

Analýza výpočtových metod pro únik a disperzi zkapalněného hořlavého plynu

Mária Skřínská^{1*}, Jan Skřínský², Vilém Sluka¹, Martina Pražáková¹, Stanislav Malý¹, Lenka Frišhansová¹, Josef Senčík¹

¹ **Výzkumný ústav bezpečnosti práce, v.v.i., Jeruzalémská 9, 116 52 Praha 1, skrinska@vubp-praha.cz**

² **Výzkumné energetické centrum, VŠB- TUO, 17. listopadu 15/2172, 708 33 Ostrava Poruba**

Souhrn

Látky mohou obecně unikat ze zařízení jako plyny, chladem nebo tlakem zkapalněné plyny nebo jako kapaliny. Protože každá taková látka může mít více nebezpečných vlastností, výsledné působení může být značně komplexní. Proto skutečné závažné havárie v chemickém průmyslu představují ve větší či menší míře nejrozumnější kombinace těchto základních situací a každá konkrétní havárie je vždy poněkud jiná a odlišuje se od dosud známých havárií. V prezentovaném příspěvku je prezentován možný způsob prerekvizity k modelování úniku a disperze zkapalněného zemního plynu, tedy negativně vzlínavého plynu, pro definovaný havarijní scénář.

1. Úvod

Výběr modelu pro únik kapaliny nebo plynu závisí na fázi (kapalná, plynná, dvoufázová) a podmínkách unikající látky. Únik kapaliny se standardně popisuje Bernoulliho rovnicí. Pro únik plynu se používají složitější modely, přičemž se musí brát v úvahu rozdíl mezi únikem plynu supersonickou rychlostí (při vysokém tlaku) a subsonickou rychlostí (při nízkém tlaku). Specifickými případy jsou úniky látky v plynné fázi z pojišťovacích ventilů a dvoufázové úniky. Pro modely úniku jsou jako vstupy obvykle potřebné podmínky, které jsou vně a uvnitř zařízení (např. teplota, tlak) a též charakteristiky látky. Požadovány jsou také velikost, tvar a umístění únikového otvoru. Tato data se odvodí přímo z provozních podmínek zařízení a z úvah spojených se scénářem dané havárie. Výstupem modelů jsou pak charakteristiky, které zahrnují (1) vyteklé množství nebo hmotnostní rychlost úniku (podkritická, nadkritická rychlost), (2) trvání úniku (jednorázový, kontinuální, časově omezený), (3) podmínky unikající látky (kapalina, plyn, mžikově se odpařující látka, dvoufázový výtok) [1]. Pod pojmem těžký plyn se označuje plyn, který má vyšší molekulovou hmotnost než vzduch ($28,96 \text{ g.mol}^{-1}$), anebo se nachází ve stavu, kdy má oproti vzduchu významně vyšší hustotu ($1,29 \text{ kg.m}^{-3}$). Při svém úniku do atmosféry tyto plyny za určitých okolností vytvářejí oblaky o relativní hustotě vyšší než je hustota okolního vzduchu, což vede k jejich klesání k zemskému povrchu. Plynná látka po úniku do atmosféry vytváří oblak, který je následně rozptýlován ve směru vanutí větru. Existují tři hlavní mechanismy rozptýlu a to (1) vznášivý rozptyl, (2) rozptyl neutrálního plynu, (3) rozptyl těžkého plynu nebo směsí těžších než vzduch. Modely pro fyzikální popis rozptýlu plynu v atmosféře je možné, rozdělit podle: (I) chování vytvořeného oblaku (modely pro vznášivý rozptyl, modely pro rozptyl těžkého plynu, turbulentní modely), (II) trvání úniku (modely pro okamžitý únik plynu, modely pro kontinuální únik plynu), (III) složitosti modelování (jednoduché „box modely“, CFD modely) [1]. Mezi nejpoužívanější modely patří výpočet koncentrace v bodě o souřadnicích x, y, z pro kontinuální a okamžitý únik [2].

2. Havarijní scénář

LNG (zkapalněný zemní plyn) o hustotě $425,6 \text{ kg/m}^3$ ($1,76 \text{ kg/m}^3$ při bodu varu -162°C) uniká z cisterny kruhovým otvorem 27 mm v horní části cisterny za podmínek 25°C a 4 bar přetlaku (5 bar abs.). Poměr tepelných kapacit $k_{\text{LNG}} = 1,31$. Doba trvání výtoku je 174 s. Při havárii vane vítr $10,9 \text{ m/s}$ (měřeno 10 m nad povrchem). Jaká je vzdálenost ve směru vanutí větru, kdy koncentrace par ve vzduchu dosáhne

úrovně dolní meze výbušnosti DMV = 5.0 obj. %, předpokládáme-li, že k úniku dojde za standardních atmosférických podmínek, tj. teplota 298 K, tlak 101,325 hPa?

Tabulka 1: Hodnoty vstupních parametrů pro model úniku a rozptylu (v jednotkách SI)

	Rovnice	Parametr	Hodnota	Jednotka
Únik	1,2	P_2	$1,01325 \cdot 10^5$	$\text{kg/m}^2 \cdot \text{s}^2$
	3,5	P_1	$5,00 \cdot 10^5$	$\text{kg/m}^2 \cdot \text{s}^2$
	3,5	k	1,31	-
	4	D	$27 \cdot 10^{-3}$	m
	5	C_D	0,85	-
	5	M	19,5	g/mol
	5	R	$8314 \cdot 10^{-3}$	$\text{m}^3/\text{mol} \cdot \text{K}$
	5	T_1	298	K
Rozptyl	6	ρ	425,6	kg/m^3
	6,7	ρ_0	1,76	kg/m^3
	7	g	9,81	m/s^2
	7	ρ_a	1,224	kg/m^3
	8,9,10,12,14	u	10,9	m/s
	8	Rd	174	s

2.1 Model úniku

Kroky pro určení výtokové rychlosti jsou popsány v rovnicích 1-3. Před začátkem výpočtu je potřeba určit fázi výtoku (tlak par zkapalněného LNG, [Pa]) a výtokový režim (veličina škrťací tlak, [Pa]).

V **1. kroku** se určí **fáze výtoku z okrajové podmínky pro výtok páry kapaliny**:

$$P_2 \leq P_l \quad (1)$$

Jelikož okolní tlak $P_2 = 1,01325$ bar je nižší než tlak par zkapalněného zemního plynu $P_l = 5$ bar abs, látka vytéká jako pára, proto je třeba použít **výraz pro výtok plynu/páry kapaliny**.

Ve **2. kroku** se určí **výtokový režim**, tj. zda se jedná o výtok sonický nebo subsonický. **Okrajová podmínka pro sonický výtok plynu/páry kapaliny**:

$$P_2 \leq P_s \quad (2)$$

Škrťací tlak, P_s , se určí ze vztahu:

$$\frac{P_s}{P_1} = \left(\frac{2}{k+1} \right)^{k/(k-1)} \quad (3)$$

kde P_s je škrťací tlak [bar]

P_1 je tlak na vnitřní straně otvoru [bar]

k je poměr tepelných kapacit plynu, C_p/C_v [-]

Po dosazení hodnot vstupních parametrů z tabulky 1 je hodnota škrťacího tlaku $P_s = 2,719$ bar. Jelikož okolní tlak $P_2 = 1,01325$ bar je nižší než škrťací tlak P_s , dojde k **sonickému výtoku plynu otvorem**.

Ve **3. kroku** se určí průřez kruhového výtokového otvoru:

$$A = \frac{\pi D^2}{4} \quad (4)$$

kde A je průřez otvoru [m^2]

D je průměr otvoru [m]

Ve **4. kroku** se určí výtoková rychlost využitím vztahu pro hmotnostní sonický (vý)tok plynu/páry kapaliny otvorem o průřezu A :

$$\dot{m}_s = C_D \cdot A \cdot P_1 \sqrt{\frac{k M}{R T_1} \left(\frac{2}{k+1} \right)^{(k+1)/(k-1)}} \quad (5)$$

kde $\dot{m}_s$ je hmotnostní tok plynu/páry otvorem [kg / s]

C_D je výtokový koeficient [-]

A je průřez otvoru [m^2]

P_1 je tlak na vnitřní straně otvoru [bar]

k je poměr tepelných kapacit plynu, C_p/C_v [-]

M je molekulová hmotnost plynu [g / mol]

R je univerzální konstanta ideálního plynu [$\text{m}^3 / \text{kmol} \cdot \text{K}$]

T_1 je počáteční teplota plynu na vnitřní straně otvoru [K]

2.2 Model rozptylu

V **5. kroku** se určí objemová rychlost výtoku par:

$$q_o = \frac{v \cdot \rho}{\rho_o} \quad (6)$$

kde q_o je objemová rychlost výtoku unikajícího materiálu [m^3 / s]

v je rychlost výtoku kapaliny [m^3 / s]

ρ je hustota materiálu před únikem [kg / m^3]

ρ_o je počáteční hustota unikajícího materiálu [kg / m^3]

V **6. kroku**, jelikož se jedná o rozptyl plynu těžšího než vzduch, je třeba posoudit použitelnost navrženého modelu podle Britter-McQuaid (kritérium počáteční vzestupnost materiálu, m/s^2). Počáteční vzestupnost je definována vztahem:

$$g_o = \frac{g \cdot (\rho_o - \rho_a)}{\rho_a} \quad (7)$$

kde g_o je počáteční faktor vzestupnosti [m / s^2]

g je gravitační zrychlení (gravitační konstanta) [m / s^2]

ρ_o je počáteční hustota unikajícího materiálu [kg / m^3]

ρ_a je hustota okolního vzduchu [kg / m^3]

V **7. kroku** se určí, zda se má uvažovat výtok **jednorázový** nebo **kontinuální**. Pro tento případ se použije níže uvedené kritérium, k , jehož hodnota pro **kontinuální** únik musí být větší nebo rovno 2,5:

$$\frac{u \cdot R_d}{x} \geq 2,5 \quad (8)$$

kde u je rychlost vanutí větru [m / s]
 R_d je doba trvání úniku [s]
 x je vzdálenost ve směru vanutí větru [m]

tedy po dosazení vstupních parametrů z tabulky 1 vyplývá z této podmínky, že pro **kontinuální únik** musí být $x \leq 758,6$ m. Konečná vzdálenost tedy musí být kratší nebo max. rovna této mezi.

V **8. kroku** se zkontroluje použití modelu pro oblak těžkého plynu. Pro tento případ se užijí následující dva vztahy definované rovnicemi 9-10. V závislosti na typu úniku je to charakteristický rozměr zdroje, tento vztah má pro kontinuální úniky tvar:

$$D_c = \left(\frac{q_o}{u} \right)^{1/2} \quad (9)$$

kde D_c je charakteristický rozměr zdroje úniku těžkého plynu [m]
 q_o je počáteční objemový výtok disperze těžkého plynu [m³ / s]
 u je rychlost vanutí větru [m / s]

Výsledku výpočtu z rovnice 9 je dosazen do druhého vztahu, který představuje kritérium pro **dostatečně těžký oblak**, který pro kontinuální výtok::

$$\left(\frac{g_o \cdot q_o}{u^3 \cdot D_c} \right)^{1/3} \geq 0,15 \quad (10)$$

kde g_o je počáteční faktor vzestupnosti [m / s²]
 D_c je charakteristický rozměr zdroje úniku těžkého plynu [m]
 q_o je počáteční objemový výtok disperze těžkého plynu [m³ / s]
 u je rychlost vanutí větru [m / s]

Dosazením vstupních parametrů z tabulky 1 do rovnic 9 a 10, je vypočítaná hodnota $D_c = 2.2589$ m a výrazu z rovnice 10 = 0,4335. Z výsledků výpočtů je zřejmé, že se musí použít model pro těžký oblak.

V **9. kroku** se vyšetří koncentrace pro **neisothermální únik páry** materiálu. Je-li původní koncentrace C_o , pak je efektivní koncentrace, C_m , dána vztahem:

$$C_m = \frac{C_o}{C_o + (1 - C^*) \cdot (T_a / T_o)} \quad (11)$$

kde T_a je okolní teplota [T]
 T_o je teplota zdroje úniku materiálu [T]

Pro požadovanou koncentraci DMV = 0,05 (v objemových zlomcích) se vypočte hodnota $C_m = 0,019227$.

V **10. kroku** se vypočtou hodnoty parametrů, α a β , definovaných rovnicemi 12-13, používaných k aproximaci Britter-McQuaidovy rozměrové korelace pro disperze vleček (plumes) těžkých oblaků.

Jelikož počáteční koncentrace plynu C_0 je v podstatě čistý LNG při teplotě vlastního bodu varu, tedy $C_0 = 1$, koncentrační poměr $C_m/C_0 = 0,019227 / 1 = 0,019227 \approx 0,02$ a je možno vypočítat koeficienty α a β pro které platí, že pokud je $-0,69 < \alpha < -0,31$, pak:

$$\alpha = \log_{10} \left(\frac{g_o^2 \cdot q_o}{u^5} \right)^{1/5} \quad (12)$$

$$\beta = 0,45\alpha + 2,39 \quad (13)$$

$$\beta = \log_{10} \left[\frac{x}{(q_0 / u)^{1/2}} \right] \quad (14)$$

Dosažením vstupních parametrů do rovnic 12-13 je hodnota $\alpha = -0,4352$ a $\beta = 2,19416$. Vyjádřením x z rovnice 14 je pro dosažení DMV = 0.05 obj. % vypočtena vzdálenost $x = 353$ m po směru vanutí větru. Pro DMV = 0.05 obj. % byla experimentem dle [3] stanovena vzdálenost 200 m, při které bylo dosaženo DMV. Gaussův model vlečky (plume) dává při stejném zadání pro nejhorší podmínky (třída stability F, rychlost vanutí větru 2 m/s) vzdálenost 13 km.

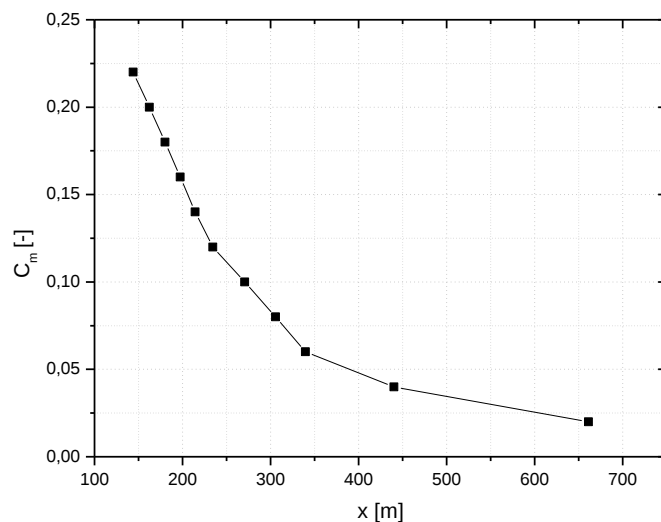
3. Výsledky a analýza

Vypočítané hodnoty výstupních parametrů: škrťací tlak, průřez otvoru, hmotnostní tok plynu/páry otvorem, objemová rychlost výtoku unikajícího materiálu, počáteční faktor vzestupnosti, charakteristický rozměr zdroje úniku těžkého plynu, efektivní koncentrace a koeficienty α a β rozměrové korelace pro disperze vleček (plumes) těžkých oblaků jsou uvedeny v tabulce č. 2.

Tabulka 2: Vypočítané hodnoty výstupních parametrů (v jednotkách SI)

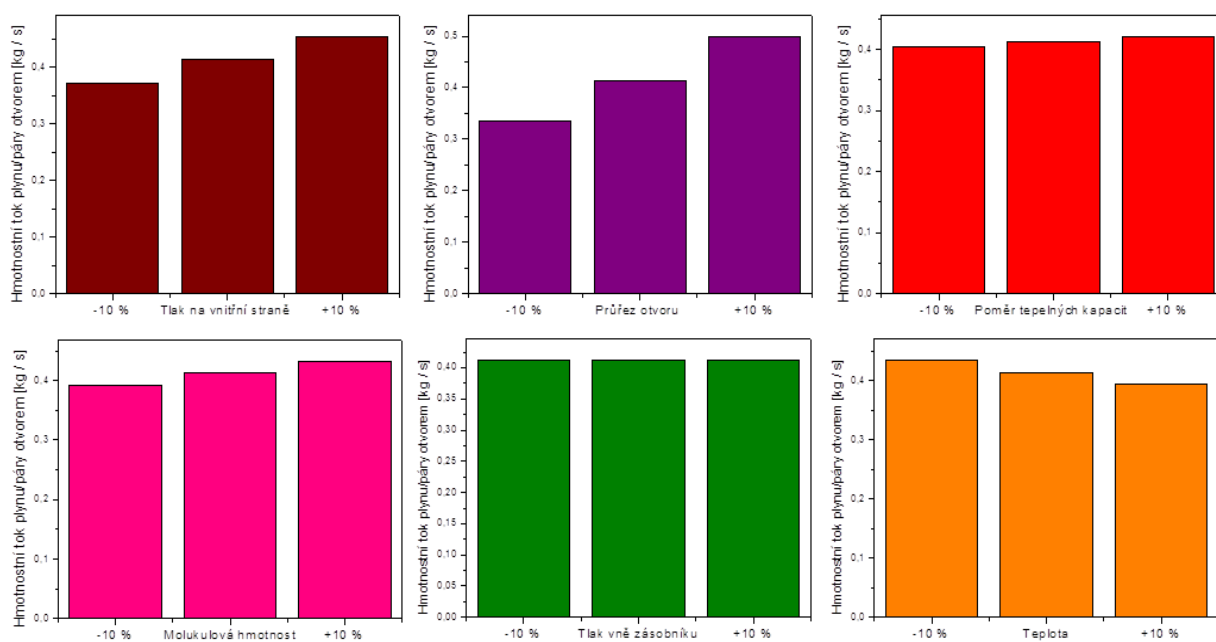
	Rovnice	Parametr	Hodnota	Jednotka
Únik	2	P_s	$2,719 \cdot 10^5$	$\text{kg/m}^2 \cdot \text{s}^2$
	4	A	0,000572	m^2
	5	m_s	0,23	m^3/s
Rozptyl	6	q_o	55,618	m^3/s
	7	g_o	4,296	m/s^2
	9	D_c	2,2589	m
	11	C_m	0,019227	-
	12	α	-0,4352	-
	13,14	β	2,19416	-

Vypočítané hodnoty vzdálenosti, x , ve směru větru pro různé koncentrace, cm. jsou uvedeny na obrázku č. 1. Vypočítané hodnoty výstupních parametrů se na obrázku č. 1 vztahují k bodu o souřadnicích $[x = 353; y = 0,05]$.

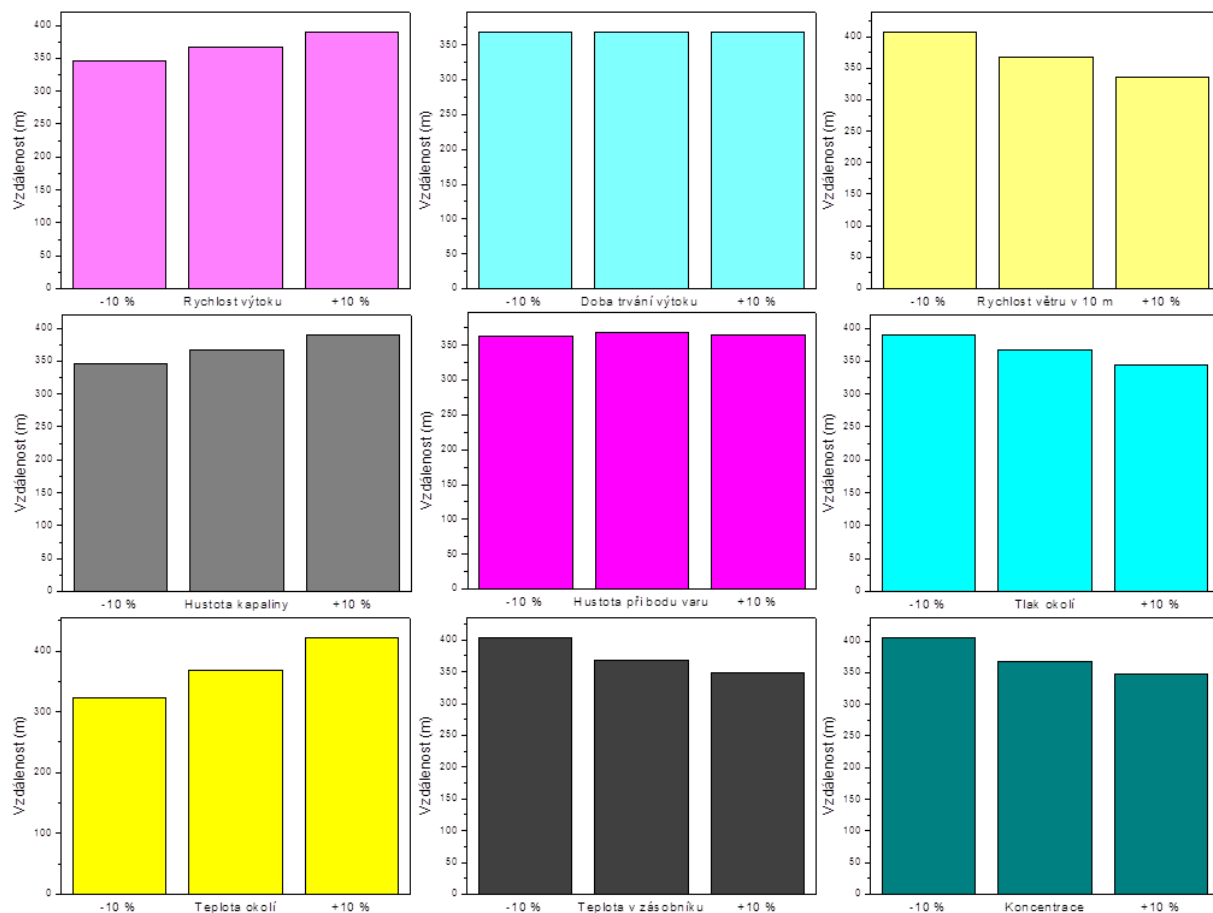


Obrázek 1: Vypočítané hodnoty vzdálenosti, x , ve směru větru pro různé koncentrace, c_m .

Na obrázcích č. 2-3 je formou grafů provedena (citlivostní) analýza pro vstupní parametry pro použité modely úniku a rozptylu. Model úniku se jeví být nejcitlivější na vnitřní tlak a velikost otvoru. Modelu rozptylu se jeví být nejcitlivější na teplotu okolí a vnitřní teplotu.



Obrázek 2 Citlivostní analýza vstupních parametrů modelu úniku.



Obrázek 3 Citlivostní analýza vstupních parametrů modelu rozptylu.

Závěr

V prezentovaném příspěvku je zjednodušeně popsán a na konkrétním havarijním scénáři úniku LNG z cisterny názorně ukázán možný způsob výpočtu úniku a disperze zkapalněného zemního plynu Britter – McQuaid modelem. V příspěvku jsou přehledně popsány výsledky jednotlivých kroků výpočtu ke snadnému ověření výpočtu čtenářem.

Výsledek výpočtu je porovnán s výsledkem experimentálním a s výsledkem aplikace modelu úniku v kombinaci s Gaussovým modelem rozptylu, který je v praxi často mylně používán k modelování rozptylu zkapalněných hořlavých plynů. Model rozptylu těžkého oblaku poskytuje mnohem realističtější výsledky. V závěru jsou jednotlivé vstupní parametry obou modelů analyzovány s ohledem na citlivost výstupního parametru (hmotnostní tok plynu otvorem pro model úniku a vzdálenost k dosažení DMV ve směru vanutí větru).

V budoucí studii přistoupíme k optimalizaci modelu využitím výsledků citlivostní analýzy, zobecnění modelu a jeho aplikaci pro další zkapalněné hořlavé plyny. Cílem budoucí studie pak bude porovnání výsledků modelu s výsledky výpočetních modelů implementovaných v software ALOHA (zástupce freeware) a EFFECTS (zástupce komerčních programů).

Poděkování

J.S. chce poděkovat za finanční podporu projektu „Inovace pro efektivitu a životní prostředí - Growth“, identifikační kód LO1403 pod MŠMT v rámci programu NPU I.

Literatura

1. Skřehot P. a kolektiv: Prevence nehod a havárií. 2. díl: Mimořádné události a prevence nežádoucích následků. Praha, Výzkumný ústav bezpečnosti práce a T-SOFT, 2009, 1. vydání, 595 s. ISBN 978-80-86973-73-9.
2. CCPS, Guidelines for Chemical Process Quantitative Risk Analysis, 2nd Edition. 2000, 748 pages. ISBN 978-0-8169-0720-5
3. Hanna, S. R., J. C. Chang, and D. G. Strimaitis (1993). "Hazardous Gas Model Evaluations With Field Observations" Atmospheric Environment, Vol. 27A, No. 15, pp. 2265-85.