

**Analyse av utslipp og spredning av klorgass ved bruk av
FLUENT — en vurdering av modelloppbygning og beregning
av spredning**

Jens William Bjerkelund

Forsvarets forskningsinstitutt/Norwegian Defence Research Establishment (FFI)

1. februar 2008

FFI-rapport 2008/00302

1048

P: 978-82-464-1413-3

E: 978-82-464-1414-0

Emneord

Spredningsberegning

CFD

Klorutslipp

Godkjent av

Monica Endergaard

Prosjektleder

Bjarne Haugstad

Forskningsjef

Jan Ivar Botnan

Avdelingssjef

Sammendrag

Denne rapporten dokumenterer arbeid utført, som en del av FFI-prosjekt 1048:

Masseødelegelsesvåpen – trussel og beredskap, av Jens W Bjerkelundi forbindelse med hans Masterstudium i Prosess-sikkerhetsteknologi ved Institutt for fysikk og teknologi, Universitetet i Bergen. Veileder for arbeidet har vært Forsker Thor Gjesdal.

Oppgaven gikk ut på å simulere utslipp og spredning av klorgass i en modell av et industrianlegg, samt å sammenlikne de simulerte resultatene med referansedata som var fremkommet ved hjelp av vindtunellforøk utført på en nedskalert modell av anlegget.

Simuleringene ble utført ved hjelp av programpakken FLUENT. FLUENT er en CFD-pakke (CFD=Computational Fluid Dynamics) som løser de tre-dimensjonale Navier-Stokes likninger supplert med modeller for turbulens for å beskrive vindfeltet og utbredelsen av gassen.

Industriområdet, det omkringliggende terrenget og strømningsvolumet er løst opp ved hjelp av et utstrukturert nettverk (grid) av tre-dimensjonale pyramideformede celler. Det er brukt flere ulike nettverk med variende oppløsning, fra ca 3 millioner til over 16 millioner celler.

Sammenlikning av de simulerte resultatene ved hjelp av statistiske metoder viser godt samsvar med de eksperimentelle verdiene.

English summary

This report documents work performed, as part of FFI-project 1048: *Weapons of mass destruction – threat and emergency response*, by Jens W Bjerkelund in preparation for his MSc degree in Process Safety Technology from the Institute for Physics and Technology of the University of Bergen. The work was performed under supervision of Thor Gjesdal.

The aim of the MSc-project was to simulate release and dispersion of chlorine gas in a model of an industrial facility, and to compare the simulated results with reference data obtained from wind tunnel experiments of a scaled model of the facility.

The simulations were performed using FLUENT. FLUENT is a CFD-package (CFD=Computational Fluid Dynamics) that solves the three-dimensional Navier-Stokes equations augmented by models for turbulence to describe the wind field and the dispersion of the gas.

The industrial facility, the surrounding terrain, and the flow domain were resolved by an unstructured mesh made up of three-dimensional tetrahedral cells. Several meshes with varying resolution, ranging from approx. 3 million cells to approx. 16 million cells, were employed.

Comparison by statistical techniques shows good correspondence between simulated and experimental results.

Innholdsfortegnelse

FORORD	IV
SAMMENDRAG.....	VI
SPRÅKLIGE FORKORTELSER.....	VII
FORKLARING AV ENKELTE ORD OG UTTRYKK	VII
SYMBOLLISTE.....	VIII
1. INTRODUKSJON	1
1.1. PROBLEMSTILLING.....	2
1.2. OPPBYGNINGEN AV OPPGAVEN	2
2. SCENARIOBESKRIVELSE – REFERANSE PROSJEKT.....	3
2.1. GENERELLE FORHOLD TILKNYTTET SCENARIET OG EKSPERIMENTELLE DATA.....	3
2.2. BESKRIVELSE AV FYSISKE FORHOLD TILKNYTTET SCENARIET	4
3. SPREDNING AV TUNG GASS – GRUNNLEGGENDE KONSEPTER.....	6
3.1. INTRODUKSJON.....	6
3.2. GRUNNLEGGENDE KONSEPTER - SPREDNINGSTEORI.....	7
3.2.1. <i>Utslipp og spredning av (tung) gass.....</i>	<i>7</i>
3.2.2. <i>Påvirkning fra meteorologiske forhold.....</i>	<i>11</i>
3.2.3. <i>Overflatenes ruhet (z_0) – Parametrisk angivelse av overflatens bidrag til turbulens.....</i>	<i>15</i>
3.2.4. <i>Påvirkning fra overflateegenskaper - topografi/ terreng og bygninger/ hindringer</i>	<i>17</i>
3.3. MODELLERING AV SPREDNING AV (TUNG) GASS	21
3.3.1. <i>Modeller for prediktering av spredning av tung gass.....</i>	<i>21</i>
3.3.2. <i>CFD – Muligheter og begrensninger</i>	<i>24</i>
3.4. TIDLIGERE ARBEIDER.....	26
3.4.1. <i>Evaluation of Modelling Uncertainty (EMU).....</i>	<i>27</i>
4. BESKRIVELSE AV PROGRAMVARE.....	28
4.1. INTRODUKSJON.....	28
4.2. PROGRAMVARE FOR BYGGING AV GEOMETRI OG TOPOGRAFI.....	28
4.2.1. <i>GAMBIT</i>	<i>28</i>
4.2.2. <i>Autodesk – AutoCAD.....</i>	<i>30</i>
4.3. BEREGNINGSMODELL – SPREDNING AV TUNG GASS	31
4.3.1. <i>FLUENT.....</i>	<i>31</i>
5. MODELLERING – INNDATA OG STRATEGI.....	32
5.1. INTRODUKSJON.....	32
5.2. FORUTSETNINGER OG INNDATA FOR MODELLERINGEN	32
5.2.1. <i>Problemer tilknyttet inndata.....</i>	<i>34</i>
5.3. OVERORDNET STRATEGI FOR LØSNING AV PROBLEMSTILLING	36
5.4. STRATEGI/ METODE – GJENNOMFØRING AV MODELLERING	36
5.4.1. <i>Hovedstrategi for bygging av geometrisk modell i denne oppgaven.....</i>	<i>38</i>
6. GENERERING AV GEOMETRISK MODELL	40
6.1. BYGGING AV GEOMETRI I AUTOCAD	42
6.1.1. <i>Problemer tilknyttet generering av topografiflate i AutoCad.....</i>	<i>44</i>
6.2. GENERERE TOPOGRAFIFLATE OG KOMPLETT GEOMETRISK MODELL I GAMBIT	45
6.2.1. <i>Problemer tilknyttet deformasjon av topografiflaten.....</i>	<i>48</i>
6.3. GENERERING AV GRID OG DEFINERING AV GRENSER.....	51
6.3.1. <i>Kort om muligheter og arbeidsmetoder.....</i>	<i>51</i>

6.3.2. Gridmodell og arbeidsgang i oppgaven	52
6.3.3. Definerings av grenseflater.....	55
6.3.4. Gridopløsning/ cellestørrelse	55
6.3.5. Generering av grid i viktig område; problem og valgt løsning	56
6.3.6. Vurdering av kvalitet på grid ved benyttet gridmodell - TGrid	57
6.3.7. Vurdering av problem og muligheter knyttet til benyttet gridmodell - TGrid	57
6.3.8. Andre løsninger og muligheter knyttet til grid av modell (og modelloppbygging).....	60
6.4. ENDELIGE MODELLER BENYTTET I DENNE OPPGAVEN	63
7. BEREGNING OG VALIDERING	64
7.1. SIMULERING/ BEREGNING AV UTSLIPP	64
7.1.1. Automatiserte oppgaver	67
7.1.2. Simuleringstid.....	69
7.2. METODE FOR VURDERING AV RESULTAT (VALIDERING)	70
7.2.1. Validering av resultater.....	70
7.2.2. Øvrig vurdering av resultater fra modellene som er laget	74
8. RESULTAT	75
8.1. INTRODUKSJON – RESULTATER FRA SIMULERINGENE	75
8.1.1. Oversikt over modeller og målepunkter (monitorpunkter).....	75
8.2. RESULTAT FRA MODELLERINGENE.....	77
8.2.1. Resultater – Normaliserte konsentrasjonsverdier pr monitor rad/ vertikal	77
8.2.2. Plumeprofil av massefraksjon klor, Cl_2 ,	82
8.2.3. Resultater - Maksverdi pr rad/ vertikal monitorrekke	83
8.3. VALIDERING AV RESULTATER – STATISTISK METODE	84
8.3.1. Plott - MRB vs. MRSE	84
8.3.2. Beregning av Faktor 2 (FA2).....	85
8.3.3. Sammenligning av statistisk resultat oppnådd med andre modeller	86
9. DISKUSJON.....	88
9.1. BRUK AV BEREGNINGSMODELLER FOR SIMULERING AV SPREDNING AV GASS	88
9.2. BETRAKTNINGER RUNDT GJENNOMFØRT GEOMETRIBYGGING – GEOMETRI, TOPOGRAFI OG VALG AV GRIDMODELL	90
9.3. BETRAKTNINGER RUNDT GJENNOMFØRTE BEREGNINGER/ SIMULERINGER.....	92
9.4. VURDERING AV RESULTATER – BETRAKTNINGER KNYTTET TIL SAMMENLIGNING AV DATASIMULERING OG VINDTUNNELFORSØK	93
10. KONKLUSJON.....	96
11. FREMTIDIGE ARBEIDER	99
12. REFERANSELISTE.....	100
13. VEDLEGG.....	102

Forord

Denne mastergradsoppgaven er skrevet som en del av studiet Prosess sikkerhets-teknologi ved Institutt for Fysikk og Teknologi (IFT), Universitetet i Bergen (UiB). Studiet er, for undertegnede, en naturlig utvidelse av tidligere ingeniørgrad innen brann og sikkerhet fra Høgskolen Stord/ Haugesund. Dette har også vært arbeidsfeltet siden 2001 da ingeniørgraden ble fullført.

Målet med oppgaven har vært å analysere spredning av klogass på et gitt industriområde ved bruk av programvaren FLUENT. Som en del av analysen er det gjennomført en evaluering av oppnådde resultater opp mot vindtunnelresultater for det gitte scenariet.

Masterstudiet er gjennomført på deltid ved siden av tilnærmet fulltidsarbeid i hele studietiden. Velvillighet fra arbeidsgiver har imidlertid gjort det mulig å ta helt eller delvis permisjon i enkelte perioder, samt at det var mulig å utføre arbeidet i Bergen, det året obligatoriske fag ble gjennomført. For de det gjelder rettes det en stor takk for dette.

Jeg vil takke UiB, og spesielt min veileder Bjørn Arntzen ved IFT, for all hjelp til oppgave, fag og ikke minst forståelse for at studiet ble gjennomført på deltid. Uten dette hadde gjennomføringen blitt vanskelig.

Selve mastergradsoppgaven er skrevet ved Forsvarets forskningsinstitutt (FFI) på Kjeller, Lillestrøm. Denne muligheten ble gitt gjennom Bjørn Arntzen sitt bekjentskap med Thor Gjesdal ved FFI, og har vært av vesentlig betydning for at det har vært praktisk mulig å gjennomføre oppgaven utenfor IFT. FFI har stilt kontorplass og nødvendig datautstyr og programvare til rådighet, slik at den praktiske gjennomføringen har vært optimal.

Jeg vil i denne forbindelse også takke FFI og ansatte ved avdeling V for all den hjelp de har gitt når det har vært faglige eller praktiske problemer som har oppstått. Jeg vil dessuten rette en spesiell takk til min veileder ved FFI, Thor Gjesdal, som til tross for sin meget travle hverdag, alltid har stilt opp på kort varsel når behovet har vært der.

FFI anbefales på det sterkeste for andre mastergradstudenter som ønsker utfordrende oppgaver i et meget sterkt fagmiljø.

Tilslutt vil jeg takke min nærmeste familie for å ha motivert meg til å ta høyere utdanning. En spesiell stor takk rettes til min samboer Katrin, som har vært til uvurderlig støtte i en lang studieperiode, som har inneholdt flytting til Bergen, familieforøkelse og generelt meget travle uker og helger i flere år. Uten denne støtten og tålmodigheten hadde gjennomføringen ikke vært mulig.

Oslo, høsten 2007

Jens W. Bjerkelund

Sammendrag

Hensikten med den oppgaven har vært å analysere spredning av klograss på et gitt industriområde ved bruk av programpakken FLUENT. Utgangspunktet for oppgaven er et referansescenario der det foreligger resultater fra vindtunneltester, inkl. utførlig data for topografi, geometri og andre inngangsparametere.

Undertegnede hadde ingen kjennskap til nevnte programpakke før oppgaven ble påbegynt. Som en del av introduksjonen til programvaren ble det gjennomført et 3 dagers introduksjonskurs ved leverandørens kontorer i Göteborg, Sverige. Dette vurderes i ettertid som meget verdifullt.

Som en del av denne analysen skulle det bygges en realistisk geometrisk modell for det gitte industriområde, og vurdere hvordan bygget modell gjengir de eksperimentelle resultatene. En vesentlig del av oppgaven har også vært å evaluere gridoppløsningens effekt på resultatene. Kort fortalt bestod oppgaven av følgende steg:

1. Bygge volumgeometri (geometri og topografi) for bruk i simuleringen.
2. Generere grid i volumgeometrien. Det ble generert modeller med forskjellig gridoppløsning, som sammen med de volumgeometriene som var bygget, resulterte i til sammen 5 geometriske modeller for beregning av spredning.
3. Beregne spredning av klograss for det aktuelle området ved bruk av genererte modeller.
4. Evaluere oppnådde resultater inkl. validering mot referansedata.
5. Utarbeide dokumentasjon (denne rapporten).

Fra FFI ble det bl.a. uttrykt ønske om at forenklinger i geometri eller topografi ikke skulle gjøres.

Spesielt generering av volumgrid skapte store problemer og veldig mye arbeid. Det viste seg umulig for undertegnede innenfor tilgjengelig tidsramme å greie og generere volumgrid med strukturert gridmodell, som anbefalt av FFI. Som følge av dette ble annen modell besluttet benyttet (ustrukturert modell).

Endringen i gridmodell førte til at det ble benyttet en modell som det er opplyst at ikke benyttes i særlig grad ved FFI. Gjennom arbeidet er det avdekket en del svakheter, men også positive trekk, ved modellen. Oppnådde resultater viser at gridmodellen er brukbar, men også at det er visse usikkerhetsmomenter tilknyttet den.

Denne oppgaven er skrevet som hovedoppgave i et masterstudium. Total oppgavetid er to semestre (10 måneder). Av denne totaltiden, som inkluderer litteraturstudie og oppgaveskriving, tok bygging av geometri og generering av volumgrid over halve tiden. Dette illustrerer hvilken belastning denne delen av modelleringsoppgaven utgjorde.

Det konkluderes med at det er oppnådd gode resultater. Den ”beste” geometriske modellen som er bygget vurderes å gjengi vindtunnelresultatene på en tilfredsstillende måte, selv om det er en liten underprediksjon i resultatene.

I tillegg konkluderes det med at gridets oppløsning (dvs. gridcellenes størrelse), i området som er viktig for spredningen, har stor betydning. I denne oppgaven, der beste modell har celledimensjon tilsvarende 1 m i dette området, er det påvist stor forskjell i resultatene dersom celledimensjonen doubles.

Til slutt konkluderes det med at undertegnede gjennom arbeidet har tilegnet seg meget nyttig kunnskap innenfor fagområdet, og innenfor de benyttede programvarene. Benyttet referansescenario vurderes i denne sammenhengen som en av faktorene for at dette er tilfelle (ikke på tross av, men på grunn av alle problemene som har oppstått som følge av referansedataenes kompleksitet).

Benyttet referansescenario anbefales for videre analyse av samme og andre typer problemstillinger, da det inneholder mange interessante momenter, samt at det er mye brukt (mye dokumentasjon foreligger).

Språklige forkortelser

ift.	I forhold til
mht.	Med hensyn til
dvs.	Det vil si
o.l.	Og lignende
el.l.	Eller lignende
iht.	I henhold til
pga.	På grunn av
mm.	Med mer
inkl.	Inklusiv(e)(t)
kap.	Kapittel
m.fl.	Med flere
hhv.	Henholdsvis
Pt.	For tiden

Forklaring av enkelte ord og uttrykk

CFD	Computational Fluid Dynamics. Betegnelse på beregningsmodeller som den som benyttes i denne oppgaven.
Fluid	I utgangspunktet et uttrykk for væske, men benyttes som et generelt begrep for det mediet som er aktuelt i strømmingen. "Fluid Dynamics" omtales på norsk ofte som "strømningslære".
Modellering	Uttrykk for den samlede arbeidsoppgaven tilknyttet en, i dette tilfelle, CFD analyse. Inkluderer alle oppgaver fra start frem til ferdig resultat.
Simulering/ Beregning	I denne oppgaven angir dette i utgangspunktet selve beregningen av spredningsforløpet som gjøres i programmet FLUENT.
Plume	Angir røyksøyle/ -fane (en skyformet stråle). Brukes også om gasskyer (som i denne oppgaven). Et engelsk uttrykk som er vanlig brukt også i Norge.
Celler	Betegnelser for beregningsvolumer i modellene som genereres.
Grid	Grid = nett, maske Celle = et volum (beregningvolum) Et grid består av mange celler som danner et nett. Når det angis at en gitt geometri skal grides, betyr det at det skal lages et sett med celler som omslutter hele geometrien og volumet (evt. at bare flatene eller kantene grides). For et volum kalles dette "volumgrid". En celle kalles også "gridcelle".
Gridmodell	Angir måten cellene bygges opp på (firkant, tetrahed). Det fins flere forskjellige modeller som deles i to hovedkategorier; strukturert og ustrukturert.
Spacing	Betegnelse for størrelse på celler. I GAMBIT angis spacing ved generering av celler (grid). Spacing 1 for en celle med form som en kube, gir en kube med størrelse 1 x 1 x 1 m.
Tetrahedral	Volum med av fire sider, dvs. et trekantet pyramidevolum. Denne typen form benyttes i utstrukturert grid.

Symbolliste

Her følger en liste over symboler benyttet i oppgaven. Symbolene er også angitt der de er benyttet.

C'	Målt middelerdi for et gitt punkt for en gitt periode (molar) [mol/dm^3]
C^*	Normaliseringsprodukt for modellens skala [g/dm^3]
C_s	Kilde-/ utslippskonsentrasjon (massefraksjon Cl_2) [g/mol]
C_o	Normalisert observert konsentrasjonsverdi (her; fra vindtunneltest) (normalisert; ift. modellens skala) [dimensjonsløs]
C_p	Normalisert predikert konsentrasjonsverdi (her; fra beregninger i FLUENT) (normalisert; ift. modellens skala) [dimensjonsløs]
C_g	Grensejustert konsentrasjonsverdi (terskelverdi) [dimensjonsløs]
d	Høyden over bakken der normal turbulensutveksling skjer (dvs. høyden til det effektive bakkenivået) [m]
H	Gjennomsnittlig bygningshøyde (ift. modellens skala) [m/s]
H_v	Gjennomsnittshøyde på ruhetselement (eventuelt det gitte element) [m]
k	von Karman konstant (= 0,4)
L	Monin – Obukhov length
ppm	Parts per million (konsentrasjon enhet pr million)
Q_s	Utslippsrate [kg/s]
Ri	Richardson number
u	Vindhastighet [m/s]
u^*	Friksjonshastigheten [m/s]
U_h	Vindhastighet i gjennomsnittlig bygningshøyde (ift. modellens skala) [m/s]
z_0	Ruhetslengde [m]
z	Størrelse i z-retning (høyde over bakken) [m]
τ	Reynoldsstress
ρ	Tetthet (kg/m^3)

1. INTRODUKSJON

Utslipp og spredning av gass er daglig en aktuell problemstilling. Forskjellige former for gass brukes i et stort spekter innenfor industri, forskning, etc., men også mye i private husholdninger. Når det snakkes om utslipp og spredning av gass er det gjerne i kontekst av hendelser som kan føre til fare for liv og helse, samt skader på miljø.

Årsaken til utslipp kan være mange, og noen eksempler er ulykker på vei eller anlegg, svikt i prosedyrer ved håndtering av produkt, i vedlikehold/ utstyr, etc. En annen aktuell årsak er sabotasje (industri/ terror/ etc.). Vi har hatt eksempler på ulykker i Norge som har ført til utslipp av giftig gass, men som heldigvis ikke har ført til tap av liv. Togulykken på Lillestrøm i april 2000 er et eksempel på en ulykke som kunne fått meget store konsekvenser. Der fikk man et utslipp av brennbar gass (propan) uten spredning, da utslippet antente (jet-flamme utenfor tanken). I det tilfellet var man redd for to ting a) at brannen som følge av utslippet varmet opp gasstanken slik at den eksploderte (BLEVE) eller b) at brannen ble slukket slik at spredning av brennbar gass kunne skje med senere antenning og eksplosjon. Togstasjonen der ulykken skjedde ligger inne i tettbebygd strøk (Lillestrøm sentrum), og konsekvensen av et av de to scenariene er i ettertid vurdert å kunne hatt store konsekvenser for store delere av tilliggende bebyggelse.

Uavhengig av årsaken til at utslipp og spredning kan skje er det et ønske om å kunne forutse følgende av det (konsekvensanalyse). En vurdering av følgende vil være et beslutningsgrunnlag for nødvendige tiltak som må iverksettes for å forebygge og hindre at utslipp skjer.

Det er utført en stor mengde arbeider knyttet til prediktering av konsekvens av utslipp. Dette har ført til en mengde modeller av ulik kompleksitet og kvalitet. Når det gjelder prediktering av spredning av tunge gasser (som f.eks. klor) ble det gjort store fremskritt på 70-tallet. Det ble da funnet at tung gass oppfører seg vesentlig annerledes enn nøytral gass (nøytral ift. oppdrift), noe som gjorde at de modeller som til da var laget for prediksjon av spredning måtte revideres. Fra 70-tallet og frem til i dag har det derfor blitt jobbet spesifikt med å finne frem til metoder som håndterer tunge gasser.

Spesielt de siste 10-15 årenes kraftige utvikling innen datamaskinens kapasitet har ført til at det er blitt mulig å benytte såkalte tredimensjonale metoder. Disse modellene baserer seg på standard velkjente fluiddynamiske modeller som overføres til numeriske modeller, som videre lar seg løse ved hjelp av datamaskiner (kjent som CFD modeller). Dette er omfattende regneprosesser som krever til dels veldig mye maskinkapasitet (prosessorkapasitet). Programvaren som benyttes i denne oppgaven, FLUENT¹, er et slikt type program. Dette programmet er et av de største og mest anerkjente programmene av dette slaget på det kommersielle markedet.

Simulering av en hendelse ved bruk av programvaren som beskrevet over, krever forholdsvis mye av både operatør og program-/ maskinvare. I tillegg vil inndata og oppsett av modell være helt avgjørende for resultatet (kvaliteten på det som legges inn avgjør kvaliteten på det som kommer ut). For å kunne arbeide effektivt med slike simuleringer er det viktig å vite på forhånd, så langt det lar seg gjøre, hvilke inndata som er nødvendige/ viktige og hvordan modellen skal bygges opp (geometrioppbygning av det som skal simuleres).

Selve oppgaven er en del av forskningsprosjektet 1048 – V/917 – *Masseødeleggelsesvåpen – Trussel og beredskap* ved FFI. Giftige industrikjemikalier (som f.eks. klor), ofte omtalt som TICs, kan i denne sammenhengen bli sett på som et potensielt kjemisk våpen og feller derfor inn under betegnelsen masseødeleggelsesvåpen. I forbindelse med prosjektet skal det bl.a. utføres en analyse av et utslipp/spredningsscenario i simuleringsprogrammet FLUENT¹. I denne oppgaven vil det bli gjennomført en analyse av et utslipp og spredning av klorgass i en gitt bebyggelse. Det skal benyttes et referansescenario i simuleringene, som det bl.a. fins eksperimentelle data på for sammenlikning.

¹ Det henvises til kap. 4 for informasjon om simuleringsverktøyet FLUENT/ GAMBIT.

1.1. Problemstilling

Som nevnt over går oppgaven ut på å simulere et utslipp og spredning av klorgass i en gitt bebyggelse. Hovedfokuset i oppgaven vil bli lagt på å forberede/ utarbeide inndata for simuleringen, og da spesielt på forholdet knyttet til oppbygning av geometrisk modell i GAMBIT. Her vil geometrisk modell, i tillegg til oppbygning av geometri/ bebyggelse, bestå av oppbygning av en terrengmodell basert på opplyste data for terreng (koordinater i forhold til Nord/Øst og høyde). Pt. er dette delvis ”upløyd mark” ift. effektive metoder, noe som ikke er i tråd med ønske om å kunne arbeide effektivt med slike analyser. Det vil derfor bli lagt vekt på å finne metode for oppbygning av en terrengmodell som effektiviserer slikt arbeid, slik at både arbeidsprosessen blir effektiv og resultater blir tilfredsstillende.

Et annet viktig parameter i bygging av geometrisk modell for simulering er oppbygning av volumgridet². Det har vist seg at gridmodell og oppløsningen på gridcellene er et viktig parameter ift. kvaliteten på resultatene som oppnås. I denne oppgaven vil det derfor også bli lagt spesielt fokus på denne delen av oppbygningen av en geometrisk modell som kan benyttes til beregning av spredning av klorgass.

Ettersom evalueringen av terrengmodellene må gjøres i form av vurdering av resultater fra simuleringer, vil det bli gjennomført fullstendige simuleringer. Disse simuleringene vil bli vurdert opp mot eksperimentelle resultater (vindtunnelresultater) fra referansescenariet (referansescenariet blir gjennomgått i kap. 2). I utgangspunktet vil det hovedsakelig bli benyttet standard innstillinger i simuleringprogrammet (FLUENT) ved disse simuleringene.

Hovedmålet med oppgaven er med dette:

Oppbygning av terreng- og geometrisk modell i GAMBIT basert på oppgitte data for terreng og bebyggelse. Det skal søkes metoder som effektiviserer prosessen, og som skaper gode resultater. Det skal i tillegg fokuseres på oppbygning av gridmodell i den geometriske modellen som genereres. I tillegg skal resultater fra simuleringer valideres ift referansedata, for å vurdere kvaliteten på de modellene som er bygget. Som en del av denne vurderingen skal det bygges forskjellige modeller, mht. gridoppbygning, for å vurdere om dette har noen effekt på resultatene.

Dette vil i hovedsak bli besvart i kap. 5, 6 og 7.

Som en del av evalueringsprosessen vil det bli benyttet anerkjente statistiske valideringsmetoder, som er utviklet gjennom bl.a. vurdering av akkurat det samme scenariet som benyttes i denne oppgaven. Denne valideringen vil være kvalitetsmålet for modellene som bygges, og vil angi hvordan resultatene ligger i forhold til resultatene fra vindtunneltestene.

1.2. Oppbygningen av oppgaven

Det vises til innholdsfortegnelsen for en oversikt over kapittelinndeling. Oppgaven bygges opp på tradisjonelt vis, men følgende nevnes spesifikt tilknyttet kapittel 5, 6 og 7:

- I disse kapitlene beskrives bl.a. strategien og metoden som er benyttet for å løse problemstillingen i oppgaven. I tillegg gjennomgås selve utførelsen av modelleringen, dvs. geometribygging, beregning og validering.
- Gjennomgangen av selve utførelsen inkluderer en gjennomgang og oversikt over problemer som har oppstått og forslag til løsninger på disse. Ettersom dette er en spesifikk del av oppgaven kan det regnes som et slags resultat uten at dette tas opp spesifikt under kap. 8 – Resultat. Kap. 8 er således kun avsatt til gjennomgang av resultater tilknyttet simuleringene som er gjort.
- De forhold som er påpekt under kap. 5, 6 og 7 vil imidlertid bli tatt med under konklusjon og diskusjon, som en del av det totale resultatet.

² Volumgrid betegner alle volumene/ cellene som dannes ved oppdelingen av den geometriske modellen i mindre volumer som brukes ved beregning. Dette forholdet blir utførlig gjennomgått i kap. 6.

2. SCENARIOBESKRIVELSE – REFERANSE PROSJEKT

2.1. Generelle forhold tilknyttet scenariet og eksperimentelle data

Simuleringene som skal gjøres i oppgaven tar utgangspunkt i et referansescenario med et gitt datasett for sammenligning av resultater.

Referansescenariet er et forskningsprosjekt utført for den Europeiske Union (EU), og ble ferdigstilt i 1997, Hall (1995/96). Hovedansvarlig for gjennomføring av prosjektet var R. C. Hall (WS Atkins, UK). Prosjektet hadde tittelen "Evaluation of Modelling Uncertainty: CFD Modelling of Near-field Atmospheric Dispersion" (EMU). Utgangspunktet for prosjektet var å se nærmere på usikkerhetene tilknyttet CFD-simulering av bakkenære utslipp. Med usikkerhet menes her hva som påvirker resultatene. Det nevnes at det aktuelle scenariet er benyttet i flere andre prosjekter også, bl.a. prosjektet "Scientific Model Evaluation of Dens Gas Dispersion Models", som det også vil bli referert til i denne oppgaven.

Hovedformålet med EMU prosjektet var å evaluere spredningen i resultatene ift hvordan en CFD-code/ -program ble benyttet og satt opp. I tillegg skulle nøyaktigheten og brukbarheten ved simulering av situasjoner med store og komplekse utslipp vurderes.

Som en del av EMU prosjektet ble det utført vindtunneltester av det aktuelle scenariet. Resultatene fra disse testene ble benyttet til vurdering av resultatene fra CFD beregningene/ simuleringene. I denne oppgaven skal eksperimentelle data (dvs. resultater fra vindtunnelforsøk) fra EMU benyttes til vurdering av resultatene fra de CFD-simuleringene som gjøres.

Inngangsdataene tilknyttet datasettet for referansescenariet inneholder i utgangspunktet alle data for å bygge modell, gjennomføre beregning/ simulering og vurdere resultater fra vindtunnel mot resultater som oppnås. Datasettet, slik det er mottatt fra oppdragsgiver (FFI), inneholder kort fortalt følgende:

- Data for bygging av geometri (bygninger og anlegg).
- Data for generering av topografi (x, y, z koordinater), gitt med oppløsning 10x10 m (og et forfinet rutenett på 5x5 m rundt utslippet).
- Data for klimatiske forhold (temperatur, stabilitet, vindretning).
- Data tilknyttet utslippet (mengde, blandingsforhold, temperatur, med mer)
- Data fra konsentrasjonsmålinger (gitt for hvert enkelt monitorpunkt som en midlet verdi over hele utslippperioden).

Det er oppdaget en usikkerhet tilknyttet datasettet. Dette er angivelsen av utslippspunkt i z-retning (høyden). Det er angitt på tegning hvor det er plassert (midt på en tank, se Figur 5-1), og denne plasseringen benyttes for z-retning koordinat.

Det nevnes at datasettet også inneholder data for utslipp og spredning av nøytral gass. I denne oppgaven er det imidlertid kun spredning og utslipp av klorgass som behandles.

Ytterligere spesifikke data for referansescenariet blir gjennomgått i kap. 5.

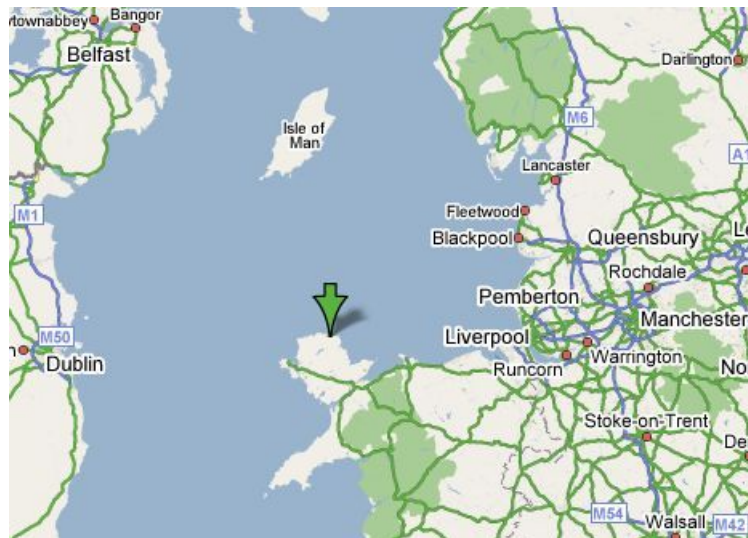
I vurderingen av oppnådde resultater, og de erfaringer som oppnås gjennom oppgaven, vil referansescenariet også bli benyttet til en mer kvalitativ vurdering. Dette vil i hovedsak gå ut på å se om erfaringer man gjorde seg for 10 år siden er lik de erfaringene man sitter med i dag. Dette er interessant spesielt fordi det har skjedd meget store endringer innen både program- og maskinvare, noe som i utgangspunktet burde bety bedret nøyaktighet, raskere beregninger og enklere bruk. Spørsmålet er således om de overordnede erfaringene er uavhengig av utviklingen innen program- og maskinvare, og om problemene og bekymringene ift nøyaktighet er de samme.

2.2. Beskrivelse av fysiske forhold tilknyttet scenariet

De simuleringer som skal gjøres har utgangspunkt i et reelt sted i Europa. Stedet ligger i Wales, England, og heter Amlwch (se Figur 2-1).

Referansescenariet som benyttes i denne oppgaven baserer seg på et industriområde med kjemisk industri i Amlwch. Den aktuelle plassen/ bedriften heter "Octel Amsite", og er i dag nedlagt. På dette industriområdet var det tidligere mye håndtering og generering av bl.a. klor (gass og væske).

Det aktuelle området ligger plassert ute ved kysten. Deler av området som omfattes av simuleringene er sjø/ kyst linje. Topografien går fra 0 m ved havoverflaten til omlag 30 m på det høyeste punktet (se Figur 2-2 og Figur 2-3). Selve industriområdet består av bygninger og tanker fordelt på området. Det er forholdsvis stor avstand mellom bygningene. I tillegg til bygningene består industriområdet også av en mengde rørgater, biler/ lastebiler, en jernbane, etc. Dette er forhold som ikke er tatt med i det geometrioppsettet som opprinnelig er generert for beskrivelse av området. Dette er derfor heller ikke en del av den modellen som bygges i denne oppgaven.

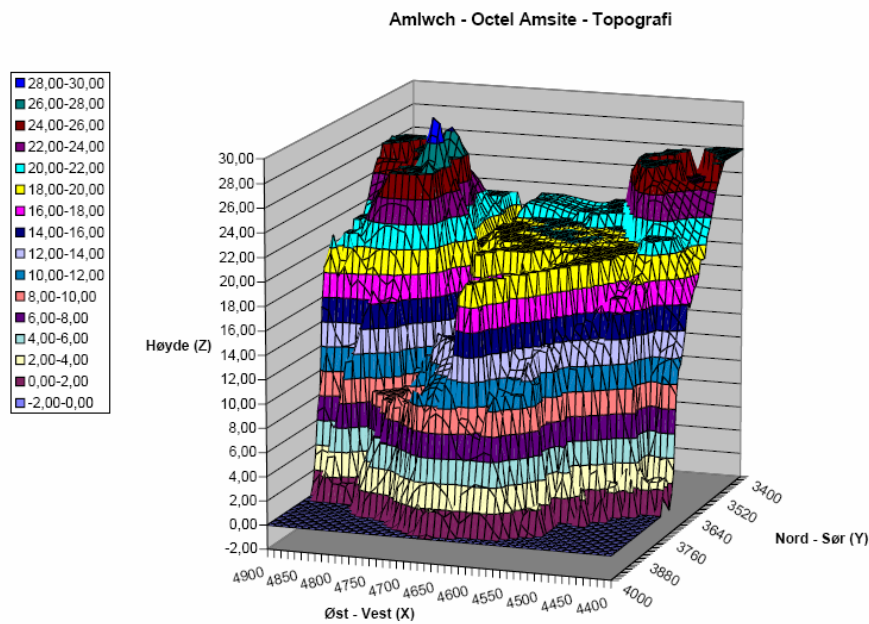


Figur 2-1: Kart som viser beliggenheten til Amlwch (hentet fra Google Maps)

Det er lite vegetasjon på området, med hovedsakelig gress og annen lav buskvegetasjon. Topografien kan klassifiseres som småkupert. Se Figur 2-2 for topografiprofil for området som inkluderes i modellen som skal bygges. Topografiprofilen baserer seg på data for lengde- og breddegrader, samt høyde over vannoverflaten.

I kapittel 3 vil det bli gjort en kort gjennomgang av hvilken påvirkning topografiske og meteorologiske forhold har å si for spredningsforløpet. Ved gjennomgang av inndata for bl.a. meteorologiske forhold (kap. 5) vises hvilke forhold som er gjeldende for det aktuelle scenariet.

Det nevnes at det ikke vil bli gjort noen forenklinger eller justeringer av oppgitte inngangsdata. Dette vil imidlertid bli nevnt som en anbefaling dersom gjennomføringen viser at det kunne vært en fordel.



Figur 2-2 Topografi for referansescenariet (enhet = meter). Det påpekes at figuren ikke gir en helt riktig illustrasjon av horisontal/ vertikal oppløsningen. Det er større oppløsning vertikalt (2 m vs. 50 m vertikalt), som gjør at det virker som om det er veldig bratt terreng. Dette stemmer ikke med virkeligheten, noe som blir riktigere illustrert senere i rapporten (egenprodusert).



Figur 2-3 Kart overindustrialanlegget som danner grunnlaget i referansescenariet, og som i sin helhet bygges i modellen i denne oppgaven (Cowan (1996)).

Figur 2-3 viser (noe uklart) bygningene som er inkludert i scenariet. Topografiske data som foreligger er noe mindre enn det som vises på figuren.

3. SPREDNING AV TUNG GASS – GRUNNLEGGENDE KONSEPTER

3.1. Introduksjon

Utslipp og spredning av gass, og da spesielt brennbar og giftig gass, er en dagsaktuell problemstilling i mange sammenhenger. Uavhengig av type hendelse er det et ønske om å kunne prediktere konsekvensen av et utslipp/ en spredning. En realistisk prediksjon vil avhenge av både inngående kjennskap til teori tilknyttet spredning generelt, samt til det gitte materialets egenskaper. Gode beregningsmodeller vil også være nødvendig.

Det har vært flere alvorlige hendelser der klor har vært involvert. Flere hendelser har også ført til tap av liv og/ eller skader. Under følger en kort oversikt over enkelte hendelser tilknyttet utslipp av klor.

Tabell 3-1 Eksempler på hendelser med klor som har ført til død og/ eller skadde.

Dato	Sted	Hendelse	Utslippsstørrelse, kg	Antall døde/skadet
26.02.78	Youngstown, Florida, US	Godstog med kjemikalier sporet av. Tank med klor ble punktert i kollisjon med annen vogn. En gassky ble dannet, og skyen flyttet seg over en nærliggende motorvei. Det var natt og tåke, og bilistene så derfor ikke skyen., og kjørte inn i den. De som døde var alle blant bilistene som kjørte inn i skyen. Togpersonellet klarte etter hvert å stanse trafikken.	-	8/ 114
16.06.81	Atlanta, Georgia, US	Klorlekkasje fra en gassflaske på en lastebil. Lastebilen var parkert ved en lasterampe i garasjen på et hotell da en 68 kg gassflaske falt fra bilen og begynte å lekke.	68	-/ 33
01.08.81	Montana, Mexico	Godstog med 32 50 tonnns klortanker sporet av grunnet bremsesvikt. Totalt utslipp var på 300-350 tonn, der ca 100 tonn slapp ut de første minuttene. Vindretningen der det skjedde var mot en liten landsby. Høyest klorkonsentrasjon antas å være i et belte med lengde ca 1000 m x 40 m bredde. Vegetasjonen i området ble bleket. Ca 1000 mennesker havnet på sykehus.	300'-350'	17/ 280
07.04.95	China	Stålbeholder med klor eksploderte på Chengdu kjemiske fabrikk.	-	3/ 19

Referanse: Mannan (2005) og McBride, Reeves, Vanderheyden et al. (2001)

Konsekvensen av en hendelse på et gitt tidspunkt kan være vanskelig å forutse, og vil være avhengi av flere viktige faktorer. Når utslippet skjer utendørs, er vindretning den viktigste faktoren. Det vil være flere andre faktorer, som temperatur, topografi, bebyggelse, etc., men vindretning er det som er den første og enkleste indikasjonen på spredningsretning. I tillegg vil stoffets egenskaper også være vesentlig.

I en risikovurdering vil alle nevnte faktorer være aktuelle, og det vil være nødvendig å finne frem til bl.a. de scenarier som vil gi verst tenkelig utfall, og sikre mot disse.

I de følgende kapitlene vil det bli gitt en overordnet gjennomgang av viktige (teoretiske) forhold tilknyttet spredning av tung gass, samt hvilke muligheter som ligger i prediksjon av en gitt hendelse.

3.2. Grunnleggende konsepter - spredningsteori

Dette kapitlet består i hovedsak av stoff basert på litteraturstudie (innen fagfeltet), og er ment som en gjennomgang av enkelte viktige forhold tilknyttet utslipp og spredning av gass (fortrinnsvis tung gass), samt ift. scenariet som behandles i oppgaven.

Det bør nevnes at det i denne oppgaven ikke er fokusert spesielt på vurdering av selve utslippet, men på spredning av tung gass som følge av et gitt utslipp.

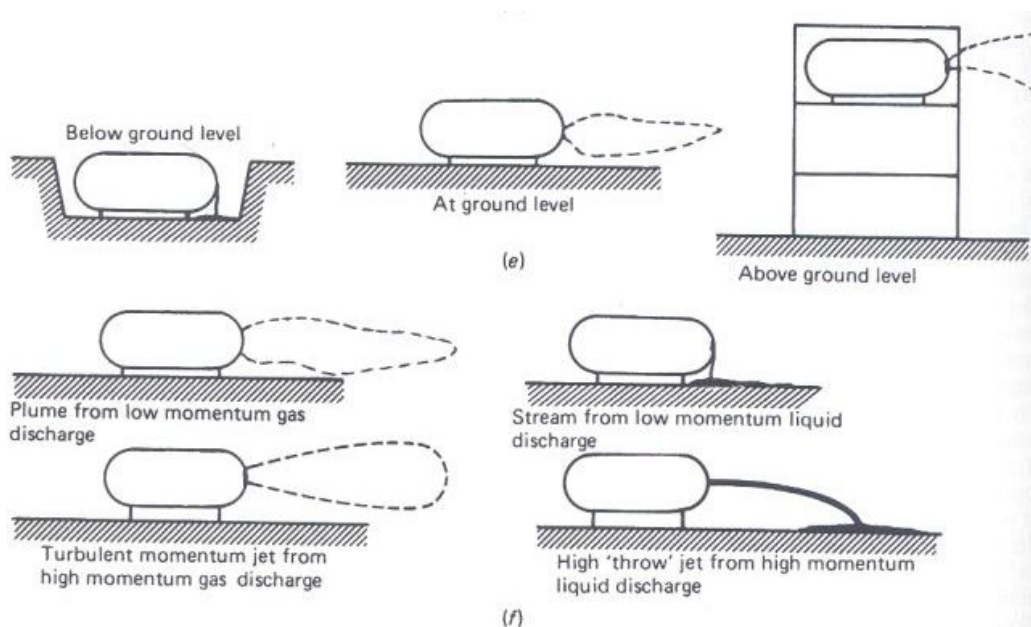
Teori i dette kapitlet er i hovedsak hentet fra følgende kilder: Mannan (2005), Hanna and Britter (2002) og Hanna (1996). Referansene angis kun der det anses som nødvendig. Annen litteratur som det refereres fra nevnes spesielt.

3.2.1. Utslipp og spredning av (tung) gass

Når det her snakkes om utslipp og spredning av gass er det i betydningen av utslipp av gass som på en eller annen måte er farlig for omgivelsene, fortrinnsvis giftig og/ eller brann-/ eksplosjonsfarlig.

Utslipp av gass skjer i utgangspunktet ved uønskede hendelser, eventuelt som en bevisst handling i en krigssituasjon, terrorhandling, el. En uønsket hendelse vil være enten ved svikt i teknisk utstyr eller ved menneskelig feil, eventuelt en kombinasjon. Uavhengig av årsak er imidlertid et felles kjennetegn at det er potensiell store konsekvenser tilknyttet hendelsen.

Sett ift de mange mulige årsakene til utslipp er det vanskelig å fastslå på forhånd størrelse og varighet, noe som fører til en stor usikkerhetskilde i vurderinger og beregninger. Det er imidlertid viktig å vurdere selve utslippet særskilt, da bl.a. spredningen av gasskyen/ plumen vil avhenge vesentlig av dette. Mulige spredningsscenarioer må derfor kartlegges nøye og vurderes særskilt (gjøres gjennom risikovurdering av mulige utslippsplasser (tankanlegg, m.fl.)). Se fig. Figur 3-1 for illustrasjon av utslippssituasjoner.



Figur 3-1 Noen få eksempler på utslippssituasjoner (Mannan (2005)).

Vurdering av utslipps-/ spredningssituasjoner gjøres ift bl.a. følgende parametere:

- 1) Fluidet type
 - a. Gass/ damp
 - b. Væske
 - c. Mix: Væske – Damp
- 2) Fluid momentum/ bevegelsesmengde
 - a. Lavt momentum
 - b. Høyt momentum
- 3) Fluid oppdrift
 - a. Positiv oppdrift
 - b. Nøytral oppdrift
 - c. Negativ oppdrift
- 4) Atmosfæriske forhold
 - a. Lav turbulens
 - b. Høy turbulens
- 5) Sted/ utstyr
 - a. Tank
 - b. Rørledning
 - c. Annet utstyr
- 6) Hull
 - a. Komplette brudd
 - b. Begrenset brudd
- 7) Geometriske begrensinger
 - a. Inne i en bygning
 - b. Utendørs i kompleks omhyllende geometri
 - c. I friluft
- 8) Høyde
 - a. Under bakkeplan
 - b. På bakkeplan
 - c. Over bakkeplan

Alle disse parametrene vil være viktige å vite noe om ved vurdering av utslippssituasjonen og konsekvenser av den. Vil utslippet danne en væskedam/ basseng, eller vil det skje direkte fordampning? Er det et direkte gassutslipp? Eller vil det være en kombinasjon? Er utslippet kontinuerlig tidsmessig, eller er det kun et kort blaff, som følge av et kort momentant utslipp? Dannes det en begrenset sky eller en kontinuerlig sky/ fane/ plume fra utslippspunktet og utover spredningsområdet? Dette er bare noen spørsmål som må stilles og besvares i en risikovurdering for å kunne vurdere konsekvens.

Utslipp kan videre kategoriseres å enten komme fra en trykksatt eller ikke-trykksatt (typisk nedkjølt) lagring. Et utslipp fra en tankkollaps vurderes som momentant (dvs. at alt materiale lekker ut øyeblikkelig), i motsetning til et rørbrudd eller begrenset brudd som kategoriseres som et kontinuerlig utslipp.

For å vurdere mengden væske som transporteres inn i skyen ved trykksatt utslipp, må kilde og dens spesifikasjoner vurderes ift utslippsform/ -type. I et en-fase gassutslipp er dette forholdsvis greit, mens det imidlertid blir noe mer komplisert å angi en bestemt modell for kilde-temen ved væske eller to-fase utslipp.

Om utslippet karakteriseres som en jet eller en plume vil avhenge av om det er hhv. momentumet eller oppdriften (positiv eller negativ) som er den dominerende mekanismen. Disse kreftene vil være dominerende for spredningen i de nærmeste områdene til selve utslippspunktet, men etter hvert som disse kreftene reduseres vil atmosfærisk turbulens (grunnet faktorer som vær og bygg/topografi) overta som dominerende krefter i spredningen.

Et væskeutslipp vil bli påvirket av underliggende overflate, og vil "koke" eller fordampe over en forlenget periode (dvs. væsken fordampes over tid). Videre vil dannelsen av en tung gassky fra en nedkjølt og ikke

trykksatt væske bestemmes av varmetransporten til væsken (og gjennom det fordampning og oppdrift). Et væskeutslipp i et begrenset område, som danner et "basseng", vil skape en stor kilde (hele bassenget er kilden til skyen, ikke selve utslippspunktet på tanken), noe som skaper en stor tilførselsmengde til skyen. Tilførselen vil imidlertid reduseres over tid etter hvert som varmetransporten fra underliggende overflate vil avta (væsken vil ha avkjølede effekt på underliggende overflate).

Utslippshøyde (over eller under bakken) vil også ha vesentlig betydning for utbredelse og spredningsforløp. Det som ofte er av interesse ved eleverte utslipp er å prediktere hvor plumen eller skyen "lander" og konsentrasjonen i dette tidspunktet. I utgangspunktet kan det antas at spredningen vil få en større utstrekning enn ved utslipp som skjer ved bakkeplan, mens det vil være en større uttynning av konsentrasjonen ved eleverte utslipp. I tilfelle knytte til giftige stoffer vil et eleverte utslipp være negativt, mens denne uttynningen kan være tilstrekkelig for å unngå brennbare blandinger (om stoffet er brennbar).

Videre vil egenskapene til selve gassen som slippes ut være av viktig betydning. Det som kjennetegner såkalt **tung gass** er at den er tyngre en luft (derav navnet tung gass). Mange kjente giftige gasser, som hydrokarboner, klor, ammoniakk, m.fl., har tung gass egenskaper. Om et gitt gassutslipp vil forme en gass sky som er tyngre enn luft avhenger av flere faktorer, som er:

- a) molekylvekten til gassen
- b) gassens temperatur
- c) om det er en væske spray (dvs. utslipps type)
- d) luftfuktighet og -temperatur

En gassky kan være tung bare i egenskap av molekylvekten (dvs. høyere molekylvekt enn luft, som i tilfelle klor). Faktorene over angir imidlertid at en gassky kan karakteriseres som tung, selv om den gitte gassen i utgangspunktet har en lavere molekylvekt enn luft. Et eksempel på dette er at gasskyen kan karakteriseres som tung bare pga. lav temperatur, som kommer av gassens lave kokepunkt. Samme effekt utgjør dessuten punkt c) over. I dette tilfellet vil fordampningen av dråpene føre til at varme fjernes og gassen blir med det kald. NH_3 (ammoniakk) er et godt eksempel på det. Denne gassen er i utgangspunktet mye lettere enn luft, men nedkjøling grunnet fordampning kan i noen tilfeller gi opphav til tung gasseffekter. I andre tilfeller vil gasskyen være lett. Dette gjør det svært vanskelig å gjøre vurderinger ift. utslipp og spredning av NH_3 .

Oppdriften til en tung gass vil i seg selv være negativ, og må påvirkes av andre krefter (turbulens, med mer) for å spres oppover. Som sagt over vil oppdriften til et gitt stoff kunne variere. I tillegg vil et væske-/dråpeutslipp føre til fall mot bakken (negativ oppdrift), mens oppdriftskreftene overtar ved fordampning. En tung gass vil imidlertid ikke ha sterk oppdrift i seg sett ift. luft. I et spredningsforløp, med en i utgangspunktet tung gass, vil den relative tettheten, og konsentrasjonen, reduseres som følge av fortykning ved blanding (med f.eks. luft). Dette fører videre til at spredningsforløpet (-modus) endres fra tung gass spredning til nøytral gass spredning. Dette vil kunne være tilfellet for f.eks. klorgass (Cl_2), som i utgangspunktet er vesentlig tyngre enn luft.

Tettheten i en gassky avhenger, som nevnt, av egenskapene til materialet som slipper ut, men også av hvordan det lagres og hvordan det slipper/ lekker ut.

NB! I denne oppgaven vurderes som nevnt kun spredningen av gass. Det er angitt at gassen holder samme temperatur som omgivelsene, og utslippet er angitt som en gassjet ut av et hull i en tank med en gitt størrelse. Utslippet er kontinuerlig og sett ift selve utslippspunktet er det derfor i hovedsak følgende forhold som vil påvirke spredningen av gassen i dette tilfellet:

- **Varighet** på utslippet
- **Geometri** på utslippet (her: rundt hull) og på bygninger, med mer.
- **Plassering** på utslippet (her: i nærheten av bakkeplanet)
- **Momentum**; bevegelsesmengden (viktig for spesielt tidlig del av spredningen)
- **Molekylvekt** på gass ift luft (gravitasjon)
- **Turbulens**; som følge av hastighet på jet, og som følge av turbulens i vindfeltet generert av bygninger, topografi, m.m.

- **Topografi;** tung gass vil ligge langs bakken og vil derfor påvirkes av formasjon på topografien, samt forhold som overflateruhet.

Momentumet på utslippet vil påvirke den første perioden av dannelsen og formasjonen på gassfanen/ - plumen. Ved lav kinetisk energi på jeten vil fanen flagre, mens høy kinetisk energi vil skape en jet med en veldefinert form. Ved høy kinetisk energi vil flagringen imidlertid kunne ses et stykke vekk fra selve utslippspunktet.

Turbulensen som skapes kommer delvis som direkte følge av momentumet til jeten, men også geometriske hindringer samt turbulens generert av atmosfæriske forhold/ vindhastighet (som bl.a. er påvirket av topografi, bebyggelse, med mer). Ved utslippspunktet er det i hovedsak utslippskarakteristikken (momentum og form på utslippspunktet (hullet)) som avgjør turbulensintensiteten. Jo lenger vekk fra utslippspunktet en kommer, jo mer vil atmosfæriske forhold (vindhastighet, temperatur, m.fl.), overflateruhet, geometri, forskjeller på materialene (molekylvekt), etc. være styrende for turbulensgenereringen og –intensiteten, og med det spredningen i form av utbredelse og konsentrasjon.

Det er med andre ord en mengde forhold som vil påvirke spredningsforløpet. Et inngående kjennskap til alle forhold ved scenariet vil være nødvendig. Antakelser som gjøres må videre være kvalitativt og/ eller kvantitativt begrunnet for at resultatene skal kunne være realistiske. Eksempel på kvalifisert antakelse vil være vurdering av størst sannsynlige meteorologiske forhold med bakgrunn i statistiske værdata.

3.2.1.1. Noen spesifikke egenskaper tilknyttet Klor, Cl₂

Klor er en av to industrigasser (ammoniakk er den andre) som blir benyttet i stor skala. Dette sammen med materialegenskapene gjør stoffet til en potensiell stor giftfare.

Molekylvekten til klor er 70,6 g/mol, og gjør gassen tung kun i kraft av vekten. Klor har videre et kokepunkt på -34⁰C, og et utslipp av klor i væskeform vil gjøre gassen (avdampet) noe tyngre (dvs. gassen oppfører seg som om den er tyngre enn kun molekylvekten tilsier). Oppvarming av gassen vil imidlertid ikke føre til store forskjeller i egenskaper mellom ”kald” og ”varm” gass, dvs. små forskjeller i tetthet som følge av temperaturforskjeller.

Klor er en giftig gass med en effekt som klassifiseres som *irriterende*. Irriterende i denne sammenheng varierer med tid og mengde, og er alt fra lett irritasjon i luftveiene til død. I Tabell 3-2 angis generelle effekter for kloreksponering (som funksjon av konsentrasjon og tid).

Tabell 3-2 Effekt av kloreksponering som funksjon av konsentrasjon og tid (Mannan (2005)).

Klorkonsentrasjon (ppm)	Eksposeringstid	Effekt
3	-	Ingen risiko, men noe små plager/ forstyrrelser.
7	1 t eller mer	Sterk til uholdbar irritasjon.
20	Flere timer	50 % dødelig
33	Ca. 1 t	50 % dødelig
60	Ca. 10 min.	50 % dødelig

I denne oppgaven blir det ikke gjort noen vurdering av registrerte konsentrasjoner opp mot effektgrensene. Resultatene i denne rapporten benyttes kun til vurdering av de forskjellige geometriske modellenes kvalitet. Ettersom resultatene angis som molar konsentrasjon og simuleringene er tidsavhengige vil en vurdering av effekt innenfor eksponert område imidlertid være fullt mulig.

3.2.2. Påvirkning fra meteorologiske forhold

Meteorologiske forhold vil ha vesentlig innvirkning på spredning av gass, og som nevnt i foregående kapittel kan meteorologiske forhold føre til at en gass, som i utgangspunktet karakteriseres som "lett" ift. luft, oppfører seg som "tung" grunnet temperatur, tetthet, osv. Dette betyr at meteorologiske forhold er en meget viktig parameter å ha kontroll på i en spredningsvurdering, der følgende hovedparametere er av spesiell interesse:

- 1) Vindhastighet
- 2) Stabilitetskategori

I tillegg vil maks/ min temperatur, vindretning, nedbør, etc. også være interessant.

Det området av atmosfæren som er av størst interesse ved vurdering av spredning er det som kalles atmosfærisk grenselag (ABL – Atmospheric boundary layer). Dette området strekker seg fra jordoverflaten og om lag 1000m ut. Det deles inn i flere mindre lag/ områder, men grovt sett i et indre og et ytre lag (med høyde på hhv. 1-100m og 100–1000m). Det indre området, som ofte også kalles overflatelaget, består videre av et dynamisk nedre sjikt med høyde 1-10 m. Mellom dette sjiktet og overflaten er det et grenseområde som avhenger av overflateruheten (se kap. 3.2.3 for nærmere gjennomgang av overflateruhet).

Innenfor ABL er det overflatelaget som er spesielt viktig pga. at spenningen (motstanden) er tilnærmet konstant. Forholdene i ABL avhenger videre av stabilitetsforholdene, der den enkleste formen er nøytral stabilitet, se kap. 3.2.2.2 for nærmere gjennomgang av stabilitetsklasser.

I beskrivelse og vurdering av spredning er vind hovedfaktoren, der følgende kan angis som prinsipielle hovedfaktorer for beskrivelse av vindfeltet:

- Retning → den retning vinden blåser
- Hastighet:
 - o Ved overflaten
 - o Over bakken
- Stabilitet
- Turbulens

Retning og hastighet for et gitt sted angis ofte ved hjelp av en såkalt "vindrose", som angir retning og hastighet som en andel over et gitt tidsrom. Dette vil være tilhjelp ved en risikovurdering for å kunne angi sannsynligheten for at vinden kommer i en bestemt retning, og bruk av sannsynlig vindhastighet ved konsekvensvurdering.

Turbulens er et kjennetegn for variasjoner i vinden, og følgende faktorer påvirker graden av turbulens:

- Hastighetsgradient
- Overflateruhet
- Temperaturforskjeller mellom luft og bakke

Turbulens har en tendens til å øke som følge av en økning i bl.a. hastighetsgradient, og turbulens kan således bli målt som vindfluktuasjon over et gitt tidsrom (f.eks. en time).

Over ABL er det en vanlig antagelse at vinden er horisontal og "fri" for friksjonskrefter (dvs. bl.a. ikke påvirket av overflate egenskaper).

3.2.2.1. Vindhastighet, U (m/s)

For adiabatisk, eller nøytrale forhold, kan den logaritmiske vertikale vindhastighetsprofilen benyttes. Denne angis som følgende:

$$[Lign. 1] \quad u = \frac{u^*}{k} \ln\left(\frac{z}{z_0}\right)$$

Der:

k: von Karman konstant = 0,4

u*: friksjonshastigheten

z: høyden over bakken

z₀: ruhetslengden

Denne er utledet fra den såkalte "Law of the Wall", som angir at strømming langs overflaten kun avhenger av skjærkraften og avstanden fra bakken.

$$[Lign. 2] \quad \frac{du}{dz} = \frac{u^*}{kz}$$

For veldig ru overflate bør ligning 1 over utvides til følgende:

$$[Lign. 3] \quad u = \frac{u^*}{k} \ln\left(\frac{z-d}{z_0}\right), z > (d + z_0)$$

Der

d = høyden til der normal turbulensveksling skjer (ikke direkte påvirket av z₀) → høyden til det effektive bakkenivået. Eks. d ≈ 0,5 H_r i tettbebygd strøk (H_r = gjennomsnittshøyden på hindringene (r = ruhet))

Friksjonshastigheten, u* (m/s), er et mål på friksjonsmotstanden/ spenningen utøvd av bakken/ overflaten på ABL. Den er proporsjonal til turbulensfluktuasjon i vindhastigheten, og er anslagsvis 10% av gjennomsnittlig vindhastighet i høyde på 10m (u/u* ≈ 0,1 ved z=10m). Denne andelen vil øke som følge av eventuell økt ruhet. Friksjonshastigheten er gitt som:

$$[Lign. 4] \quad u^* = \sqrt{\frac{\tau}{\rho}}$$

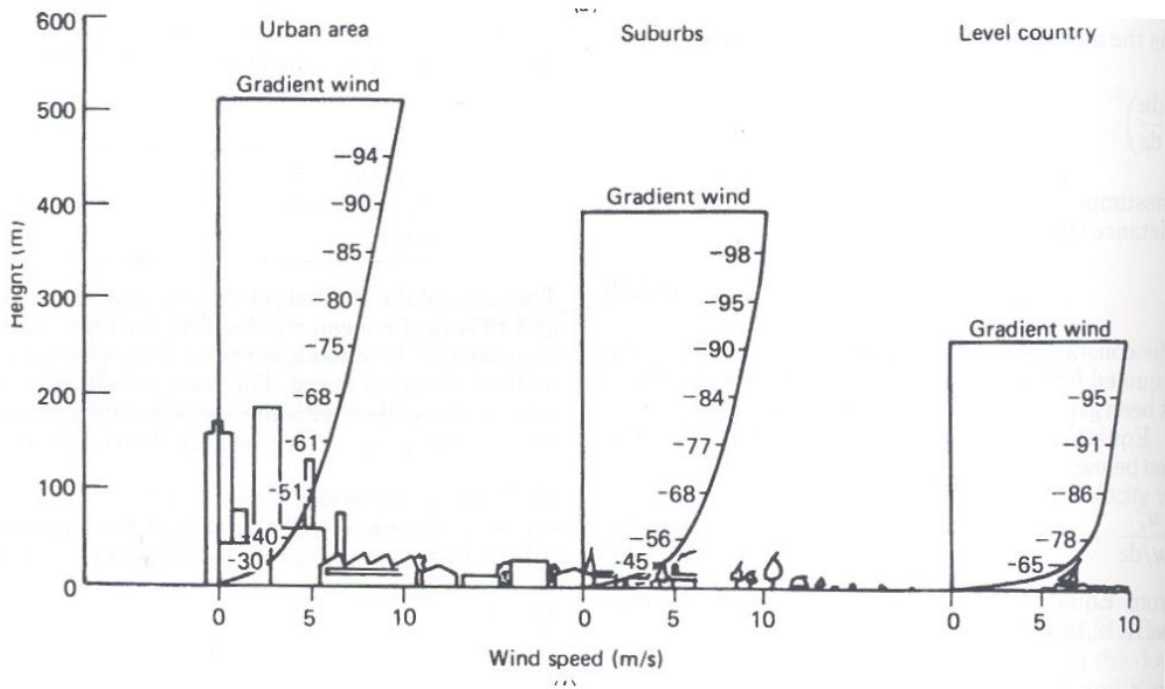
Der

τ = Reynoldsstørrelse (middel momentum fluks pr. arealenhet)

ρ = tetthet (luft)

Vindprofil kan genereres automatisk ved CFD-beregninger, men kan også her settes opp helt spesifikt iht. de gitte lokale forholdene eller egne ønsker (dvs. at den gis som input til beregningene).

Under følger en figur for typiske vindprofiler over forskjellige typer områder.



Figur 3-2 Viser vindhastighet ift. høyde over bakken for forskjellige områder (Mannan (2005)).

Av figuren ser man at overflatens utforming påvirker vindhastigheten i vesentlig grad (jo høyere ruhet, jo mer vil vindhastigheten påvirke vindhastigheten i høyden).

3.2.2.2. Stabilitetskategori

For å beskrive turbulensgenerering som følge av klimatiske forhold, benyttes forskjellige mål eller kategorier for å beskrive den atmosfæriske stabiliteten. Stabiliteten er i utgangspunktet et mål for den vertikale bevegelsen i atmosfæren, og kan kategoriseres som tre stabilitetsforhold, som beskrevet under (Mannan (2005) og Turner (1994)).

Stabile forhold

Forkommer oftest ved klare netter. Varmestråling fra bakken kjøler bakken og luftmassene i nærheten av den, som fører til en nedadgående varme fluks (såkalt inversjon, som følger av en økning i lufttemperaturen med høyde). Dette fører videre til at mekanisk turbulens vil dempes av den negative oppdriften, som følger av den stabile temperaturstrukturen. Andre typer inversjon kan forårsakes av:

- Naturlige temperaturforskjeller mellom bakken og luften.
- Fall av luft fra store høyder som fører til kompresjon, som videre fører til økt temperatur.
- Pålandsvind som fører et kaldt luftlag under en varmt luftlag.
- Meteorologisk front som også fører til kald luft nederst og varm øverst.

Stabile forhold forekommer også når temperaturgradienten fra bakken og oppover i luftlagene er 0 (isotermiske forhold). Ved lave positive temperaturforskjeller mellom bakke og luft vil også forholdene kunne være stabile, da oppdriftskreftene blir små (grunnet lav konveksjon/ varmeoverføring/-forflytning).

Nøytrale forhold

Ved nøytrale forhold er det liten eller ingen oppvarming av bakken eller luftmassene tilliggende bakken, noe som fører til varme fluks ~ 0 . Den vertikale temperaturforandringen er noe synkende med høyden (grunnet i utgangspunktet lavere trykk som fører til ekspansjon i luft som kommer fra underliggende lag, som igjen fører til avkjøling).

Nøytrale forhold kan forekomme som følge av:

- Overskyet vær som hindrer innkommende og utgående stråling
- Sterk vind som raskt vil føre til vertikal blanding av all oppvarming/ nedkjøling som gjøres på bakken
- Overgangssituasjoner der forholdene endres fra stabile til ustabile og vice versa (dvs. ved soloppgang og –nedgang).

Ustabile forhold

Ustabile forhold forekommer oftest på solfylte dager med lav vindhastighet og få skyer, og kommer av sterkt sollys som varmer opp bakken. Dette vil føre til sterke/ store stigende turbulensvirkler som følge av konveksjon. Det kan også forekomme i tilfeller der det ikke er ekstrem oppvarming, men allikevel er en positiv temperaturforskjell mellom bakke og luft.

Det nevnes videre at enkelte topografiske forhold kan påvirke stabiliteten i vesentlig grad. Dette kan f.eks. være:

- Kystområder (forholdet mellom sjø og land)
- By/ befolkede områder (oppvarming)

Klassifiseringen er generelt vanskelig, og et eksempel på problemer er at det kan være områder (lokale) som avgir mye energi, slik at stabile forhold i stedet blir ustabile, etc., noe som kan føre til økt turbulensgenerering.

I ABL genereres turbulent energi i hovedsak fra tre forhold:

1. Mekanisk motstand tilknyttet vind over overflaten (overflatens ruhet)
2. Endring i vindretning med høyden (skjærkrefter)
3. Konveksjon/ inversjon tilknyttet temperaturforskjeller i luftlagene og/ eller mellom overflaten og luften (dvs. turbulens drevet av oppdrift som følge av temperaturforskjeller).

De 3 stabilitetskategoriene som er redegjort for over, styres alle av punkt 3. Ved nøytrale forhold genereres turbulens imidlertid kun av punkt 1 og 2.

Ettersom det sjelden fins turbulensobservasjoner for et gitt område, er det behov for metoder for å beskrive dette da det vil være viktige parametere i en spredningsvurdering. Det fins flere metoder for beskrivelse/ kategorisering av atmosfærisk stabilitet. De tre vanligste metodene er:

- Richardson number
- Monin – Obukhov length
- Pasquill stability categories

Richardson number, Ri , er et forhold mellom tyngdekraft (oppdrift) og treghetskreftene, og er gjerne knyttet til grensesjikt eller sjiktet strømming (interaksjonen mellom sjiktene). Dersom det ses på som en fluks vil Ri være forholdet mellom produksjon av turbulensenergi ved oppdriftskrefter og produksjon av turbulensenergi ved skjærkrefter (Ertesvåg (1999)). Ri kan således gi en beskrivelse av atmosfærisk stabilitet (angir rateandelen av reduksjonen eller produksjon av turbulens).

Monin – Obukhov length, L , er et mål (m) for dybden/ tykkelsen på laget over bakken som er dominert av mekanisk turbulens. L er negativ for ustabile forhold og positive for stabile.

Både Ri og L er funksjoner av høyden (som følge av at mekanisk turbulens reduseres ganske raskt med høyden).

Pasquill stability categories angir stabilitet som 6 stabilitetsklasser, A – F, som er delt inn etter tid på døgnet, vindhastighet, skyer og solintensitet, der A er veldig ustabil, D er nøytral og F er veldig stabil. Metoden er basert på enkle formler for sky-/ plumevekst på tvers av vindretningen (i retning y og z) som funksjon av nedstrømsavstand (retning x).

For utførlig beskrivelse av metodene, og formularene, henvises det til AMSGlossary (2007) og Mannan (2005). I Tabell 3-3 vises sammenhengen mellom de nevnte stabilitetskategoriene.

Tabell 3-3 Oversikt over atmosfærisk tilstand ift. forskjellige stabilitetsklasser (Hanna (1996) og Mannan (2005))

Atmosfærisk tilstand	Tid/ vær	Vindhastighet (u)	Pasquill—Gifford Stability Class	Monin-Obukhov Length (L)	Richardson No.
Veldig stabil	Klar natt	< 3 m/s	F	10 m	0,05 – 0,11
Stabil	↓	2-4 m/s	E	50 m	0,03 – 0,05
Nøytral	Skyet eller vind	Alle	D	> 100 m	0
Ustabil	↓	2-6 m/s	B el. C	- 50 m	C: -0,17 – -0,13 B: -0,5 – -0,4
Veldig ustabil	Sterk sol	< 3 m/s	A	- 10 m	-1 – -0,7

Det nevnes at det i referansescenariet benyttet i denne oppgaven er beskrevet at stabilitet er klassifisert som nøytral, dvs. klasse D.

3.2.3. Overflatenes ruhet (z_0) – Parametrisk angivelse av overflatens bidrag til turbulens

Overflate ruhetslengden, z_0 , er et parameter/ mål for mengden av mekanisk blanding overflaten bidrar med. Generelt kan det sies at jo høyere/ større overflateruhet; jo lavere blir vindhastigheten og høyere blir turbulens intensiteten. Dette betyr at jo større ruhet, jo mer turbulens blir generert.

Variasjon i vindhastighet er i seg selv bidragsyter til mekanisk blanding/ turbulens. Videre kan z_0 bli funnet ved å plote vindhastigheten (u) som en funksjon av høyden over bakken (z), der z_0 er avstanden over bakken der vindhastigheten teoretisk er lik 0, dvs. der $u=0$ m/s og $z=z_0$ (gjeldende for nøytrale forhold) (Hanna and Britter (2002)).

Det er viktig å beregne et steds ruhetslengde ("roughness length") fordi den maksimale konsentrasjonen i terrengnivå for et utslipp nært bakken har en tendens til å reduseres med en faktor to for hver økning i ruhet sin størrelsesorden (Hanna and Britter (2002)). Feil i denne størrelsen kan dermed ha stor innvirkning på resultatet.

Det er gjort en mengde studier tilknyttet bestemmelsen av ruhetslengden, z_0 . Gjennom studier knyttet til rør-ruhet er det funnet at ruhetslengden, z_0 , og gjennomsnittshøyden til de forskjellige ruhetselementene er relatert tilnærmet som følger (Mannan (2005)):

[Lign. 5]
$$z_0 = \frac{H_r}{30}$$

der:

z_0 : ruhetslengde

H_r = gjennomsnittshøyden på ruhetselementene (eventuelt på det gitte elementet).

Andre studier i større skala angir imidlertid følgende:

[Lign. 6]
$$z_0 = \frac{H_r}{7,35}$$

Som en tommelfingerregel kan imidlertid følgende benyttes, dersom høyden på objektene ikke er over 20 m (Hanna and Britter (2002)):

[Lign. 7]
$$z_0 = 0,1 \times H_r$$

I tillegg til de enkle utledningene som er gitt over fins det en rekke andre, og mer komplekse metoder, for å bestemme z_0 . I denne oppgaven er z_0 gitt i inndata fra referansescenariet, se kap. 5.2.

I en CFD-modell vil imidlertid bygningene være en del av modellen, og z_0 vil således være relatert til overflaten for øvrig, dvs. hvordan bakken/ terrenget er utformet (skog, ørken, etc.).

Det vurderes at vesentlig forenkling/ fjerning av geometri ikke kan kompenseres fullt ut ved å endre ruhetslengde, z_0 . Bakgrunnen for dette er at turbulensen som skapes ved og rundt bygninger ikke gjenskapes på samme måte ved kun bruk av ruhetslengdeparameteren. For å få et riktig resultat anses det derfor om nødvendig å inkludere geometri i modelloppbygningen, men at denne geometrien kan forenkles i en viss grad uten at resultatet vil forringes.

I en CFD simulering må z_0 velges slik at $z_0 \ll \Delta z$ (Δz = gridopløsningen vertikalt). I denne oppgaven er $z_0 = 0,1$ og minste $\Delta z = 1$ (dvs. at kriteriet er oppfylt). Når geometri inkluderes i modellen kan ikke z_0 også ta høyde for denne geometrien (da blir det dobbelt opp).

Under følger noen eksempler på overflateruhet tilknyttet forskjellige typer bebyggelse og terreng.

Tabell 3-4 Eksempler på ruhetslengde tilknyttet forskjellige typer bebyggelse (Hanna and Britter (2002)).

Kategori	Ruhetslengde, z_0	Beskrivelse
Grovt – åpent	0,1 m	Moderat åpent landskap med enkelte hindringer, f.eks. enkeltstående lave bygninger, med innbyrdes avstand minst 20 x høyden på hindringen.
Grovt	0,25 m	Spredt bebyggelse eller industrihindringer (innbyrdes avstand = 8-12 x bygningshøyde).
Veldig grovt	0,5 m	Moderat bebygget område, med lave bygninger, industritanker, med mer (innbyrdes avstand = 3-7 x bygningshøyde).
	1 m	Høyere bebyggelse med relativt lav tetthet, men med om lag lik høyde.
”Kaotisk”	2 m	Bysentrum med blanding av lave og høye bygninger. Her anbefales det å gjøres utvidet vurdering av scenario.

Tabell 3-5 Eksempler på ruhetslengde tilknytte forskjellige typer overflater (Mannan (2005)).

Overflate	Ruhetslengde, z_0	Evt. ytterligere beskrivelse
Is, flat gjørme	0,00001 m	Dette området inkluderer også: - Flat ørken (ca. 0,0006 m) - Snødekt flatt landskap (ca. 7E-5)
Rolig åpen sjø	0,0001 m	
Kystlinje (sjø)	0,001 m	
Klipt gress (~ 3 cm)	0,007 m	
Noen få hekker og trær (sommer)	0,02 – 0,1 m	Jordbruksområde
Hekker og trær, samt noen få bygninger	0,25 m	
Sentrum i større byer	~ 1 m	Tilsvarende gjennomsnitt i Sør Amerika
Rocky Mountains	50 – 60 m	

Som følge av økt turbulens vil spredning/ utbredelse således være større i områder med mye bygninger og hindringer (dvs. faktorer som øker den mekaniske turbulensen). Det kan imidlertid forventes en større uttynning av materialet som spres, som følge av økt blanding grunnet økt turbulens.

I områder med mye bebyggelse, spesielt i prosessanlegg, vil det dessuten være andre effekter, som temperaturgradienter grunnet driften (dvs. forskjell i temperatur inne på området og utenfor), som også vil føre til turbulens (dette er såkalte "heat island").

Som tabellene over viser kan bygninger være en del av ruhetsbeskrivelsen.

3.2.4. Påvirkning fra overflateegenskaper - topografi/ terreng og bygninger/ hindringer

Ruhet, som beskrevet i foregående kapittel, er en beskrivelse av overflaten ift. hvordan overflaten bidrar til turbulensoppbygning (mekanisk blanding). I en virkelig situasjon vil overflaten bestå av overflatelaget (trær, busker, etc), topografisk utforming (fjell, sletter, sjø, med mer) og geometri (bygninger og andre konstruksjoner). Alle disse forholdene vil vesentlig virke inn på hvordan spredningen forløper.

Utslipp skjer sjelden uten noen form for konstruksjoner i nærheten, enten som del av kilden, nærliggende til kilden eller mellom kilden og det område som er av interesse (for f.eks. målinger av giftige konsentrasjoner). Nærliggende konstruksjoner kan bli brukt som begrensninger for utslipp, dvs. konstruksjoner som har som formål å begrense konsekvensen av et eventuelt utslipp.

Det som imidlertid er (ekstremt) komplekst, er luftstrømning tilknyttet en bygning eller grupper av bygninger. Turbulens vil føre til at spredning av utsluppet materiale blir spredt på komplisert måte, som følge av bygningenes geometri og kildens konfigurasjon (måten utslippet skjer på; type, mengde, trykksatt, gass, væske etc.). Turbulens kan som utgangspunktet føre til lavere konsentrasjoner, men til større spredningsområde. Generalisering av slik strømning er ofte vanskelig, og problemet løses best med en spesifikk modell for det gitte scenarioet.

Påvirkningen på strømning gjennom bl.a. turbulensgenerering, som følge av mekanisk motstand i overflateområdet, er derfor meget viktig å ta høyde for om resultatene skal bli tilfredsstillende. Det kan være stor variasjon i overflaten fra sted til sted, og forhold som er av spesielle interesse mht. dette er:

- Overflate ruhet (se gjennomgang i tidligere kapittel)
- Urbane områder
- Kystsoner og sjø
- Komplekst terreng/ topografi
- Bygninger og obstruksjoner/ hindringer

Mens det kan være vanskelig å ivareta disse forholdene fullt ut i analytiske spredningsmetoder, vil mulighetene være gode for tilnærmet full ivaretagelse i fysiske- (vindtunnel) og 3-dimensjonale metoder (CFD).

Urbane områder

Det som kjennetegner slike områder er at de er grove mht. ruhet, og gjennom det skaper mye mekanisk turbulens. I tillegg er energiforbruket i slike områder vanligvis høyt og konsentrert (såkalt "heat island"), noe som fører til at vanlige stabilitetsklasser ikke kan benyttes. Bakgrunnen for dette er at den store varmeavgivelsen fra slike områder vil føre til en konstant positiv vertikal varmefluks, som igjen fører til økt turbulens (pga. konveksjon).

Stabilitet i nærheten av byer er nærmere nøytralt enn stabilt, og derfor forekommer sjelden stabile forhold (dvs. F – G iht. Pasquill). Dette er imidlertid en sannhet med modifikasjoner da f.eks. flere byer i Norge har forholdsvis mange dager/ netter med stabile forhold (f.eks. Oslo pga. kaldt klima og Bergen grunnet topografiske forhold). I disse tilfellene vil generelt sett ikke den lokale varmefluksen være stor nok til å destabilisere inversjonen.

Kystsoner og sjø

I dette ligger også elver, selv om bidraget kan være noe mindre ekstremt enn ved sjø.

Meteorologiske forhold langs kysten kan være ekstremt varierende mht. vindmønster, temperatur og fuktighet. Som en regel må det påregnes store endringer i stabilitet og turbulens, noe som fører til at spredning over slik område er meget kompleks.

Turbulens, og med det utbredelse og fortykning, er ofte mindre over sjø enn over land. Spesielt når varmluft strømmer horisontalt over kaldt vann. Motsatt tilfelle, dvs. kald luft over varmt vann, kan føre til sterk turbulens.

Mannan (2005) skiller mellom tre forhold:

- 1) Spredning over sjø
- 2) Spredning i kystsonen
 - a) Med gradient vind (normalt vindfelt)
 - b) Med sjøbris (ikke vanlig pålandsvind)

Alle disse forholdene kan inneha meget komplekse meteorologiske forhold, og fører til at spredningsvurdering også blir kompleks. Dette kan spesielt fremkomme i kystsonene der ruhet varierer veldig, og vindforholdene kan være komplekse med en blanding av på- og fralandsvind i forskjellige høyder. I tillegg kan det være store temperaturforskjeller mellom vind og vann, som fører til kraftig konveksjon eller inversjon.

De spesielle forholdene kan forårsake sterk spredning i disse områdene, kontra landområder.

Over sjø vil de fleste meteorologiske parametrene, og døgnvise variasjonene, ha en tendens til å variere fra de over land. Stabilitetskategoriene er forskjellige, samt ruheten og friksjonshastigheten.

Komplekst terreng/ topografi

Komplekst terreng vil kunne påvirke spredning vesentlig og er således viktig å ivareta for å oppnå et tilfredsstillende resultat. Urbane og industrielle områder er ofte lagt ved siden av en elv, i nærheten av kysten, i en dal, i bunnen av et fjell eller i enden av en slette. Således vil komplekst terreng ofte være en realitet.

Det er flere forhold ved komplekst terreng som bidrar til økt spredning. En er skjærkrefter i vind som følge av variasjoner i vindhastigheter og –retning ift. høyde. En annen er dreining av plumen som følge av terrengmessige endringer, som kan være vesentlig i komplekst terreng.

Stabilitetsmessige forskjeller mellom komplekst og flatt terreng er størst ved stabile forhold, da stabil laginndeling kan produsere skjærkrefter/ spenningsbevegelser. Dette fører således til økt turbulens.

I dalstrøk er det ofte lokal variasjon i vindretning og -hastighet. Det er typisk vind oppover i dalen på dagtid, og nedover om natten.

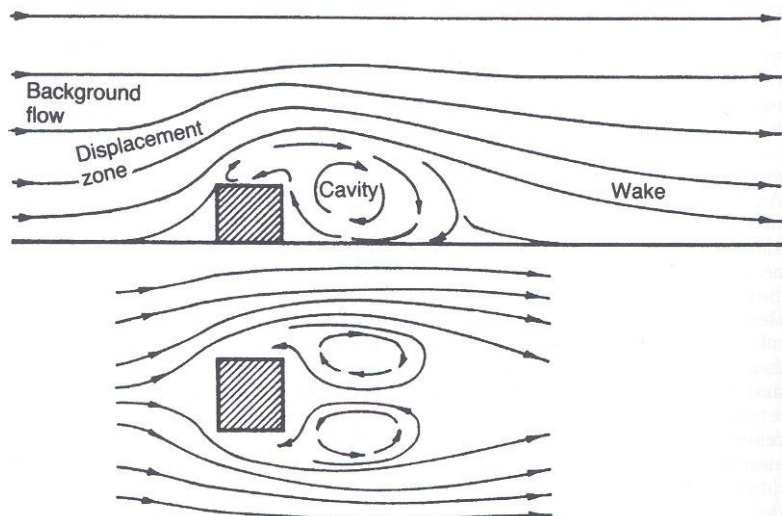
Når det er komplekst terreng, eller ikke tilnærmet flatt, vil det være behov for å implementere dette i modellene som bygges. Hvis ikke vil det måtte forventes vesentlige feil i predikteringen.

Bygninger og obstruksjoner

Bygninger og hindringer endrer strømningsmønsteret vesentlig, og fører til (meget) kompleks strømming, og er en stor bidragsyter til generering av turbulens, se Figur 3-3 for en enkelskisse av turbulens generering tilknyttet bygninger.

Tilstedeværelsen av bygninger og andre hindringer i strømningsveien til en gassky har en markant innvirkning på strømmingen og spredningen. De bidrar til en fordreining av strømmingen ved at det oppstår lokale trykk- og hastighetsfluktuasjoner.

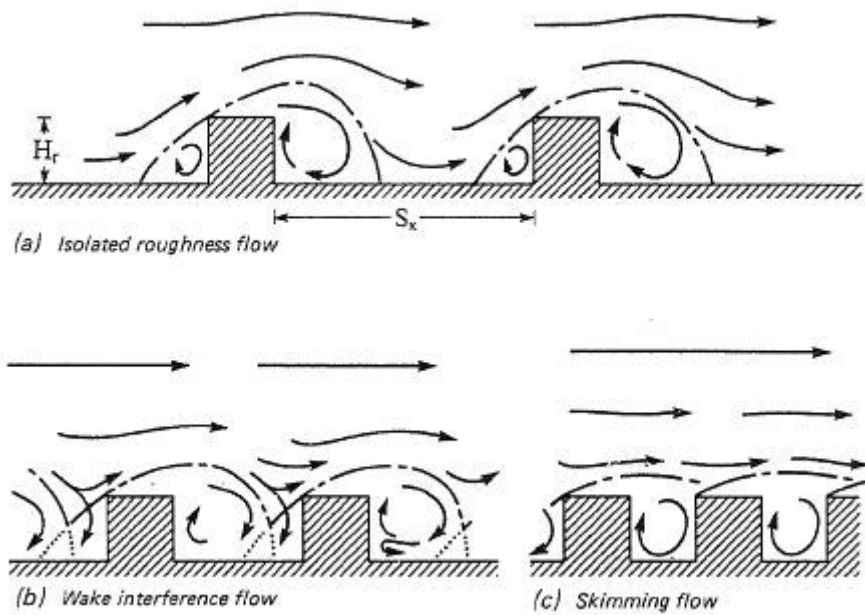
Det gjøres ofte forskjell på vurdering av graden av påvirkning fra bygninger sett ift. om utslippet skjer i nærheten av, eller et stykke borte fra, bygningene/ hindringene. Om utslipp skjer i nærheten av bygninger er det spesielt viktig med en riktig beskrivelse av området, samt plassering av utslipp (på taket, i le av bygget, etc.), da dette har stor innvirkning på den videre spredningsutviklingen. Lenger vekk fra utslippspunktet kan bygninger ofte bli behandlet som en del av overflateruheten (noe som kan muliggjøre forenklinger i geometrisk modell uten at resultatet nødvendigvis blir forringet i vesentlig grad).



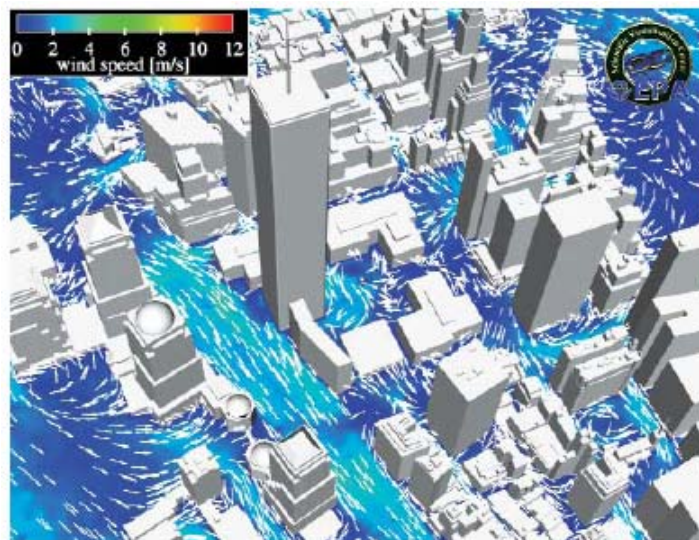
Figur 3-3 Forenklet strømningsmønster rundt en bygning med skarpe kanter (Mannan (2005)).

Jo større konsentrasjon av bygninger, og jo mindre den innbyrdes avstanden er, jo mer komplekst blir også strømningsmønsteret. Modelleringer utført i byer med bl.a. høyhusbebyggelse har vist at vindretningen langs bakken kan være helt motsatt av den over byggene (se Figur 3-5). Dette viser hvilken kompleksitet som faktisk kan følge av bebyggelse.

Avstanden mellom bygninger, sett ift. bygningshøyden, har også stor innvirkning på strømningsmønsteret. Dersom avstanden mellom bygningene er stor (noen tideler av bygningshøyden eller mer), vil det være liten påvirkning mellom de individuelle strømningsforholdene (strømningsmønsteret kan vurderes som strømming rundt isolerte bygninger). Dette vil imidlertid endres etter hvert som bygninger plasseres nærmere hverandre. Deres individuelle strømningsfelt vil da bli påvirket av hverandre (se Figur 3-4), og vesentlige endringer i strømningsfeltene vil oppstå (Hosker (ukjent år)).



Figur 3-4 Betydningen av avstand mellom bygninger ift. form på strømningsfeltet (Hanna and Britter (2002)).



Figur 3-5 Bilde illustrerer strømningskompleksiteten internt i en by (ANSYS-Fluent (2007)).

Kompleksiteten på bygninger, plassering av området og terrengets utforming er alle forhold som har vesentlig betydning for strømningsfeltet, og med det også spredningen. En så riktig ivaretagelse av dette som mulig (i modellen som benyttes) vil derfor være viktig for å kunne oppnå realistiske resultater.

Ivaretagelse av dette i en CFD modell vil naturlig være å bygge en geometrisk modell som har vesentlige likhetstrekk (størrelse og hovedform) som virkelige forhold. Det er derfor nødvendig å ha god kjennskap til faktiske forhold for å oppnå realistiske resultater.

3.3. Modellering av spredning av (tung) gass

Modellering, slik det omhandles i denne oppgaven, handler i hovedsak om prediktering av en konsekvens av et utslipp av fortrinnsvis giftig- og/ eller brennbar gass. Modellering av denne typen er i dag mye benyttet i design av utstyr og ved planlegging av beliggenhet og layout for industrielle installasjoner. Det benyttes dessuten mye til generell vurdering av spredning av forurensning, etc.. Ift. oppdragsgiveren for denne oppgaven, FFI, vil bruk av slik modellering være nyttig for bl.a. prediktering av spredning av giftige stoffer som følge av en terror-/ krigshandling.

Modellering er et forsøk på å beskrive en hendelse ved bruk av spesifiserte modeller for den gitte typen problemstilling. Komplexiteten på de modeller som i dag foreligger for problemstillingen ”spredning av tung gass”, varierer meget. Variasjonen vises også i resultatene. Med datamaskinens kraftige inntog de siste 10-15 årene har det åpnet seg store muligheter for bruk av meget komplekse modeller for beskrivelse av fluiddynamiske problemstillinger. Dagens tredimensjonale datamodeller for fluiddynamiske problemstillinger (CFD) er så gode at virkelige forhold kan gjengis meget realistisk.

Det nevnes at uttrykket ”modellering” i utgangspunktet benyttes der datamaskin benyttes til å utføre beregningene i den gitte modellen.

Informasjon fra/ om spredning av tung gass, som vanligvis er interessant i en risikovurdering, er konsentrasjonsdata som en funksjon av tid og sted. Ofte er det kun nødvendig at denne informasjonen er på overordnet/ oppsummert form, som f.eks.:

- Avstand til en gitt konsentrasjon (f.eks. dødelig dose eller brennbarhetsgrense)
- Størrelse, sammensetning og form på gasskyen
- Konsentrasjon og tidshistorikk på et gitt sted (for vurdering av effekt på mennesker, etc.)
- Annet

Modellene som er laget for å prediktere spredning av tung gass gir alle slike resultater (eller deler av dem) på en eller annen form som muliggjør videre behandling og beslutning.

3.3.1. Modeller for prediktering av spredning av tung gass

Det fins en lang rekke analytiske og numeriske modeller, med høyst forskjellig kompleksitet, for prediktering av spredning av tung gass. Disse kan i dag grovt deles inn i tre kategorier mht. kompleksitet (Mannan (2005)):

- Modifiserte konvensjonelle modeller
- Box/ slab modeller
- Tredimensjonale modeller (CFD)

Under følger en kort gjennomgang av prinsippene tilknyttet de forskjellige modellene, og det henvises til referansene for en utførlig gjennomgang av modeller og prinsipper.

3.3.1.1. Modifiserte konvensjonelle modeller

Modifiserte konvensjonelle modeller baserer seg på modifiserte Gaussiske spredningsmodeller. Gaussiske spredningsmodell beskriver (generell) spredning i vindretningen (x) som en funksjon av spredning vertikalt (z) og spredning på tvers (y). Figur 3-6 illustrerer hvordan dette angis.

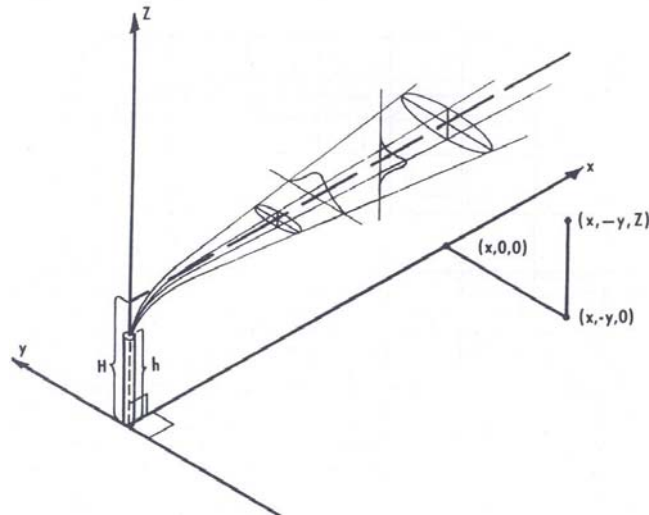
Metoden er ikke brukbar for utslipp nær bakken eller under ustabile forhold (konveksjonsdrevet turbulens).

For tung gass viste det seg også at den opprinnelige modellen ikke var brukbar, og det ble gjort forsøk på å modifisere metoden (av det ”modifiserte konvensjonelle modeller”), slik at metoden også skulle ivareta

gasser med slike egenskaper. Dette har imidlertid ikke ført frem til brukbare resultater, og helt andre angrepsmetoder har vært nødvendig for denne typen problemstillinger.

Eksperimentelle resultater har vist at modellen feilpredikerer vesentlig for tunge gasser.

Det er dermed konkludert med at modeller basert på denne angrepsmåten ikke er særlig brukbar for tunge gasser, eller for gasser med slike egenskaper.



Figur 3-6 Koordinatsystem som viser Gaussisk fordeling i det horisontale (y) og vertikale (z) plan.

3.3.1.2. Box modeller

Som en følge av at de Gaussiske modellene ikke fungerte ble det laget en ny generasjon modeller (integrasjonsmodeller), som vanligvis kalles Box.

I enkle Box-modeller antas det at gasskyen har en pannekakelignende form, med uniforme egenskaper på tvers og vertikalt av vindretningen. Modellen beskriver utbredelse/ vekst i radius og høyde ved et puff, og utbredelse/ vekst i bredden og høyden på tvers av vindretningen ved kontinuerlig utlipp, samt innblanding av luft i grensesonene til skyen (dvs. topp og kanter).

Typiske trekk tilknyttet denne typen modeller er (Mannan (2005)):

- Skyens form styres av gravitasjonsstyrt strømning.
- Intern blanding skjer så raskt at konsentrasjonen i skyen er uniform
- Innblandingshastigheten til luft er spesifisert som en funksjon av skyens horisontale hastighet, tetthetsforskjeller og turbulensintensitet.

Selv om modellen er forholdsvis enkel rent konseptmessig, krever den en del av den som bruker den ift. riktig angivelse av de nevnte hovedtrekkene. En box modell inneholder få justerbare parametere, som bestemmes hver for seg gjennom eksperimentelle forsøk. At modellen er enkel gjør den kostnadseffektiv.

I Mannan (2005) angis det at box modeller kan gi tilstrekkelig resultater for vurdering av giftutlipp, pga. den relativt store usikkerheten tilknyttet skader av giftstoffer. For vurdering av brennbar atmosfære (flammegrenser) anses den imidlertid som utilstrekkelig.

Denne typen modeller er relativt enkle i bruk, men har enkelte viktige begrensninger:

- I utgangspunktet begrenset til flatt terreng uten hindringer, og er ikke laget for terreng med helning og hindringer, bygninger, el.l.
- Antagelsen om at konsentrasjonen internt i skyen er uniform er utilstrekkelig for vurdering av gift- og flammegrenser.

Det nevns at det er laget noen mer avanserte modeller som tar høyde for noe av de begrensningene som er nevnt (i hovedsak konsentrasjonsforskjeller internt i skyen).

Innenfor de gitte begrensningene har en del modeller vist seg å gjengi eksperimentelle forsøk relativt nøyaktig (Britter (1989)).

3.3.1.3. Tredimensjonale modeller - CFD

Som følge av begrensninger tilknyttet metodene over har tredimensjonale modeller i økende grad tatt over. Disse modellene baserer seg på et ligningssett for bevaring av masse, energi, momentum. Modellene beregner endring i egenskaper, hastighet og konsentrasjon i strømningsfeltet, enten som funksjon av tid eller som stasjonær tilstand ("steady state").

Fluiddynamiske beregningsmodeller, vanligvis omtalt som CFD (Computational Fluid Dynamics), betegner i dag avanserte modeller for beregning/ simulering av fluiddynamiske problemstillinger. Kompleksiteten i ligningssettene og diskretiseringen, samt behovet for iterasjon (dvs. gjentagende beregninger), gjør disse metodene helt avhengig av til dels kraftig datamaskinkapasitet. Det nevnes i denne sammenheng at det i starten var stor usikkerhet tilknyttet tredimensjonale modeller pga. kompleksiteten og krav til maskinkapasitet. Britter (1989) referer til to utsagn fra midten av 1980 tallet; "*det vil være veldig få problemer som vil kunne rettferdiggjøre kostnaden tilknyttet denne typen modeller*", men i tillegg også "*tunge numeriske problem kan løses med disse metodene*".

CFD konseptet består i at volumet av interesse for beregningene (beregningsvolumet, som f.eks. kan være et rør eller et industriområde, som i denne oppgaven) deles inn i mange underordnede volumer (kontrollvolumer) eller celler (det dannes da et nett av celler som gjerne kalles grid, og en celle blir da en gridcelle). I hver av disse cellene løses så de nevnte ligningssettene for hvert tidssteg. Variablene antas å være konstante innenfor hver celle, og hver celle avhenger av hva som skjer i cellen ved siden av (avhengighet avgjøres av diskretiseringsmetode; "finite difference", "finite elements" eller "finite volume"). Hvis beregningsvolumet er et område (her; industriområde) med en vindstrøm inn og en vindstrømstrøm ut, vil det for eksempel være behov for noen gjennomregninger før egenskapene fra innstrøm påvirker utstrømmen (endringen forflytter seg gjennom volumet fra celle til celle). Et viktig poeng i denne sammenheng vil være størrelse på cellene. Dersom de er for store i områder med store endringer, kan det føre til at den reelle endringen ikke fremkommer grunnet utvisking av effekt som følge av for få/ store celler.

Den vanligste diskretiseringsmetoden i CFD, dvs. metoden som benyttes for å overføre den partielle differensialligningen for hver størrelse (hastighetskomponentene, etc.) over til en numerisk modell (som er en tilnærming til virkelige forhold) for bruk i datamodellene, er den såkalte "finite volume method" (Shaw (1992)). Kort fortalt går metoden ut på at overføring av egenskaper (momentum, etc.) fra ett volum til ett annet ses på som en fluks med en kilde/ drivkraft (f.eks. momentum + trykkgradient).

Beregningsvolumet vil inneholde alt av interesse for den gitte problemstillingen. Dette kan f.eks. industriområde (som det er i denne oppgaven). I denne oppgaven lages det et beregningsvolum som inneholder området som er av interesse, og som igjen deles opp i mindre kontrollvolum/ celler. Her går modelleringen ut på å beregne konsekvens av et utslipp av klor gass, og fluiddynamikken består således av vindstrømning gjennom hele beregningsvolumet med innblanding av klorgass fra en jet. Se forøvrig kapittel 6 for beskrivelse av beregningsvolumet og kontrollvolumene/ cellene.

Et annet meget viktig forhold tilknyttet CFD modellering er beskrivelse av grensebetingelser og egenskaper tilknyttet disse. Bakgrunnen for dette er at variablene i beregningene (hastighet, turbulens, trykk og masse strømming) avhenger av betingelser fra grensene i volumet for at beregningene skal bli riktige. Eksempler på grensebetingelser og egenskaper for variablene er (Shaw (1992)) (se også kap. 6.3.3):

- **Solide vegger**; spesielt viktig for turbulensgenereringen, og små celler er nødvendig for å fange opp alle endringene.
- **Innstrømming**; der fluidet kommer inn i beregningsvolumet (med gitte egenskaper (hastighet, etc)).
- **Utstrømming**; der fluidet forlater beregningsvolumet (er det f.eks. tilbakestrømming?)
- **Symmetri**; over ett/ flere plan (den deriverte til normalen til planet er null, dvs. ingen endring/påvirkning).

Til sammen dannes det modeller som kan beskrive virkelige forhold meget godt. Det fins i dag en mengde CFD-verktøy (dataprogrammer) som enten er spesialiserte programmer for et begrenset antall problemstillinger (f.eks. FDS³ som er begrenset til røyk- og brannspredning), eller som programmer av mer generelt slag for løsning av mengder med forskjellige fluiddynamiske forhold/ problemstillinger (f.eks. FLUENT, se kap. 4). Det er derfor viktig å kjenne til modellenes begrensninger før de benyttes, slik at det ikke benyttes en modell som i utgangspunktet ikke er tilpasset de gitte strømningsproblemene.

3.3.2. CFD – Muligheter og begrensninger

Modellering ved bruk av CFD åpner en rekke muligheter for utførlig og realistisk vurdering av fluiddynamiske problemstillinger. Det er imidlertid knyttet en del begrensninger og usikkerhet til modellene og bruken, som gjør det nødvendig med kunnskap spesielt knyttet til disse temaene.

3.3.2.1. Muligheter og begrensninger

Den store fordelen tilknyttet CFD er muligheten til å oppnå en realistisk beskrivelse av virkelige fluiddynamiske forhold. Alternativet til CFD, er gjerne eksperimentelle forsøk (vindtunnel, etc), for å oppnå tilsvarende realisme i resultatene, noe som oftest vil være helt uaktuelt ift. tid og kostnader.

Kostnadene tilknyttet både programvare og maskinkapasitet er til dels høye, men av en slik størrelsesorden at de i utgangspunktet er tilgjengelig for de fleste typer virksomheter. I hvilken grad de blir benyttet avhenger imidlertid av om den til dels høye kostnaden kan forsvares (i hvilken grad er man avhengig av denne typen verktøy for å løse en gitt oppgave, og er kunden villig til å betale for dette?).

En annen begrensende faktor vil være kunnskap. Dette er et vanskelig punkt, og vil være et problem der de som benytter seg av CFD-programvare ikke har tilstrekkelig kunnskap om verken programvaren eller fagområdet. Dette kan føre til alvorlig feilbruk og feilbedømmelse av resultatene.

3.3.2.2. Forutsetninger ved modellering/ simulering

Med forutsetninger menes i denne sammenhengen:

- Inngangsparametere
- Ukjente parametere (antagelser)
- Forenklinger/ tilpasninger
- Modellmessige begrensninger
- Annet

Dette nevnes spesielt er pga. viktigheten alle slike parametere har for det endelige resultatet. Den totale usikkerheten er avhengig av dette (se kap. 3.3.2.3), noe som gjør at det er viktig å ha kontroll på alle de nevnte forutsetningene for modelloppbyggingen og selve modelleringen.

³ Fire Dynamics Simulator (FDS), kan fritt lastes ned fra <http://fire.nist.gov/fds/>.

Feil i inngangsforutsetningene er ofte knyttet opp til feil informasjon, manglende kunnskap, el.l.. Feilkilder tilknyttet justeringer/ forenklinger er også ofte knyttet opp mot det samme, men kan også være en bevisst handling for å påvirke resultatene (bevisst manipulasjon for å oppnå ønskede resultater).

Forenklinger og tilpasninger i oppbygning av geometrisk modell for bruk i modelleringen vil imidlertid ofte være helt nødvendig for at modelleringen skal kunne gjennomføres. Bakgrunnen for dette er at det i mange tilfeller ligger begrensninger i programmene som benyttes, samt at tid tilgjengelig for gjennomføring av modellering ofte er begrenset (dvs. kompleksiteten må reduseres). For å ivareta kvaliteten til modelleringen vil det være nødvendig med mye kunnskaper om scenariet som skal vurderes før forenklinger og tilpasninger kan gjennomføres.

Det nevnes til slutt at et vanlig uttrykk for feil i inndata er "drit inn gir drit ut". Dette vurderes som en god betegnelse på viktigheten av gode og riktige inndata for å oppnå tilfredsstillende resultater.

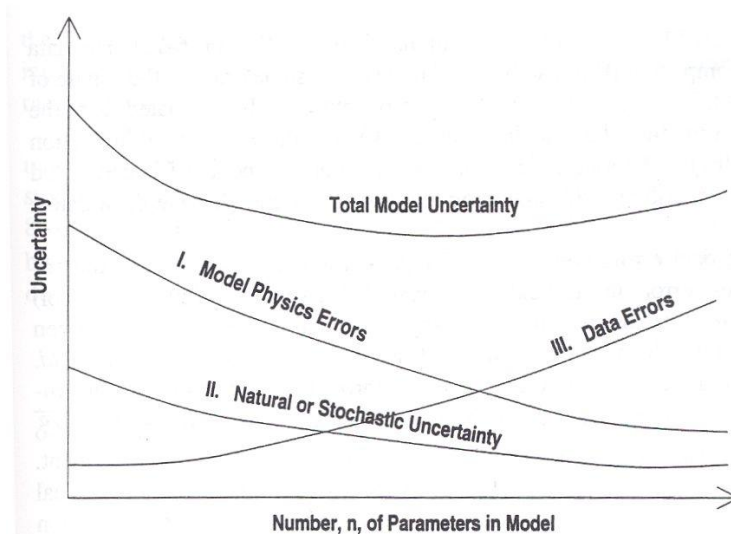
3.3.2.3. Usikkerhet tilknyttet modellering

Som nevnt over er det usikkerhet tilknyttet modellering. Usikkerhet er i utgangspunktet knyttet til alle faser av en modellering, og må tas med i vurderingen og bruken av resultatene.

Skal modellen benyttes til risikovurdering, fastsettelse/ utarbeidelse av innsatsplaner, m.m. er det viktig å tro mest mulig på modellene som blir brukt og de data som genereres fra dem. Hvor stor tro man har på modellene kommer av erfaring og kunnskap m.m. Det vil imidlertid være noen viktige hovedpunkter som det er nødvendig å ha kontroll på. Hanna (1996) angir tre hovedkomponenter for den totale feil/ usikkerhet i en gitt modell for beregning av utslipp, transport og spredning av giftig gass (vurderes som overordnede punkter som er uavhengig av metode/ modell). Disse er:

- I. Feil som følge av antagelser tilknyttet fysiske forhold i modellen
- II. Tilfeldig variasjon (f.eks. fluktuasjon i konsentrasjoner)
- III. Usikkerheter generert av feil i inngangsdata

Figur 3-7 angir at den totale usikkerheten i modellen først synker med økende antall parametere (antall parametere som må angis av brukeren), for så å øke når antall parametere også øker. Økningen angis hovedsakelig å komme av økning i antall feil i inngangsdata. Det kan derfor vurderes at de fysiske aspektene ved en gitt modell blir bedre med økende antall parametere, mens det samme vil føre til en økende feil i inngangsdata. Det vil dermed være ønskelig å designe modeller/ programmer som minimaliserer den totale modellusikkerheten, se Figur 3-7. Det nevnes at denne figuren er "brukt mot" CFD-modeller, da de inneholder mange flere parametre enn "enkle" modeller.



Figur 3-7 Illustrasjon av variasjon av modellusikkerhet ift. antall parametere i modellen (Hanna (1996)).

Den totale usikkerheten kan beregnes, og vil være summen av feil/ usikkerhet gitt av de tre punktene over (det vises til Hanna (1996) for beregningsoppsett).

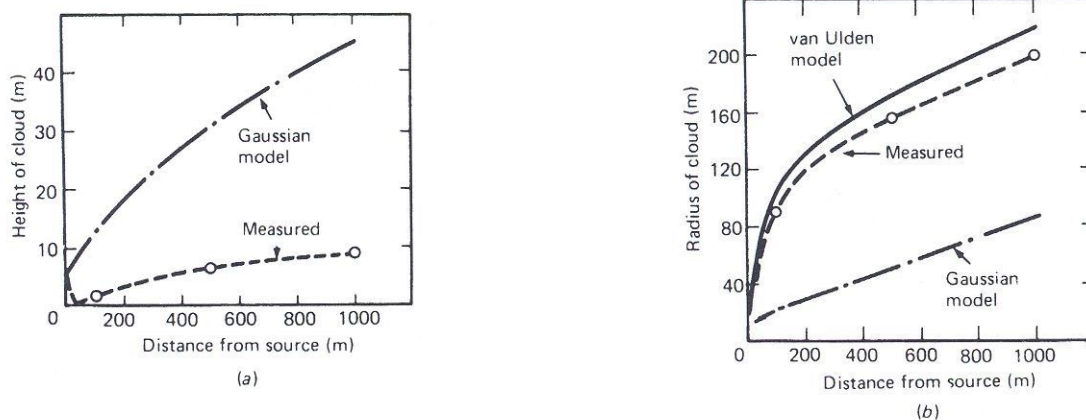
I denne oppgaven er det ikke utført beregning av usikkerheten. Det er imidlertid utført validering av oppnådde resultater opp mot resultater fra eksperimentelle forsøk gjort på samme scenario. Dette angir ikke usikkerhet i resultatene, men er et kvantitativt kvalitetsmål. Metoden anses som tilstrekkelig for vurdering av kvalitet (suksesskriterium i denne oppgaven), og kan også benyttes til å vurdere effekten av enkeltvis justering i inngangsparametere (som vil være viktig for erfaring tilknyttet modellering av denne typen scenario).

3.4. Tidligere arbeider

Spredning av tung gass ble frem til midten av 1970-tallet behandlet på samme måte som spredning av nøytral gass (opptriftsmessig nøytral). De klare skillene i egenskapene mellom nøytral og tung gass ble i 1974 avdekket av Van Ulden gjennom eksperimentelle arbeider (Mannan (2005)).

Van Ulden sine resultater viste at det var meget store forskjeller mellom virkeligheten og modellene som var tilgjengelig på den tiden (Gaussiske modeller). Av Figur 3-8 fremkommer det at det er til dels meget store forskjeller, og at forskjellene øker raskt spesielt i nærheten til kilden. Skyens radius var om lag 2-3 ganger større enn Gaussiskemodeller, mens høyden på skyen av tung gass var så mye som 5 ganger mindre.

Van Ulden utarbeidet en egen modell som følge av resultatene han hadde oppnådd. Dette ble en modell som påvirket det videre arbeidet inne faget.



Figur 3-8 Van Ulden sine resultater fra eksperimentelle forsøk vs. resultater fra Gaussisk modell (Mannan (2005)).

Et annet arbeid som fikk innvirkning på faget og utvikling av temaet var en studie utført av Havens på slutten av 1970-tallet (for US Coast Guard). Dette var et fullskala forsøk med utslipp av 25 000 m³ LNG over vann. Dette bidro til ytterligere forståelse av problematikken tilknyttet spredning av tung gass.

I løpet av de siste 20-30 årene er det lagt ned mye arbeid i problemstillingen tilknyttet utslipp og spredning av tung gass. Arbeidene har bestått i både fullskala forsøk (i reelle omgivelser) og fysiske forsøk (vindtunnel, med mer), samt rent teoretiske tilnærminger (fra enkle Gaussisk modifiseringer til tredimensjonale modeller (CFD)). Arbeidene har ført til en mengde modeller for beskrivelse av spesifikke eller generelle problemstillinger, som enten er teoretiske, empiriske, eller en blanding.

Problemet med en del modeller (spesielt frem til tredimensjonale modeller ble mulig å benytte) har vært at de har vært meget begrenset (til spesifikke problemstillinger), og at de generelt ikke har kunnet gjengi en reell situasjon med varierende terreng, vegetasjon samt bebyggelse.

McBride, Reeves, Vanderheyden et al. (2001) har gjort en studie der de har vurdert vindtunnelresultater opp mot resultater fra CFD modelleringer (program benyttet: CFX4). Et av målene med denne studien var å vurdere bruk av CFD modeller med topografiske forhold inkludert opp mot spredningsmodeller som kun håndterer flatt terreng (DRIFT og HGSYSTEM). Her konkluderes det bl.a. med følgende:

- Både vindtunneleksperimenter og CFD beregninger gir vesentlige bedre prediksjoner enn konvensjonelle modeller for flatt terreng.
- Topografiske forhold (fjell, daler, etc.), samt bygninger, påvirker gasskyen vesentlig, og har vesentlig innvirkning på retning og spredning.

Konklusjonene underbygges videre med viktigheten av å ta høyde for nettopp bebyggelse og topografi i risikovurderinger og spredningsprediksjon. I tillegg var det vesentlig forskjeller i resultater mellom vindtunneltestene og CFD beregningene (CFD hadde størst konsentrasjoner ved små utslipp, mens det var motsatt for store utslipp). Dette vurderes av forfatterne å være en vesentlig feilkilde og som gjør det vanskelig å foreta en direkte sammenligning, men påpeker samtidig at det til dels er vesentlige forskjeller i modelloppsettet av vindtunnel og CFD-modell (veldig vanskelig å få det helt likt), som må tas med i betraktningene. Det nevnes at andre studier har konkludert med at det generelt oppnås en bedret ytelse ved økt modell kompleksitet (jo mer som inkluderes i modelloppbygningen jo bedre blir resultatet).

Det store antall modeller, og den vesentlige forskjellen i prediksjonene de gir, har gjort at det er behov for metoder for å evaluere modellene. Historisk har evalueringsmetodene i utgangspunktet blitt utført på følgende tre hovedmåter:

- Statistisk evaluering; vurdering av resultater basert på statistiske metoder.
- Modellevaluering; evaluering av matematiske oppbygning, med mer.
- Brukerevaluering; vurdering av brukervennlighet

I denne oppgaven vurderes resultatene mot eksperimentelle data (fra vindtunnel). Det benyttes en statistisk metode utarbeidet ifm. et stort europeisk evalueringsprosjekt for denne typen spredningsmodeller, *Scientific Modell Evaluation of Dense Gas Dispersion Models, SMEDIS* (Carissimo, Jagger, Daish et al. (2001; Jagger, Carissimo and Daish (1998)). Metodene er nærmere beskrevet i kap. 7.2, og er mye brukte og anerkjente metoder for denne typen valideringer.

En slik vurdering fører til trygghet i videre bruk av resultatene.

3.4.1. Evaluation of Modelling Uncertainty (EMU)

Det nevnes kort at det er gjort mye arbeid innen scenariet som benyttes i denne oppgaven. I prosjektet der dette scenariet var en viktig bestanddel, gikk nettopp ut på å evaluere eksperimentelle resultater opp mot modellerte resultater. Mye av arbeidet i prosjektet ble utført ved EnFlo Research Center, University of Surrey. Undertegnede fikk oversendt alle prosjektrapporter de hadde utarbeidet (sendt fra instituttets leder: A. G. Robins).

Scenariet er benyttet i andre sammenhenger også for nettopp samme formål (f.eks. nevnte prosjekt: SMEDIS). En del av dette er upublisert materiale, men resultatene vil bli presentert i anonymisert form, som en sammenligning til resultater som er oppnådd i denne oppgaven.

EMU vurderes som et bra scenario å gjøre tester mot. Bakgrunnen for dette er at det inneholder mange interessante komponenter (topografi og relativt kompleks geometri), samt at mye arbeider er utført på det (selv om en del informasjon er vanskelig å få tak i).

4. BESKRIVELSE AV PROGRAMVARE

4.1. Introduksjon

Som tidligere nevnt er det i hovedsak benyttet 3 stk programmer i oppgaven; to for bygging av geometriske modeller og ett for beregning av spredning. Disse programmene er:

- FLUENT.6.3.26 (2006/07) (FLUENT)
- GAMBIT.2.3.16 (2006) (GAMBIT)
- Autodesk (2007) – AutoCAD (AutoCAD)

FLUENT og GAMBIT er to programmer tilhørende samme programpakke, som leveres av ANSYS FLUENT, mens AutoCAD er et velkjent CAD-program levert av Autodesk. *Konseptet knyttet til programmene vil bli beskrevet kort i de neste kapitlene, men det vil ikke bli gitt noen utførlig beskrivelse av dem.* For dette henvises det til leverandørenes hjemmesider, som er henholdsvis www.fluent.se og www.autodesk.no.

I utgangspunktet kan GAMBIT i sin helhet benyttes til bygging av geometri. Ettersom undertegnede har kjennskap til AutoCAD fra før, samt at modellen som skal bygges er kompleks, ble det valgt å gjøre et forsøk på å benytte AutoCAD til bygging av geometri og topografi. Dette hang dessuten sammen med at AutoCAD er et spesialisert geometriprogram, mens GAMBIT har mange flere oppgaver enn bare bygging av geometri. Det gjør at brukervennligheten i geometribyggingen er vesentlig bedre i AutoCAD enn i GAMBIT.

Kort oppsummert skal programvaren benyttes til følgende oppgaver:

- FLUENT: beregning av vindfelt og spredning av klorgass
- GAMBIT: sammensetning av geometri/ topograf, bygging av beregningsvolum og grid
- AutoCAD: bygging av geometri/ topografi

Det er også testet diverse tilleggsprogram til AutoCAD for generering av topograf (PointorV3 og Terrain for AutoCAD) uten at det ga særlige resultater. Disse vil derfor ikke bli beskrevet nærmere.

I tillegg til dette er det benyttet Microsoft Office 2003 til oppgavene knyttet til dokumentasjon. Dette er en kjent "office-pakke", som ikke beskrives nærmere.

4.2. Programvare for bygging av geometri og topografi

4.2.1. GAMBIT

GAMBIT er som nevnt over, verktøyet for bygging av geometrisk modell for beregning i FLUENT, dvs. preprosessering av beregningsmodell. Programmet GAMBIT benyttes til bygging av geometri/ topografi, generering av grid og definering av overordnede grensebetingelser i volumet.

I denne oppgaven er det benyttet programversjon 2.3.16.

Programmet har et forholdsvis enkelt brukergrensesnitt, men det er nødvendig med en viss innlæringsstid, da ikke alt er like intuitivt. Brukergrensesnittet kan derfor ikke sammenlignes med andre spesialiserte CAD programmer.

Det meste av geometri kan bygges direkte i GAMBIT, men importmulighetene fra CAD gjør det mulig å importere geometri direkte fra denne typen programmer. Dette vil ofte kunne være en fordel, og et ønske,

ved at geometri kan bygges eksternt uten tilgang til GAMBIT, samt at geometri kan bygges raskere i CAD-programmer, m.fl.

Ved import av geometrifiler fins det verktøy for å ”rydde” og tilpasse geometrien for bruk i GAMBIT dersom det skulle være nødvendig. Selv om slike verktøy er tilgjengelig er det uansett en stor fordel om de som skal generere geometri direkte i GAMBIT, eller eksternt, har kjennskap til viktige forutsetninger for at geometrien skal fungere. Dette er enkle prinsipper som kontinuerlige og sammenkoblede flater, etc. Dersom dette ikke er kjent hos geometribygger vil tilpasning og oppretning av modell kunne bli meget arbeidskrevende.

Det er i tillegg gode muligheter for bruk av automatisering av oppgaver gjennom bruk av journalfiler. Dette kan naturlig nok være meget arbeidsbesparende for gjentagende oppgaver.

Prinsippet for byggingen av modell for beregning/ simulering i FLUENT er at det lages et volum som inneholder all aktuell geometri. Hva slags type volum som er aktuelt vil naturligvis variere mye, og kan for eksempel være et rør, en bilkupé, en bygning, eller som i denne oppgaven, et industriområde. Det som er interessant i denne oppgaven er å beregne spredning av et gassutslipp fra et spesifikt punkt på industriområdet, og det er dermed det som skjer på utsiden av bygninger som er aktuelt. Modellen som da lages består av en topografiflate, som inneholder omrisset av all geometri (dvs. bygninger, med mer). Topografiflaten danner nedre flate i volumet. Resten av volumet bygges så av sideflater og topp flate. Som det følger av Figur 6-1 danes da en kube, som er modellen som skal benyttes videre ved beregning i FLUENT.

Volumet skal så grides, dvs. at det skal fylles med kontrollvolumer/ gridceller, som benyttes ved beregning i FLUENT, se også kap. 3.3.1.3.

Gridet kan bygges på flere forskjellige måter, noe som gjør det mulig å gride de fleste typer volum, så sant volumet er generert uten feil. Det kan imidlertid være en utfordring å få gridet med den typen grid som ofte er ønsket, dvs. et strukturert grid der det er stor kontroll på celletyper, -form og -størrelse. Det kan videre bety at det er behov for til dels omfattende tilpasning/ ombygging av geometri eller volum, slik at ønsket grid kan oppnås. Dette løses gjerne ved bruk av såkalte hjelpevolumer, dvs. at hovedvolumet modellen består av, deles opp i mindre volumer som er av mindre kompleks art, og som enklere kan grides. Hovedpoenget er imidlertid at modellen som genereres skal være fylt med celler i en eller annen form (strukturert eller ustrukturert), slik at beregning i FLUENT kan foretas.

Cellene/ gridet må dessuten være av en viss kvalitet, som automatisk angis av programmet ved generering. Kvalitetsmålet sier noe om formen på gridet som genereres (i volumet eller på flaten), og angis som antall ”skewed elements”. Poenget med kvalitetsmålet er at det gis beskjed om at cellene det gjelder har en slik form at de kan skape feil eller problemer ved beregningen. Slike celler må derfor i størst mulig grad unngås. I FLUENT er det mulig å konvertere slike celler, til celler med tilfredsstillende form, men dette har ofte vist seg å ikke fungere særlig godt. Hovedregelen er derfor at de må unngås, eventuelt at modellen testes for å se om de fører til feil (det må da imidlertid vurderes om det er nødvendig å lage flere modeller for å se om det blir forskjeller i beregningene).

I tillegg til generering av geometri og grid defineres også ytre grenser i GAMBIT. I dette ligger at det defineres hva som skjer på alle flater i volumet. Som standard blir alle flater angitt som vegg, dersom de ikke har grid på hver side (da blir flaten automatisk angitt med kontinuitet i gridet). I denne oppgaven skal det beregnes en form for strømning gjennom volumet (-ene), og det vil derfor være nødvendig å definere bl.a. flater der strømning kommer inn og går ut. I tillegg er den en rekke andre definisjonsmuligheter.

Når geometri er bygget, volumet er gridet og grenser definert, kan modellen eksporteres (det er gridet som eksporteres). Den eksporterte filen er nå klar for å importeres i FLUENT for videre prosessering/ beregning.

4.2.1.1. Gridoppbygning

Ved generering av grid fins det i utgangspunktet tre typer gridmodeller:

- Strukturert form
- Ustrukturert form
- Blanding av strukturert og ustrukturert form

Innenfor kategorien strukturert form fins det videre et antall forskjellige former, som muliggjør strukturert gridform innenfor geometri som ikke er rettvinklet.

Mens strukturert form bygges opp med firkant-form, har et ustrukturert grid en tetrahede-form (dvs. trekantet pyramide). Et ustrukturert grid vil nesten uten unntak enkelt la seg generere i nesten hvilken som helst geometri. Dette gjør metoden interessant ift bl.a. redusert arbeidstid ved generering av grid og tilpasning av geometri for strukturert grid. Metoden har imidlertid en del svakheter, som først og fremst knytter seg til størrelsesfordeling i volumet. Det antas imidlertid at det fins løsninger til dette, uten at det er testet av forfatteren.

Som nevnt over er det som oftest ønske med en strukturert form, da man erfaringsmessig har større kontroll på gridet (størrelse og kvalitet ift dreide celler med mer).

I kap. 6 vises det til både problemer som har oppstått i denne oppgaven, og forslag til muligheter.

For nærmere opplysninger om gridmodellene henvises det til www.FLUENT.se og FLUENT-Inc._02 (2006).

4.2.2. Autodesk – AutoCAD

Autodesk – AutoCAD er blant de mest brukte programmene av dette slaget. I denne oppgaven ble fullversjonen av 2007 utgaven benyttet. Autodesk har et meget bra studentprogram, som gjorde at undertegnede fikk benytte programmet gratis. Det anbefales for andre studenter å sjekke ut dette, da det muliggjør tilgang og bruk av siste versjon av programvare som er mye benyttet i kommersiell virksomhet.

I AutoCAD genereres geometri meget enkelt, og det vurderes som enklere å bygge geometri der enn i GAMBIT. Behovet vil imidlertid variere, men ved en viss kompleksitet/ omfang på geometrien anses AutoCAD å være tidsbesparende.

Geometri generert i AutoCAD eksporteres som ACIS (*.sat). Det er kun volumgeometri som kan eksporteres. Dersom det kun er en flate som skal eksporteres, må det derfor lages et volum der den aktuelle flaten er en av flatene. Volumet/ flater kan så fjernes når geometrien er importert i GAMBIT.

Kommando for import i GAMBIT: File → Import → ACIS

I tillegg til AutoCAD fins det er rekke andre CAD programmer som er tilpasset GAMBIT spesielt. Det er ukjent om det er spesielle fordeler tilknyttet disse programmene kontra AutoCAD. Andre programmer er bl.a. CATIA og SolidWorks.

AutoCad har et visst maskinbehov, men lar seg enkelt kjøre på de fleste av dagens maskiner så lenge ikke modellene som lages blir for store. Ved store modeller bør maskinen ha 1-2GB minne (ram).

4.3. Beregningsmodell – spredning av tung gass

Det er kun FLUENT.6.3.26 som er benyttet til beregning/ simulering av spredning av tung gass i denne oppgaven.

4.3.1. FLUENT

FLUENT er en CFD modell for beregning av mange typer strømning og reaksjoner. Hovedkategoriene av det som kan modelleres er bl.a.:

- Turbulens
- Akustikk
- Varmetransport
- Faseendring
- Kjemiske reaksjoner
- Stråling
- Fler-fase strømning
- Roterende deler
- Med mer

FLUENT er et meget anvendelig program som kan benyttes til det meste inne for CFD modellering. Det er mange ferdig definerte valgmuligheter i programvaren (f.eks. valg av turbulensmodeller), men det er også mulighet til å lage egne ”brukerdefinerte funksjoner” (UDF's) for å lage og bruke egne definisjoner/modeller på for eksempel grenseverdier, materialeegenskaper etc. Det gjør mulighetene gode for å få definert en modell tilpasset det spesifikke prosjektet med stor nøyaktighet.

FLUENT kan karakteriseres som et ”generelt” CFD-program. Forskjellen på et generelt og et spesifikt program er at det kan/ vil være behov for en del egendefinerte tilpasninger i et generelt program, der et spesialisert program for den gitte problemstillingen har nødvendige tilpasninger/ innstillinger ferdig implementert.

Numerikken i FLUENT, som baserer seg på løsning av transport-/ tilstandsligninger for bevaring av masse, energi, momentum, m.fl., er også tilpasset bruk av ustrukturert grid (tetraheder, prizmer og pyramider), noe som vesentlig kan forenkle preprosesseringen. Det muliggjør dessuten bruk av meget komplisert geometri, som ellers vanskelig hadde latt seg gride uten vesentlige forenklinger (ANSYS-Fluent (2007)). Det er i tillegg mulighet for å bruke bevegelig grid, som er vesentlig i modellering av bevegelige gjenstander (f.eks. turbo, propeller, mm.).

Som det gjennomgås i kap. 6 bygges modellen som benyttes i beregningen opp av et volum som videre deles i et grid bestående av et gitt antall gridceller/ volumer (antall avhenger av størrelse som defineres). Selve beregningen består i å beregne endringen fra celle til celle basert på definerte metoder (se kap. 3.3.1.3).

Resultatene består av filer med de definerte parametrene, samt enkel grafisk fremstilling. Andre programmer for postprosessering kan benyttes.

Programmet kan kjøres i fler-prosessor modus, noe som vil være nødvendig der modellene er store (som i denne oppgaven).

I det store og hele vurderes FLUENT som et meget anvendelig program som kan benyttes til de fleste CFD-beregninger. Oppsett og tilpasninger kan imidlertid forventes å være noe mer omfattende i enkelte tilfeller, sett ift. programvare som er spesialisert innenfor en type fenomen (f.eks. FLACS som bl.a. er spesialisert mot simulering av gasssekspløsjoner, etc.).

5. MODELLERING – INNDATA OG STRATEGI

I dette kapittelet gjennomgås strategien/ metoden som ble valgt for å løse oppgaven. Spesifikk gjennomgang av utførte hovedoppgaver følger i kap. 6 og 7.

5.1. Introduksjon

Som beskrevet i bl.a. kap. 4 benyttes programpakken FLUENT i de simuleringer som utføres. Undertegnede hadde ingen kjennskap til programpakken før oppgaven ble påbegynt. Som en del av introduksjonen til programvaren ble det gjennomført et 3 dagers introduksjonskurs ved leverandørens kontorer i Göteborg, Sverige.

Som alle andre introduksjonskurs bar også dette preg av mye informasjon på liten tid. Grunnleggende bruk og funksjoner ble gjennomgått. Kurset vurderes i ettertid som viktig ift det å komme raskt i gang med selve modelloppbygningen.

På kurset ble det gjort forsøk på å få tips knyttet til en av de spesifikke problemstillingen i denne oppgaven (dvs. oppbygning av topografi fra et gitt koordinatsett). De foreleste på kurset hadde imidlertid ikke så mange tips å komme med til denne problemstillingen, da de ikke hadde mye erfaring med denne type problemstilling. Det betydde at oppgaven ble startet uten tips, eller noen formening om hvordan den essensielle delen av modelloppbygning, dvs. implementering av topografi, skulle utføres.

Strategien for oppbygningen av modellen ble derfor laget selv. Utgangspunktet for strategien ble lagt med bakgrunn i egne erfaringer fra annen programvare, forståelse av GAMBIT samt antagelser om hva som kunne fungere. Dette innbar bl.a. stor bruk av AutoCad i geometrioppbygningen.

Utgangspunktet for topografioppbygningen, samt oppbygningen av bygninger, er i sin helhet basert på data fra referansescenariet. Som nærmer gjennomgått under var ikke dette en jobb uten problemer grunnet unøyaktigheter i datasettet.

5.2. Forutsetninger og inndata for modelleringen

Inndata for scenariet som behandles i oppgaven er i sin helhet gitt av FFI, og er, som tidligere nevnt hentet fra prosjektet kalt EMU.

Datasettet inneholder følgende data:

- Topografiske og geometriske data for terreng og bygninger
- Meteorologiske data
- Spesifikke data for utslippet og området generelt
- Testresultater fra vindtunnel inkl. plassering av målepunkter (monitorpunkter)

Topografiske data er gitt av to koordinatsystem, med koordinater for nord og øst samt høyde. Koordinatsystem nr 1 er gitt med et 10 x 10 m rutenett, og definerer hele området. Det består av 3111 punkter og definerer et område på 600 x 500 m. Koordinatsystem nr 2 er gitt med et 5 x 5 m rutenett, og definerer et område rundt utslippet. Halvparten av punktene i dette koordinatsystemet korresponderer med system nr 1, og er dermed en forfining av topografiinformasjonen i området rundt utslippspunktet.

Koordinatsystemene må omarbeides til en enkel tabellform på x-y-z-form for at de skal kunne importeres til AutoCad/ GAMBIT.

Geometriske data for bygninger og anlegg er gitt på to forskjellige måter; en som målsatte skisser, og en som koordinater for nedre hjørnepunkter på bygningene.

Koordinater gitt for plassering av hjørnepunkter på bygningene er oppgitt med 4 siffer. Koordinatene for topografiflaten er imidlertid gitt på 6-siffer nivå. For at alle koordinater skulle stemme overens, slik at bygningene automatisk blir plassert riktig på topografiflaten, er det gjort endringer på koordinatene tilhørende topografiflaten. Disse er endret fra 6 til 4 siffer.

Under følger oppgitte inndata for oppsett av bl.a. beregningsmodell.

Tabell 5-1 Oversikt over oppgitte inndata for oppsett av beregningsmodell.

Inndata	Verdi
Substans/ stoff	Klor (Cl ₂)
Utslippstype (puff/jet/cyclone)	jet
Diameter på utslipps hull (m)	1,74
Massefraksjon på basseng (dam)	0
Utslippsretning a	135
b	0
Fase (væske til gass masse forhold)	0
Start konsentrasjon (vol/masse)	0,1 / 0,214
Utgangstemperatur (°C)	20 → Gir et isotermt system
Utgangstrykk	-999
Utslipsrate (kg/s)	230
Starttidspunkt for utslipp h	0
m	0
s	0
Utslippsvarighet (s)	900s
Stedets snitt vindretning (grader fra N)	0
Standardavvik for vindretning	-999
- ideell vindretning (grader fra N)	0
- x-akse orientering (grader fra N)	180
Stedets gjennomsnittlige vindhastighet (m/s)	5
- Referansehøyde for vind (m)	10
- Standardavvik for vindhastighet (m/s)	0,55
Friksjonshastighet (m/s)	0,47
Overflateruhet (m)	0,075 sjø / 0,1 land
Monin-Obukov lengde (m)	-999
Stabilitetsklasse	D (dvs. nøytrale forhold)
cloud cover	-999
Omgivelsestemperatur (°C)	20
Omgivelsestrykk	-999
Relativ fuktighet	-999
Molekylvekt for Cl ₂ (g/mol)	70,6
Lengdeskala	-999
Tidsskala	-999
Gjennomsnittid for middelverdier (s)	900

Av tabellen over fremgår en del viktige forhold knyttet til oppsettet av beregningsmodell. Ift dataene som er oppgitt er det gjort enkelte valg ved oppsettet av beregningsmodellen. Dette er følgende:

- Inngangsvindhastighet er angitt som 5 m/s uten oppsett av en spesiell vindprofil ift referansehøyde eller vurdering av standardavvik.
- Overflateruheten er satt til 0,1 for hele området uavhengig av om det er sjø eller land (kun begrenset del som består av sjø).

Av Tabell 5-1, og de valg som er gjort, fremkommer det at oppsettet for beregningene som gjøres blir forholdsvis enkelt, og at utslippet skjer under stabile og isoterme forhold, se beskrivelse av stabilitet i kap. 3.2.2.2.

Det har vært en del mangler og usikkerheter knyttet til det mottatte datasettet, spesielt hva gjelder geometriske data. Dette går nærmere gjennom i neste kapittel.

Det påpekes at det var et ønske fra FFI om at det ikke ble gjort noen forenklinger på datasettet. Dette gjelder spesielt geometriske data (dvs. bygninger o.l.) da det var et ønske om å sjekke hvordan det ville fungere med en oppbygning helt identisk med det som er laget for vindtunneltesten. Det nevnes at det ved gjennomgang av litteratur som omhandler samme scenario, virker det som om de fleste som har utført datasimuleringer med samme scenario har gjort forenklinger i geometrien pga. kompleksiteten/ størrelsen på området og byggene. Dette skyldes nok delvis at det er noen år siden arbeidene ble gjennomført, og at både programvare og maskinkapasitet var begrenset ift. hva tilfelle er i dag. Det kan også skyldes den faktiske kompleksiteten på datasettet.

5.2.1. Problemer tilknyttet inndata

Det har vist seg å være en del problemer knyttet til inndataene. Dette er i hovedsak følgende:

- **Unøyaktigheter:** Det er til dels store unøyaktigheter knyttet til koordinatene for hjørneangivelse for bygningene. Det har ført til geometri som blir enda mer komplisert enn den trenger å være ved at nesten alle bygg er blitt skeive (omtrent ingen vinkler som er 90°), samt at sammensatte bygg ikke faller helt inntil hverandre (små avstander som skaper glipper, som er problematisk ved generering av grid). Det har derfor vært nødvendig med til dels omfattende justering av byggene. Ved bygging ble det tatt utgangspunkt i hjørnekoordinater, mens skissene ble benyttet til justering. Endelig geometri er dermed blitt bra.
- **Ukjente:** Resultatene som oppnås gjennom de beregninger som gjøres skal som kjent valideres mot resultater fra vindtunneltest. Disse resultatene er oppgitt som en justert verdi (C_{mol}/C^*) og som en middelværdi ($mean_C$ (%)). Problemet har imidlertid vært at C^* ikke er oppgitt, samt at den midlele verdien er oppgitt med en beregningsmåte som ikke er forklart, og som ikke har vært mulig å forstå.

Etter en del leting (og igjen nyttig informasjon fra University of Surrey v/ Robins) har det blitt klart at C_{mol}/C^* er en ubenevnt normalisert verdi av oppnådde resultater. Normaliseringen må gjøres ift den aktuelle skaleringen det er på modellen. Mer om denne skaleringen er gitt i kap. 7.2.1. Det antas at metoden som er gitt der er den som også er benyttet på vindtunnelresultatene, da metoden er benyttet av andre i samme scenario tidligere.

Forståelsen av hvordan $mean_C$ (%) blir generert har det imidlertid ikke vært mulig å finne ut av i denne oppgaven, og vurdering mot denne verdien er derfor ikke utført.

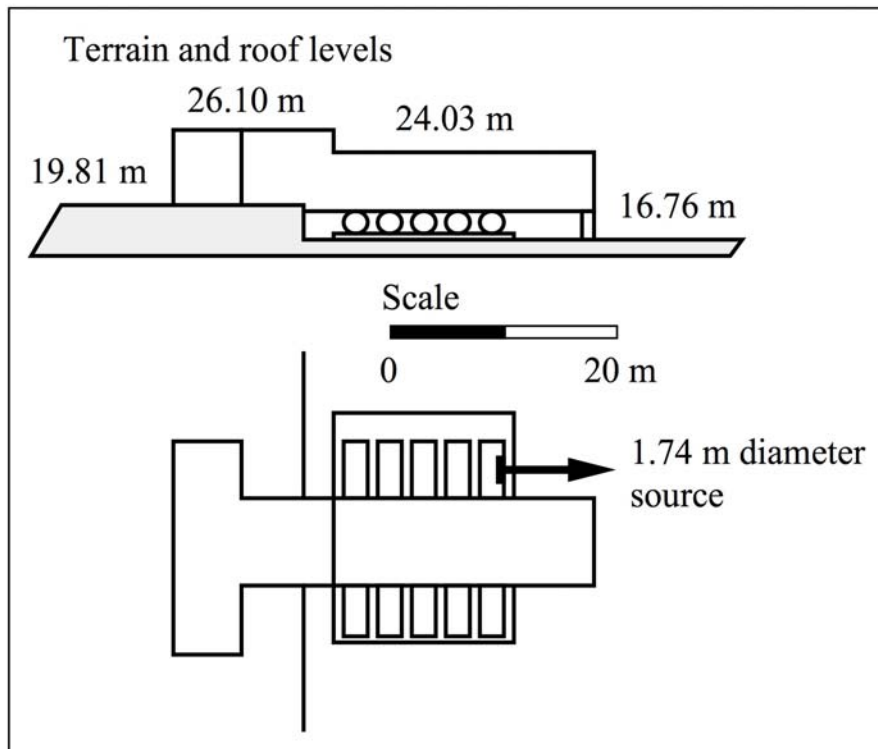
- **Mangler:** Det er mangler knyttet til angivelse av plassering på utslippspunkt. Det førte til at undertegnede faktisk ikke vet med sikkerhet hvor utslippet er plassert. X og Y koordinaten er kjent. I tillegg er retningen ift bygningen den tilhører kjent⁴ (parallelt med bygget). Det som imidlertid ikke er kjent er verdien for høyden (Z).

Denne ukjente verdien er et problem, og vurderes å kunne ha en til dels stor innvirkning på resultatet. Bakgrunnen for dette er at, avhengig av plasseringen, vil utslippet bli delvis berørt av geometrien tilhørende bygget utslippet kommer fra. Dette bygget består av en bygning, samt 5 tanker plassert oppe i et oppsamlingskar, se Figur 5-1. Problemet med at høyden på utslippet ikke er kjent, er at det er ukjent om utslippet blir berørt av veggen på oppsamlingskaret eller ikke.

⁴ Retning ift bygget den tilhører er blitt gjort kjent gjennom materiale mottatt fra University of Surrey v/ A. G. Robins, som også har benyttet dette scenariet i arbeidet på midten av 90-tallet.

Utslippet har en høy utgangshastighet, og det vil derfor ha en stor betydning om deler av jet'en går rett inn i tankveggen eller ikke.

Ettersom høyden ikke er kjent er det gjort en antagelse. Antagelsen går ut på at utslippet, ettersom det kommer fra en av tankene, må ligge innenfor høyden til tanken. Utslippet er plassert med senter litt over senter på tanken, men ikke over høyden på tanken. Med denne plasseringen vil deler av jet'en gå rett inn i veggen på karet, og føre til at deler av utslippet bremses opp og samles i karet før det spres videre.



Figur 5-1 Skisse over bygning der utslippet skjer. Tankene er plassert 0,25 m over bunnen i et oppsamlingskar med sidevegger med høyde = 0,75 m. Dette betyr at tanken er dekket 0,5 m i høyden av tankveggen. Tankene har følgende mål: $D = 2$ m, $L = 17$ m. (Skissen er mottatt fra University of Surrey (fotnote 4)).

Ettersom det er ukjent hvordan utslippet er plassert i vindtunneltesten vil denne ukjente faktoren føre til en tildels stor usikkerhetskilde i resultatene. Dersom utslippet går klar av karet i vindtunneltesten vil det i utgangspunktet kunne bety at modellene som bygges i denne oppgaven vil gi feil prediksjon.

For gjennomføringen av oppgaven gjøres det en antagelse om at valgt plassering av utslippet er plassert tilnærmet slik det er i vindtunneltestene. Dette betyr at det ikke utføres noen ytterligere vurdering av denne usikkerheten, og at resultatene som oppnås vurderes direkte mot vindtunneldataene.

Som en vurdering er det laget en modell der utslippet er plassert slik at jet'en går klar av oppsamlingskaret. Dette vil gi en indikasjon på om valgte plassering er riktig.

Punktene som er nevnt over har skapt til dels stor arbeidsbelastning i oppgaven. Det mottatte datasettet virket i utgangspunktet detaljert og tilstrekkelig, men det viste seg etter hvert at det var en del mangler og unøyaktigheter. Det kan være vanskelig å se dette på forhånd. For senere bruk av samme scenario anbefales det derfor at det tas utgangspunkt i skissene når geometrien skal bygges, selv om det vil føre til noe mer arbeid enn å benytte hjørnekoordinatene.

5.3. Overordnet strategi for løsning av problemstilling

Med strategi menes her hvilken ”vei” som velges for å løse den gitte problemstillingen, gitt i kap. 1.1. Problemstillingen i oppgaven er definert som følger:

Oppbygning av terreng- og geometrisk modell i GAMBIT basert på oppgitte data for terreng og bebyggelse. Det skal søkes metoder som effektiviserer prosessen, og som skaper gode resultater. I tillegg skal resultater fra simuleringer valideres ift referansedata, for å vurdere kvaliteten på de modellene som er bygget.

Strategi vil variere ut fra mange forhold, som; problemstilling, program som benyttes, scenario som skal vurderes, erfaring med problemstillingen, mm.. En klart definert strategi er nødvendig i et hvert prosjekt for å kunne jobbe systematisk og effektivt for å nå målsetningen og gjennom det gode resultater.

Strategien for løsning av problemstillingen har endret seg underveis i prosjektet som følge av problemer som har oppstått (se bl.a. kap. 5.4). Endelig overordnet strategi for løsning av problemstillingen er:

1. Det skal søkes å finne (enkle) metoder for generering av topografiflate.
2. Det skal bygges en standard geometrisk modell og gridmodell (dvs. strukturert form) som skal benyttes til modellering av spredning av klogass fra et definert utslipp.
3. Resultatene fra modelleringene skal valideres mot resultater fra referansescenario.
4. Kvaliteten på geometrisk modell skal også vurderes gjennom bruk av forskjellig størrelse på gridceller, for å se hvilken betydning dette har.
5. På grunn av usikkerhetene i inndataene, mht. plassering av utslippspunkt, skal det lages en geometrisk modell med en alternativ plassering av utslippspunktet. Resultatene skal valideres mot referansescenariet.

Punkt 1-5 vurderes å svare på gitt problemstilling.

5.4. Strategi/ metode – gjennomføring av modellering

Strategi velges, som nevnt i kap. 5.3, ut i fra flere forhold. Bygging og oppsett av en simuleringsmodell vil imidlertid alltid inneholde de samme overordnede punktene, som må gjennomføres. Disse hovedpunktene vil være:

Inndata; innsamling og gjennomgang/ vurdering

Bygging av geometrisk modell; implementering av geometriske inndata og oppbygning av grid/mesh (dvs. et beregningsvolum som benyttes i beregningen).

Oppsett av beregningsmodellen; implementering av oppgavespesifikke inndata og tilpasning til den aktuelle beregningsmodellen.

Beregning; utføres av programvaren

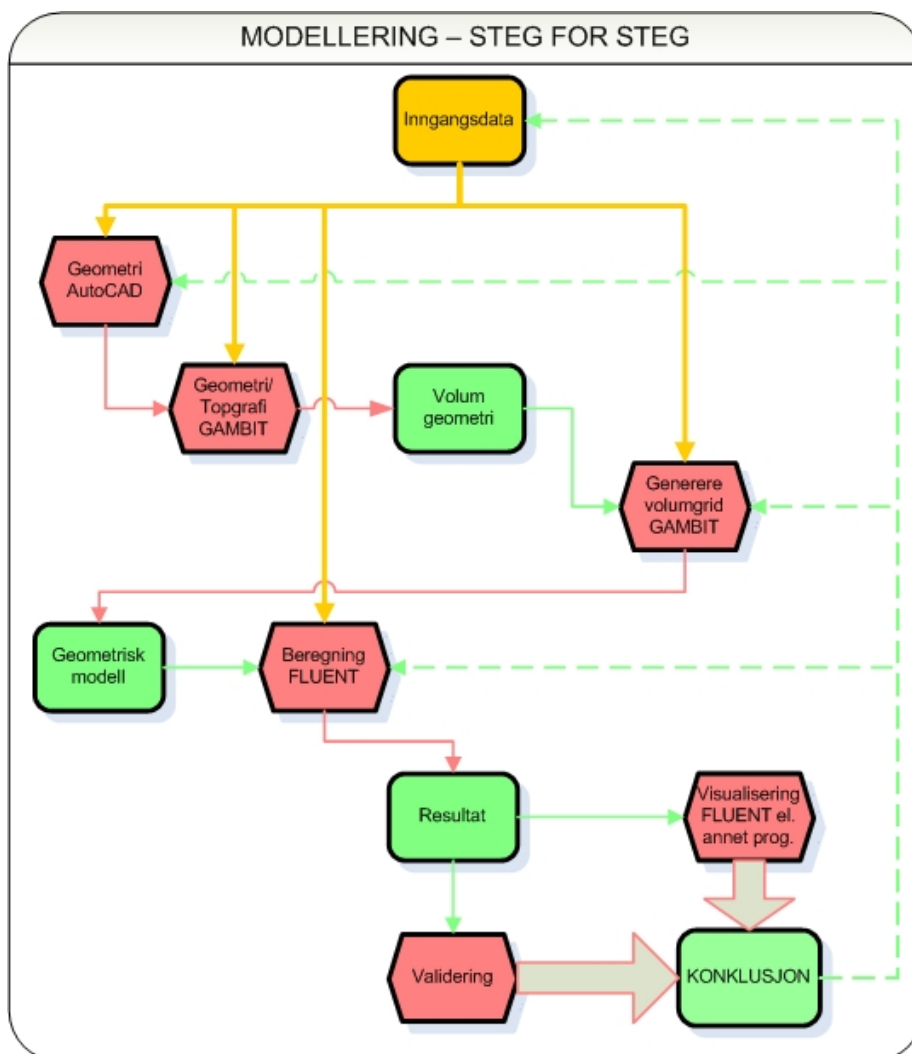
Vurdering av resultat og eventuelle sensitivitetsvurderinger.

Arbeidsmengde og størrelse på hvert av de nevnte hovedpunktene vil avhenge av kompleksiteten på modellen som skal bygges og hva som skal beregnes, og kan variere mye fra prosjekt til prosjekt.

I denne oppgaven har bygging av modell og grid vært det absolutt mest arbeidskrevende, og har tatt meget lang tid. Oppsett av beregningsmodellen har imidlertid vært forholdsvis enkel, da scenariet som skal simuleres er forholdsvis enkelt (kun transport av et kjemisk stoff i luft uten kjemiske reaksjoner), samt at det benyttes hovedsakelig standard oppsett ("default settings").

Tidsaspektet knyttet til hver enkelt oppgave er naturligvis også avhengig av erfaring og kunnskap, og arbeidet vil rasjonaliseres vesentlig jo mer man jobber med programvaren og jo bedre man blir på å legge en effektiv strategi for arbeidene.

Hvor bra en modell blir, og hvor enkel den blir å jobbe med, avhenger også av strategien som velges for oppsettet av modellen. Under følger en skisse som illustrerer stegene i en modelleringsprosess, som også gjennomført i denne oppgaven. Stegene er generelle og vil alltid være en del av en modelleringsprosess.



Figur 5-2 Steg i en modellering (egenprodusert)

5.4.1. Hovedstrategi for bygging av geometrisk modell i denne oppgaven

I denne oppgaven er i utgangspunktet strategi for bygging av geometrisk modell valgt ut fra erfaring og antagelser om hva som ville kunne fungere. Strategien er basert på hvilke programvarer som var tilgjengelig, samt kjennskap til disse. Ettersom erfaringen med deler av programvaren er minimal, velges strategi hovedsakelig ut fra gjennomgang av litteratur, antagelser, samt prøving/ feiling. Andres erfaring blir naturligvis tatt med i vurderinger der slikt er oppgitt.

Oppgaver utover oppbygning av geometrisk modell og grid (dvs. vurdering/ gjennomgang av inndata, oppsett av beregningsmodell og vurdering av resultat), følger ingen særskilt strategi utover hvordan dette normalt gjøres. Oppsett av beregningsmodell følger i hovedsak standard innstillinger, og oppsett av denne blir derfor forholdsvis enkel.

Hovedfokus nr. 1 i oppgaven er som kjent knyttet til bygging av geometrisk modell bestående av følgende to elementer:

1. **Volumgeometri; bestående av topografi** – fra terrengdata **og geometri** – fra bygningsdata
2. **Generering av volumgrid** - i bygde volumgeometri

Ut fra kjennskap til programvare ble det valgt å bygge volumgeometrien i AutoCad (Autodesk (2007)), der de to delmodellene blir bygget hver for seg. De to delmodellene settes så sammen ved implementering i GAMBIT (GAMBIT.2.3.16 (2006)).

Hovedårsaken til at AutoCad ble valgt framfor å bygge all geometri direkte i GAMBIT, var at det ikke var mulig å få noe klart svar fra tilgjengelige fagpersoner (inkl. kontaktpersoner hos FLUENT i Sverige) på hvordan topografiflaten kunne genereres i GAMBIT. Det ble ved oppstart heller ikke funnet noen definert metode, eller referanse til eksempler i den litteraturen som ble gjennomgått i forbindelse med dette forholdet. Det ble derfor konkludert med at AutoCad, som var et kjent verktøy, skulle benyttes til generering av all geometri.

I tillegg til dette ble AutoCad vurdert som et mer effektivt verktøy for geometribygging enn GAMBIT. Dette har sammenheng med erfaring i bruk av programvaren, og de to programmene brukervennlighet ift. effektiv geometrioppbygning. Som beskrevet i kap. 4 er AutoCad et spesialisert program for bl.a. geometrioppbygning, mens GAMBIT skal løse andre vesentlige oppgaver (bl.a. gridoppbygning) i tillegg til geometrifunksjonene. Dette gjør at GAMBIT ikke er blitt like brukervennlig og effektivt å jobbe med, sammenlignet med AutoCad.

Videre ble det i samråd med ekstern veileder ved FFI satt en hovedstrategi for bygging av grid i GAMBIT. Denne følger i utgangspunktet erfaringer FFI sitter med fra omfattende arbeid med programvaren, og går i utgangspunkt ut på at gridoppbygningen så langt det lar seg gjøre skal bygges opp iht. følgende hovedkriterier:

- A. **Cellestørrelse;** Måltall for celle størrelse i ”viktig område” settes til 1 (dvs. 1x1x1 m for en kube).
- B. **Celleform;** Det skal søkes å oppnå et strukturert grid i ”viktig område”.
- C. **Viktig område;** ”Viktig område” utgjør område med bygningsgeometri, spredning og målepunkter (dvs. det området som påvirker spredningen direkte, og gjennom det er spesielt viktig for resultatet av beregningene).

Pga. modellens størrelse ble det valgt å definere et ”viktig område”. Utenfor dette området settes det ikke et spesifikt kvalitetsmål for cellestørrelse eller –form, utover at veksten på cellene fra viktig område ikke skal overstige de kriterier for cellevekst som gjør at det vil kunne være en fare for at numeriske feil kan skapes. Cellevekst bør normalt ikke overstige 20%. For å avgrense det viktige området fra resten av

beregningsvolumet vil det totale beregningsvolumet bli delt opp i mindre volumer (hjelpesvolumer), som blir gridet hver for seg ift hvilke krav som settes til cellestørrelse og –form.

Når geometrisk modell er ferdig bygget og gridet, eksporteres modellen til FLUENT (FLUENT.6.3.26 (2006/07)).

Oppsettet i FLUENT er, som nevnt over, forholdsvis enkelt og følger ingen spesiell strategi. I hovedsak er det kun følgende punkter som skal settes opp:

- **Grensebetingelser** (f.eks. vindhastighet inn i modell, utslippsbetingelser og ruhet (z_0))
- **Gravitasjon**
- **Utslipp**; dvs. definerings av materialer
- Valg av **turbulensmodell**
- Oppsett av **monitorpunkter** for registrering av molar konsentrasjon
- **Stasjonær tilstand** eller **tidsavhengig**
- **Antall iterasjoner** i hvert tidssteg og stabilitetskjøring
- **Eventuell oppdeling av modellen** tilsvarende antall prosessorer som benyttes

Dette oppsettet gjøres ganske raskt, og resten av innstillinger i FLUENT følger standard oppsett.

Resultater fra simuleringene skal videre behandles særskilt. I denne oppgaven skal de valideres mot vindtunneldata. Det skal benyttes en gitt metode for valideringen, se kap. 7.2 for beskrivelse av denne.

Kort oppsummert består strategi for modelleringen av følgende overordnede deloppgaver:

1. **Geometrioppbygning** gjøres ved bruk av AutoCad
2. **Topografioppbygning** gjøres ved bruk av AutoCad
3. **Grid** genereres i GAMBIT og skal følge visse kriterier ift størrelse og form
4. **Beregning** gjennomføres i FLUENT med hovedsakelig standard oppsett
5. **Resultater** valideres iht. gitt metode

5.4.1.1. Endringer i valgt strategi

Den valgte strategien, og målene i denne, har vist seg å ikke være lett å følge/ gjennomføre. Dette gjelder spesielt punktene knyttet til topografigenerering i AutoCad, og kriteriene for form på cellene (spesielt i viktig område). Problemene som har oppstått settes på ”kontoen” for erfaring. Det påpekes imidlertid at det på forhånd ikke var gitt at valgte strategi ikke ville fungere, og at det heller ikke ble angitt noen løsning verken fra FLUENT Sweden eller fra andre. Det som anses som beklagelig er imidlertid at det tok så vidt lang tid med å finne løsninger på forholdene.

Dette har ført til at den strategien som over er angitt for generering av geometrisk modell ikke har ført frem. Med dette som bakgrunn er det gjort følgende endringer underveis i oppgaven:

- **Topografioppbygning gjøres direkte i GAMBIT.**
- **Celleform utføres som ”ustrukturert”.**

Det er ikke gjort endringer utover disse to punktene. Gjennomgang av bakgrunnen for endringene følger av de påfølgende kapitlene knyttet til disse spesifikke delene av oppgaven.

6. GENERERING AV GEOMETRISK MODELL

Dette kapitlet er en gjennomgang av hvordan geometrisk modell ble bygget, samt gjennomgang av eventuelle problemer og muligheter som er oppdaget underveis. Oppbygning av modell er basert på gitte geometriske inndata, som beskrevet i kap. 5.2.

Dette kapitlet tar kun for seg hvordan oppbygningen ble gjort i de modellene som ble benyttet, og er ikke en oversikt over alle modellene som totalt ble laget i prosjektet. Enkelte spesielle problemer, samt tanker og muligheter, tas imidlertid opp her, om de ikke er nevnt i andre kapitler.

Bygging av geometrisk modell følger den strategi, med angitte endringer, som er gjennomgått i kap. 5.4.

De geometriske modellene som er generert, består av følgende to bestanddeler:

- Et ”beregningsvolum”, som inneholder all den geometri og topografi som er gitt i dette tilfellet. Topografien danner den nederste flaten i volumet, og geometrien (her: bygg og tanker) er plassert på topografiflaten. Det er innenfor beregningsvolumet hele beregningen av utslippet vil gjøres.
- Et volumgrid, som fyller hele beregningsvolumet. Det er volumgridet som importeres i beregningsprogrammet (FLUENT), og som benyttes i beregningene som utføres.

Størrelsen på beregningsvolumet i X-Y-planet begrenses av utstrekningen på topografiflaten. Her er denne gitt med en størrelse på 500 x 600 m. Høyden/ toppen på beregningsvolumet (Z-retning) må være så stor at den begrensningen denne høyden utgjør ikke påvirker det bakkenære vindfeltet (der turbulensgenereringen i grensesjiktet til overflaten er spesielt viktig ifm. spredningsforløpet og utbredelsen). Valgt høyde er en vilkårlig valgt størrelse, som i diskusjon med veileder er antatt å være tilstrekkelig for at det bakkenære vindfeltet ikke påvirkes av begrensningen. Som følge av dette er det valgt å sette høyden til 300 m ift Z_0 (Z_0 varierer videre fra 0 – 30 m ift topografien, slik at høyden på beregningsvolumet varierer fra 270-300 m), noe som vil være tilstrekkelig høyde over grensesjiktet (the roughness sublayer), som er i området pluss minus en faktor 2 av gjennomsnittlig bygningshøyde (som her er 10 m), jfr. Hanna and Britter (2002).

Beregningsvolumet kan videre deles opp i mindre volumer, her kalt ”hjelpesvolumer”, som kan være til hjelp for å skille av deler av volumet fra hverandre. Dette er et veldig viktig hjelpemiddel når modellen skal grides, da det ofte er ønske om forskjellige typer og/ eller kvalitet på gridet i forskjellige soner. I tillegg er det et hjelpemiddel for faktisk å få generert grid med ønsket kvalitet (ved å dele et komplekst område opp i mindre komplekse deler). Beregningsvolumet kan derfor måtte deles opp i veldig mange mindre hjelpesvolumer ettersom det er behov.

Med bakgrunn i den gridmodellen som til slutt ble valgt, som angitt i kap. 5.3, er beregningsvolumet i liten grad delt opp i mindre hjelpesvolumer. Det er benyttet to modeller for oppdeling. I den ene er beregningsvolumet delt i to mindre volumer (et øvre og et nedre volum), mens det nedre hjelpesvolumet er delt i 3 i den andre modellen (se Figur 6-1). Hovedprinsippet for valgt oppdeling er at det er områder der det er ønske om et grid med mindre cellestørrelse enn andre. Området dette gjelder er der spredningen av gassen vil skje, og karakteriseres som ”viktig område” ift. beregning av spredningen. Utenfor dette området godtas et grovere grid, da påvikningen på selve spredningsforløpet er mindre her.

Av Figur 6-1 fremgår det hvordan modellen med fire hjelpesvolumer er delt opp. Den viser imidlertid kun flat bunnflate. Imidlertid er bunnflaten egentlig en topografiflate, se Figur 6-3. Flaten mellom det store volumet og de små volumene er i tillegg identisk med topografiflaten, slik at høyden (Z) alltid er 25 m i de nedre hjelpesvolumene. Som nevnt over er en modell (den med grovest gridoppløsning) laget med kun to hjelpesvolumer, dvs. at nedre del ikke består av tre hjelpesvolumer, som vist i Figur 6-1, men kun av ett volum.

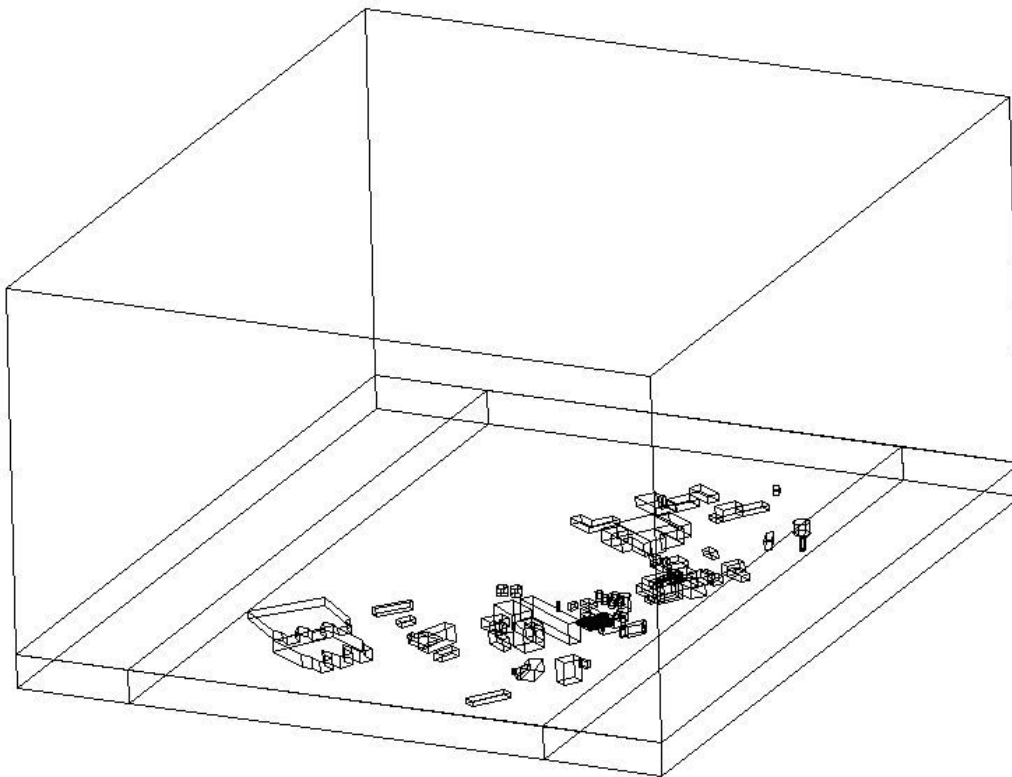
Bakgrunnen til at det er laget to modeller for oppdeling er at det er ønske om å redusere viktig område der cellestørrelsen er liten (slik at antall celler også kan reduseres).

Som nevnt tidligere i rapporten benyttes følgende programvare i denne delen av oppgaven:

- AutoCad: Generering av geometri, dvs. bygninger, med mer, samt enkelte hjelpevolum.
- GAMBIT: Generering av topografi og sammensetting av geometri og topografi til en komplett geometri. I tillegg benyttes GAMBIT til generering av grid og definering av grenseflater.

I de neste kapitlene følger en gjennomgang av de forskjellige stegene i tilknytning til deloppgavene i bygging av geometrisk modell, dvs. generering av geometrisk volum som inneholder topografi og bygninger, samt generering av volumgrid.

NB! Alle kommandoer benyttet i programvaren det refereres til i kapitlene som følger er angitt på engelsk. Dette kommer av at programvaren har engelsk språk (AutoCad kan fåes på Norsk, men det er ikke benyttet her).



Figur 6-1 Skisse over beregningsvolumet og oppdeling av dette i fire hjelpevolumer (ett stort og tre mindre). Denne skisses viser ikke topografiflaten, men kun en flat flate i bunn. Skissen viser hvordan bygningen er plassert, og at det er laget et hjelpevolum rundt dette området, som er definert som ”viktig område” ift. beregning av spredning av klorgass (egenprodusert).

6.1. Bygging av geometri i AutoCad

Som nevnt er AutoCad benyttet til bygging av bygninger, med mer, som er en del av modellen. Det var i utgangspunktet tenkt å generere topografiflaten her også, men dette fungerte ikke (se nærmere spesifisering i kap. 6.1.1).

Figur 6-1 viser, om ikke detaljert, omfanget på bygningene i modellen. De fleste byggene består av relativt komplisert geometri, i det at de enten har en spesiell form, eller er satt sammen av flere bygningsdeler med forskjellig størrelse og form. Et eksempel er bygningen der utslippet skjer, se Figur 5-1, som består av en bygningskropp, 5 stk tanker som er plassert under deler av bygningskroppen og et oppsamlingskar som omslutter alle tankene. Denne typen geometri er relativt enkel å tegne, men må karakteriseres som komplisert når den skal grides.

Inndata for alle bygninger er gitt gjennom referanseprosjektet, som redegjort i kap. 5.2. Inndata for bygninger er gitt på to former:

- Koordinater for nedre hjørnepunkter på alle bygninger
- Målsatte skisser inkl. høyder på alle byggene

Som nevnt i kap. 5.2 er det visse unøyaktigheter tilknyttet hjørnepunktskoordinatene. Det fører til at alle bygg blir unøyaktige ved bruk av disse, og må følgelig rettes opp i ettertid. Her viste det seg at dette var nødvendig i relativt stort omfang, og justeringene som ble gjort ble utført ved hjelp av de målsatte skissene, som er en del av inngangsdataene.

Den måten som vurderes som enklest/ raskest å bygge opp geometrien i AutoCad, med denne typen inndata tilgjengelig i dette referanseprosjektet, er å gjøre følgende:

- Legge inn koordinatpunktene for hjørnepunktene på byggene
- Tegne bunnlinjen for hvert bygg ved hjelp av koordinatpunktene
- Bruke bunnlinjene til å skape volum med ønsket høyde ved bruk av spesifisert kommando. Byggene er da bygget.

Koordinatene ble lagt inn manuelt, men kunne med fordel ha vært lest inn automatisk (kommando: "Insert → ACIS file"). Koordinatene må da være ordnet på X, Y, Z form og lagret som en *.sat-fil).

Dette er ikke veldig ulikt måten det kan gjøres på i GAMBIT, men det som anses som en stor fordel i AutoCad er at små justeringer og tilpasninger kan gjøres meget enkelt. Dette vil kreve noe mer arbeid i GAMBIT.

En annen stor fordel ved å tegne med kordinatene er at byggene plasseres på riktig plass (ift x, y, z) med en gang. Dette er spesielt viktig ift at de skal plasseres riktig på en topografiflate.

Enkelte bygninger, som kilden, og tankene for øvrig, ble tegnet etter skissene, da det ikke var koordinater for disse.

Et meget viktig punkt når geometrien skal grides er at det ikke er små mellomrom/ glipper i geometrien. Dette kan forårsakes ved at to bygg ikke står helt inntil hverandre, at bygget ikke bryter topografiflaten skikkelig, med mer. Dette problemet ble oppdaget når geometrien ble importert til GAMBIT, og plassert på topografiflaten. For å rette opp unøyaktigheter og potensielle feilkilder/ problemområder ble det tatt to grep:

1. Alle sammensatte bygninger ble nøye gjennomgått og tilpasset slik at bygningskroppene enten stod helt inntil hverandre eller gikk i hverandre.

2. Alle bygninger ble senket 1 m uten at høyden ble endret. Dette ble gjort for å sikre at bygningene skulle bryte topografiflaten skikkelig.

Disse grepene sikret at det ikke ble problemer med generering av grid som følge av nevnte potensielle problemer.

I tillegg til selve byggene ble også en del av hjelpevolumene laget i AutoCad. Dvs. de som ikke hadde topografiflaten som en av flatene (da den ble generert i GAMBIT).

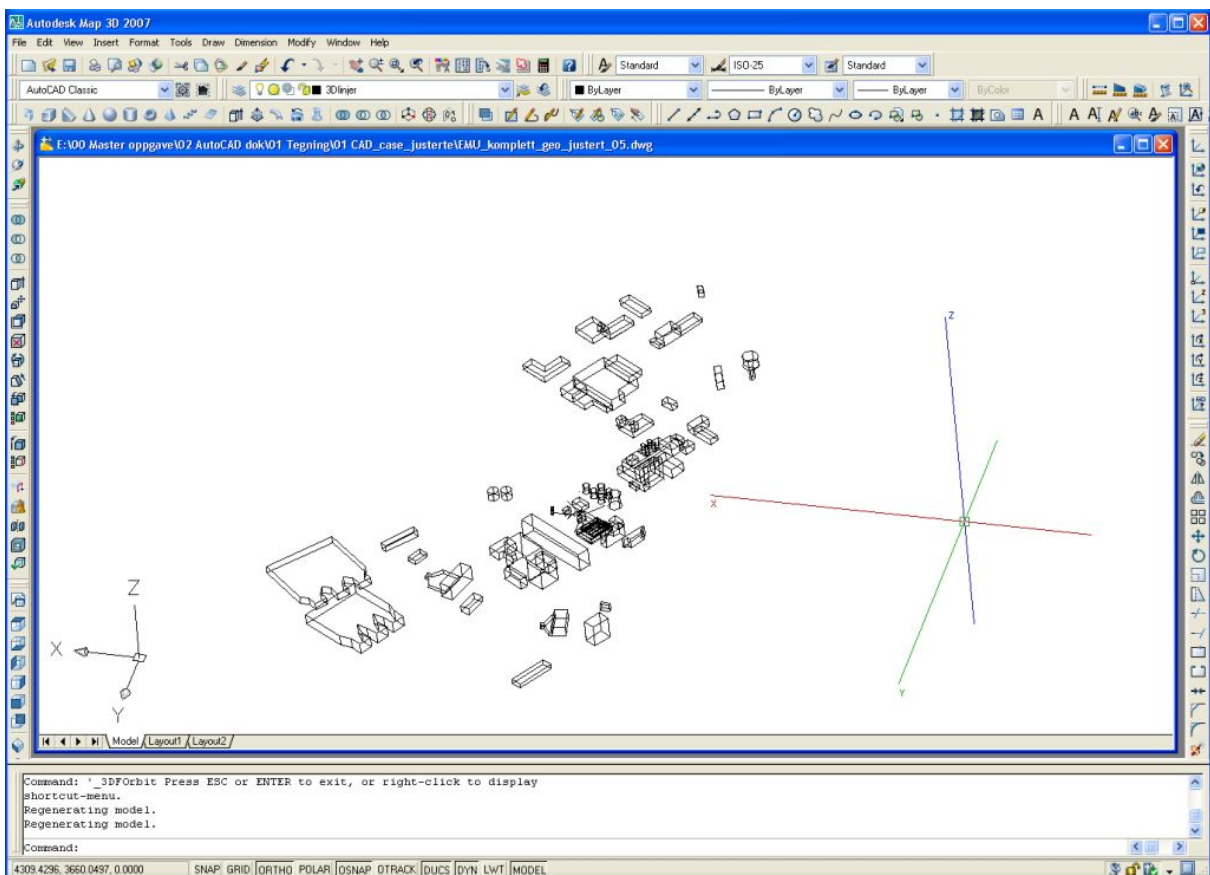
Under følger en kort oppsummert liste over stegene og kommandoene som er benyttet i byggingen av geometrien i AutoCad. Se for øvrig Figur 6-2 for skjerm bilde av AutoCad arbeidsvindu.

Tabell 6-1 Oversikt over steg i generering av geometri i AutoCad

Steg	Hva ble utført	Kommandoer (Engelsk)	Kommentar
1	Innlesning av punktkoordinater for nedre hjørner på byggene.	Point	X, Y og Z koordinater ble benyttet. Punktene kan med fordel leses inn automatisk gjennom kommandoene "Insert → ACIS file" (sat-fil som les).
2	Nedre bunnlinje ble tegnet opp, og denne ble så benyttet til å lage hele bygget (dvs. lage volum basert på bunnlinjen).	Polyline – for å lage bunnlinjene Extrude – for å lage volum av bunnlinje	Det er viktig at den linjen som blir tegnet mellom punktene, som danner bunnlinjen, blir en lukket linje (for at volumgenereringen skal fungere). Det er andre måter å generere byggene/volumene på. Uavhengig av metode er det imidlertid viktig at volumene som genereres er tette. Hvis ikke lar de seg ikke eksportere. Dvs. tette volum elementer er nødvendig.
3	Spesiell geometri ble tegnet inn, som: utslippsgeometri og andre tanker. Dette ble tegnet på grunnlag av målsatte skisser.	Samme kommandoer som over ble benyttet, men utgangspunktet for opptegningen var ikke hjørnepunkter.	
4	Senking av alle bygninger, slik at de med sikkerhet vil gå gjennom topografiflaten.	Move – for å flytte bygningene 1 m ned. Extrude – for å øke volumene med 1 m (for å oppnå riktig høyde).	Dette kunne vært gjort enklere ved at alle koordinater hadde blitt justert på forhånd (ble ikke gjort slik da alle byggene var tegnet før behovet for senkning ble oppdaget). Den benyttede metoden er imidlertid ikke veldig arbeidskrevende (alle bygg flyttes i en operasjon).
5	Bygging av hjelpevolumer.	Ble laget på akkurat samme måte. 1. Polyline (bunnlinje) 2. Extrude (volum)	Størrelse på hjelpevolumene ble tilpasset valgt høyde på beregningsvolumet, samt ønsket oppdeling av nedre hjelpevolum.
6	Eksport av fil til format som kan importeres i GAMBIT.	File → Export Velg format: ACIS (*.sat) Så velges volumene som skal eksporteres, og filnavn angis.	Det er kun tette volumelementer som lar seg eksportere på denne måten.

N	Justering av geometri ved behov. Dette gjaldt spesielt hjelpevolumer og utslippspunktet.	Som gitt i steg 1-6.	
---	---	----------------------	--

Av Tabell 6-1 fremkommer det at stegene og måten geometrien ble generert på er meget enkel. I denne oppgaven var det imidlertid en del prøving og feiling før resultatet var tilfredsstillende, men det vurderes at valgte strategi for bygging av geometrien, dvs. ved bruk av AutoCad, var et riktig valg. Det anses ikke at dette på noen måte hadde gått raskere ved bruk av GAMBIT, snarere tvert i mot.



Figur 6-2 Skjerm bilde av AutoCad arbeidsvindu. Bilde er noe uklart, men viser at det er en mengde hurtigknapper for generering og justering av geometri, noe som effektiviserer arbeidet (egenprodusert).

6.1.1. Problemer tilknyttet generering av topografiflate i AutoCad

I utgangspunktet var planen (strategien) å generere topografiflaten i AutoCad, sammen med resten av geometrien. Dette viste seg fort å ikke fungere som forutsatt, og generering av topografi i AutoCad fra det gitte datasettet i oppgaven, som er basert på x, y og z koordinater, ble derfor forkastet. Det viste seg at det ikke var mulig å generere en topografiflate i AutoCad, som var brukbar i, eller lot seg importere til, GAMBIT.

Problemet som oppstår er at det ikke er noen opplagt måte å generere en flate i AutoCad fra importerte punktdata. Som beskrevet i kap. 4 er det kun volum som lar seg eksportere som ASCII-filer fra AutoCad. For å lage et volum er det videre nødvendig med en definert flate. Hadde det således vært mulig å lage en veldefinert flate kunne således et volum, der denne flaten er en del, blitt laget og eksportert. Det ble testet

flere forskjellige tilleggsprogrammer til AutoCad for import av punktdata, men dette hjalp ikke. Etter mye resultatløs prøving ble denne strategien for topografigenerering forkastet.

Det kan nevnes at dette problemet kan (sannsynligvis) henge sammen med undertegnedes kjennskap til, og kunnskap om, programvaren. Det er imidlertid gjort omfattende forsøk på å finne ut av forholdet, noe som har betydd gjennomgang av dokumentasjon, internetforum, samt bruk av annen programvare. Det har likevel ikke lyktes å generere topografiflatten som ønsket.

Løsningen som tilslutt viste seg å fungere, og som dessuten var meget enkel, var å importere datasettet for topografiflatten direkte i GAMBIT. Det genereres da en punktsky (dvs. punkter tilsvarende hver enkelt x-y-z-koordinat), som det enkelt kan genereres en flate fra. Dette fungerte bra, og ble den valgte strategien.

6.2. Generere topografiflate og komplett geometrisk modell i GAMBIT

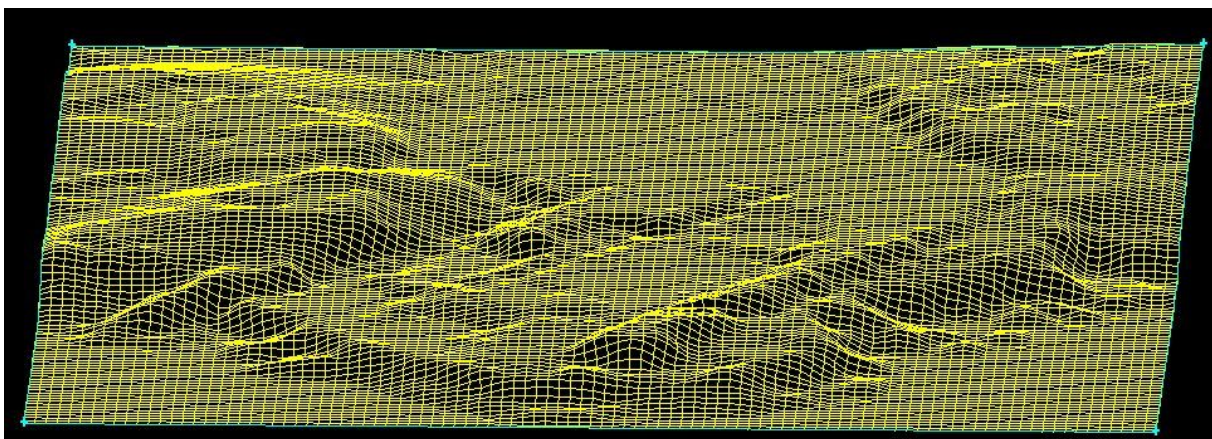
GAMBIT er som tidligere nevnt benyttet til å generere topografien, og sette den sammen med annen geometri slik at en komplett geometrisk modell blir generert.

Tabell 6-2 gir en oversikt over stegene som ble benyttet i GAMBIT frem til den geometriske modellen var klar til å bli gridet.

Med bakgrunn i at topografiflatten genereres i GAMBIT, vil også hovedhjelpvolumer (øver og nedre del) bli generert i GAMBIT.

Det har oppstått enkelte alvorlige problemer tilknyttet topografiflatten. Problemet som oppstår, mulig årsak og forslag til løsninger er redegjort for i kap.6.2.1. Det problemet som har oppstått ble oppdaget på et sent tidspunkt i prosjektet, og gjorde at alle modellene som skulle benyttes måtte bygges om for at topografien skulle bli gjengitt riktig. Dette førte videre til at den topografiflatten som er benyttet kun består av 10 x 10 m rutenettet, og er ikke komplett med 5 x 5 m rutenettet i området rundt utslippet. Dette er uheldig, men det vurderes imidlertid ikke å bety vesentlige endringer i spredningen av gassen som slippes ut (5 x 5 m rutenettet angir en forfinet overflate i et område på 150 x 150 m der annet hvert punkt er samsvarende med punktene i 10 x 10 m rutenettet). Dette kunne imidlertid vært fint å få sjekket ut, uten at det ble tid til det i denne oppgaven.

Figur 6-3 viser topografiflatten slik den er generert og brukt i de geometriske modellene som er bygget i oppgaven. I figuren er det lagt på et 10 x 10 m rutenett (flategrid) for å få frem hvordan overflaten varierer.

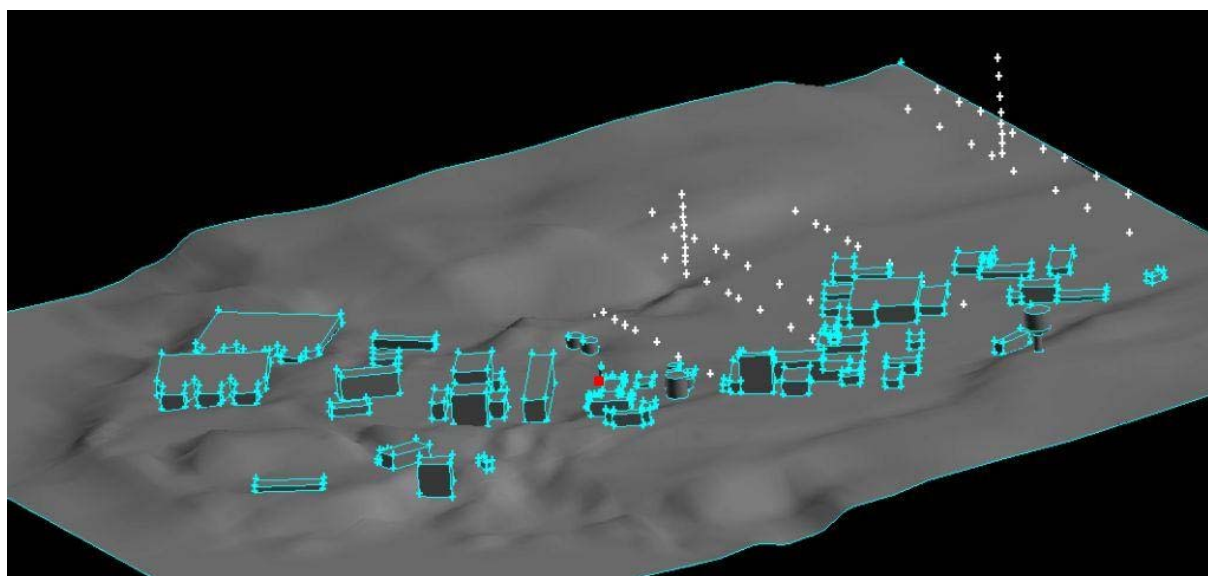


Figur 6-3 Topografiflate slik den er generert og brukt i modelloppbygningen (egenproduisert)

Topografiflaten som er vist i Figur 6-3 er første steg i byggingen av modellen, som kort oppsummert består av følgende steg:

1. Generere topografiflate
2. Bygge beregningsvolum, som inneholder topografiflaten, og dele det inn i hjelpevolum (hoveddeler)
3. Importere ACIS-fil med geometri og eventuelle andre hjelpevolum bygget i AutoCad
4. Sammenføye importert geometri/ hjelpevolum, med beregningsvolumet som er bygget

Dette er i grove trekk de steg som er benyttet for å generere geometrisk modell i oppgaven. I Tabell 6-2 følger en mer detaljert oversikt over stegene med tilhørende kommandoer.



Figur 6-4 Viser sammensatt topografiflate og bygninger. Hvite punkter angir monitorpunkter for registrering av gasskonsentrasjon. Rødt punkt angir plasseringen på utslippet (egenprodusert).

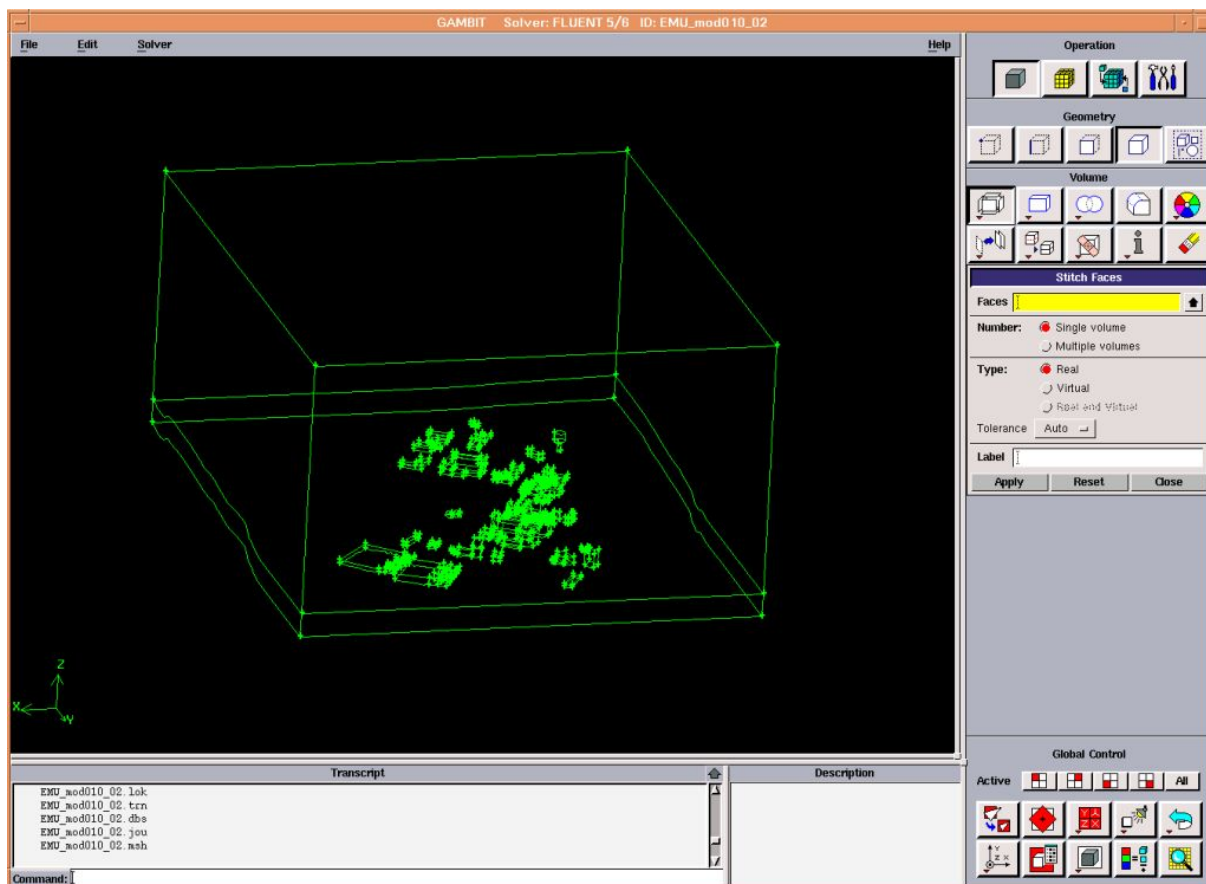
Tabell 6-2 Oversikt over steg i generering av topografi og komplett geometrisk modell i GAMBIT

Steg	Hva ble utført	Kommandoer (Engelsk)	Kommentar
1	Generering av topografiflate. Stegene er som følger: <ul style="list-style-type: none"> - Import av koordinatpunkter - Generere flate fra importerte punkter. 	<ol style="list-style-type: none"> 1. File → Import → Vertexdata <u>Vertexdata må være i csv-format, og ordnet i kolonner med x, y, z.</u> 2. Geometry command → Face command → Form Face → Create Face From Vertex Rows Her markeres alle importerte punkter, samt at antall rader angis. 	Topografiflate kan genereres på andre måter (se kap. 6.2.1), som er mer arbeidskrevende, men sannsynligvis enklere ift å få slått sammen de to rutenettene. Med den metoden som er benyttet her er importen og generering av flaten enkel, mens sammenslåingen av de to flatene (fra 5x5 og 10x10 nettet) er vanskelig.
2	Bygge beregningsvolum. Generert ved å benytte x og y koordinatene i hjørnene på topografiflaten og plassere dem i z = 300. Disse punktene benyttes til å lage et volum med	Standard kommandoer under geometrigenereringsmenyen i GAMBIT. <ol style="list-style-type: none"> 1. Create Real Vertex (i z = 300) 2. Create Straight Edge (mellom punktene og punktene/ topografiflaten) 3. Create Face from Wireframe (dvs. sideflater og toppflate på 	

Steg	Hva ble utført	Kommandoer (Engelsk)	Kommentar
	topografiflaten som nedre flate.	beregningsvolumet) 4. Stitch Faces (til ett volum) Beregningsvolumet er nå generert.	
3	Dele beregningsvolum i to deler ved å kopiere topografiflaten og plassere den 25 m over reell topografisk overflate.	1. Copy Faces (kopier topografiflaten 25 m i z-retning). 2. Spilt volume with Faces (real) + Connected (deler beregningsvolumet i 2 deler med den kopierte topografiflaten og lager to volumer, øvre og nedre, som er koblet sammen, dvs. med en felles flate).	Det er nå dannet to volumer som er koblet sammen. At de er koblet sammen med én felles flate, er meget viktig for å oppnå kontinuitet i strømmingen over flaten.
4	Importere ACIS-fil inneholdende all geometri og eventuelt hjelpevolum (generert i AutoCad).	File → Import → ACIS	All geometri plassers der det er tegnet (ift koordinater som er benyttet). Det er således viktig å tegne geometri i AutoCad med riktig plassering.
5	Sammenføye hjelpevolumer (Det var kun i nedre volum dette var aktuelt i denne oppgaven).	Her benyttes også Split Volume kommandoen. Dersom det er volumer som importeres benyttes både Bidirectional + Connected . Det vil da være nødvendig å fjerne overskuddsdeler av importerte volumer om disse har større størrelse enn de volumene de splittes med.	Se Figur 6-1. Der er dette gjort i nedre volum og det er dannet tre volumer.
6	Sammenføye geometri (dvs. bygninger, etc.) med volumene de faller i.	Subtract Real Volumes Alle byggene trekkes fra volumet(-ne) de er plassert. Retain er <u>ikke</u> benyttet i denne oppgaven (og anses som greit å ikke benytte)	Når dette gjøres fjernes all importert geometri og bare avtrykket i volumet de var plassert i står tilbake i volumet. Topografiflaten vil nå følge langs bygningskroppen der bygningen brøyt denne flaten. Endringer på geometrien kan nå i utgangspunktet ikke gjøres.
N	Eventuelle endringer	I hovedsak de samme kommandoene som er angitt over.	Det må påregnes en del testing og tilpasninger/ endringer før tilfredsstillende modell er generert.

Det anbefales at punkter, kanter, flater og volumer som er viktige kalles opp med særegne navn, da det vil gjøre det enklere å jobbe med modellen. Dette gjøres i tilfelle når disse geometridelene genereres.

Komplett geometrisk modell er nå ferdig generert, og er klar for siste fase før beregning, dvs. at grid skal genereres og grenseflater skal defineres (Figur 6-5 viser skjermbilde av grafisk grensesnitt av GAMBIT, samt ferdig bygget geometri).



Figur 6-5 Skjerm bilde som viser ferdig bygget geometrisk modell i GAMBIT, samt det grafiske brukergrensesnittet (egen produsert).

Det kan nevnes at alle kommandoer i GAMBIT kan skrives direkte inn i kommandolinjen nederst i programvinduet. Det er dessuten flere kommandoer som kun kan benyttes via slik angivelse.

6.2.1. Problemer tilknyttet deformasjon av topografiflaten

Det har, som nevnt over, vist seg at topografiflaten kan bli vesentlig deformert når det utføres endring av/på flaten. Problemet kommer først til syne når man starter å generere grid på overflaten, da det er da topografikonturen fremkommer i sin helhet. Figur 6-6 og Figur 6-7 viser to deformerte topografiflater, sett i forhold til Figur 6-3, som viser topografien slik den skal være.

Årsaken til at deformasjon skjer er ukjent, og antas å kunne være flere. Det som imidlertid er observert i dette tilfellet er at hovedflaten (bygget av punkter i et 10x10 m rutenett) endres vesentlig når det gjøres forsøk på å slå den sammen med den forfinede flaten for område rundt kilden (bygget av punkter i et 5x5 m rutenett), for å oppnå en hel sammenhengende flate. Det kan benyttes flere metoder for å slå de to flatene sammen. De som er testet i denne oppgaven har vist seg å føre til tildels alvorlig deformasjon av topografiflaten (som vist på figurene under).

Det som også er interessant er at det kan fremkomme forskjellige typer deformasjoner. Figur 6-6 viser en flate som er deformert i form av at den er blitt jevnet ut ift riktig flate. Figur 6-7 viser imidlertid en deformert flate, som ved grove grid angis korrekt, mens det ved fine grid fremkommer alvorlige deformasjoner (som vist på figuren).

Problemet ble observert på et sent tidspunkt i prosjektet. Det har ført til at det ikke har vært tid tilgjengelig for å søke veldig etter den reelle feilkilden. Det eneste som er observert er at deformasjon skjer når det gjøres forskjellige forsøk på å slå de to flatene (10x10 m rutenettet og 5x5 m rutenettet) sammen. Da

problemet ble oppdaget, ble alle modellene revidert, og kun bygget opp av 10x10 m rutenettet, for å være helt sikker på at topografien ikke inneholdt deformasjoner. Dette anses uansett å gi en tilfredsstillende representasjon av topografien, og meget bedre enn om deformert flate (som f.eks. vist i Figur 6-7) skulle vært benyttet.

Det antas at det vil være flere mulige løsninger på forholdet, som bl.a. kan være:

- En generell løsning kan være å ikke gjøre noe forsøk på slå to slike flater sammen. Det som da kan gjøres er å lage et eget volum bestående av den forfinede flaten, som splittes med hovedvolumet som består av den store flaten. De to flatene, og volumene, vil da være koblet sammen (og ingen nærmere tilpasninger vil være nødvendig før gridding).

I dette prosjektet ville denne fremgangsmåten imidlertid bydd på litt problemer, da enkelte deler av geometrien havner på tvers av skillet mellom flatene. Dette kunne blitt løst ved å justere den minste flaten, slik at geometri i grenseområdet mellom flatene i sin helhet havner på den ene eller den andre flaten.

- En annen løsning kan være å slå de to datasettene (5x5m og 10x10m) sammen. Annet hvert punkt i 5x5 m settet er det samme som i 10x10 m settet, og en sammenslåing vil således være enkel.

Det som imidlertid antas å ville kunne by på problemer er generering av flate fra importerte punktdata med bruk av samme kommando i GAMBIT, som er benyttet i dette prosjektet. Flatene er generert fra punktdata direkte via kommandoen "Create Face From Vertex Rows". Det er mulig at dette kan bli vanskelig ift at alle radene ikke består av like mange punkter.

Dersom ikke flategenereringen, som beskrevet over, fungerer, kan det gjøres et forsøk på å generere flaten fra importerte punktdata gjennom bruk av kommandoene:

- o **"Create Edges from Vertics"**, som må gjøres i både x og y retning (for å danne et rutenett av linjer). Dette danner interpolerte linjer fra hver punktrekke.
- o Så kan det gjøres et forsøk å bruke **"Create Net Surface Face"**, som vil lage en flate av nettet (en netflate).

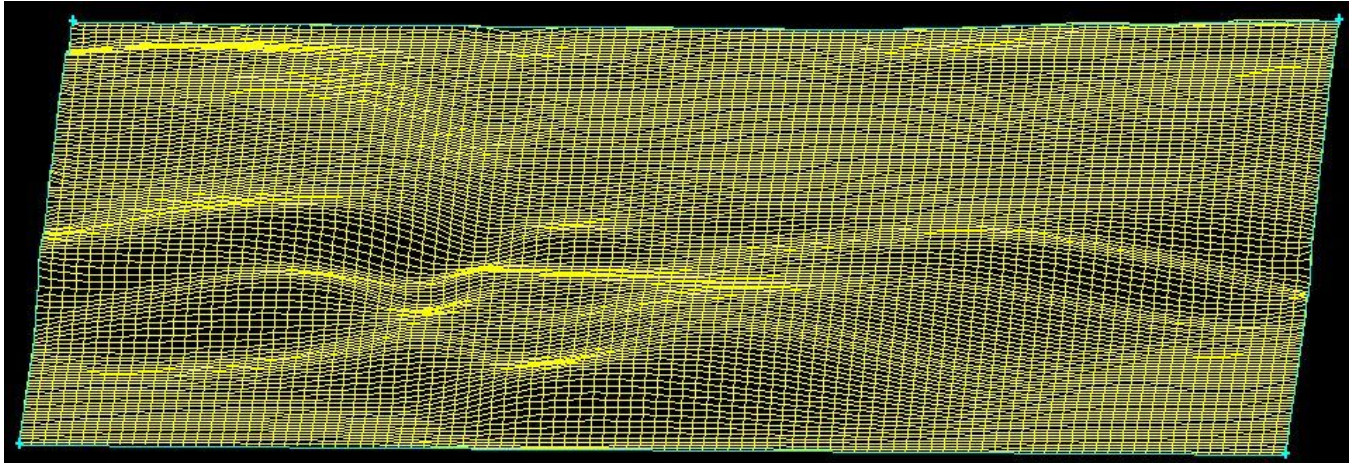
Denne metoden er testet på det datasettet som ble benyttet i oppgaven, og det ser ut til at dette lager en flate som er tilsvarende den som er bygget med den metoden som er benyttet. Dette betyr at det er flere måter å generere en topografiflate på.

Det som anses som positivt med metoden, som er beskrevet her, er at den enkelt lar seg kombinere med flere datasett for representasjon av en flate. Et problem i oppgaven var bl.a. at det var to datasett for topografiflaten, som nevnt over (et 10x10m rutenett og et 5x5m rutenett). Det skapte problemer å slå disse sammen, for så å benytte kommandoen "Create Face From Vertex Rows". I den alternative metoden, som angitt over, vil et kombinert datasett imidlertid ikke være noe problem, da man lager linjene først. Hver linje kan videre lages av et forskjellig antall punkter. Når linjene er laget kan en flate fra linjene genereres. Det vurderes at det hadde vært en fordel om denne metoden hadde blitt benyttet i oppgaven i stedet for metoden som ble benyttet.

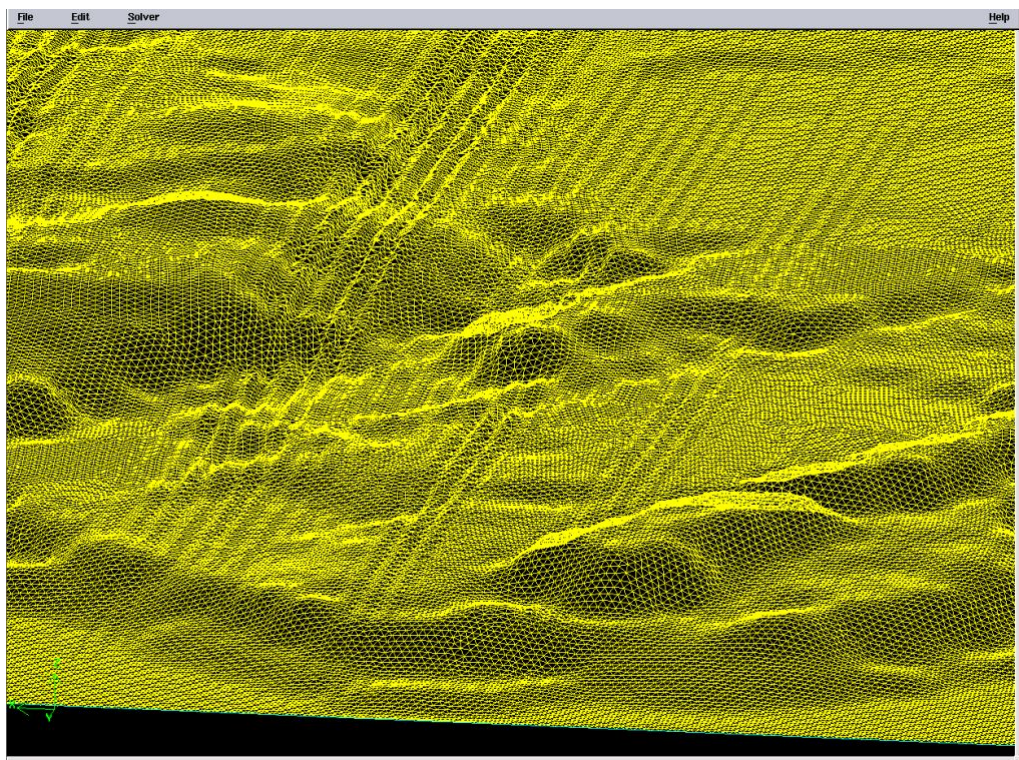
Det fins også andre funksjoner som er tilnærmet den som er beskrevet over. Man benytter da kun linjer i enten x eller y retning for å generere flaten. Dette kan også være en mulighet.

- Andre muligheter kan være å generere flaten eksternt, dvs. i andre programmer enn GAMBIT. Dette vil kunne være matematiske programmer eller i CAD programmer. Det er ikke gjort forsøk på dette utover det som er nevnt under kap. 6. En fordel med dette vil kunne være at det oppnås mer kontroll på hvordan flaten blir representert.

Det konkluderes med at det må føres jevnlig kontroll med om/ hvordan topografiflaten endres når det gjøres endringer på den. Dersom dette ikke gjøres, kan det føre til at det skjer alvorlige deformasjoner av flaten, uten at det er kjent. Dette kan videre påvirke resultatet fra bruk av modellen vesentlig.



Figur 6-6 Viser degenerert topografiflate som følge av "merge" av to flater til en virtuell flate, og videre konvertert til reell flate (egenprodusert).



Figur 6-7 Viser deformert topografiflate. Årsak til deformasjonen er ikke kjent, men antas å ha oppstått i forbindelse med sammenslåing av hovedtopografien med den forfinede topografien rundt kilden (egenprodusert).

6.3. Generering av grid og definering av grenser

Generering av grid gjøres, som nevnt, i GAMBIT. Det samme gjelder definering av grenser.

Utgangspunktet var at det skulle benyttes strukturert grid, da muligheten for beregnings-/ diskretiseringsfeil reduseres (FLUENT (2004)), samt at antall celler potensielt også kan reduseres (noe som er av stort ønske for å få ned beregningstiden).

Det ble gjort utførlige forsøk på å få generert et strukturert grid uten at det har lyktes å få til. Det ble til slutt valgt en helt ustrukturert gridmodell for alle modellene som ble bygget, se kap. 6.3.5 for nærmere beskrivelse av problemene tilknyttet strukturert gridmodell.

Scenariet i oppgaven vurderes å bestå av komplisert geometri. Bakgrunnen for vurderingen er at geometrien består av en topografiflate, med relativt store nivåforskjeller, samt av geometri (bygninger) med stor variasjon i form og størrelse (til dels mye variasjon på enkelte av bygningene som er sammensatt av flere bygningskropper). Dette er den direkte årsaken til at strukturert grid ikke lot seg generere som ønsket, selv om det ble benyttet stor oppdeling i hjelpevolumer for å få ned kompleksiteten i volumene som skulle grides.

6.3.1. Kort om muligheter og arbeidsmetoder

Det fins en rekke muligheter og metoder for generering av grid på flater og i volum. I dette ligger bl.a. følgende:

- **Gridmodeller:** mange typer for flater og volumer, slik at de aller fleste geometriske modeller kan bli gridet.
- **Verktøy:** for tilpasning av størrelse, vekst, grensesjikt, med mer.

Volumgrid kan enten genereres direkte eller ved å gå stegene ved å først grille kanter/ flater for så å grille volumet. Dersom det skal benyttes en cellestørrelse i hele volumet kan i utgangspunktet volumet grides direkte, men det anbefales å grille overflater først for å kunne ha litt kontroll på hvordan celleformen blir (kan bli til dels meget degenerert uten at det gis noen spesiell tilbakemelding fra programvaren på det).

Dersom cellestørrelsen i et volum skal variere, f.eks. ved at størrelsen skal øke, vil det være behov for å grille kanter og flater først. Ved enkelte gridmodeller kan man, ved å se på flategridet, imidlertid bli lurt av hvordan celleveksten i volumet vil skje. Dette virker å være et spesielt problem ved gridmodellen TGrid, og forholdet er nærmere gjennomgått i kap. 6.3.7. Det bør nevnes at det er nødvendig med utførlig sjekk av gridet for å oppdage dette.

På generelt grunnlag anbefales derfor følgende overordnede arbeidsgang ved generering av grid:

1. Start med de områder i modellen som er viktigst. Definer ønsket gridmodell.
2. Generer grid på kanter og flater uavhengig av om cellestørrelsen skal være lik i volumet eller ikke.
3. Kontroller gridet som er generert fortløpende, slik at uønskede former med mer, unngås.
4. Generer ønsket volumgrid.
5. Kontroller volumgridet fortløpende.

Det fins i utgangspunktet to hovedmodeller for generering av volumgrid.

- Strukturert: "Hex" (sekskantet volum)
- Ustrukturert: "Tet/hybrid" (firekantet volum)

Videre nevnes at det fins flere typer gridformer innenfor det som defineres som strukturert grid, og at det er et kubisk grid som ofte er det som er ønsket. Innenfor det som defineres som utstrukturert grid fins det to typer gridmodeller; TGrid og HexCore. TGrid er et helt ustrukturert grid bestående av firkantet volum

(trekantet pyramide). HexCore er imidlertid en mellomting mellom strukturert og ustrukturert grid, der flater, og en del av volumet tilliggende flatene grides med TGrid, mens selve volumet grides med strukturert grid. Se Figur 6-14 for en enkel illustrasjon, samt kap. 6.3.8 der det blir gjort noen vurderinger tilknyttet muligheten til HexCore. I tillegg vil HexCore kunne være cellebesparende.

For nærmere gjennomgang av modeller og muligheter henvises det til "GAMBIT Modelling Guide" (FLUENT-Inc. _02 (2006)).

6.3.2. Gridmodell og arbeidsgang i oppgaven

I de modellene som er bygget i dette prosjektet er det i sin helhet benyttet ustrukturert grid; **TGrid**. Bakgrunnen for valgt gridmodell er redegjort for i kap. 6.3.5. Kort fortalt viste det seg at det ikke var mulig å generere et strukturert grid i den geometriske modellen som er bygget i denne oppgaven. Det ble gjort omfattende forsøk på løsninger, men dette fungerte ikke. For å komme i mål med oppgaven ble det derfor besluttet å gå for en ustrukturert gridmodell, TGrid, noe som viste seg å være interessant mht. muligheter og potensielle problemer.

En av fordelene med et ustrukturert grid er at så å si alle typer geometri forholdsvis enkelt lar seg grille. Som gjennomgått i kap. 6.3.7 er det imidlertid en del potensielle problemer knyttet til denne gridmodellen, og modellen fører dessuten til noen flere gridceller, noe som øker beregningstiden.

Under følger en kort gjennomgang over hvordan gridet i modellene i oppgaven ble generert. Det er oppbygningen av grid i modell nr. 3 (se Figur 6-8 og Tabell 6-3) som gjennomgås. Denne modellen var delt inn i 4 hjelpevolumer; ett hovedvolum som omsluttet all geometri og monitorpunkter (viktig område), to på hver side av dette volumet, og ett volum på toppen (over disse volumene).

Arbeidsmetoden er den samme dersom det er flere eller færre hjelpevolumer. Erfaringen til undertegnede er at det er greit å starte med det viktigste område først når modellen bygges slik som dette. Dersom man bygger opp modellen med en mengde hjelpevolumer vil det være fornuftig å sjekke hvilke volumer som kan grides med det "mest" strukturerte gridet, og begynne med disse. Gridform er da "arbeidsveien"; fra strukturert mot ustrukturert.

Tabell 6-3 Oversikt over stegene i generering av grid i dette prosjektet (utgangspunktet er modell nr. 3)

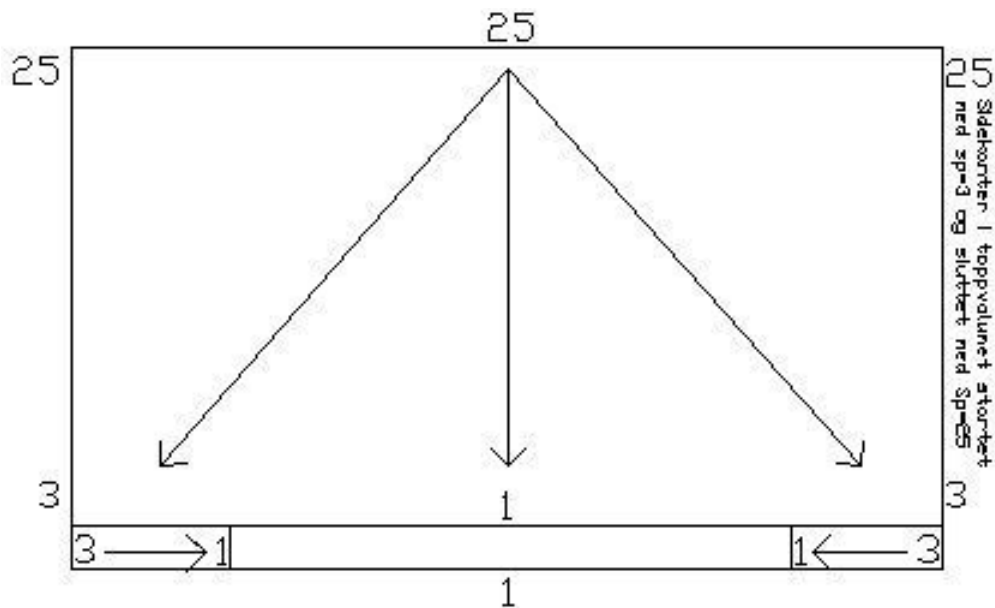
Steg	Hva ble utført	Kommandoer (Engelsk)	Kommentar
1	Grid av flater på alle bygninger. Gridstørrelse: 1 Unntatt: - Utslippspunktet: 0,25 på utslippspunkt og 0,5 på bygget forøvrig.	Mesh Faces Form: Tri → Pave Størrelse: Spacing 1	Det ble valgt å generere grid på byggene først. Bakgrunnen for dette er at det er ønske om at grid på bakken skal være tilpasset byggene, og ikke omvendt (fordi bygningsgeometrien er den mest komplekse delen).
2	Grid av bunnflate i hovedvolumet. Gridstørrelse: 1	Mesh Faces Form: Tri → Pave Størrelse: Spacing 1	Det gridet som nå genereres tilpasses gridet som er lagt på all geometri (dvs. byggene).
3	Grid av øvrige sideflater i volumet.	Mesh Faces Form: Tri → Pave Størrelse: Spacing 1	

Steg	Hva ble utført	Kommandoer (Engelsk)	Kommentar
4	Volumgrid: hovedvolumet	Mesh Volumes Form: Tet/Hybrid → TGrid Størrelse: Automatisk	Grid genereres direkte. Cellestørrelse bestemmes fra gridet som er generert på flatene (her: spacing 1).
5	Grid av ytre sideflate på nedre sidevolumer	Mesh Faces Form: Tri → Pave Størrelse: Spacing 3	Spacing 3 er valgt som en mellomting mellom grovt og fint grid, uten andre ønsker enn at gridet ikke skal bli grovt for fort i modellen.
6	Grid av sidevolumer	Mesh Volumes Form: Tet/Hybrid → TGrid Størrelse: Automatisk	Utgangspunktet for grid av disse volumene er den ene sideflatene på hovedvolumet (spacing: 1) og motstående flater, som i steg nr 5 ble gridet med spacing: 3. Volumgridet, og flategridet på øvrige flater, vil bli en blanding av spacing 1 og 3. Det er imidlertid visse problemer tilknyttet dette, som diskutert i kap. 6.3.7.
7	Grid av sidekanter i øvre volum	Mesh Edges Frist Length → 3 Intervall Count → 24/ 25	Ytre sideflater i nedre sidevolumer er gridet med spacing 3. Dette blir dermed første størrelse på gridet som legges på sidekantene i øvre volum. Det er bestemt at cellestørrelse i øvre volum kan være inntil 25 m, slik at gridet på sidekantene skal øke fra 3 m i starten til 25 på slutten. Dette gir en vekst på drøye 9% i cellestørrelse langs kantene. Intervallene er forskjellige ettersom sidekantene ikke er like høye (ca 25 m forskjell).
8	Grid av kanter på toppen av øvre volum	Mesh Edges Successive Ratio → 1 Intervall Size → 25	De øverste kantene er nå gridet med størrelse = 25 m.
9	Grid av øvre volum	Mesh Volumes Form: Tet/Hybrid → TGrid Størrelse: Automatisk	Sideflatene og volumet genereres automatisk, og det blir en fordeling av cellestørrelser grunnet vekst, som angitt i steg nr. 7 og 8.

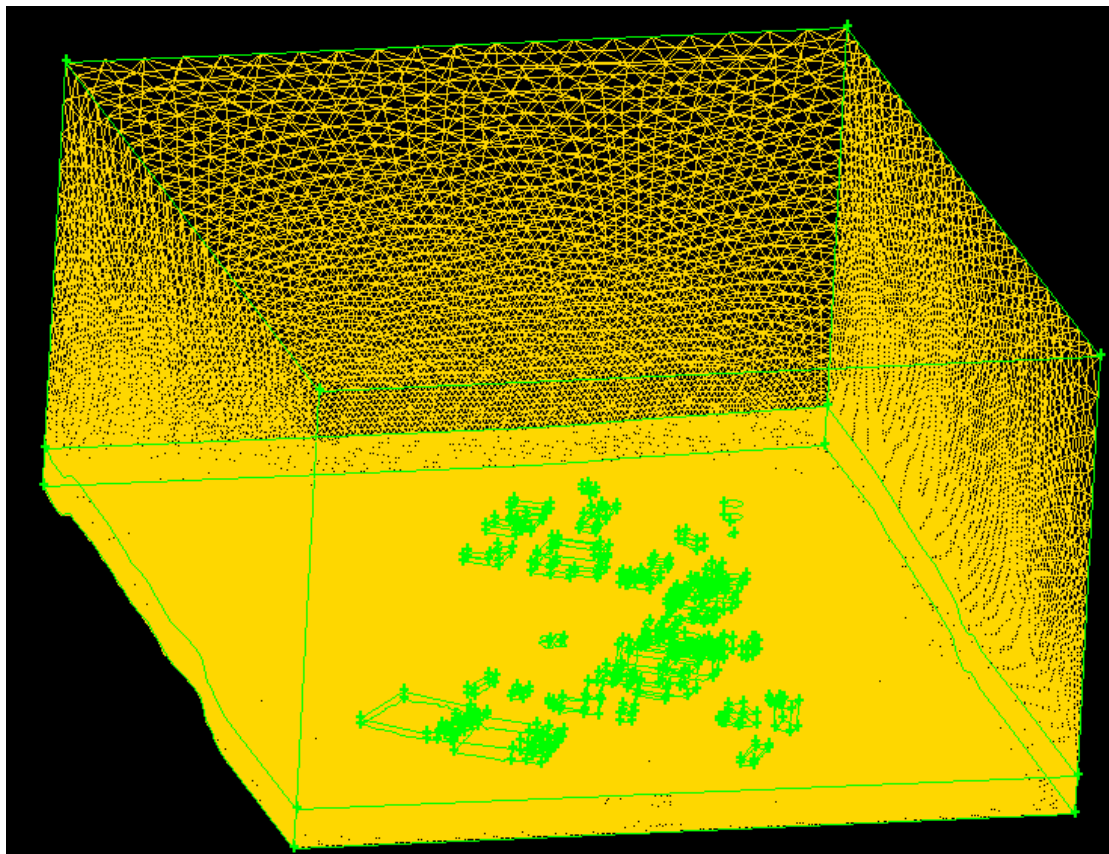
Modellen er nå ferdig gridet, og klar for de to siste stegene før modellen kan importeres i FLUENT. Disse stegene er:

1. Definerings av grenseflater
2. Eksport av grid

Grid eksporteres enkelt helt til slutt ved kommandoen: **File** → **Export** → **Mesh**. Det genereres da en msh-fil som kan importeres i FLUENT.



Figur 6-8 Skisse viser modell nr 3 (FLUENT 3), og hvilke sidekanter/flater som ble gridet (med tilhørende størrelse). Pilene viser hvilken "vei" volumcellene vokser ift. problematikken knyttet til at volumet blir fylt med så mange av de største cellene som mulig sett ift størrelse på celler som er lagt på sidekanter og flater (egenprodusert).



Figur 6-9 Viser modell 5 (FLUENT 5) som er ferdig gridet (tilsvarende som modell nr 1) (egenprodusert).

6.3.3. Definerings av grenseflater

Grenseflater angir i denne sammenheng alle flater i volumet. Dersom ikke annet angis vil interne flater med grid på hver side automatisk bli angitt slik at det blir kontinuitet over flaten ift strømning. Eksempler på slike flater er flatene som skiller hjelpevolumer fra hverandre. Andre flater vil automatisk bli angitt som "wall" (vegg) dersom ikke annet angis. Det er således to typer grenseflater, eller soner (som det kalles i FLUENT-Inc._02 (2006)):

- **Kontinuitetssoner/** -flater
- **Grensesoner/** -flater

I denne oppgaven har vi kun en type kontinuitetssone, som er fluid. Det defineres her som luft.

Når det gjelder grensesoner benyttes imidlertid flere. De som benyttes, egenskapene til disse, samt hvilke flater det gjelder i modellene, er (navn på engelsk iht. programvaren):

- **WALL:** Bunnflate og bygninger angis som dette. Til denne grenseflaten kan det angis bl.a. overflateruhet, temperaturutveksling, med mer.
- **VELOCITY_INLET:** Flatene fra nord, dvs. den retningen vinden blåser fra. Her angis vindhastigheten, eventuelle andeler av Cl₂, turbulensegenskaper, med mer.
- **OUTFLOW:** Flatene på motsatt ende av VELOCITY_INLET. Her angis kun andel av strømmingen som slippes gjennom. I oppgaven er denne andelen = 1.
- **SYMMETRY:** Sideflater og toppflaten (utover det som er definert som strømning inn og ut eller vegg). Denne grensebetingelsen angir at det ikke skjer noen endring over flaten, dvs. at gradienten er lik 0 (for egenskaper som temperatur, strømning og trykk). Det skjer ingen endring eller påvirkning i denne sonen. Dette er derfor tilfredsstillende betingelser for ytresoner som ikke har noen direkte påvirkning på det som skjer i modellen. Her er dette soner som ligger langt fra de områdene som er viktige i beregningen som skal foretas.
- **MASS_FLOW_INLET:** Utslippsflate. Her angis retningen på utslippet, mengde, strømningsrate, med mer.

NB! Grenseflatene angis i GAMBIT, mens de defineres i FLUENT.

Det kan nevnes at angivelse og definerings av grenseflatene i dette scenariet var forholdsvis greit, noe som kommer av at vindstrømmen inn i modellen kommer rett inn på en flate (direkte fra nord (y)).

6.3.4. Gridoppløsning/ cellestørrelse

Som en del av løsningen på problemstillingen i denne oppgaven er det generert en geometrisk modell som er benyttet som standard modell (kun mindre forskjell i oppdeling i hjelpevolum, se forskjell i Figur 6-1 og Figur 6-5). For å vurdere om gridoppløsningen, dvs. om cellestørrelse har stor betydning på resultatet, er det laget 3 modeller, med standard geometrisk modell, der cellestørrelsen i viktig område er forskjellig.

I Tabell 6-4 er alle modeller satt opp, og det er de tre første modellene som er generert for vurdering av cellestørrelsens betydning. To av disse modellene er generert med varierende cellestørrelse i viktig område. Det er gjort på den måten at bunnflate og toppflate i volumet som omslutter viktig område er gridet med forskjellig cellestørrelse. Volumgrid er så generert ut fra de to flatene. Cellestørrelsen baseres da på cellestørrelsen på de to flatene, og vil ikke bli større enn cellene på den flaten med størst celler. Som gjennomgått i kap. 6.3.7 søker imidlertid TGrid-modellen, som standard, å "fylle" volumet med flest mulig gridceller av den største typen (som bl.a. innebærer en brå overgang mellom cellestørrelsene).

Det ble ikke benyttet noen form for grensesjikt i modellene som er generert i denne oppgaven.

6.3.5. Generering av grid i viktig område; problem og valgt løsning

Målsetningen for generering av grid i viktig område var, som angitt i kap.5.4:

- **Cellestørrelse:** 1x1x1 m
- **Celleform:** strukturert (dvs. i utgangspunktet celler med kubisk form).

Det var i utgangspunktet ikke knyttet noe spesifikt problem til ønsket størrelse. Ønsket størrelse betydde bare at antall celler ble meget høyt, noe som henger sammen med at området som ble definert som viktig er stort (ca 25 x 322 x 600 m). På grunn av størrelsen på viktig område ble det derfor valgt å teste noen modeller med større cellestørrelse enn det som er definert som ønsket størrelse, slik at det kunne bli vurdert hvilken effekt cellestørrelsen i viktige områder har å si.

Det som imidlertid viste seg å bli et problem var målsetningen om at celleform i viktig område skulle ha en veldefinert og strukturert form. Dette har ikke latt seg gjennomføre, og det er i hovedsak to forhold som har ført til at det har vært vanskelig/ umulig å få generert et strukturert volumgrid. Disse er:

- Topografiflate med mye variasjon
- Bygningsgeometri (komplisert, sammensatt og en del unøyaktigheter)

Topografiflaten varierer vesentlig i enkelte områder. Det vil si at det rundt en bygning kan være store nivåforskjeller i bakkeplanet. Problemet som oppstår er at det ikke har vært mulig å generere et strukturert grid når det er store variasjoner rundt bygningene/ geometrien, selv om selve bygget har hatt den enkleste form (kubisk).

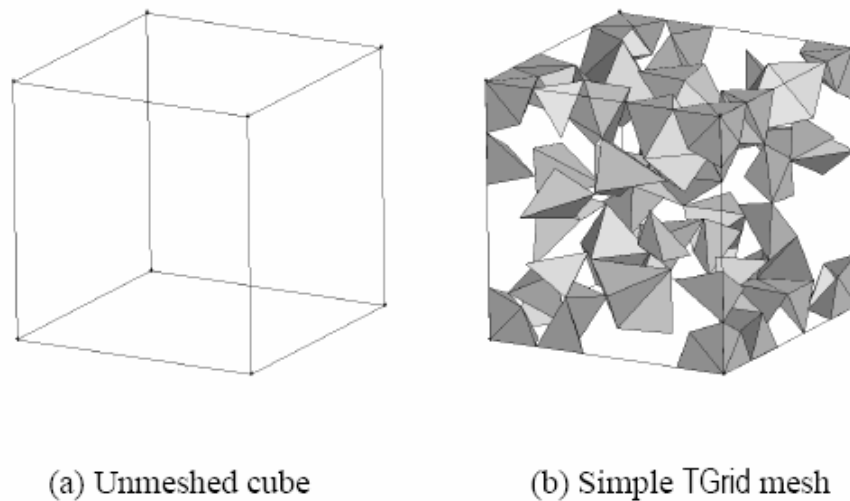
Det har vært gjort forsøk med å lage mindre hjelpevolum rundt hver enkelt bygning, for å forenkle og redusere områdene som skal grides. Dette førte delvis frem, ved at om lag 20-30 % av gridet som ble generert fikk en strukturert form.

Det som er noe av problemet knyttet til scenariet som benyttes i oppgaven er at det er stort, både i utstrekning og i mengden bygninger/ geometri. I tillegg er geometrien kompleks og sammensatt (dvs. at bygninger har store interne variasjoner, samt at flere bygninger består av flere sammensatte bygninger med stor variasjon i størrelse og form), og topografien har relativt store høydeforskjeller. Det gjør at en ekstrem oppdeling i hjelpevolumer, som er blitt skissert som en løsning av fagpersoner på FFI (dvs. oppdeling av beregningsvolumet i små volumer som ikke dekker hele bygninger, men kun deler), hadde medført en enorm arbeidsmengde, og en så stor oppgave at den ikke hadde vært gjennomførbar i dette prosjektet. Det anses også som en for arbeidskrevende operasjon i et normalt prosjekt. Det stilles også spørsmålstegn til om resultatet i det hele tatt hadde blitt tilfredsstillende.

I oppgaven ble det derfor til slutt, etter mange forsøk uten tilfredsstillende resultat, tatt en beslutning om å generere gridet med en ustrukturert form. Dette hang bl.a. sammen med at det ikke var ønske om (fra oppdragsgiver) at det skulle gjøres justeringer på det datasettet som var grunnlaget for geometri og topografi.

Endelige løsning for generering av grid ble derfor:

- **Celleform:** Ustrukturert (TGrid)
- **Hjelpevolum:** kun skilt ut viktig område



Figur 6-10 Enkel skisse som viser struktur volumgrid der TGrid er benyttet (FLUENT-Inc._02 (2006)).

Figur 6-10 illustrerer hvordan gridcellene i en ustrukturert modell (TGrid) blir seende ut. Ordet ustrukturert vurderes å passe bra, da det ser ganske kaotisk ut.

6.3.6. Vurdering av kvalitet på grid ved benyttet gridmodell - TGrid

GAMBIT angir automatisk kvalitetene på gridet etter hvert som de genereres. Kvaliteten er i denne sammenheng et mål på skjevheten i formen på hver enkelt celle (angis som "Cell Skeewness"). Dersom det genereres celler med en skjevhet som er utenfor de toleranser GAMBIT angir som tilfredsstillende, vil antall celler dette gjelder bli oppgitt. Å finne frem til disse cellene er ikke lett, og det anbefales å generere volumgridet på nytt dersom det er et stort antall slike celler. Det kan nevnes at det er mulig å rette opp slike celler i FLUENT også, men erfaringen med denne muligheten er ikke veldig god (fungerte i begrenset grad).

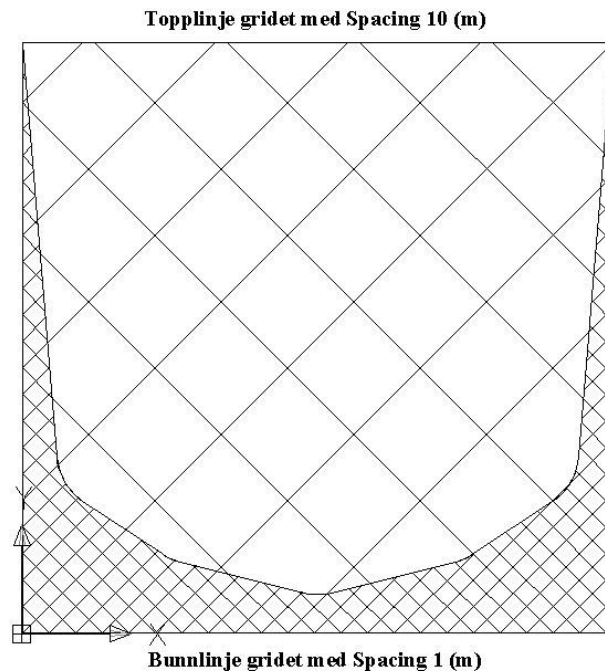
I modellene som er laget i oppgaven inneholder enkelte modeller noen slike celler. Antallet har imidlertid vært så lavt at det er valgt å benytte modellene som de er (modell 3/ FLUENT 3 har f.eks. til sammen 14,89 millioner volumceller og 15 av disse er oppgitt å ha en toleranse som ikke tilfredsstillende kravet i GAMBIT).

6.3.7. Vurdering av problem og muligheter knyttet til benyttet gridmodell - TGrid

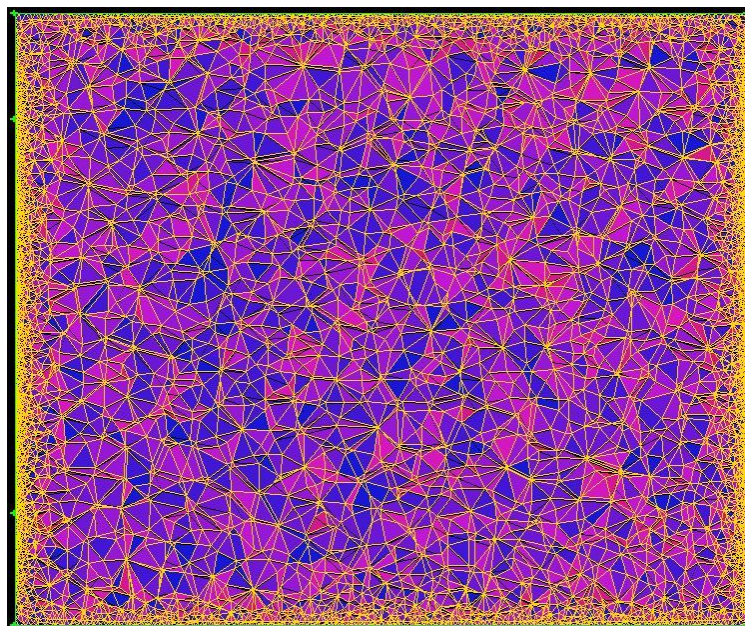
Det som ofte angis som et problem knyttet til volum-grid, som er utført med metoden TGrid, er at det kan være vanskelig/ umulig å holde kontroll på cellestørrelsen i viktige områder. Dette er ikke et problem dersom alle flater grides med lik gridstørrelse (spacing), men blir et problem dersom man grider flatene i volumet med forskjellig størrelse (slik det er gjort i enkelte av modellene som er bygget her). Bakgrunnen for dette er at denne metoden for generering av volumgrid, som standard, har vist seg å søke etter å "fylle" volumet så langt det lar seg gjøre med volumceller med tilsvarende størrelse som den flaten som har de største cellene, dvs. at et så stort område av volumet som mulig inneholder størst mulig celler. Cellene vil imidlertid aldri bli større enn cellene på den flaten som har størst celler. Det betyr at dersom en volumflate er gridet med spacing 1 m (bunnflate) og en annen med 2 m (toppflate), vil modellen forsøke å oppnå volumceller med spacing 2 i så stor del av volumet som mulig. Dette fører også til at overgangsområdet ikke blir veldig stort, dvs. området der cellestørrelsen går fra spacing 1 til 2.

Det samme skjer dersom det er ønske om å få en vekst i cellestørrelsen i et volum, og grid av kantlinjene benyttes som vekstfaktor. Et eksempel kan være at topp- og bunnlinjene i et volum grides med spacing 1 m i bunn og 10 m på topp. Sideflatene grides så automatisk ift gridet som er laget på topp- og bunnlinjen. Det som da genereres er et flategrid, som vokser jevnt og fint fra bunn til topp, med en jevn overgang mellom

gridstørrelsene (ser veldig bra og riktig ut, se Figur 6-13). Så langt er alt vel. Når volumet så skal grides, med utgangspunkt i det gridet som er generert på ytterflatene i volumet, er det en naturlig antagelse (og ønske) at volumgridet skal vokse og fordele seg like jevnt og fint som det som var tilfelle på sideflatene. Dette skjer imidlertid ikke, og volumgridet som genereres får en oppbygning som består av størst mulig celler i et så stort område som mulig, og en overgang mellom store og små celler som skjer relativt raskt. Se forøvrig Figur 6-11 og Figur 6-12 for en skisse av problematikken.

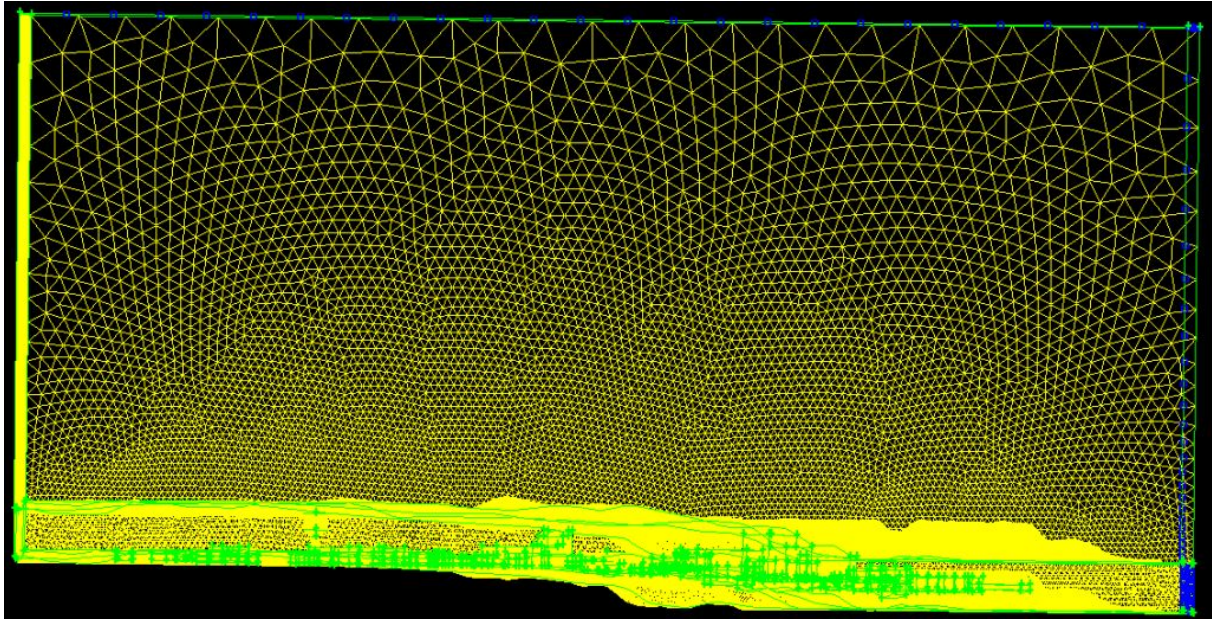


Figur 6-11 Skisse over fordeling av størrelse på volumcellene ved forhåndsgrid av topp og bunmlinje (kun en skisse, reelt vil overgangen mellom områdene være en glatt/ jevn, men brå, overgang mellom cellestørrelsene (se også fig. 6-12)) (egenprodusert)



Figur 6-12 Figur er hentet fra modell 2 (FLUENT 2) (se Tabell 6-4). Figuren viser cellestørrelse i volumet i x-planet i $z=85-90\text{m}$, og viser godt den beskrevne problemstilling tilknyttet volum-grid metoden TGrid (egenprodusert).

Dette forholdet er det meget viktig å være klar over, og det er veldig lett å bli lurt av hvordan flatene blir seende ut når de grides. Det er derfor viktig å være klar over at det ikke blir en jevn overgang, og heller ikke en jevn fordeling av celler, når volumet grides. Problematikken er ikke tilstede når det kun benyttes en fast cellestørrelse, det er kun en problemstilling ved bruk av forskjellig gridstørrelse internt i volumet på flater eller linjer. Se forøvrig Figur 6-13 for et bilde på hvordan sideflaten blir gridet i modell 2 (se Tabell 6-4). Sammen med Figur 6-12 illustreres problematikken tilknyttet volumgrid med TGrid metoden godt. Ved å se på flategridet skulle det kunne antas at volumgridet i $z=85-90$ m burde vær forholdsvis fint (modellen er 300 m høyt, og Figur 6-12 viser dermed volumgridet i området som i Figur 6-13 er gridet med liten størrelse sett ut i fra flategridet).



Figur 6-13 Er hentet fra modell 2 (FLUENT 2) (se Tabell 6-4). Figuren viser hvordan flaten blir gridet når sidekantene er gridet på forhånd. Figur 6-12 viser tverrsnitt av volumgridet i samme modell i $z=85-90$ m (dvs. omlag 1/3 av totale høyde i modellen) (egenprodusert).

Det som imidlertid kan og bør sjekkes nærmere er om dette forholdet kan utnyttes. Bakgrunnen for dette er at det gjerne er i områder rundt geometri og bakken det er størst behov for et fint grid, mens det i åpne områder (dvs. områder uten obstruksjon) gjerne kan godtas større gridceller. Dersom det kan godtas større celler i enkelte deler av volumet, kan TGrid således være en metode som kan være rask og enkel å benytte. Det bør imidlertid bl.a. ses nærmere på om overgang fra små til store celler blir for brå, eller om GAMBIT regulerer dette slik at numeriske forhold ivaretas.

I oppgaven er alle modellene bygget med TGrid volumgrid. I modell 1 og 2, se Tabell 6-4, er det benyttet forskjellig gridstørrelse på flater internt i volumet, som gjør at cellestørrelsen i viktig del av volumet er større enn det som ble satt som målsetning (kap. 5.2). Resultatene fra beregningene vurderes i kap. 8, og det er derfor interessant å se på om dette har noe vesentlig utslag på resultatene.

NB! Det kan til slutt nevnes at det fins en kommando i GAMBIT som heter ”**Size Functions**” og ligger under verktøy (”tools”). Dette er et verktøy som i utgangspunktet skal kunne løse det beskrevne problemet. Det er gjort enkelte tester på dette, men det er ikke utførlig testet. Dette verktøyet skal i utgangspunktet kunne gjøre at fordelingen/ veksten av celler blir riktigere. Tester som er utført her har imidlertid ikke ført til at det har blitt en jevnere vekst og fordeling av celler i volumområdet. Sideflatene virker imidlertid å fungere som tidligere. Verktøyet bør imidlertid ses nærmere på, da det kan være en løsning på det beskrevne problem ift. cellevekst i volumer ved bruk av TGrid.

6.3.8. Andre løsninger og muligheter knyttet til grid av modell (og modelloppbygging)

Underveis i prosessen er det notert noen mulige løsninger for å i større grad oppnå et strukturert grid. Av tidsmessige årsaker har det ikke vært mulig å teste ut disse. Mulige løsningsalternativer kan være følgende:

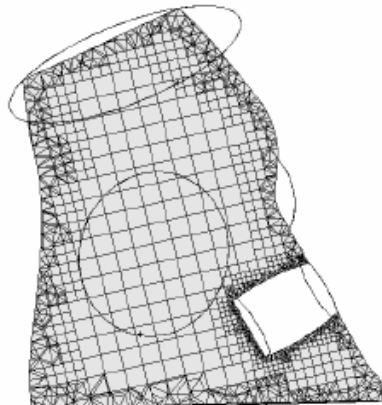
- **Forenkling av geometri:** I dette legges det at geometri forenkles i form, slik at de har rette vinkler og ikke lengre er sammensatte (dvs. at formen blir en slags middelværdi av de forskjellige delene av bygningen). Dette vurderes som en mulig løsning, da det er observert at det ved enkel bygningsgeometri er mulig å få generert et strukturert grid. Spørsmålet som imidlertid må stilles er om forenklingene som må gjøres for å oppnå dette endrer gjengivelsen av faktisk situasjon så mye at det fører til en forringelse av modellen og gjennom det også resultatene.
- **Sette geometri på plane flater** som omsluttet av små hjelpevolum: Poenget med dette forslaget er å skape en rett kant der bygningskroppen skjærer bakken, som videre gjør muligheten større for å få generert et strukturert grid. I denne oppgaven skjærer bygget topografiflaten, som grunnet variasjoner i høyde, skaper en bølgete kant der bygget skjærer bakken. En slik bølgete kant har skapt problemer, spesielt der det er store høydeforskjeller i topografien. Problemet som da virker å oppstå er at volumgridet får en form som ikke sammenfaller med det programvaren (GAMBIT), som standard, er innstilt å vurdere som en tilfredsstillende form på et strukturert grid.

Dersom bygningene/ geometrien settes på plane flater som strekker seg for eksempel 1-2 m ut fra bygningskroppen, antas det at volumgeometrien rundt hver enkelt bygning enklere vil la seg bli generert med strukturert grid. For at dette skal fungere antas det at det bør lages hjelpevolum, som har samme størrelse som den plane flaten.

Det som imidlertid kan være en utfordring er å skape en jevn overgang mellom topografiflaten og den plane flaten. Ved store høydeforskjeller kan det skapes skarpe kanter som kan ha innvirkning på turbulensgenerering med mer. Det må derfor søkes løsninger som unngår mulige feilkilder i beregningene (f.eks. jevn skråhelling på platene der det er stor høydeforskjell langs bygningskroppen).

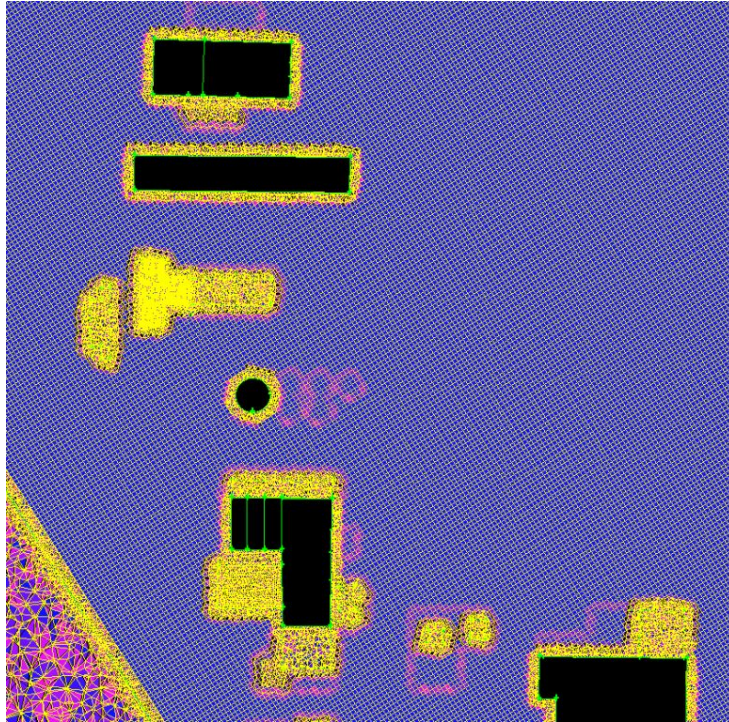
Dersom det skal gjøres beregning av områder som ligger i nærheten av arbeidsplassen, foreslås det at det foretas en befaring for å kartlegge reelle forhold. I utgangspunktet vurderes det imidlertid at en antagelse om at bakken er flat rundt bygninger/ geometri samsvarer godt med hvordan det faktisk er utført rundt de fleste bygninger. Dette innebærer også at bakken har en jevn helning der bygg ligger i skrånet terreng.

- Bruke **andre typer grid**, som er delvis strukturerte: Det fins metoder for generering av grid som benytter en blanding av strukturert og ustrukturert grid. Denne metoden heter "Hex Core" og lager et utstrukturert grid på overflatene, som går over til et strukturert grid i volumet, se Figur 6-14.

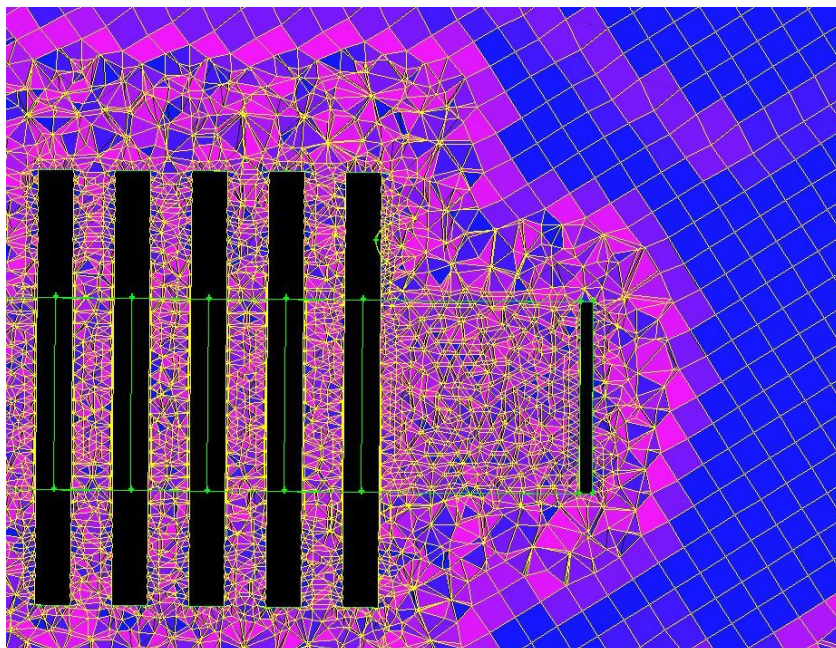


Figur 6-14 Viser "HexCore" grid, dvs. et delvis strukturert volumgrid (FLUENT-Inc. _02 (2006)).

Denne metoden er bare delvis utprøvd, og er ikke benyttet. Tester som er utført viser imidlertid interessante muligheter, og metoden bør således vurderes nærmere. Den store muligheten er at det vil være mulig å benytte færre hjelpevolumer, og med det vil både tiden til bygging av geometri og generering av grid bli kortere. Under følger to figurer som er hentet fra testene som er utført (Figur 6-15 og Figur 6-16). Som figurene viser genereres det et lag med ustrukturert grid i kantene på geometrien, mens det i det meste av volumet genereres et strukturert grid.



Figur 6-15 Viser grid generert med gridmodellen HexCore (egenprodusert).



Figur 6-16 Viser HexCore grid i område rundt geometrien der utslippet skjer (utslippet skjer øverst på tanken helt til høyre) (egenprodusert).

- **Reduksjon av viktig område:** Dette går på en vurdering av om det viktige område, dvs. det området som er spesielt viktig for beregningen (her: området som har direkte påvirkning på spredning av gass), kan reduseres. I oppgaven er viktig område vurdert å være meget stort ($B \times L = 322 \times 600 \text{ m} = 193\,200 \text{ m}^2$ ($H = 25 \text{ m}$)), noe som medfører et stort antall celler. Vurderingen vil derfor måtte gå på hvilke områder det kan godtas noe større celler, enn det som ønskes i de viktigste områdene for beregningene. Det som imidlertid er viktig i denne sammenhengen er at ikke området reduseres så mye at det fører til forringelse av resultatene.

Det anses som sannsynlig at en kombinasjon av flere av de foreslåtte alternativene vil være nødvendig for å oppnå nødvendig/ tilfredsstillende resultat ved fullstendig bruk av det scenariet som er benyttet i denne oppgaven. Det påpekes at forslagene som er angitt over er basert på den metoden, og erfaring med denne, som er benyttet av undertegnede i oppgaven for bygging av geometrisk modell og generering av grid. Andre løsninger, forslag og alternativer finnes sannsynligvis.

Det kan også nevnes at et annet forslag som vurderes som interessant til løsning på bygging av modell, er et forslag som er kommet fra Bjørn-Anders Petterson Reif ved FFI. Forslaget, slik undertegnede har forstått det, går ut på generere en flate uten geometri/ byggene, men med avtrykkene av dem (dvs. hull i topografiflaten der byggene står). Topografiflaten grides så direkte med valgt cellestørrelse, det lages så en kantlinje tilsvarende den bygningen som har den laveste takhøyden (uavhengig av hvor høyt bygget er i seg selv). Denne kantlinjen benyttes så til å dra gridet som er generert på flaten til toppen av denne kantlinjen (ved bruk av kommandoen "Sweep Face Incl Mesh" i GAMBIT). Man grider så flaten som utgjør bygningens tak, og fortsetter på samme måte til neste bygningshøyde. Til slutt er hele volumet gridet. Dette anses som en god metode der bygningskompleksiteten er lav. I komplekse geometrier, som i denne oppgaven, vurderes det at denne metoden vil bli meget vanskelig uten at det gjøres forenklinger på geometrien eller lager egne hjelpevolumer rundt kompleks geometri. Fordelen med metoden er at den kan være rask, samt at det genereres et uniformt grid. Metoden bør således være med i betraktningen ved planlegging av bygging av modell.

Scenariet benyttet i oppgaven vurderes, som følge av størrelsen og kompleksiteten, som godt ift. å vurdere og finne frem til løsninger for bygging av (kompleks) geometri og topografi, som muliggjør ønsket gridoppbygging. Metoder som fungerer i dette scenariet antas å kunne fungere også i andre scenarier som omhandler denne typen problemstillinger/ scenarier.

Det kan til slutt nevnes at GAMBIT enkelte ganger gir forslag til endring av standard innstillinger, som forslag til hvordan volumgrid, med ønsket form, kan bli generert. Problemet med dette er at det ikke alltid er like enkelt å vurdere hva endring av innstillinger faktisk gjør. Her er det derfor valgt å ikke endre standard innstillinger. Det er imidlertid gjort enkelte tester uten at det har ført frem.

Ved vurdering av modellkvalitet bør alltid foreslått modell sensitivitetstestes og/ eller valideres. Det benyttede scenariet i oppgaven fins det eksperimentelle data for (vindtunneltest), som modellene kan valideres mot. I tillegg bygges det flere modeller med forskjellig gridoppløsning for å sjekke hvilken effekt dette har.

6.4. Endelige modeller benyttet i denne oppgaven

I oppgaven består endelig løsning, dvs. løsning av problemstillingen, av tre modeller som er bygget opp etter samme prinsipp, men med forskjellig grad av gridopløsning (modell nr. 1-3). I tillegg til disse modellene ble det generert en modell uten topografiflate, som da kun har en plan bunnflate (modell nr. 4), samt at det ble laget en modell med alternativ plassering av utslippspunkt, for å vurdere valgt plassering i de andre modellene (modell nr. 5). Oversikt og nøkkelinformasjon over modellene følger i tabellen under.

Tabell 6-4 Oversikt og informasjon over endelige modeller som er generert i dette prosjektet

Modell nr*	Topografi	Geometri	Hjelpevolum	Grid-modell	Grid str i viktig område	Totalt antall gridceller	Filstr. (msh)
1 (FLUENT 1)	EMU	Fullstendig, dvs. alle bygg eksakt iht. datasettet.	Ett stk for å dele området i to i høyden (nedre volum er 25 m høyt).	TGrid i sin helhet.	Inntil 7 m	Ca 3,03 mill.	275 MB
2 (FLUENT 2)	EMU	---/---	Tre stykk. Som mod 1, men nedre volum er i tillegg delt i tre for å begrense det viktige området.	---/---	Inntil 2 m	Ca 6,8 mill.	623 MB
3 (FLUENT 3)	EMU	---/---	---/---	---/---	1 m	Ca. 14,8 mill.	1,4 GB
4 (FLUENT 4)	Flat	---/---	---/---	---/---	Inntil 2 m	Ca 9,3 mill.	862 MB
5 (FLUENT 5)	EMU (lik mod. 1)	---/--- Utslippspunktet er imidlertid endret slik at den ikke påvirkes av geometrien rett ved utslippet.	Ett stk for å dele området i to i høyden (nedre volum er 25 m høyt).	---/---	Inntil 7 m	Ca. 3,03 mill.	275 MB

* Nummer i parentes angir modellnummer, slik de blir behandlet i bl.a. kap. 6, 7, 8, 9 og 10.

Som angitt i foregående kapitler var det veldig mye arbeid, samt ”prøve og feile”, før endelige modeller var generert. Arbeidet førte tilslutt til modellene 1-5, som angitt over. Totalt antall modeller som er generert er mange ganger dette antallet.

7. BEREGNING OG VALIDERING

I dette kapittelet vil oppsett og utførelsen av simuleringen/ beregningen bli gjennomgått. I tillegg vil metodene som er benyttet for vurdering/ validering av oppnådde resultater også bli gjennomgått.

7.1. Simulering/ beregning av utslipp

Som nevnt i tidligere kapitler er FLUENT (FLUENT.6.3.26 (2006/07)) benyttet til beregning/ simulering av utslipp. Geometriske modeller som er laget i GAMBIT blir importert som gridfiler (*.msh-filer). Det videre arbeidet består så i å sette opp beregningsmodellen for det aktuelle scenariet.

FLUENT-Inc. (2006) er benyttet mye, og har vært meget nyttig ved bruk og forståelse av beregningsmodellen. Den inneholder en forholdsvis detaljert gjennomgang av alle valgmuligheter og hva de forskjellige valgene innebærer, samt eksempler og hjelp for å få satt opp beregningsmodellen riktig.

Det nevnes at oppsett av beregningsmodell, og spesielt valg av turbulensmodell og diskretiseringsnivå, er gjort med bakgrunn i angivelser fra fagpersoner på FFI. Disse forholdene er meget viktige i slike typer beregninger. Utførelse av dette er ikke en del av denne oppgaven, og er derfor heller ikke gjort. Det er således tatt utgangspunkt i de angivelser som er gitt fra FFI på disse punktene, uten at de er nærmere vurdert.

I dette scenariet har oppsett av beregningsmodell bestått i følgende oppgaver:

- Partisjonering av modell i ønskede antall deler ift. antall prosessorer som er benyttet
- Oppsett av transport av kjemisk stoff (uten reaksjon)
- Oppsett av materialer/ blanding (luft og klor)
- Oppsett av turbulensmodell
- Angivelse av gravitasjon
- Definerings av grensebetingelser ift. grenseflatene og kontinuitetssonene som er angitt i GAMBIT (se kap. 6.3.3)
- Definerings av om beregningen er tidsavhengig eller ikke (stasjonær tilstand)
- Angivelse av monitorpunkter (for registrering av klorkonsentrasjoner)
- Definerings av monitorpunkter, slik at de registrer ønsket verdi
- Angivelse av diskretiseringsnivå (1.- eller 2.ordensnivå)

Utover dette benyttes standard innstillinger. Oppsettet for dette scenariet er derfor forholdsvis enkelt, og gjøres etter hvert forholdsvis raskt.

Under følger en kort kommentar til enkelte av punktene som er angitt over:

- **Partisjonering:** For å redusere beregningstiden er det ofte et ønske om å kjøre simuleringen på flere cpu'er (prosessorer). For at dette skal fungere må modellen deles/ partisjoneres i antall partisjoner likt det antall cpu'er som skal benyttes.

I FLUENT kan dette gjøres automatisk. Den automatiske partisjoneringen har imidlertid ikke fungert, slik at dette må gjøres manuelt, noe som betyr at antall partisjoner og metode må angis.

Partisjoneringsmetoden som har vist seg å fungere i denne oppgaven er "Cartesian-Y-Coordinat". Metoden partisjonerer modellen langs y-aksen, se Figur 7-1 som viser delelinjene.

Reduksjonen i beregningstid er ikke lineær med antall cpu'er som benyttes, da det kreves noe ressurser for samhandlingen mellom partisjonene. Det vil imidlertid føre til vesentlig redusert beregningstid, og denne muligheten har vært nødvendig for gjennomføringen av oppgaven.

Det kan nevnes at den automatiske partisjoneringen, som ikke fungerte, førte til at hele simuleringen stoppet fullstendig opp. Årsaken til dette er ikke kjent, men support@fluentusers.se foreslo at det ble testet en annen partisjonering. Dette ble gjort og modellen fungerte (valg av modell ble gjort selv).

- **Material oppsett:** Det må settes opp en såkalt "mixture" (blanding). Viktige forhold tilknyttet dette er:
 - o Før oppsett av blandingen kan skje må det defineres at modellen skal beregne transport av stoffer (uten reaksjon).
 - o Blandingen inneholder sammensetningen av utslippet.
 - o Blandingen må også inneholde "hovedfluidet", her: luft, selv om det ikke er en del av utslippet.
 - o Hovedfluidet må angis til slutt i listen over stoffer, da det siste stoffet angir hovedfluidet.

NB! Det påpekes at det ved bruk av flere typer fluider (ved oppsett av "mixtures" under "Materials" i FLUENT), er viktig at luft angis som siste fluid i miksen. Det siste stoffet vil være det som automatisk settes som det det er mest av, dvs. hovedbestanddelen. Her er det et klorutslipp i luft, og luft angis derfor til slutt i listen.

- **Turbulensmodell:** Det er benyttet en standard $k-\omega$ modell. Se FLUENT-Inc. (2006) for utførlig gjennomgang av modellen.
- **Gravitasjon:** Det angis normal gravitasjon, dvs. $g_z = -9,81 \text{ m/s}^2$.
- **Grensebetingelser:** Det vises til kap. 6.3.3 for en nærmere gjennomgang av de forskjellige grenseflatene. Grensene som defineres, inkl. verdi, er:
 - o Strømning inn i systemet: vindhastighet = 5 m/s, vinkelrett på angitt grenseflate.
 - o Strømning ut av systemet: 100%
 - o Ruhet langs bakken og byggene = 0,1
 - o Utslippspunkt: vinkelrett på grenseflaten, utslippsrate = 230 kg/s med en massefraksjon klor ift luft på 0,214.

Øvrige mulige innstillinger er ikke endret ift. standard innstillinger.

Valget av konstant hastighet på innløpsflaten er gjort i samråd med oppdragsgiver, og er gjort med bakgrunn i at turbulensfeltene og strømninger lokalt vil være dominert av påvirkning fra bygninger. Det er således antatt at effekten av atmosfærisk turbulens og grensesjiktet er av mindre betydning.

- **Tidsavhengighet:** Scenariet som skal simuleres angir et utslipp som går over 900s. Beregningen utføres med beregning i tidssteg; $\Delta t = 0,1 \text{ s}$. Med en beregningsperiode på 900s betyr dette 9000 beregningssteg. Maks antall iterasjoner pr tidssteg beholdes med standard innstilling, dvs. maks 20 stk.

Eksperimentelle resultater er angitt som midlede verdier over 900s. Spredningen registreres derfor fra utslippsstart ved $t = 0\text{s}$ til stopp ved $t = 900\text{s}$, med registreringstid $\Delta t = 0,1\text{s}$. Registrerte verdier midles så over 900s. Sammenligningsgrunnlag er da oppnådd.

- **Monitorpunkter:** Det settes opp 66 monitorpunkter iht. plassering gitt i inndatasettet, som innebærer følgende:
 - o Monitorpunktene settes opp som "Point-Surface".
 - o Alle punktene defineres videre for registrering av "molar Cl_2 konsentrasjon" med registrering ift. strømningstid, som her blir hvert 0,1s.
 - o I oppgaven er punkter langs bakken hevet 25 cm (ift oppgitt 0), for å være sikker på at de ikke faller under eller i skjæring med bakken.

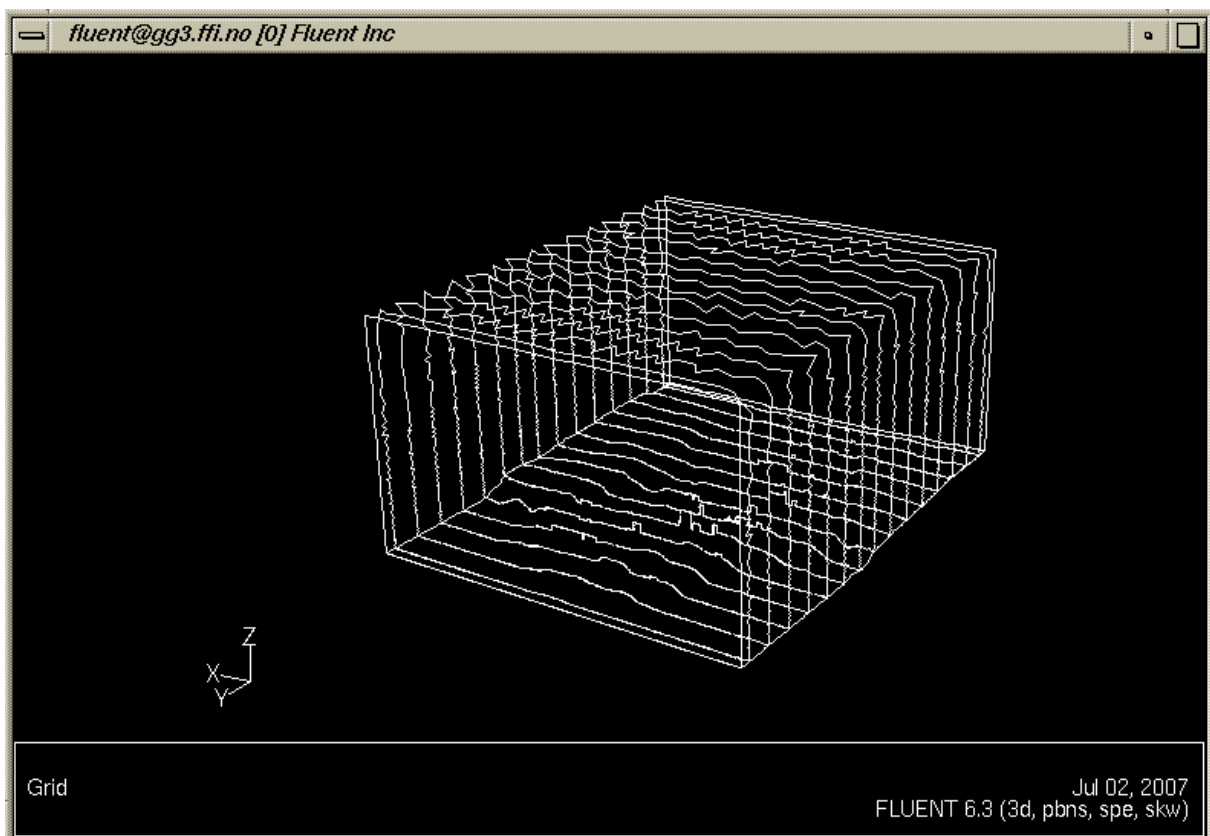
- Resultater skrives i filer for hvert punkt med angivelse av registrert verdi for gitt tidssteg.
- **Diskretisering:** For turbulent strømning angis i utgangspunktet 2.ordens diskretisering som nødvendig (FLUENT-Inc. (2006)). Det er imidlertid angitt fra FFI at turbulensfaktorene (k og ω) kan kjøres med 1.ordens diskretisering (med bakgrunn i at dette er vanlig praksis, samt at modellen i utgangspunktet er grov). Andre ordens diskretisering av turbulensstørrelser kan også gi opphav til ufsiktslige (numeriske) instabiliteter som ødelegger løsningene, ref. FFI.

For momentum og Cl_2 benyttes 2.ordens diskretisering.

I FLUENT angis forskjellen på 1.- og 2.ordens diskretisering å være bl.a. at verdiene på celleflatene ved 1.orden fastsettes gjennom antagelsen av at senterverdien i cellen antas å være lik gjennom hele cellevolumet. Ved 2.orden vil verdien på celleflaten beregnes, og blir med det mer nøyaktig.

FLUENT-Inc. (2006) angir at 2.ordens diskretisering bør benyttes for å oppnå tilfredsstillende nøyaktighet når strømmingen er turbulent og når det benyttes ustrukturert grid.

Som det følger av punktene over er oppsettet av beregningsmodellen i utgangspunktet forholdsvis enkelt. Forhold knyttet til type turbulensmodell er imidlertid noe som kan være vanskelig å avgjøre, og det bør derfor sjekkes hvilken modell som vil kunne fungere for det gitte scenariet, eventuelt at det kjøres beregninger med forskjellige modeller, for så å vurdere resultatet.



Figur 7-1 Figuren viser en partisjonert modell i 16 deler ved bruk av oppdelingsmetoden "Cartesian-Y-Coordinat" (dvs. for bruk med 16 cpu'er) (egenprodusert).

Et viktig poeng ved beregning er at løsningen konvergerer. I FLUENT er konvergenzkriteriet satt til 10^{-3} reduksjon / fall på de skalerte residualene jf. FLUENT-Inc. (2006). Dette kan være vanskelig å få til, spesielt ved modeller med store celleantall, og/ eller komplisert strømning. Det kan være flere løsninger for

å oppnå konvergens. Den overordnede løsningen som angis er å starte beregningen med en forenklet modell og lavere diskretiseringsorden. Denne strategien er benyttet i alle simuleringene i oppgaven, og består av følgende beregningssteg/ stabiliseringssteg:

1. **Stasjonær tilstand og 1.orden diskretisering uten utslipp.** Det er kun vind som strømmer gjennom modellen. Dette kjøres til konvergens oppnås.
2. **Stasjonær tilstand og 2.orden diskretisering (ikke turbulens) uten utslipp.** Det er fortsatt kun vind som strømmer gjennom modellen. Dette kjøres til konvergens oppnås.
3. **Tidsavhengig tilstand og 2.orden diskretisering (ikke turbulens) uten utslipp.** Det er fortsatt kun vind som strømmer gjennom modellen. Dette kjøres i 30-60s.
4. **Tidsavhengig tilstand og 2.orden diskretisering (ikke turbulens) med utslipp.** Dette er hovedsimuleringen og kjøres i 900 s.

Det optimale er at det oppnås konvergens i alle stegene. I steg 3 og 4 kan det hende det må kjøres noen sekunder før konvergens inntreffer. Dersom konvergens ikke oppnås i steg 1 og 2, men kjøringene er stabile, kan det være et forsøk å sette i gang en tidsavhengig beregning da det har vist seg å kunne stabilisere simuleringen, dvs. at konvergens oppnås (som er en sterk indikasjon på at strømmingen faktisk er tidsavhengig).

I tillegg til dette er det mulig å gjøre justeringer på standardinnstillingene i FLUENT for å tilpasse programmet til den gitte modellen slik at konvergens kan oppnås. Det er ikke gjort forsøk på dette i oppgaven, og det vurderes at det er behov for utførlig kjennskap til programvaren og hva eventuelle endringer faktisk betyr.

Enkelte modeller, som modell 3, var problematiske mht. konvergens. Dette er den største modellen mht. celleantall, og nettopp celleantallet vurderes å kunne være problemet, jf. FLUENT-Inc. (2006). Det er mulig at steg 1 og 2 skulle vært kjørt lengre, dvs. flere iterasjoner/ gjennomregninger, men disse ble stoppet når det var en viss stabilitet i modellen. Dette er en (sterk) indikasjon på at strømmingen faktisk er tidsavhengig og at det ikke finnes en (entydig) stasjonær løsning. Eventuelt skyldes det svakheter i modellen. Resultatene er uansett tatt med i vurderingen av de bygde modellene for å kunne se på forskjeller (da de anses å komme frem uavhengig av dette). Resultatene er derfor vurdert uavhengig av dette forholdet.

7.1.1. Automatiserte oppgaver

I både GAMBIT og FLUENT kan automatiserte oppgaver, såkalt journaler, benyttes. Dette er i liten grad brukt i oppgaven, men er benyttet ved innlegging og definering av monitorpunktene. Dette kan gjøres manuelt, men tar veldig lang tid pga. antall punkter.

En journal i FLUENT genereres ved å "ta opp" det som skrives av kommandoer i programmet (viktig poeng at det kun er kommandoer som skrives som "tas opp"). Under følger korte utdrag/ eksempler på journalene som er laget og brukt i denne oppgaven.

Eksempel på journal for innlegging av monitorpunkter:

```
surface  
point-surface mon-001 4580 3680 18.75  
point-surface mon-002 4610 3680 18.45  
point-surface mon-003 4630 3680 20.05  
point-surface mon-004 4650 3680 20.05  
osv.
```

Eksempel på journal for definering av et monitorpunkter:

```
solve monitors surface  
set-monitor mon-001 "Flow Rate"  
concentration-cl2  
mon-001
```

```
yes  
"mon-001.out"
```

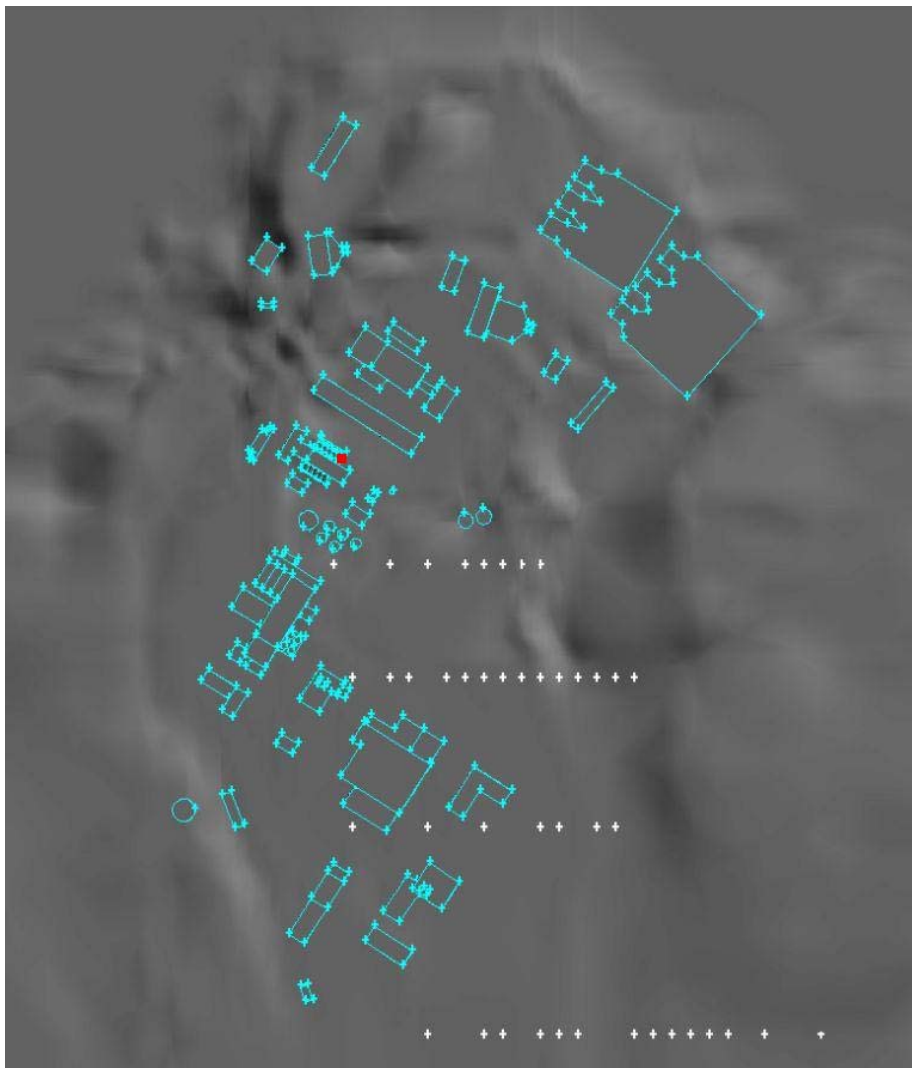
```
yes
```

```
flow-time
```

Monitor nr. 001 er nå definert ift. hva som skal registreres og når det skal registreres.

Det nevnes at journaler kan genereres (kopieres ut) i GAMBIT fra registrerte oppgaver som er utført. Dette kan være veldig interessant ift. å få generert geometri og grid gjennom journaler, noe som vil bety en meget effektiv bruk av tiden.

Journalene som er benyttet her (i FLUENT) har ført til vesentlig tidsbesparelse i oppsettet av beregningsmodellen.



Figur 7-2 Hvite punkter angir plassering av monitorpunkter. Se for øvrig Figur 6-4 som, litt bedre, viser hvordan punktene er plassert. Rødt punkt angir utslippspunkt (egenproduisert).

7.1.2. Simuleringstid

Simulering av denne typen, med dette antall celler, tar lang tid. Det som imidlertid er greit er at det kun tar maskinkapasitet i denne tiden, og ikke arbeidstid. Maskinkapasiteten kan ikke bli for stor, men vil være en begrensende faktor da den er kostnadsdrivende. Tabell 7-1 viser simuleringstiden for hver modell i denne oppgaven.

Tabell 7-1 Oversikt over simuleringstid ift antall gridceller og antall CPU'er

Modell nr	Antall gridceller	Antall CPU	Ca. total simuleringstid for 900 sekunder (cpu timer)*	Stabilitetskjøringer
1 (010)	Ca 3,03 mill.	20	72 timer (1440 t)	2 stk (hhv): - "Steady-state"; 1.- og 2.ordens Så tidsavhengig med direkte utslipp
2 (014)	Ca 6,8 mill.	18	144 timer (2592 t)	3 stk (hhv): - "Steady-state"; 1.- og 2.ordens - Tidsavhengig: 30-60 sek uten utslipp før utslippsberegning
3 (17_02)	Ca. 14,9 mill.	15	480 timer (7200 t)	---//---
4 (18)	Ca 9,3 mill.	20	300 timer (6000 t)	---//---
5 (10_02)	Ca. 3,03 mill.	15	72 timer (1440 t)	---//---

* Angitt tid er kun tid for beregning av utslipp i 15 minutter (900 sekunder). I tillegg til denne tiden kommer tid til stabilitetskjøringene (ca. 10 – 20 % av angitt tid).

I utgangspunktet vurderes det at det ikke er bra for fremdriften i et prosjekt at simuleringstiden er for lang. Det avhenger selvfølgelig av prosjektets art og lengde, og vurderes dessuten å kunne være noe forskjellig sett ift. om det er et forskningsprosjekt eller et engineering-prosjekt (der tid og kostnad som oftest er et essensielt tema).

Et bilde på omfanget av en simulering kan gis gjennom å se nærmere på f.eks. modell nr. 3. Her er det ca. 14,9 millioner gridceller. Den totale simuleringprosessen har innbefattet totalt ca. $2,4 \times 10^{12}$ beregninger (antall celler x antall iterasjoner x antall ligningssett). Dette sier noe om omfanget av simuleringene, samt hvilken betydning celleantallet har.

Med bakgrunn i dette vil et naturlig mål for enhver simulering være å kunne lage en modell med færrest mulig celler, og enklest mulig geometri, slik at simuleringstiden kan reduseres. Dette må imidlertid ikke komme på kant med kravet til kvalitet i resultatene. I denne forbindelse nevnes det igjen at et strukturert grid vil kunne danne færre gridceller, samt en enklere struktur beregningsmessig, enn et utstrukturert grid.

7.2. Metode for vurdering av resultat (validering)

Vurdering av resultatene fra de simuleringene som gjøres i denne oppgaven, gjøres gjennom å validere dem mot resultatene fra eksperimentelle forsøk (vindtunneltest). Dette vil gi et bilde av kvaliteten på modellene som er laget, og ytterligere vurdering er i utgangspunktet ikke nødvendig for løsning av problemstillingen i oppgaven. Det vil imidlertid bli gjort noen kvalitative vurderinger og betraktninger omkring de oppnådde resultatene. Vurdering av resultatene vil med dette bestå av følgende elementer:

- Validering av resultater basert på statistiske metoder (også mot tidligere forsøk)
- Vurdering og sammenligning av resultater (plott, etc.)

Vurderingene baserer seg videre på resultater i form av:

- Tidsmessige gjennomsnittsverdier
- Maksverdier langs monitorradene

Valideringen skjer kun ift. tidsmessige gjennomsnittsverdier.

7.2.1. Validering av resultater

Validering av resultatene, som oppnås gjennom simulering i FLUENT, har som hovedmål å vurdere om modellen er av samme kvalitet som det eksperimentelle forsøket som referansedataene er hentet fra (vindtunneltest). I dette ligger det bl.a. en vurdering av om modellen predikerer for høyt eller for lavt.

Metodene som benyttes for valideringen er bestemt av FFI, og redegjøres for i de kommende kapitlene.

7.2.1.1. Metode for statistisk validering av resultater

Metodene som benyttes for validering følger det som beskrives av bl.a. Jagger, Carissimo and Daish (1998), for måling av statistisk ytelse. I denne oppgaven benyttes tre metoder, som beskrives som robuste og brukbare for de fleste datasett (også dersom det er nullverdier i datasettet). Dette er:

- Mean relative bias (**MRB**)
- Mean relative square error (**MRSE**)
- Factor of 2 (**FA2**)

I tillegg til disse metodene (som vil bli kort gjennomgått lenger ned i kapitlet) vil det også være nødvendig med en vurdering av eventuelle nullverdier, eller tilnærmet nullverdier (dette går også gjennom lenger ned).

Disse tre metodene vil i sin helhet benyttes til å validere resultater som oppnås gjennom de forskjellige simuleringene. Metodene tar utgangspunkt i tidsmessige gjennomsnittsverdier for hvert monitorpunkt.

Resultatet fra selve valideringen er presentert i kap. 8.3

7.2.1.1.1. Beskrivelse av metode MRB og MRSE

For vurdering av om modellen over- eller underpredikerer samt om den følger samme trend som referansedataene, benyttes metodene MRB og MRSE. Ved å plote disse verdiene mot hverandre får man opp ett punkt (eventuelt flere om datasettet deles opp), som forteller noe om kvaliteten til modellen eller deler av modellen.

MRB og MRSE beregnes ved bruk av henholdsvis [Lign. 8] og [Lign. 9]. Verdien beregnes fra middelverdi (her normalisert middel Cl_2 konsentrasjon over utslippsperioden) i hvert monitorpunkt. Det midles så over

beregnet middelværdi for alle punktene, slik at en verdi oppnås for hhv. MRB og MRSE, som representerer hele modellen. Når disse verdiene plottes mot hverandre vil kvaliteten på modellen illustreres. Det kan imidlertid være interessant å se nærmere på kun deler av modellen (her deler av monitorpunktene, f.eks. én og en rad) for å vurdere enkeltdelels påvirkning på modellen. Dersom datasette splittes er det imidlertid viktig å være oppmerksom på at det er en viss risiko for at utvalget blir for lite til å oppnå en pålitelig statistikk.

MRB og MRSE er gitt ved følgende:

[Lign. 8]
$$MRB = 2 \left(\frac{C_p - C_o}{C_p + C_o} \right)$$

[Lign. 9]
$$MRSE = 4 \left(\frac{C_p - C_o}{C_p + C_o} \right)^2$$

C_p : Predikert konsentrasjons verdi

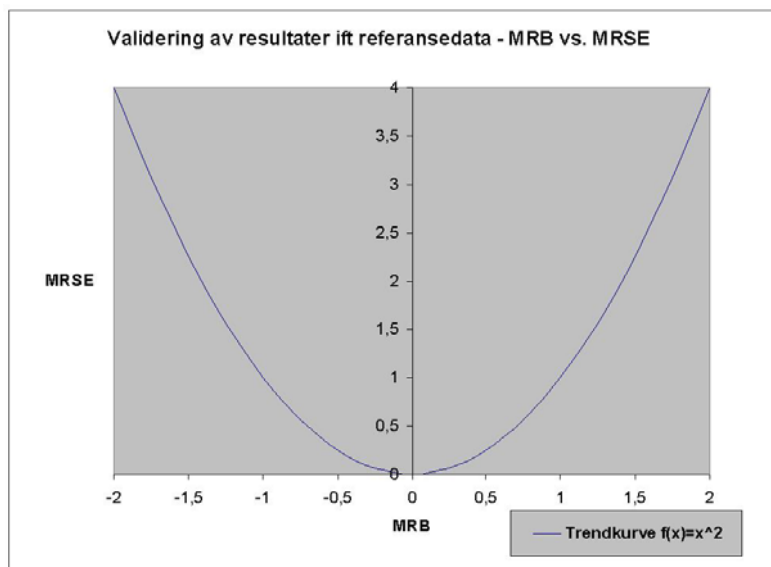
C_o : Observert konsentrasjons verdi

$\overline{(\dots)}$: Overstrek betyr middelværdi (midling over alle monitorpunktene)

MRB angir graden av over-/ underprediksjon. Modellen underpredikerer dersom beregnet MRB-verdi er negativ, og overpredikerer dersom den er positiv.

MRSE angir om modellen følger samme trend som referansedataene (og er nært knyttet til graden av over-/ underprediksjonen).

Verdiene MRB og MRSE plottes mot en standard annengradskurve ($f(x) = x^2$), se Figur 7-3. Oppnådde resultater følger samme trend som resultater i referansedataene dersom punktet faller på/ i nærheten av parabelen. Resultatene kan således over-/ underprediktere vesentlig, men fortsatt følge samme trend som referansedataene (dvs. at kvaliteten kan vurderes som tilfredsstillende). Modellen er ”perfekt” dersom MRB og MRSE begge gir verdien 0.



Figur 7-3 Koordinatsystemet MRB og MRSE plottes i (verdier faller innenfor parabelen) (egenprodusert).

Dersom plottets verdi avviker vesentlig fra parabelen må modellen kunne sies å ikke gjengi referansedataene tilfredsstillende (som her er hentet fra et eksperimentelt forsøk), dvs. at resultatene er tilfeldige/ vilkårlige ift. referansedataene. Det kan være flere årsaker til dette, som ikke nødvendigvis gjør at modellen som er bygget er feil, men det sier noe om at det er forhold som ikke stemmer mellom dem. Eventuelle kilder til feil/ avvik må derfor vurderes, og helst underbygges ved forsøk (for å se om antagelsene stemmer).

Bruk av metodene kan ikke benyttes helt blindt, som angitt av Chang and Hanna (2003). Det kan være vanskelig å lese den fullstendige kvaliteten av plottet, og det angis at illustrative plott av for eksempel hver enkelt monitorrad vil kunne avsløre eventuelle vesentlige feil/ likheter på en måte som valideringsmetoden ikke greier. Dette må derfor gjøres.

I denne oppgaven vil kilder til eventuelle feil og avvik kun vurderes kvalitativt, med eventuelle videre forslag til tester som kan gjøres for å vurdere antagelsene.

7.2.1.1.2. Beskrivelse av metode FA2

Faktor 2, FA2, er en metode for å vurdere om predikterte resultater fra simuleringene ligger innenfor en faktor 2 av referansedataene. Chang and Hanna (2003) konkluderer med at modeller som har ”god” ytelse har en FA2 innenfor omkring 50 %. Det nevnes at FFI vurderer god ytelse som noe høyere, dvs. FA2 innenfor omlag 60-70% av referansedata.

FA2 for prediktert resultat ligger inne for en FA2 for referansedata dersom følgende er ivarettatt:

$$[\text{Lign. 10}] \quad FA2 : (C_p > 0,5 \times C_o) \text{ og } (C_p < 2 \times C_o)$$

C_p : Prediktert konsentrasjons verdi

C_o : Observert konsentrasjons verdi

Resultatet gis som en 0 eller 1 verdi for hvert monitorpunkt, der verdien 1 angir at den predikterte verdien ligger innenfor en Faktor 2 av referansedataene. En summering av resultatet fra alle monitorpunkter vil gi en verdi mellom 0 og 1 (dvs. mellom 0 og 100 %), der 1,0 er best mulig.

7.2.1.1.3. Vurdering og behandling av terskelverdier og nullverdier

Et problem tilknyttet måling av statistisk ytelse til de gitte modellene er verdiene som registreres i ytterkanten av skyen, dvs. verdier som er null eller tilnærmet null. Disse verdiene er naturligvis viktige, og vil inneholde viktig informasjon i en vurdering av spredningsfare, utbredelse, mm., men vil kunne skape problemer i en måling av statistisk ytelse, som angitt av Jagger, Carissimo and Daish (1998).

Et problem som nevnes er at vurderingen kan bli dominert, eller meget preget, av målepunkter i ytterkant av skyen som har tilnærmet null- eller nullverdier. At det er variasjon i registrerte konsentrasjoner i randsonen til skyen mellom modellene, og mellom modeller og eksperimentelle forsøk, betyr ikke at modellene er dårlige. Variasjon i dette område skjer naturlig, og verdier i sonen vil alltid være forbundet med en viss usikkerhet. Pga. dette samt at verdiene kan ha stor betydning på totalvurderingen av resultatet, uten at de reelt sett har det, gjør at lave verdier behandles særskilt.

Det angis flere måter å behandle denne problemstillingen på. En måte er å utelate alle slike verdier, noe som imidlertid anses som uheldig. Den mest vanlige og enkleste måten å behandle denne problemstillingen på angis imidlertid å være en grensejustering av disse punktene ved å innføre en ”terskelverdi” (”threshold”) for alle observerte og predikterte data, som en nedre verdi. Det betyr at det settes en nedre verdi et målepunkt kan ha. Dersom registret verdi i målepunktet er under denne terskelbetingelsen vil terskelverdien benyttes i stedet.

Metoden som i utgangspunktet er å anbefale for fastsettelse av terskelverdien, er å sette den laveste sensitiviteten i måleutstyret som terskelverdi. Eventuelt kan nullverdien i utstyret før gassen kommer frem benyttes. I denne oppgaven har imidlertid ikke slike data vært tilgjengelig, og annen metode for å sette terskelbetingelse er nødvendig.

I referansescenariet som er benyttet i oppgaven har Jagger, Carissimo and Daish (1998) angitt terskelverdi som skal benyttes for alle data som inneholder definerte nullverdier, dvs. der referanseverdi eller predikert verdi er lavere enn den gitte terskelverdien ($C_o, C_p < C_g$). Vurderingen som er gjort i nevnte referanse ble gjort ifm. SMEDIS prosjektet. Dette var et EU finansiert prosjekt som ble gjennomført på 1990-tallet, der bl.a. EMU ble benyttet som et scenario (som tidligere nevnt).

Fastsettelse av C_g kan gjøres på flere måter. Ettersom Jagger, Carissimo and Daish (1998) ga innspill til grensebetingelse for SMEDIS, som også benyttet EMU som et av scenariene som ble vurdert, benyttes samme terskelverdi i denne oppgaven.

Her velges derfor $C_g = 0,001$.

NB! I motsetning til det som er nevnt over har Carissimo, Jagger, Daish et al. (2001) angitt at valideringsmetoden som benyttes i utgangspunktet ikke trenger spesiell behandling av nullverdier, dersom det ikke er nullverdier i både referanseverdi og predikert verdi. Bakgrunnen for dette er bl.a. at metoden som benyttes takler nullverdier, og det vurderes således at det ikke er nødvendig med egne terskelbetingelser for dette.

Det er dermed to noe sprikende konklusjoner på behandlingen av nullverdier. Med bakgrunn i konklusjonene fra de to refererte rapportene vil de resultater som oppnås derfor bli vurdert både med og uten bruk av terskel-/ grenseverdier.

7.2.1.2. Normalisering av resultater ift eksperimentelle data

Referansedataene som benyttes til validering av resultatene fra simuleringene er normalisert ift skalering av modell, samt at de gjennom denne normaliseringen blir dimensjonsløse.

Normaliseringen er nødvendig da referansedataene stammer fra et skalert vindtunneleksperiment. Modellene i vindtunnelen er bygget og utført i en skala på 1:250. Modellene som er generert for bruk i FLUENT er 1:1 (fullskala). En normalisering er derfor nødvendig for at resultatene skal være sammenlignbare (dvs. på samme form).

Metoden som benyttes for normalisering av resultatene er angitt bl.a. i Cowan (1996). Normaliseringsmetoden som benyttes er gitt av:

[Lign. 11]
$$\frac{C'}{C^*} = \text{normalisert dimensjonsløs verdi av det gitte resultatet}$$

C' : målt middelverdi for gitt periode (volum; molar - mol/dm³)

C^* : normaliseringsprodukt for modellens skala

For å løse dette følger videre beregning av C^* , som er fast for den aktuelle modellen (basert på modellens skala).

[Lign. 12]
$$C^* = \frac{C_s \times Q_s}{U_h \times H^2} [g / dm^3]$$

- C_s:** Kilde-/ utslippskonsentrasjon (massefraksjon Cl²)
Q_s: Utslippsrate (kg/s totalt utslipp)
U_h: Vindhastighet i gjennomsnittlig bygningshøyde (ift modellens skala)
H: Gjennomsnittlig bygningshøyde (ift modellens skala)

Som følge av at C* fra [Lign. 12] er angitt i masse/volum, og C' er angitt i molar, må C* også regnes om til molar størrelse. Dette gjøres ved å dividere resultat fra [Lign. 12] med mol-vekten til klor, Cl₂ (g/mol).

Når dette er utført er verdien normalisert ift modellens skala, og med det sammenlignbar mot referansedataene. Denne øvelsen gjøres for gjennomsnittsverdien for hvert monitorpunkt.

7.2.2. Øvrig vurdering av resultater fra modellene som er laget

Vurderingen av resultatene for bestemmelse av modellenes kvalitet, følger i hovedsak kun av valideringsprosessen. Som Chang and Hanna (2003) angir er det imidlertid viktig, og nødvendig, å gjennomføre en resultatanalyse på enkelt nivå, der hvert monitorpunkt vurderes mot hverandre for å se forskjeller. Denne vurderingen innebærer plott av predikerte verdier fra de forskjellige modellene mot referansedataene, og vurdering og sammenligning av disse. Dette gjøres helt i starten av resultatgjennomgangen, og anses som en helt nødvendig øvelse.

Chang and Hanna (2003) anser en slik øvelse som helt nødvendig og veldig verdifull for å få en forståelse av resultatene. I dette ligger det at statistiske metoder ikke nødvendigvis får frem det hele og fulle bilde av situasjonen (som nevnt over).

8. RESULTAT

8.1. Introduksjon – resultater fra simuleringene

Med resultater menes i denne sammenhengen resultater som er kommet gjennom simulering/ beregning av spredning i FLUENT. Resultatene fra disse simuleringene er en verdi for klor (Cl_2) konsentrasjonen (pr volum - molarkonsentrasjon) i de gitte monitorpunktene.

Som angitt i kap. 5 skal metodene valideres mot eksperimentelle data (**EMU**) for å vurdere kvaliteten. I denne sammenhengen må resultatene også etterbehandles for å komme på riktig form ift. de metodene som benyttes. Dette er en normaliseringsprosess, som er gjennomgått i kap. 7.2, som gjøres for å normalisere resultatene ift. modellens skala. I tillegg gjøres det også en validering av grensejusterte data (se kap. 7.2 for forklaring av metode).

Følgende sammenligninger gjøres av resultatene:

- Radvis sammenligning av middel Cl_2 verdi
- Maks Cl_2 verdi pr rad.

Som valideringsmetode benyttes følgende metoder:

- Plott av MRB vs. MRSE
- Faktor 2 (Fa2)

Sammenligningen vil vise hvordan hvert monitorpunkt i modellene ligger an ift vindtunnelresultatene. Valideringsmetodene vil imidlertid være det kvantitative kvalitetsmålet for modellene.

I tillegg til dette vil det bli gjort en sammenligning av oppnådde validerte data opp mot resultatet fra en rekke andre modeller som har benyttet akkurat det samme scenariet. Her vil programvaren bli holdt anonym, og sammenligningen er kun ment som en ytterligere vurdering av oppnådde resultater.

8.1.1. Oversikt over modeller og målepunkter (monitorpunkter)

Det er laget 5 geometriske modeller, som angitt i kap. 6, som alle er beregnet i FLUENT. Tabell 8-1 gir en kort oppsummering av modellene.

Tabell 8-1 Oppsummert oversikt over modeller benyttet i oppgaven.

Modell nr	Topografi	Antall gridceller	Antall CPU	Ca. total simuleringstid
1 (FLUENT 1)	EMU	Ca 3,03 mill.	20	72 timer
2 (FLUENT 2)	EMU	Ca 6,8 mill.	18	144 timer
3 (FLUENT 3)	EMU	Ca. 14,9 mill.	15	480 timer
4 (FLUENT 4)	FLAT	Ca 9,3 mill.	20	300 timer
5 (FLUENT 5)	EMU	Ca. 3,03 mill.	15	72 timer

Som det fremkommer av tabellen er antall gridceller vesentlig forskjellig, noe som følger av gridcellenes oppløsning i de enkelte modellene (volumgeometrien er lik i alle modellene). Effekten av gridcellestørrelsen vil bli vurdert. I presentasjonen videre i kapittelet tilsvare modell nr 1 FLUENT 1, osv.

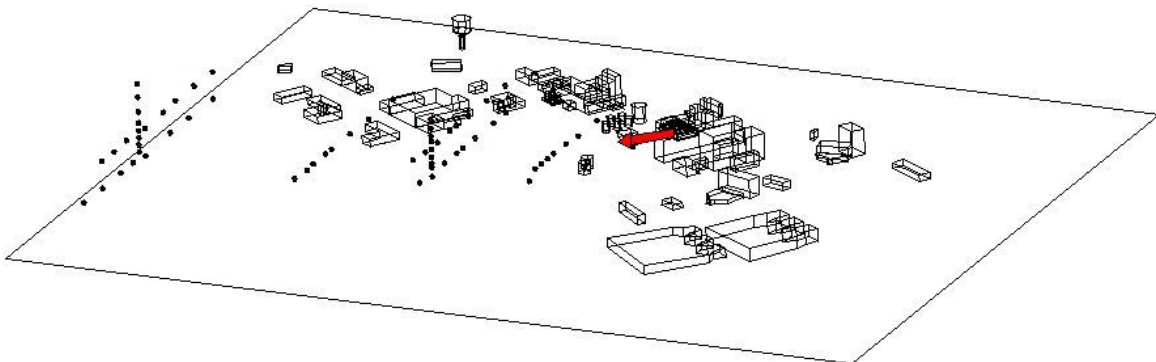
Registrering av Cl_2 konsentrasjon i modellene gjøres gjennom forhåndsdefinerte monitorpunkter. Som det fremkommer av Tabell 8-2 og Figur 8-1 er monitorpunktene plassert i 6 horisontale rader samt to vertikale kolonner (vertikaler). I sammenligningen av resultatene vil hver enkelt rad/ vertikal ses på separat. I valideringen ses imidlertid hele systemet under ett.

Tabell 8-2 oversikt over plassering av rader/ vertikaler ift utslippunkt.

Rad #	Navn	Plassering ift utslipp*		Bredde/ høyde (m)
		Y (m)	Z (m)	
1	Rad 1	55	0,25	25,9
2	Rad 2.1	110	0,25	36,7
3	Rad 2.2	110	18,8	24
4	Rad 3	195	0,25	37,7
5	Rad 4.1	300	0,25	39,8
6	Rad 4.2	300	18,8	32,9
7	Vert. 2.3	110	6,3 til 39	32,7
8	Vert. 4.3	300	4 til 51	47

* Y retning blir således nedstrømsutslippet (slik modellene er bygget i oppgaven).

Avstanden mellom monitorpunktene varierer en del, fra 10 m til 25 m. Hvert monitorpunkt vil havne innenfor en gitt gridcelle, og den registrerte konsentrasjonsverdien i et gitt monitorpunkt vil dermed gjenspeile konsentrasjonen i den gitte gridcellen. Forskjellen mellom det fineste og grøvste gridet i spredningsområdet er 1 m vs. 7 m, og ift. avstanden mellom monitorpunktene kan antall gridceller mellom hvert punkt variere en del mellom modellene som er generert. Grove grid vil dessuten ha en dempende effekt på turbulensen (spesielt i områder der det naturlig er mye turbulens), som vil føre til en mindre utbredelse/ spredning (samt mindre endringer mellom monitorpunktene).



Figur 8-1 Enkel skisse som viser monitorrader og vertikaler (egenprodusert).

I gjennomgang av resultater videre i kapittelet refereres det til modell nr ift. de modeller som er laget og beregnet i oppgaven. Resultater fra vindtunneltester presenteres som **EMU**.

8.2. Resultat fra modelleringene

I de neste kapitlene presenteres resultatene i oppgaven. Det vil bli gjort fortløpende kommentarer og vurderinger knyttet til det som presenteres.

8.2.1. Resultater – Normaliserte konsentrasjonsverdier pr monitor rad/ vertikal

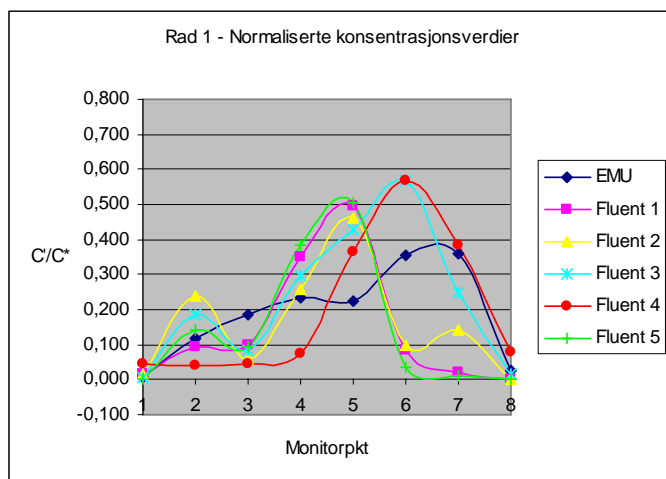
Under følger en presentasjon av normaliserte Cl_2 verdier pr. rad/ vertikal. Plott av resultater fra rader som er plassert på samme sted (x og y), men i forskjellige høyder, plasseres under hverandre for enklere illustrasjon av eventuelle forskjeller som følger av høyden punktene er plassert i.

Som nevnt tidligere er det spesielt interessant å se hvordan resultatene fra modell 1, 2 og 3 (FLUENT 1, 2, og 5) korresponderer med hverandre og med EMU. Bakgrunnen for dette er at disse modellene er identiske, bortsett fra cellestørrelsen i viktig område. Mens FLUENT 1 har minste cellestørrelse lik 3 og største lik 7, har FLUENT 2 minste cellestørrelse lik 1 og største lik 2. FLUENT 3 har en cellestørrelse lik 1 i hele det viktige området. FLUENT 5 er som kjent tilsvarende FLUENT 1, men med et justert utslippspunkt. FLUENT 4 er lik FLUENT 3, men med en plan overflate.

Det vil også være interessant å se hvor maks konsentrasjon i skyen/ plumen registreres, og hvordan dette korresponderer mellom modellene og EMU resultater. Dersom det er stor forskjell mellom to tilliggende monitorpunkter i en modell med grovt grid, mens forskjellen er mindre i en modell med fint grid, kan det tyde på at cellestørrelsen har en innvirkning på utbredelsen av skyen/ plumen.

Det nevnes at monitor punkt nr 1 ligger nærmest rett nedstrøm (ift. vindretningen) av utslippspunktet, og er det punktet som ligger nærmest dette området i hver rad. Monitorpunkt 8 og 9 er de punktene som ligger mest på tvers av vindretningen (mest på tvers nedstrømsutslippet). Det påpekes at nedstrømsretning her er ift. vindretning.

Plott av normaliserte middel Cl_2 konsentrasjonsverdier pr. monitor rad/ vertikal



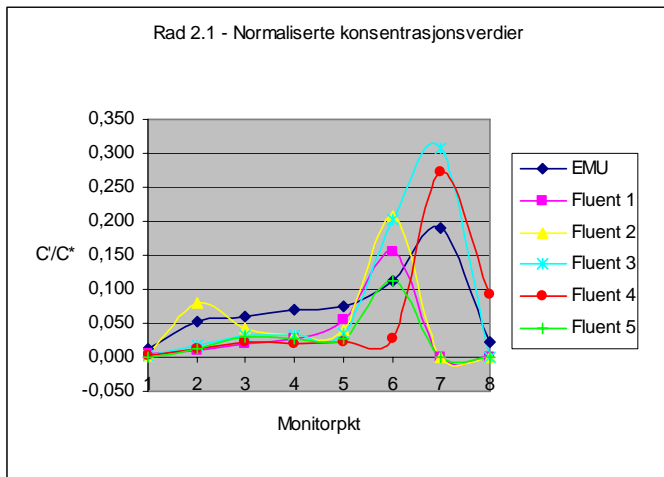
Kommentar til rad 1:

Plassering: Y = 55m, Z = 0,25m, lengde på rad = 25,9m

FLUENT 1, 2 og 5 (modell 1, 2 og 5) er relativt like, mens FLUENT 3 og 4 skiller seg ut. Alle modellene korresponderer relativt godt med EMU resultater i ytterkantene, men er vesentlig forskjellige mellom. FLUENT 3 vurderes å gi best korrespondanse med EMU.

Største målte konsentrasjon korresponderer rent plasseringsmessig godt mellom FLUENT 3, 4 og EMU.

Utslipet har som kjent en retning ift. vindretningen på $\sim 45^\circ$ (vinden kommer fra nord mot sør, og utslippet har en retning rett sør-øst). Monitor punkt 1 ligger nesten rett nedstrøms (ift. vindretning) utslippet. Det er i den forbindelse interessant å se at FLUENT 4, dvs. den flate modellen, ikke har stor spredning rett nedstrøms, og avviker forholdsvis vesentlig fra øvrige modeller. Mulig årsak kan være at ledning av utslipp langs bakken skjer annerledes i en topografimodell, samt at økt turbulens vil kunne føre til økt spredningsområde.



Kommentar til rad 2.1:

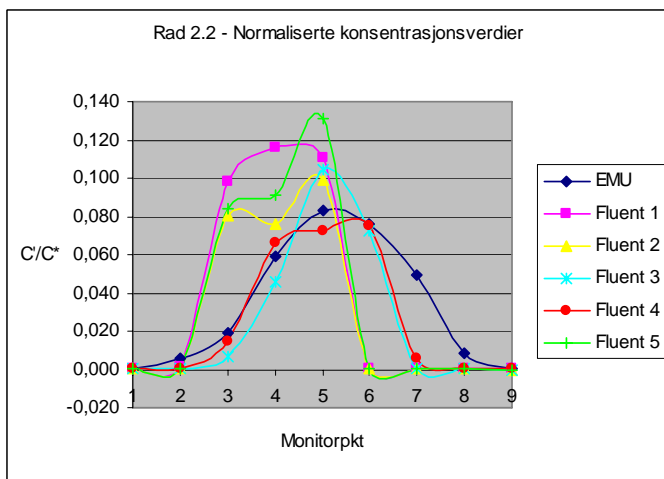
Plassering: $Y = 110\text{m}$, $Z = 0,25\text{m}$, lengde på rad = $36,7\text{m}$

Som for rad 1, men beregnede data korresponderer bedre med EMU resultatene.

Også her noteres det at største målte konsentrasjon korresponderer godt mellom FLUENT 3 (samt delvis 4) og EMU. Disse skiller seg dessuten klart fra FLUENT 1, 2 og 5 ved at maksimal konsentrasjon ligger ett monitor lenger vekk fra utslippspunktet sett på tvers av vindretningen.

Alle modellene for "smal" gassky ift. EMU, men modellene med høyest oppløsning overpredikerer maksverdiene.

For øvrig samme tendens som i rad 1 for FLUENT 4 (se kommentar tilknyttet spredning langs bakken rett nedstrøms utslippet), selv om det ikke er like tydelig.



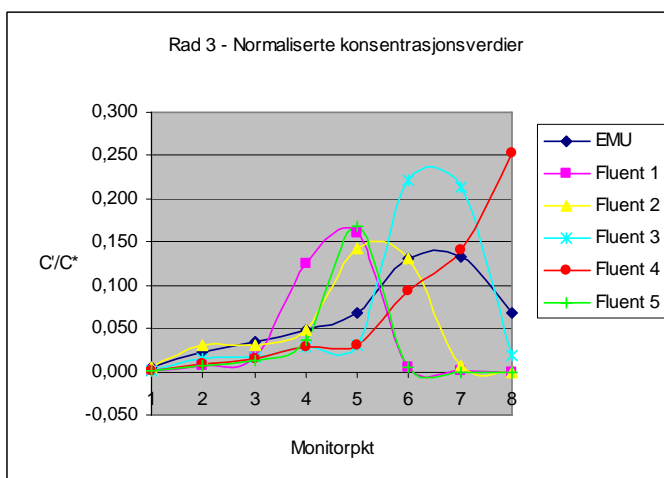
Kommentar til rad 2.2 (ligger over rad 2.1):

Plassering: $Y = 110\text{m}$, $Z = 18,8\text{m}$, lengde på rad = 24m

I denne regionen består modellene med forskjellig celledørrelse i viktig område av celler med størst størrelse. For FLUENT 1 betyr dette f.eks. celledørrelse = 7 m.

FLUENT 3 og 4 korresponderer forholdsvis bra med EMU resultatene, men har en for "smal" gassky og underpredikerer totalt sett.

FLUENT 1, 2 og 5 overpredikerer vesentlig i området nærmest nedstrøms av utslippspunktet, mens de underpredikerer vesentlig jo mer på tvers av vindretningen en kommer. Plottet viser imidlertid at disse modellene har de største registrerte konsentrasjonsverdiene. Dette kan komme av at naturlig vertikal reduksjon i konsentrasjon ikke ivaretas like godt ved grov gridoppløsning (grovt grid gir få celler mellom bakken og $z=18\text{m}$, noe som kan føre til for liten forandring over gitt den avstand ift. reelle forhold).



Kommentar til rad 3:

Plassering: $Y = 195\text{m}$, $Z = 0,25\text{m}$, lengde på rad = $37,7\text{m}$

Også her ser vi de samme trekkene mellom FLUENT 1, 2 og 5 på den ene siden og FLUENT 3, 4 og EMU på den andre, som viser at maksimal konsentrasjonen ligger vesentlig lengre ut på tvers av vindretningen for FLUENT 3, 4 og EMU.

Alle modellene har imidlertid delvis korresponderende trekk til EMU, men kun gjeldende for omlag halvparten av monitorpunktene.

FLUENT 3 og 4 avviker vesentlig fra EMU i de største registrerte konsentrasjonene (inntil om lag 40 %), men korresponderer likevel forholdsvis bra med EMU.

Monitor punkt 8 ligger ved en forhøyning i topografien. Det antas at det er dette forholdet som gjør forskjellen mellom målte verdier i topografi modellene og den flate modellen

(FLUENT 4) i dette punktet. Dette er en meget interessant og sannsynlig effekt av topografien (se for øvrig Figur 6-3, Figur 6-4 og Figur 7-2 for en skisse av topografi og monitorpunkt plassering).

Alle modeller underpredikerer totalt sett.

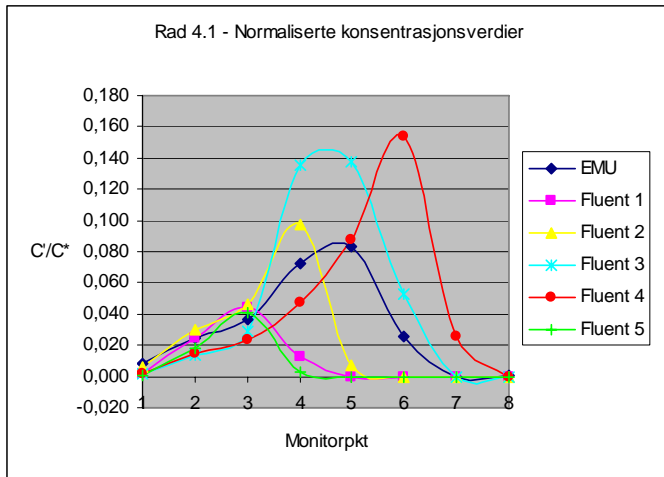
Kommentar til rad: 4.1:

Plassering: Y = 300m, Z = 0,25m, lengde på rad = 39,8m

FLUENT 1 og 5 har tilnærmet null i registrert verdi i 5 av 8 punkter. FLUENT 2 har noe høyere registreringer, men om lag samme punkter med lave konsentrasjonsverdier som FLUENT 1 og 5.

FLUENT 3 og 4 overpredikerer med om lag 60 % i punktet med høyest registrering, selv om flere punkter har lavere registrerte konsentrasjoner enn EMU. Profilmessig korresponderer FLUENT 3 imidlertid bra med EMU.

Som i den forrige monitorraden som ligger langs bakken (rad 3) gir FLUENT 4 (flat modell) høyere verdier i punkter mot enden. Det antas at topografiske forhold er hovedårsaken til forskjellene, da det er topografiske ujevnheter i området, noe som fører til at gasstrømmen følger disse terrengendringene.



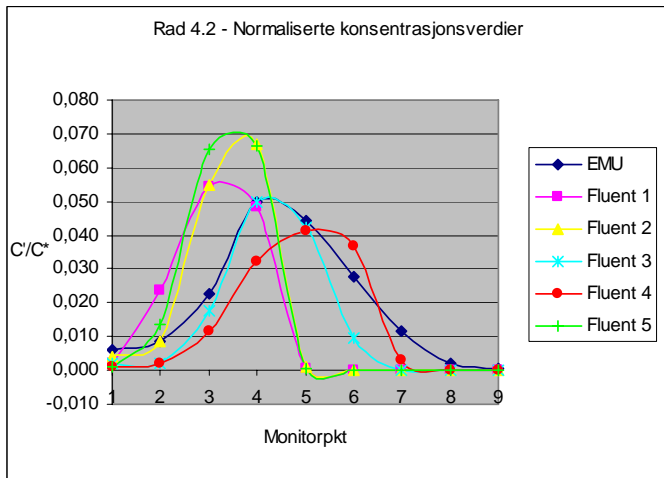
Kommentar til rad 4.2 (ligger over rad 4.1):

Plassering: Y = 300m, Z = 18,8m, lengde på rad = 25,9m

I denne regionen består modellene med forskjellig cellestørrelse i viktig område av celler med størst størrelse. For FLUENT 1 betyr dette f.eks. cellestørrelse = 7 m.

Det som er interessant med denne raden er at maksimale konsentrasjoner er høyest i FLUENT 1, 2 og 5 (noe som er samme resultat som i rad. 2.2). Disse har imidlertid maksimalkonsentrasjon et punkt nærmere rett nedstrøm enn EMU og FLUENT 3 og 4, noe som er et gjennomgående trekk i alle radene.

Også her korresponderer FLUENT 3 bra med EMU, men den, som de andre modellene, underpredikerer totalt sett ift. EMU.

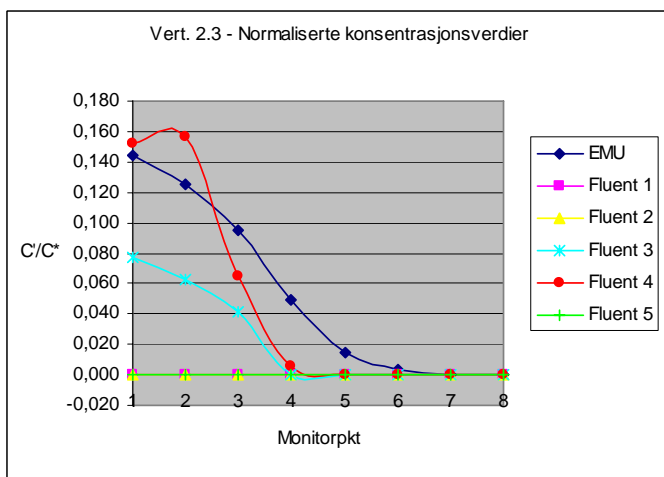


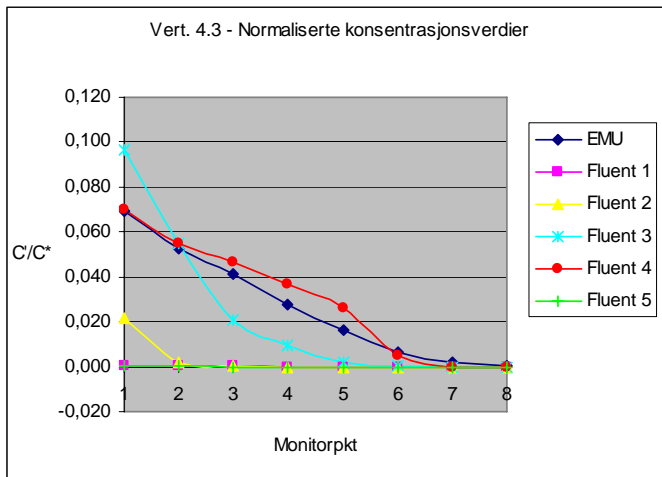
Kommentar til vert. 2.3 (ligger sammen med rad 2.1 og 2.2):

Plassering: Y = 55m, Z = 6,3-39m, høyde på vertikal=32,7m

Ingen av modellene korresponderer særlig bra med EMU. Kurveformen til FLUENT 3 er korresponderende, noe som kan bety at modellen har likhetstrekk, men underpredikerer vesentlig.

Monitor 4 – 6 ligger i høyde 19 – 30 m. Det er interessant å se at modellene underpredikerer vesentlig, ganske rakst vertikalt (tilnærmet nullverdier).





Kommentar til vert. 4.3 (ligger sammen med rad 4.1 og 4.2):

Plassering: Y = 300m, Z = 4-51m, høyde på vertikal = 47m

FLUENT 4 korresponderer meget bra med EMU, mens FLUENT 3 avviker noe. FLUENT 1, 2 og 5 har tilnærmet nullverdier i hele registreringen.

Det er interessant å se at korrespondansen mellom FLUENT 4 (og til dels 3) og EMU i monitorpunkt 4-6 er vesentlig bedre lenger vekk fra utslippet sammenlignet med vertikal 2.3. Det nevnes at det er 190 m mellom vertikal 2.3 og 4.3.

Gjennomgang av normaliserte middelkonsentrasjoner for hvert monitorpunkt viser at det er til dels stor forskjell mellom resultatene fra hver enkelt modell. Kort fortalt korresponderer FLUENT 3 og 4 absolutt best med EMU, selv om det er til dels store variasjoner også der. Kort oppsummert viser resultatene fra simuleringene følgende:

- Resultatene viser at fint grid virker å ha en større betydning på resultatene enn topografiske forhold, spesielt når topografien er forholdsvis flat (som den her er i spredningsområdet). Det antas at større topografiske forskjeller vil ha vesentlig større betydning på resultatene.
- En generell vurdering er at FLUENT 3 korresponderer best med EMU hva gjelder konsentrasjonsprofil, dvs. konsentrasjonsnivå i gitt målepunkt. FLUENT 4 viser imidlertid også tildels meget bra korrespondanse, men vurderes å ha avvik som er av betydning ift. reell situasjon.
- Det bemerkes også at FLUENT 3 og 4, samt EMU, har en vesentlig større utbredelse nedstrøms på tvers av vindretningen enn de andre modellene, noe som registreres i hver rad fra og med om lag monitorpunkt nr 5 og til nest ytterste punkt. Dette antas å hovedsakelig å henge sammen med cellestørrelse.
- I området som i liten grad går på tvers av vindretningen, dvs. monitor punkt 1 – 4, har alle modellene korresponderende trekk. I dette legges at alle modellene i denne regionen enten stiger relativt likt eller synker relativt likt. Visse avvik fremkommer imidlertid.
- For de to vertikale radene er det vesentlige forskjeller mellom modellene. FLUENT 3 og 4 (4 spesielt i vertikal 4.3) korresponderer relativt godt med EMU, mens de andre modellene (med grov oppløsning) knapt har registreringer i vertikalsonene (gasskyen bommer rett og slett). Skyen/ plumen i EMU og FLUENT 3 og 4 har med dette en større utbredelse vertikalt i dette området enn resterende modeller.
- I de første monitorradene er det liten spredning rett nedstrøms for utslippet i FLUENT 4 (flat modell). Dette kan komme av flere årsaker, der en årsak nok kan være at topografiske forhold fører til at utslippet ledes annerledes langs bakken enn ved en helt flat modell, samt at turbulensnivået langs bakken nok vil være større i en topografimodell enn i en flat modell. Den økte turbulensen kan/ vil føre til økt spredning. Disse forholdene ser ikke ut til å ha særlig stor innvirkning i litt høyde over bakken (type 15-20 m), så lenge topografiske forskjeller ikke er så store.

Totalt sett anses FLUENT 3 å gjengi EMU resultater forholdsvis bra. Dette kan også sies om FLUENT 4, selv om det er noen avvik som gjør at denne modellen ikke kan sies å være like god/ nøyaktig. Øvrige modeller vurderes ikke å gjengi eksperimentelle data godt nok, spesielt sett ift. kvaliteten på FLUENT 3.

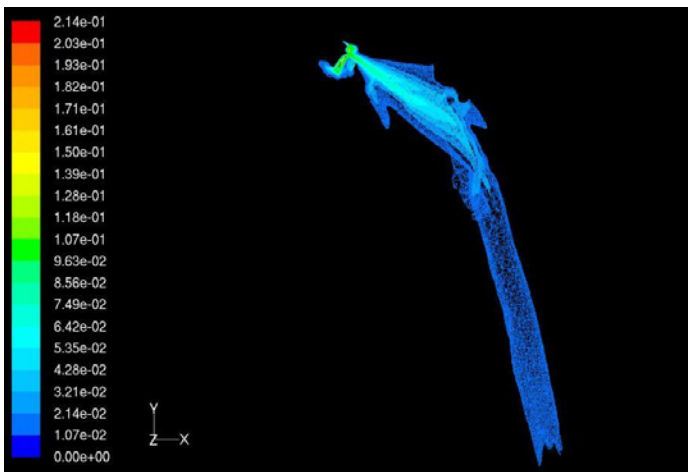
Ift. at det kan virke og være en mulig tendens at, spesielt de grove, modellene underpredikterer ved bakken og overpredikterer i høyden er det interessant å se på hva dette kan komme av. FFI angir at dette kan komme av at vertikal miksing overpredikteres i simuleringene, som kan skyldes to effekter:

- Numerisk diffusjon.
- Det er kjent at standard turbulensmodeller ikke fungerer så bra ved stabil stratifisering, dvs. at tettheten til luften (gassblandingen) er størst ved bakken og avtar i høyden. I slike tilfeller vil tetthetsforskjellene bidra til å dempe turbulensen og derved miksing. Standard modeller håndterer ikke dette så bra og kan derfor tendere til å overdrive vertikal miksing, dvs. større uttynning ved bakken (lavere konsentrasjoner) og høyere konsentrasjoner i høyden.

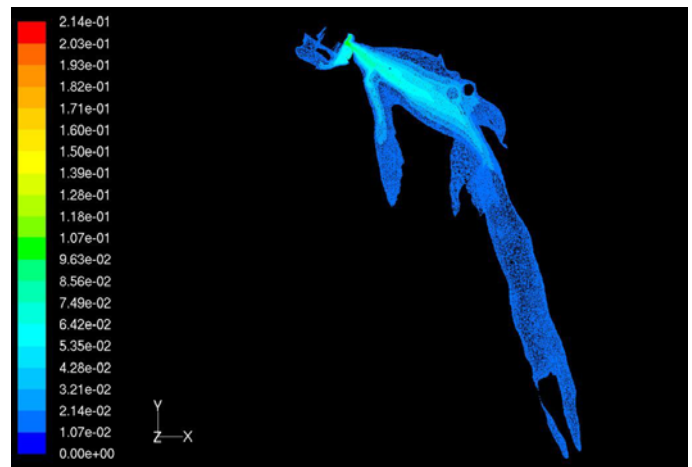
Undertegnede er ikke kjent med hvordan dette kan håndteres i FLUENT. Da effekten virker å kunne være av vesentlig betydning for resultatet bør forholdet ses nærmere på dersom dette ikke kan ivaretas på en enkel måte.

8.2.2. Plumeprofil av massefraksjon klor, Cl_2 ,

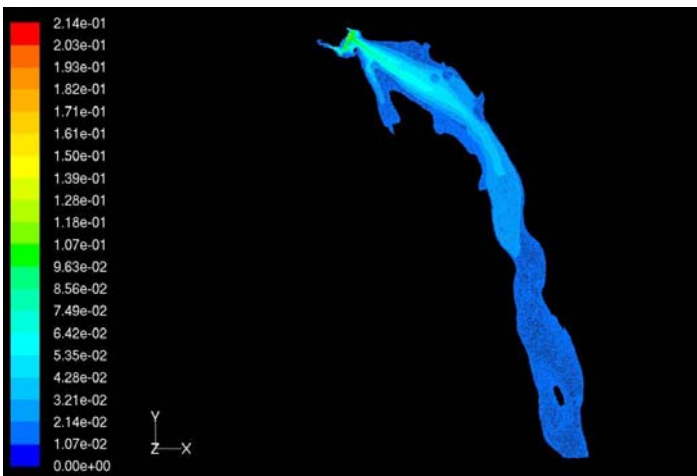
Under følger plumeprofil av massefraksjon klor, Cl_2 , for hver modell ved beregningens slutt (tid = 900 s).



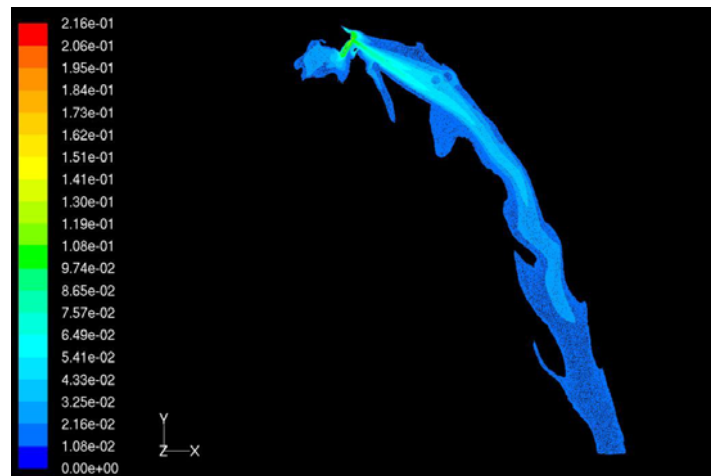
Figur 8-2 Plumeprofil - FLUENT 1



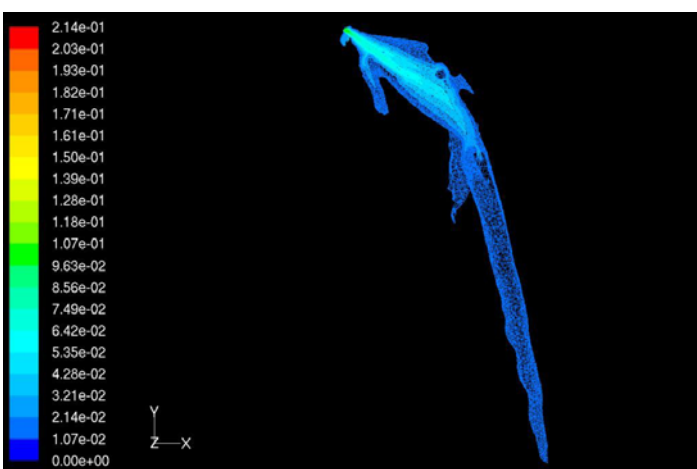
Figur 8-3 Plumeprofil - FLUENT 2



Figur 8-4 Plumeprofil - FLUENT 3



Figur 8-5 Plumeprofil - FLUENT 4



Figur 8-6 Plumeprofil - FLUENT 5

Figurene 8-2 til 8-6 er egenproduserte.

Kommentar til plumeprofilene:

NB! Figurene er utskrift fra FLUENT (i bakkeplan) og er kun i tilnærmet samme skala. Figurene er kun ment som en illustrasjon.

De to modellene som korresponderer best, dvs. FLUENT 3 og 4, har profiler som er sammenfallende i form hva gjelder bølgeformer. Denne formen er imidlertid mer markant i FLUENT 4 enn i FLUENT 3. Ettersom FLUENT 4 er en flat modell kan det virke som om topografiske effekter har en dempende effekt på denne bølgegenereringen.

Utover dette fremgår det klart at spredningen har vesentlig kortere/ mindre utstrekning i FLUENT 1, 2 og 5, enn i 3 og 4.

8.2.3. Resultater - Maksverdi pr rad/ vertikal monitorrekke

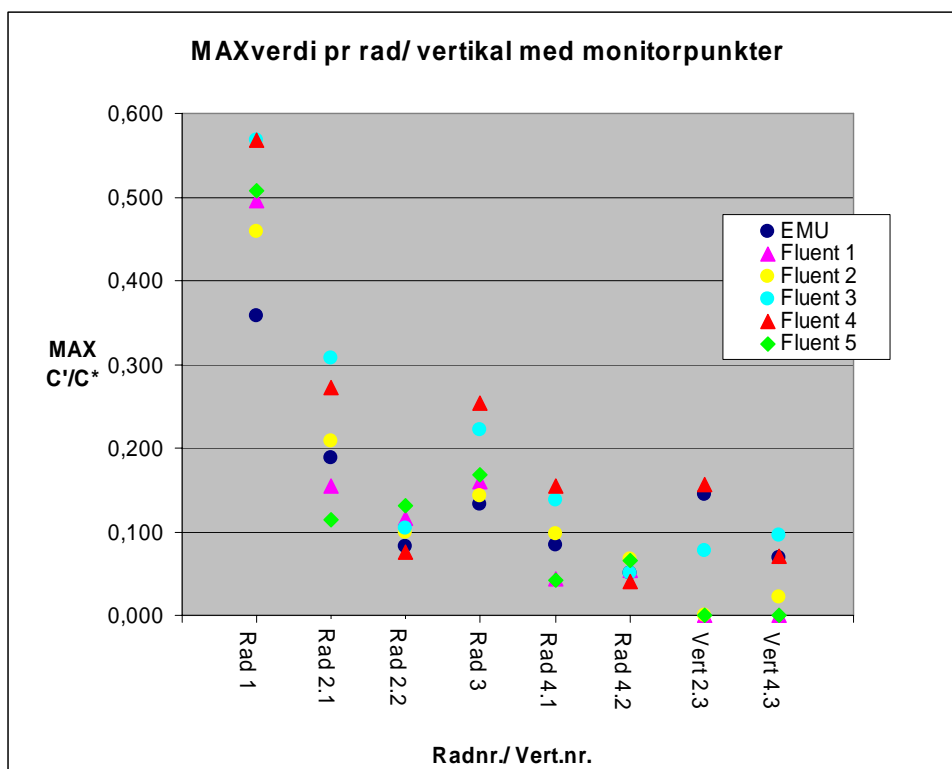
Under følger en oversikt over målte maks konsentrasjoner pr monitor rad/ vertikal. Resultatene er midlede normaliserte konsentrasjonsverdier over hele tidsforløpet (900 sekunder).

Tabell 8-3 Største målte konsentrasjoner av CL₂ pr monitor rad/ vertikal (normaliserte middelverdier).

		MAXverdi pr monitor rad (C'/C*)					
Rad #	Rad navn	EMU	FLUENT 1	FLUENT 2	FLUENT 3	FLUENT 4	FLUENT 5
1	Rad 1	0,3581	0,4956	0,4590	0,5689	0,5675	0,5072
2	Rad 2.1	0,1890	0,1551	0,2081	0,3077	0,2719	0,1136
3	Rad 2.2	0,0828	0,1158	0,0988	0,1042	0,0750	0,1310
4	Rad 3	0,1328	0,1600	0,1424	0,2216	0,2536	0,1677
5	Rad 4.1	0,0838	0,0437	0,0973	0,1373	0,1538	0,0413
6	Rad 4.2	0,0500	0,0542	0,0669	0,0499	0,0411	0,0664
7	Vert 2.3	0,1444	0,0000	0,0000	0,0770	0,1569	0,0001
8	Vert 4.3	0,0694	0,0005	0,0215	0,0962	0,0698	0,0003

: Angir punkt med største registrerte konsentrasjon for den gitte raden/ vertikalen.

Det er registrert at det er til dels stor variasjon i målte maks konsentrasjoner, også mellom de modeller som må sies å korrespondere best, dvs. EMU ift. FLUENT 3 og 4.



Figur 8-7 Plott av MAX verdi pr rad/ vertikal (egenprodusert).

Dette plottet illustrerer størrelsesforskjellene i registrerte maksverdier. Det registreres at de to modellene som er vurdert å inneha best kvalitet følger er forholdsvis sammenfallende også for maksverdiene. Ift. EMU resultater avviker de imidlertid en del.

8.3. Validering av resultater – statistisk metode

Under følger en gjennomgang av hvordan hver enkelt modell kom ut ved bruk av statistiske valideringsmetoder. Som nevnt ved gjennomgang av vurderingsmetodene i kap. 7.2, vil denne vurderingen angi kvaliteten på hver enkelt modell sett ift. vindtunnelresultatene. Som Chang and Hanna (2003) angir må imidlertid resultatene sees i sammenheng med annen vurdering av resultatene (som utført i foregående kapitler), da de statistiske resultatene ikke fullt ut tar høyde for skjevheter og lignende i plumen.

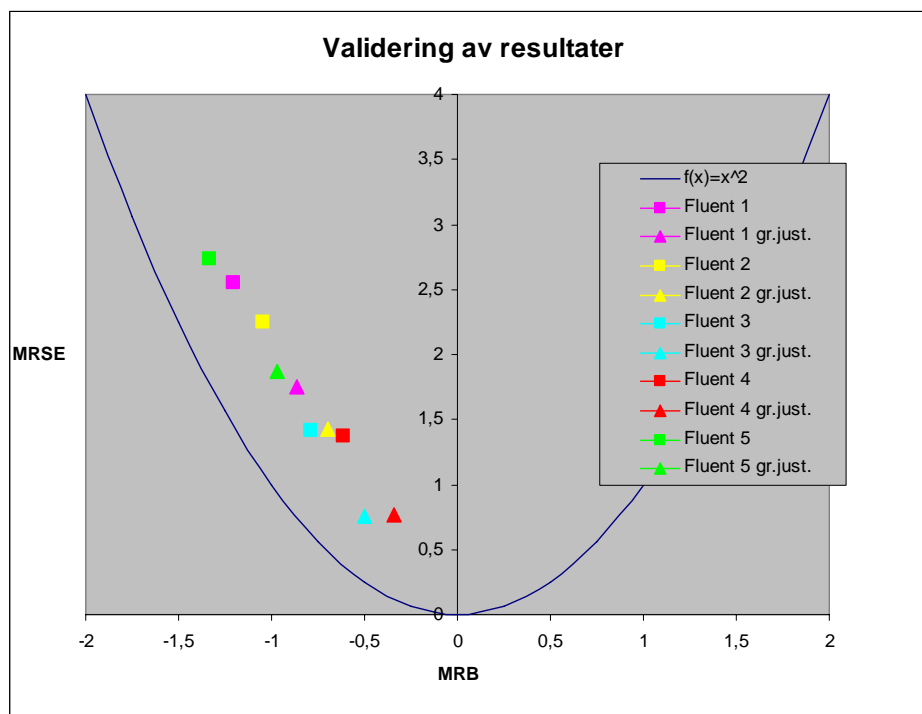
De to statistiske metodene som benyttes er:

- Plott av MRB mot MRSE
- Beregning av faktor 2 (FA2)

Det henvises til kap. 7.2 for en gjennomgang av metodene.

8.3.1. Plott - MRB vs. MRSE

Under følger plott av verdier for MRB og MRSE for hver modell. Det er også plottet grensejusterte terskelverdier. Som nevnt i kap. 7.2 er en null – null verdi tilsvarende en ”perfekt” modell sammenlignet med referansedata, som her er vindtunneldata. Med ”perfekt” menes det at den gjengir referanse scenariet 100%. Dersom $MRB < 0$ underpredikerer modellen, og overpredikerer for $MRB > 0$. Videre angir parabelen trenden, dvs. om resultatene følger samme trend, eller utvikling, som referansescenariet. Oppnådde resultater bør således ligge i nærheten av kurven.



Figur 8-8 Plott av MRB vs. MRSE (inkl. grensejusterte resultater) (egenprodusert).

Av Figur 8-8 følger oppnådde verdier av de fem modellene som er benyttet. Av figuren fremgår en klar trend i resultatene:

- Alle modellene følger trendkurven tilnærmet likt.
- Det er en jevn og klar forbedring i resultater fra FLUENT 1 (og 5) til 4. Dette angir en helt klar kvalitetsforbedring av resultatene.

Det er interessant å se at grensejusterte verdier for FLUENT 2 er på tilsvarende nivå som FLUENT 3, noe som må bety at terskelverdien som er benyttet er relativt lik mange av verdiene som er registrert for FLUENT 3. Interessant er det også ift. at FLUENT 2 har ca. halvparten så mange volumceller og 1/3 av simuleringstiden, som FLUENT 3.

Ut fra oppnådde MRB/ MRSE verdier vurderes det at FLUENT 3 er kvalitetsmessig den beste modellen. FLUENT 4 anses å være nesten likeverdig, men anses å avvike mer fra EMU dataene enn FLUENT 3.

FLUENT 5, som er tilsvarende som FLUENT 1 bare med annerledes plassert utslippspunkt (for verifisering av riktig plassering), vurderes som den dårligste modellen (som følge av feil plassering av utslippspunktet).

Som nevnt innledningsvis i kap. 8, er det viktig å se resultatene fra valideringen i sammenheng med annen vurdering av resultatene. Plott for hver monitorrad/ -vertikal, som vist i kap. 8.2.1, illustrerer godt hvordan oppnådde resultater faller ift. referanseverdier. Dersom dette sammenlignes med plottet for MRB vs. MRSE ses f.eks. at FLUENT 4 avviker mer fra trendlinjen til referanseverdiene enn FLUENT 3. Den samme trenden ses ved plott av resultater, der det fremkommer at FLUENT 3 er mer sammenfallende med referansescenariet enn FLUENT 4, selv om FLUENT 4 oppnår gode resultater.

8.3.2. Beregning av Faktor 2 (FA2)

Under følger en beregning av faktor 2 (FA2) for oppnådde resultater. Som nevnt i kap. 7.2.1.1.2 anses modellen som bra dersom $FA2 \approx 50\%$. FFI vurderer imidlertid at denne verdien bør ligge noen prosentpoeng høyere (10-20).

Som det følger av tabellene under er det beregnet verdier for:

- hele monitorsettet
- for alle monitorradene (dvs. utelatt vertikalradene, 2.3 og 4.3)
- for alle rader langs bakken (følgende er utelatt: 2.2, 2.3, 4.2 og 4.3)
- samt at det er beregnet grensejusterte verdier

En differensiering av hvilke monitorpunkter som tas med er gjort for å se om resultatene for enkelte deler av modellene er bedre enn det hele modellen angir. Dersom resultatene på én plass i modellen er bedre enn hva totalen tilsier kan det være grunn til å se nærmere på forskjeller internt i modellene som tydeligvis er utslagsgivende. Hvordan er f.eks. cellemodellen/ -størrelsen i ”gode” områder kontra ”mindre gode” områder?

Tabell 8-4 FA2 for midlede normaliserte verdier (sum alle monitorpunkter).

Faktor 2 (FA2)	FLUENT	FLUENT	FLUENT	FLUENT	FLUENT
	1	2	3	4	5
Alle pkt	15,15	28,79	45,45	42,42	18,18
Alle rader	20,00	38,00	50,00	38,00	24,00
Alle rader v bakken	22,58	45,16	61,29	35,48	25,81

Tabell 8-5 FA2 for grensejusterte midlede normaliserte verdier (sum alle monitorpunkter).

Grensejusterte data					
Faktor 2 (FA2)	FLUENT	FLUENT	FLUENT	FLUENT	FLUENT
	1	2	3	4	5
Alle pkt	19,70	33,33	48,48	46,97	22,73
Alle rader	20,00	38,00	48,00	38,00	24,00
Alle rader v bakken	22,58	45,16	58,06	35,48	25,81

Av Tabell 8-4 fremgår det at kvaliteten mellom de tilsvarende geometriske modellene, dvs. FLUENT 1 til 3, nesten dobler seg mellom modellene. Dvs. at FLUENT 3 er 3 ganger så ”bra” som FLUENT 1.

FLUENT 3 vurderes å oppnå akseptable resultater. FLUENT 3 viser, i likhet med FLUENT 1 og 2, en markant forbedring i resultat langs bakken kontra resultatene der monitorer i høyden er tatt med.

Et meget interessant trekk er at FLUENT 4 har omvendte trekk fra de andre modellene. I denne modellen vises det faktisk at det er monitorpunktene i høyden som er mest sammenfallende med referanseverdien, noe som er motsatt av øvrige modeller. Ettersom det er motsatt av resultatene fra topografimodellene vurderes det at bl.a. effekt fra topografien har noe å si på resultatene.

Det er ikke en vesentlig forbedring i de grensejusterte resultatene. Det er imidlertid interessant å se at FLUENT 3 oppnår noe dårligere resultat langs bakken kontra resultater som ikke er grensejustert, samtidig med at totalresultatet forbedres.

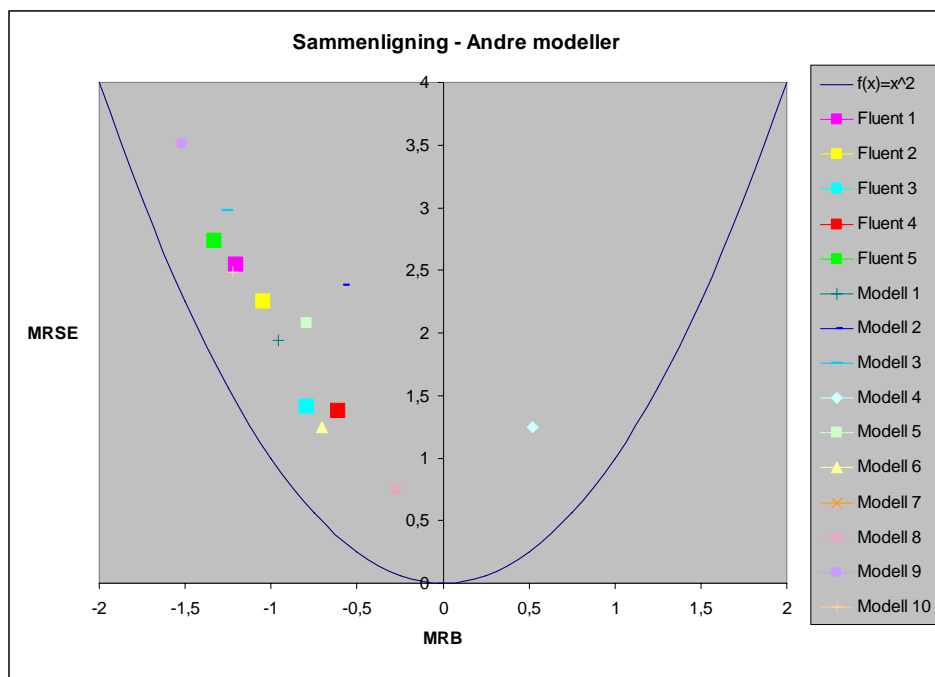
Det konkluderes med at oppnådde resultater gir grunnlag for å se nærmere på gridmodellen benyttet i bl.a. FLUENT 3, samt se nærmere på selve den geometriske modellen og spesielt oppbygning av hjelpevolumer. Bakgrunnen for dette er at det kan virke som om hjelpevolumet som omslutter området som omtales som "viktig område" muligens kan være for begrenset. I denne vurderingen ligger det at spredningen i øvre del av viktig område påvirkes negativt av økt cellestørrelse, som vokser raskt utenfor dette området. Det reelle problemet kan derfor muligens føres tilbake til problematikken tilknyttet gridmodellen TGrid og hvordan volumcellene fordeler seg i volumer med forskjellige cellestørrelser (se kap. 6.3.7).

Det vurderes med dette at resultater oppnådd for FLUENT 3 anses å inneha en tilfredsstillende kvalitet. Øvrige modeller vurderes ikke å inneha tilfredsstillende kvalitet sett ift. oppnådde FA2 verdier.

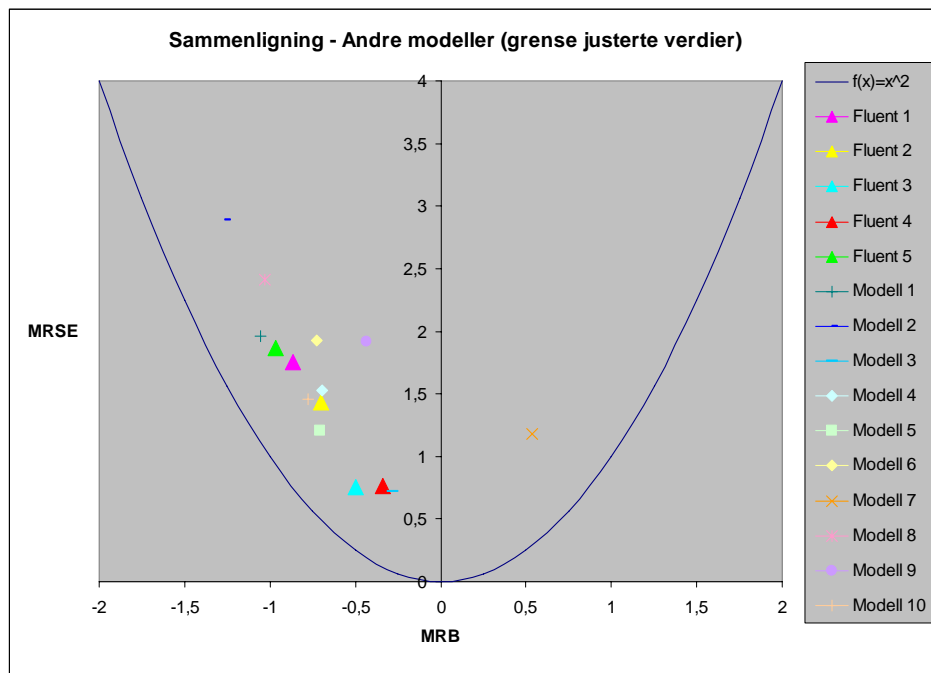
8.3.3. Sammenligning av statistisk resultat oppnådd med andre modeller

Referansescenariet benyttet i oppgaven er, som nevnt, et mye benyttet scenario. Det er gjennomført flere større forskningsprosjekter i Europa der dette scenariet har vært benyttet til validering av oppbygning av modeller og programmene som benyttes. Under følger et plott av verdier for MRB og MRSE som er oppnådd i dette prosjektet og av andre som har gjennomført samme øvelse som er gjort her. Det er benyttet både lik og ulik programvare.

Resultatene er anonymisert ift. hvem som har utført og hvilken programvare som er benyttet.



Figur 8-9 Plott MRB vs. MRSE - Sammenligning mot andre modeller (egenprodusert).



Figur 8-10 Plott MRB vs. MRSE gr.justerte verdier - Sammenligning mot andre modeller (egenprodusert).

De to plottene (Figur 8-9 og Figur 8-10) viser at alle resultater oppnådd i denne oppgaven ligger innenfor det som tidligere er oppnådd med både lik og ulik programvare. Av figurene fremkommer det at både FLUENT 3 og 4 kommer til dels meget godt ut ift. øvrige modeller.

En interessant observasjon er at så å si alle modellene underpredikterer. I en konsekvensanalyse vil jo dette være av vesentlig betydning, og må på en eller annen måte håndteres.

Det kan nevnes at referansescenariet er vurdert av flere av de som har benyttet det, å være til dels meget komplisert og sammensatt. Dette har ført til at flere har benyttet modeller med forenklet geometri (flere bygninger er fjernet, med mer). I denne oppgaven er det benyttet en fullstendig geometri og topografi, noe som har vært til dels meget arbeidskrevende, og skapt en hel del problemer spesielt tilknyttet gridding av modellene.

Det vurderes at spesielt FLUENT 3, men også FLUENT 4, kommer til dels meget godt ut sammenlignet med de andre modelleringene som er gjort. Den generelle vurderingen er derfor at modellen for FLUENT 3 er en god modell, men at den flate modellen, FLUENT 4, også gir tilfredsstillende resultat sammenlignet med andre modeller.

9. DISKUSJON

Endelig hovedmålsetning for denne oppgaven var å bygge en realistisk geometrisk modell for et gitt industriområde, og vurdere hvordan bygget modell gjengir eksperimentelle resultater for spredning av klogass ved hjelp av simulering i beregningsprogrammet FLUENT. En del av oppgaven har også vært å evaluere gridoppløsningens effekt på resultatene. Kort fortalt bestod oppgaven av følgende steg:

6. Bygge volumgeometri (geometri og topografi) for bruk i simuleringen.
7. Generere grid i volumgeometrien. Det ble generert modeller med forskjellig gridoppløsning, som sammen med de volumgeometriene som var bygget ga til sammen 5 geometriske modeller for simulering.
8. Beregne spredning av klogass for det aktuelle området ved bruk av genererte modeller.
9. Evaluere resultater.
10. Utarbeide dokumentasjon (denne rapporten).

Fra FFI ble videre følgende angitt som utgangspunkt for oppgaven:

- Ønsket gridmodell for generering av volumgrid
- Anbefalt gridstørrelse i viktig område
- Forenklinger i geometri eller topografi skulle ikke gjøres

Spesielt anbefalt gridmodell skapte store problemer og veldig mye arbeid. Det viste seg umulig for undertegnede innenfor tilgjengelig tidsramme å greie og generere volumgrid med anbefalt modell. Som følge av dette ble det besluttet å benytte en annen modell.

Endringen i gridmodell anses i utgangspunktet som positivt ift. at det er benyttet en modell som det er opplyst at ikke benyttes i særlig grad ved FFI. Gjennom arbeidet er det avdekket en del svakheter, men også positive trekk ved modellen. Oppnådde resultater viser dessuten at gridmodellen er brukbar, men at avdekkede usikkerhetsmomenter bør sjekkes nærmere for å få fullstendig kontroll på modellen, samt få utnyttet modellens hele potensial.

Under følger en kvalitativ vurdering av momentene i oppgavene som anses som viktigst.

9.1. Bruk av beregningsmodeller for simulering av spredning av gass

Bruk av avanserte beregningsmodeller for spredning av gass er muliggjort gjennom datamaskinens inntog. Utviklingen på denne fronten har dessuten gjort det mulig for "allmennheten" å benytte programmer som er tilgjengelig, selv om prisen på enkelte programpakker er av en slik størrelsesorden at en del programmer i utgangspunktet er forbeholdt forskningsinstitusjoner og visse deler av næringslivet. Det fins til dels avanserte modeller som fritt kan lastes ned fra nettet. Disse er imidlertid ikke så "strømlineformet" og vil nok kreve større innsats av brukeren (de er dessuten ofte beregnet til en begrenset type scenarier, f.eks. brann)

Avansert programvare og kraftig maskinkapasitet har ført til at ellers uløselige matematiske modeller lar seg løse. Tidligere har slike problemstillinger blitt løst ved enkle modeller knyttet opp mot antagelser og/eller resultater fra eksperimentelle forsøk. Mulighetene for å oppnå meget realistiske resultater gjennom beregninger er i dag store. Det er imidlertid en del forhold som spiller inn ift. om resultatene blir av tilfredsstillende kvalitet og om det er lønnsomt å gjennomføre slike beregninger.

Teoretisk bakgrunn, kunnskap om metodene som benyttes samt erfaring med den gitte programvaren, er alle forhold som vurderes som helt nødvendig for å kunne jobbe rasjonelt og oppnå troverdige og tilfredsstillende resultater. Undertegnede har følt dette sterkt gjennom hele oppgaven. Arbeidet ble startet med enkel kunnskap om teori og metode, men uten noe som helst bakgrunn fra arbeid med det spesifikke,

eller andre programvarer av denne typen. Dette førte naturligvis til at en del tid ble brukt på å komme over den innledende brukerterskelen, som gjør at arbeidet glir.

For å jobbe effektivt og rasjonelt med denne typen problemstillinger og programmer anses det som nødvendig å ha en viss kontinuitet, dvs. at man får jobbet med dette jevnlig.

Kostnaden tilknyttet bruk av denne typen modeller og programvarer anses å være til dels meget høy. Dette er knyttet opp mot programvarens ofte meget høye kostnad, ofte meget høyt tidsforbruk for oppsett av geometrisk modell og beregningsmodell, samt kostnad for datamaskinkapasitet. Den totale kostnaden vurderes å være så høy at det ofte ikke er mulig å forsvare det i det private markedet. Typiske områder det vurderes som nødvendig, og der kostnaden ofte kan forsvares, er innen olje- og gassektoren. Her er potensiell konsekvens ved en hendelse gjerne stor, samt at denne næringen genererer så mye inntekter at selve kostnaden enkelt kan forsvares. Sikkerhetsfokuset er dessuten så høyt innen denne sektoren at det i seg selv er tilstrekkelig for å forsvare denne typen vurderinger.

Undertegnede har erfaring som rådgiver innen brann- og sikkerhetsbransjen. For den vanlige landbaserte byggenæringen anses denne typen analyser å være for kostbare i mange prosjekter, dersom ikke behovet og/ eller besparelsene tilknyttet analysene er store nok, noe som ofte er vanskelig å synliggjøre på forhånd. Det kan nevnes at det er utarbeidet en gratis CFD-kode/ programvare spesifikt beregnet for analyse av brannutvikling og røykspredning. Den er gratis da den amerikanske stat har sponset utviklingen, og med det krever at den skal være fritt tilgjengelig. Brukerterskelen til denne programvaren er forholdsvis høy, noe som gjør at programvaren innledningsvis er tung å bruke. Programmet er imidlertid mye benyttet og anses som brukbar for det gitte fagområdet (hovedsakelig branner innomhus). Med bakgrunn i kostnad og kvalitet benyttes programmet en del, og kostnaden tilknyttet analysen er ofte enkel å forsvare ift. potensiell besparelse i f.eks. byggekostnad tilknyttet en enklere løsning enn det som er vanlig å benytte. (Nevnte programvare kan fritt lastes ned fra <http://fire.nist.gov/fds/>).

Det er visse essensielle forhold som undertegnede synes å være spesielt utfordrende tilknyttet slike analyser. De kan kort oppsummeres å være:

- Vurdering av resultatenes kvalitet.
- Ivaretagelse av usikkerhet knyttet til inndata.

Vurdering av resultatenes kvalitet anses å ha direkte sammenheng med kunnskap og erfaring. Dette bør jo i utgangspunktet ikke være et veldig mye større problem ved bruk av en CFD-modell enn ved bruk av forenklete metoder. Forskjellen er at resultatene fra en CFD simulering ofte illustreres på en slik måte at man blir blendet av det, og ikke helt greier å se bak resultatene og vurdere dem kritisk. Denne skepsisen har ført til at CFD ofte betegnes som "Colorfull Fluid Dynamics" av skeptikere, som mener at resultatene lett blir brukt ukritisk (og ikke nødvendigvis er av samme kvalitet som illustrasjonen).

Undertegnede har følt vanskeligheter med å vurdere hva som er bra og hva som er dårlig ift. angivelse av resultatenes kvalitet. I oppgaven har imidlertid et vindtunneleksperiment vært grunnlaget for geometri bygging og inndata for beregningsoppsettet, samt at eksperimentelle resultater har vært et kvalitetsmål for beregnede resultater. Dette har gjort evalueringsjobben mye enklere enn om slike data ikke hadde vært tilgjengelig. Mulighet for riktig vurdering av resultatets kvalitet anses generelt å være nært knyttet opp mot brukerens erfaring med slikt arbeid, men også teoretisk/ praktisk kunnskap innen fluiddynamiske problemstillinger.

Inndataenes kvalitet vurderes generelt å ha meget stor betydning for resultatet. Utrykket "drit inn, drit ut" er vanlig brukt om resultatet av dårlige/ feil inndata, men ikke minst om muligheten til å manipulere resultatene. Inndata er således en del av usikkerheten tilknyttet en modells kvalitet, og som nevnt i kap. 3.3.2.3 kan usikkerhet knyttes opp mot tre forhold:

- I. Feil som følge av antagelser tilknyttet fysiske forhold i modellen
- II. Tilfeldig variasjon (f.eks. fluktusjon i konsentrasjoner)
- III. Usikkerheter generert av feil i inngangsdata

Det anses å være fullt mulig å ha god kontroll på punkt I og III, men det vil kreve et visst fokus.

Kvaliteten på inndataene knyttet til scenariet i oppgaven vurderes som generelt gode, men med enkelte usikkerheter. Den vesentligste usikkerheten har vært nøyaktig plassering av utslippspunkt (i z-retning). Ettersom scenariet er en del benyttet av andre fins det også en del dokumentasjon fra annet arbeid, som gjør scenariet egnet til arbeider lik det som er utført her.

Til tross for de negative forholdene som er vurdert å være tilknyttet beregningsmetoder av typen som er benyttet, vurderes muligheten å være store for å oppnå realistiske resultater som meget gode. Det ”eneste” som kreves er kunnskap.

I de neste kapitlene følger en nærmere vurdering av det som spesifikt er oppnådd gjennom det arbeidet som er utført i denne oppgaven.

9.2. Betraktninger rundt gjennomført geometribygging – geometri, topografi og valg av gridmodell

Denne delen av oppgaven har tatt desidert mest tid. Det har vært store utfordringer knyttet til både det å generere en tilfredsstillende volumgeometri, men ikke minst knyttet til generering av volumgrid og valg av gridmodell.

Det vurderes generelt at spesialiserte CAD-verktøy er bedre egnet til generering av geometri enn det GAMBIT er. Dette gjelder spesielt ved store geometrier med mye variasjon. Brukervennligheten til GAMBIT vurderes som dårlig sammenlignet med dagens avanserte CAD-verktøy. Importmuligheten av CAD-filer til GAMBIT er god, noe som gjør denne jobben enkel.

Når det gjelder generering av topografisk flate vurderes imidlertid situasjonen som noe annerledes. Det er ikke funnet enkle metoder for å gjøre dette i benyttet CAD-program (AutoCad), mens det gjøres meget enkelt i GAMBIT.

Det vurderes derfor at bruk av GAMBIT og annet CAD-verktøy sammen utgjør en god kombinasjon. Dette forutsetter selvfølgelig at man benytter samme referansepunkter, slik at importerte filer ”faller på riktig plass” ved import.

Arbeid på/ med topografiflate innebærer imidlertid noen utfordringer. Dette gjelder spesielt faren for degenerering av flaten, men også tidsaspektet. Tidsaspektet nevnes da GAMBIT bruker vesentlig lenger tid på operasjoner tilknyttet en topografiflate jfr. en plan flate. Med operasjoner menes her f.eks. sammenslåing av bygningsgeometri med topografiflaten. En slik operasjon går meget raskt ved en plan flate, mens det ved en topografiflate kan ta veldig lang tid (antatt også avhengig av graden av topografiske forskjeller). Dette aspektet kommer enda sterkere til syne ved generering av grid (kan ta timesvis).

For at det skal kunne jobbes effektivt med topografiflate i GAMBIT anses det derfor som helt nødvendig å ha kraftig maskinvare tilgjengelig. Undertegnede jobbet i starten av oppgaven på en utrangert maskin, som gjorde det umulig å jobbe effektivt. Etter hvert ble en kraftigere maskin tilgjengelig, noe som bedret situasjonen betraktelig. Det anbefales imidlertid at oppdragsgiver (FFI) benytter enda kraftigere maskinvare dersom det er tenkt at topografi vil bli vanlig å benytte for simuleringer av scenarier der terreng er en naturlig del (utomhus).

Når det gjelder degenerering av topografiflaten ble dette forholdet oppdaget ved en tilfældighet, og etter at enkelte simuleringer var ferdig kjørt (og mye arbeid måtte gjøres på nytt). Konsekvensen av slik degenerering kan være veldig stor, og det anses som negativt at GAMBIT faktisk er i stand til å utføre en slik operasjon. Her burde enten handlingen vært umulig, eller varsel om feil blitt gitt. Dette forsterkes ytterligere av at slik degenerering ikke er lett å oppdage. Problematikken må således fokuseres på, og den enkleste løsningen vil være å ikke gjøre for store inngrep/ endringer i en topografiflate (spesielt ift

sammenslåing av flere topografiflater). Dette vil kunne sette noen begrensninger på hva som er mulig å gjøre med en slik flate, noe som i utgangspunktet er uheldig. Problemet anses imidlertid ikke å være større enn at det kan håndteres dersom man som bruker er oppmerksom, men stort nok til at det er nødvendig å være klar over det. Dette bør imidlertid ikke sette begrensninger, eller skape skepsis til bruk av topografi.

En sak som også ble testet ut i denne oppgaven var om det var noen reell forskjell på bruk av topografisk flate eller en plan flate. Resultatene viser at det kan tenkes at forskjellen ikke er så stor i flate områder, noe som vil være naturlig. Å se bort fra topografiske forhold i områder der det faktisk er reelle topografiske forskjeller, vurderes imidlertid som feil. Bakgrunnen for dette er flere, men hovedsaken er at slike forskjeller vil ha til dels stor betydning for et spredningsforløp (gjennom bl.a. turbulensgenerering og hvordan plumens retning påvirkes av topografiske endringer). Det anbefales at topografi inkluderes der den kan tenkes å ha en reell innvirkning på spredningsforløpet. Ved tung gass, som i stor grad vil ligge i nærheten av bakken, vil topografiske endringer selvfølgelig ha vesentlig betydning for spredningen.

Den største utfordringen tilknyttet generering av ferdig geometrisk modell for simulering (bestående av volumgeometri og volumgrid) er generering av volumgrid. Selve utfordringen er en kombinasjon av ønsket gridmodell og geometrien som skal grides.

FFI uttalte ved oppstart at gridmodell bestående av strukturert grid var ønsket. Dette var også utgangspunktet i modellbyggingen i oppgaven. Dette lot seg imidlertid ikke gjennomføre. Årsakene er nok flere, og erfaringen til undertegnede er nok en av dem, men i utgangspunktet vurderes det at GAMBIT ikke er egnet i bruk for generering av strukturert grid i kompleks geometri (her; kompleks geometri i kombinasjon med topografisk overflate). Til det er behovet for store tilpasninger av geometrien for stort til at det vurderes som forsvarlig å gjennomføre (arbeidet tar rett og slett for lang tid, samt at utførlige justeringer vil kunne være nødvendig). Dersom strukturert gridmodell vurderes som det eneste riktige/tilfredsstillende, anses behovet for annen gridgenerator eller annen programvare å være nødvendig. Det nevnes at det fins programvare som enkelt vil kunne generere et strukturert grid i den geometrien som er laget i denne oppgaven. Om dette totalt sett er tilfredsstillende programvare for FFI er imidlertid undertegnede ikke kjent med.

Ettersom det ikke lot seg gjøre å generere et strukturert volumgrid i den geometriske modellen i oppgaven, ble det benyttet en ustrukturert gridmodell (TGrid). Denne metoden muliggjør generering av volumgrid i nær sagt alle typer geometri. Dette, sammen med den relativt korte tiden det tar å gride store volumer, anses som spesielt positive forhold kontra generering av strukturert grid i komplekse geometrier. Det er imidlertid noen fallgruver i modellen spesielt knyttet til fordeling av celledørrelse i volumer der celledørrelsen vokser fra en størrelse til en annen. Dette skal det i utgangspunktet finnes verktøy for i GAMBIT, slik at det lar seg kontrollere, uten at undertegnede har hatt tid til å utforske dette fullt ut. Dersom man ikke er oppmerksom på dette forholdet, kan det bli generert et grid som ikke er av ønsket kvalitet, noe som vil være til dels meget negativt for sluttresultatet. TGrid anses dermed å inneha en usikkerhet som ikke er tilfredsstillende uten at usikkerheten blir ivaretatt på tilfredsstillende måte.

I tillegg til den nevnte kontrollen på cellevekst i volumet, er det en del generelle synspunkter på benyttet gridmodell (rent beregningsmessig ved simulering). Det går bl.a. på beregningstid som enkelte mener blir vesentlig lengre ved bruk av ustrukturert grid kontra strukturert grid. Undertegnede er imidlertid usikker på om denne forskjellen, reelt sett, er særlig stor. Enkle sammenligninger viser at det kan virke som om forskjellen er minimal, og vesentlig mindre enn forskjellen mellom tiden det tar å generere et strukturert kontra et ustrukturert grid i en kompleks geometri. Dersom modellene kan vurderes som likeverdige rent matematisk, dvs. at de er like gode ift. resultatene de gir, anses det at en nærmere vurdering av reelle forskjeller bør gjøres for å se om antagelser om kvalitetsforskjellene er reelle, eller om de er basert på tro og gamle myter. I denne sammenhengen nevnes det at det fins modeller som er en blanding av de to nevnte modellene (HexCore), som også bør tas med i en slik vurdering. Dersom en slik øvelse ikke gjøres kan beslutninger om GAMBITs kvaliteter som gridgenerator bli tatt på et noe feilaktig grunnlag. En slik vurdering og øvelse anses som et godt forslag til en masteroppgave.

Erfaringer som ble gjort underveis i arbeidet med generering av geometrisk modell og volumgrid anses som meget interessante og verdifulle. Det var en rekke utfordrende forhold som dukket opp, og som, etter

undertegnede vurdering, ble løst på en tilfredsstillende måte. Av oppdagede forhold som vil kunne ha stor konsekvens for resultatene, nevnes spesielt degenereringen av topografiflaten og hvordan fordelingen av cellestørrelse skjer i volumer der cellestørrelse skal vokse når ustrukturert gridmodell benyttes. Dersom disse forholdene ikke hadde blitt oppdaget ville de endelige modellene blitt dårlige. Fordeling av cellestørrelse og dets betydning på resultatene, er testet i oppgaven gjennom modellene som er benyttet.

Helt avslutningsvis bør det nevnes at scenariet som er benyttet i denne oppgaven er vurdert, av de fleste andre som har benyttet det, til å være i overkant komplekst for å benytte bl.a. geometrien fullt ut. Dette har betydning at det ved tidligere forsøk er opplyst at det har blitt gjort forenklinger i form av at geometrien er blitt gjort enklere, eller at deler av geometrien er utelatt (eller en kombinasjon). På tross av forenklingene er det allikevel oppnådd enkelte tilfredsstillende resultater (avhengig av program/ modell). Undertegnede har ikke gjort noen forenklinger av geometrien eller utelatt noe fra beskrivelsen av scenariet. Ettersom andre har oppnådd tilfredsstillende resultater med forenklet geometri er det jo betimelig å tenke at dette med fordel også kunne vært gjort i denne oppgaven. Slike forenklinger krever imidlertid en del kunnskap om hva som vil bidra i spredningsforløpet og hva som ikke vil gjøre det. I den sammenheng vurderes det at undertegnede har tilegnet seg mye nyttig kunnskap gjennom oppgaven til senere kritisk å kunne gjøre betraktninger knyttet til potensielle forenklinger. Det anses derfor riktig å ikke gjøre forenklinger på det nivået denne oppgaven ble utført på (dersom ikke det i seg selv hadde vært en oppgave).

9.3. Betraktninger rundt gjennomførte beregninger/ simuleringer

Arbeidet tilknyttet denne delen av oppgaven gikk forholdsvis raskt sammenlignet med arbeidet som var knyttet til generering av geometrisk modell og volumgrid. Selve oppsettet fulgte i utgangspunktet standard oppsett i FLUENT med visse angivelser fra FFI.

FLUENT vurderes å ha et relativt enkelt brukergrensesnitt. For å få fullt utbytte kreves det imidlertid en del kjennskap til alle muligheter som ligger i programvaren. Rent kunnskapsmessig er det dessuten viktig å vite hvilke inngangsparametere som vil være viktig for den gitte problemstillingen. Eksempel på et slik parameter er valg av turbulensmodell.

Rent tidsmessig er det to oppgaver som tar lang tid:

- Gjentakende oppgaver i oppsettet av beregningen
- Beregningen

Det anses som en stor fordel at det er mulig å lage enkle journalfiler for hjelp i oppsettet. Dette gjelder spesielt for gjentakende oppgaver; som oppsett og definering av registreringspunkter. Dette er til dels meget arbeidsbesparende, og anses som nødvendig å benytte for å jobbe effektivt. Det er også forholdsvis enkelt å sette seg inn i hvordan slike filer settes opp.

Selve beregningene tar til dels meget lang tid. Dette er tidligere nevnt, og diskuteres ikke i nærmere her. Det som imidlertid nevnes er muligheten til å benytte parallell prosessering. Alle modellene som er laget i denne oppgaven er så store, dvs. inneholder et så stort antall gridceller, at det er helt nødvendig med parallell prosessering. Muligheten for å gjøre dette anses som en positiv funksjon i programvaren, mens nødvendigheten anses å gi visse begrensninger til allmenn bruk av modeller av slike størrelser som her. Parallell prosessering tilfører et kostnadsaspekt til bruken som kan være vesentlig og som må kunne forsvares. I denne oppgaven er det benyttet inntil 20 prosessorer samtidig, og beregningene har allikevel tatt ukesvis. Behovet for meget kraftig maskinvare setter visse begrensninger for bruk, og vil føre til at kostnaden kan bli vanskelig å forsvare i en del sammenhenger.

For å kunne benytte seg av parallell prosessering er det nødvendig å dele/ partisjonere den aktuelle geometriske modellen i like mange deler som antall prosessorer som skal benyttes. Dette er i utgangspunktet en enkel oppgave og kan gjøres automatisk eller manuelt (begge deler er enkelt). Det nevnes imidlertid at standard partisjoneringsmetode i FLUENT, ved bruk av automatisk partisjonering, førte til at beregningene kræsjet. Dette er visst et vanlig problem, som løste seg da FLUENT Sverige AB

foreslo at en annen partisjoneringsmetode enn den som var benyttet, ble testet. Ettersom dette tydeligvis er et vanlig problem, er det en svakhet at det ikke er gjort noe med dette i programvaren.

Det er et helt klart ankepunkt at store komplekse modeller, som ofte er nødvendig for å oppnå tilfredsstillende resultat, vil kreve så mye maskinkapasitet at det kan bli utelukket å benytte seg av slik programvare. Resultatet kan bli forenklete metoder og/ eller forenklete modeller, som ikke vil gjengi reelle forhold særlig godt. Når dette er sagt, vil det alltid være en rekke begrensninger til enhver beregningsmetode, kompleks eller enkel (f.eks. vanskelig å anta vær- og føreforhold). Av den grunn kan enkle modeller eller metoder faktisk kunne gi en indikasjon som ikke er så gal. Det vil imidlertid være nødvendig å være bevisst på at resultatene i mye mindre grad gjengir virkeligheten, og bare vil gi visse indikasjoner. Dette kan imidlertid være nok i mange sammenhenger. Det påpekes at disse betraktningene gjelder for store system med et stort antall gridceller.

Det nevnes at konsernet AnsysFLUENT har tatt konsekvensen av at programvaren krever mye maskinkapasitet, og derfor tilbyr leie av maskinkapasitet for en kortere periode. Dette vil kunne gi muligheter for utvidet bruk i kommersiell sammenheng, da kostnadene enkelt kan knyttes opp mot et gitt prosjekt.

Suksessfaktorer for bruk av FLUENT, for beregninger av problemstillinger som i denne oppgaven, er å ha kjennskap til programvaren og de muligheter som ligger i effektivisering av arbeidsprosesser, samt tilgang på nødvendig maskinkapasitet. Når dette er tilfredsstillt anses programmet å egne seg meget bra for denne typen problemstillinger.

9.4. Vurdering av resultater – betraktninger knyttet til sammenligning av datasimulering og vindtunnelforsøk

Vurdering av resultater fra datasimuleringer er ikke alltid enkelt. I oppgaven hadde undertegnede vindtunnelresultater å vurdere mot. Uten dette hadde det ikke vært like enkelt å vurdere de forskjellige modellenes kvalitet. Det nevnes i denne sammenheng at vurderingen av resultatene er begrenset til de perspektivene som er analysert, samt at det kun er utført et begrenset antall beregninger.

Kvaliteten og troverdigheten på vurdering av resultater er en helt vanlig problemstilling ifm. prediktering av et gitt scenario. Dette er kanskje også den største fallgruven, nemlig å greie å vurdere oppnådde resultater. Det fins en del metoder, men i utgangspunktet er kunnskap og erfaring viktig for å kunne si noe helt generelt omkring resultatenes kvalitet. Undertegnede sitter således igjen med bl.a. følgende erfaring, etter gjennomføring av denne oppgaven, hva gjelder viktige kriterier for å oppnå et godt resultat ved bruk av CFD simuleringer; gridet må være av god kvalitet og høy oppløsning.

Gridoppløsningens effekt på resultatene har vist seg å være stor. Dette fremkommer klart ved validering av resultatene, der kvalitetsforskjellen på resultatene fra de forskjellige modellene som er bygget, er vesentlig. Gridoppløsningens effekt viser at det er mulig å gjenskape virkeligheten ganske bra, dersom oppløsningen er fin nok. Den negative effekten er at det er behov for mye maskinkraft når så store områder som det er snakk om i dette scenariet, skal behandles. Uansett har det vist seg at gridoppløsningen har vesentlig betydning på resultatene, og angis derfor som en viktig suksessfaktor.

Forskjellen i kvalitet på størst og lavest gridoppløsning er som nevnt vesentlig. Når det videre er nødvendig med høy oppløsning i spredningsområdet, er det naturlig å gjøre nærmere vurdering av størrelsen på "viktige område" for spredningen. Jo mindre "viktig område" kan være, jo mindre blir den totale størrelsen på modellen. I oppgaven ble "viktig område" definert som et volum på om lag 25x320x600 m (HxBxD) i et totalvolum på 300x500x600 m. I ettertid vurderes det at "viktig område" kunne vært redusert noe, spesielt i dybde og bredde, uten at kvaliteten nødvendigvis hadde blitt vesentlig dårligere. Denne vurderingen er gjort med bakgrunn i hvordan gassplumen formes (relativt begrenset område). Dersom et slikt grep hadde fungert ville modellstørrelsen (dvs. antall gridceller) kunne blitt redusert, og med det også beregningstiden.

Når det gjelder sammenligning av resultater, dvs. oppnådde resultater vurdert mot vindtunnelresultater, skal dette i utgangspunktet være direkte sammenlignbart. Bakgrunnen for dette er bl.a. at inndataene er like og konsistente i begge modellene. Dersom det hadde vært utendørs eksperimentelle forsøk, hadde usikkerheten vært en ganske annen, da bl.a. vindfeltet og oppdrift m.m., ville kunne variert mye over et gitt tidsrom. Ofte vil det i sånne tilfeller bli vurdert midlede verdier for inndataene, men noe usikkerhet vil det naturligvis være knyttet til inndataene. Uansett, i denne oppgaven var det vindtunnelresultater sammenligningen ble gjort mot, og forskjell i meteorologiske forhold skal i utgangspunktet være liten. Det er ikke gjort noen utvidet vurdering av mulig usikkerhet tilknyttet verken inndataene eller resultatene fra vindtunnelforsøkene.

I oppgaven er det benyttet flere forskjellige vurderingskriterier for vurdering av oppnådde resultater; radvis sammenligning av registrerte middelverdier i hvert monitorpunkt, sammenligning av maksimale middelverdi per rad og statistiske metoder. Statistiske metoder er godt egnet til overordnede vurderinger, men det er knyttet visse usikkerhetsmomenter til metodene som må ivaretas.

Bruk av statistiske metoder for validering av resultatene anses som en godt egnet metode for å oppnå én verdi for kvaliteten på modellene. Metodene er imidlertid grove, og gir ikke det hele og sanne bilde. Valg av metode er dessuten ikke så enkelt. I litteraturen, f.eks. Chang and Hanna (2003) og Carissimo, Jagger, Daish et al. (2001), står det en del om hvilke metoder som er robuste, etc., men lite om bruksområde. Undertegnede fikk anvisninger av FFI om hvilke metoder som burde benyttes. Uten denne anvisningen hadde valget blitt "litt skudd i mørke", noe som anses som uheldig, og gjør at metodene på mange måter er begrenset til brukere med utvidet kunnskap innen området (må ha spesiell kunnskap innen statistiske metoder).

Som gjennomgått i kap. 5 benyttes tre statistiske metoder; MRB, MRSE og FA2. Disse modellene er vurdert som robuste (bl.a. av Carissimo, Jagger, Daish et al. (2001)). Metodene er dessuten forholdsvis enkle i bruk, samt enkle å tolke. De vurderes imidlertid ikke nødvendigvis å gi det hele og sanne bilde. Bakgrunnen for denne vurderingen er at verdiene som oppnås for MRB og MRSE er en middelverdi for alle monitorpunktene. I utgangspunktet tar metodene høyde for plasseringen på en gitt registrert verdi, men det vil kunne bli en del avvik uten at det klart fremkommer av de beregnede verdiene. Undertegnede gjorde en test der referansedataene ble vurdert opp mot seg selv, bare speilvendt. Metodene viste seg å håndtere dette godt ved at MRB ble 0 (dvs. at midlet konsentrasjonsverdi er lik selv om verdiene er speilvendt av referanseverdien), mens beregnet verdi for MRSE ble ca 1,44 (MRSE har et intervall fra 0 til 4, der 0 er perfekt gjengivelse). Denne testen viste at modellen faktisk tar høyde for plasseringen av hver enkelt verdi på en forholdsvis god måte (MRSE verdien følger ikke samme trend som MRB ved at den ikke blir 0), men at utslaget nødvendigvis ikke blir vesentlig. Dette kan gjøre det litt vanskelig å gjøre en totalvurdering av resultatene bare med bakgrunn i verdiene MRB og MRSE. I testen ble MRB verdien 0, som man lett kan bli blendet av, ettersom det er en verdi for en "perfekt modell". Sammen med MRSE =1,44 blir modellen imidlertid ikke perfekt.

Bl.a. Chang and Hanna (2003) angir at det er nødvendig og meget nyttig å benytte andre vurderingsmetoder også, for å vurdere om den beregnede "kvalitetsverdien" kan vurderes å gi et riktig bilde av den gitte modells kvalitet. Det som angis, og som er benyttet her, er å plote datasettene/ resultatene, på forskjellig måte. I denne oppgaven er dette gjort ved å plote oppnådd verdi for hvert registreringspunkt i hver modell mot verdi i referansedataene. Plottene er videre gjort radvis for å illustrere forskjellene i konsentrasjonsmålinger mht. registreringspunktene på samme rad (dette gir et tverrsnitt av plumen mht. konsentrasjonsverdi). Denne øvelsen var meget verdifull, og spesielt verdifull ift. vurderingen av modellene som kom tilnærmet likt ut ved statistisk validering (FLUENT 3 og 4). Ved å foreta en slik enkel plott sammenligning vil eventuelle skjevheter i plumkonsentrasjonen ift. referansedataene, bli lett synlige. Vurderingene fra slike plott kan videre benyttes som kvalitativt input i den totale vurderingen av oppnådde resultater.

Et annet aspekt knyttet til de statistiske metodene, som vurderes som bra, er forholdet tilknyttet behandling av nullverdier/ tilnærmet nullverdier. Dette er verdier som gjerne registreres i ytterkant av plumen, der konsentrasjonene ofte vil være lave. I utgangspunktet håndterer de benyttede metodene slike verdier, men spørsmålet er om det er riktig å benytte slike verdier ved vurdering av kvalitet. Bakgrunn for denne

vurderingen er at verdiene i ytterkant av skyen kan få stor betydning for det totale resultatet. I denne sonen av skyen kan variasjonen være stor, uten at beregningen nødvendigvis er dårlig. Undertegnede vurderer det derfor som hensiktsmessig å benytte seg av en terskelverdi (grensejustering), som gjør at slike effekter vil bli dempet. Det nevnes imidlertid at en negativ effekt ved bruk av en slik terskelverdi på hele datasettet er at punkter som ligger midt inne i plumen, som i en dårlig modell har lav registrering, også justeres opp. På denne måten vil en slik modell kunne oppnå en totalt noe bedre kvalitet enn hva som faktisk er tilfelle. Ettersom det i oppgaven ikke er tatt noen spesiell høyde for hvilke monitorpunkter som skal justeres og hvilke som ikke skal justeres, anses modellene FLUENT 1, 2 og 5 å ha fått en høyere kvalitet etter grensejusteringen, enn om kun de punktene som lå i randsonen til plumen i vindtunnelforsøket hadde blitt justert (vindhunnelforsøket vil således være referansen for hvilke punkter som skal justeres). Denne effekten kan unngås dersom terskel verdien settes lavt nok, slik at den først og fremst ivaretar sonene der det er jevnt lave konsentrasjoner (som vil være randsonen).

Den "beste" modell, ift. nevnte vurderingskriterier for kvalitet, er vurdert å være FLUENT 3. Denne modellen må sies å være av bra kvalitet, og anses å gjengi vindhunnelforsøket bra. Dette gjenspeiles også ved vurdering av resultatene mot andre simuleringer av samme scenario (samme og andre programvarer). Modellen anses å gi et tilfredsstillende resultat også uten grensejustering (sett ift. f.eks. de verdier som vurderes som bra av Chang and Hanna (2003)).

Av resultatene ser man at spredningen langs bakken gir vesentlig riktigere verdier enn spredningen i høyden. Årsaken til dette vurderes bl.a. å kunne ha sammenheng med hvordan beregningsmodellen er satt opp. I forsøk utført av Sklavounos and Rigas (2004) er det konkludert med at turbulensmodellen som benyttes i oppgaven ($k-\omega$) er vist å kunne gi en viss underprediksjon (ift. eksperimentelle forsøk). Dette anses imidlertid som et noe usikkert punkt da FFI i utgangspunktet mener at denne turbulensmodellen er den mest aktuelle å bruke i denne typen scenarier (selv om de ikke har angitt noe vedr. over-/underprediksjon tilknyttet modellen). Det er også nevnt fra FFI at underprediksjonen spesielt i vertikal spredning, kan ha noe å gjøre med oppsettet av beregningsmodellene ift. ivaretagelse av diffusiv blanding (tar ikke tilstrekkelig høyde for tetthetsforskjellene ved oppsett av beregningsmodellen).

Validering av oppnådde resultater viser en klar kvalitetsforskjell mellom modeller med grovt grid og de med fint grid i "viktig område". FLUENT 1 (i likhet med FLUENT 5) er den modellen med grovest grid i denne regionen, og resultatene avviker vesentlig fra FLUENT 3, som har høyest oppløsning på gridet i denne regionen. Årsaken til dette er bl.a. at gridet er for grovt til å kunne gjengi tilfredsstillende resultater for endring av turbulens, m.m., i nærheten av bygninger og bakke. Dette skyldes bl.a. de store endringene i variablene som skjer i dette området, som store gridceller ikke vil kunne gjengi tilfredsstillende.

Valideringen viser totalt sett at CFD-modellering muliggjør veldig god ivaretagelse av inndataene, og kvaliteten av beregningene som gjøres vil i vesentlig grad avhenge av oppløsning på gridet i de områder der viktige forhold skjer (spesielt med tanke på turbulensgenerering). Behandling av usikkerheter tilknyttet inndataene vil imidlertid kunne være viktig, men er ofte dårlig opplyst og kan med det utgjøre en vesentlig feilkilde (f.eks. hvor mange kjøring er resultatene basert på; 1 eller 15? Kan resultatene komme av tilfeldige forhold knyttet til kun den ene kjøringen?). Vurdering og ivaretagelse av usikkerhet anses som en utfordring i enhver modellering, og må alltid behandles/ kommenteres for å gi resultatene nødvendig troverdighet.

10. KONKLUSJON

I denne oppgaven er det gjennomført en vurdering av muligheten for å gjenskape resultater fra eksperimentelle forsøk tilknyttet spredning av klogass på et industriområde. Vurderingen har inkludert følgende hovedoppgaver:

1. Bygging av geometrisk modell som inneholder eksakt lik geometri og topografi som benyttet i vindtunnelforsøket (referansescenariet).
2. Generering av volumgrid i geometrisk modell, der det bygges flere modeller med forskjellig gridstørrelse i området der spredningen skjer.
3. Beregning av spredning fra gitt utslipp over en bestemt tidsperiode.
4. Validering av resultater mot resultater fra vindtunnelforsøk.

Hovedkonklusjonen er at "virkeligheten" lar seg gjenskape forholdsvis godt. Det krever imidlertid mye arbeid og beregningstid. Det påpekes at resultatene som er oppnådd viser at det er til dels stort sprik mellom de forskjellige modellene som er bygget. Dette går direkte på volumgridets oppløsning, som har vist seg å ha stor betydning på resultatene.

Fra arbeidet med deloppgave 1 og 2 kan det konkluderes med følgende:

- Generering av geometri; bygninger, installasjoner, hjelpevolumer, etc., gjøres mer effektivt i et spesialisert CAD-program enn i GAMBIT. I denne oppgaven ble AutoCad benyttet, og dette effektiviserte denne deloppgaven vesentlig framfor bruk av GAMBIT.
- Gjengivelse av geometri, dvs. bygninger og installasjoner, er viktig for den totale kvaliteten. Det vurderes imidlertid at det kan være fornuftig å gjøre forenklinger i form, slik at geometrien blir enklere å bygge, samt enklere å gride. Det benyttede datasettet har en relativt kompleks geometri, som gjør at begge de to nevnte forholdene blir til dels meget arbeidsskrevende, samt vanskelig å jobbe med ved griding av volumene.
- Ved bygging av volumgeometri vil det, avhengig av størrelsen, være nødvendig å dele volumet opp i mindre delvolumer. Volumene benyttes som hjelp til generering av grid (dvs. å avgrense viktige områder og med det forenkle muligheten for generering av ønsket volumgrid). Dette er en enkel måte å skille mellom områder med forskjellige cellestørrelser og til å definere områder i volumet, som er mindre eller mer viktige enn andre. I oppgaven ble beregningsvolumet delt inn i 4 delvolumer, der hovedsaken var å avgrense området der spredningen ville skje/ det området som ville påvirke spredningen mest (turbulensgenerering, etc.). I dette området ble det definert at cellestørrelse var spesielt viktig, mens det i øvrige områder kunne benyttes et grovere grid.
- Ved utslipp av spesielt tung gass er gjengivelse av reell topografi viktig for spredningsforløpet. Topografiske forhold er dessuten generelt viktig for generering av turbulens, som er et viktig parameter i et hvert spredningsforløp. Ved utslipp av tung gass vil det imidlertid være en dimensjon til tilknyttet topografien, og det er hvordan gassen blir ledet som følge av topografiske endringer. Resultatene indikerer imidlertid at topografisk ivaretagelse ikke er like vesentlige i områder som er flate. Dette bør vurderes i hvert enkelt tilfelle, da arbeidstiden ift. geometri med topografisk overflate er vesentlig høyere enn en modell der overflaten består av en helt plan flate.
- Det kan konkluderes med at det må føres jevnlig kontroll med hvordan/ om topografiflatten endres når det gjøres endringer på den. Dersom slik kontroll ikke gjøres, kan det føre til at det skjer alvorlige deformasjoner av flaten, uten at det er kjent. Dette kan videre kunne påvirke sluttresultatet vesentlig. Det nevnes at sammenslåing av flere topografflater, som ikke er helt sammenfallende i sammenslåingspunktene, har vist seg å kunne føre til alvorlig deformasjon uten at programmet oppfatter det som en feil.

- Generering av volumgrid, i geometrien som genereres fra referansedataene, er en utfordring. I tillegg er det meget tidkrevende. Det kan konkluderes med at strukturert volumgrid ikke er egentlig for dette scenariet. Det er gjort utførlige forsøk på å få dette til, men slik referansedataene er gitt lar ikke dette seg gjøre. Ved til dels omfattende tilpasninger og forenklinger kan det muligens la seg gjøre å få generert et strukturert grid.
- For dette scenariet anbefales det at det benyttes en ustrukturert gridmodell, TGrid, eller en delvis ustrukturert modell, HexCore. TGrid er benyttet i denne oppgaven, og generering av volumgrid gjøres da forholdsvis raskt. Det er imidlertid enkelte forhold tilknyttet denne modellen som det er nødvendig å være oppmerksom på (spesielt cellevekst i et volum, der cellestørrelse skal vokse fra en størrelse til en annen).
- Forskjellen mellom et strukturert og et ustrukturert volumgrid vurderes som marginal, både hva gjelder kvalitet og beregningstid. Hovedforskjellen, som anses som meget viktig, er at det kan være enklere å ha god kontroll på gridet ved bruk av strukturert grid (jfr. problemet knyttet til cellevekst i TGrid). Kvalitetsmålene, dvs. målene GAMBIT oppgir dersom gridet som genereres er av dårlig kvalitet, er de samme for alle modellene.

Fra arbeidet med deloppgave 3 og 4 kan det konkluderes med følgende:

- FLUENT er enkel og lett i bruk for denne typen oppgaver. Oppsettet av scenariet krever få endringer av standardoppsettet i programmet, og de innstillinger som gjøres er enkle.
- For å bruke FLUENT effektivt er det nødvendig å bruke automatiserte oppgaver (i form av journalfiler) for gjentakende oppgaver, som f.eks. oppsett og definering av målepunkter.
- Resultater fra FLUENT gis på enkel form, som gir rask viderebehandling.
- Ved partisjonering av geometrisk modell ved bruk av flere prosessorer i beregningene, må det påregnes at standard metode i FLUENT kan gi beregningskræsje. Det anbefales derfor at partisjonering gjøres manuelt, samt at annen metode benyttes (f.eks. "Cartesian-Y-coordinate" som er benyttet med suksess i oppgaven).
- Valideringsmetodene (statistisk metode kalt MRB og MRSE, samt FA2) benyttet i denne oppgaven vurderes som egnet for kvalitetsvurdering av denne typen oppgaver. Det er imidlertid ikke like enkelt å vurdere den reelle kvaliteten direkte ut av beregnede valideringsverdier. Det er derfor nødvendig å bruke andre metoder i tillegg, som f.eks. enkle konsentrasjonsplott for illustrasjon av hvor godt resultatene er sammenfallende med referansedataene (som her var vurderingsreferansen).
- For å unngå at (tilfeldige) variasjoner i ytterkant av skyen skal føre til feil vurdering av en modells reelle kvalitet, da slike variasjoner ikke nødvendigvis sier noen om den totale kvaliteten på en modell, anbefales det at det benyttes en nedre terskelverdi for konsentrasjonsdata. Denne verdien benyttes for alle målte verdier som er lavere enn denne (gjelder for både referansedataene og predikterte resultater). Dette foreslås ikke benyttet ved plott av konsentrasjonsmålinger mot referansedata, da bildet kan forkludres av at enkelte punkter kan bli sammenfallende. I tillegg bør det vurderes å angi hvilke målepunkter som eventuelt skal være en del av en slik grensejustering (kan/ bør velges ut fra referansescenariet dersom slik benyttes til kvalitetsvurdering).
- Vurdering av resultater er en utfordring, og krever kunnskap og erfaring. I denne oppgaven var det eksperimentelle data som predikterte resultater kunne vurderes mot. Dette gjorde vurderingene enklere, samt førte til at undertegnede fikk mye lærerik kunnskap omkring enkelte forhold som har betydning for kvaliteten på resultatene.

Etter vurdering av resultater fra beregning av spredning i de 5 geometriske modellene som er bygget, kan det konkluderes med følgende:

- De beste resultatene som er oppnådd vurderes som gode (modell FLUENT 3). Denne vurderingen baserer seg på:
 - Resultat fra statistisk validering.
 - Plott av oppnådd resultat mot referansedata.
 - Vurdering av oppnådde resultater mot resultater oppnådd av andre som har utført samme oppgave (med lik eller annen programvare).
- Gridets oppløsning (dvs. gridcellenes størrelse), i området som er viktig for spredningen, har stor betydning. I denne oppgaven, der beste modell har celledimensjon tilsvarende 1 m i dette området, er det påvist stor forskjell i resultatene dersom celledimensjonen dobles (FLUENT 2).
- Alle resultater underpredikerer totalt sett i større eller mindre grad, men ikke nødvendigvis lokalt (hvis en ser på ett og ett monitorpunkt).
- Bruk av plan overflate i stedet for topografisk overflate, samt bruk av samme gridoppløsning som modellen som er vurdert som best, gir resultater som er forholdsvis bra (FLUENT 4). Nærmere vurdering av hver målte konsentrasjonsverdi viser at gjengivelsen virker å være god i flate områder, men avviker når det blir topografiske forskjeller.

Totalt sett tar oppbygning av geometrisk modell (inkl. generering av grid) desidert mest tid for operatør (vurdert ut fra benyttet programvare). Beregningene tar også veldig lang tid. Dette er en maskinbelastning, som også kan ha stor betydning ift. at annen bruk av maskinen hindres i lengre tid. Et annet aspekt er at det tar lang tid før resultatene er tilgjengelige (noe som i kommersiell sammenheng kan by på problemer ift. krav om leveranstid, m.m.). Dette betyr ikke at bruk av CFD simulering frarådes, men at det vil kreve en del av bl.a. av operatør, for å frembringe gode resultater på en effektiv måte.

Denne oppgaven er skrevet som hovedoppgave i et masterstudium. Total oppgavetid er to semestre (10 måneder). Av denne totaltiden, som inkluderer litteraturstudie og oppgaveskriving, tok bygging av geometri og generering av volumgrid over halve tiden. Dette illustrerer hvilken belastning denne delen av modelleringsoppgaven utgjør.

Det kan konkluderes med at CFD modellering er et verktøy som kan gjengi virkeligheten på en tilfredsstillende måte innenfor de begrensninger som legges i inngangsdataene (realistisk gjengivelse av geometri/ topografi, enkelte utvalgte værdi m.m.). Denne typen programmer er i utgangspunktet å regne som et verktøy for planlegging, og ikke som et verktøy for innsatsplanlegging, eller prediksjon av konsekvens, når en hendelse først har skjedd. Til det er programvaren for komplisert og arbeidskrevende.

Til slutt konkluderes det med at undertegnede gjennom arbeidet har tilegnet seg meget nyttig kunnskap innenfor fagområdet, og innenfor de benyttede programvarene. Benyttet referansescenario vurderes i denne sammenheng som en av faktorene for at dette er tilfelle (ikke på tross av, men på grunn av alle problemene som har oppstått som følge av referansedataenes kompleksitet).

11. FREMTIDIGE ARBEIDER

Som nevnt i oppgaven anses scenariet å være velegnet til testing av programvare og muligheter tilknyttet det. Gjennom arbeid med oppgaven har det dukket opp en rekke problemstillinger som det ikke har vært tid til å gå nærmere inn på, men som bør ses nærmere på. Dette er problemstillinger som i hovedsak er knyttet til programpakken FLUENT, der benyttet scenario anses som et godt scenario å bruke (da flere av problemstillingene er direkte knyttet opp mot utfordringer knyttet opp mot denne typen geometri og topografi). At det foreligger eksperimentelle data som kan brukes til sammenligning/ validering av resultater gjør dessuten kvalitetsvurderingen forholdsvis enkel og troverdig.

Under følger noen problemstillinger som er vurdert å egne seg for videre arbeid. Flere av problemstillingene anses, alene eller sammen, å være av et omfang som en ettårig masteroppgave.

Forslag til fremtidige arbeider:

- Vurdering av forskjellige gridmodeller mot hverandre, strukturert vs. ustrukturert, mht. vurdering av forskjell i:
 - resultatenes kvalitet ift. benyttet gridmodell,
 - tid benyttet til generering av de forskjellige volumgrid inkl. tid benyttet til eventuell tilpassing av geometri for å få generert en gitt type volumgrid (dette inkluderer også hvilke kvalitetsmessige endringer slik tilpasning/ forenkling gir på resultatene), og
 - beregningstid tilknyttet de forskjellige gridmodellene.

I en slik vurdering er det viktig å være klar over hvilke svakheter som er knyttet til hver enkelt gridmodell, slik at disse ivaretas på en riktig måte ved vurdering av kvalitet. Oppdagete svakheter ift. modellen TGrid er nevnt i denne rapporten, og forslag til løsning er også angitt.

- Vurdering av gridmodellen HexCore. Dette er en modell som benytter strukturert grid i det åpne volumet og ustrukturert grid langs volumets grenser. Bruk av en slik modell gjør at grid enkelt kan genereres i forholdsvis kompleks geometri, samt at det ofte ønskede strukturerte gridet benyttes i det aller meste av volumet.
- Vurdering av nødvendig størrelse på ”viktig område”. Jo mindre dette området trenger å være jo mindre blir omfanget på gridceller med høy oppløsning. Dette har en direkte innvirkning på beregningstiden, og dersom dette området kan gjøres mindre enn det som er benyttet i denne oppgaven vil beregningstiden gå ned. Det er imidlertid viktig å være klar over at konsekvensen kan være at området bør/ må gjøres større i en eller flere retninger for at kvaliteten skal bli bra.
- Vurdering av eventuelle kvalitetsmessige endringer som følge av (vesentlige) forenklinger i geometri og topografi. Spørsmålet er om geometri kan gjøres enklere, og med det forenkle gridgenerering, uten at resultatenes kvalitet forringes. Er det dessuten mulig å ivareta topografisk innvirkning på resultatene gjennom bruk av plane flater (flatt eller elevvert)?
- Test forskjellige turbulensmodeller. I denne oppgaven er det kun benyttet en type modell, $k-\omega$. Da det i litteraturen (Sklavounos and Rigas (2004)) er angitt at modellen kan gi en underprediksjon, er det av interesse å se om bruk av annen turbulensmodell har noen positiv eller negativ innvirkning på resultatene.

12. REFERANSELISTE

- AMSGlossary (2007). Glossary of Meteorology, American Meteorological Society
<http://amsglossary.allenpress.com>.
- ANSYS-Fluent (2007). ANSYS Fluent homepage (www.fluent.se).
- Autodesk (2007). AutoCAD 2007. Autodesk: CAD program, se www.autodesk.no.
- Britter, R. E. (1989). "Atmospheric Dispersion of Dense Gases." Annual Review of Fluid Mechanics **21**: 317-344.
- Carissimo, B., Jagger, S. F., Daish, N. C., Halford, A., Selmer-Olsen, S., Raiikonen, K., Perroux, J. M. and Würtz, J. (2001). "The SMEDIS database and validation exercise." Int. J. Environment and Pollution **16**: 614-629.
- Chang, J. C. and Hanna, S. R. (2003). "Air quality model performance evaluation." Meteorology and Atmospheric Physics **87**: 167-196.
- Cowan, I. R. (1996). Project EMU: Stage A Summary. Surrey, UK, EnFlo Research Center, Dep. of Mechanical Engineering, University of Surrey, Guildford, Surrey GU2 5XH, UK.
- Ertesvåg, I. S. (1999). Turbulent strømming og forbrenning, TAPIR akademisk forlag.
- FLUENT-Inc. (2006). FLUENT 6.3 User's Guide. Lastet ned fra: www.fluentusers.com, Fluent Inc.
- FLUENT-Inc. _02 (2006). GAMBIT Modeling Guide. Lastet ned fra: www.fluentusers.com, FLUENT Inc.
- FLUENT (2004). Introductory GAMBIT Training, GAMBIT 2.2.
- FLUENT.6.3.26 (2006/07). FLUENT Inc.: CFD-programvare, les mer på: www.fluent.se.
- GAMBIT.2.3.16 (2006). Fluent Inc.: Programvare for bygging av geometri og generering av grid/mesh. Se: www.fluent.se.
- Hall, R. C. (1995/96). Atmospheric Dispersion Modelling, Annex B. M. A. Mayall, National Radiological Protection Board: 69.
- Hanna, S. R. and Britter, R. E. (2002). Wind flow and vapor cloud dispersion at industrial and urban sites. New York, Center for Chemical Process Safety of the American Institute of Chemical Engineers.
- Hanna, S. R., Drivas, P.J. and J.C. Chang (1996). Guidelines for use of vapor cloud dispersion models. New York, American Institute of Chemical Engineers.
- Hosker, R. P. (ukjent år). "Flow around Isolated Structures and Building Clusters: A Review." Ukjent Ukjent: 1671-1692.
- Jagger, S. F., Carissimo, B. and Daish, N. (1998). Definition of Parameters for Model Runs, WP4, HSL, EdF og CERC: 1-31.

- Mannan, S. (2005). *Lee's loss prevention in the process industries : hazard identification, assessment and control*. Amsterdam, Elsevier Butterworth-Heinemann.
- McBride, M. A., Reeves, A. B., Vanderheyden, M. D., Lea, C. J. and Zhou, X. X. (2001). "Use of advanced techniques to model the dispersion of chlorine in complex terrain." Trans IChemE **79**(Part B): 89-102.
- Shaw, C. T. (1992). Using Computational Fluid Dynamics.
- Sklavounos, S. and Rigas, F. (2004). "Validation of turbulence models in heavy gas dispersion over obstacles." Journal of Hazardous Materials **A108 2004**: 9-20.
- Turner, D. B. (1994). Workbook of atmospheric dispersion estimates : an introduction to dispersion modeling. Boca Raton, Lewis Publishers.

13. VEDLEGG

Med denne rapporten følger ingen vedlegg i papirformat. For oppdragsgiver er det imidlertid satt sammen et elektronisk arkiv bestående av følgende dokumenter:

- Inngangsdata benyttet i rapporten.
- AutoCad-filer med geometri benyttet i oppgaven.
- Alle filer fra GAMBIT og FLUENT tilhørende de modeller som er bygget og beregnet i denne oppgaven.
- Alle behandlede resultater fra gjennomførte beregninger.
- Digital referanselitteratur knyttet til dette spesifikke scenariet (EMU).

Pga. datamengden (ca 200 GB) blir alt dette materialet systematisk plassert på undertegneds område på serveren (gg3) hos FFI.

Henvendelse vedr. vedleggene kan rettes til FFI v/ Thor Gjesdal (thor.gjesdal@ffi.no).

