er å bidra til bedre forståelse og grunnleggende kunnskap om hvordan kjemiske trusselstoffer oppfører seg ved utslipp og hvordan de spres i luft. Slik kunnskap er et avgjørende grunnlag for konsekvensvurderinger av mulige utslipp og for planlegging av beskyttelses- og mottiltak, og for beredskapstrening og øvelser for Forsvaret og for sivile beredskapsmyndigheter. Det er utviklet en rekke fareprediksjonsverktøy og spredningsmodeller for å vurdere konsekvenser av angrep, sabotasje eller ulykker. En komplett modell inneholder en matematisk og fysisk beskrivelse av en rekke ulike fenomener som til sammen utgjør en spredningshendelse, og kan grovt deles inn i hhv kildemodellering, transportmodellering, og effektmodellering. Forbedring av denne type modeller er et felt der mye forskning gjenstår, da det per i dag er til dels stor usikkerhet knyttet til de tre leddene i modellkjeden. Denne studien fokuserer på kildemodellering.

FFI har bidratt med et scenario for innendørs spredning av sarin i NATO-studien RTO-SAS-061 'Defence against CBRN-attacks in the changing NATO strategic environment'. Scenarioet ble også simulert av andre deltakere, og det viste seg at de ulike deltakerne brukte en fordampningsrate som varierte med inntil en faktor 10. Dette bidrar til tilsvarende store variasjoner for beregninger av konsekvenser og skadeomfang, og er bakgrunnen for dette arbeidet. En nøyaktig beskrivelse av fordampningen er avgjørende for å modellere spredningen realistisk, både når det gjelder tidsforløp og konsentrasjon. Egenskaper til luftstrømmen over den avdampende væskeflaten har stor innvirkning på fordampningsraten. Spesielt viktig er det turbulente grensesjiktet rett over dammen. Hensikten med denne studien er å studere fordampning av en væske, i dette tilfellet nervegassen sarin, i en sjakt, for å bidra til en bedre beskrivelse av fordampning av væsker generelt. Dette kan brukes både i kombinasjon med enkle fareprediksjonsverktøy, enkle spredningsberegninger og mer komplekse modeller.

I dette arbeidet er turbulent strømming i en kvadratisk sjakt simulert ved hjelp av ulike turbulensmodeller i 'Computational Fluid Dynamics'-koden Fluent. Resultatene er sammenlignet med direkte numeriske simuleringer for å verifisere den valgte metoden. Basert på de turbulente hastighetsfeltene fra simuleringene er fordampning fra en dam i sjakten, og videre spredning av dampen gjennom sjakten, simulert. Dette er spesielt relevant for innendørs spredning der ventilasjonsanlegg blir brukt, men også viktig i andre scenarier der fordampning av kjemiske trusselstoffer fra en dam inngår. Resultatene viser at luftstrømmen påvirker væskeflaten, og dette har stor innvirkning på fordampningsraten. Fordampningsraten beregnet med simuleringene er omtrent fire ganger høyere enn fordampningsraten beregnet med en enkel modell som baserer seg på molekylær diffusjon i en laminær strøm. Resultatene viser også at en del fordampet sarin fester seg på veggene av sjakten, og dette vil gi opphav til sekundær fordampning.

Dette arbeidet vil bli videreført ved å se på andre trusselstoffer og variere egenskaper ved strømmingen. Planen er å lage en database med startbetingelser for spredningsberegninger, for senere å kunne gjennomføre fordampningsberegninger raskt og nøyaktig.

English summary

The aim of this study is to contribute to a better understanding and fundamental knowledge on the behaviour of harmful chemical substances when released, and how they are dispersed in air. Such knowledge is a crucial foundation for estimating the consequences of possible chemical incidents, and for the planning of protective actions and countermeasures, and also for training and exercises for the Defence and for civilian emergency authorities. There are numerous models for calculating the dispersion and estimating hazard areas, and possible consequences of attacks, sabotage or accidents. A complete model includes a mathematical and physical description of a number of phenomena that constitute a dispersion incident, and can roughly be divided in source modelling, transport modelling, and effect modelling respectively. Improvements of such models is a field that still requires a lot of research, as there are large uncertainties in the three parts of the modelling chain. This study focuses on source modelling.

FFI has contributed to the NATO study RTO-SAS-061 'Defence against CBRN-attacks in the changing NATO strategic environment' with a scenario of indoor dispersion of sarin. The scenario was also simulated by other participants, and it turned out that different participants used evaporation rates that were set apart with a factor of up to 10. This gives correspondingly large variations on the calculations of the consequences and the extent of damages, and is the background for this study. An accurate description of the evaporation is vital for a realistic modelling of the dispersion, both for time and concentration. The properties of the air flow above the evaporating liquid surface have a great influence on the evaporation rate. The turbulent boundary layer directly above the pool is particularly important. The object of this work is to study the evaporation from a liquid, in this case the nerve agent sarin, in a shaft, in order to contribute to a better description of the evaporation of liquids in general. This can be used both in combination with simple tools for estimating the hazard areas, simple dispersion models, and more complex models.

In this work, the turbulent flow through a quadratic shaft has been simulated by means of various turbulence models in the Computational Fluid Dynamics code Fluent. The results are compared with direct numerical simulations in order to verify the chosen method. Based on the turbulent velocity fields from the simulations, the evaporation from a pool in the shaft and the subsequent dispersion of the vapour are simulated. This is especially important for indoor dispersion where ventilation systems are utilised, but also important in other scenarios that include evaporation of chemicals from a pool. The results show that the air flow perturbs the liquid surface, and this has a great effect on the evaporation rate. The evaporation rate calculated from the simulations is about four times greater than the corresponding evaporation rate calculated with a simple formula based on molecular diffusion through a laminar flow. They also show that some of the sarin binds to the walls of the shaft, and this causes a secondary evaporation.

This work will be continued by examining other chemical substances and by varying the properties of the flow. The plan is to construct a data base with initial conditions for dispersion calculations, so that later calculations of evaporation can be executed quickly and accurate.

Innhold

1	Innledning	7
2	Bakgrunn	8
3	Turbulens og CFD-modeller	9
3.1	Turbulent strømming	9
3.2	Endelig volum-metoden	10
3.3	Direkte numeriske simuleringer (DNS)	10
3.4	Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS)	10
3.4.1	Spalart-Alamaras-modellen	11
3.4.2	(k - ϵ)-modellen	11
3.4.3	(k - ω)-modellen	12
3.4.4	Reynolds-Spennings-Modell (RSM)	12
3.4.5	Veggbehandling	13
3.5	Large Eddy Simulation (LES)	13
4	Numeriske beregninger	15
4.1	Beregningsgitter	15
4.2	Numeriske beregninger	16
5	Resultater fra simuleringene	18
5.1	Resultater fra LES og RSM	19
5.1.1	Resultater fra enkle RANS-modeller	21
6	Fordampning	21
6.1	Skalartransport	22
6.2	Volume-of-fluid (VOF)	23
6.3	Sammenligning av fordampningsmodellene	26
7	Oppsummering	30
8	Videre arbeid	31

1 Innledning

Kjemiske trusselstoffer, både kjemiske stridsmidler og giftige industrikjemikalier, kan utgjøre en trussel mot norske styrker eller annet norsk personell i internasjonale operasjoner eller i Norge, enten ved vilde handlinger eller alvorlige ulykker. Formålet med denne studien er å bidra til bedre forståelse og grunnleggende kunnskap om hvordan kjemiske trusselstoffer oppfører seg ved utslipp og hvordan de spres i luft. Modellering og simulering av slike hendelser er avgjørende for å kunne forutsi effekten av hendelser, ikke minst hvordan skadevirkningene kan reduseres gjennom riktige beskyttelses- og beredskapstiltak.

Trussel- og konsekvensvurderinger basert på analyse av tenkte hendelser (scenarioer) er et nyttig og hyppig brukt verktøy, både nasjonalt (forsvarsanalyser, sivil beredskapsplanlegging, i industrien, etc), og internasjonalt (f. eks. i NATO). Det er utviklet en rekke fareprediksjonsverktøy og spredningsmodeller for å vurdere konsekvenser av angrep, sabotasje eller ulykker. Forbedring av denne type modeller er et felt der mye forskning gjenstår, da det per i dag er til dels stor usikkerhet knyttet til de ulike delene av modellkjeden.

FFI har bidratt med et scenario for innendørs spredning av sarin i NATO-studien RTO-SAS-061 'Defence against CBRN-attacks in the changing NATO strategic environment' [1]. Scenarioet ble også simulert av andre deltakere, og det viste seg at de ulike deltakerne brukte en fordampningsrate som varierte med inntil en faktor 10. Dette ga tilsvarende store variasjoner i beregnet skadeomfang, og demonstrerte et klart forbedringsbehov. Det er derfor avgjørende å forbedre fordampningsmodellen for å foreta mer nøyaktige beregninger av spredning av kjemiske trusselstoffer. Fordampningsraten har innvirkning både på tidsforløpet til scenarioet og på konsentrasjonen, og har følgelig stor betydning for å anslå konsekvensene ved en gitt hendelse. Dette er bakgrunnen for denne studien.

Hensikten med denne studien er å studere fordampning av en væske, i dette tilfellet nervegassen sarin, i en sjakt det går en luftstrøm gjennom, for å bidra til en bedre beskrivelse av fordampning av væsker generelt. Dette kan brukes både i kombinasjon med enkle fareprediksjonsverktøy, enkle spredningsberegninger og mer komplekse modeller.

Denne studien er utført som en del av den basisfinansierte aktiviteten i FFI-prosjekt 1048 'Masseødeleggelsesvåpen - trussel og beredskap' og som en del av det basisfinansierte prosjektet FFI-prosjekt 1112 'Aerosoler: Spredning, transport og virkning'. Kim Åge Martinussen var sommerstudent ved FFI sommeren 2008. Han foretok i denne tiden, under veiledning av Thomas Vik og Bjørn Anders Pettersson Reif, en del av beregningene.

Kapittel 2 gir en bakgrunn for studien. Kapittel 3 gjennomgår turbulensmodellene som er benyttet, kapittel 4 beskriver de ulike simuleringene, og resultatene og sammenligning mellom disse er gitt i kapittel 5. Kapittel 6 beskriver simuleringene med fordampning.

2 Bakgrunn

En komplett konsekvensprediksjonsmodell inneholder en matematisk og fysisk beskrivelse av en rekke ulike fenomener som til sammen utgjør en spredningshendelse, og kan grovt deles inn i hhv kildemodellering, transportmodellering, og effektmodellering[2]:

- Kildemodellering: For å modellere selve utslippet er det nødvendig å kjenne utslippsmekanismen eller leveringsmiddelet, samt de fysiske og kjemiske egenskapene til trusselstoffet. Dette må beskrives i en form som gjør at det kan tas med i de senere leddene i modellkjeden.
- Transportmodellering: Et kritisk element i modellering av spredningstilfeller er beskrivelsen av vindfeltet og hvordan trusselstoffet sprer seg med vinden. Dette avhenger blant annet av omgivelsene og fysiske prosesser knyttet til turbulens og meteorologi. Det er generelt ikke mulig å ha komplett kjennskap til vindfeltet, og det er nødvendig å gjøre en rekke forenklingse antagelser for å etablere en modell for spredningen. Dette fører til et spenn av modeller med varierende kompleksitet.
- Effektmodellering: En komplett spredningsmodellering omfatter også beregninger av det potensielle skadeområdet for scenarioet basert på kilde- og transportmodelleringen. I tilfeller med giftige utslipp er man avhengig av toksikologiske data og kunnskap.

Denne studien fokuserer på kildemodellering.

Strømningstekniske aspekter er av stor betydning for fordampningsprosessen. Spesielt naturen til grensesjiktet rett ovenfor den avdampende væskeflaten har stor innvirkning, for eksempel hvorvidt det er et turbulent grensesjikt eller om det er laminært. Eksisterende modeller for å beregne fordampningsraten tar i varierende grad hensyn til strømningstekniske aspekter.

På grunn av dette er det startet opp et arbeid med å studere fordampning fra en dam med sarin i en ventilasjonssjakt, og spredning av sarindamp gjennom sjakten, der også turbulent strømning gjennom sjakten blir simulert, for å gi en god og troverdig kildetermsbeskrivelse til spredningsberegninger.

Grunnleggende studier av fordampningsprosessen er gjennomført ved hjelp av numeriske simuleringer med Computational Fluid Dynamics-koden (CFD-koden) Fluent. Først er turbulent strømning av luft gjennom en kvadratisk sjakt simulert med ulike CFD-modeller av typene Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS) og Large Eddy Simulation (LES). Resultatene fra disse er sammenlignet med publiserte data fra direkte numeriske simuleringer (DNS) [3, 4], for å på den måten verifisere den valgte metoden. Deretter er det introdusert en væskedam i sjakten, og fordampningen av denne, og videre spredning gjennom sjakten, er simulert.

Hensikten med dette arbeidet er først og fremst å gjøre grunnleggende undersøkelser av fordampning i et slikt scenario for å være i stand til å foreta gode og troverdige beregninger for scenario-utvikling og ved faktiske hendelser der fordampning av væsker inngår. Det er også av interesse å

sammenligne ulike turbulensmodeller for å undersøke forskjellene i resultatene fra de ulike modellene.

3 Turbulens og CFD-modeller

3.1 Turbulent strømning

Strømning av en Newtonsk inkompressibel fluid, både turbulent og laminær, beskrives av Navier-Stokes' ligninger:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.1)$$

$$\rho \left(\frac{\partial u_i}{\partial t} + u_j \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \mu \left(\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2} \right) + f_i \quad (3.2)$$

(3.1 beskriver bevarelse av masse og 3.2 bevarelse av bevegelsesmengde). Variablene i ligningene representerer følgende parametre: ρ er fluidets tetthet, u_i hastighetskomponentene, t tid, x_i romlige koordinater, p trykket, μ dynamisk viskositet og f_i eventuelle ytre krefter (for eksempel gravitasjon)¹. Disse ligningene anses å gi en fullstendig og korrekt beskrivelse av strømning. Navier-Stokes' ligninger har ikke analytiske løsninger for turbulent strømning og må dermed løses numerisk.

I en turbulent strøm vil hastighetskomponentene og trykket fluktuere. De instantane komponentene (som inngår i Navier-Stokes' ligninger) kan skrives som:

$$u_i(\mathbf{x}, t) = U_i(\mathbf{x}, t) + u'_i(\mathbf{x}, t) \quad (3.3)$$

$$p(\mathbf{x}, t) = P(\mathbf{x}, t) + p'(\mathbf{x}, t) \quad (3.4)$$

der U_i er middelverdien til hastighetskomponenten, u'_i er fluktuerende hastighet om middelverdien, P er middelverdien til trykket og p' er fluktuerende trykk. (Fet type betyr at størrelsen er en vektor.)

En viktig størrelse er Reynoldstallet: $Re = UL/\nu$, der U og L er henholdsvis en karakteristisk hastighet og lengdeskala for strømningen og $\nu = \mu/\rho$ er den kinematiske viskositeten. Dette tallet forteller om hvorvidt en bestemt strømning er turbulent eller laminær. For eksempel er strømning gjennom et rør laminær for $Re_D < 2000$ og fullstendig turbulent for $Re_D > 4000$, der Re_D beregnes fra bulkhastigheten og diameteren på røret [5].

Det er store variasjoner på de turbulente lengdeskalaene. Forholdet mellom de minste turbulente skalaene, η , og de største, l_0 , kan bestemmes fra [6]:

$$\eta/l_0 \sim Re^{-3/4} \quad (3.5)$$

¹Her er Cartesisk tensornotasjon brukt: $u_i = \{u_1, u_2, u_3\}$ og $x_i = \{x_1, x_2, x_3\}$. Repeterte indekser summeres; for eksempel $\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3}$.

Her er η er Kolmogorov-lengdeskalaen, som beskriver størrelsen til viskøs dissipasjon, mens l_0 beskriver de største turbulente skalaene. Kolmogorov-lengdeskalaene er gitt ved: $\eta = (\nu/\epsilon)^{1/4}$, der ν er den kinematiske viskositeten og ϵ er dissipasjonsraten av turbulent energi. I simuleringene i dette arbeidet er $\eta \approx 0,004$ m, og $l_0 \approx 4$ m. De store variasjonene i lengdeskala har stor innvirkning på de numeriske simuleringene.

Turbulensen taper stadig energi, og går i en kaskade fra de store strukturene til mindre. Ved Kolmogorovskalaen blir den molekylære viskositeten viktig, og turbulent kinetisk energi dissiperer til indre energi.

3.2 Endelig volum-metoden

Den vanligste metoden for beregning av differensialligninger i CFD, er endelig volum-metoden (engelsk: 'finite volume'). Her deles beregningsdomenet inn i mange kontrollvolum, kalt celler. Beregningsvariabelen er lokalisert i sentrum av cellen, og det antas at variabelen ikke endrer seg i cellen. Bevarelse av masse, bevegelsesmengde, energi og så videre, er oppfylt både innenfor hver enkelt celle og for hele beregningsdomenet. Beregningsdomenet inndelt i kontrollvolum kalles beregningsgitter. I dette arbeidet er disse gitterne konstruert med programmet GAMBIT.

3.3 Direkte numeriske simuleringer (DNS)

I prinsippet kan Navier-Stokes ligninger løses eksakt for turbulent strømning ved direkte numeriske simuleringer (DNS). Dette krever imidlertid svært store dataressurser slik at DNS er begrenset til strømninger ved lave Reynoldstall. Grunnen til dette er at beregningscellene må være små nok til at de minste turbulentskalaene er løst opp, og samtidig må beregningsdomenet være stort nok til å inneholde de store skalaene. Det kan vises at antall gitterpunkter som trengs går som $Re^{3/4}$; da dette gjelder for de tre romlige koordinatene, og tidssteget er relatert til gitterstørrelsen, skalerer kostnadene ved en direkte numerisk simulering som Re^3 .

Det er ikke gjennomført DNS i denne studien. Denne er i stedet basert på numeriske løsninger av sett med modelligninger. Resultatene er imidlertid sammenlignet med publiserte DNS-data [3, 4] for å verifisere metoden.

3.4 Reynolds Averaged Navier-Stokes (RANS)

RANS-modellene dekomponerer hastigheten som vist i ligning 3.3, og setter dekomponeringen inn i Navier-Stokes ligninger. For et inkompressibelt fluid fås etter litt algebra:

$$\frac{\partial U_i}{\partial x_i} = 0 \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial U_i}{\partial t} + U_j \frac{\partial U_i}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x_i} + \nu \left(\frac{\partial^2 U_i}{\partial x_j^2} \right) - \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\overline{u'_i u'_j} \right) \quad (3.7)$$

Disse ligningene kalles RANS-ligningene, og beskriver middelhastighetsfeltet. (For utledning av disse formlene, se for eksempel [6]).

Leddet $\overline{u'_i u'_j}$ (middelverdien av produktet av fluktuerende hastigheter i samme punkt i rommet) kalles Reynolds-spenning og må modelleres. Denne parameteren beskriver den gjennomsnittlige effekten av turbulensen på middelhastighetsfeltet. Det finnes en rekke RANS-modeller for å modellere dette leddet. I dette arbeidet er følgende modeller brukt: Spalart-Alamaras (S-A), k - ϵ , k - ω og Reynolds-Spennings-modellen (RSM). Herunder følger beskrivelse av disse modellene.

S-A-, (k - ϵ)- og (k - ω)-modellene baserer seg på Boussinesq-hypotesen (turbulensviskositetshypotesen) for å beregne Reynolds-spenningen:

$$-\overline{u'_i u'_j} = -\frac{2}{3} k \delta_{ij} + \nu_T \left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \quad (3.8)$$

der ν_T er den såkalte eddy-viskositeten (turbulent viskositet) og k er turbulent kinetisk energi.

3.4.1 Spalart-Alamaras-modellen

S-A-modellen er en enkel modell som løser én transportligning for den kinematiske turbulente viskositeten ν_T :

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho \nu_T) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho \nu_T U_i) = G_\nu + \frac{1}{\sigma_{\nu_T}} \left[\frac{\partial}{\partial x_j} \left((\mu + \rho \nu_T) \frac{\partial \nu_T}{\partial x_j} \right) + C_{b2} \rho \left(\frac{\partial \nu_T}{\partial x_j} \right)^2 \right] - Y_\nu + S_{\nu_T} \quad (3.9)$$

der G_ν er produksjon av turbulent viskositet, Y_ν er destruksjon av turbulent viskositet i nær-vegg-regionen på grunn av veggblokkering og viskøs demping, og S_{ν_T} er et skalart mål på deformasjonstensen. σ_{ν_T} og C_{b2} er konstanter.

3.4.2 (k - ϵ)-modellen

Den mest brukte turbulensmodellen er k - ϵ . Dette er en to-ligningsmodell der transportligninger for turbulent kinetisk energi, k , og dissipasjon av turbulens, ϵ , blir løst. Ligningen for transport av kinetisk turbulent energi er:

$$\frac{\partial k}{\partial t} + U_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \nu_T \left[\left(\frac{\partial U_i}{\partial x_j} + \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial U_j}{\partial x_i} \right] - \epsilon + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] \quad (3.10)$$

der det første leddet på høyre side beskriver produksjon av turbulent kinetisk energi og det siste beskriver diffusjon. Transportligningen for dissipasjon har samme form som ligning 3.10 (se for eksempel [6]). Eddy-viskositeten blir så beregnet ved:

$$\nu_T = \frac{C_\mu k^2}{\epsilon} \quad (3.11)$$

der C_μ er en konstant som vanligvis tilegnes verdien 0,09 (basert på eksperimentelle målinger).

Det er videre utprøvd tre undergrupper av k - ϵ : standard, realizable og RNG. Alle disse løser transportligninger for k og ϵ , men de skiller seg fra hverandre i utregningen av ν_T .

Standard (k - ϵ)-modellen er den mest vanlige i industrien, men den er kun gyldig for fullt utviklet turbulent strømning. Den antar også at diffusjon på grunn av molekylær viskositet kan neglisjeres. Det er i denne modellen $C_\mu = 0,09$ blir brukt.

RNG-modellen bruker en matematisk teknikk kalt renormaliseringsgruppemetoder (eng: renormalization group (RNG) methods) for å renormalisere Navier-Stokes ligninger, for å kunne gjøre rede for effekter fra de mindre skalaene til bevegelsen. Dette gjøres ved at ligningen for turbulent dissipasjon modifieres til å ta hensyn til ulike skalaer. Ligningen for eddy-viskositet er den samme som for standard k - ϵ men konstanten er forskjellig. Denne er mer nøyaktig for strømning med mye virvler, eller strømning i geometrier med sterk krumning.

'Realizable k - ϵ ' inneholder en begrensning på den estimerte stress-tensoren for å forsikre at normal-spenningskomponentene ($\overline{u'_i u'_i}$) er positive. Disse må per definisjon være positive, men kan, i andre modeller, få simultant negative verdier for strømninger med store tøyingsrater. Den skiller seg fra standard k - ϵ ved at transportligningen for ϵ er modifisert. Eddy-viskositeten er beregnet fra samme ligning (ligning 3.11), men konstanten er forskjellig.

3.4.3 (k - ω)-modellen

En alternativ to-lignings eddy-viskositetsmodell er k - ω . Denne løser en ligning for k , og en for den spesifiserte dissipasjonsraten $\omega \propto \epsilon/k$, som kan tolkes som en invers tidsskala.

Standard k - ω er rapportert å være bedre enn k - ϵ i strømninger med motvirkende trykkgradient, og er numerisk svært stabil. Denne modellen kan også simulere strømninger nær vegg bedre enn k - ϵ . Imidlertid er standard k - ω følsom for fristrømsgrensebetingelsen for ω i fri skjærstrøm. Turbulent viskositet blir utregnet på lignende måte som for k - ϵ :

$$\nu_T = \alpha^* \frac{k}{\omega} \quad (3.12)$$

der α^* er en koeffisient som avhenger av $Re_T = \frac{k}{\nu\omega}$.

Shear-Stress Transportmodellen (RST) kobler sammen k - ω nær veggen med k - ϵ i fristrømsregionen og er dermed gyldig både nær vegg og i fristrømsområdet. Et kryssdiffusjonsledd introduseres for å transformere standard k - ϵ til ligninger basert på k og ω .

3.4.4 Reynolds-Spennings-Modell (RSM)

RSM baseres ikke på Boussinesq-hypotesen. I stedet løses ligningen for selve Reynolds-spenningstensoren. Det tas da utgangspunkt i RANS-ligningen for bevegelsesmengde, ligning 3.7. Etter en

del algebra fås:

$$\frac{\overline{\partial u'_i u'_k}}{\partial t} + U_j \frac{\overline{\partial u'_i u'_k}}{\partial x_j} = P_{ik} + \Phi_{ik} + D_{ik} - \epsilon_{ik} \quad (3.13)$$

der termene på høyre side representerer henholdsvis produksjon, trykk-tøyning, turbulent transport og dissipasjon av Reynolds-spenning. Turbulent transport-termen er videre delt inn i turbulent diffusjon og molekylær diffusjon.

RST-modellen løser disse transportligningene, samt transportligningen for dissipasjon. Dette resulterer i sju ligninger. Disse ligningene er koblet sammen, noe som kan føre til numerisk ustabilitet. Imidlertid gir RSM-modellen bedre prediksjoner for komplekse strømnings, da den kan ta hensyn til raske endringer i tøyningraten (noe som ikke en- og to-ligningsmodellene kan), og kan da gjøre rede for effekter av strømlinjekrumning, virvler og rotasjon.

3.4.5 Veggbehandling

Vegger har stor innvirkning på strømnings. Når vegger har viskositeten stor innvirkning, mens det kan ses bort fra viskositet i fristrømsområdet med fullt utviklet turbulens. RSM og (k - ϵ)-modellene er gyldige i områder langt fra veggene (fristrøm), men må modifiseres i nærvegg-områdene. Det er to metoder for å gjøre dette.

Standard veggfunksjoner er den mest anvendte metoden i industrien. Her løses ikke den delen som avhenger av viskositeten opp, men veggfunksjoner benyttes for å gi grenseverdier for løsningsvariablene i det første gitterpunktet. Dette punktet må derfor ligge langt fra vegg.

Den andre metoden, forbedret veggbehandling (engelsk: Enhanced Wall Treatment), modifiserer turbulensmodellene slik at området som affekteres av viskositet også løses opp. Beregningsdomenet deles inn i et lag som påvirkes av viskositet og et fullt turbulent lag ved hjelp av et Reynoldstall: $Re_y = y\sqrt{k}/\nu$, der y er avstanden til nærmeste vegg. RSM og $k - \epsilon$ -modellen benyttes for $Re_y > 200$, mens en en-lignings turbulens modell for turbulent kinetisk energi, samt et algebraisk uttrykk for å beregne dissipasjonen, benyttes for $Re_y < 200$.

3.5 Large Eddy Simulation (LES)

I LES beregnes storskalabevegelsene til turbulent strømning eksakt, mens småskalastrukturene blir modellert. Det er storskalabevegelsene som inneholder mesteparten av energien og står for det meste av transporten av bevarte parametre (energi, bevegelsesmengde, masse og så videre). Disse strukturene varierer i tillegg mye mellom ulike strømnings, blant annet har geometrien stor innvirkning. Småskalastrukturene antas å være langt mer universelle, det vil si de er like for ulike strømnings og avhenger ikke av geometrien. De er derfor enklere å modellere.

Ved å filtrere hastigheten fås hastighetsfeltet til storskalastrukturene:

$$\bar{u}_i = \int G(x, x') u'_i dx' \quad (3.14)$$

der $G(x, x')$ er en funksjon som er stor kun når x og x' er langt fra hverandre. (Observer at merket hastighet, u' , i dette tilfellet ikke betyr at det er fluktuierende hastighet, som i RANS-formuleringen). I en homogen strømming, kan det brukes filter som avhenger kun av avstanden mellom punktene: $G(|x - x'|/\Delta)$, der Δ er filterbredden. Virvler større enn Δ anses for store, og virvler mindre enn Δ anses som små. Δ er vanligvis antatt å være proporsjonal med gitterstørrelsen, men de er ikke identiske. Det er flere funksjoner for $G(x, x')$ i bruk. Fluent bruker volumet, V , til beregningscellene:

$$G(x, x') = \frac{1}{V}. \quad (3.15)$$

Ved å sette den filtrerte hastigheten inn i Navier-stokes ligninger, fås et sett med ligninger som ligner svært på RANS-ligningene:

$$\frac{\overline{D}u_i}{\overline{D}t} + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \nu \frac{\partial^2 \overline{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} \quad (3.16)$$

Her er den substantielt deriverte basert på den filtrerte hastigheten gitt ved:

$$\frac{\overline{D}}{\overline{D}t} \equiv \frac{\partial}{\partial t} + \overline{\mathbf{u}} \cdot \nabla \quad (3.17)$$

og

$$\tau_{ij} = \overline{u_i u_j} - \overline{u}_i \overline{u}_j \quad (3.18)$$

kalles 'subgrid-scale-stress' (SGS). Den har lignende rolle i LES som Reynolds-spenning har i RANS-modellene, men fysikken den modellerer er forskjellig. Merk at $\overline{u_i u_j} \neq \overline{u}_i \overline{u}_j$.

Som for RANS-modellene, introduseres Boussinesq eddy-viskositetshypotesen for å modellere SGS-stress:

$$\tau_{ij} - \frac{1}{3} \tau_{kk} \delta_{ij} = -2\nu_T \overline{S}_{ij} \quad (3.19)$$

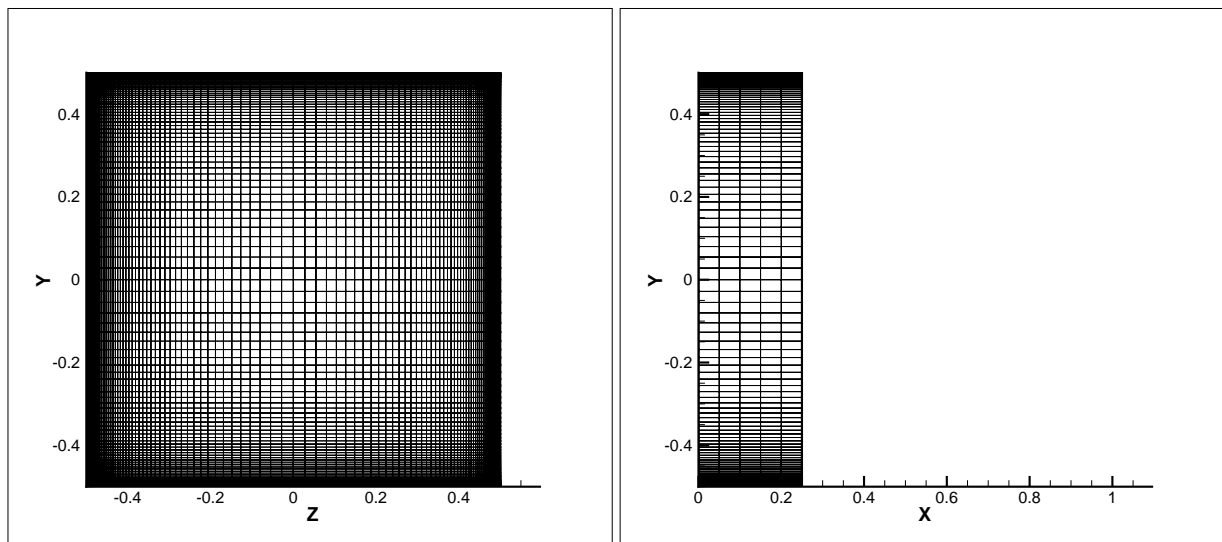
der $\overline{S}_{ij} = \frac{1}{2} (\frac{\partial \overline{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{u}_j}{\partial x_i})$ er tøyningstensoren av det filtrerte hastighetsfeltet. Det finnes flere metoder for å modellere eddy-viskositeten, Smagorinsky-Lilly-modellen er blant de vanligste. Her modelleres eddy-viskositeten som:

$$\nu_T = \rho L_s^2 |\overline{S}| \quad (3.20)$$

der $L_s = \min(\kappa d, C_s V^{1/3})$ er Smagorinsky-lengdeskalaen (eller 'mixing-length'-parameteren), og $|\overline{S}| = \sqrt{2\overline{S}_{ij}\overline{S}_{ij}}$. κ er von Karamans konstant, d er avstanden til veggen, C_s er Smagorinsky-konstanten og V er volumet til beregningscellen. κ har en verdi på 0,41 og Fluent bruker en standardverdi for Smagorinsky-konstanten på $C_s = 0,1$.

Den dynamiske Smagorinsky-Lilly-modellen regner ut verdien av C_s ved hver iterasjon basert på de beregnede oppløste skalaene til bevegelsene (denne er altså ingen egentlig konstant i disse beregningene). Det er denne modellen som er brukt i simuleringene i dette arbeidet.

Selv om LES ikke har like strenge krav til beregningsgitteret som DNS, må det fortsatt være stort nok til å inneholde storskalastrukturene. Størrelsen på cellene avhenger av nøyaktigheten man krever av løsningen. I alle fall kreves det et mye større, og finere, beregningsgitter enn i RANS-beregninger, og i tillegg må beregningene kjøres over lang tid for å samle statistikk for strømmingen som modelleres. LES krever størrelsesordener mer regnekraft og tid enn RANS.



Figur 4.1: Beregningsgitteret til RANS-simuleringene. I figuren til venstre er gitteret sett forfra i normalplanet til middelstrømmen (yz -planet). I figuren til høyre er gitteret sett fra siden (xy -planet)

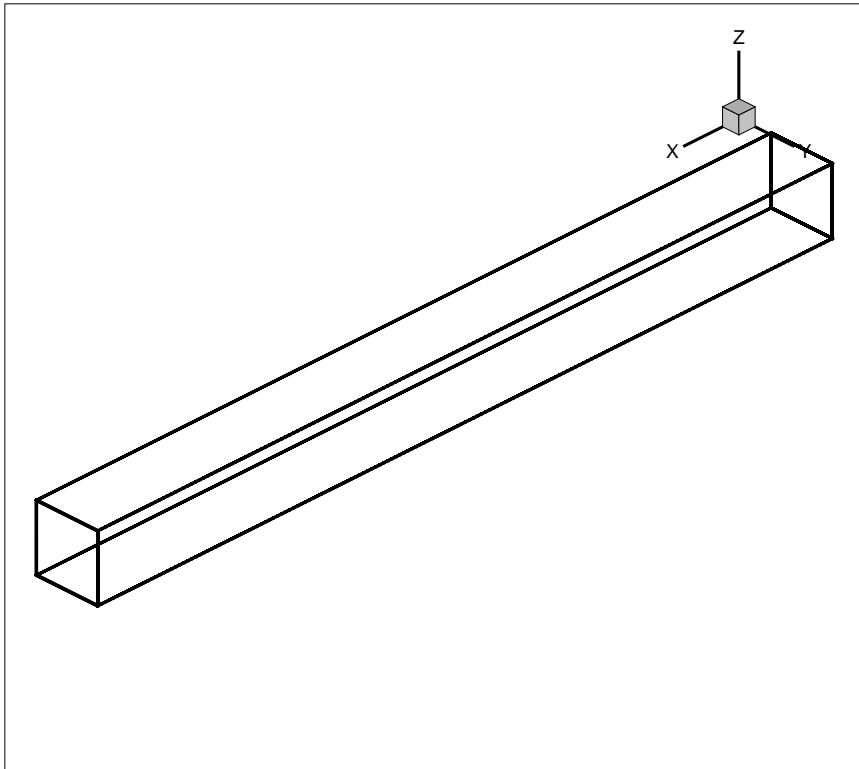
4 Numeriske beregninger

4.1 Beregningsgitter

Gitteret beregningene utføres i er noe forskjellig for RANS- og LES-beregningene. Årsaken til dette er at i LES så må storskalastrukturene simuleres og følgelig må beregningsdomenet være stort nok til å inneholde disse. RANS-modellene simulerer ikke turbulente strukturer, og kan være betraktelig mindre.

Alle simuleringene er gjennomført for en kvadratisk sjakt med et tverssnittsareal på $1 \times 1 \text{ m}^2$. Koordinatsystemet er valgt slik at middelstrømmen går i x -retning. For simuleringene med RANS-modellene er det konstruert et gitter med lengde 5 cm (i middelstrømsretningen). I normalplanet til middelstrømmen, yz -planet, er det 101×101 nodepunkter; det er størst gittertetthet nær veggene, se figur 4.1. I x -retningen er det 6 jevnt fordelt nodepunkter med en avstand på 5 cm mellom hver. Da det kan antas at strømmingen er fullt utviklet i x -retningen, er det mulig å bruke et så kort beregningsområdet i denne retningen.

For LES-beregningene er sjakten 12 m lang, figur 4.2. Det er 181 jevnt fordelte gitterpunkter i strømningsretningen. I normalplanet er det en avstand på 2,5 cm mellom gitterpunktene, figur 4.3.



Figur 4.2: Beregningsgitteret til LES-simuleringene.

4.2 Numeriske beregninger

Simuleringene er gjennomført for et Reynoldstall på $Re_\tau = Du_\tau/\nu = 600$, der er $u_\tau = \sqrt{\tau_w/\rho}$ er friksjonshastigheten på vegg og τ_w veggskjærsspenningen. Luft har en kinematisk viskositet på $\nu = 1,46 \cdot 10^{-5}$ m²/s, og sjakten har en diameter på $D = 1$ m. Dermed er veggskjærshastigheten $u_\tau = 8,76 \cdot 10^{-3}$ m/s. Dette kan relateres til en turbulent lengdeskala: $\nu/u_\tau \approx 0,002$ m. Lengdevariable til strømmingen nær vegger blir ofte normalisert med denne turbulente lengdeskalaen: $y^+ = \frac{yu_\tau}{\nu}$ (skaleringen er gyldig for $y^+ < 5$).

Ved å se på kreftene i strømningsretningen kan dette relateres til et trykkfall gjennom sjakten:

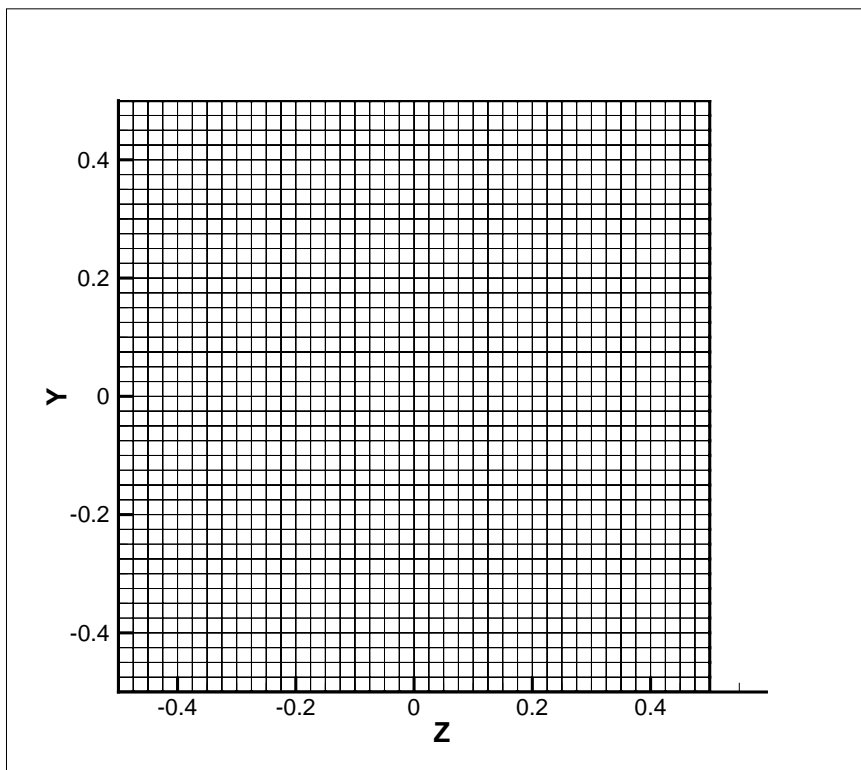
$$\frac{dp}{dx} = -\frac{4\rho u_\tau^2}{D} \quad (4.1)$$

Med veggskjærshastigheten ovenfor resulterer dette i et trykkfall: $\frac{dp}{dx} = -3,76 \cdot 10^{-4}$ Pa.

Simuleringene er gjort ved å først ha grensebetingelser med konstant hastighet på innløpet. Etter en stund er grensebetingelsene omgjort til periodiske betingelser ved at strømmingen i utløpet føres inn igjen i innløpet. Trykkfallet beregnet ovenfor er da innført i sjakten for å oppnå friksjonshastigheten og Reynoldstallet nevnt ovenfor. Dette svarer dermed til en uendelig lang sjakt.

RANS-modellene er statistisk stasjonære². Disse er foretatt med ikke-periodiske grensebetingelser

²Det er mulig å gjennomføre tidsavhengige RANS-beregninger også. Det er gjort i simuleringene med fordampning.



Figur 4.3: Beregningsgitteret til LES-simuleringene sett forfra normalt på middelstrømsretningen.

til løsningene er rimelig konvergent, og deretter er periodiske grensebetingelser og strengere konvergenskriterier innført.

Det er gjennomført simuleringer med både standard veggfunksjoner og med forbedret veggbehandling for k - ϵ -modellene. For RSM er det kun kjørt beregninger med forsterket veggbehandling³. Det er videre undersøkt en rekke mulige innstillinger for de ulike modellene i FLUENT. Disse er forklart nærmere der de er benyttet.

LES-modellen er tidsavhengige. Her er det først simulert med ikke-periodiske grensebetingelser til det er utviklet turbulens i hele sjakten. Deretter er det innført periodiske betingelser, og simuleringen er kjørt til tilstrekkelig med statistikk er innsamlet. Dette ses ved at middelhastighetsfeltet er symmetrisk i normalplanet til sjakten, samt ved at konvergenskriteriene er oppnådd.

For både RANS og LES er det satt krav om at veggskjærsspenningen til løsningene svarer til den analytiske (det vil si at ligning 4.1 er oppfylt for trykkgradienten som er satt på forhånd og den utregnede veggskjærshastigheten). Det er sjekket at volumstrømmen er konstant, det vil si at det som kommer inn i sjakten også går ut igjen. I tillegg er det sjekket at hastighetsfeltet er symmetrisk i normalplanet til middelstrømmen. Det er også sjekket at løsningen er konvergent ved å innføre grenseverdier på residualene til kontinuitetsligningen.

Tabell 4.1 lister opp de ulike RANS-modellene som er brukt. Tabellen oppgir også antall iterasjoner

³Årsaken til det er at beregningsgitteret var for fint til at veggfunksjoner kunne brukes. Se kapittel 3.4.5.

	Modell	Veggbehandling	Antall iterasjoner
$(k-\epsilon)1$	Standard $k-\epsilon$	Standard veggfunksjon	3381
$(k-\epsilon)2$	Standard $k-\epsilon$	Forbedret veggmodellering	3790
$(k-\epsilon)3$	Realizable $k-\epsilon$	Forbedret veggmodellering	4491
$(k-\epsilon)4$	RNG $k-\epsilon$	Forbedret veggmodellering	2802
$(k-\epsilon)5$	RNG $k-\epsilon$	Forbedret veggmodellering	2644
$(k-\omega)1$	Standard $k-\omega$		3376
$(k-\omega)2$	SST $k-\omega$		4037
(S-A)1	Spalart-Alamaras		3409
(S-A)2	Spalart-Alamaras		3147
RSM	Reynolds-Spennings-Modell	Forbedret veggmodellering	6428

Tabell 4.1: RANS-modellene som er undersøkt. $(k - \epsilon)4$ og 5 skiller seg ved at 4 inkluderer en differensiell viskositetsmodell som 5 ikke inkluderer. (S-A)1 og 2 skiller seg ved måten vortisitet (rotasjon av hastighetsfeltet) beregnes på; (S-A)1 beregner vortisitet kun fra rotasjon, mens 2 beregner vortisitet fra rotasjon og tøyning.

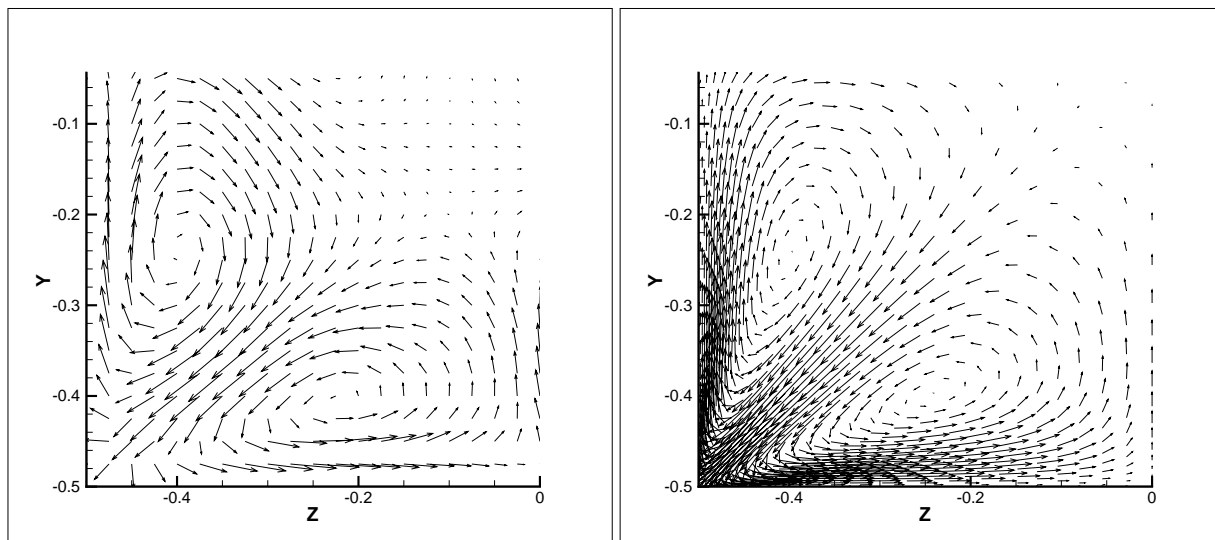
gjennomført for hver modell for å oppnå numerisk konvergens. Konvergenzkriteriet i disse simuleringene var at residualene skulle være mindre enn 10^{-3} for kontinuitetsligningen (massebevarelse).

LES-beregningene ble utført med tidssteg på 1 sekund, med maks 20 subiterasjoner per tidssteg. Et konvergenzkriterium for massebevarelse ble innført, først med en grense på 10^{-3} , deretter en grense på 10^{-4} . Totalt ble det gjennomført noen tusen tidssteg før periodiske grensebetingelser ble innført, og deretter noen tusen steg før statistikkinnsamlingen ble satt i gang⁴, og til slutt noen tusen tidssteg der statistikk av midlede data ble innsamlet. Dette gir et totalt antall tidssteg på over 20000, og totalt over 100000 iterasjoner. Fordelen med RANS-modellene, som typisk trengte 3000-4000 iterasjoner, når det gjelder tidsbruk, er dermed åpenbar.

5 Resultater fra simuleringene

Figur 5.1 viser hastighetsvektorene simulert med LES og RSM i planet normalt på strømningsretningen. Kun en kvadrant av sjakten er vist. Det kan tydelig ses to virvler ved hvert hjørne. Disse sekundærstrømningene er en turbulent effekt som oppstår ved strømning i kvadratisk sjakt og som drives av anisotropien i turbulensen. Laminær strømning har ikke disse sekundærstrømningene. De enkle RANS-modellene modellerer ikke disse sekundærstrømningene da det er en ren turbulent effekt. Til tross for at sekundærstrømningen er svak, påvirker den miksingene i kanalen betydelig.

⁴Innsamling av statistikk, det vil si beregning av midlede verdier, må ikke settes igang før løsningen er statistisk stabil.



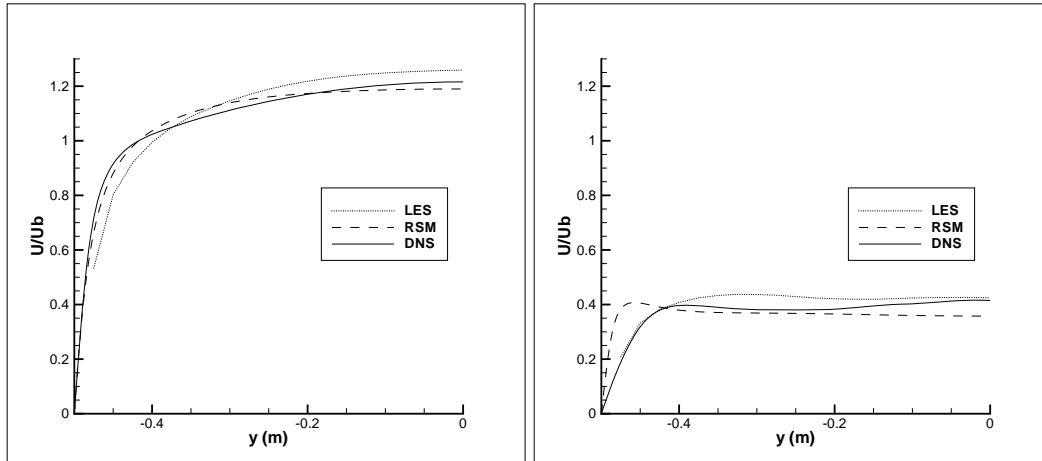
Figur 5.1: Strømningsmønsteret i et plan normalt på middelsstrømsretningen. Figuren til venstre er fra LES-beregning, figuren til høyre fra en RSM-beregning. Skalaene for hastighetsvektorene i de to figurene er ikke identisk.

5.1 Resultater fra LES og RSM

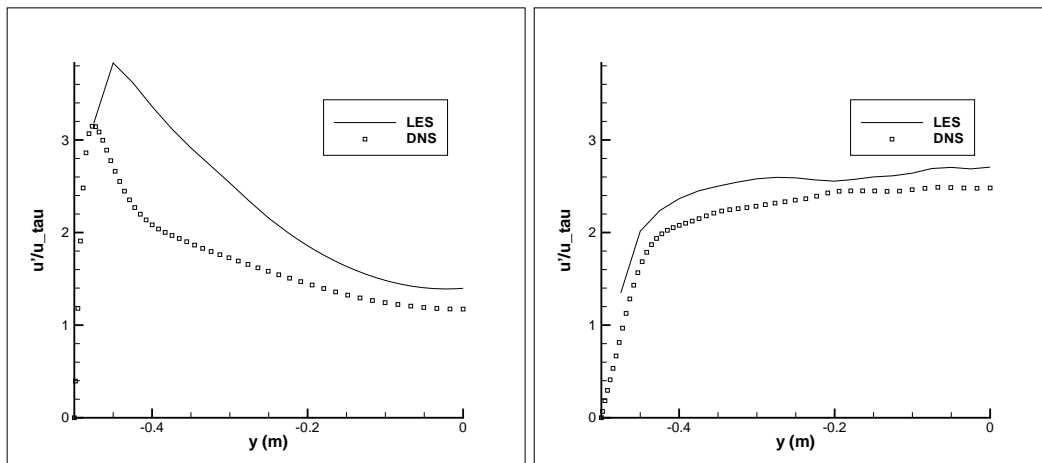
Figur 5.2 viser middelhastigheten i strømningsretningen beregnet med LES og RSM sammenlignet med data fra DNS. Hastighetene er vist som funksjon av avstanden fra veggen i y -retning; figuren til venstre er midt i kanalen i z -retningen, mens figuren til høyre er 1 cm fra veggen. Årsaken til at kurven for LES ikke går helt inntil veggen ($y = -0,5$ m) er at midlingen foretas over beregningscellene, som strekker seg ut i sjakten. Dette fører til at hastigheten blir gitt en verdi forskjellig fra null på veggen, og siden dette kun skyldes de numeriske algoritmene og ikke er en fysisk effekt, er det valgt å fjerne dette punktet fra kurvene. På grunn av 'no-slip'-betingelsen på veggen, er hastigheten på veggen lik null. Dette gjelder for samtlige fordelinger av midlede eller fluktuerende hastigheter beregnet med LES.

Figure 5.3 viser fluktuasjonene til hastigheten i x -retning beregnet med LES og DNS som funksjon av avstanden fra veggen.

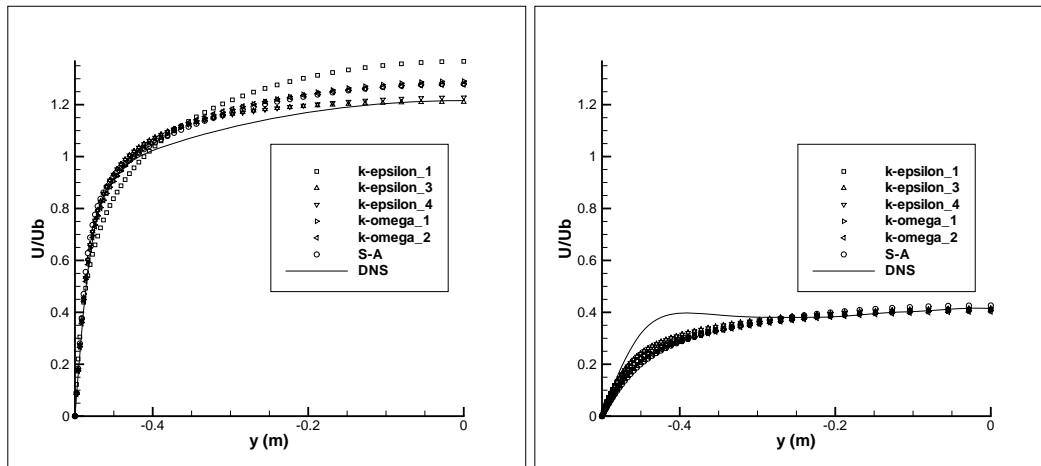
Både LES og RSM reproducerer hastighetsfeltene fra DNS rimelig bra. Middelhastigheten i strømningsretningen midt i kanalen predikeres svært bra med RSM, mens LES overpredikerer hastigheten noe. Ved veggen er sammenligningen noe mindre entydig. Ved y -koordinater nær veggen reproducerer LES hastighetene fra DNS godt, mens RSM her overpredikerer kraftig. Nærmere midten av kanalen i y -retning derimot, er det vanskelig å si hvilken modell som gir best samsvar med DNS.



Figur 5.2: Middelhastigheten i x -retning simulert med LES, RSM og DNS normalisert med bulkhastighet som funksjon av avstand fra veggen i y -retning. Figuren til venstre er for $z = 0$ m, dvs midt i kanalen; figuren til høyre er for $z = 0,49$ m, dvs 1 cm fra veggen.



Figur 5.3: Hastighetsfluktuasjone i x -retning normalisert med veggfriksjonshastighet som funksjon av avstand fra veggen. Linjene svarer til LES-beregninger, mens symbolene svarer til DNS. Figuren til venstre er for $z = 0$ m, figuren til høyre $z = 0,49$ m.



Figur 5.4: Middelhastigheten i x -retning beregnet med diverse RANS-modeller og DNS normalisert med bulkhastighet som funksjon av avstand fra veggen i y -retning. Figuren til venstre er for $z = 0$ m, figuren til høyre $z = 0,49$ m.

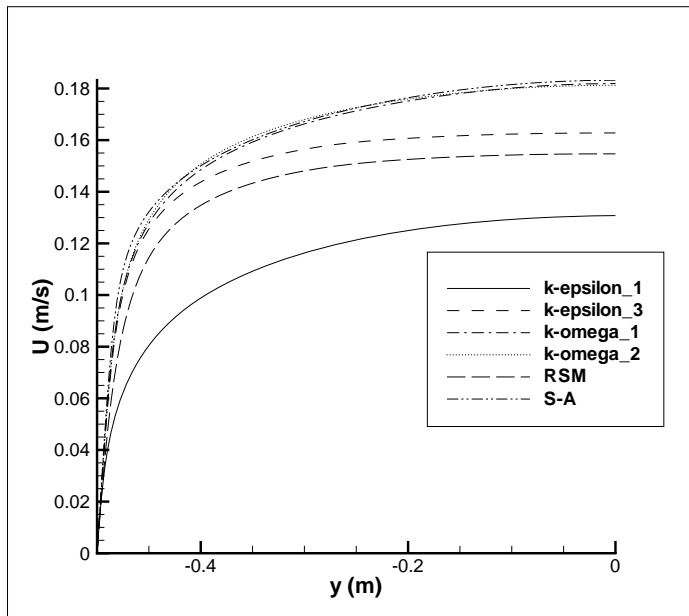
5.1.1 Resultater fra enkle RANS-modeller

Figur 5.4 viser middelhastigheten i x -retning normalisert med bulkhastigheten som funksjon av avstanden fra veggen i y -retning beregnet med de enkle RANS-modellene. Tilsvarende normalisert hastighet fra DNS er også vist. Det er rimelig god samling på de ulike modellene. Midt i kanalen i z -retning overestimerer k - ϵ -modellen med standard veggfunksjoner hastigheten en del, mens de andre k - ϵ -modellene er i godt samsvar med DNS. k - ω og S-A overpredikerer hastigheten noe. Nær veggen i både y - og z -retning underpredikerer alle RANS-modellene hastigheten sammenlignet med DNS.

Figur 5.5 viser ikke-normalisert hastighet i x -retning som funksjon av avstanden fra veggen i y -retningen midt i sjakten i z -retning. De ulike modellene predikerer noe forskjellig hastighet, men denne forskjellen blir mindre betydelig når hastighetene normaliseres med bulkhastigheten (som er gjennomsnittshastigheten i sjakten).

6 Fordampning

Med utgangspunkt i hastighetsfeltene fra RANS- og LES-beregningene er fordampning fra en dam med sarin på bunnen av sjakten undersøkt. Både selve fordampningsprosessen og transport av damp gjennom sjakten er simulert. Det er benyttet to metoder: skalartransport og "volume-of-fluid"



Figur 5.5: Hastigheten i x -retning med ulike RANS-modeller.

6.1 Skalartransport

Dampen kan behandles som en passiv skalar som blir transportert av luftstrømmen uten å påvirke den. (En aktiv skalar derimot, påvirker strømmen.)

I dette arbeidet er spesietransportmodellen (engelsk: 'Species transport') i Fluent benyttet. Her beregnes transportligningen for den lokale massefraksjonen av hver komponent Y_α , i dette tilfellet sarin, ved:

$$\rho \left(\frac{\partial Y_\alpha}{\partial t} + U_j \frac{\partial Y_\alpha}{\partial x_j} \right) = - \frac{\partial \mathbf{J}_\alpha}{\partial x_j} + R_\alpha + S_\alpha \quad (6.1)$$

der R_α er produksjonen av Y_α fra kjemiske reaksjoner og S_α er en kilde term (den kan for eksempel beskrive tilførsel av komponent α fra et innløp). Videre er diffusjonsflukser av komponent α på grunn av konsentrasjonsgradienter beskrevet av:

$$\mathbf{J}_\alpha = -(\rho D_\alpha + \frac{\mu_t}{Sc_t}) \Delta Y_\alpha \quad (6.2)$$

der D_α er den molekylære diffusjonskoeffisienten, μ_t den turbulente viskositeten (fra Boussinesq-hypotesen), og $Sc_t = \mu_t / \rho D_t$ et turbulent Schmidt-tall der D_t er turbulent diffusjon. Schmidt-tallet er gitt verdien 0,7 (default-verdi i Fluent).

Vi ser bort fra kjemiske reaksjoner. Et areal på $1 \times 1 \text{ m}^2$ på bunnflaten av sjakten (det vil si i xz -planet og $y=-0,5 \text{ m}$), blir definert som innløp av sarindamp. Massefraksjonen rett over dette planet blir beregnet ut fra damptrykket til sarin ved den aktuelle temperaturen og totaltrykket i hver enkelt beregningscelle. Sarinen blir herfra transportert av luftstrømmen. Denne antagelsen tilsvarer dermed en helt flat væskeflate som ikke påvirkes av luftstrømmen over.

Modell	Fluks (kg/s)
$(k - \epsilon)2$	$3,34 \cdot 10^{-6}$
$(k - \epsilon)3$	$3,41 \cdot 10^{-6}$
$(k - \epsilon)4$	$3,32 \cdot 10^{-6}$
$(k - \epsilon)5$	$3,38 \cdot 10^{-6}$
$(k - \omega)1$	$3,25 \cdot 10^{-6}$
$(k - \omega)2$	$3,36 \cdot 10^{-6}$
(S-A)1	$3,65 \cdot 10^{-6}$
RSM	$3,57 \cdot 10^{-6}$
LES	$3,76 \cdot 10^{-6}$

Tabell 6.1: Fluksen av sarindamp gjennom utløpet av sjakten

Figur 6.1 viser massefraksjonen ($m_{sarin}/(m_{sarin}+m_{luft})$) av sarindamp ved utløpet av ventilasjons-sjakten med $(k-\epsilon)$ -, $(k-\omega)$ -og RSM-modellene. Figur 6.2 viser tilsvarende fraksjon når transporten av damp er beregnet med LES (det er samme verdi for maksimal og minimum molarfraksjon som i figur 6.1, men færre konturnivåer er valgt). Figuren med den midlede massekonsentrasjonen er midlet både i tid og speilet over midten av kanalen i z -retning. Det er figuren med midlede verdier som er interessant å sammenligne med figur 6.1, da RANS kun regner på middelveidier. Det er tydelig at spredningen skjer mye mer effektivt når det beregnes med LES enn RANS. For LES ses det også tydelig topper både på sidene og i midten. Dette skyldes de turbulente sekundærstrømningene (se figur 5.1). $(k - \epsilon)$ - og $(k - \omega)$ -modellene løser ikke opp disse sekundærstrømningene, og dermed blir sarindampen i disse simuleringene spredt mer langs veggene. RSM løser opp disse sekundærstrømningene til en viss grad, men vi ser at spredningen i midten er mye kraftigere for LES.

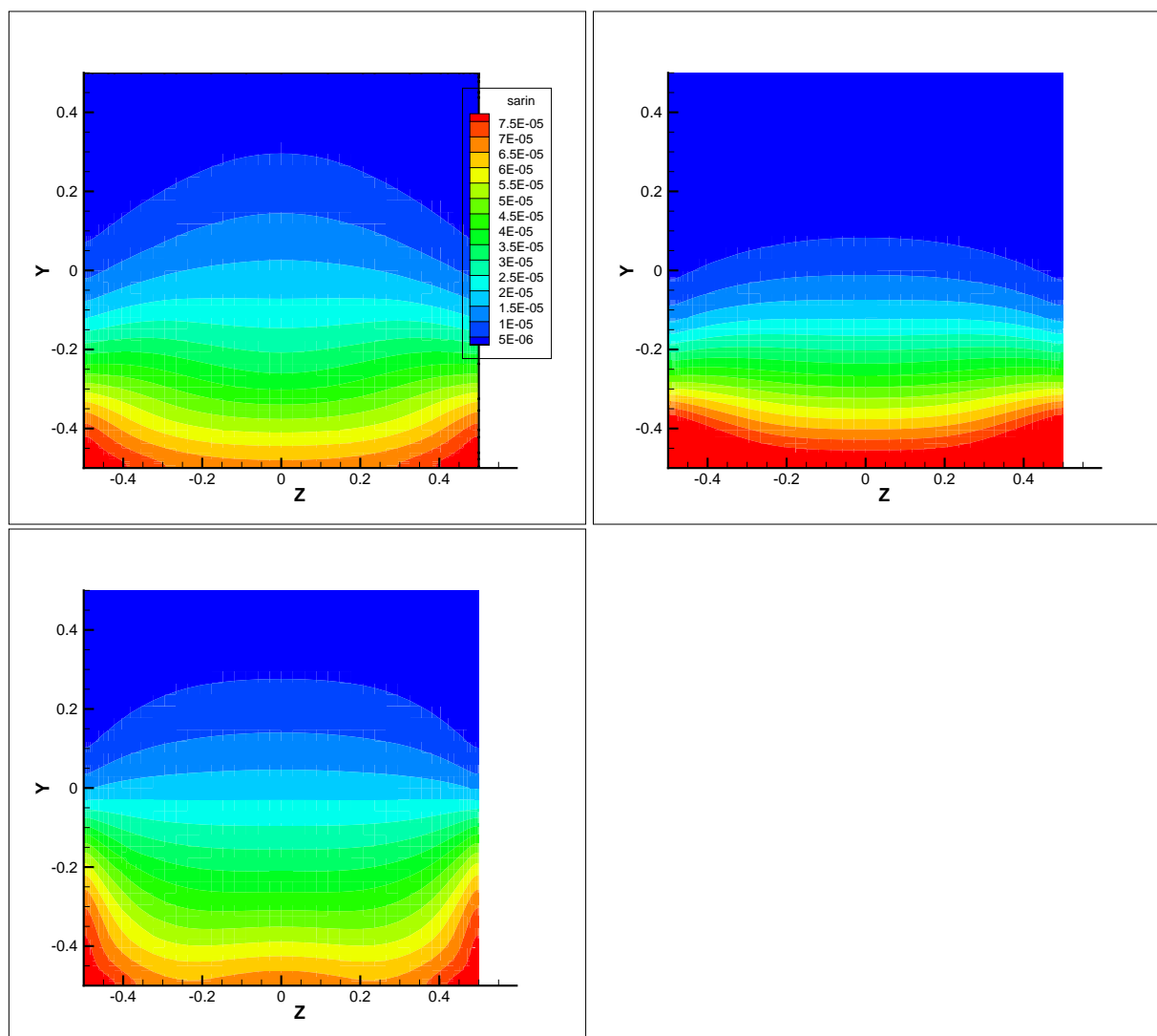
Tabell 6.1 viser sarinfluksen gjennom utløpet av sjakten beregnet fra de simulerte hastighetsfeltene og massekonsentrasjonene. For LES er disse beregnet fra de midlede hastighetene og sarinkonsentrasjonene. Vi ser at fluksen gjennom utløpet er nokså lik for de ulike modellene.

6.2 Volume-of-fluid (VOF)

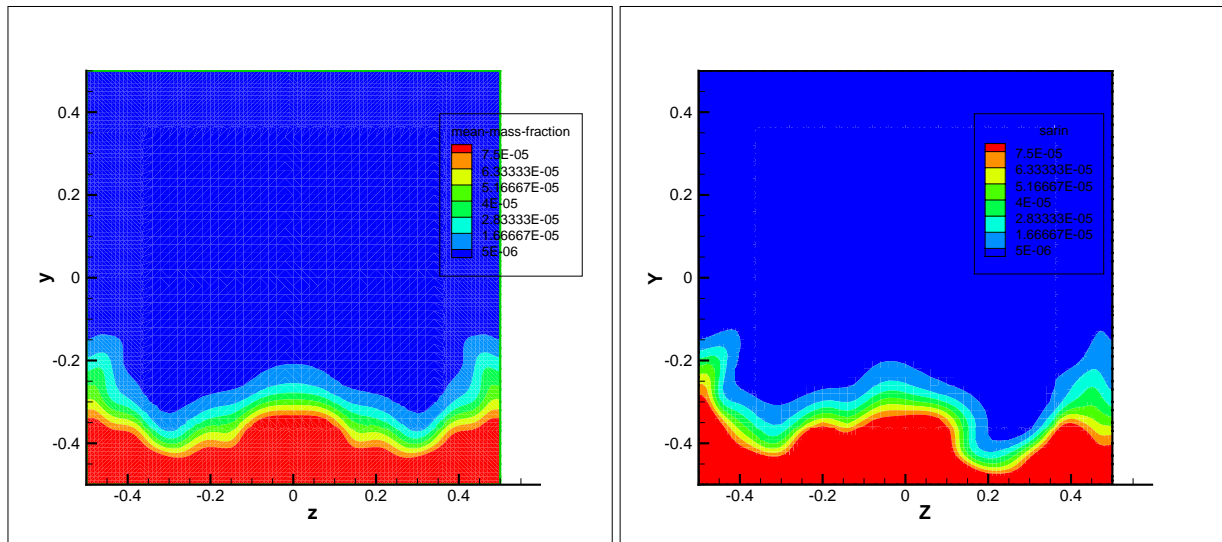
En mer omstendelig metode for å beregne fordampning fra en væskeflate er 'volume-of-fluid' (VOF). Denne metoden er kun utprøvd med hastighetsfeltene fra LES-simuleringer. Denne metoden modellerer to eller flere separate faser ved å løse ett enkelt sett med bevegelsesligninger, og sporer volumfraksjonen til hver enkelt fase gjennom beregningsdomenet.

Grenseflaten mellom fasene spores ved hjelp av kontinuitetsligningen for volumfraksjonen av en eller flere faser, som får følgende form for fase q :

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \mathbf{u}_q) \right] = S_{\alpha_q} + \sum_{p=1}^n (j_{pq} - j_{qp}) \quad (6.3)$$



Figur 6.1: Massefraksjonen av sarindamp ved utløpet av ventilasjonssjakten beregnet med tre RANS-modeller. Figuren øverst til venstre er beregnet fra realizable (k - ϵ)-modellen, figuren øverst til høyre fra SST k - ω og figuren nederst til venstre fra RSM.



Figur 6.2: Massefraksjon av sarindamp ved utløpet av ventilasjonssjakten beregnet med LES. Figuren til venstre er midlede verdier, figuren til høyre er instantane verdier.

der α_q og ρ_q er volumefraksjon og tetthet til fase q , j_{qp} er massoverføring fra fase q til fase p , n er antall faser, og S_{α_q} er en kilde term til fase q med default-verdi null.

En eksplisitt tidsdiskretisering er brukt. Her foretas interpoleringen med volumandelsverdiene ved forrige tidssteg (i motsetning til det implisitte systemet, der interpoleringen gjøres ved det nåværende tidssteget). Interpoleringen ved grenseflaten mellom to faser gjøres ved geometrisk rekonstruksjon, der grenseflaten blir representert ved en delvis (engelsk: piecewise) lineær funksjon.

Følgende bevegelsesligning løses, og det resulterende hastighetsfeltet deles mellom fasene:

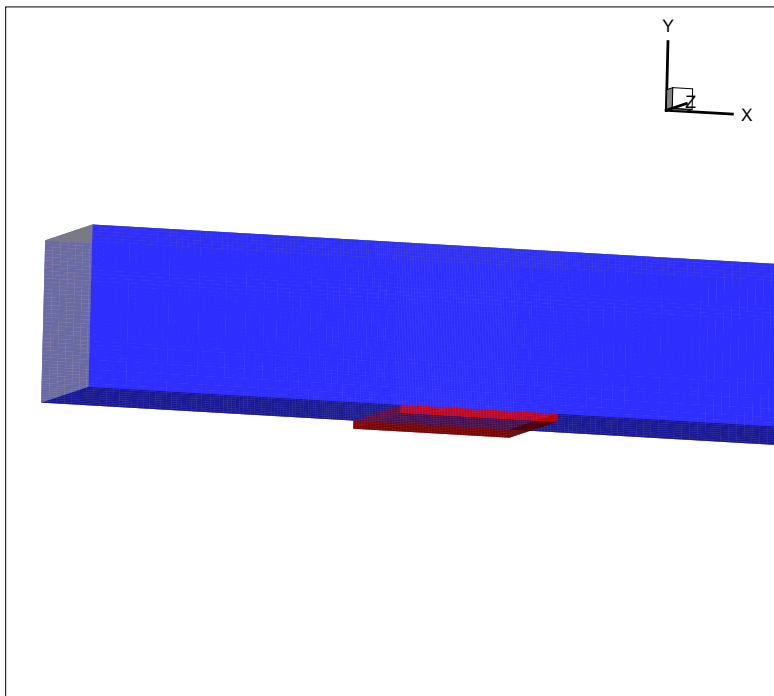
$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \mathbf{u}) + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot [\mu(\nabla \mathbf{u} + \nabla \mathbf{u}^T)] + \rho \mathbf{g} + \mathbf{F} \quad (6.4)$$

der F er ytre krefter og g er gravitasjon.

Det kan også løses en energiligning (som også deles mellom fasene), men det er ikke blitt gjort i dette arbeidet.

Overflatespenningen til sarinvæsken er inkludert i simuleringen. Den kommer inn som en kilde term i bevegelsesmengdeligningen. Overflatespenningen er satt til: $\sigma = 0.0255 \text{N/m}$ [7].

For denne simuleringen er det introdusert en grop i bunnen av sjakten, og denne gropen fylles med sarinvæske, se figur 6.3. Fordampning fra væskeoverflaten er beregnet fra damptrykket til sarin ved den aktuelle temperaturen. Kun celler ved overflaten tas med ved å sette et krav om at det kun er fordampning fra celler som ikke er fylt opp med kun en fase. Først fylles sarin til et nivå midt i første celle over gropen. Deretter vil væskeoverflaten bli påvirket av luftstrømmen, slik at dette er en akseptabel metode.



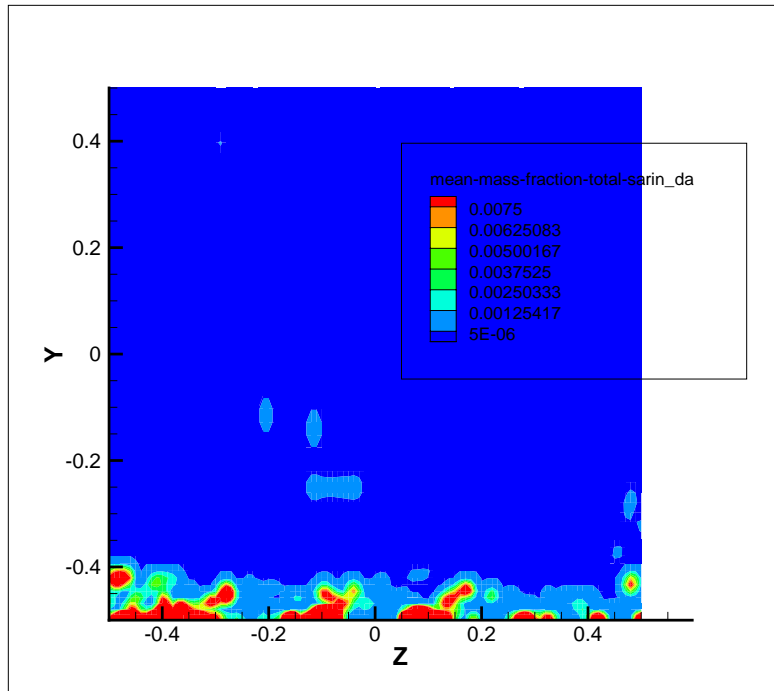
Figur 6.3: Sjakt med grop til VOF-beregningene. Gropen er den røde boksen under den blå sjakten sjakten. Sjaktes innløp er vist med farge grå. Kun en liten del av sjakten er vist; gropen strekker seg fra $x = 2$ til $x = 3$ m.)

Figur 6.4 viser den midlede massefraksjonen av sarindamp 5 cm bak gropen (yz -planet ved $x = 3,05$ m) etter 280 sekunder.

6.3 Sammenligning av fordampningsmodellene

Tabell 6.2 gir integralet av massefraksjonen til sarindamp i noen plan rett etter utslippsplanet. Variabelen x står for plasseringen av integralplanet etter sarininløpet, innløpet er i området $2 < x < 3$. I VOF-beregningene blir en svært stor del av sarinen transportert som væskedråper. Denne væsken vil være en kilde til en sekundær fordampning av sarin. Rett bak innløpet er konsentrasjonen av sarindamp beregnet med VOF betraktelig større enn konsentrasjonen beregnet med spesietransport, forskjellen blir mindre lengre vekk fra innløpet (figur 6.5).

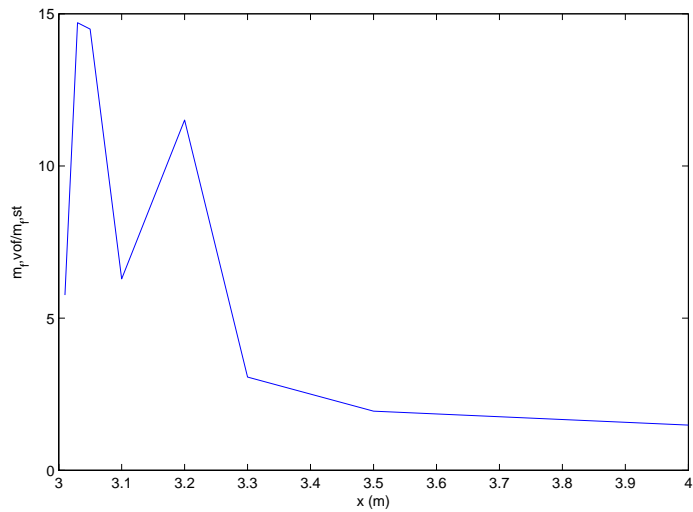
Massefraksjonen av damp og væske avtar kraftig nedover i sjakten. Væskefraksjonen vil naturlig avta på grunn av fordampning. Årsaken til at massefraksjonen av damp avtar er at sarin blir liggende på veggene i sjakten. Tabell 6.3 lister opp den midlede massefraksjonen av sarin på bunnflaten mellom normalplanene i tabell 6.2, integrert over flatearealet. Figur 6.6 viser deposisjonen av sarinvæske på bunnflaten av sjakten nedstrøms (det er den midlede massefraksjonen av sarinvæske som vises). Massefraksjonen på bunnflaten er størst ved $z \approx \pm(0,2 - 0,3)$. Dette skyldes sekundærstrømmingene som drar med seg sarin opp ved veggene og i midten av kanalen (se figur 5.1). Ved $x < 4$ m er



Figur 6.4: Den midlede massefraksjonen av sarindamp i et plan normalt på strømrretningen 5 cm bak sarindammen.

Posisjon plan x (m)	Spesietransport	VOF	
		Damp	Væske
3,01	$4,15 \cdot 10^{-5}$	$2,39 \cdot 10^{-4}$	$2,12 \cdot 10^{-2}$
3,03	$4,06 \cdot 10^{-5}$	$5,97 \cdot 10^{-4}$	$6,37 \cdot 10^{-3}$
3,05	$3,98 \cdot 10^{-5}$	$5,77 \cdot 10^{-4}$	$3,23 \cdot 10^{-3}$
3,1	$3,85 \cdot 10^{-5}$	$2,42 \cdot 10^{-4}$	$2,26 \cdot 10^{-4}$
3,2	$3,58 \cdot 10^{-5}$	$4,12 \cdot 10^{-4}$	$2,83 \cdot 10^{-4}$
3,3	$3,46 \cdot 10^{-5}$	$1,06 \cdot 10^{-4}$	$1,87 \cdot 10^{-4}$
3,5	$3,21 \cdot 10^{-5}$	$6,23 \cdot 10^{-5}$	$1,85 \cdot 10^{-4}$
4	$2,84 \cdot 10^{-5}$	$4,21 \cdot 10^{-5}$	$1,26 \cdot 10^{-4}$

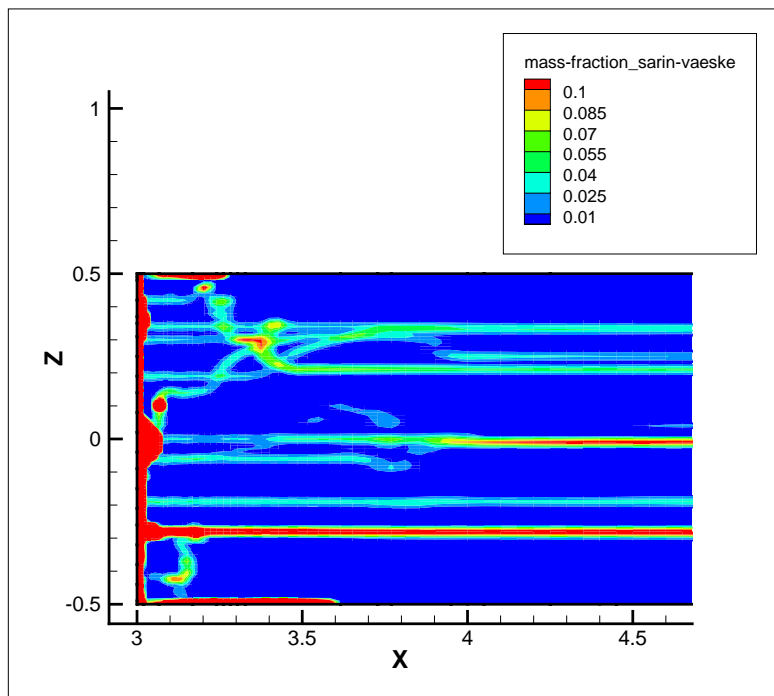
Tabell 6.2: Massefraksjonen integrert over normalplanet til middelstrømsretningen 1, 3, 5, 10, 20, 30, 50 og 100 cm bak sarininnslippet.



Figur 6.5: Integrert massefraksjon over normalplan beregnet med VOF dividert med integrert massefraksjon beregnet med spesietransport som funksjon av avstanden bak innløpet.

x (m)	Spesietransport	VOF	
		Damp	Væske
3,01 - 3,03	$1,53 \cdot 10^{-3}$	$3,39 \cdot 10^{-2}$	0,286
3,03 - 3,05	$1,55 \cdot 10^{-3}$	$4,06 \cdot 10^{-2}$	0,125
3,05 - 3,1	$1,31 \cdot 10^{-3}$	$2,31 \cdot 10^{-2}$	$4,51 \cdot 10^{-2}$
3,1 - 3,2	$1,13 \cdot 10^{-3}$	$1,34 \cdot 10^{-2}$	$2,32 \cdot 10^{-2}$
3,2 - 3,3	$9,72 \cdot 10^{-4}$	$1,92 \cdot 10^{-2}$	$2,10 \cdot 10^{-2}$
3,3 - 3,5	$8,23 \cdot 10^{-4}$	$5,29 \cdot 10^{-3}$	$1,86 \cdot 10^{-2}$
3,5 - 4	$6,25 \cdot 10^{-4}$	$3,33 \cdot 10^{-3}$	$1,02 \cdot 10^{-2}$

Tabell 6.3: Integrert massefraksjon på bunnflaten.



Figur 6.6: Deposisjon av sarinvæske på bunnflaten av sjakten nedstrøms.

det også en betydelig deposisjon midt i sjakten.

Integralet av masseoverføringsraten fra sarinvæske til sarindamp over hele beregningsdomenet ved et tilfeldig tidspunkt (det vil si ved den instantane raten og ikke den tidsmidlede raten) i VOF-modellen er: $j = 0,085 \text{ g/s}$; deler av denne raten skyldes fordampning av dråper etter selve innløpet (sammenlign med forholdet mellom volumfraksjonene av sarin i væske- og dampform i tabell 6.2). Til sammenligning blir det utregnede fordampningsraten fra Odd Busmundruds enkle modell [8] $j \approx 0,02 \text{ g/s}$. Væskeflaten blir deformert av luftstrømmen, slik at arealet blir noe større enn det opprinnelige. Dette bidrar til å gi en større fordampningsrate enn det som utregnes med Busmundruds modell (som antar en flat, upåvirket flate). I tillegg antar Busmundruds modell en laminær strøm, mens det i dette arbeidet er en turbulent strøm. Turbulent strøm har en mye sterkere miksing vertikalt enn laminær strøm, slik at dampen transporteres vekk langt raskere; dermed vil fordampningsraten være større ved en turbulent strøm sammenlignet med laminær.

VOF-modellen er en tofasemodell, mens skalartransport er en enfasemodell. Det er langt enklere å gjennomføre enfasesimuleringer enn tofasesimuleringer. Tofaseproblematikken er imidlertid bare interessant i nærområdet til væskeflaten⁵, langt fra dammen er sarin kun tilstede i form av damp som følger luftstrømmen.

En mulighet er å simulere fordampningen med VOF-modellen, og se på konsentrasjonsfeltet i et plan etter væskedammen, for eksempel i planet 5 cm etter sarininnløpet. Dette konsentrasjonsfeltet

⁵Bortsett fra ved fordampning av væskedråper og aerosoler i luft.

kan så gis som startverdier til en spredningsberegning, der spredningen av damp blir beregnet ved skalartransport.

Det kan gjennomføres VOF-beregninger for en rekke ulike trusselstoffer, og ved forskjellige forhold (vindhastighet, temperatur og så videre). Konsentrasjonsfeltene herifra kan da legges inn i en database. Ved senere beregning av spredning gjennom sjakten kan feltene fra denne databasen leses inn.

7 Oppsummering

Simuleringer og beregninger av spredning av kjemiske trusselstoffer er viktig for å kunne opprettholde en god beredskap mot faktiske hendelser, ved terrorhandlinger og ved uhell. Å ha gode og gjennomarbeidede scenarier er også nyttig for utdanning, trening og øvelser. Scenarioene gir et grunnlag for å identifisere passende beskyttelsesnivåer, og gi anbefalinger angående håndtering av slike hendelser med tanke på organisasjon, prosedyrer og utstyr, samt peke på mulige mangler.

En viktig del av modelleringskjeden for spredning av kjemiske trusselstoffer er kildemodellering, det vil si modellering av selve utslippet. Dette er nødvendig både for å beregne tidsaspektet ved utslippet korrekt og for å beskrive konsentrasjonen i luften til enhver tid; en god beskrivelse av kilden er dermed avgjørende for å beregne mulige konsekvenser av anslaget. I denne rapporten er fordampning fra en sarinvæskedam i et ventilasjonssystem undersøkt.

Simuleringer av turbulent strømning gjennom en kvadratisk sjakt er gjennomført med enkle, raske modeller (RANS), og en omstendig, tidkrevende modell (LES). Resultatene er sammenlignet med publiserte data fra en DNS-beregning av tilsvarende strømningsfelt. Resultatene viser at de enkle RANS-modellene gir en god beskrivelse av middelhastighetsfeltet. De enkle to-lignings RANS-modellene synes ikke å være vesentlig dårligere enn den mer tidkrevende RSM-modellen for dette. LES synes imidlertid å ha større likhet med formen på hastighetskurvene fra DNS enn RANS-modellene, men middelhastighetene beregnet fra LES avviker en del fra resultatene fra direkte numeriske simuleringer. RANS-modellene, med unntak av RSM, kan imidlertid ikke løse opp de turbulente sekundærstrømningene som oppstår ved strømning i en kvadratisk sjakt. Sekundærstrømningene har innvirkning på miksingen i kanalen, og kan dermed ha betydning for spredningsberegninger. LES-simuleringer med Fluent har vist seg å være problematisk i mange tilfeller, hvilket kan skyldes lite egnede numeriske algoritmer.

Det er utprøvd to metoder for å beregne fordampning. I den ene, spesietransport, blir ikke vekselvirkningen mellom væskeflaten og luftstrømmen tatt hensyn til. Resultatene herfra er nokså like for RANS- og LES-hastighetsfeltene. I den andre metoden, 'volume-of-fluid', tas det hensyn til vekselvirkningen mellom væskeflaten og luftstrømmen. Dette har en stor innvirkning på fordampningsraten. Resultatene viser også at sekundærfordampning på grunn av væskedeposisjon vil kunne spille en viktig rolle for spredning i en ventilasjonssjakt; dette har stor innvirkning på tidsforløpet til spredningsprosessen, og på konsentrasjonen i luften til enhver tid.

Det er mer krevende å gjennomføre tofaseberegninger som VOF, enn enfaseberegninger som spesietransport. Ved spredningsberegninger er tofaseproblematikken kun aktuell der både væske- og dampfase av trusselstoffet er til stede, det vil si i området ved selve dammen (eller dråpen). En mulighet vil være å bruke VOF til å modellere fordampningen, for å bruke det resulterende konsentrasjonsfeltet til å gjennomføre videre beregninger med den enklere spesietransportmodellen.

Resultatene fra arbeidet kan oppsummeres som følger:

- Fordampningsraten beregnet med VOF-modellen er omtrent $j \approx 0.085$ g/s. Dette er fire ganger høyere enn tilsvarende fordampningsrate beregnet med Busmundruds enkle modell, $j \approx 0.02$ g/s. Årsaken til denne forskjellen er at VOF-modellen tar hensyn til vekselvirkningen mellom væskeflaten og luftstrømmen og at det her er en turbulent luftstrøm som drar med seg dampen. Busmundruds modell antar en laminær strøm og tar ikke hensyn til vekselvirkningen mellom luftstrømmen og væskeflaten. Turbulent strømming har en mye kraftigere vertikal miksing, og drar med seg damp fra området over væskeflaten langt mer effektivt, og dette bidrar til at fordampningsraten øker vesentlig.
- Raske og enkle RANS-modeller synes å gi en brukbar prediksjon av middelhastighetsfeltene i en kvadratisk sjakt. Den mer tidkrevende LES-modellen synes ikke å gi vesentlig bedre samsvar med DNS-beregningene i dette tilfellet⁶.
- Den viktige turbulente sekundærstrømningen kan kun oppløses ved LES-modellen samt den mest tidkrevende RANS-modellen: RSM.
- Ved passiv transport av sarindamp er det svært lite forskjell i mengdene og fluksen målt med LES- og RANS-modellene. Dette er ikke uventet da middelhastighetsfeltene også er nokså like. Når det gjelder fordelingen i rommet er det imidlertid noe forskjell på RANS- og LES-modellene.
- Simuleringene av luftstrømmen og væsken med tofasemodellen VOF, viser at vekselvirkningen mellom væskeflaten og luftstrømmen har stor betydning på fordampningsraten. Dette skyldes delvis at væskeflaten blir deformert av luftstrømmen over.
- En mulighet vil være å modellere fordampningen og fordelingen av damp rett etter dammen med en tofasemodell, mens videre spredning kan utføres med enklere enfasemodeller, der dampen transporteres passivt av luftstrømmen.

8 Videre arbeid

Dette arbeidet vil bli videreført i FFI-prosjekt 1149: 'Masseødeleggelsesvåpen -trussel og beredskap II'. Det vil være av interesse å gjennomføre en parameterstudie. Dette inkluderer å se på ulike

⁶Konklusjonen her gjelder beregninger med disse modellene i Fluent, ikke nødvendigvis modellene i seg selv.

kjemiske trusselstoffer, samt ulike forhold når det gjelder strømmingen (temperatur og temperaturgradienter, vindhastigheter og lignende). Det bør da gjøres et representativt utvalg som spenner fra flyktige stoffer, som typiske giftige industrikjemikalier, til varige stoffer med høyt kokepunkt, som for eksempel nerve- og hudstridsmidler. Konsentrasjonsfeltene herifra må da normaliseres med lengde-, tids- og hastighetsskalaer som beskriver strømmingen, slik at resultatene blir almenyldige, og ikke spesifikke for hvert enkelt tilfelle.

Resultatene kan legges inn i en database, som senere kan brukes til å gi gode inputdata til tilsvarende spredningsberegninger for en rekke kjemiske trusselstoffer. Det kan dermed senere raskt gjøres beregninger over spredning og konsekvenser. Det er stor interesse for denne type data i NATO-gruppen 'Challenge Sub-group' (CSG). En slik database vil bli meget godt mottatt og benyttet i NATO-gruppens videre arbeid innen vurdering av ulike kjemiske trusler. CSGs arbeid blir igjen benyttet av andre NATO-grupper under 'Joint Capability Group CBRN', slik som blant andre 'Physical Protection Sub-group' og 'Hazard Management Sub-group'.

Referanser

- [1] NATO/RTO/SAS-061: Defence against CBRN-attacks in the changing NATO strategic environment, submitted to NATO/RTO for publication, 2008
- [2] T. Gjesdal, Oversikt over modeller for spredningssimulering, FFI/NOTAT-2003/00581, Forsvarets forskningsinstitutt, 2003
- [3] A. Huser, S. Biringen, Direct numerical simulation of turbulent flow in a square duct, *J. Fluid Mech.* **257**, 65-95, 1993
- [4] Advisory Group for Aerospace Research and Development, A Selection of Test Cases for the validation of Large-Eddy Simulations of Turbulent Flows, AGARD-AR-345, NATO, 1998
- [5] F. M. White, *Viscous fluid flow*, 3rd ed., McGraw-Hill, NY, USA, ISBN: 978-0-07-240231-5, 2006
- [6] S. B. Pope, *Turbulent flows*, Cambridge University press, UK, ISBN: 0-521-59886-9, 2000
- [7] C. A. van Beest, A. R. T. Hin, *Toxicity and Physical Property Standards for Modelling Chemical Warfare and Defence*, TNO-PML, Rijswijk, Nederland, 1995
- [8] O. Busmundrud, Fordaming fra overflater og dråper, FFI/RAPPORT-2005/03538, Forsvarets forskningsinstitutt, 2005