Validering av FDS för simulering av mindre vätgasläckage inomhus

Emil Alavei Erik Andersson Avdelningen för BRANDTEKNIK LTH | LUNDS UNIVERSITET



Validering av FDS för simulering av mindre vätgasläckage inomhus

Emil Alavei & Erik Andersson

Lund 2023

Titel: Validering av FDS för simulering av mindre vätgasläckage inomhus Titel: Validation of FDS simulation of minor indoor hydrogen leakage

Författare/Authors: Emil Alavei och Erik Andersson Report 5692 ISRN: LUTVDG/TVBB--5692--SE

Antal sidor/Number of pages: 91 Illustrationer/Illustrations: If not specified, all illustrations belong to the author.

Sökord/Keywords: Vätgas, helium, ventilation, CFD, FDS

Abstract

The prevailing global climate transition is incentivized to occur in a short period of time. Hydrogen is considered a pivotal element towards a renewable energy system. However, the physical and chemical properties of hydrogen give rise to the risk of fire and explosion. This risk must be evaluated as hydrogen becomes increasingly integrated into society. This paper aims to investigate whether the Computational Fluid Dynamics (CFD) program FDS can be utilized to dimension the natural ventilation of minor hydrogen leaks. Experimental data was generated to provide validation, which was subsequently compared to simulated data produced by FDS.

The results demonstrate that the Computational Fluid Dynamics (CFD) program FDS is capable of dimensioning natural ventilation for emissions with larger opening sizes, resulting in lower velocities. Under the applied ventilation conditions, FDS tends to overestimate the concentration level, which appears to act as a safety margin. Additionally, the results establish that the precision in concentration measurements produced by FDS increases with larger ventilation areas. For emissions with smaller opening sizes that generate higher velocities, the FDS model encounters difficulties in computing representative values.

© Copyright: Division of Fire Safety Engineering, Faculty of Engineering, Lund University, Lund 2023.

Avdelningen för Brandteknik, Lunds tekniska högskola, Lunds universitet, Lund 2023.

Brandteknik Lunds tekniska högskola Lunds universitet Box 118 221 00 Lund

www.brand.lth.se Telefon: 046 - 222 73 60 Division of Fire Safety Engineering Faculty of Engineering Lund University P.O. Box 118 SE-221 00 Lund Sweden

www.brand.lth.se Telephone: +46 46 222 73 60

Förord

Detta examensarbete utfördes under höst- och vårterminen 2022/2023 på avdelningen för Brandteknik vid Lunds Tekniska Högskola, för att avsluta civilingenjörsprogrammet inom riskhantering. Arbetet motsvarar 30 högskolepoäng och skrevs av Emil Alavei och Erik Andersson.

Vi vill rikta ett stort tack till Marcus Runefors, Universitetsadjunkt vid brandtekniska avdelningen på Lunds Tekniska Högskola för hans kunskap, engagemang och vägledningen genom hela arbetet. Tack för att ha givit oss möjligheten att få forska inom ett område där både vi och omvärlden kan dra nytta.

Vidare tackar vi Jonathan Wahlqvist som har varit stöttande i den del av arbetet där CFD stod i centrum. Utan stöttningen från en expert hade genomförandet av simuleringarna varit betydligt svårare att genomföra.

Lund, Mars 2023 Emil Hamnes Alavei & Erik Andersson

Sammanfattning

Vätgasen kan anses vara nyckeln till ett förnybart energisystem och har fått ett ökande intresse genom dess möjlighet att bidra till klimatneutraliteten och dess tillämpningsområden. Vätgasen har incitament att implementeras i samhället under relativt kort tid för att främja en klimatneutral och hållbar energiförsörjning. Dock ger vätgasens fysikaliska och kemiska egenskaper upphov till brand- och explosionsrisker, vilket behöver beaktas i takt som att vätgasen blir allt mer samhällsnära. Rapporten behandlar ventilationsproblematiken kopplat till mindre läckage av vätgas och ämnar till att ge svar på följande frågeställning:

Kan FDS användas för att beräkna nödvändig area för naturlig ventilation av mindre vätgasläckage?

FDS är ett relativt outforskat CFD-program kopplat till ventilationsproblematiken av vätgasutsläpp. Grundförutsättningar för analysen baseras på fyra fall med stigande komplexitet och verklighetstrohet. Fyra del fall bedömdes vara en adekvat mängd för att kunna erhålla tillräckligt med valideringsdata för att i sin tur besvara arbetets frågeställning. Anledningen till att fallen hade en stigande komplexitet och verklighetstrohet var om FDS inte klarade av att ge korrekta resultat, så underlättas det att identifiera var modellen brister och ge möjligheter för kalibrering.

Till validering av FDS-modellen krävdes valideringsdata. För att uppnå tillförlitliga valideringsdata behövde försöksuppställningar till experiment byggas upp som utfördes i brandlabbet på Lunds Universitet. Den precisa försöksuppställningen varierar för fallen, vilket bestämdes utifrån syftet för respektive fall. Försöksuppställningen limiterades i utformning på grund av arbetets avgränsningar och begräsningar samt de praktiska begräsningarna som fanns med simulering av CFD-modeller i FDS. En försöksserie för fallen skapades, där ventilationsarean varierades för de två mer komplexa fallen. Vidare är hanteringen av vätgas begränsad på institutionen på grund av dess brandfarlighet och har i detta arbete substituerats mot helium.

Uppbyggnaden av FDS-modellen grundade sig i att efterlikna de utförda experimenten för att ge representativa och korrekta resultat. De slutliga fallet var av hög komplexitet och det mest verklighetstrogna fallet i arbetet. Förutsättningarna för detta fall ansågs kräva en stor beräkningskraft. För att göra fallet hanterbart skapades en teoretisk anpassning vilket möjliggjorde simuleringar på kortare tid och med mindre beräkningskraft. Anpassningen har tillämpats i liknande studier på grund av samma skäl och påvisat adekvata resultat.

Resultaten påvisar att CFD programmet FDS kan användas som ett verktyg till att dimensionera naturlig ventilation för vätgasläckage som karaktäriseras av en större öppning vilket resulterar i lägre hastigheter. För de valda förutsättningarna i ventilation tenderar FDS överskatta koncentrationsnivåerna, vilket kan verka som en säkerhetsmarginal som kan vara fördelaktigt vid dimensionering av ventilation. Ytterligare påvisar resultaten att precisionen förbättras med ökad ventilationsarea. För utsläpp som karaktäriseras med en mindre utsläppsöppning, som resulterar i högre hastigheter, har FDS-modellen svårigheter att beräkna representativa koncentrationsvärden. De initiala förutsättningarna är grundorsaken till att FDS-modellen inte visar representativa värden för dessa typer av utsläpp.

Summary

Hydrogen can be considered the key to a renewable energy system and has received increasing interest due to its potential to contribute to climate neutrality and its applications. Hydrogen has incentives to be implemented in society in a relatively short time to promote a climate-neutral and sustainable energy supply. However, the physical and chemical properties of hydrogen give rise to fire and explosion risks, which need to be considered as hydrogen becomes more integrated into society. This paper addresses the ventilation issues related to minor hydrogen leaks and aims to answer the following question:

Can FDS be used to calculate the necessary area for natural ventilation of minor hydrogen leaks?

FDS is a relatively unexplored CFD program related to the ventilation issues of hydrogen emissions. The analysis is based on four cases with increasing complexity and realism. Four sub-cases were considered adequate in order to obtain enough validation data to answer the research question. The reason for the cases having increasing complexity and realism was if FDS could not provide accurate results, it would facilitate in identifying model deficiencies and provide opportunities for calibration.

To validate the FDS model, validation data was required. To obtain reliable validation data, experimental setups needed to be built, which were performed in the fire lab at Lund University. The precise experimental setup varied for each case, which was determined based on the purpose of each case. The experimental setup was limited in design due to this paper's limitations and practical constraints of simulating CFD models in FDS. A series of experiments for the cases were created, where the ventilation area was varied for the two more complex cases. Furthermore, the handling of hydrogen is limited at the institution due to its flammability and has been substituted with helium in this paper.

The construction of the FDS model was based on replicating the performed experiments to provide representative and accurate results. The final case was of high complexity and the most realistic case in the paper. The conditions for this case were considered to require a large computational power. To make the case manageable, a theoretical adaptation was created, which enabled simulations to be conducted in a shorter time and with less computational power. The adaptation has been applied in similar studies and has demonstrated adequate results.

The results demonstrate that the Computational Fluid Dynamics (CFD) program FDS can be used as a tool for dimensioning natural ventilation for hydrogen leakage characterized by larger openings resulting in lower velocities. For the chosen ventilation conditions, FDS tends to overestimate the concentration levels, which can act as a safety margin and be advantageous for ventilation design. Additionally, the results show that the precision improves with increased ventilation area. For emissions characterized by a smaller opening, resulting in higher velocities, the FDS model encounters difficulties in computing representative concentration values. The initial conditions are the main cause of the FDS model not showing representative values for these types of emissions.

Akronymer

ATEX	Explosionsfarlig miljö
CFD	Computational Fluid Dynamics
CFL	The Courant-Friedrichs-Lewy
CO ₂	Koldioxid
EIA	Energy Information Agency
EJ	Exa Joule
FDS	Fire Dynamics Simulator
GW	Gigawatt
H_2	Vätgas
Не	Helium
HVAC	Heating Ventilation and Air Conditioning
IEA	International Energy Agency
IVA	Ingenjörsvetenskapsakademin
LES	Large-eddy Simulation
LFL	Lower Flammability Limit
MSB	Myndigheten för samhällsskydd och beredskap
Mt	Megaton
SCCM	Standard Cubic Centimeters Per Minute
SLPM	Standard Litre Per Minute
USD	Amerikansk Dollar

Definitioner

Buoyant	Hur benägen en fluid är att stiga i luft
Mesh	Mesh hänvisar till ett rutnät eller nätverket av celler som används för att diskretisera beräkningsdomänen i FDS
Meshkluster	Meshkluster hänvisar till en sammansättning av flera rutnät eller nätverk
Steady-state	Ett oförändrat tillstånd i en fysikalisk process
Stigkraftsdominerad	När gravitationskraften är den dominerande kraften som påverkar en fluid massa
Tröghetsdominerad	När fluida krafter är den dominerande kraften som påverkar en fluid massa

Nomenklatur

Α	Area för utsläppsöppningen	m ²
α	Vinkel för heliumplym	0
Cax	Koncentration andel av ett ämne vid ett visst avstånd från utsläppskällan	-
C _N	Koncentration andel av ett ämne vid utsläppskällans öppning	-
C _p	Specifika värmekapaciteten under konstant tryck	kJ/(kg*K)
Cv	Specifika värmekapaciteten under en kontant volym	kJ/(kg*K)
c	Ljudets hastighet i ett medium	m/s
D	Diametern för utsläppsöppningen	m
D _{eq}	Den ekvivalenta diametern	m
$\mathbf{D}_{\mathbf{N}}$	Diametern vid den ursprungliga utsläppsöppningen	m
Fr	Froudes tal	-
g	Tyngdaccelerationen	m/s^2
M_{He}	Molmassa för helium	g/mol
M_{Luft}	Molmassa för luft	g/mol
Μ	Massa	kg
'n	Massflöde ur utsläppsöppningen för Fall 1,2 och 3	kg/s
\dot{m}_N	Massflöde ur utsläppsöppningen för Fall 4	kg/s
$\dot{m}_{ m eq}$	Massflödet vid den ekvivalenta öppningen	kg/s
Ma	Machtal	-
n	Substansmängd	mol
L	Jetens utbredning vid avståndet x	m
Р	Tryck	kPa
ρ	Densitet	kg/m ³
$ ho_{ m N}$	Densiteten vid utsläppskällans öppning	kg/m ³
$ ho_{ m S}$	Densiteten i omgivningen	kg/m ³
$ ho_{ m eq}$	Densiteten vid den ekvivalenta öppningen	kg/m ³

R	Allmänna gaskonstanten = 8314	kJ/(K*mol)
Т	Temperatur	K eller °C
δt	Tidsteget i simuleringsprogrammet FDS	S
V	Utsläppshastighet	m/s
<i>॑</i>	Volymflöde	m ³ /s
u	Gasenshastighet vid ett visst avstånd från utsläppskällan	m/s
u	Beskriver hastigheterna i simuleringen vid uträkningen av tidssteget	S
X	Avståndet mellan utsläppskällans öppning den ekvivalenta öppningen	m
δx	Beskriver cellstorleken	m
x_{He}	Massandelen helium i en gasblandning	-
x _{Luft}	Massandelen luft i en gasblandning	-
γ	Specifika värmekonstanten	-

Innehållsförteckning

1	Inle	dning	1		
	1.1	Vätgas, lagring & risker	1		
	1.2	Syfte, mål och frågeställningar	2		
	1.3	Avgränsningar och begräsningar	2		
	1.3.1	1 Modell för experiment och FDS	2		
	1.3.2	2 Ekonomiska förutsättningar	3		
	1.4	Disposition	3		
2	Bak	grund	4		
	2.1	Den globala energiförbrukningen	4		
	2.2	Användningsområden för vätgas	5		
	2.3	Risker med vätgas	7		
	2.4	Vätgas i samhället	7		
3	Teo	ri	Э		
	3.1	Vätgas	Э		
	3.2	Helium	9		
	3.3	Gasens spridning i ett utrymme	C		
	3.4	Jetutsläpp1	1		
	3.5	Ventilation			
	3.6	Simuleringsprogram	3		
	3.7	Simulering av jetutsläpp i FDS	4		
4	Met	od1	9		
	4.1	Grundförutsättningar för analys1	9		
	4.2	Försöksuppställning (Experiment)	3		
	4.2.1	1 Utrustning 23	3		
	4.2.2	2 Utsläppet2	5		
	4.2.3	3 Mätteknik	6		
	4.2.4	4 Geometri och ventilation (Lådan) 27	7		
	4.2.5	5 Försöksserie	9		
	4.3	Uppställning av modellen i FDS	2		
	4.3.1	1 LUNARC och Aurora	2		
	4.3.2	2 Utsläppet	2		
	4.3.3	3 Geometri och ventilation	4		
	4.3.4	4 Mesh	6		
	4.3.5	5 Utdata	9		
5	Res	ultat	2		

	5.1	Fall 1 – Resultat från FDS jämfört med handberäkningar 42
	5.2	Fall 2 – Resultat från FDS jämfört med experiment 42
	5.3	Fall 3 – Resultat från FDS jämfört med experiment
	5.4	Fall 4 - Resultat från FDS jämfört med experiment
6	Disł	sussion
	6.1	Fall 1 – Jetutsläpp utan hinder
	6.2	Fall 2 – Jetutsläpp med hinder
	6.3	Fall 3 – Jetutsläpp med stor öppning i utrymme
	6.4	Fall 4 – Jetutsläpp med liten öppning i utrymme 49
	6.5	Helium i stället för vätgas
	6.6	Metoddiskussion och felkällor
7	Slut	satser
8	Vida	are studier
9	Refe	erenseri
Bi	laga A	Indata FDS – utsläppiv
Bi	laga B	Indata FDS - meshvii
Bi	laga C	Mät- och simuleringsresultat
Bi	laga D	Experimentplan och riskanalysxxi
Bi	laga E	HVAC – En lösningxvv

1 Inledning

1.1 Vätgas, lagring & risker

Vätgasen kan anses vara nyckeln till ett förnybart energisystem och har fått ett ökande intresse genom dess möjlighet att bidra till klimatneutraliteten och dess tillämpningsområden. Enligt IEA (2022) var behovet av vätgas 91 Mt år 2021 och därmed återhämtat sig från de behovsnivåer som identifierats innan pandemin (Covid-19). Anledningen till det ökade behovet är de möjligheter som finns att producera vätgas från klimatsmarta alternativ som sol-, vind- och vattenkraft och en rad olika tillämpningsområden. Vätgas har möjligheten att användas till olika typer av processindustrier, lagring av elektricitet och drivmedelssektorn (IEA, 2022). Enligt IEA (2022) behöver behovet av vätgas vara cirka 200 Mt år 2030 för att vara i linje med målen för "Net Zero by 2050" som har ambitionen om att vara uppfyllt år 2050 (IEA, 2022).

Vätgas som lagringsalternativ har en stor potential att vara framtidens lösning till lagringsproblematiken och inför den klimatomställningen som krävs. Enligt Akal et al. (2020) så är tillgången till vätgas i princip obegränsad, skonsam mot miljön och har möjligheter att bli kostnadseffektiv. IEA (2022) hävdar att kostnaden för elektrolysprocessen som krävs för produceringen av förnybar vätgas har möjligheten att minska runt 70% till 2030 i regioner där det finns bra förutsättningar för förnybara energialternativ, vilket styrker ovanstående påstående om kostnadseffektiviteten. Den globala energikrisen som upplevs triggades av kriget mellan Ryssland och Ukraina och innebär en minskad export av fossila bränslen från Ryssland (IEA, 2022). Detta driver i sin tur arbetet mot omställningen till de förnybara energialternativen, för en mer flexibel och robust energiproduktion. Sammantaget finns det flera incitament vilket kommer höja efterfrågan på vätgas från förnybara källor.

Den förhöjda efterfrågan på vätgas innebär att behovet på lagringskapaciteten för gasen ökar. Det finns problematik kopplat till lagring och hantering av vätgas, exempelvis dess breda brännbarhetsområde samt att trycken vid lagring som kan uppgå mot 1000 bar, med hänsyn till gasen densitet (MSB, 2022). Detta innebär att traditionella säkerhetssystem och kontrollfunktioner inte nödvändigtvis är praktiskt tillämpbara för hantering och lagring av vätgasen på grund av dess skillnader i fysikaliska egenskaper gentemot andra brandfarliga gaser. Säkerhetssystemen bör därmed hanteras i takt med att vätgasen blir alltmer populär och samhällsnära. Vätgasen har en liten molekylstorlek med en diameter på 0,41 nm, vilket gör det relativt svårt att motverka läckage och därmed anses som en större problematik för vätgasen än för de traditionella energigaserna (MSB, 2022; Wheeler & Sears, 2015). Därmed finns det uppenbara brand- och explosionsrisker för lagring och hantering av vätgas, speciellt eftersom brännbarhetsområdet är sträcker sig mellan 4–77%, vilket innebär att det finns ett brett intervall av koncentration som kan leda till explosiva miljöer (Brzezińska, 2021). Vidare har vätgasen fysiska och kemiska egenskaper som gör att den är färg-, lukt- och smaklös, vilket försvårare detektion av gasen. Därför krävs det ett robust säkerhetssystem som kan hantera läckage av vätgas om det ska kunna slå igenom lagringsalternativ till förnybara energikällor (Liu, 2012).

CFD tillåter ingenjörer visualisera fysikaliska fenomen i komplexa miljöer, vilket ger dem förutsättningar att optimera. FDS används inom det brandtekniska området, främst för validering av brandtekniska parametrar som sikt, temperatur. Kännedomen kring programmet är högt inom området för brand och risk vilka arbeta med vätgasproblematik. FDS bygger på ekvationer vilket innebär att programmet rent teoretiskt kan appliceras för att mäta koncentrationer nivåer av diverse gaser. FDS har inte validerats för spridning av vätgas från jetströmmar och det finns ett behov av att identifiera applicerbara program med enkel användarvänlighet för att hantera riskerna som uppstår med ökad vätgasanvändning.

1.2 Syfte, mål och frågeställningar

Syftet med arbetet är att undersöka om ventilationen för vätgas kan dimensioneras med hjälp av CFDprogrammet FDS. Det vill säga om FDS har förmågan att fånga upp rörelser och koncentrationer vid mindre läckage av vätgas. Arbetet ämnar undersöka hur väl FDS klarar denna typ av utsläpp och om det finns begränsningar som behöver beaktas. Studien ämnar stödja utvecklingen kring implementeringen av vätgas och i sin tur främja klimatsmarta och hållbara energilösningar.

Målet med arbetet är att undersöka om FDS kan prediktera vätgaskoncentrationer i ventilerade inneslutningar, vilket är en central komponent i ett robust säkerhetssystem för lagring av vätgas. För att uppnå målet ska följande frågeställning besvaras.

I) Kan FDS användas för att beräkna nödvändig area för naturlig ventilation av mindre vätgasläckage?

Arbetet förväntas bidra till kunskapsutvecklingen kring hur eventuella läckage av vätgas kan hanteras med hjälp av CFD-program. Förhoppningsvis kommer arbetet erhålla en helt eller delvis validerad FDS-modell genom teoretiska beräkningar och experiment. Informationen som samlas in från arbetet förväntas kunna stödja kunskapsutvecklingen kring ventilering av vätgas.

1.3 Avgränsningar och begräsningar

I avsnittet nedan beskrivs de avgränsningar och begräsningar som satts för arbetet.

1.3.1 Modell för experiment och FDS

FDS-modellen har som avsikt att valideras för tillämpning av dimensionering av ventilation. För att validera CFD-modellen som byggs upp i FDS kommer experiment att behöva utföras. Simuleringsmodellen behövde beakta de begräsningar i förutsättningar som fanns för experimentdelen av arbetet. Exempelvis hade det utrymme som inneslöt delar av experimenten en viss takhöjd som begränsade hur högt mätpunkter kunde placeras. De munstycke som användes i experimenten blev dimensionerande för förutsättningarna i FDS. Detta påverkade i sin tur hur teorin kring jetutsläpp anpassades. De bästa tänkbara förutsättningarna hade varit ett par olika munstycke så att även teorin kring jetutsläpp hade kunnat valideras. Om utrymmet hade haft högre taknivå så hade de eventuella hastigheterna från jetutsläppet varit lägre när de nådde taket och därmed påverkat spridningen i utrymmet. Men för frågeställningens syfte med avseende på validering ansågs detta inte som ett hinder för att besvara arbetets frågeställning.

1.3.2 Ekonomiska förutsättningar

Då en del av arbetet innefattar experiment, kommer kostnader för material att tillkomma. Dels material för själva utrymmet, dels detektorer för att möjliga koncentrationsmätningar på helium. Heliumdetektorer är dyra och ekonomiska resurser begränsade därför antalet detektorer till fem trots att det kunde tänkas vara intressant att validera CFD-modellen mot fler mätpunkter.

1.4 Disposition

Rapporten är ordnad i tidsföljd efter i vilken ordning författarna arbetade med frågeställningen där den slutligen diskuteras och besvaras i Kapitel 6: "Diskussion" och Kapital 7: "Slutsats".

Kapitel 1: Inledning till arbetet, syfte, mål och frågeställning presenteras. Samt avgränsningar, begräsningar och metod.

Kapitel 2: Bakgrund vilket ämnar på att ge läsaren ett sammanhang för varför arbetets frågeställning har relevans och är i behov av ytterligare forskning.

Kapital 3: All nödvändig information, kunskap och teori presenteras som har legat till grund för antaganden till beräkningar och gett förutsättningar att arbeta med uppbyggnaden av en simuleringsmodell samt experimentmodell.

Kapital 4: Presenteras arbetets metod. Grundförutsättningar för valideringsarbetet, försöksuppställning och indata till FDS presenteras.

Kapital 5: Sammanställning av de resultat som har utvunnits från simuleringar och experiment.

Kapital 6: Arbetets diskussion.

Kapitel 7: Arbetets slutsats vilket besvarar frågeställningen.

Kapital 8: Vidare studier.

2 Bakgrund

I detta kapitel presenteras nödvändig information för att förstå arbetets sammanhang och efterföljande utredning.

2.1 Den globala energiförbrukningen

För att kunna reducera mängden CO₂ utsläpp och föroreningar måste världen övergå till energi som kommer från källor utan kol, det vill säga exempelvis kärnkraft och förnybara energikällor. Nedan beskrivs människans historiska användning av energi, samt vilka faktorer som påverkar och vad som kan förväntas i framtiden.

Historisk energianvändning

Efterfrågan på energi har aldrig varit högre än vad den är idag. I år jämfört med 1975 har energiförbrukningen fördubblats från 200 till ca 400 EJ (IEA, 2021). Det finns många faktorer som påverkar energitrenden, exempelvis är befolkningsökningen en stor bidragande faktor. Från 1975 till 2021 har befolkningen i princip fördubblats från 4 till 8 miljarder, vilket visar på att energiförbrukning och befolkningsökningen har en viss korrelation (IEA, 2021). Indirekta konsekvenser av en ökad befolkningsmängd är att mer energi används till jordbrukssektorn samt en ökad urbanisering vilket också visat sig vara faktorer som påverkar energiförbrukningen enligt EIA (2019). EIA (2019) hävdar även att det finns en rad andra faktorer som också har bidragit till den ökande energikonsumtionen. Exempelvis ny avancerad teknologi som har utvecklats och mer avancerade sätt att utvinna fossila bränslen, vilka dessutom är kostnadseffektiva som i sin tur leder till att mer energi konsumeras (EIA, 2019). Wang et al. (2017) beskriver om hur rikedom leder till mer energianvändning och att det finns en tydlig korrelation mellan dessa faktorer. Fattigdomen minskar i stora delar av världen, vilket är en bidragande faktor till den ökade energiförbrukningen (Wang et al., 2017).



Figur 1. Beskriver världens totala energiförbrukning år 1975 och 2020 fördelat på energikällor (IEA, 2021)

Framtida energiförbrukningen

Enligt FN (2022) förväntas den globala populationen uppgå till 10,4 miljarder år 2100 vilket är en ökning med 30 procent från de nuvarande 8 miljarderna, mer mat måste produceras, fler hus försörjas och mer avancerad teknologi utvecklas som i sin tur leder till en ökad efterfråga på energi. En fortsatt urbaniseringen förväntas, speciellt då de ökade medeltemperaturerna har orsakat brist på rent dricksvatten i många delar av världen, vilket också har och kommer förbli en bidragande faktor till de ökade energinivåerna som väntas. Det går inte att bortse från de teknologiska avancemangen som sker, speciellt inom energisektorn med avseende på kostandeffektiviteten och för de förnybara energikällorna. Det antyder på att en förhöjd efterfråga på energi kommer att kunna mötas med ett mer klimathållbart tillvägagångssätt. En av de absolut kritiska delarna för ett klimathållbarhet tillvägagångsätt är att tillämpa vätgasen (IEA, 2021).

Mer förnybar el – ren energi

Ett rekordhögt antal länder binder löfte till att följa de riktlinjer som finns gällande klimatomställningen vilket innebär att länder inte ska förorena världen mer än de bidrar till den. IEA (2021) hävdar att energisektorn ansvarar för cirka 3/4 av det totala växthusgaserna. I rapporten skriven av IEA "Net Zero by 2050: a Roadmap for the Global Energy Sector", ämnar de främja hållbara energialternativ. I rapporten beskrivs det också hur implementeringen ska se ut för att upprätthålla en långsiktig och hållbar ekonomi inom energisektorn. Med adekvat stöd från beslutsfattande organ i respektive länder, innebär detta att marknaden för förnybara energialternativ kommer att öka och dessutom ta över marknadsandelar från de fossilbaserade energialternativen (IEA, 2021). För att vara i linje med IEA:s (2021) scenarier behöver investeringar i förnybara energikällor öka drastiskt. IEA (2021) hävdar att sådana investeringar hade uppgått mot 1300 miljarder USD, vilket är en tredubbling från de nuvarande 390 miljarderna som investeras idag. En kapacitetsutökning av de förnybara energikällorna kommer kräva ett större och mer robust infrastruktursystem för vätgasen som en energibärare, vilket har förmågan att lagra överskottsenergi.

2.2 Användningsområden för vätgas

Användningsområdena för vätgas är breda och relativt outforskade. Incitamenten som nationer, verksamheter och individer ställs inför gällande klimatomställningen medför att vätgasens tillämpningar och användningsområden utforskas. Det som gör gasen extra intressant och användbar är dess restprodukt som endast är vatten, och därmed inte skadligt för miljön eller andra levande organismer.

Lagring av vätgas

Som beskrivet ovan växer incitamenten för de förnybara energikällorna, speciellt vind- och solenergi. Något som båda dessa energikällor har gemensamt är att de är beroende av väderlekar, det vill säga att de inte är direkt styrda av efterfrågan på el. En flexibilitetslösnings som har fått framgång på senaste tiden är vätgasen som kan användas för att lagra överskottsenergi genom en elektrolysprocess. IEA (2021) beskriver hur produktionskapaciteten för elektrolyser dubblades från 4 – 8 GW under 2020, och att förverkligandet av pågående pilotprojekt skulle leda till en produktion mellan 124–240 GW till år 2030. För förnybara energikällor, som förlitar sig på förhållanden snarare än efterfrågan, behövs en robust flexibilitetslösning där det finns möjlighet till att lagra överskottsenergi. Vilket resulterar i att förnybara energikällor blir mer tillförlitliga. Risken blir annars att en del av energin som produceras inte kommer till användning, vilket minskar på den potentiella kostnadseffektiviteten och i sin tur det eventuella genomslag dessa energialternativ kan medföra med hänsyn till miljön.

Vätgas inom transportsektorn

Naturskyddsföreningen (2021) hävdar att 13 % av alla växthusgaser kommer från fossildrivna fordonen inom transportsektorn. Fulton (2022) beskriver hur övergången till vätgasdrivna fordon har en positiv inverkan på miljön i form av minskade utsläpp. Författaren nämner att det redan idag finns utvecklade och tillgängliga bränsleceller för små-, medel och stora fordon och att tillgången på dem kommer att öka i samband med att infrastrukturen för vätgasstationer ökar. Fulton (2022) beskriver om hur staten California i dagsläget har 50 tankstationer och till 2026 planeras det finnas cirka 200 stationer för att förse behovet av vätgas på vägarna. Detta innebär att både individrisker och samhällsrisker kommer öka under tidsperioden som antal tankstationer ökar, speciellt i tätbefolkade områden (Fulton, 2022). IVA (2022) släppte nyligen en rapport vars syfte var att ligga till grund för beslutsfattande i Sverige gällande vätgasdrivna fordon inom transportsektorn med avseende på de förutsättningar Sverige har att kunna framställa och lagra vätgas. Sammantaget menar författarna från IVA att potentialen för vätgasen som transportmedel är stor men att förutsättningarna för att bygga upp den svenska infrastrukturen gällande vätgasproduktion, som kan försörja transportsektorn, inte blir tillräckligt konkurrenskraftig med tanke de varierade elpriskostnaderna och andra skattesatser som föreligger (IVA, 2022). Något som både Fulton (2022) och IVA (2022) är eniga om är att omställningen till vätgasdrivna fordon är nödvändigt om milstolpar kring växthusutsläpp ska uppnås. Detta kräver dock att beslutsfattande organ behöver agera i en riktning som gynnar den teknologi och infrastruktur som i sin tur ger goda förutsättningar för vätgasens implementering inom transportsektorn.

Vätgas inom industrier

Vätgas har en potential att användas inom industrier. Exempelvis kan vätgasen användas till raffinering, förädling och andra kemiska reningsprocesser på grund av dess gynnsamma fysikaliska och kemiska egenskaper (Fulton, 2022). Fulton (2022) hävdar att efterfrågan av vätgas från industrier kan rivalisera med efterfrågan från transportsektorn tills 2030. År 2030 kan efterfrågan på vätgas inom regionen uppgå mot 500 000 ton/år för industrisektorn inom Kalifornien med rätt stöd från beslutsfattande inom regionen. I dagsläget kostar det 10 USD/kg att producera vätgas. Dock behöver priset halveras, detta eftersom naturliga efterfrågan ska uppnås. Fullskalig kommersialisering med en produktionskapacitet på 500 000 ton/år är en tillräcklig mängd för att uppnå de prisnivåer som krävs och bedöms kunna ske innan 2030. Denna uppskalning kräver däremot stimulering och incitament från beslutsfattande (Fulton, 2022). Om vätgas används i samhället behövs måste det finnas en tillräcklig buffert för att kunna förflytta och lagra den. Det innebär nya risker som måste hanteras i takt med att vätgasen blir allt mer samhällsnära (Fulton, 2022).

2.3 Risker med vätgas

I takt med att infrastrukturen för vätgas växer och blir alltmer samhällsnära utsätts fler individer för risker som behöver beaktas. För att vätgasen ska kunna få det genombrott som förväntas krävs det att den omvandlade energin lagras. Energin från sol- och vindkraft, tankstationer för transport och buffertar för industrier har alla gemensamt att de i någon form behöver lagras. Kotchourko (2022) menar på att de flesta olyckor som sker med vätgas inleds med något typ av utsläpp, spridning av gasen i omgivningen och i sin tur antändning.

Som tidigare beskrivet är utsläppet det första som sker i olyckor förknippade med vätgas. Utsläppets storlek är beroende på en rad olika faktorer som hur snabbt gasen släpps ut, vilken del av systemen där brister har uppstått och hur och omgivningen kring gasen ser ut. Eftersom vätgasen lagras under höga tryck kan det tänkas att ett eventuellt utsläpp inte bara är ett gasutsläpp utan en kombination av gas och vätska, således ett 2-fasutsläpp vilket ökar komplexiteten för hanteringen av gasen (Kotchourko, 2022).

Vätgasens molekylstorlek är liten vilket innebär svårigheter att lagra den utan någon genomträning av materialet som används för lagring. Genomträngande utsläpp eller utsläpp som sker via permeation associeras med utsläpp som sker via väggar i ett slutet utrymme eller behållare. Olika material påverkar genomträningshastigheten, exempelvis har metaller en lägre permeabilitet än plaster och andra naturliga material vilket i sin tur minskar hur och hur snabbt gasen tränger igenom materialet. Intensiteten av utsläppet karaktäriseras dessutom av vilket tryck vätgasen lagras under, hur länge den lagras och hur av gasen som är i kontakt med omgivande väggar (Kotchourko, 2022). Detta innebär en uppenbar risk för explosiva miljöer och måste hanteras enligt ATEX-direktiven, det vill säga säkerställning av att explosiva miljöer minimeras eller på något sätt hanteras (MSB, 2019).

Ett annat tänkbart utsläpp kopplat till vätgas är jetutsläpp. Det kan exempelvis vara en otäthet, mindre läckage eller rörbrott, vilket resulterar i utsläpp som formars till en jet och i stora delar av jeten innebär det explosionsrisker på grund av vätgasens breda brännbarhetsområde. Dessa utsläpp är mer kraftfulla och kan generellt sträcka sig under längre områden (Kotchourko, 2022: Brzezińska, 2021).

I verkligheten finns det en rad olika källor kopplat till hanteringen av vätgas som kan tänkas riskera antändning av ett eventuellt utsläpp. Kotchourko (2022) beskriver om hur heta ytor, mekanisk friktion och spontanantändning kan ge upphov till antändning av ett utsläpp. Heta ytor och mekanisk friktion är något som kopplas till vätgas hantering och behövs beaktas i dimensionering av säkerhetstekniska anordning och design av system.

2.4 Vätgas i samhället

Det finns många incitament för en ökad vätgasproduktion vilket i sin tur resulterar i att tillhörande infrastruktur ska byggas upp i samhället, för dess indirekt gynnsamma påverkan på klimatet. Vätgas regleras i den svenska lagstiftningen genom exempelvis genom lagen om brandfarliga och explosivavaror (LBE), plan- och bygglagen, miljöbalken och Seveso-lagstiftningen för att motverka och begränsa följderna av eventuella kemikalieolyckor (Andersson & Rosqvist, 2021). Detta uttrycker sig i att verksamheter måste följa föreskrifter som reglerar hur arbetssätt, uppbyggnad av säkerhetstekniska samt vilka handlingar som krävs.

Lagen om brandfarliga och explosiva varor reglerar om verksamheter blir tillståndspliktiga eller inte och beror på vilka mängder som hanteras, om det är inomhus respektive utomhus samt vad det är för typ av verksamhet. Exempelvis styr tillhörande regelverk som MSBFS 2020:1 hur brandfarliga och explosiva ventilering bör beaktas (MSB, 2020). Tillståndsprocessen innebär att specifika handlingar behöver tillhandahållas till berörda myndigheter, oftast den regionala räddningstjänsten. Sevesolagstiftningen föreskriver krav utifrån de mängder som hanteras. Kravnivåer för dessa anläggningar delas in i en lägre och en högre. Båda kravnivåerna innebär att verksamheterna måste anmälas till länsstyrelsen. Föreskrifter från miljöbalken reglerar exempelvis vattenhantering. Plan- och bygglagen reglerar krav gällande bygglov och i de flesta fall detaljplan (Andersson & Rosqvist, 2021). Den intensifiering av vätgas som väntar innebär att verksamhetsutövare behöver adekvata riktlinjer och vägledning från myndigheter. Sammantaget finns det en viss okunskap inom vätgasområdet, speciellt hos beslutsfattare, vilket ofta innebär att riskerna för vätgasen överdrivs och därmed kostsamt att bedriva en verksamhet inom området (Andersson & Rosqvist, 2021). Detta har i sin tur förmågan att sakta ner omställningen mot ett mer klimatsmart samhälle och att målsättningar satta i Net Zero by 2050 riskeras att inte uppnås inom utsatt tid.

Arbetet hanterar endast ventilationsproblematiken kopplat till vätgasområdet men kommer bli en av de mer centrala utmaningarna vid implementering av en robust och tillförlitlig infrastruktur av vätgas. Dimensionering av nya tankstationer för vätgasbilar, lagring av solenergi i bostadshus och buffertlagring av överskottsenergi är bara några delar för ett att bygga upp en infrastruktur. Framtidsprognosen för vätgasanvändning innebär ett ökat behov av delarna som ingår i infrastrukturen för vätgas, vilket i sin tur direkt aktualiserar ventilationsproblematiken.

Världen står inför en stor utmaning i att förverkliga klimatomställningen, vilket dessutom har starka incitament att ske på en relativt kort tid (IEA, 2022). Trots att beslutfattande gällande vätgasrelaterade frågor ska hanteras snabbt behövs adekvat underlag för grunda så bra beslut som möjligt. Genom att besvara arbetets frågeställningar ger det upphov till nya forskningsprojekt alternativt underlag till beslutsfattande i ventilationsfrågor kring vätgasläckage. Detta för att undvika en del av de uppenbara olycksriskerna som är förknippade med vätgaslagring.

3 Teori

Nedan redogörs nödvändig teori för att få bättre förståelse kring de olika aspekterna av arbetet.

3.1 Vätgas

För att bättre förstå ett utsläpp av vätgas är det viktigt att förstå vätgasens egenskaper. Vätgasen har båda goda och utmanande aspekter med avseende på dess förmåga som en energibärare. I detta delavsnitt redogörs teorin för både egenskaper hos vätgasen samt relevanta aspekter med hänsyn till arbetets inriktning.

Egenskaper

Väteatomen är den första atomen i det periodiska systemet och naturligt förekommer väte i formen av vätgasmolekylen (H₂). Atomen består endast bestående av en proton och en elektron, vilket gör väte till den atomen med minst massa och en relativt liten diameter på 0,41 nm, med detta faktum kan det uppstå mindre läckage under lagring då den kan läcka ur mikroskopiska sprickor (Liu, 2012). Följaktligen har väte en molmassa på ungefär 1,008 g/mol, vilket jämfört med molekylvikten på torr luft 28,966 g/mol, leder till att gasen stiger relativt lätt i en luftmassa (Wheeler & Sears, 2015). Gasen har en kokpunkt på -253 °C och en densitet på 0,09 kg/m³ i rumstemperatur (MSB, 2022). Vätgas är även en färg-, doft-och smaklös gas som gör den svår att upptäcka vid läckage. Ytterligare har gasen ett brännbarhetsområde mellan 4–77 volymprocent (Linde Gas, 2020).

Reaktivitet

Atomer strävar efter att ha åtta valenselektroner i det yttre elektronskalet. Med undantag för det första skalet, vilket endast kan hålla två elektroner. Väteatomen har en valenselektron i sitt enda elektronskal, kommer därmed att sträva efter ytterligare en elektron för att fylla ut det yttre skalet. Det betyder att väte är reaktivt med andra ämnen, mest vanligt med syre. Reaktionen mellan väte och syre är troligtvis den viktigaste för bildning av liv på jorden, vilket gör det naturligt att atomerna har en stark eftersträvan till varandra. Ur reaktionen mellan väte och syre bildas inte endast en stor mängd energi utan även vattenånga som restprodukt. Det betyder att inga förorening bildas som restprodukt vid en eventuell reaktion (Wheeler & Sears, 2015). Ytterligare har vätgas en relativt stor energimängd på 141,6 MJ/kg, vilket är 2,5 gånger mer än den av propan (Akal et al., 2020). Vid reaktion med syre utlöses denna energi som värme och vattenånga bildas, således en exoterm reaktion. Reaktionen mellan vätgas och syre är en form av oxidering, vilket betyder att det krävs en initial energi för reaktion. Energin som krävs är en tiondel av initialenergin för metan. Den nedre brännbarhetsgränsen för vätgas är 4 procent, vilket innebär en brandfara i kontakt med syre vid relativt låga koncentrationer (Linde Gas, 2020).

3.2 Helium

Eftersom vätgas är en brandfarlig och reaktiv gas behövde vätgasen substitueras för att kunna utföra experiment som inte medförde oacceptabla risker för laboranterna. Nedan presenteras substitutgasen helium, dess likheter och olikheter mot vätgasen samt stöd till varför helium är ett lämpligt substitut inom ramen för arbetet.

Likheter och olikheter mot vätgas

Likt väte är förekommer ämnet naturligt i gasformen He och är en färg-, doft-, smaklös gas. Trots att vätgas och helium ligger efterföljande varandra i det periodiska systemet, finns det ett par skillnader i egenskaper mellan ämnena. I rumstemperatur har helium har en kokpunkt på -268,9 °C och en densitet på 0,179 kg/m³. Helium atomen har en molekylvikt på 4,003 g/mol och jämfört med vätets atomvikt, på 1,008 g/mol, är ämnet relativt tyngre. Följaktligen är vätgas 7 procent mer flyktig (engelskans buoyant) än helium, förutsatt att omgivningen består av torr luftmassa, vilket betyder att vätgas har en högre stig- och spridningshastighet i ett luftmedium. Trots att helium har en högre atomvikt är helium en starkare förmåga att tränga sig igenom mikroskopiska sprickor och porer med sådan liten atomstorlek (Wheeler & Sears, 2015). Den mest betydande skillnaden är att helium är en inert gas. Detta redogörs vidare i följande avsnitt.

Helium som en inert gas

Till skillnad från vätgas är helium en ädelgas. Det betyder att ämnet har fyllt sitt yttre elektronskal och är därmed inert. En inert gas har en liten attraktion till andra ämnen och har därmed nästintill ingen chans för någon form av reaktion. Helium, som den minsta ädelgasen, har ytterligare lägre attraktions nivå och har därmed minst förmåga av alla ämnen att fästa sig eller reagera med något annat material. Gasens förmåga att vara helt inert har resulterat i heliums stora användningsområde som lyftmedium för luftballonger och Zeppelin flygfartyg, då det inte finns någon risk för antändning av gasen (Wheeler & Sears, 2015).

3.3 Gasens spridning i ett utrymme

Vid ett vätgas läckage inom ett utrymme där omgivande medium består av luft, kommer gasen följa en viss ström genom utrymmet (Blomqvist, 2009). Förståelse för hur strömmen rör sig och därmed hur gasen sprider sig i ett rum, är kritisk information för att hantera läckage med ventilation. Hur vätgasströmmen beter sig är beroende på ett flertal parametrar som redogörs nedan i detta delavsnitt.

Stigkrafter

En luftmassa har en naturlig konvektion i ett utrymme som är en form av naturlig luftrörelse. Det uppstår vid densitetsskillnader på luften i en massa, vilket även kan förändras vid temperaturskillnader. Varmare luft har lägre densitet och kommer därmed att stiga i en luftmassa med lägre temperatur. Utrymmen är sällan helt symmetriska i temperatur, exempelvis olika temperaturer vid mark- och taknivå, därmed strömmar luften naturlig runt när den värms och kyls i olika delar av rummet. Hur egenskaperna hos gasen skiljer sig från luften, kommer påverka spridningen i utrymmet. Densitet, som nämndes innan påverkas av temperatur, har en stor roll i spridningen. Vätgasen har en lägre densitet än luft, vilket naturligt resulterar i en spridning i ett luftfyllt rum. Andra relevanta faktorer som är luftensfuktighet, omgivningens temperatur och ventilationen (Blomqvist, 2009). Dessutom har tröghetsmomentet en påverkan på stigkraften, vilket beskrivs mer utförligt i avsnitt 3.4.

Utformning på utrymmet

Då simuleringar och experiment skulle utföras insåg författarna att de behövde avgränsa ett gasutsläpp i ett utrymme och därmed intressant att se vilka faktorer som påverkar spridningen på utsläppet i ett avgränsat utrymme.

När gasen har stigit upp till taket från låga utsläppshastigheter, kommer det bildas ett vätgaslager vid taknivån. Trots att hastigheterna är låga vid utsläppet kan gaserna även ha ett visst moment när de slår mot taket. Därmed är en viktig parameter hur stor yta taket har. Inte bara för tjockleken av vätgaslagret, utan även för hur rörelserna agerar när de strävar under en stor gentemot liten takyta. Om hastigheterna för utsläppet i stället är höga kan det ske större blandning med omgivande luft. När gasen slår mot taket sker det en större spridning och en mer homogen blandning uppstår, vilket inte resulterar i ett distinkt gaslager. Ytterligare en viktig parameter blir därmed avståndet mellan öppningen på läckaget och takytan. Om vätgasplymen sträcker sig närmare taket, kommer strömmen att träffa taket med mer moment och vidare förändrar spridningen. Objekt som sitter i taket, exempelvis hängande lampor, och andra hinder i utrymmet har även en påverkan på hur gasen sprider sig (Blomqvist, 2009).

3.4 Jetutsläpp

Jetutsläpp bildas från gasutsläpp genom ett munstycke eller mynning ut i ett omgivande medium, som formar ett flöde av gas. Eftersom vätgas förvaras i tankar under högt tryck är det rimligt att förvänta ett jetflöde med höga hastigheter vid utsläpp på grund av den stora tryckskillnaden mellan tanken och omgivande utrymme (Blomqvist, 2009). I sin tur blir utsläppöppningens orientering och utformning mer relevant för hur gasen sprider sig. Ett läckage med en cirkelformad öppning ger en så kallad *"round jet"* som resulterar i ett konliknande flöde som bredas ut ju längre gasen flödat från utsläppspunkten, se Figur 2. Round jetflödena med cirkelformade snitt fanns det studier om, vilket underlättade förutsättningar för beräkningar (Bejan et al., 2014), som diskuteras mer i 3.7. En del av valideringsprocessen för FDS är att validera om programmet kan fånga upp koncentrationen av gas på olika höjder över utsläppet. Nedan presenteras Ekvation 1 som användes för att jämföra koncentrationen gas över olika höjder ovanför utsläppskällan i FDS (Molkov, 2012).

Ekvation 1

$$\frac{C_{ax}}{C_n} = 5.4 \sqrt{\frac{\rho_N}{\rho_S}} \frac{D}{x}$$

- Där C_n beskriver fraktionen av gasen vid utsläppskällan
- Där C_{ax} beskriver fraktionen av gasen vid avståndet x
- Där ρ_N beskriver densiteten av gasen i utsläppskällan
- Där ρ_S beskriver densiteten av omgivningen
- Där *D* beskriver utsläppskällans diameter
- Där x beskriver avståndet över utsläppskällan

Vidare om utsläppet sker i vertikal riktning, det vill säga om utsläppskällan riktat uppåt, bildas en plym likt den som kan observeras i Figur 2. Detta för att de centrala tröghetskrafterna och stigkrafterna verkar i samma riktning (uppåt). Om utsläppet i stället sker i horisontell riktning, det vill säga utsläppskällan riktas åt sidan, bildas en plym likt den som kan observeras i Figur 3. Det beror på att gasen förlorar sitt initiala tröghetsmoment som det flödade ut med under det höga trycket. Till slut kommer gasens ström helt domineras av stigkrafter på grund av densitetsskillnaden mellan mediet (Wang et al., 2019). Träffar jeten en vägg eller tak när dess hastigheter fortfarande är höga ger det ytterligare variationer på spridningen av gasen (Wang & Tan, 2010).

Jetströmmar kan delas upp i subsoniska och soniska utsläpp. Det som karaktäriserar de subsoniska utsläppen är att hastigheten från utsläppskällan underskrider ljudets hastighet medan de soniska utsläppen har en hastighet som uppnår ljudets hastighet vid utsläppskällan (Kotchourko, 2022). De flesta gaser kan uppnå sin ljudhastighet från ett utsläpp med ett lagringstryck som överskrider 1,9 bar. Eftersom många industrier uppnår sådana lagringstryck är det vanligt med olyckor som resulterar i soniska jetflammor (Palacios et al., 2008).



Figur 2. Beskriver plymutvecklingen under ett vertikalt jetutsläpp (Kotchourko, 2022)

Figur 3. Beskriver plymutvecklingen under ett horisontellt jetutsläpp (Kotchourko, 2022).

Som tidigare nämnts kommer gaserna från ett jetutsläpp eventuellt övergå från momentdominerad till stigkraftsdominerad. Med hjälp av Froudes tal, se Ekvation 2, kan det avgöras vilken typ av kraft som dominerar gasspridningen. Froudes tal är en dimensionslös kvantitet inom fluidmekaniken som beskriver relationen mellan gravitationens och tröghetsmomentets påverkan på en fluid. Om Fr~1 har de inverkande krafterna lika stor påverkan. En ökning av Froudes tal skulle innebära att tröghetsmoment har större inverkan än de naturliga stigkrafterna från gravitationen. Därmed kan Froudes tal användas för att bestämma i vilken grad vissa krafter dominerar i ett utsläpp (Brzezińska, 2021).

Ekvation 2

$$Fr = \frac{v^2}{g \times D}$$

- Där v beskriver utsläppshastigheten
- Där g beskriver tyngdaccelerationen
- Där D beskriver diametern på utsläppsöppningen

3.5 Ventilation

Ventilation förknippas som en process där transportering och utbyte av luft sker, främst för byggnader, rum eller utrymmen (Nationalencyklopedin, 2022). Vanligtvis används ventilationssystem för säkerställning av luftkvalitén med hänsyn till föroreningar som alstras i ett utrymme. Dessutom kan ett ventilationssystem tillämpas som en säkerhetsteknisk anordning för att motverka explosiva miljöer, genom att ha ett adekvat luftflöde. Rent praktiskt används m³/timme per m³ för att beskriva luftflödet. Den luft som tillförs till ett utrymme kallas tilluft och luften som förs bort kallas frånluft (Nationalencyklopedin, 2022).

Mekanisk ventilation

Ett mekaniskt ventilationssystem använder sig antingen av frånluft eller en kombination av från- och tilluft för att erhålla erforderligt luftflöde. I ett system som endast använder frånluft så är tillförseln av tilluft försedd via ventiler i fönster och väggar eller andra otätheter som kan råda. Luftflödet erhålls från en frånluftsfläkt och brukar benämnas som F-system. F-systemen medför en relativt enkel anordning vilket kan säkerställa luftflödet oavsett årstid. Ett ventilationssystem som har kombinationen av från- och tilluft innebär en ökande komplexitet av den tekniska nivån. I ett sådant system, även kallat FTX-system, värms luften som tillförs från utomhusmiljön. Utrymmesbehovet ökar också för ett FTX-system. Rent generellt krävs större luftflöden vilket i sin tur leder till att tilluftssystem med fläktar och luftvärmare (Nationalencyklopedin, 2022).

Naturlig ventilation

Naturlig ventilation är ett ventilationssystem som inte kräver några tekniska anordningar för att luftombyte ska ske, luftflödet erhålls genom självdrag och sådana system benämns som S-system. Luftflödet för S-systemen har en lägre robusthet än F-systemen då luftflödet tenderar till att minska under varma årstider på grund av en minskning i tryckskillnader mellan inomhus- och utomhusmiljöer (Nationalencyklopedin, 2022). Naturlig ventilation är praktiskt vid experimentering då det egentligen inte krävs några tekniska anordningar, samtidigt som det fungerar som ventilationssystem vid validering av modeller.

3.6 Simuleringsprogram

Simuleringsprogram kommer användas för att skapa flera simuleringar av läckage med olika förutsättningar. En FDS modell kommer byggas upp i användargränssnittet PyroSim med syftet att representera experimenten så väl som möjligt för att i sin tur kunna validera simuleringsmodellen. Nedan beskrivs de simuleringsprogram som använts i arbetet.

FDS och PyroSim

FDS är en CFD-modell som används för att simulera och analysera brand-drivna gaser och skapades av NIST, med den första versionen som publicerades år 2000. Utvecklarna av modellen hävdar att mjukvaran även kan användas för att beräkna och analysera spridning på andra gaser som inte är relaterade till brand. Däremot använder FDS matematiska formler för att beskriva fysikaliska fenomen. Exempelvis går det att genomföra tredimensionella simulationer på värmeöverföring, massflöde, flödeshastigheter, temperatur, gaskoncentrationer och spridning av gaser (McGrattan et al., 2018).

Ett exempel på där mjukvaran använder sig av matematiska ekvation är Navier-Stokes ekvationerna som tillämpas i FDS. Navier-Stokes ekvationer är differentialekvationer som beskriver rörelser av fluider som är härledda från bevarandet av moment, energi och massflöden. Dessutom tar ekvationerna hänsyn till hastigheterna på fluiden förändras över tid på grund av tryck och gravitation. Mjukvaran (FDS) använder sig även av Large Eddy simulations (LES) för att modellera hur turbulensen på kortare längdskalor än de som fångas av programmet, påverkar flödet på den simulerade nivån. Tillämpningen möjliggör att snabba och oförutsägbara flöden kan beräknas i CFD modeller som FDS. FDS kan även användas för andra typer av modellering. Exempelvis modellering av naturlig och mekanisk ventilering samt utflöde ur ett munstycke (McGrattan et al., 2018). Sammantaget medför detta att programmet rent teoretiskt borde kunna tillämpas för att skapa jetutsläpp av gas och ta hänsyn till relevanta fysikaliska fenomen förknippat med dessa typer av utsläpp. FDS är begränsat i att kunna beakta plötsliga skillnader i tryck som påverkar densiteten, detta är en problematik för kompressibla gaser, därför ansätts ett lågt machtal för att undvika den kompressibla zonen, vilket beskrivs mer i 3.7 (McGrattan et al., 2018).

Författarna för detta arbete använde sig av mjukvaran PyroSim, vilket är ett grafiskt användargränssnitt tillägg till programmet FDS (Thunderhead Engineering, 2020). Det anses generellt vara lättare att ställa upp simulationer och analysera resultatet med hjälp av mjukvaran. Syftet med användargränssnittet är att effektivisera uppbyggnaden av simuleringsmodellen som i sin tur kan representera experimentförsök.

Begränsningar simuleringsprogram (FDS)

Som tidigare beskrivet är FDS programvaran avsedd för att beräkna spridning av bränder och förhåller sig till matematiska ekvationer anpassat för den typen av händelseförlopp. CFD-modellen förhåller sig även till Courant-Friedrichs-Lewy (CFL) tal. Detta är en dimensionslös parameter som används för att kontrollera noggrannheten och stabiliteten i simulationen. CFL talet grundar sig i flödeshastigheten och hur stor meshen är vilket resulterar i tidsstegen som visas i Ekvation 3 (McGrattan et al., 2018).

FDS justerar tidssteget så att CFL-talet understiger 1, vilket säkerställer att simulationerna är stabila och noggranna. Om CFL talet är för litet kan det resultera i att tidsstegen blir för stora, vilket påverkar simulationens numeriska instabilitet. Om CFL talet i stället är för stort, kan det resultera i att tidstegen blir för små som i sin tur påverkar den numeriska träffsäkerheten. Då verkliga utsläpp av vätgas karaktäriseras av jetutsläpp resulterar det mest troligen i högre hastigheter än vad som genereras vid standardbränder. Det beror på att helium har en relativt låg densitet strävar efter jämvikt. Problematiken med ett tänkt jetutsläpp i systemet för simuleringsmodellen är att det kräver en större beräkningskraft vid lägre skillnad i tidssteg, vilket är direkt beroende av hastigheter som inte är tillgängliga. CFL talet i FDS förhåller sig till \approx 1, vilket innebär att programvaran har en beräkningspunkt i varje cell. Detta i sin tur begränsar hur fin meshindelning som kan appliceras i simuleringsmodellen. Tidsstegen kan lösas ut från Ekvation 3 nedan(McGrattan et al., 2018).

Ekvation 3

 $\delta t = \delta x * CFL/||u||$

- Där δt beskriver tidsstegen
- Där δx beskriver cellstorleken
- Där CFL beskriver en konstant
- Där ||u|| beskriver hastigheten

3.7 Simulering av jetutsläpp i FDS

Anledningen till att en anpassning av jetutsläppet behövdes skapas var för att göra det hanterbart i FDS. Höga hastigheter och höga tryck uppstår i det underexpanderade området, vilket leder till att simuleringar i dessa områden inte hade varit praktiskt möjligt. Genom att applicera teori kring hur jetutsläpp artar sig, kan författarna välja att undvika att simulera den delen av jeten som tillhör det komprimerade området och endast simulera i utvalda delar av det expanderade området. Därmed undviks de högsta hastigheterna i simuleringen som påverkar simuleringstiden i FDS. Genom att a ett

snitt i det förutsatta konliknande jeten, kommer detta snitt att representera den nya öppningen för utsläppet i FDS, se Figur 5 och Ekvation 5. Detta snitt kommer skapa en större diameter och lägre gashastigheter för utsläppet, vilket gör det möjligt att simulera i FDS med bättre noggrannhet och under kortare tid. Förutsatt att den delen av jeten som inte simuleras kan antas vara mindre relevant för gasspridningen, borde resultatet ge representativa värden (Rengel et al., 2019). För att få bättre förståelse kring denna anpassning måste bättre förståelse anskaffas kring det tidigare nämnda machtalet.

I avsnitt 3.6 beskrevs ett antal faktorer som direkt påverkar tidssteget i simuleringarna, exempelvis höga hastigheter och små cellstorlekar. Då arbetet i ett senare skede hanterade utsläpp som karaktäriserades av jetströmmar, dvs jetutsläpp, visste författarna om att höga hastigheter kunde uppnås. Detta har möjligheten att orsaka små tidssteg för CFD-programmet som kan resultera i långa simuleringar. Dock genom teorin kring Navier-Stokes, samt tidigare studier för jetutsläpp i FDS, kunde anpassningen där de initiala förutsättningarna karaktäriserades som ett jetutsläpp simuleras i CFD-programmet. Genom att skala om de initiala förutsättningarna kunde cellstorlekar hållas höga och hastigheter hållas låga gentemot om en riktig jet hade simulerats.

Navier-Stokes ekvationer har haft stor betydelse inom fluid dynamiken och tillämpas inom flera simuleringsprogram som har nämnts tidigare i avsnitt 3.6. Denna teori innehåller delvis machtalet som i tidigare studier har använts för att anpassa jetutsläpp i FDS. Rengel et al. (2019) undersökte hur ett antal olika parametrar kunde hanteras där utsläppet anpassades för jetflammor. Exempelvis resulterade detta i att FDS kunde skapa representativa värden på strålning men inte för temperatur. Trots att denna studie utfördes för jetflammor borde samma teori kunna appliceras för jetutsläpp som inte antänds. Vidare har inga studier utförts kring om FDS visar representativa värden för koncentrationsnivåerna av en gas i ett utrymme där utsläppet karaktäriseras som ett jetutsläpp.



Figur 4. Beskriver hur machtal förändras i jeten (Rengel et al., 2019).

Ekvation 4

$$M_a = \frac{u}{a}$$

- Där M_a beskriver machtal

- Där u beskriver gasens hastighet (m/s)
- Där c beskriver ljudets hastighet i det aktuella mediet (m/s)

Den dimensionslösa kvantiteten machtal är definierad av relationen mellan gasens hastighet och ljudets hastighet som beskrivs i Ekvation 4 nedan (Kollmann, 2019). Talet beskriver hastigheten i en punkt i jeten relativt till ljudets hastighet, se Figur 4. När machtal =1 är flödeshastigheten samma som ljudets hastighet (i gasen helium). Denna hastighet uppnås vid utsläppsöppningen som sedan accelererar till soniska hastigheter efter gasen har lämnat öppningen. Inom detta område sker ingen blandning med omgivande medium, vanligtvis luft, då trycket är så högt. När gaserna har passerat den så kallade "mach-disken" sjunker hastigheterna snabbt under ljudets hastighet och luftinblandningen börjar ske. När machtalet sjunker under 0,3 nås den expanderande zonen. Majoriteten av jeten ligger inom denna zon. I början av den expanderande zonen är hastigheterna fortfarande höga, vilket resulterar i en stor mängd luftinblandning. Längre ut i jetströmmen däremot, kommer hastigheterna att sjunka och luftinblandningen kommer därmed att minska (Rengel et al., 2019).



Figur 5. Beskriver en ritning av ekvivalenta-diametern som används för att skala om de initiala förutsättningarna (Rengel et al., 2019).

Ekvation 5

$$D_{eq} = \sqrt{4 \dot{m}_{eq}/\pi \rho_{eq} M_a c}$$

- Där \dot{m}_{eq} beskriver det ekvivalenta massflödet
- Där ρ_{eq} beskriver den ekvivalenta densiteten
- Där M_a beskriver machtal
- Där c beskriver ljudets hastighet i helium
- Där x beskriver avståndet mellan den egentliga diametern och den ekvivalenta diametern

Med antagandet att egentliga utsläppskällor av vätgas har utsläppshastigheter som är i linje med teorin om sonisk- & subsoniskjet, så kan machtal användas för att beräkna en så kallad "*ekvivalent diameter*" på ett längre avstånd än den "egentliga utsläppskällan". Enligt Rengel et al. (2019) kan Ekvation 4 och Ekvation 5 användas för att beräkna en ny ekvivalent diameter på ett längre avstånd från utsläppskällan. Både Figur 4 och Figur 5 visar att ett machtal som har understigit 0,3 har utsläppet övergått till den expanderande zonen. Den expanderade zonen är betydligt mindre komplex och mer hanterbart i FDS. Detta eftersom de allra högsta hastigheterna i utsläppet samt tryckförändringarna sker i den komprimerade zonen. Arbetet begränsas på grund av praktiska skäl som beräkningskraft till att enbart simulera i den expanderade zonen.

Förutom att den ekvivalenta diametern behöver beräknas i den expanderade zonen på grund av hanterbarhet så behövs även hastigheter tas hänsyn till. I avsnittet 3.6 beskrivs det indirekt hur hastigheterna påverkar stabiliteten och noggrannheten. Dessutom riskeras simuleringstiderna bli för långa om hastigheter blir för höga. Genom att förhålla sig till under 100 m/s borde rent teoretiskt, simuleringstiden inte bli allt för lång och samtidigt ge adekvata resultat. Tabell 1, med hjälp av Ekvation 4, visar på att vid machtal som understiger 0,1 understiger utsläppshastigheter 100 m/s, vilket gör utsläppet hanterbart i FDS. Detta förutsätter dock att hela jeten består enbart av helium utan luftinblandning och därav borde Tabell 1 anses vara konservativ. Rengel et al. (2019) beskriver att vid jetutsläpp så sker det en viss luftinblandning på grund av olika fysikaliska fenomen.

Tabell 1.	beskriver	hur h	astigheten	varierar m	ed varieran	de machtal	(konstant c	$x = 972 \ m/s$).	

M _a (-)	1	0,9	0,8	0,7	0,6	0,5	0,4	0,3	0,2	0,1
U _e (m/s)	972	874,8	777,6	680,4	583,2	486	388,8	291,6	194,4	97,2

Anpassningen resulterar i en gasblandning bestående av helium och luft. För att hastigheten i gasen ska kunna beräknas behövs ljudhastigheten i gasen. Detta härleds ur den ideala gaslagen (FOA, 1998). Där M och γ beräknas utifrån heliumluftblandningen som utvinns från Ekvation 1. Det vill säga, olika koncentrationer påverkar hastigheten i gasen då mol sammansättningen och den ämnesspecifika konstanten varierar.

Ekvation 6

$$c = \sqrt{\frac{P}{\rho} * \gamma} = \sqrt{\frac{\gamma * R * T}{M}}$$

- Där beskriver γ den specifika värmekonstanten
- Där R beskriver gaskonstanten
- Där T beskriver omgivande temperatur
- Där M beskriver molmassan

Då ett nytt snitt av jeten anpassas genom ovanstående teori blev det kritiskt att identifiera vilket förhållande det finns mellan jetens utbredning beroende av höjden. Enligt Tang et al. (2018) erhölls ett samband som beskrev hur bredden förhåller sig mot höjden på ett jetutsläpp, se Ekvation 7.

Ekvation 7

L = 0,09x

Givet detta samband kan avståndet mellan den egentliga utsläppskällan (D_N) och den ekvivalenta utsläppskällan (D_{eq}) beräknas, se Figur 6. Detta avstånd blir en kritisk ingångsparameter för FDS då utsläppets startpunkt kommer att förskjutas i höjdled, vilket inte är nödvändigt för utsläpp som inte karaktäriseras som jet. Därefter kan Ekvation 1 användas för att beräkna vilken koncentration helium finns i jeten vid detta avstånd.



Figur 6. Beskriver hur Ekvation 7 kan tillämpas för att skala om initiala förutsättningar för utsläppet i FDS.

4 Metod

I detta avsnitt beskrivs metoden som tillämpats för att kunna besvara arbetets frågeställning. Arbetet är av en analyserande karaktär och består av litteratur, experiment och simuleringar, vilket ämnar leda fram till en slutsats som besvarar arbetets frågeställning. Initialt utförs en litteraturgenomgång där nödvändig teori kring vätgasområdet presenteras. Därefter skapades grundförutsättningar för valideringen av FDS. Detta innefattar uppbyggnad av olika fall med ökande grad av komplexitet för att i sin tur ligga till grund för valideringen av själva FDS-modellen. Metodiken i att tillämpa fall med ökande grad av komplexitet leder till förståelse kring vart modellen bär eller brister. Modellen valideras delvis mot handberäkningar men även mot experiment. Experiment tillämpades som valideringsmetod av de mer komplexa fallen då det ansågs vara lämpligast. Därefter presenteras hur försöksuppställningen för experimentet har byggts upp och beskriver vilka val och antaganden som gjorts för respektive fall. I nästa del presenteras indata till FDS där förutsättningar för simuleringsmodellen beskrivs för respektive fall. Därefter presenteras, jämförs och diskuteras simuleringsdata och experimentdata, vilket slutligen möjliggör att slutsatser om analysen kan dras. I kommande delavsnitt beskrivs förutsättningarna för de olika fallen samt hur modellen konstruerades i FDS och experiment. Metoden beskrivs i Figur 7.



Figur 7. Illustrerar den kronologiska arbetsgången för rapporten.

4.1 Grundförutsättningar för analys

Första steget i valideringsarbetet av FDS-modellen var att konstruera olika fall med ökande grad av komplexitet. Simuleringsmodellen behövde förhålla sig till begränsningar i utformning, dels på grund av begräsningar som fanns för själva experimenten, dels för begränsningarna som finns med CFDprogrammet beskrivet i 3.6. Experimenten begränsade exempelvis simuleringsmodellens geometri då den behövde få plats under en fast fläkt för möjligheten att ventilera bort gasen, samt ekonomiska resurser som begränsade hur många mätpunkter som faktiskt kunde jämföras mot modellen. CFDprogrammet klarar av höga hastigheter. Men för att undvika långa och kraftfulla beräkningstider, vilket är en praktisk begränsning, konstruerades inledningsvis fall som erhöll relativt låga hastigheter. Då fallen gradvis ökar i komplexitet, för att efterlikna verkliga scenarier, tilläts högre hastigheter vid det sista fallet. Det innebar att förenklingar och antaganden gällande utsläppskällan behövde beaktas och hanteras.

Fyra olika del fall bedömdes vara en adekvat mängd för att kunna erhålla tillräckligt med valideringsdata för att kunna besvara arbetets frågeställning. Det första fallet bestämdes till att vara en så simpel sammansättning som möjligt för att bekräfta FDS-modellens förmåga att reflektera en verklig koncentrationsavtagning för ett jetutsläpp, vilket validerades mot handberäkningsmetoden (Ekvation 1) som beskrivs mer i 3.4. Det andra fallet har snarlika förutsättningar som för det första fallet. Då experiment bestämdes som valideringsmetod för de resterande tre fallen, behövde detektorernas volym beaktas. Det som ökar graden av komplexitet mot det första fallet är att detektorer, som tidigare inte antogs ha en volym, nu har en volym i FDS-modellen. I det tredje fallet ökade graden av komplexitet ytterligare. Detta genom att genomföra ett jetutsläpp i ett fixt utrymme. Det ökar direkt graden av komplexitet då jetutsläppet ansamlas i utrymmet. För det tredje fallet utfördes tre olika tester med variationer i förutsättningar för ventilationen. Det slutliga fallet var det mest representativa för verkligheten. Då gaser lagras under höga tryck genereras generellt högre hastigheter vid utsläppet för det slutliga fallet har en mindre öppningsarea och högre flöde, vilket jetutsläpp vanligen karaktäriseras som.

Syftet med att införa de olika fallen var att successivt bygga upp komplexiteten mot en slutgiltig simuleringsmodell som i sin tur kunde användas för att besvara arbetets frågeställning. Genom att införa fall med ökande grad av komplexitet kunde författarna på ett strategiskt sätt se vart simuleringsmodellen bär eller brister. På så sätt får författarna mer kunskap om var och hur osäkerheter uppstår med olika typer av utsläpp i FDS.



Figur 8. Beskriver hur systemet gradvis ökar i komplexitet med hjälp av de olika fallen.

Fall 1 - Jetutsläpp utan hinder

Syftet med Fall 1 var att undersöka om handberäkningen och FDS stämmer överens, således Ekvation 1 i avsnitt 3.4. Handberäkningar är ett försök att representera verkliga fenomen och resultaten från detta fall kunde ge en uppfattning om programmets lämplighet till frågeställningen. Fallet som byggdes upp i FDS består av ett jetutsläpp utan hinder. Koncentrationerna i centrumlinjen mättes upp i olika punkter från utsläppskällan över höjd. Därefter validerades resultaten med hjälp av koncentrationsberäkningar. Om koncentrationsberäkningar i teorin och simuleringsresultat stämmer överens visste författarna att FDS klarar av att fånga upp koncentrationsavtagandet i plymen över höjd med nuvarande modellförutsättningar.

Fall 2 – Jetutsläpp med hinder

Syftet med Fall 2 var att ytterligare öka komplexiteten av systemet genom att undersöka om koncentrationsavtagande för FDS stämmer överens med experiment. För att mäta värden i experimentet sattes detektorer i centrumlinjen av plymen. Eftersom detektorerna kan påverka koncentrationerna senare i plymen, ansattes hinder i FDS modellen för att representera de detektorer som användes i experimentet. Genom att undersöka hur detta påverkar koncentrationerna kunde författarna göra mer välgrundade beslut gällande placering av detektorerna samt hur den påverkan som de detektorerna orsakar skulle hanteras.

Fall 3 – Jetutsläpp med stor öppning i utrymme

Syftet med Fall 3 var att undersöka hur korrekt FDS simulerar koncentrationsnivåer i ett avgränsat utrymme då de teoretiska och praktiska begränsningarna gällande utsläppskällan undveks. För Fall 3 skedde utsläppet i en avgränsad geometri i form av tre tester med varierande förutsättningar för ventilationen. Genom variation av förutsättningar för Fall 3 möjliggjordes en eventuell identifiering av felkällor med adekvat underlag. Rent teoretiskt borde Fall 3 kunna representeras med hög tillförlitlighet. I Fall 3 kommer startkoncentrationen från utsläppet enbart vara helium. Startpunkten för utsläppet karaktäriserades av att den började 0,1 m från geometrins botten.

Fall 4 – Jetutsläpp med liten öppning i utrymme

Syftet med Fall 4 var att undersöka hur korrekt FDS simulerar koncentrationsnivåer i ett avgränsat utrymme då en teoretisk anpassning för att efterlikna verkliga utsläpp utfördes. Fall 4 hade identiska förutsättningar som för Fall 3. Skillnaden mellan fallen är att storleken på öppningen minskade och massflödet ökade, vilket resulterade hastigheter som oftast är förknippat med jetutsläpp. För att kunna simulera Fall 4 behövdes teori kring massflöden, jetutsläpp, machtal och jetens utbredning appliceras, vilket beskrivs i 3.4 och 3.7. I det scenario där Fall 4 ger adekvata resultat mellan simuleringar och experiment, påvisar detta att anpassningen som gjorts kring ett jetutsläpp funkar och att FDS klarar av att hantera sådana utsläpp trots begränsningar i FDS.

|--|

Fall	1 - Jetutsläpp utan hinder	2 - Jetutsläpp med hinder	3 - Jetutsläpp med stor öppning i utrymme	4 - Jetutsläpp med liten öppning i utrymme
Syfte	Validera koncentrations avtaganden i FDS mot handberäkning en	Validera vilken påverkan detektorer har på koncentrationsre sultatet mot experiment. Samt validera om FDS klarar av att koncentrationsa vtagande över höjd mot experiment	Validera om FDS kan beräkna korrekt koncentrationsnivå er i ett avgränsat utrymme mot experiment	Validera om FDS kan beräkna korrekt koncentrationsnivåer i ett avgränsat utrymme mot experiment där utsläppskällan efterliknar verkliga utsläpp
Froudes tal (-)	$2,9 * 10^{1}$	2,9 * 10 ¹	$2,9 * 10^{1}$	2,6 * 10 ⁵
Massflöde (kg/s)	2,967 * 10 ⁻⁴	2,967 * 10 ⁻⁴	2,967 * 10 ⁻⁴	5,04*10-4
Volymflöde (SLPM)	100	100	100	170
Öppningsdiam eter (mm)	27,5	27,5	27,5	5,5
Hastighet (m/s)	2,81	2,81	2,81	118,9
Extra information	-Endast utsläpp utan något hinder	-Block som representerar helium detektorer	 -Utsläppet sker i ett avgränsat utrymme med naturlig ventilation - Utför tre tester med varierande ventilations areor 	 -Utsläppet sker i ett avgränsat utrymme med naturlig ventilation -Utsläppet är anpassat till att efterlikna verkliga utsläpp - Utför tre tester med varierande ventilations areor

Ett bra substitut för vätgas inom validering av modeller

Trots att modellen valideras för utsläpp av vätgas var det inte lämpligt att utföra experiment med vätgas inom Lunds Universitet. Detta arbete kommer använda ett substitut till vätgas för att undvika de risker som uppstår vid hantering av brandfarliga gaser. Substitutet som valdes var helium och dess likheter med vätgas kan hittas i Tabell 3. Nedan motiveras substitutet ytterligare och varför det ansågs vara lämpligt till arbetets frågeställning.

Den främsta anledningen för substitutionen till helium är att gasen inte reagerar naturligt med något ämne och är därmed ingen brandfara. Detta är fördelaktigt inom de delar av arbetet som innefattar experiment, då det finns uppenbara olycksrisker som reduceras. Med användning av helium i arbetet kommer laboranternas och handledarens säkerhet främjas. I bästa fall borde substitutens egenskaper i form av spridning vara praktiskt lika, så resultatet inte får betydliga skillnader. Endast de egenskaperna som påverkar spridningen kommer beaktas, då syftet med experimentet är att validera den modell för ventilation som tagits fram i arbetet. Faktumet att vätgas har en lägre molekylvikt än helium är försumbart när det handlar om gaser som redan är avsevärt lättare än luft. Dock kan gasutsläpp av helium generera ett större massflöde ur ett munstycke under samma tryck än vad vätgas får, på grund av kombinationen av större atomvikt och mindre atomdiameter (Wheeler M. "Bo" Sears, 2015). Bernard-Michel & Houssin-Agbomson (2017) beskriver i sin rapport hur skillnaderna på gaserna kan ge betydande variationer på spridningen mellan respektive gas i ett luftfyllt utrymme. Variationer i spridning kan även ge skillnader på koncentrationsnivåerna utrymmet där utsläppet sker. Däremot föklarar författarna att det endast är lämpligt att använda helium som en substitut för vätgas inom validering av modeller eftersom helium är den gas som mest efterliknar väte. Med denna antagna förutsättning, kombinerat med att helium är ett relativt ofarligt ämne, kommer helium att användas som substitutsgas istället för vätgas i både experiment och simuleringar för detta arbete. Trots att substitutet har stöd från tidigare arbeten kommer subtitutet att diskuteras i ett senare skede för att knyta an till frågeställningen som egentligen berör vätgas och inte helium.

Egenskaper	Vätgas	Helium
Brännbar	Ja	Nej
Kokpunkt	-253 ℃	-268,9 ℃
Densitet	0,09 kg/m ³	0,179 kg/m ³
Densitettal	0,1	0,1
Diffussivitet	190 (mm²/s)	160 (mm ² /s)
Molekylvikt	2 g/mol	4 g/mol
Molekyldiameter	1,008 g/mol	4,003 g/mol

Tabell 3. Egenskaper för vätgas jämfört med helium.

4.2 Försöksuppställning (Experiment)

I detta avsnitt beskrivs förutsättningarna för den del av arbetet som innefattade experiment. Information om hur försöksuppställningarna ser ut för respektive fall, försöksserie, mätningsteknik, utrustning etc. redovisas i avsnittet.

Laborationen innebar en ökad säkerhetsrisk, vilket hanterades genom god planering bestående av ett experimentplan och tillhörande riskanalys, se Bilaga D.

4.2.1 Utrustning

För att få bättre uppfattning om hur försöksuppställningen för experimentet byggdes, presenteras den utrustning som fanns tillgänglig.

Heliumdetektorer

För att kunna mäta koncentrationer av helium införskaffades lämpliga detektorer. Gasdetektorer som införskaffades använder sig av fysikaliska data gällande värmeledningsförmåga för den relevanta gasen. Detektorerna bestod av två sensorer med en fix temperatur som kunde fånga upp gasens förmåga att fånga upp värme, såväl som temperatur och tryck som i sin tur resulterar i en koncentration (Wootaek et al., 2022). Produkten är testad av tillverkaren och i produktbeskrivningen anges det att felmarginaler i mätningsprecisionen kan uppnå mot 1 %. Se Figur 9 och Figur 10 för utformning och dimensioner.



Figur 9. Dimensioner för en gasdetektor (ovanifrån).



Massflödeskontroller (FMA-2600)

Utsläppskällan behöver ett massflöde som är konstant. Ett sätt att uppnå detta är genom att ansätta en massflödeskontroll som är kopplad till utsläppet. Massflödeskontrollern justerar en ventil genom att ta hänsyn till tryckfall över valvet för att uppnå det önskade massflödet, alternativt mäter densitetsskillnader genom ett uppvärmt rör (Xuhui, 2000). För den specifika produkten kan massflöden inom intervallet 0,5 sccm till 3000 SLPM specificeras. Massflödeskontrollerns utvecklare är Omega och produktnamnet "FMA-2600", vilket var det instrument som användes i experimenten.

Lådan

Lådan är en befintligt nerskalat rum lokaliserat i Lunds Tekniska Universitets brandlabb som har dimensionerna 0,8*1,2*0,8 m³, se Figur 11. Lådan har tidigare använts för brandrelaterade experiment, bland annat brandgasansamling. Följaktligen är Lådan gastät och därmed passande för arbetets experimentdel inom gasutsläpp i ett utrymme. Det finns ett hål på undersidan där ett munstycke kan placeras. Ytterligare har två hål skapats som ska representera till- och frånluftventilationen. Ett hål på långsidan och ett på kortsidan.


Figur 11. Bild på Lådan

4.2.2 Utsläppet

Till varje experimentförsök som utfördes behövdes ett munstycke kopplas till en gasflaska fylld med helium. Gasflaskan placerades fastkedjad på en kärra i anslutning till utrymningsväg, se Figur 12. Den kopplades därefter samman med massflödeskontrollern, vilket var den apparat där massflödet kunde regleras och övervakas, se Figur 15. Vidare förberedes två munstycken med öppningsdiameter på 27,5 mm och 5,5 mm respektive, se Figur 16 och Figur 17. Massflödeskontrollern kopplades sedan samman med korrekt munstycke för respektive försök. För det större utsläppets placering borrades ett hål i botten av Lådan, se Figur 13 och Figur 14. För det mindre utsläppet fästes munstycket intill det större, det vill säga gick inte igenom det borrade hålet.



Figur 12. Visar gasflaska med helium.



Figur 13. Visar hur hålet i botten gjordes.



Figur 14. Visar placering av munstycket och stativ i Lådan.



Figur 15. Visar massflödeskontrollern



Figur 16. Visar munstycke med diameter om 27,5 mm



Figur 17. Visar munstycke om 5,5 mm.

4.2.3 Mätteknik

Mätningsteknikerna inkluderades både av klassiska och moderna tekniker för att uppnå syftet med laborationen. Klassiska metoder bestod av mätning med tumstock och mer precisa linjaler för att uppnå rätt avstånd mellan varje heliumdetektor, centrering av detektorerna samt korrekt ventilationsöppningar. Den moderna mätmetoden bestod av data som genererades från heliumdetektorerna. Detektorerna var sammankopplade med varandra samt en dator som visade mätvärdena detektorerna avläste. Detta möjliggjorde en övervakning i realtid, vilket gjorde det lättare att upptäcka tekniska problem.

För att uppnå en centrering och erforderlig höjd av detektorerna, konstruerades två separata stativ. Det långa stativet skapades med syftet att centrera detektorerna i heliumplymens centrumlinje på dess angivna höjd upp till 1,9 m över utsläppskällan se Figur 19. Ett befintligt stativ användes och trälister fästes med aluminiumtejp respektive heliumdetektors höjd. För att hålla detektorerna stabila användes buntband för att spänna dem på trälisterna. Det korta stativet skulle hålla detektorerna på sina respektive höjder mellan 0,1m - 0,7m över golvet inne i ISO rummet. Därmed användes samma metoder som för det förra stativet dock med ett mindre befintligt stativ, se Figur 18.



Figur 18. Visar Stativ för detektorerna till Fall 3 och Fall Figur 19. Visar Stativ för heliumdetektorerna till Fall 2. 4.

4.2.4 Geometri och ventilation (Lådan)

Lådan användes i den del av experimentet som undersöker hur väl helium ventileras ur ett utrymme. Det gjordes tester med tre olika ventilationsförutsättningar, se Tabell 4 och Tabell 5. Lådan hade en befintlig stor öppning på ena framsidan och ett mindre på ena långsidan. För att uppfylla ventilationsförutsättningarna för rummet användes en spånskiva för att täcka över den stora öppningen. Genom experimentets gång sågades skivan med en kontinuerligt större öppning för att uppfylla kravet på ventilation för respektive fall. För de tester som krävde mindre ventilation än de befintliga öppningarna, användes aluminiumtejp för att uppnå dessa ventilationsareor. Aluminiumtejp användes även för att täta de springor mellan spånskivan och lådan.

Tryckavlastningen (A1) består av ett hål med dimensionen 60x30 mm² placerat i mitten av geometrins kortsida, 20 mm från botten. Mindre ventilation (A2) består av 2 hål. Båda har dimensionerna 60x30 mm², den ena placerat i mitten av geometrins kortsida, 20 mm från botten. Den andra i mitten på geometrins långsida, 10 mm från toppen. Större ventilation (A3) består av 2 hål med dubbelt så stor area som för mindre ventilation, det vill säga 60x60 mm² och har placerat på identiskt sätt som för testet med mindre ventilation.

Tabell 4. Ventilationsarean för till- och frånluftöppningarna i de olika testerna för Fall 3.

Fall 3					
Test	Tilluftsarea (m ²)	Frånluftarea (m ²)			
3-A1	0,0018	-			
3-A2	0,0018	0,0018			
3-A1	0,0036	0,0036			

Tabell 5. Ventilationsarean för till- och frånluftöppningarna i de olika testerna för Fall 4.

Fall 4						
Test	Tilluftsarea (m ²)	Frånluftarea (m ²)				
4-A1	0,0018	-				
4-A2	0,0018	0,0018				
4-A3	0,0036	0,0036				





Figur 22. Visar Lådan liten ventilation.



Figur 21. Visar Lådan endast tryckavlastning.



Figur 23. Visar Lådan stor ventilation.

4.2.5 Försöksserie

För att kunna besvara arbetets frågeställning behövdes experiment utföras med så identiska förutsättningarna som möjligt till den FDS-modell som byggs upp senare i arbetet. De fallen som skulle valideras mot experimentdata, bestämdes i 4.1 och byggdes upp. Alla experiment utfördes i brandlabbet, lokaliserad i V-huset på Lunds Tekniska Högskola med övervakning av handledare. Se Tabell 6 för en lista över utförda experiment.

Fall-Försök	Munstycke Diameter (mm)	Massflöde (SLPM)	Uppställning	Tid (s)
2-A	27,5	100	Fritt, centrumlinje	180
3-A1	27,5	100	Lådan, tryckavlastning	300
3-A2	27,5	100	Lådan, liten ventilation	300
3-A3	27,5	100	Lådan, stor ventilation	300
4-A1	5,5	170	Lådan, tryckavlastning	180
4-A2	5,5	170	Lådan, liten ventilation	180
4-A3	5,5	170	Lådan, stor ventilation	180

Tabell 6. Beskriver försöksuppställningen för respektive experiment.

Fall 2 - Jetutsläpp med hinder (2-A)

För att bygga upp Fall 2 som beskrivs i 4.1 behövdes parametrar bestämmas. Massflödet bestämdes till 100 SLPM genom hela försökstiden, vilket genom en öppningsdiameter på 27,5 mm genererar en hastighet om 2,81 m/s. Det är en relativt låg hastighet som var i linje med beskrivningen för Fall 2. Då syftet med fallet var att validera modellens förmåga till koncentrationsavtagande över höjd och den maximala höjden som kunde experimenteras på var 2 meter (på grund av fläkten). Det bestämdes därefter att detektorerna centrerades över utsläppet på avståndet 0,3, 0,7, 1,1, 1,5 och 1,9 meter över utsläppet. Då experimentet inte innefattar en ansamling av gaser i ett utrymme, antogs det att steady-state uppnås relativt tidigt och experimenttiden bestämdes därefter till 180 sekunder. Se Figur 24 för generell beskrivning av försöksuppställningen.



Figur 24. Visar generell försöksuppställning för Fall 2.

Fall 3 – Jetutsläpp med stor öppning i utrymme (3-A1, 3-A2, 3-A3)

För att bygga upp Fall 3 som beskrivs i 4.1 behövdes parametrar bestämmas. Massflödet bestämdes till 100 SLPM genom hela försökstiden, vilket genom en öppningsdiameter på 27,5 mm genererar en hastighet om 2,81 m/s. Det är en relativt låg hastighet som var i linje med beskrivningen för Fall 3. Då syftet med fallet var att validera modellens förmåga till ansamling och ventilering i ett avgränsat utrymme bestämdes det att detektorerna hängdes upp på ett stativ med avstånden 0,1, 0,3, 0,5, 0,6 och 0,7 meter som sedan placerade i ett av rummets hörn. Då experimentet innefattar en ansamling av gaser i ett utrymme, antogs det att steady-state uppnås i ett senare skede än för Fall 2 och experimenttiden bestämdes därefter till 300 sekunder. Se Figur 25 för generell beskrivning av försöksuppställning.



Figur 25. Visar generell försöksuppställning för Fall 3.

Fall 4 – Jetutsläpp liten öppning i utrymme (4A1, 4A2, 4A3)

För att bygga upp fall som beskrivs i 4.1 behövdes parametrar bestämmas. Massflödet beräknades till 170 SLPM genom hela försökstiden, för beräkning av massflödet, se Bilaga A. Ett massflöde om 170 SLPM genom en öppningsdiameter på 5,5 mm genererar en hastighet om 128,3 m/s. Det är relativt hög hastighet i jämförelse med de tre tidigare fallen som var i linje med beskrivningen för Fall 4. Då syftet med fallet var att validera modellens förmåga till ansamling och ventilering i ett avgränsat utrymme. Bestämdes det att detektorerna hängdes upp på ett stativ med stativ med avstånden 0,1, 0,3, 0,5, 0,6 och 0,7 meter som sedan placerades i ett av rummets hörn. Experimenttiden var den samma för som alla tester för Fall 3 enligt samma resonemang. Se Figur 26 för generell beskrivning av försöksuppställning.



Figur 26. Visar generell försöksuppställning för Fall 4.

4.3 Uppställning av modellen i FDS

I detta avsnitt beskrivs hur CFD-modellen i FDS har byggts upp. Applicering av den beskrivna teorin utförs och antaganden motiveras. Genomlöpande beskrivs förutsättningarna för modellen på ett kategoriskt vis. Koderna för modellen är tillgängliga på Github¹

4.3.1 LUNARC och Aurora

Förutom att det finns begräsningar med FDS, som beskrivs i 3.6, så kommer LUNARC och Aurora begränsa förutsättningarna för modelluppbyggandet. Modellen i detta arbete förväntas kräva en kraftfull hårdvara för att simulera, därmed kommer LUNARC att användas för att undvika icke praktiska simuleringstider som kan uppstå på vanliga datorer. LUNARC är Lunds Universitets vetenskapliga center för teknisk beräkning. Aurora är ett datorkluster uppbyggt av 250 noder som styrs och underhålls av LUNARC. Varje nod består av 2 processorer som därefter består av 10 kärnor. Auroras primära syfte är att utföra simuleringar och andra beräkningar för stora arbeten inom Lunds Universitet. En begränsning med LUNARC är att ett arbete endast får ta 7 dagar att utföras. Om en simulering som skickas in tar längre tid, kommer LUNARC att avbryta simuleringen. Därmed måste simuleringarna av modellen anpassas för att hålla sig inom tidsramen.

4.3.2 Utsläppet

Utsläppet behöver definieras i FDS för att erhålla representativa mätvärden. Nedan beskrivs relevanta förutsättningar gällande utsläppet. Jetutsläpp i utrymme med liten öppning (Fall 4) isoleras nedan, då teorin från 3.7 behövde appliceras.

Fall 1, 2 och 3

Syftet för Fall 1 var att påvisa att den teori som motiverats kring hur koncentrationerna avtar med höjder för utsläppet var korrekt. För att kunna använda teorin kring round jet behövdes en så cirkulär öppning som möjligt representeras. Ekvation 1 som berör koncentrationsavtagande har som randvillkor att utsläppet ska vara cirkulärt för att Ekvation 1 ska vara giltig. Då Fall 2 och Fall 3 valideras mot experiment var det praktiskt att tillämpa en öppningsarea för utsläppet av samma storlek. Detta beslutades till en öppningsdiameter om 27,5 mm i diameter, vilket motsvarar en area om 593,96 mm², som ansågs vara adekvat. I och med de begränsningar som CFD-programmet har, var det inte möjligt att utforma en komplett cirkulär öppning, se Figur 27 och Figur 28. Detta resulterade i att öppningsarean i FDS blev 600 mm², vilket beskrivs mer i 4.3.4.

Förutom att de teoretiska koncentrationsberäkningarna antar ett cirkulär öppning, så var det viktigt att ansätta det så cirkulärt som möjligt för att FDS ska kunna beräkna en korrekt spridning och luftinblandning. Detta för att i slutändan ge modellen optimala förutsättningar för att beräkna spridningen med en så bra precision som möjligt och erhålla jämförbara resultat. Utsläppets startpunkt bestämdes till 0,1 meter ovan golvet. FDS erhåller förinställda egenskaper hos olika fluider, vilket inkluderar gasen helium som användes i modellen. Volymflöde bestämdes till 100 SLPM i försöksuppställningen för experiment. FDS godtar massflux som indataparameter som randvillkor för utsläppet. Massflux för dessa fall resulterade i 0,495 kg/m²s, se Bilaga A.

¹ https://github.com/fdskoder/FDS



Figur 27. Beskriver öppningens placering i geometrin i FDS för Fall 3 och 4 (2D).



Figur 28. Beskriver öppningens utformning i FDS (3D).

Fall 4

För Fall 4 bestämdes en mindre öppningsstorlek och ett högre massflöde. Begränsningar i tid och resurser för arbetet resulterar i att teori kring jetutsläpp behöver appliceras. Den teori som appliceras nedan återfinns i 3.7.

Den egentliga diametern (D_N) för Fall 4 motsvarar 5,5 mm och den ekvivalenta diametern bestämdes till 27,5 (D_{eq}) mm. Detta beslut beror delvis av att samma mesh kunde användas, men även på grund av jämförbarheten med Fall 3 som skapas när samma diameter används. Genom tillämpning av Ekvation 7 och Figur 6 resulterade detta i att avståndet mellan den egentliga diametern (D_N) och den ekvivalenta diametern (D_{eq}) motsvarar 0,122 m, se Bilaga A.

Utsläppet i Fall 4 sker i form av ett jetutsläpp högre hastigheter än för de föregående fallen. Utsläppet i Fall 4 karaktäriseras av att den är mer tröghetsdominerad än för Fall 1, 2 och 3. Detta kan avläsas i Tabell 2 genom att identifiera skillnaden i Froudes tal.

Vid den ekvivalenta diametern som ligger 0,122 meter från den egentliga utsläppskällan, förväntas en viss luftinblandning. Tabell 7 är en modifikation på Tabell 1 givet att koncentrationen helium i utsläppet vid ekvivalenta utsläppspunkten är 9,38 %, vilket beräknas i Bilaga A. För att beräkna det ekvivalenta massflödet helium beräknades ett nytt c, vilket är beroende av heliumluftblandningen, som i sin tur resulterade i 361,2 m/s, se Bilaga A.

I Tabell 7 påvisades det att machtalet 0,025 erhöll hastigheter som understeg riktvärden om 100 m/s, vilket i sin tur resulterade i det dimensionerande värdet på machtal för att beräkna andra ingångsparameterar till det ekvivalenta utsläppet. Ytterligare en faktor till tillämpningen av 0,025 var att massflödeskontrollern teoretiskt maximala massflöde inte skulle påfrestas. Detta säkerställde att experiment kunde utföras. I studien skriven av Rengel et al. (2019) prövades tillämpning av machtal

0,025 och genererade goda resultat. Machtalet $0,0252^2$ valdes och la grunden till de ingångsparametrarna för det ekvivalenta utsläppet.

<i>M</i> _a (-)	1	0,8	0,6	0,4	0,2	0,1	0,05	0,025
u_e (m/s)	361,2	289,0	216,7	144,5	72,2	36,1	18,1	9,0

Tabell 7. Beskriver hur hastigheten varierar med varierande machtal och c konstant (361,2 m/s).

Ytterligare en parameter gällande utsläppskällans förutsättningar i FDS är att beräkna startkoncentrationen vid den ekvivalenta diametern, då luftinbladning sker under transportsträckan 0,122 m.

Massflödet helium i vid den egentliga utsläppskällan är lika stor som vid den ekvivalenta utsläppskällan. Volymflöde beräknades till 170 SLPM, vilket beskrivs försöksuppställningen för experiment, se Bilaga A för beräkning. Massflux beräknades till 0,849 kg/m²s, se Bilaga A. För att uppnå korrekta hastigheter i det ekvivalenta utsläppet i FDS behövde mängden helium och luft tas hänsyn till. Det vill säga för att uppnå hastigheten runt 9 m/s bestod utsläppet av 9,38 massprocent helium och 90,62 massprocent luft. I Tabell 8 nedan beskrivs skillnaderna i förutsättningarna för utsläppet i FDS och experiment för Fall 4.

Tabell 8. Beskriver skillnader i förutsättningar mellan FDS och experiment för Fall 4.

Fall 4	Öppningsdiameter (mm)	Utsläppshöjd (m)	Utsläppets sammansättning (massprocent)
FDS	27,5	0,225	9,38 helium / 90,62 luft
Experiment	5,5	0,1	100 helium / 0 luft

4.3.3 Geometri och ventilation

För att efterlikna de utförda experimenten behövdes geometri och ventilation introduceras, samt hur de byggdes upp i FDS. För jetutsläpp utan hinder och jetutsläpp med hinder krävdes ingen ventilation. Nedan beskrivs relevanta förutsättningar gällande geometrin och ventilationen för de aktuella fallen.

Fall 1 och Fall 2

För Fall 1 och Fall 2 fanns det inget direkt behov av omgivande geometri eller ventilation då syftet för de mindre komplexa fallen var att kontrollera hur väl FDS mäter koncentrationer över höjd. Den nödvändiga geometrin för Fall 1 och Fall 2 visas i Figur 29 och Figur 30 nedan. De blocken som befinner sig ovan utsläppskällan i Figur 30 representerar heliumdetektorer. Blocken har dimensionerna 35*65*10 mm³. Dessa dimensioner efterliknar de av den verkliga detektorns så bra som möjligt för att även stämma överens med den befintliga cellstorleken i modellen.

² Vid experiment planerades ett utsläpp med diameter på 5,3 mm. På grund av stort tryckfall användes ett nytt utsläpp med diameter på 5,5 mm. Då experiment endast kunde utföras en gång, kalibreras machtalet från 0,025 till 0,0252.



Figur 29. Geometrin för Fall 1.



Figur 30. Geometrin för Fall 2.

Geometri - Fall 3 och Fall 4

För Fall 3 och Fall 4 skedde utsläppen i ett avgränsat utrymme. Eftersom tidigare nämnda Lådan användes i experimentdelen, byggdes en liknande geometri upp i PyroSim. Dimensionerna för Lådan var 0,8*1,2*0,8 m³ och dess uppbyggnad i PyroSim visas i Figur 31 och Figur 32. Dimensionerna för golv, tak och väggar kan hittas i Tabell 9. Eftersom värmeöverföring är mindre relevant i detta arbete, sattes golv, tak och väggar till inerta.

Dessa fallen krävde även ventilation krävdes ventilation som bestämdes till att ske genom naturlig ventilation. Därmed skapades två hål i rummet som visas i Figur 31. Det utfördes med funktionen "hole", vilket innebar att hål skapas där fritt flöde kan verka. Vidare sattes de meshgränser som inte gränsar till andra mesher till "open", vilket innebar att gaser kunde flöda genom mesh-gränserna. Det betyder även att vanligt atmosfärstryck (1 bar) verkade på omgivningen, vilket resulterade i ett naturligt flöde genom ventilationen på den avgränsade geometrin. För att få bra möjligheter att validera modellen mot experimentdata kommer ventilationen i respektive fall att variera enligt förbestämda värden, se och . Det första testet för respektive fall simuleras utan ventilation och blev endast angivet ett hål för tryckavlastning. De andra testerna har varierande ventilationsarea.





Figur 31. Geometrin för Fall 3 och 4. Utsidan.

Figur 32. Geometrin för Fall 3 och 4. Insidan.

Tahe	119	Dim	ensioner	förr	de	hvggdelar	som	ingår i	geometrin	för	Fall 3	3 och	4
Iuve	11 /.	Dun	ensioner	<i>j011</i>	ue	Dyggueiur	som	ingui i	geomenni	101	I un s	, ocn	-

Byggdelar	Dimensions (m ²)	Tjocklek (m)
Golv/tak	0,8*1,2	0,04
Väggar kortsidan	0,8*0,8	0,04
Väggar långsidan	1,2*0,8	0,04

4.3.4 Mesh

Kortfattat beskrivet så är en mesh en avsett 3-dimentionell geometri i en simulation där programmet utför beräkningar. Meshen är uppbyggd av ett visst antal celler där beräkningarna baseras på konserveringsekvationerna för varje cell. Som grundregel utför en cell en beräkning (CFL \approx 1) inom tidsintervallet och beräknar förändringar till nästa cell. Följaktligen ger mindre celler mer noga beräkningar. Däremot resulterar det i fler celler inom geometrin och om meshen har för många celler kan de orsaka för stor belastning på hårdvaran under simuleringen. Motsatsen är om meshen har för stora celler kan systemet missa vissa förändringar i värden mellan celler såsom

hastighetsförändringar, som i sin tur kan ge ett icke representativt resultat (McGrattan et al., 2018). Därmed är det viktigt att använda ett rimligt antal celler i modellen. Eftersom arbetet hanterar läckage, var det arean och geometrin på utsläppsöppningen som dimensionerade antalet celler och dess storlek. Detta eftersom ett visst antal celler bör täcka öppningen för att systemet ska beräkna rimliga värden på de efterfrågande utdataparametrarna. Vidare måste öppningen endast innefatta hela celler. Det innebär att cell inte kan brytas på mitten och både befinna sig inom och utanför öppningen. Detta är en förutsättning för FDS som är en tumregel vid uppbyggnad av vilket system som helst. En annan förutsättning i FDS är att programmet är känsligt mot icke kubiska former. Därmed har utsläppsöppningen formats, se Figur 33, för att efterlikna en cirkulär öppning. Idealt för utformningen av fallens modell, bör öppningens storlek innehålla 24st celler. Därefter kunde cellernas storlek bestämmas.



Figur 33. Visar cellerna som täcker utsläppsöppningen.

För att minska belastningen på LUNARC (se 4.3.1) och förhålla sig inom tidsramen för max en veckas simuleringstid, har geometrin delats upp i flera mesher med olika cellstorlek. Eftersom hastighets- och koncentrationsförändringarna är som störst i plymen nära utsläppsöppningen, valdes finare mesher i de områden för att få så noga värden som möjligt. De omgivande mesher behöver inte en lika fin cellstorlek. Här förekommer ytterligare två av känsligheterna i FDS. Två mesher som gränsar till varandra måste ha sina celler parallellt uppställda mot varandra enligt Figur 34. FDS accepterar inte heller ett för stort hopp i cellstorlek för de angränsande mesher (McGrattan et al., 2022). En parallell uppställning på 1:2 är optimalt, enligt Figur 35. Denna anpassning är till för att undvika problem för simuleringstiden om endast en kärna i LUNARC tar emot hela modellen. För att förhålla sig inom tidsramen för simuleringen på LUNARC, krävdes en uppdelning av mesherna till var sin kärna. För att undvika att en simulation ska ta flera dagar bör en mesh ligga under ett cellantal på 300 000 celler, vilket kan resultera i ytterligare meshuppdelning för att uppfylla det cellantalet. Vidare har de fyra fallen i arbetet olika syften, vilket resulterar i olika utformningar på mesherna.



Figur 34. Två mesher med samma cellstorlek som gränsar till varandra som FDS accepterar.



Figur 35. Två mesher med olika cellstorlek som gränsar till varandra som FDS accepterar.

Fall 1 och Fall 2

Eftersom syftet med dessa fall endast var att jämföra koncentrationsavtagandet från FDS simuleringar med handberäkningar respektive experiment, kommer samma mesh att användas för båda fallen. Därmed kommer gaserna inte ansamlas i ett rum, utan stiga uppåt i en teoretisk oändlighet. Öppningen för utsläppet har en diameter på 27,5 mm, vilket ger en area på 593,96 mm². För att få modellen bättre anpassad till programmet avrundades arean till 600 mm². För att täcka öppningen med 24 celler enligt Figur 33, bör de överlappande cellerna ha en storlek på 5*5*5 mm³ handberäkningar för koncentrationer med utdata från FDS, bestod fallet endast av utsläppet. De dimensioner som klustret av mesher fick var 1,04*1,04*2,4 m³. Därefter delades meshen upp i 20 mindre mesher med olika cellstorlekar för att minska belastningen på LUNARC. Mesherna som fångar upp centrumlinjen av heliumplymen består 12st fina mesher uppradade på höjd. De resterande 8 mesherna är grövre och

omger de mer fina mesherna, se Figur 36 och Figur 37. Cellstorlek och dimensioner för mesherna i Fall 1 och Fall 2 kan hittas i Tabell 12, se Bilaga B.





Figur 36. Meshklustret för Fall 1 och 2. Bild från ovan.

Figur 37. Meshklustret för Fall 1 och 2. Bild från Sidan.

Vidare bör det undersökas hur stor påverkan cellstorleken i mesherna har på resultatet. Därmed kommer ytterligare simulationer att skickas in till LUNARC med en minskning på cellstorleken. För att vara i linje med de förutsättningar som nämnts tidigare, kommer cellstorleken att halveras för respektive mesh. Det ger cellstorleken 2,5*2,5*2,5 mm³ i den finaste delen av meshklustret, vilket resulterade i att antalet celler ökade med en faktor åtta. Trots detta faktum skickades den finare simulationen in för undersökningens skull. Information kring meshklustret kan hittas i Tabell 13, se Bilaga B.

Fall 3 och Fall 4

Dessa fall innefattade heliumansamling i ett utrymme med naturlig ventilation. Därmed skiljer sig utformningen på meshklustret från den av de två förra fallen då deras syfte även skiljer sig. Eftersom fallen innefattar gasansamling bör även mesherna vara större än rummet så att systemet ska kunna beräkna de flöden som sker genom ventilationsöppningarna. Därmed valdes dimensionerna för klustret av mesher till 1,08*1,48*0,8 m³ (1*b*h). Klustret delades upp i 18st mindre mesher. Likt meshen från de förra fallen är de mesher som täcker utsläppsöppningen och heliumplymen de finaste i cellstorlek. Eftersom även dessa fall simuleras med en utsläppsdiameter på 27,5 mm, är de täckande cellstorleken 5*5*5 mm³. Därefter skapades ett omgivande lager av grövre mesher. För att förhållas inom rimliga gränser för LUNARC delades de fina mesherna upp till 10st och de grövre till 8st, se Figur 38 och Figur 39. Mer information angående mesherna för Fall 3 och Fall 4 kan hittas i Tabell 14, se Bilaga B.



Figur 38. Meshklustret för Fall 3 och 4. Bild från ovan.

Figur 39. Meshklustret för Fall 3 och 4. Bild från Sidan.

4.3.5 Utdata

Detektorer användes i för att mäta koncentrationsnivåerna i olika punkter för fallen. I FDS finns funktionen "device" som kan ansättas till olika slags teknologiska anordningar för att kontrollera, mäta eller hantera en eld, exempelvis detektorer och sprinkler. Praktiskt nog fanns det detektorer som mätte heliumkoncentrationer, vilket tillämpades för att mäta heliumkoncentrationer i punkter.

Fall 1 och Fall 2

För Fall 1 var det endast intressant att se hur koncentrationen avtar i FDS-modellen upptill den valda höjden på 2,4 m och därför ansattes 14 detektorer för att få tillräckligt med data för att validera mot de teoretiska beräkningarna, se Figur 40.

För Fall 2 var det intressant att undersöka om detektorernas placering påverkar koncentrationsresultatet då de tar upp en fix yta och kan störa utsläppets spridning över höjd. Därför ansattes fem detektorer under plattor som motsvarar den yta en detektor antas ta upp, se Figur 41.



Figur 40. Mätpunkter för Fall 1.



Figur 41. Mätpunkter för Fall 2.

Fall 3 och Fall 4

För Fall 3 och 4 var det mest intressanta att undersöka hur helium ansamlas i Lådan vid olika höjder, under olika ventilationsförhållanden. Därmed skapades en uppradning av mätpunkter i hörnet längst in i Lådan se Figur 42. Gruppen omfattade 7 mätpunkter som sattes med jämnt intervall mellan höjden 0,1-0,7 m över golvet. Anledningen till att detektorgruppen fick den placeringen var att ventilationsöppningarna antogs ha som minst påverkan på flödet. Dessutom kördes en testsimulering med två olika detektorgrupper som ytterligare styrker argumentet om detektorgruppens placering, se Bilaga C.



Figur 42. Placering av mätpunkter i Lådan.

5 Resultat

DNedan redovisas resultaten från simuleringar och experiment. För ytterligare information, illustrationer och figurer om resultaten, se Bilaga C.



5.1 Fall 1 – Resultat från FDS jämfört med handberäkningar

5.2 Fall 2 – Resultat från FDS jämfört med experiment





5.3 Fall 3 – Resultat från FDS jämfört med experiment



5.4 Fall 4 - Resultat från FDS jämfört med experiment





6 Diskussion

I detta avsnitt kommenteras, jämförs och diskuteras resultaten från FDS-simuleringarna och experimentförsöken. Därefter generell diskussion kring felkällor.

6.1 Fall 1 – Jetutsläpp utan hinder

Figur 43 visar att resultaten från FDS ställt mot handberäkningar. En uppenbar skillnad i koncentrationsnivåerna kan ses vid de lägre höjderna över utsläppskällan. Däremot kring höjden 0,9 m börjar skillnaderna mellan handberäkningsteori och resultatet från FDS bli allt mindre och mer efterliknande.

Det finns en del tänkbara anledningar till att resultatet mellan Fall 1, handberäkningar mot FDS, har variationer i mätresultaten. Handberäkningarna är generellt ett försökt att representera verkligheten. Ekvation 1 grundar sig i experimentella försök och därefter har den bästa approximationen skapats, men även ekvationer har sina brister.

Simuleringsprogrammet FDS är ytterligare ett sätt att beskriva verkliga fenomen. Även FDS har sina begräsningar, vilket kan vara en anledning till att resultaten skiljer vid mindre avstånd över utsläppet. Ett exempel på detta är att den största delen av luftinblandningen sker vid korta avstånd från utsläppskällan, vilket är svårt att hantera då cellstorlek begränsas av beräkningskapacitet som kan ge mindre representativa resultat för värden närmare utsläppskällan under användning av för stora celler.

Ekvation 1 grundar sig i att utsläppet består av en perfekt cirkulär öppning vilket inte är möjligt i FDS på grund av de begränsningar som redovisas i 3.6, vilket skulle kunna ge skillnader i resultaten mellan handberäkningar och FDS. Det som kan konstateras är om en trendlinje anpassas från utsläppets punkt vid 100 volymprocent helium till vilken given punkt som helst efter 0,9 m, så kommer de påvisa mer eller mindre samma koncentrationsavtagande per längdenhet, se Figur 56. Detta påvisar att FDS har förmågan att ta hänsyn till de koncentrationsavtaganden över höjd som faktiskt sker vid ett utsläpp av denna typ.

Vid simuleringsförsök av Fall 1 skapades ett meshkluster som ansågs grövre och ett finare med hänsyn till cellstorleken, där antal celler var 8 gånger så högt i den som ansågs fin. Skillnaderna i resultaten presenteras i Figur 43 och påvisar att koncentrationer av helium för avstånd nära utsläppskällan skiljer sig. Detta är med största sannolikhet beroende av att en mer representativ luftinblandning tillåts. Det som kan konstateras är att båda FDS-resultaten efterliknar varandra efter avståndet 0,3 m över utsläppskällan.

För syftet av arbetet är det inte nödvändigt att bestämma koncentrationer i nära anslutning till utsläppskällan. Det som intresserar författarna är hur väl FDS kan ta hänsyn till koncentrationsavtagande över höjd, vilket programmet klarar av i avstånd där den största delen av luftinblandningen har skett.

6.2 Fall 2 – Jetutsläpp med hinder

Figur 57 i Bilaga C jämförs resultaten för Fall 2 mot Fall 1 i FDS. Det vill säga när det finns detektorer med en volym i centrumlinjen ovanför utsläppskällan jämfört med endast mätpunkter utan volym. Resultatet påvisar en minimal skillnad för heliumkoncentrationen oavsett vilken höjd som jämförs.

Figur 58 visar att jetflödet blir påverkad av detektorns volym. Däremot visar Figur 59 att när jetutsläppet har uppnått steady-state, påverkas inte jeten av att detektorer är placerade i centrumlinjen av plymen. En möjlig anledning till att resultaten i Figur 57 är så pass lika är densitetsskillnaden mellan helium och luft. Som beskrivits i avsnitt 3.3, stiger gaser som har lägre densitet än det omgivande mediet. Eftersom densitetsskillnaden är stor mellan helium och luft, strävar heliumet uppåt genom den snabbaste vägen. Därför kommer heliumet att färdas runt obstruktionerna (detektorerna), utan att bryta den snabbaste vägen uppåt, och resulterar därmed inte i någon signifikant påverkan på de uppmätta koncentrationerna i centrumlinjen. Ett annat möjligt skäl är att detektorerna inte är placerade tillräckligt nära utsläppskällan för att göra en signifikant skillnad. Möjligheten finns att koncentrationsnivåerna senare i centrumlinjen hade blivit mer påverkade om detektorer hade placerats närmare utsläppskällan där högre koncentrationsnivåer uppnås.

Figur 44 visar resultatet mellan experiment och FDS-simulationerna för Fall 2. Rent generellt så visar den uppmätta experimentdata och mätvärden från FDS på lika värden i alla mätpunkter. Nedan följer diskussion kring resultatet.

En intressant del av resultaten mellan experiment och simuleringar som visas i Figur 44 är hur grov och fin mesh förhåller sig till den experimentella data. Den största skillnaden i volymprocent identifieras i den mätpunkt som lokaliseras 0,3 m över utsläppskällan där skillnader mellan experimentdata och simuleringar uppgår mot 4,15 procentenheter för grov mesh och 1,5 procentenheter för fin mesh. Dessutom identifierades den procentuella skillnaden mellan experiment och simuleringar. Den experimentella mätpunkten som utsattes för störst procentuell skillnad mot FDS-resultaten var den längst bort (1,9 m) över utsläppskällan. Den maximala skillnaden uppgick mot 30,7 % mot fin mesh och 39,4 % mot grov mesh.

Tabell 10. Visar skillnader mellan experiment och FDS i procentenheter.

Skillnad mellan	Skillnad mellan	Höjd
experiment och	experiment och	över
FDS fin mesh i	FDS grov mesh i	utsläpp
procentenheter	procentenheter	(m)
(vol%)	(vol%)	
1,6	4,15	0,3
1,3	2,8	0,7
0,55	0,13	1,1
0,24	0,61	1,5
0,85	0,99	1,9

Tabell 11. Visar den procentuella skillnaden mellan experiment och FDS.

Procentuella	Procentuella	Höjd
skillnaden	skillnaden	över
mellan	mellan	utsläpp
experiment och	experiment och	(m)
FDS fin mesh	FDS grov mesh	
(%)	(%)	
4,1	11,2	0,3
10,0	24,3	0.7
8,6	2,2	1,1
5,9	16,5	1,5
32,1	39,4	1,9

Resultaten från Tabell 10 och Tabell 11 visar skillnaderna i procentenheter och den procentuella skillnaden. Lägst är den skillnad mellan experiment och FDS som uppstår när meshen är fin (fler celler), vilket indikerar att finare mesh ger resultat som bättre reflekterar verkligheten. Detta är något som kan förväntas med arbete som involverar CFD-simuleringar. Fler celler tillåter en mer adekvat

luftinblandning att ske i nära anslutning till utsläppskällan och därmed ger mer korrekta resultat. Vid högre hastigheter blir det desto viktigare med en lämplig mesh, för att uppnå representativa resultat.

Endast fem experimentella mätpunkter kunde jämföras mot FDS, på grund av ekonomiska begränsningar. Trots att dessa fem mätpunkter visar lika resultat mellan experiment och FDS, hade varit intressant att mäta koncentrationen över fler höjder men i brist på tid och resurser var detta inte möjligt. Därmed saknas informationen kring hur likt FDS är verkligheten på att fånga upp koncentrationsnivåer i centrumlinjen av en heliumplym på ett avstånd närmare än 0,3 m från utsläppskällan. Dock anses de resultaten som inskaffats vara tillräckliga för att dra slutsatsen att FDS är ett verktyg som väl kan representera hur koncentrationsnivåer avtar över höjd i ett jetutsläpp.

Ytterligare kan det vara intressant att jämföra hur FDS står mot resultatet från handberäkningar som visas i Figur 43. Eftersom Figur 57 visar att det blir en liten skillnad i FDS mellan Fall 1 och Fall 2, möjliggörs denna jämförelse. Vid de högre höjderna, 1,1 m och över, är resultaten lika. Däremot vid mätpunkterna 0,3 m och 0,7 m visas skillnader. Tidigare har det konstaterats att handberäkningar ger mindre representativa värden vid höjder närmare utsläppskällan. FDS resultaten däremot, ger värden mer lika de experimentella resultaten. Detta visar att FDS är ett verktyg som bättre speglar verkligheten än handberäkningar för ett fall av denna enkla komplexitet.

6.3 Fall 3 – Jetutsläpp med stor öppning i utrymme

Alla resultat från Fall 3 visar på spridning av helium i ett utrymme där utsläppskällan hade en diameter om 27,5 mm. Figur 45, Figur 46 och Figur 47 jämför resultaten från FDS simuleringar mot de av experimenten med olika förutsättningar i ventilation.

Utifrån de olika ventilationsförutsättningarna har test 3-A3 med störst ventilationsarea de mest liknande resultat mellan FDS och experiment, se Figur 47. För mäthöjderna 0,5 m - 0,7 m uppnår den största skillnaden på fyra procentenheter efter 150 sekunder, som därefter stabilt bibehåller denna skillnad för den resterande utsläppstiden. Vid mäthöjden 0,3 m ser koncentrationsnivåerna ut att sträva mot varandra för experiment och FDS efter 150 sekunder. Test 3-A2 med mindre ventilationsarea uppnår tydligt högre koncentrationsnivåer jämfört med test 3-A3. Däremot uppnås även en större skillnad mellan FDS och experiment för detta test, som ligger kring 7–8 procentenheter. Denna skillnad visas för alla mäthöjder, förutom vid höjden 0,1 m. För test 3-A1, med endast tryckavlastning, uppnås en skillnad på 16 procentenheter mellan FDS och experiment. Resultaten ser ut att vidare öka i skillnad om utsläppstiden hade varit längre. En annan tydlig skillnad är att FDS ger en koncentrationsnivå på 30 procentenheter högre än den av experiment vid mätpunkten 0,1 m.

Något som uppmärksammades med resultaten från FDS, var att oavsett ventilationsförutsättningar så överskattade FDS koncentrationsnivåerna mot de uppmätta experimentella koncentrationsnivåerna. Brzezińska (2021) delar samma uppfattning om FDS:s förmåga att överskatta koncentrationsnivåerna och förklarar fördelen med detta ur ett dimensioneringsperspektiv. Då det kunde tänkas vara för få celler över ventilationsöppningarna i modellen, test Fall 3-A2 simulerades med en halverad cellstorlek i mesherna som täcker från- och tilluftsöppningarna. Resultatet visar att FDS bibehåller sin överskattning och att ventilationsflödet inte limiterades av antalet celler över öppningarna, se Figur 60 i Bilaga C. Om CFD-programmet överskattar koncentrationsnivåer i utrymmet leder detta till en indirekt extra säkerhetsmarginal vid dimensionering av ventilation. En överskattning av koncentrationsnivåer för båda modellerna utesluter inte att det finns sätt att bygga upp en modell på, där effekterna skulle kunna avta eller bli de motsatta.

Först fanns funderingen om att utsläppet i FDS tillförde mer helium än det i experimentet. Däremot med tanke på att resultaten för alla ventilationsförutsättningar mellan FDS och experiment är lika i början av utsläppet men sedan skiljer sig alltmer över tid, borde det tyda på att FDS i stället underskattar flödena genom ventilationen. Med större ventilationsarea ger FDS ett mer representativt resultat, men med mindre ventilation ger FDS en större överskattning för koncentrationsnivåerna. Förutsatt att det finns en god förkunskap kring FDS samt vätgasrelaterade fenomen finns det goda möjligheter att skapa en FDS modell som generellt sett överskattar koncentrationsvärden i ett utrymme, vilket är fördelaktigt vid dimensionering av ventilation av brännbara gaser. Dock ur ett vetenskapligt perspektiv är det mest intressant att vara så nära resultatet som möjligt.

Den trend som har identifierats om att FDS representerar koncentrationsnivåer bättre när ventilationsarean ökar är positivt. För att knyta an till frågeställningen som handlar om nödvändig ventilationsarea, det vill säga när ventilationsarean kan upprätthålla koncentrationsnivåer under LFL. I de experiment och simuleringar som har undersökts har ventilationsarean inte optimerats utan mer en undersökning om att validera en FDS-modell. Om en optimering skulle utföras så krävs en betydligt större ventilationsarea förutsatt att flödet av gasen är densamma. Detta indikerar på att FDS borde ha en högre precision vid dimensionering av nödvändig ventilationsarea.

Den generella uppbyggnaden, oavsett fall, var att ha finare mesh i mitten av modellen och grövre ju längre bort från utsläppskällan. Något som borde beaktats var antalet celler som verkade över ventilationsöppningarna. Detta hade i sin tur tillåtit en mer korrekt ventilering och därmed gett mindre skillnader mellan simuleringar och experiment. Om den nuvarande ventilationen underskattade mängden helium som flödade ut ur utrymmet och en uppdatering som beskrivet ovan hade införts. Så hade detta resulterat i att den säkerhetsmarginalen som nu fanns eventuellt förändrats. Ett styrkande argument till varför säkerhetsmarginalen hade förändrats då cellantalet över ventilationsöppningar hade ökat. Är den skillnad i koncentrationsresultat som uppmättes mellan fin och grov mesh, se Figur 44.

6.4 Fall 4 – Jetutsläpp med liten öppning i utrymme

Alla resultat från Fall 4 visar på spridning av helium i ett utrymme där utsläppskällan hade en diameter om 5,5 mm. Figur 48, Figur 49 och Figur 50 jämför resultaten från FDS simuleringar mot de av experimenten med varierande förutsättningar i ventilation.

En trend som upprepas för alla tester med olika ventilationsförutsättningar är att resultatet från FDS simuleringarna ger en snabbare stigning av koncentrationsnivåer i början av utsläppet och överstiger den av experimenten. Dock efter 70–80 sekunder minskar stigningen och understiger de uppmätta koncentrationerna från experimenten, vilket resulterar i större skillnader över tid. Vidare, uppnår även testerna samma koncentration helium på ungefär 37 volymprocent oavsett ventilationsförutsättningar. Däremot finns det en tydlig skillnad mellan testerna på mätvärdet 0,1 m över golvet. För FDS simulationerna har dessa värden en del skillnader, men efter en viss utsläppstid uppnår de samma värden som de resterande mäthöjderna. Experimenten däremot, är det endast tryckavlastnings testet 4-A1 som följer samma trend. För test 4-A2 ligger mäthöjden 0,1 m på 15 procentenheter under de resterande mäthöjderna. Det betyder att på en höjd under 0,3 m över golvet så börjar koncentrationsnivåerna sjunka. Detta indikerar på att någon form av skiktning av gaslager bildas i utrymmet. Tydligare visas detta för test 4-A3 med större ventilation, där koncentrationsnivån vid 0,1 m ökade fram tills 150 sekunder utsläppstid och därefter började avta över tid. Med en varierande ventilationsarea kan en steady-state uppnås för en viss höjd som inte nödvändigtvis förhåller sig till andra höjder, detta visas tydligt i experimentella mätpunkten för 0,1 m, se Figur 50.

Med det sagt så finns det en del skillnader mellan FDS och experiment för Fall 4 med jetutsläpp. Först och främst verkar FDS skapa en steady-state tidigare än vad experimentvärdena visar. FDS verkar inte heller fånga upp att steady-state kan skilja sig mellan de olika mäthöjderna så att skikt med olika koncentrationsnivåer bildas. Vidare verkar det som att FDS ger en steady-state med samma koncentrationsnivåer för de olika testerna oavsett ventilationsförutsättningar, eftersom alla tester ligger kring 37 volymprocent efter 180 sekunder.

Anledningen till att resultaten skiljer sig kan beror troligtvis på de initiala förutsättningarna som skapades i FDS. Vid anpassningen av den ekvivalenta öppningen för utsläppet, lades ett visst flöde av luft till för att spegla den luftinblandning som skett under den del av jeten som inte simulerades. Som visas i Bilaga A består ungefär 91% av detta massflöde av luft och endast 9% av helium. Syftet med att lägga till den mängden luft är för att uppnå korrekt koncentration helium i jeten och efterlikna experimentet så mycket som möjligt. Dessvärre är möjligheten att dessa stora mängder luft påverkar koncentrationsnivåerna av helium i utrymmet. Större massa av gas flödar in i utrymmet, vilket leder till ett större flöde ut genom ventilationen. Det kan förklara varför koncentrationsnivåerna blir lägre i FDS än experimenten efter 70 – 80 sekunder. Anledningen till att FDS resultaten når ett steady-state på 37 volymprocent kan direkt förklaras med utsläppets initiala förutsättningar. Massflödet av helium och luft i utsläppet har sammansättningen 9 respektive 91 procent. Omvandlat till volymflöde, så resulteras det i 38 procent helium i av det totala volymflödet. Det visar varför resultatet från FDS konvergerar mot 38 procent. Vidare observeras det i Figur 65 att helium flödar ut genom både frånoch tilluftsventilationerna. Det beror troligtvis på att utsläppet som innehåller 62 volymprocent luft tillför en stor mängd gas i utrymmet, vilket leder till en tryckuppbyggnad. Därmed uppstår det utflöden ur båda ventilations öppningarna då utsläppet står för hela lufttillförseln i utrymmet. Under skapningen av de initiala förutsättningarna anades det om att denna luftinblandning kunde skapa problem. Dock eftersom de nödvändiga hastigheterna inte kunde uppnås på annat sätt, kördes simuleringarna med denna förutsättning. En eventuell lösning till problematiken med de initiala förutsättningarna presenteras i Bilaga E.

Rengel et al. (2019) har simulerat försök med ekvivalenta utsläpp för ett antal simuleringsprogram inkluderat FDS. För de utdataparameterar som de har erhållit goda resultat för FDS är strålning och flamhöjd men inte för temperatur. Resultatet från studien utförd av Rengel et al. (2019) beskrivs hur anpassningen med ett ekvivalent utsläpp var som mest representativt när machtalet mellan 0,025 – 0,1. I detta arbete anpassades jetutsläppet endast med machtalet 0,0252². Där endast en ekvivalent diameter testades, vilket ledde till att alla tester hade samma förutsättningar för utsläppet. Tester med större variationer på förutsättningarna kan ge mer kunskap om vad anledningen till att resultaten på FDS och experiment skiljer sig. Exempelvis mätte Rengel et al. (2019) upp mindre goda resultat på strålningen när machtal varierade. Dock så gav fortfarande machtalet på 0,2 ett bra resultat men för resterande av testerna så var deras resultat avvikande vilket ledde dem till att dra slutsatsen om att FDS inte kunde prediktera strålningen med varierande machtal. Dock på grund av begränsningar i tid och utrustning, var fler tester inte möjligt.

Vidare antogs det vid utformningen av anpassning för detta arbete att förutsättningarna för en jetström borde vara lika de jetflammor som studerades i Rengel et al. (2019S). Dock behöver detta inte vara fallet. Möjligheten finns att anpassningen inte alls är applicerbar på spridning av gas och koncentration uppmätningar i ett utrymme.

Under planeringen av experimentet valdes ett munstycke med 5,3 mm diameter som skulle användes för jetutsläppet. Däremot under experiment så gav detta munstycke stora tryckförluster på grund av böjningen i röret och kunde inte generera de hastigheter som krävdes. Därmed ersattes detta

munstycke med den som visas i som hade diametern 5,5 mm. Skillnaderna i förutsättningar i FDS blir minimala med denna förändring i öppningsstorlek. Exempelvis blev skillnaden i avstånd mellan den egentliga utsläppskällan och den ekvivalenta utsläppskällan endast 0,001 m. Det konstateras därför att substitutet av munstycket inte har en signifikant skillnad på resultatet från FDS och är därför inte anledningen till att koncentrationer inte uppnår de av experimenten.

Luftinblandningen beräknades med ekvation 1, vilket är den blåa linjen i Figur 43. I Figur 43 märks det att stora skillnader i koncentration över höjd uppstår initialt (0-0,9) för att sedan börja likna FDS-data mer. För beräkningar av luftinblandning till den ekvivalenta utsläppskällan om 4 tillämpades ett avstånd om 0,122 m, vilket kan tänkas skapa osäkerheter den teoretiska beräkningen av koncentrationen, just på grund av de skillnader som uppstår i Figur 43. Dock så används en hålstorlek med diameter om 0,0053 m vilken medför att om denna hålstorleken hade tillämpats i ekvation 1 så hade koncentrationsfallet skett under en kortare sträcka och gjort att skillnaderna mellan FDS och handberäkningarna bedömdes vara små, därför utreddes osäkerheterna kring luftinblandnigen vidare. Dock hade detta såklart behövt beaktats vid dimensionering om metodiken för anpassade jetutsläpp förverkligades.

I diskussionen för Fall 2 konstaterades det att ju finare mesh, desto mindre skillnad i resultat mellan FDS- och experimentresultat. I resultatet för Fall 4 har det konstaterats att det är möjligt att FDS identifierar ett steady-state tidigare än vad experimentet gör. Något som definitivt har påverkan på detta är cellstorleken som i sin tur bestämmer hur fin meshen är. Hade en ytterligare förfinad mesh som testades i Fall 2 applicerats även för Fall 4, så hade detta kunnat leda till mer korrekta resultat. Speciellt då hastigheterna från den mindre munstycket genererar högre hastigheter.

6.5 Helium i stället för vätgas

Trots att arbetet ämnar besvara om FDS användas för att beräkna nödvändig area för naturlig ventilation av mindre vätgasläckage, användes substitutet helium för alla ingående delarna av experiment och FDS. Då det blev mer lämpligt att jämföra resultaten med varandra när helium användes konsekvent genom hela arbetet, återstår faktumet att ingen undersökning har gjorts på vätgasutsläpp i FDS eller experiment i detta arbete. Studien har grundats på att egenskaperna hos helium är tillräckligt lika de av vätgasen för att få ut representativa resultat ur den modellen som konstruerats under arbetets gång. Eftersom vätgas inte har innefattats i studien praktiska delar fanns inte möjligheten att undersöka hur stora skillnaderna blir på resultaten om helium används i stället för vätgas. Dock använder Bernard-Michel & Houssin-Agbomson (2017) utrymmen med storleken 1 m³ till 2 m³ samt 2 ventilationsöppningar i deras studie, vilket är likt de förutsättningar som finns för detta arbete som i sin tur ger bra stöd till att substitutet är giltigt i valideringen av denna FDS-modell.

Densiteten för helium och vätgas är 0,178 kg/m³ respektive 0,09 kg/m³, vilket innebär att de naturliga stigkrafterna borde vara högre för vätgas än för helium. Det vill säga att hastigheterna om utsläppet inte är tröghetsdominerat borde vara högre för vätgas förutsatt att det omgivande mediet är luft. Diffusiviteten för helium och vätgas är 190 m²/s respektive 160 m²/s, vilket innebär att vätgasens densitet kommer att sjunka snabbare än vad heliumet skulle göra och därmed resultera i högre hastigheter för vätgasen (David, 1991). Både densiteten och diffusiviteten har påverkan på hur ansamling och spridning sker i experiment och i FDS. Det finns inga teoretiska begräsningar som skulle göra FDS inkompatibelt att beräkna trots ökade spridnings och ansamlingshastigheter. Att använda FDS för vätgas med liknande modellförutsättningar hade däremot påfrestat beräkningskraften, vilket skulle innebära att fler noder hade behövts ockuperats i LUNARC och AURORA som var en praktisk begränsning med detta arbete. Sammantaget finns det inga teoretiska

begränsningar för att simulera utsläpp av vätgas, däremot praktiska begräsningar i beräkningskapacitet.

6.6 Metoddiskussion och felkällor

För frågeställningen fanns ingen data tillgängligt anpassat utsläpp som karaktäriseras som jetströmmar. Det fanns då ett behov av att skapa egna data, där kontroll över kvaliteten kunde erhållas, vilket i sin tur säkerställde trovärdigheten och kvaliteten hos valideringsresultaten. Dessutom fanns det ytterligare risker att hämta data från andra studier. Det är svårt att identifiera hur data har hanterats och samlats in då detta inte alltid beskrivs. Data kan även vara förvridet för att sälja vissa produkter eller i det här fallet simuleringsprogramvaror. Trots att skapa egna data tar längre tid och kraft bedömdes det nödvändigt att producera egna data för det specifika syftet och målet för rapporten.

Trots god planering med experimentplan och riskanalys så fanns det risk för en viss felmarginal av resultaten på grund av den experimentella uppställningen. Exempelvis kan det ha uppstått mindre läckor i Lådan under experimenteringen. Då slangar till utsläppet och kablar till detektorerna behövdes dras ut genom Lådan, försvårades det att helt eliminera möjligheten att gas kunde släppas igenom. Dessutom försvårade slangarna att helt forma tilluftsöppning som motsvarar exakt de förutbestämda dimensionerna. Vidare fanns det möjligheten till felmarginal under uppmätning av erforderlig mäthöjd på detektorer. Eftersom det inte fanns ett befintligt verktyg att praktiskt ställa upp detektorerna på respektive höjd, konstruerades stativ. Trots att uppmätning gjordes så att detektorerna hölls på sina angivna höjder, är stativet inte perfekt. Däremot var den mest praktisk med de resurser och den tillgängliga tiden. Som nämnts innan har kan detektorerna ha en felmarginal upp till 1 procent helium i uppmätningen, vilket är en låg variation som kan förväntas vara försumbar. Däremot under experimentets gång var det en detektor som uppmätte koncentrationsvärden på 100% när ISO rummet hade ventilerats i förberedning för det uppkommande testet. Detta tekniska fel löstes genom att koppla om strömförsörjningen. Därmed uppstår möjligheten att ett sådant tekniskt fel kan ha uppstått under testerna, dock inget ovanligt syns på de uppmätta värdena.

7 Slutsatser

De slutsatser som kan dras till arbetets frågeställning.

"Kan FDS användas för att beräkna nödvändig area för naturlig ventilation av mindre vätgasläckage?"

- För utsläpp med större öppningsstorlekar, som genererar lägre hastigheter, klarar FDSmodellen av att beräkna representativa koncentrationsvärden.
- Resultaten påvisar att vid större ventilationsarea så ökar precisionen i koncentrationsmätningarna i FDS.
- Med de tillämpade ventilationsförutsättningarna överskattar FDS koncentrationsnivåer.

En överskattning av koncentrationsnivåerna i FDS kan vara konservativt samt fördelaktigt ur ett dimensionerings perspektiv. Däremot ur ett vetenskapligt perspektiv är det mest intressant att vara så nära verkligheten som möjligt. Trots att en överskattning kan visas vara en fördel, återstår möjligheten att FDS har brister inom dimensionering för lägre ventilationsareor.

• För utsläpp med mindre öppningsstorlekar, som genererar högre hastigheter, har FDSmodellen svårigheter att beräkna representativa koncentrationsvärden.

FDS-modellen kan inte tillämpas för dimensionering av naturlig ventilation av mindre vätgasläckage utan kalibrering. Modellens nuvarande förutsättningar för utsläppet medför en tryckuppbyggnad då en stor mängd luft förs in genom utsläppet. Genom att modifiera utsläppets initiala förutsättningar med hjälp av en HVAC funktion kan tryckuppbyggnaden undvikas och därmed skapa förutsättningar för naturliga flöden genom ventilationen. I Bilaga E presenteras ett försök att applicera HVAC funktionen. Sammantaget bör modellen genom kalibrering inte konvergera mot andelen helium i utsläppet och därmed ha förutsättningar att efterlikna resultaten från experimenten.

8 Vidare studier

Området med att tillämpa FDS till spridning av vätgas är outforskat. Som studien visar är det svårt att dra några slutsatser om FDS:s förmågor att simulera mer komplexa och verklighetstrogna utsläpp. Detta just på grund av praktiska begränsningarna som finns gällande tid och resurser. Den teoretiska anpassningen som utförts kunde inte valideras i denna studie. Genom att variera machtalet mot experiment kan den teoretiska anpassningen valideras.

Det hade varit intressant att ytterligare undersöka hur FDS hanterar varierande ventilation och massflöde. Detta möjliggör en identifiering av nya trender och insamling av ny data som stöttar forskningen kring dimensionering av vätgasläckage i FDS. Naturlig ventilation kan anses som icke robust ventilationssystem då det är direkt beroende av utomhusförhållande och ventilering av vätgas troligtvis behöver säkerställas med hjälp av mekanisk ventilation. Därför bör det undersökas ytterligare hur FDS svarar på liknande undersökningar där mekanisk ventilation substituerar naturlig ventilation. Data i detta arbetet och andra liknande typer av försök med helium eller vätgas bör valideras mot mekanisk ventilation i FDS,

På grund av att vätgas är en brandfarlig gas som innebär en avsevärd riskökning har studien, av rimliga skäl, inte fått tillstånd till att experimentera med vätgas. Om FDS ska slå igenom som programvara för syftet om att dimensionera ventilation krävs det att resultat från FDS valideras mot experiment där vätgas används.

Resultaten i detta arbete visar att FDS-modellen inte visar representativa koncentrationsvärden för Fall 4, där en anpassning har utförts. Anpassningen visade sig vara bristfällig och påverkade förmågan hos FDS-modellen att kunna genererar representativa värden. En möjlig lösning är att kalibrera utsläppet genom att använda HVAC-funktionen. Istället för att använda luft i utsläppet som en initial förutsättning, kombineras utsläppet med luft som tas från omgivningen och helium som ansamlas i en extern låda. Genom HVAC funktionen kopplas ett flöde av helium och ett flöde omgivande luft ihop och ansätts till det korrekta flödet för utsläppet. Med denna anpassning undviks den stora tryckuppbyggnad som sker när ny luft förs in genom utsläppet samtidigt som modellen fortfarande efterliknar ett verkligt utsläpp.

9 Referenser

- Akal, D., Öztuna, S., & Büyükakın, M. K. (2020). A review of hydrogen usage in internal combustion engines (gasoline-Lpg-diesel) from combustion performance aspect. Elsevier Ltd.
- Andersson, T., & Rosqvist, S. (2021). Vätgas i fokus vad säger juridiken?
- Bejan, A., Ziaei, S., & Lorente, S. (2014). *Evolution: Why all plumes and jets evolve to round cross sections.* Scientific Reports.
- Bernard-Michel, G., & Houssin-Agbomson, D. (2017). *Comparison of helium and hydrogen releases in* 1 m3 and 2 m3 two vents enclosures: Concentration measurements at different flow rates and for two diameters of injection nozzle. Elsevier Ltd.
- Blomqvist, C. (2009). *Distribution of Ventilation Air and Heat by Buoyancy Forces Inside Buildings, An experimental study.* Gävle: KTH Research School Centre for Built Environment & University of Gävle, Sweden Department of Technology and Built Environment.
- Brzezińska, D. (2021). Hydrogen Dispersion and Ventilation Effects in Enclosures under Different Release Conditions. Lodz: Faculty of Process and Environmental Engineering.
- David, R. (1991). CRC Handbook of chemistry and physics: a ready-reference book of chemical and physical data. CRC press .
- EIA. (den 24 09 2019). *www.eia.gov*. Hämtat från https://www.eia.gov/todayinenergy/detail.php?id=41433
- Fulton, L. (2022). Potential Uses of Hydrogen in Califronia's Clean Energy Transition . September.
- Försvarets Forskningsanstalt . (1998). Vådautsläpp av brandfarliga och giftiga gaser och vätskor. FOA.
- IEA. (2021). Net Zero by 2050 A Roadmap for the Global Energy Sector. Paris: IEA. Hämtat från Net Zero by 2050: IEA (20212050, IEA, Paris https://www.iea.org/reports/net-zero-by-2050, License: CC BY 4.0
- IEA. (2021). www.IEA.org. Paris, France. Hämtat från https://www.iea.org/reports/key-worldenergy-statistics-
- IEA. (2022). Global Hydrogen review. Hämtat från www.IEA.org: https://www.iea.org/news/worldenergy-outlook-2022-shows-the-global-energy-crisis-can-be-a-historic-turning-pointtowards-a-cleaner-and-more-secure-future
- IEA. (2022). www.IEA.org. Hämtat från World Energy Outlook 2022 shows the global energy crisis can be a historic turning point towards a cleaner and more secure future: https://www.iea.org/reports/global-hydrogen-review-2022
- IVA. (2022). Vätgasens roll för tunga vägtransporter en underlagsrapport. Kungliga IngenjörsVetenskaps Akademin.
- Kollmann, W. (2019). Navier–Stokes Turbulence; Theory and Analysis. Springer Nature Switzerland.

Kotchourko, A. (2022). Hydrogen Safety for Energy Applications.

Linde Gas. (den 30 Mars 2020). Säkerhetsdatablad Hydrogen.

Liu, J. (2012). Hydrogen Storage. Croatia: INTECH d.o.o.

- McGrattan, K., Hostikka, S., Floyd , J., McDermott, R., & Vanella, M. (2018). *Fire Dynamics Simulator Technical Reference Guide Volume 1: Mathematical Model.* NIST.
- Molkov, V. (2012). Fundamentals of Hydrogen Safety Engineering 1.
- MSB. (den 12 December 2019). Explsionsfarlig miljö (ATEX).
- MSB. (den 11 Maj 2020). Föreskrifter om hantering av brandfarlig gas och brandfarliga aerosoler. Hämtat från https://www.msb.se/sv/regler/gallande-regler/brandfarliga-och-explosivavaror/msbfs-202012/
- MSB. (2022). Hämtat från www.rib.msb.se: https://rib.msb.se/Portal/Template/Pages/Kemi/Substance.aspx?id=375&g=HELIUM&p=1
- MSB. (2022). *RIB*. Hämtat från www.rib.msb.se: https://rib.msb.se/Portal/Template/Pages/Kemi/Substance.aspx?id=390&q=v%c3%a4tgas& p=1
- MSB. (den 21 Januari 2022). www.msb.se. Hämtat från https://www.msb.se/sv/amnesomraden/skydd-mot-olyckor-och-farliga-amnen/brandfarligtoch-explosivt/brandfarliga-gaser/vatgas
- Nationalencyklopedin. (den 10 November 2022). Hämtat från http://www.ne.se/uppslagsverk/encyklopedi/lång/ventilation
- Naturskyddsföreningen. (den 16 mars 2021). Hämtat från www.naturskyddsföreningen.se: https://www.naturskyddsforeningen.se/faktablad/hallbara-transporter/
- Palacios, A., Muñoz, M., & Casal, J. (2008). *Jet fires: An experimental study of the main geometrical features of the flame in subsonic and sonic regimes*. American Institute of Chemical Engineers AIChE J.
- Rengel, B., Mata, C., Palacios, A., Pastor, E., Casal, J., & Planas, E. (2019). *CFD Modelling of Vertical Sonic Jet Fires.* Saint-Petersburg, Russia: Saint-Petersburg Polytechnic University Press.
- Tang, X., Dzieminska, E., Asahara, M., Hayashi, A. K., & Tsuboi, N. (2018). Numerical Investigation of a High Pressure Hydrogen Jet of 82 MPa with Adaptive Mesh Refinement: Concentration and Velocity Distributions. International Journal of Hydrogen Energy 43.

Thunderhead Engineering. (den 24 09 2020). PyroSim User Manual. New York, USA.

- UN. (2022). www.un.org. Hämtat från https://www.un.org/development/desa/pd/sites/www.un.org.development.desa.pd/files/w pp2022_summary_of_results.pdf
- Wang, D., Tong, L., Liu, L., & Cao, X. (2019). *Preliminary numerical study on hydrogen distribution characteristics in the process that flow regime transits from jet to buoyancy plume in time and space.* Korea: Elsevier Korea LLC.
- Wang, R., Zhang, H., Shi, F. Z., & Zhang, L. (2017). Empirical Study of the Relationship between Global Energy Consumption and Economic Growth. International Electric and Energy Conference.

Wang, X.-k., & Tan, S. K. (2010). *Environmental fluid dynamics-jet flow*. Shanghai: Nanyang Technological University.

Wheeler M. "Bo" Sears, J. (2015). *Helium: The Disappearing Element*. Dallas, USA: Springer Cham.

- Wootaek, C., Taejung, K., & S, H. (2022). *Thermal conductivity detector (TCD)-type gas sensor based* on a batch-fabricated 1D nanoheater for ultra-low power consumption. Ulsan: Elsevier B.V.
- Xuhui, L. (2000). Water vapor density effect on measurments of trace gas mixing ratio and flux with a massflow controller. *Journal of Geophysical Research*, 17,807-17,810.

Bilaga A Indata FDS – utsläpp

I bilaga A presenteras nödvändiga ekvationer för att beräkna massflöde och utsläppshastigheter som ligger till grunden för utsläppet i fallen 1, 2 och 3. Dessutom presenteras nödvändig teori och förenklingar som krävs för att anpassa utsläppet i Fall 4.

Fall 1,2 och 3

Med enkla beräkningar erhålls volymflödet i m³/s genom Ekvation 8.

Ekvation 8

$$\dot{V} = 100 \frac{l}{min} = 1.67 \frac{l}{s} = 0,001677 \ m^3/s$$

För att ta reda på vilket massflöde som volymflödet motsvarar behövs densiteten av helium multipliceras med volymflödet, se Ekvation 9.

Ekvation 9

$$\dot{m} = \dot{v} * \rho_{He} = 0,001677 \frac{m^3}{s} * 0,178 \frac{kg}{m^3} = 2,967 * 10^{-4} \frac{kg}{s}$$

Steget mot att verifiera utsläppshastigheten behövs arean på den cirkulära öppningen beräknas, se nedan.

$$A = \frac{\pi D^2}{4} = \frac{\pi * 0.0275^2}{4} = 593,96 \ mm^2$$

Utsläppshastigheten beräknas genom Ekvation 10 nedan och är teoretiskt likadan i FDS som för experiment.

Ekvation 10

$$V = \frac{\dot{V}}{A} = \frac{0,001667}{0,00059396} = 2,81 \ m/s$$

Fall 4

Då genom tillämpning av Ekvation 7 genererar en rätvinklig triangel går det att beräkna vinkeln α i Figur 6.

Med enkel trigonometri erhålls vinkeln α enligt nedanstående beräkningar:

$$tan^{-1} = \left(\frac{0.09}{1}\right) = 5.14^{\circ}$$

Då den ekvivalenta diametern skulle motsvara 27,5 mm resulterade dettas i att L i figur 6 måste motsvara 0,011 meter. Se Ekvation 11 nedan.

Ekvation 11

$$D_{eq} = 2L + D_N = (2 * 0.011) + 0.0055 = 0.0275 m = 27.5 mm$$

Då L är bestämt kan x beräknas genom enkel trigonometri, se nedan.

$$tan(\alpha) = \frac{Motstånde katet}{N\"arliggande katet} = \frac{L}{x} \qquad = => \qquad x = \frac{L}{\tan(\alpha)} = \frac{0,011}{\tan(5,14)} = 0,122 m$$

När avståndet till den ekvivalenta diametern väl var identifierat blev det kritiskt att beräkna vilken andel helium som utsläppet bestod av i den givna punkten, då luftinblandning har skett i den komprimerade zonen.

Genom tillämpning av Ekvation 1 ett beräknas andelen helium vid ett avstånd 0,122 m från den egentliga utsläppskällan, se nedan.

$$\frac{C_{ax}}{C_n} = 5.4 \sqrt{\frac{\rho_N}{\rho_S}} \frac{D}{x} = 5.4 \sqrt{\frac{0.178}{1.20}} \frac{0.0055}{0.122} = 0.0938 = => 9.38 \% Helium$$

Massflödet vid den ekvivalenta diametern blev viktigt att beräkna för att veta vilka initiala förutsättningar som krävs i FDS, samt vilket massflöde som massflödeskontrollern behövde vid experiment.

För att beräkna det ekvivalenta massflödet behövs först den ekvivalenta densiteten beräknas enligt Ekvation 12.

Ekvation 12

$$\rho_{eq} = x_{He} * \rho_{He} + x_{Luft} * \rho_{Luft} = 0,0938 * 0,178 + (1 - 0,0938) * 1,20 = 1,10 \frac{kg}{m^3}$$

Massflödet beräknas genom att lösa ut variabeln från Ekvation 4, givet att machtal är 0,0252 och c är 361,2 m/s.

Innan ett ekvivalent massflöde kan beräknas måste ljudhastigheten c beräknas för den heliumluftlandningen som fanns vid den ekvivalenta diametern, ljudhastigheten härleds ur ideala gaslagen (FOA, 1998), se Ekvation 15. M och γ beräknades utifrån heliumluftbladningen se Ekvation 13 och Ekvation 14 nedan.

Ekvation 13

 $\gamma = x_{He} * \gamma_{He} + x_{Luft} * \gamma_{Luft} = 0,0938 * 1,667 + (1 - 0,0938) * 1,4 = 1,43$

- Där x beskriver andelen av det ämnet
- Där γ beskriver specifik värmförhållandet det specifika ämnet

Ekvation 14

$$M = x_{He} * M_{He} + x_{Luft} * M_{Luft} = 0,0938 * 4 + (1 - 0,0938) * 29 = 26,7 \ g/mol$$

- Där *x* beskriver andelen
- Där M beskriver molmassan

Ekvation 15

$$c = \sqrt{\frac{P}{\rho} * \gamma} = \sqrt{\frac{\gamma * R * T}{M}} = \sqrt{\frac{1,42 * 8314 * 293}{26,8}} = 361,2 \ m/s$$

- Där beskriver γ är en ämnesspecifik konstant
- Där R beskriver gaskonstanten
- Där T beskriver omgivande temperatur
- Där M beskriver molmassan

Det ekvivalenta massflödet beräknas genom att lösa ut variabeln från Ekvation 5.

$$m_{eq} = ((D_{eq})^2 * \pi * \rho_{eq} * Ma * c)/4 = (0.0275^2 * 3.14 * 1.10 * 0.0252 * 361.2)/4 = \ge 0.00594 \frac{kg}{s}$$

Eftersom 9,38% av detta massflöde är helium kan massflödet från den egentliga utsläppskällan beräknas ut enligt nedan.

$$\dot{m}_N = x_{He} * \dot{m}_{eq} = 0,0938 * 0,00594 = 0,000504 \frac{\kappa g}{s}$$

- Där x beskriver andelen av ämnet

- Där \dot{m}_{eq} beskriver det ekvivalenta massflödet

När massflödet av helium var beräknat kunde Ekvation 8 användas för att beräkna volymflödet. Nästa steg var en enklare enhetsomvandling från kubikmeter per sekund till liter per sekund, se nedan.

1. ~

$$\dot{V} = \frac{\dot{m}}{\rho_{He}} = \frac{0,000504}{0,178} = 0,00283 \frac{m^3}{s} \implies 0,00283 * 60 * 1000 = 170 \ slpm$$

Utsläppshastigheten i startpunkten för Fall 4 beräknas nedan och är endast den experimentella hastigheten. För att beräkna ut starthastigheten i FDS behöver hastigheten multipliceras med det dimensionerande machtalet.

$$A = \frac{0,0055^2\pi}{4} = 2,38 * 10^{-5} => \dot{V} = \frac{0,00283}{2,38*10^{-5}} = 118,9 \ m/s$$

Som del av utsläppets egenskaper behöver ett massflux beräknas genom att konvertera detta från massflödet. Nedan görs detta för Fall 1,2 och 3 samt ett separat för Fall 4.

Massflux för Fall 1,2 och 3 => $\dot{m}'' = \frac{\dot{m}}{A} = \frac{2,967*10^{-4}}{5,9394*10^{-4}} = 0,4945 \ kg/m^2 s$

Massflux för Fall 4 => $\dot{m}'' = \frac{\dot{m}}{A} = \frac{5,04*10^{-4}}{5,9394*10^{-4}} = 0,849 \ kg/m^2$
Bilaga B Indata FDS - mesh

I Bilaga B presenteras dimensioner på mesher som tillämpats för respektive fall.

Mesh	Dimensioner (m ³)	Cellstorlek (m ³)	Antal Celler (st)
Fin Mesh Mitten	0,4*0,4*0,2	0,005	256 000
Grov Mesh Omgivande	0,67*0,27*1,2	0,01	217 080
Totala Mesh Clustret	0,94*0,94*2,4	-	4 808 640

Tabell 12. Dimensioner och cellstorlek för de ingående mesherna i Fall 1 och 2.

Tabell 13. Dimensioner och cellstorlek för de ingående mesherna i Fall 1 och 2 för det testet med finare cellstorlek.

Mesh	Dimensioner (m ³)	Cellstorlek (m ³)	Antal Celler (st)
Fin Mesh Mitten	0,4*0,4*0,2	0,0025	2 048 000
Grov Mesh Omgivande	0,67*0,27*1,2	0,005	1 736 640
Totala Mesh Clustret	0,94*0,94*2,4	-	38 469 120

Tabell 14. Dimensioner och cellstorlek för de ingående mesherna i meshklustret för Fall 3 och 4.

Mesh	Dimensioner (m)	Cellstorlek (m ³)	Antal Celler
Fin Mesh Mitten (10 st)	0,2*0,2*0,08	0,005 ³	102 800
Grov Mesh omgivande (4 st)	0,34*0,94*0,4	0,01 ³	127 840
Grov Mesh omgivande (4 st)	0,74*0,54*0,4	0,01 ³	159 840
Totala Mesh Clustret	1,08*1,48*0,8	-	2 174 720

Bilaga C Mät- och simuleringsresultat

I Bilaga C presenteras mer detaljerad information angående mätvärdena för resultat som presenterats i avsnitt 5. Dessutom presenteras figurer vilket har legat som underlag för olika val av tillvägagångssätt samt illustrationer och figurer för att kunna föra en heltäckande diskussion.

Handberäkning- och mätresultat

Höjd ovanför utsläppet (m)	Medelvärdet av heliumkoncentration (vol %)
0,05	110,72
0,1	55,38
0,15	36,92
0,3	18,46
0,5	11,10
0,7	7,91
0,9	6,15
1,1	5,03
1,3	4,26
1,5	3,69
1,7	3,26
1,9	2,91
2,1	2,64
2,3	2,41

Tabell 15. Resultat från handberäkningarna beräknat från ekvation 1.

Tabell 16. Medelvärdet på resultatet för Fall 1 med cellstorleken $0,005^3m^3$ beräknat efter 10 sekunder utsläppstid (steady-state).

Höjd ovanför utsläppet (m)	Medelvärdet av heliumkoncentration (vol %)
0,05	92,71
0,1	77,58
0,15	60,49

0,3	33,48
0,5	18,10
0,7	11,21
0,9	8,15
1,1	6,01
1,3	4,94
1,5	3,91
1,7	3,20
1,9	2,69
2,1	2,30
2,3	2,06

Tabell 17. Medelvärdet på resultatet för Fall 1 med cellstorleken 0,0025³m³ beräknat mellan 8 och 11,5 sekunder utsläppstid (steady-state).

Höjd ovanför utsläppet (m)	Medelvärdet av heliumkoncentration (vol %)
0,05	99,99
0,1	95,28
0,15	69,69
0,3	35,62
0,5	19,16
0,7	10,97
0,9	7,53
1,1	5,66
1,3	4,55
1,5	3,87
1,7	3,56
1,9	3,21

2,1	3,32
2,3	2,62

Tabell 18. Medelvärdet på resultatet för Fall 2 med cellstorleken 0,005³m³ beräknat efter 10 sekunder utsläppstid (steadystate).

Höjd ovanför utsläppet (m)	Medelvärdet av heliumkoncentration vol %
0,05	93,38
0,1	78,04
0,15	63,16
0,3	36,95
0,5	16,87
0,7	11,49
0,9	7,69
1,1	6,03
1,3	4,70
1,5	3,69
1,7	2,93
1,9	2,51
2,1	2,12
2,3	1,88

Tabell 19 Medelvärdet på resultatet för Fall 2 med cellstorleken $0,0025^3m^3$ beräknat mellan 8 och 11,5 sekunder utsläppstid (steady-state).

Höjd ovanför utsläppet (m)	Medelvärdet av heliumkoncentration vol %
0,05	99,98
0,1	94,91
0,15	72,70
0,3	39,64

0,5	18,12
0,7	13,00
0,9	7,68
1,1	6,45
1,3	4,65
1,5	4,06
1,7	3,16
1,9	2,65
2,1	2,41
2,3	1,79

Tabell 20. Resultat från experiment för Fall 2 taget på högsta mätvärdet från varje detektor.

Höjd ovanför utsläppet (m)	Medelvärdet av heliumkoncentration vol %
0,3	41,1
0,7	14,3
1,1	5,9
1,5	4,3
1,9	3,5

Figurer för tillvägagångssätt FDS

Figur 51, Figur 52 och Figur 53 jämför koncentrationsnivåer av två olika detektorgrupper i två olika hörn av Lådan i FDS.



Figur 51. Resultat av 3-A1, Fall 3, där två olika detektorgrupper (D1/D2) jämförs.



Figur 52. Resultat av 3-A2, Fall 3, där två olika detektorgrupper (D1/D2) jämförs.



Figur 53. Resultat av 3-A3 Fall 3 där två olika detektorgrupper (D1/D2) jämförs.

Vid bestämmelser av förutsättningar för simuleringar och experiment behövdes placering av detektorgruppen göras. Figur 51, Figur 52 och Figur 53 är simuleringsresultaten från FDS där två detektorgrupper är aktiverade i olika hörn av utrymmet. Den slutsats som kunde dras är att simuleringsmässigt så påverkar inte detektorernas placering dess förmåga att fånga upp koncentrationer, åtminstone i FDS. Dock är det bra att placera detektorgruppen så långt bort från ventilationsöppningar för att de ska påverkas så lite som möjligt av dessa. Givet detta går författarna vidare med den detektorplacering som innebär längst avstånd från ventilationsöppningarna i FDS och experiment.

Figur 54 och Figur 55 visar koncentrationsnivåerna för höjden 0,9 m för Fall 1 med grov respektive fin mesh.



Figur 54. Beskriver heliumkoncentrationen 0,9m över utsläppskällan för Fall 1 (grov mesh) där medelvärdet 8,15 vol%.



Figur 55. Beskriver heliumkoncentrationen 0,9 m över utsläppskällan för Fall 1 (fin mesh) där medelvärdet är 7,53 vol%

Simuleringsförsök på Fall 1 och Fall 2 med ytterligare förfinad mesh avbröts efter ca 12 sekunder. Då dessa fallen inte innefattas av något fixt utrymme kan det tänkas att steady-state uppnås i ett tidigare skede än för Fall 3 och 4. Figur 54 och Figur 55 påvisar att steady-state har uppnåts kring 8 sekunder då trendlinjen är i princip vågrät. Därför ansågs det adekvat att tillämpa resultaten från den simuleringsresultatet av den finare meshen erforderlig att presenteras i Figur 43 och Figur 44.



Figurer för diskussion av Fall 1

Figur 56. Resultat av Fall 1 jämfört med handberäkningar från höjden 0,9 m.



Figurer för diskussion av Fall 2



Figur 58. Fall 2 med fin mesh. Visar tidspunkten då jeten träffar första detektorn.



Figur **59***. Fall* 2 *med fin mesh. Visar jetutsläppet vid steady – state.*



Figurer för diskussion av Fall 3



Figur 61. Visar utsläppet i test 3-A2 vid 60 sekunder.



Figur 62. Visar utsläppet i test 3-A2 vid 180 sekunder.



Figur 63. Visar utsläppet i test 3-A2 vid 300 sekunder.

Figurer för diskussion av Fall 4



Figur 64. Visar utsläppet i test 4-A2 vid 60 sekunder.



Figur 65. Visar utsläppet i test 4-A2 vid 180 sekunder.



Figur 66. Visar utsläppet i test 4-A2 vid 300 sekunder.

Bilaga D Experimentplan och riskanalys

Experimentplan och Riskanalys

Laborationsdatum: 31/1 - 2023

Laboranter: Emil Alavei

Erik Andersson

Mål - Vad försöker vi hitta?

Då laboranterna arbetar med ett examensarbete vilket innefattar validering av FDS och arbetets mål är att avgöra om FDS kan användas för att dimensionerna naturlig ventilation av mindre vätgasläckage behövs data som stöd i valideringsprocessen. Experiment ger laboranterna kritiska data, vilket kommer att hanteras, jämföras och diskuteras i examensarbetet. Observera att experimentering av vätgas hade varit riskfyllt och därför tillämpas den inerta substitutgasen helium.

Metod – Hur finner vi datan?

Tre fall behöver valideras mot experimentdata. Alla de olika fallen kommer att experimenteras under den stora fläkt-huven som finns i brandlabbet.

Första fallet (Fall 2 i rapport) ämnar generera egna data för att jämföra FDS förmåga att reproducera koncentration i själva jet:en då det finns obstruktioner ovanför centrumlinjen, alltså där heliumdetektorerna placerades. Detta fall separeras som ett eget fall då laboranterna vill reproducera experiment från FDS så högt som möjligt. 1 test kommer att utföras där ett fixt massflöde om 100 SLPM ansätts med ett munstycke om 27,5 mm. Den tid som bedöms ge adekvata resultat estimeras mellan 30–60 sekunder. Se figuren nedan för schematisk skiss av försöksuppställningen för Fall 2.



I det andra fallet (Fall 3 i rapport) kommer ett rum, så kallat Lådan att användas som ett utrymme där ett heliumutsläpp kan ske. Lådan placeras som beskriver under huven. Det kommer utformas ett hål i botten av Lådan varvid munstycket (utsläppskällan) placeras i. fyra tester kommer att utföras, där tre av dem har olika förutsättningar i ventilationen, varav 1 försök där massflödet varieras. Alla försök kommer att pågå i 300 sekunder. Den tid som krävs för att uppnå adekvata data för detta fall estimeras till 3–5 minuter för respektive test. Se nedan för schematisk skiss av försöksuppställningen av Fall 3.



I det tredje fallet (Fall 4 i rapport) kommer Lådan att användas med samma variation av ventilationen som för det föregående fallet. Det som skiljer fallen åt är att munstycket om 27,5 mm kommer att

ersättas av ett mindre munstycke om 5,3 mm, då vätgasutsläpp rent praktiskt efterliknar jetutsläpp. I detta fall kan inte massflöde varieras då den teoretiska anpassningen i FDS är baserad på ett fixt massflöde om 170 SLPM, se Bilaga A. Se figuren nedan för schematisk skiss av försöksuppställningen för Fall 4.



Utrustning – Vad behöver vi?

- Lådan
- Munstycke om 27,5 mm och 5,3 mm
- Massflödeskontroller
- Heliumgasflaskor (1,8 kg)
- Heliumdetektorer (5 st)
- Fläkthuven
- Skyddsrock skyddsglasögon, handskar
- Material som möjliggör justering av ventilationsöppningarna
- Uppställning för heliumdetektorerna, stativ + klämmor/liknande

Hypotes - Vad tror vi?

Laboranterna tror att experimentdata kommer att korrelera med resultat som utvunnits från FDSsimuleringarna. Om det finns tydliga korrelationer med faktiska experiment och CFD-simuleringar kan modellen valideras och i sin tur FDS som tillämpning för läckage av denna storleksordning.

Vad kan vi förvänta oss för resultat?

Det finns en möjlighet att experimentdata inte förhåller sig till något sätt till den data som har utvunnits från FDS. Detta är minst lika intressant att veta då arbetets frågeställning ämnar besvara FDS tillämpning.

Resultat

Genomförd laboration resulterade i kritiska data vilket kan användas i författarnas examensarbete. Målet med laborationen är därmed uppfyllt.

Slutsats

Resultaten för delar av testerna som utfördes var lika de resultat som genererats från simuleringar. Munstycket med en diameter 5,3 mm utsattes för tryckfall vilket i sin tur resulterade i att erforderligt massflöde inte kunde genereras. Därför byttes munstycket ut mot ett nytt med en lättare böjning för att undvika tryckfallet och därmed kunde erforderligt massflöde genereras. I övrigt ledde den goda planeringen av laborationen till en säkrare miljö samt att det inte blev någon tidsbrist.

Riskanalys

Flaskor med trycksatt gas av helium innebär risker för laboranterna. Dels i form av att gasen lagras under högt tryck i gasflaskor men även för att helium kan orsaka kvävning.

Gasflaskan av helium förväntas inte att utsättas för någon typ av extrem värme då laborationen inte innefattar någon typ av reaktion och absolut ingen brand. Därav borde explosionsrisker vad undvikta. Gasflaskan kommer att placeras i gas-förrådet då den inte används och vid användning kommer gasflaskan att vara i ett utrymme där den snabbt kan föras i säkerhet vid en eventuell brand eller annan oväntad händelse.

Gällande kvävningsrisken så innehåller en heliumgasflaska maximalt 50 liter och i värsta fall antas allt helium släppas ut momentant så hade detta inte inneburit någon kvävningsrisk då brandlabbet överstiger 250 m3 (10x10,2,5). Trots detta kommer en syrgassensor att använda för att ytterligare minska på riskerna.

Bilaga E HVAC – En lösning

Eftersom de initiala förutsättningarna i simuleringen för Fall 4 skapade inkorrekta värden, gjordes en komplettering med hjälp av FDS funktionen HVAC. Problemet med de initiala förutsättningarna låg i hanteringen av den luftinblandning som sker i den del av jeten som inte simulerades. Utsläppet var definierat som en blandning av helium och luft, men istället för att luften som blandas in i jeten kommer från omgivande luft så fördes ny luft in från utsläppet. På grund av detta sker det ett för stort flöde in av "ny" gas och ett större tryck uppstådde i utrymmet för simuleringen.

Med hjälp av HVAC – funktionen kan luft tas från omgivande luft och användas för luftinblandningen. Hur appliceringen av funktionen förändrar modellen kan ses i Figur 67. Helium ansamlas i en extern låda bredvid det inneslutna utrymmet (ISO – rummet) med det korrekta massflödet för endast helium. Kopplat till den externa lådan är en HVAC – vent som leder heliumet till en nod i munstycket. På undersidan av munstycket finns ytterligare en HVAC – vent med en fläkt funktion. Fläkten suger in omgivande luft med ett adekvat flöde, som vidare ledes till samma nod som heliumet. Där blandat gaserna och släpps ut ur en HVAC – vent på ovansidan av munstycket som representerar öppningen för det verkliga utsläppet av luft och helium. På så sätt förs inte ny luft in i modellen och en inkorrekt tryckökning bör undvikas i FDS

På grund av tidsbrist har korrekta villkor för modellen inte identifierats. Rent teoretiskt borde denna lösning justera modellen på så sätt att utsläpp av samma karaktär som Fall 4 borde kunna simuleras av FDS.



Figur 67. Beskriver modellen med HVAC - funktionen applicerad.