

Příjemce:

MV-GŘ HZS ČR -Technický ústav požární ochrany

VŠCHT Praha, Fakulta chemicko-inženýrská

Poskytovatel: Česká republika - Ministerstvo vnitra

Projekt s názvem:

**Průběh a důsledky havarijního úniku CNG z osobních automobilů  
s identifikačním kódem VI20172019077**

Název předkládaného výsledku:

**Matematické modelování úniku CNG z tlakových  
zásobníků osobních automobilů přes  
přetlakové zařízení**

Typ výsledku dle UV č. 837/2017	Evidenční číslo (příjemce)	Rok vzniku
<b>(N<sub>metC</sub>)</b> Metodika certifikovaná oprávněným orgánem	<b>567/2020</b>	<b>2019</b>
ISBN-ISSN	Webový odkaz na výsledek	Kde a kdy publikováno
	<a href="https://www.hzscr.cz/clanek/menu-vyzkum-a-vyvoj-vyzkumne-projekty">https://www.hzscr.cz/clanek/menu-vyzkum-a-vyvoj-vyzkumne-projekty</a>	

**Anotace výsledku:**

Metodika se snaží podpořit využití matematických modelů a zejména definuje nároky na správnou praxi při jejich použití. Hlavním cílem metodiky je poskytnout jasný a věcný rozbor možností matematického modelování úniku stlačeného zemního plynu z osobních automobilů a poskytnout konkrétní doporučení nastavení, specifik a možností modelů pro jednotlivé metody a scénáře. Je popsána funkce přetlakového zařízení, chování CNG systému, dynamika proudění plynu při výtoku. Metodika definuje cíle a veličiny, které je možné matematickým modelem získat. Matematický problém výtoku plynu je rozdělen do čtyř samostatných úloh. Pro každou úlohu jsou definovány hlavní cíle výpočtu a konkrétní doporučení pro čtyři CFD numerické řešiče. Na příkladech jsou stručně ukázány možné výstupy CFD modelu. Uplatnění nachází metodika ve všech oblastech, kde je třeba provádět posouzení rizika spojeného s únikem plynu z vozidel s pohonem na zemní plyn, zejména pak v oblasti projektování požární bezpečnosti staveb.

**Řešitelský tým:**

**Ing. Jan Karl**

**Ing. Lucie Hasalová, Ph.D.**

**Doc. Ing. Milan Jahoda Csc**

**Ing. Václav Vystrčil**

**Ing. Jiří Ira**

# MINISTERSTVO VNITRA

Generální ředitelství Hasičského záchranného sboru České republiky  
Kloknerova 26, pošt. příhr. 69, 148 01 PRAHA 414

---

Podle § 7 odst. 5 a v návaznosti na § 7 odst. 2 až 4 zákona č. 239/2000 Sb.,  
o integrovaném záchranném systému a změně některých zákonů ve znění  
pozdějších předpisů a podle § 26 odst. 1 a § 24 odst. 1 zákona č. 133/1985  
Sb., o požární ochraně ve znění pozdějších předpisů  
**je vydáno**

## OSVĚDČENÍ O CERTIFIKACI METODIKY

**Číslo : CERO 8/2019**

**Název metodiky:**

**Matematické modelování úniku CNG z tlakových zásobníků osobních  
automobilů přes přetlakové bezpečnostní zařízení**

**Dedikace**

**VI20172019077**

**Zpracovatel metodiky:**

**Ing. Lucie Hasalová, Ph.D.**

**Ing. Václav Vystrčil**

**doc. Dr. Ing. Milan Jahoda**

**Ing. Jiří Ira**

V Praze dne 17.9.2019



**plk. Ing. Daniel Miklós, MPA**  
náměstek generálního ředitele HZS ČR  
pro prevenci a civilní nouzovou připravenost





**VYSOKÁ ŠKOLA  
CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ  
V PRAZE**



## **MATEMATICKÉ MODELOVÁNÍ ÚNIKU CNG Z TLAKOVÝCH ZÁSOBNÍKŮ OSOBNÍCH AUTOMOBILŮ PŘES PŘETLAKOVÉ BEZPEČNOSTNÍ ZAŘÍZENÍ**

Verze 2

Zpracovali:	
MV-GŘ HZS ČR Technický ústav požární ochrany	Ing. Lucie Hasalová, Ph.D. Ing. Václav Vystrčil
Vysoká škola chemicko-technologická v Praze, Fakulta chemického inženýrství	Doc. Dr. Ing. Milan Jahoda Ing. Jiří Ira

Projekt:	Průběh a důsledky havarijního úniku CNG z osobních automobilů
Identifikační kód:	VI20172019077
Poskytovatel:	Ministerstvo vnitra České republiky

# OBSAH

1. Cíle a uplatnění metodiky .....	1
2. Struktura metodiky .....	1
3. Termíny, definice a seznam zkratk.....	1
4. Úvod do problematiky.....	2
4.1. Vlastnosti zemního plynu.....	2
4.2. Popis CNG palivového systému v osobních automobilech .....	2
4.3. Jak/kudy může dojít k úniku CNG ze systému.....	3
4.4. Přetlakové zařízení spouštěné teplotou.....	3
4.5. Modelová situace - příklad.....	4
5. Výtok plynu – teorie.....	5
6. Matematické modelování výtoku plynu.....	7
6.1. Model výtokové rychlosti a hmotnostní tok plynu.....	7
6.2. Model chování vzniklého proudění.....	7
7. Isoentropické modely.....	8
7.1. Teorie.....	8
7.2. Neustálený výtok .....	9
7.3. Příklad .....	10
7.4. Závěr .....	12
8. CFD .....	13
8.1. Teoretický úvod.....	13
8.2. Numerické řešiče .....	13
8.3. Základní kroky při řešení CFD úlohy.....	14
8.3.1. Přípravná část.....	14
8.3.2. Výpočetní část.....	16
8.3.3. Analytická část .....	18
9. Modelování výtoku plynu pomocí CFD .....	18
9.1. Obecné komentáře .....	18
9.2. Proudění v bezprostřední blízkosti výtokového otvoru – neomezený výtok.....	20
9.2.1. Fluent .....	21
9.2.2. CFX .....	21
9.2.3. OpenFoam .....	21
9.2.4. FLACS .....	21
9.2.5. Příklad.....	22
9.3. Nadkritické proudění pod vozidlem a v bezprostředním okolí – omezený výtok.....	24
9.3.1. Fluent .....	24
9.3.2. CFX .....	24
9.3.3. OpenFoam .....	25
9.3.4. FLACS .....	25
9.3.5. Příklad.....	25
9.4. Ekvivalentní tok .....	26
9.5. Disperze plynu do okolí v podkritickém režimu proudění .....	26
9.5.1. Fluent .....	26

9.5.2.	CFX .....	27
9.5.3.	OpenFoam .....	27
9.5.4.	FLACS .....	27
9.5.5.	Příklad.....	27
9.6.	Zahoření plynu.....	29
9.6.1.	Cíle výpočtu .....	29
9.6.2.	Fluent .....	29
9.6.3.	CFX .....	29
9.6.4.	OpenFoam.....	30
9.6.5.	FLACS .....	30
10.	Literatura.....	31
11.	Seznam obrázků.....	31

## ERRATA k verzi 1

Na straně 10/32

$$\Delta\rho_{i+1} = N \frac{\dot{m}_i}{V} \Delta t \text{ bylo nahrazeno } \Delta\rho_{i+1} = \frac{\dot{m}_i}{V} \Delta t ,$$

$$\Delta T_{i+1} = \frac{p_i}{c_p \rho_i^2} \Delta\rho_{i+1} \text{ bylo nahrazeno } \Delta T_{i+1} = \frac{p_i}{c_v \rho_i^2} \Delta\rho_{i+1}$$

$$p_{i+1} = \rho_i \frac{R T_{i+1}}{M} \text{ bylo nahrazeno } p_{i+1} = \rho_{i+1} \frac{R T_{i+1}}{M}$$

## 1. Cíle a uplatnění metodiky

Hlavním cílem metodiky je poskytnout jasný a věcný rozbor možností matematického modelování úniku stlačeného zemního plynu z osobních automobilů a poskytnout konkrétní doporučení nastavení, specifik a možností modelů pro jednotlivé metody a scénáře. Metodika se snaží podpořit využití matematických modelů a zejména definuje nároky na správnou praxi při jejich použití.

Uplatnění nachází metodika ve všech oblastech, kde je třeba provádět posouzení rizika spojeného s únikem plynu z vozidel s pohonem na zemní plyn, zejména pak v oblasti projektování požární bezpečnosti staveb.

## 2. Struktura metodiky

Úvodní část metodiky (kapitola 4) shrnuje problematiku využití zemního plynu jako alternativního paliva v osobních vozidlech, rizika spojená s únikem zemního plynu z vozidla, popisuje základní části palivové soustavy a vysvětluje funkci přetlakového zařízení spouštěného teplotou. Kapitola 5 popisuje výtoku plynu z palivové nádrže osobního vozidla přes přetlakové zařízení z pohledu probíhajících fyzikálních dějů a dynamiky proudění plynu. Kapitola 6 pak tento problém popisuje z pohledu matematického modelování, definuje cíle a veličiny, které je možné matematickým modelem získat. Kapitola 7 popisuje matematické modelování výtoku pomocí teorie jednorozměrového isoentropického proudění ideálního plynu. Kapitola 8 popisuje matematické modelování metodou počítačové dynamiky tekutin (CFD) a definuje jednotlivé kroky při řešení CFD úlohy. V kapitole 9 jsou obecné principy CFD modelování aplikovány na úlohu výtoku plynu z palivové nádrže osobního vozidla přes přetlakové zařízení. V kapitole 9 je matematický problém výtoku plynu rozdělen do čtyř samostatných úloh. Pro každou úlohu jsou definovány hlavní cíle výpočtu a konkrétní doporučení pro čtyři CFD numerické řešiče. Na příkladech jsou stručně ukázány možné výstupy CFD modelu.

## 3. Termíny, definice a seznam zkratk

bar (jednotka) – vedlejší jednotka tlaku v soustavě SI, 1 bar = 100 000 pascalů (Pa)

CFD (computational fluid dynamics) - výpočetní metoda pro modelování proudění tekutin.

CFX – obecný komerční CFD řešič společnosti ANSYS

CNG (compressed natural gas) – stlačený zemní plyn jako motorové palivo.

FLACS – specializovaný komerční CFD řešič společnosti GEXCON

FLUENT – obecný komerční CFD řešič společnosti ANSYS

Jet fire – tryskový požár, hoření par vytékající pod tlakem velkou rychlostí z únikového otvoru

Nádrž (tlaková lahev) na CNG – tlaková nádoba na CNG, provedená v souladu s EHK OSN č. 110

Pool fire – požár par, které se vypařují z hladiny kapaliny v ohraničeném prostoru

OpenFOAM – obecný otevřený CFD řešič

TRPD (temperature triggered pressure relief device) – přetlakové zařízení spouštěné teplotou

## 4. Úvod do problematiky

Posouzení bezpečnosti CNG vozidel lze rozdělit do dvou aspektů. Prvním aspektem je chování CNG vozidel v případě mimořádné události, která není přímo způsobena únikem CNG. Je třeba mít na paměti, že je ve vozidle jedna nebo více tlakových nádob s hořlavým plynem a případný únik plynu, nebo destrukce tlakové nádoby, výrazně zasáhne do průběhu/následku události. Příkladem může být dopravní nehoda a/nebo požár vozidla. Porozumění a znalost chování CNG systému je pak klíčová pro zasahující složky z hlediska nutných opatření při zásahu. Druhým aspektem je pak bezpečnost CNG vozidel jako přímého zdroje mimořádné události. To se týká především oblasti návrhu rozmístění prvků detekčního systému a parametrů systému odvětrání obecně všude, kde se se CNG vozidly manipuluje, zejména ale při parkování vozidel v uzavřených garážích. Klíčovou je v takovém případě znalost rychlosti úniku plynu a dynamika proudění plynu do okolí.

Jestliže dojde k úniku plynu ze CNG systému, mohou nastat dvě situace:

**1) Unikající plyn ve směsi se vzduchem se vznítí ihned, nebo po malé chvíli od počátku úniku.** Dochází k hoření plynu unikajícího z poškozené části CNG systému, ale nedochází k vytvoření výbušné směsi zemní plyn vzduch

**2) Plyn uniká, ale nedojde k zahoření.** Pokud plyn uniká v uzavřeném prostoru, může se lokálně akumulovat a ve směsi se vzdušným kyslíkem se vytvoří výbušná koncentrace. Metan je lehčí než vzduch, proto se akumuluje převážně v podstropní oblasti (může také následně pronikat stropní konstrukcí). Iniciací poté může být např. jiskra v podstropních elektrických rozvodech (zařízení) nebo osvětlovacích tělesech. V případě výbuchu dosahují výbuchové parametry vysokých hodnot. Pokud plyn uniká na volném prostranství, šíří se po větru a rozptyluje se. Lokálně může být také dosažena výbušná koncentrace, ale výbuch nedosahuje tak velkých tlakových účinků jako v uzavřeném prostoru.

### 4.1. Vlastnosti zemního plynu

Zemní plyn obsahuje objemově kolem 96 % metanu, asi 3 % etanu, dále jsou zastoupeny vyšší uhlovodíky C<sub>3</sub>+ a inertní plyny oxid uhličitý a dusík. Zemní plyn neobsahuje vodík a oxid uhelnatý. Samotný zemní plyn je bez zápachu, působí slabě narkoticky, při nedostatku kyslíku vyvolává ospalost, nevolnost a závratě. Zemní plyn není toxický, ale je dusivý, proto je pro veřejnou dodávku odorizován. Jde především o látky na bázi merkaptanů (thioly) nebo sulfidů (především cyklických sulfidů, např. tetrahydrothiofen, C<sub>4</sub>H<sub>8</sub>S). Rozsah oblasti výbušnosti u zemního plynu je od 4,4 % obj. do 17 % obj. Nejvyššího výbušného tlaku se dosahuje při 9,5 % obj., tj. při stechiometrickém složení. Výbuchová rychlost je 1 800 ms<sup>-1</sup>, výbuchový tlak 1,742 MPa a výbuchová teplota 2 500 °C. Průměrná výhřevnost zemního plynu je 33,9 MJm<sup>-3</sup> [Brumovská 1995]. Hodnoty jsou orientační, závisí na složení zemního plynu, tlaku, teplotě a relativní vlhkosti vzduchu.

### 4.2. Popis CNG palivového systému v osobních automobilech

Stlačený plyn je ve vozidlech skladován v tlakových zásobnících umístěných ve spodní části vozidla. V nádržích je plyn stlačen na provozní tlak maximálně 200 bar (20 MPa). Maximální tlak plnění je 260 bar. Velikost a počet nádrží závisí na typu vozidla. Tlakové láhve mohou být celokovové (typ I), částečně odlehčené použitím kovové vložky, která je obručovitě (typ II) či plně ovinutá (typ III) uhlíkovými nebo skleněnými vlákny, nebo plně kompozitní s plastovou vložkou (typ IV). V současnosti nejčastěji používané jsou nádoby ocelové, které jsou nejlevnější, ale také nejtěžší. Trendem automobilových výrobců je přechod k lahvím kompozitním. Plně kompozitní

lahve mají nejvyšší korozní odolnost a jsou nejlehčí (až o 50 až 70 % proti lahvím celooceľovým), ale jejich cena je mnohonásobně vyšší.

CNG systém lze rozdělit na část vysokotlakou, přechodovou a nízkotlakou. Ze zásobníků je CNG vedeno vysokotlakým potrubím k motorové části, kde je v regulátoru tlak snížen na 5-9 bar. Od regulátoru tlaku plynu proudí potrubím do vstřikovačů, kde dojde k vytvoření směsi se vzduchem, která dál postupuje do válců motoru ke spálení. Od nádrže až k regulátoru v motorové části je tedy tlak v CNG soustavě stejný jako tlak v nádrži. Je nutné zajistit dokonalou plynotěsnost celého CNG systému.

Předpis EHK OSN č. 110 [EHK OSN č. 110] stanovuje pravidla schvalování tlakových lahví na CNG pro využití ve vozidlech stejně jako ostatních součástí systému CNG jako jsou ventily a pevné a ohebné spojovací části. Předpis číslo 110 je závazný dle Vyhlášky 341/2014 Sb. o schvalování technické způsobilosti a o technických podmínkách provozu vozidel na pozemních komunikacích a to jak pro vozidla s originální CNG vestavbou tak i pro přestavbu vozidel na pohon stlačeným zemním plynem.

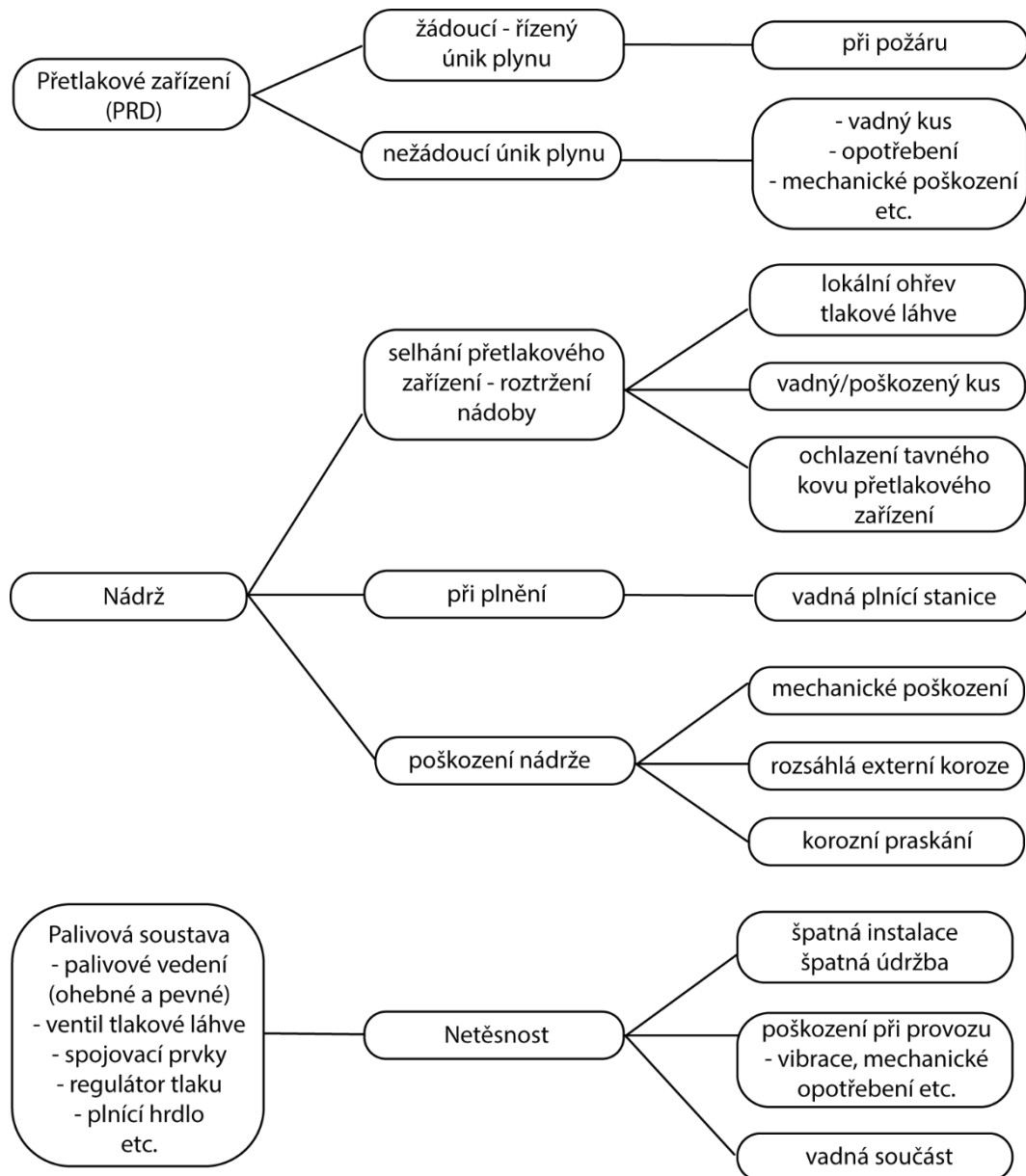
### 4.3. Jak/kudy může dojít k úniku CNG ze systému

V principu lze místa a typy úniku rozdělit do tří kategorií: únik přes přetlakové zařízení, únik přímo z nádrže a únik kdekoli jinde na palivové soustavě tedy v palivovém vedení, ventilech, spojovacích prvcích atd. Možná místa a příčiny úniku plynu ze CNG systému jsou shrnuta schématem, viz Obrázek 1. **Metodika se zabývá pouze modelováním úniku plynu přes přetlakové zařízení.** V takovém případě se jedná o žádoucí výtok plynu v případě požáru vozidla nebo požáru v jeho těsné blízkosti, aby nedošlo k roztržení tlakového zásobníku.

### 4.4. Přetlakové zařízení spouštěné teplotou

Destrukci nádrže v případě nadměrného nárůstu tlaku v důsledku příliš vysoké teploty okolí zabraňuje přetlakové zařízení (Pressure Relief Device - PRD). V principu mohou být přetlaková zařízení spouštěná teplotou nebo tlakem. Na tlakových lahvích v CNG vozidlech se využívají přetlaková zařízení spouštěná teplotou (často označována jako tzv. tepelná pojistka, TPRD). Existují dvě konstrukčně rozdílná řešení přetlakových zařízení spouštěných teplotou. Výtoková cesta plynu je buď uzavřena skleněnou trubičkou s kapalinou, která se při zahřívání rozpíná, až dojde k prasknutí trubičky, nebo nízko-teplotně tavitelnou slitinou. V obou případech musí být tepelná pojistka navržena tak, aby došlo k řízenému úniku plynu z nádrže při dosažení teploty pojistky  $110 \pm 10$  °C [EHK/OSN č. 110]. Proces otevření přetlakového zařízení je v obou případech nevratný. Konstrukční řešení přetlakových zařízení spouštěných teplotou se liší. Mohou mít jeden či více výtokových otvorů, průměr každého z nich se pohybuje v řádu milimetrů, celková výtoková plocha je tak velmi malá, obvykle nepřesahuje jeden čtvereční centimetr.



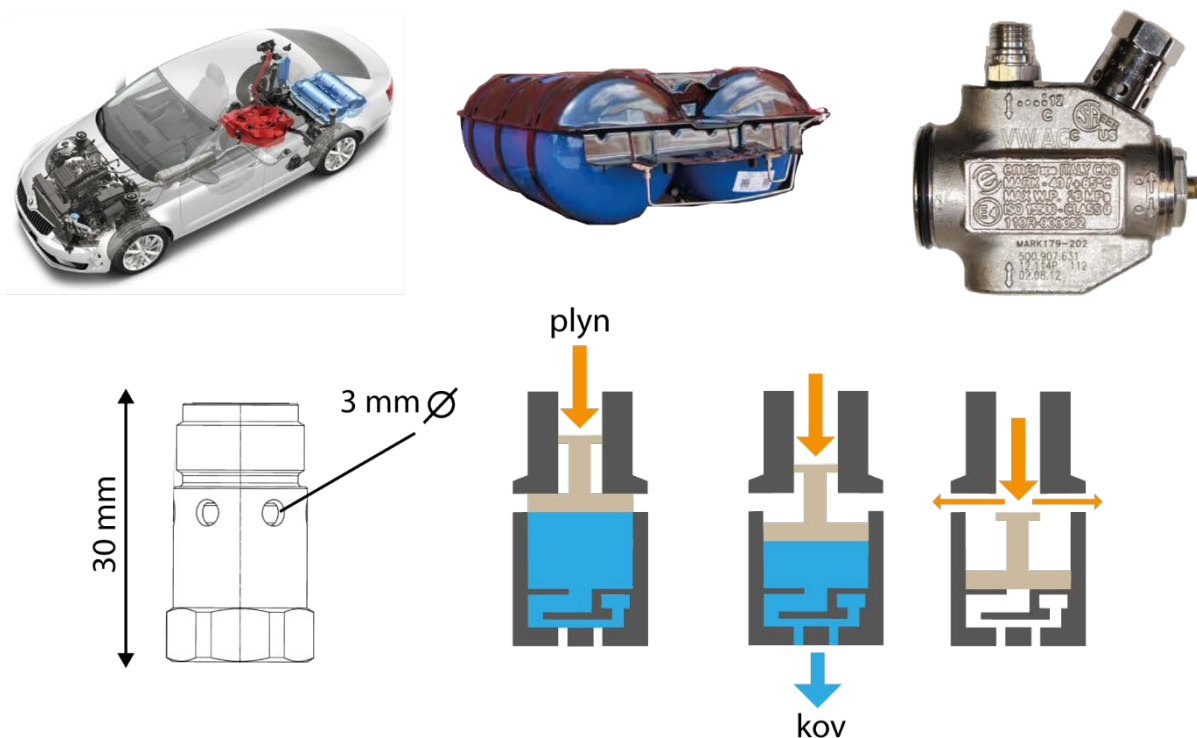


Obrázek 1: Schéma možných míst úniku plynu z CNG systému v osobním vozidle.

#### 4.5. Modelová situace - příklad

V metodice je pro demonstraci možností modelování a příkladů řešení úniku zemního plynu ze CNG systému použit konkrétní systém z osobního vozu s CNG palivovou soustavou - jedná se o originální vestavbu. Všechny součásti systému splňují legislativní požadavky dle předpisu EHK/OSN č. 110. Jádrem vysokotlaké části jsou dvě tlakové nádoby, každá o objemu 48,5 litru. Obě nádoby jsou umístěny za zadní nápravou. Jedná se o nádoby celokovové, ocelové. Pracovní tlak je 200 bar (20 MPa), maximální tlak plnění je 260 bar (26 MPa). Na každé nádobě je umístěn multifunkční solenoidový ventil opatřený přetlakovým zařízením spouštěným teplotou. Citlivým spouštěcím prvkem je nízko-teplotně tavitelná slitina india a bismutu. Po otevření pojistky se nádoba začne regulovaně vyprazdňovat šesti kruhovými otvory, každý o průměru 3 mm.

Postupy popsané v kapitole 7 až 9 jsou obecného charakteru a lze je aplikovat i na jiné konstrukční typy pojistek a jiné technické řešení umístění lahví ve vozidle.



Obrázek 2: Umístění nádrží ve vozidle, umístění lahví v držáku, detail multifunkčního solenoidového ventilu a přetlakového zařízení, schéma řezu přetlakovým zařízením.

## 5. Výtok plynu – teorie

Z hlediska charakteristiky proudění lze studovaný systém popsat jako proces výtoku plynu z oblasti s vysokým tlakem (nádrž) do prostředí s atmosférickým tlakem (okolí) malým otvorem. Výtok plynu je vzhledem k vysokým rozdílům tlaku uvnitř a vně nádoby velmi rychlý. Při popisu proudění tekutin o vysokých rychlostech se používá bezrozměrné Machovo číslo, které udává poměr rychlosti proudění plynu k rychlosti zvuku šířeném v témže prostředí. Podle velikosti Machova čísla lze rozdělit oblasti rychlostí proudění dvojím způsobem. První jednodušší dělení rozděluje oblasti na dvě základní a druhé podrobnější dělení nachází uplatnění především v aerodynamice.

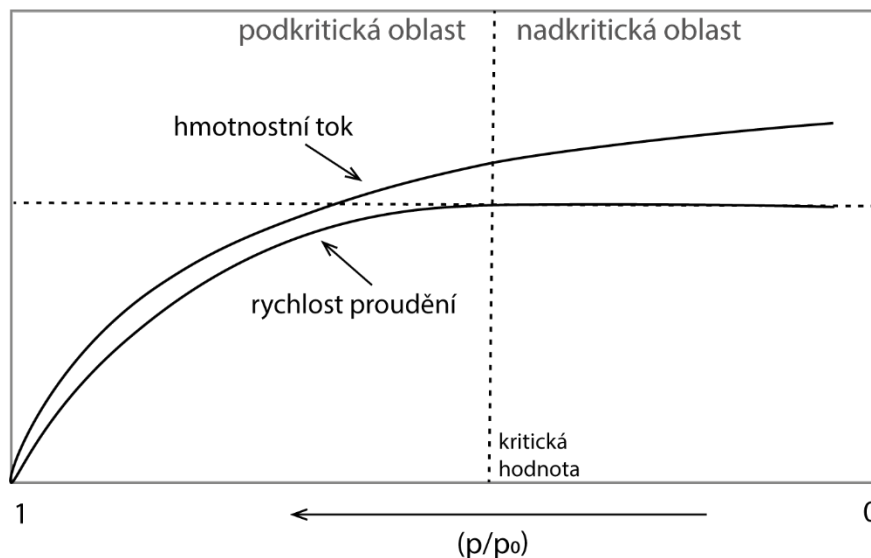
Základní dělení:

- $Ma < 1$  podzvuková oblast (subsonická, podkritická),
- $Ma > 1$  nadzvuková oblast (supersonická, nadkritická).

Podrobnější dělení:

- $0,3 < Ma < 0,7$  subsonická oblast,
- $0,7 < Ma < 1,2$  transonická oblast,
- $1,2 < Ma < 5,0$  supersonická oblast,
- $5 < Ma$  hypersonická oblast.

Výtoková rychlost plynu z nádrže se mění s časem právě v závislosti na rozdílu tlaků uvnitř a vně uzavřené nádoby (Obrázek 3). Při dosažení kritického stavu výtoková rychlost v otvoru zůstává konstantní, i když budeme zvyšovat tlak  $p_0$  uvnitř zásobníku. Jakmile vzrůstá tlak uvnitř zásobníku, vzrůstá také hustota plynu, a protože hmotnostní průtok je funkcí hustoty, hmotnostní



Obrázek 3: Rychlost proudění a hmotnostní tok plynu jako funkce poměru tlaků uvnitř a vně tlakové nádoby.

průtok lineárně roste s rostoucím tlakem uvnitř zásobníku. Z opačné strany při poklesu rozdílu tlaků v láhvi, tedy při jejím vypouštění do okolí, se rychlost proudění nemění v nadkritické oblasti, v podkritické oblasti klesá. Hmotnostní tok klesá v nadkritické i podkritické oblasti. V případě osobních vozidel dosahujeme takového poměru tlaků, že musíme uvažovat, že havarijní výtok CNG z palivové nádrže přes tepelnou pojistku bude v téměř celém rozsahu provozních tlaků nadkritický.

V nadkritické oblasti proudění za výtokovým otvorem vzniká silně směrově ohraničené proudění tzv. jet. Ihned za výtokovým otvorem dochází k expanzi zemního plynu doprovázené vznikem rázových vln. Franquet a kol. [Franquet 2015] popisuje tři rozdílné oblasti v rámci vytvořené proudové struktury podél její osy - blízká oblast, přechodová oblast a vzdálená oblast.

- Blízká oblast - Blízká oblast je tvořena jádrem. V jádře dochází k isoentropické expanzi plynu spojené s odběrem velkého množství tepla z okolí a k postupnému vyrovnávání tlaku plynu na tlak plynu okolí. V jádře je pouze čistý zemní plyn, nemůže tam tedy docházet k hoření.
- Přechodová oblast - V určité vzdálenosti od výtokového otvoru se kolem jádra vytváří vrstva, kde dochází k intenzivnímu turbulentnímu promíchávání metanu s okolním plynem (vzduch). K promíchávání metanu a vzduchu dochází postupně blíže a blíže směrem k ose proudové struktury (přechodová oblast). Dochází k rychlému vyrovnání tlakového pole.
- Vzdálená oblast - Jádro zaniká v momentě, kdy i v ose proudové struktury ve směru toku plynu dochází k promíchávání plynu vytékajícího z nádoby a okolního plynu. Ve vzdálené oblasti už je proudová struktura plně expandovaná. Rychlost proudění může být stále velmi vysoká, ale proudící plyn je v tlakové rovnováze s okolním plynem. Hovoříme o tom, že proudové pole je v této oblasti již plně vyvinuté. Koncentrace metanu ve vzduchu už může spadat mezi dolní a horní mez hořlavosti v celé šířce proudové struktury.

## 6. Matematické modelování výtoku plynu

Hlavním cílem modelu výtoku zemního plynu přes přetlakové zařízení je předpovědět průběh a následky úniku plynu z nádrže. Tuto úlohu je třeba rozdělit do dvou samostatných, ale vzájemně provázaných úloh:

- 1) Určení výtokové rychlosti a hmotnostního toku plynu z nádoby,
- 2) Chování vzniklého proudění za výtokovým otvorem tedy popis rychlostního a tlakového pole a případné zahoření zemního plynu tedy popis koncentračního pole.

### 6.1. Model výtokové rychlost a hmotnostní tok plynu

Tyto dvě veličiny jsou nutnou okrajovou podmínkou pro popis chování proudění za výtokovým otvorem. Výtoková rychlost se v nadkritické oblasti proudění s časem nemění, hmotnostní tok zemního plynu v čase klesá (viz kapitola 5). Existují dvě rozdílné možnosti stanovení výtokové rychlosti a hmotnostního toku plynu – isoentropický model (kapitola 7) a CFD model (kapitola 8).

Výtoková rychlost závisí kromě rozdílu tlaků vně a uvnitř nádoby také na geometrii výtokové cesty z nádrže k výtokovému otvoru. Při průtoku zemního plynu multifunkčním ventilem a přetlakovým zařízením dochází vlivem tření k tlakové ztrátě a k poklesu rychlosti. Výtoková rychlost respektive tlak plynu může být tedy nižší než tlak v nádobě při uzavřeném ventilu. Toto chování je možno postihnout pouze CFD modelem s plně vytvořenou geometrií výtokové cesty. Isoentropický model uvažuje pro výpočet výtokové rychlosti jako vstupní hodnotu tlak v nádrži.

Hmotnostní tok závisí na velikosti a tvaru výtokového otvoru.

### 6.2. Model chování vzniklého proudění

Za výtokovým otvorem dochází k rozvoji proudění a vytvoření proudového pole, které je nejčastěji charakterizováno rychlostí proudění a koncentrací zemního plynu v daném místě. Proudové pole může být určeno CFD modelem. CFD model poskytuje vysokou variabilitu z hlediska geometrie studovaných systémů úniku jako je umístění lahví a přetlakového zařízení ve vozidle. CFD je tedy vhodné pro studium interakce vytvořeného proudění s vozidlem a bezprostředním okolím.

CFD model je také možno využít pro předpověď charakteristiky volného, ničím neomezeného proudění z výtokového otvoru, tedy vytvoření jetu. CFD model je schopen předpovědět vzhled proudové struktury po celé délce, tedy ve všech třech oblastech včetně oblasti blízké a přechodové.

Pro předpověď rychlostního a koncentračního pole ve vzdálené oblasti proudu zemního plynu lze využít analytického předpisu, který vychází z teorie podobnosti a vytvoření tzv. pseudo-výtokového otvoru (sekce 9.4). Analytický model lze ale aplikovat pouze na výtok z kruhového otvoru, symetrický podél osy. V problematice výtoku plynu z palivové nádrže CNG nemá veliké uplatnění.

## 7. Isoentropické modely

Výtok plynů z tlakových zásobníků na základě rozdílu tlaků vně a uvnitř lze řešit pomocí klasické teorie proudění plynů. Existují různé modelové představy jak tento problém řešit [Sullivan 1981]. Nejznámějšími modely jsou Callendarův model, Rayleighův, Walkerův, van der Waalsův a izoentropický model, který je teoreticky popsán (sekce 7.1 a 7.2) a aplikován na příklad výtoku ze CNG systému (7.3) v této kapitole.

Tyto modely nachází v inženýrské praxi široké uplatnění. V oblasti požární bezpečnosti staveb jsou využívány v problematice parkování vozidel na plynná paliva v uzavřených garážích, konkrétně části posouzení rizika vzniku výbušné atmosféry. Toman [Toman 2016] shrnuje problematiku větrání uzavřených garáží pro parkování vozidel na plynná paliva v rámci legislativních požadavků a projektové praxe. Isoentropický model popisující adiabatickou expanzi ideálního plynu je modelem, který je uveden jako „poskytující rozumné odhady rychlosti úniku plynu“ českou technickou normou ČSN EN 60079-10-1 Výbušné atmosféry – část 10-1: Určování nebezpečných prostorů – výbušné plynné atmosféry.

### 7.1. Teorie

Základním předpokladem modelu je představa jednorozměrového isoentropického proudění ideálního plynu. Ideální plyn, tj. plyn, jehož částice na sebe navzájem nepůsobí a při pohybu nevzniká tření, se používá pro zjednodušení popisu termodynamických dějů<sup>1</sup>. V inženýrské praxi se technické plyny za běžných podmínek chovají téměř jako ideální plyn, takže se při výpočtech nedopouštíme nijak závažných chyb. Při výpočtech výtoku reálných tekutin se používá korekční výtokový koeficient.

Isoentropický (adiabatický vratný) děj je termodynamický děj, při kterém nedochází k tepelné výměně mezi plynem a okolím, entropie plynu se nemění. Za adiabatický lze pokládat takový proces, který proběhne tak rychle, že se výměna tepla s okolím nestačí uskutečnit. V případě, že plyn přechází z oblasti vysokého tlaku do oblasti nízkého tlaku, dochází k jeho rozpínání (plyn koná práci) a při adiabatickém ději je to na úrok jeho vnitřní energie. Důsledkem je jeho ochlazení. Adiabatický děj popisujeme rovnicí adiabaty (Poissonův zákon)

$$p \cdot v^\kappa = \text{konst} \quad [1]$$

$$p / \rho^\kappa = \text{konst.}, \quad [2]$$

kde  $p$  je tlak (Pa),  $v$  – měrný objem ( $\text{m}^3/\text{kg}$ ),  $\rho$  - hustota ( $\text{m}^3/\text{kg}$ ) a  $\kappa$  - Poissonova konstanta (izoentropický koeficient) definovaná jako poměr tepelných kapacit  $\kappa = c_p/c_v$ . Poissonova konstanta je bezrozměrná veličina závislá na teplotě a tlaku. Pro inženýrské výpočty můžeme použít konstantní koeficient  $\kappa$  (zemní plyn) = 1,3; pro čistý metan je střední hodnota 1,32 a pro vzduch je střední hodnota 1,4.

V podzvukové oblasti vypočteme výtokovou rychlost plynu z malého otvoru na tlakovém zásobníku pomocí Saint Vénantovy – Wantzelovy rovnice (rovnice 3). Rovnice byla odvozena dosazením Poissonova zákona, který udává vztah mezi tlakem a hustotou proudící tekutiny (rovnice 2), do Bernoulliovy rovnice s předpokladem, že rychlost proudění plynu v tlakové nádobě je zanedbatelná ve srovnání s výtokovou rychlostí. Výsledný vztah pro výtokovou rychlost v podkritické oblasti má tedy tvar

<sup>1</sup>Pro výpočty termodynamických vlastností zemního plynu lze použít stavové rovnice reálných plynů např. Peng-Robinson nebo Soave-Redlich-Kwong.

$$v = \sqrt{2 \frac{\kappa}{\kappa-1} \frac{p_0}{\rho_0} \left[ 1 - \left( \frac{p_a}{p_0} \right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}} \right]}, \quad [3]$$

kde  $p_0$  je tlak uvnitř zásobníku,  $p_a$  - atmosférický tlak a  $\rho_0$  je hustota plynu v zásobníku. Hmotnostní tok ze zásobníku vypočítáme jako

$$\dot{m} = \rho v S, \quad [4]$$

kde  $S$  je plocha výtokového otvoru. Při dosazení za hustotu z Poissonova zákona a rychlosti z rovnice 3, získáme vztah pro výpočet hmotnostního toku plynu v podkritické oblasti

$$\dot{m} = \mu S p_0 \sqrt{\frac{2 M}{R T_0} \left( \frac{\kappa}{\kappa-1} \right) \left[ \left( \frac{p_a}{p_0} \right)^{\frac{2}{\kappa}} - \left( \frac{p_a}{p_0} \right)^{\frac{\kappa+1}{\kappa}} \right]}, \quad [5]$$

$M$  je molární hmotnost plynu ( $\text{kg mol}^{-1}$ ),  $R$  je molární plynová konstanta ( $\text{J K}^{-1} \text{mol}^{-1}$ ),  $p_0$  - tlak v zásobníku (Pa),  $T$  - termodynamická teplota (K) a  $\mu$  - výtokový koeficient. Hodnota výtokového koeficientu se pohybuje mezi nulou a jedničkou. V bezpečnostním inženýrství se často zanedbává korekce na chování reálného plynu při výtoku, protože ideální plyn, jehož výtokový koeficient je roven jedné, dosahuje nejvyšších hmotnostních toků a tedy nejkratší doby výtoku.

Výtoková rychlost je závislá na poměru tlaků  $p_a/p_0$  a roste pouze tak dlouho, dokud tento poměr nedosáhne tzv. kritické hodnoty. Kritický poměr tlaků je definován vztahem, kde levá strana odpovídá rychlosti proudění a kdy pravá strana je rovna právě rychlosti zvuku

$$\left( \frac{p_a}{p_0} \right)_{\text{krit}} = \left( \frac{2}{\kappa+1} \right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}}. \quad [6]$$

Po dosazení  $\kappa = 1,3$  získáme pro zemní plyn hodnotu kritického poměru tlaků 0,544 (pro vzduch 0,528). Při tomto poměru tlaků rychlost plynu v otvoru dosáhne lokální rychlosti zvuku (kritický stav) a rychlost se již dále nezvyšuje (angl. choked velocity), zůstává v nadkritické oblasti konstantní. Dosadíme-li do vztahu pro výčet hmotnostního toku plynu (rovnice 4) z výtokového otvoru za rychlost odpovídající kritickému poměru tlaků a za hustotu opět z Poissonova zákona, získáme vztah pro výpočet hmotnostního toku plynu v nadkritické oblasti

$$\dot{m} = \mu S p_0 \sqrt{\frac{\kappa M}{R T_0} \left( \frac{2}{\kappa+1} \right)^{\frac{\kappa+1}{\kappa-1}}}. \quad [7]$$

## 7.2. Neustálený výtok

Výtok plynu ze zásobníku je neustálený děj. Při neustáleném výtoku plynu malým otvorem z tlakové nádoby s pevnými stěnami dochází uvnitř nádoby k poklesu tlaku, teploty a hustoty plynu. Pro výpočet časového průběhu hmotnostního toku lze použít nestacionární výpočet, kde jsou v každém časovém kroku počítány změny charakteristických veličin v nádobě [Assael a Kakosimos 2010].

Nejdříve je vypočtena ze stavové rovnice ideálního plynu počáteční hustota metanu,  $\rho_0$ . Vzorec pro výpočet hmotnostního toku výtokovým otvorem v čase  $t_i$  se mění podle oblasti proudění:



- kritická oblast

$$\dot{m}_i = \mu S p_{0,i} \sqrt{\frac{\kappa M}{R T_i} \left(\frac{2}{\kappa + 1}\right)^{\frac{\kappa+1}{\kappa-1}}} \quad \text{pro} \quad \frac{p_{0,i}}{p_a} \geq \left(\frac{\kappa + 1}{2}\right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}} \quad [8]$$

- podkritická oblast

$$\dot{m}_i = \mu S p_{0,i} \sqrt{\frac{2 M}{R T_{0,i}} \left(\frac{\kappa}{\kappa-1}\right) \left[ \left(\frac{p_a}{p_{0,i}}\right)^{\frac{2}{\kappa}} - \left(\frac{p_a}{p_{0,i}}\right)^{\frac{\kappa+1}{\kappa}} \right]} \quad \text{pro} \quad \frac{p_{0,i}}{p_a} < \left(\frac{\kappa+1}{2}\right)^{\frac{\kappa}{\kappa-1}}. \quad [9]$$

Pro každý následující časový krok ( $i+1$ ) je vypočtena:

- změna hustoty plynu v zásobníku

$$\Delta \rho_{i+1} = \frac{\dot{m}_i}{V} \Delta t$$

- změna teploty plynu

$$\Delta T_{i+1} = \frac{p_i}{c_v \rho_i^2} \Delta \rho_{i+1}$$

- nová hodnota hustoty plynu v zásobníku

$$\rho_{i+1} = \rho_i - \Delta \rho_{i+1}$$

- nová teplota plynu v zásobníku

$$T_{i+1} = T_i - \Delta T_{i+1}$$

- nový tlak v zásobníku

$$p_{i+1} = \rho_{i+1} \frac{R T_{i+1}}{M}$$

### 7.3. Příklad

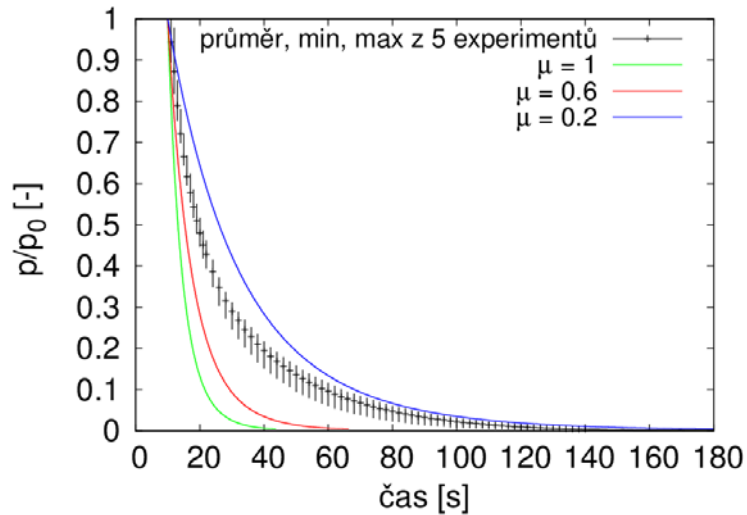
Postupem popsaným v předchozí sekci byl vypočten průběh výtoku plynu z plného zásobníku, tedy při 200 bar, do okolní atmosféry s různou hodnotou výtakového koeficientu a modelová data byla porovnána s tlakovým úbytkem změřeným experimentálně (Obrázek 4) na CNG systému popsaném v sekci 4.5. Zvolený časový krok pro výpočet modelu  $\Delta t$  byl 0,1 s, při testování kratšího časového kroku byly získány stejné výsledné hodnoty. Výpočet byl ukončen při dosažení stavu, kdy hodnota nového tlaku plynu v zásobníku  $p_{i+1}$  byla menší než hodnota zadaného atmosférického tlaku  $p_a$ .

Jak je vidět na obrázku 4, výtokový koeficient silně ovlivňuje průběh poklesu tlaku v nádrži a tedy i hmotnostní tok plynu. Při zanedbání korekce na reálný výtok tedy, při  $\mu = 1$ , je dosaženo velmi špatné shody s experimentem. Modelem předpovězená výtoková doba plynu z nádrže je 40 sekund, experimentálně naměřená doba výtoku plynu je přibližně 140 sekund. Modelem předpovězený hmotnostní tok je tedy výrazně vyšší. V české technické normě ČSN EN 60079-10-1 je výtokový koeficient označován jako odtokový součinitel  $C_d$ . Pro otvory s ostrými hranami je doporučena hodnota výtakového koeficientu mezi 0,5 až 0,75. Při dosažení výtakového koeficientu 0,6 do výpočtu, doba výtoku plynu z nádrže vzrostla na 60 s. Pro dosažení shody modelu s experimentálními daty musí výtokový koeficient klesnout na hodnotu 0,2 a menší.

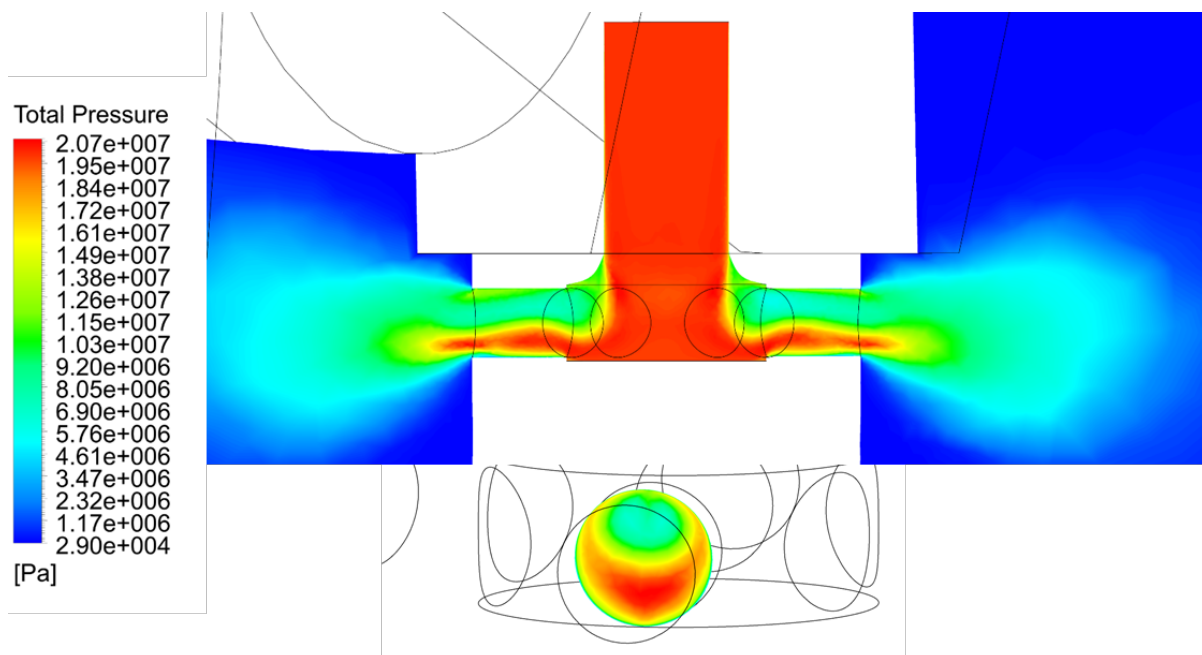
Takto nízký výtokový koeficient ale v tomto případě neodráží pouze korekci na reálný výtok, tedy chování reálné tekutiny a korekci na neidealitu výtakového otvor, ale také fakt, že tlak v rovině výtakového otvoru tepelné pojistky je výrazně nižší než tlak v nádrži, který se zadává jako vstupní hodnota do výpočtu a to vlivem ztrát turbulencí a třením při průtoku plynu z nádrže

multifunkčním ventilem. Tlak také není rovnoměrně rozložen v rovině výtokového otvoru. To je dobře vidět na řezu rovinou výtokového otvoru bezpečnostní pojistky a řezu multifunkčním ventilem v CFD simulaci výtoku plynu z nádrže v silně zjednodušené geometrii multifunkčního ventilu (Obrázek 5).

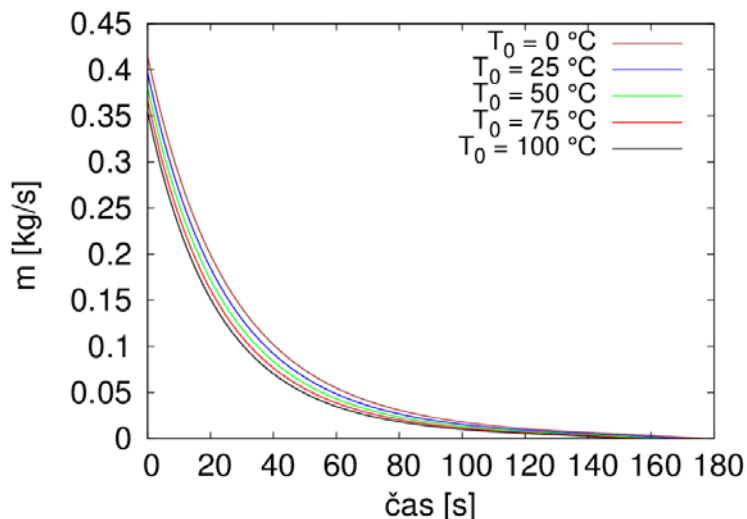
Kromě počátečního tlaku plynu a výtokového koeficientu je dalším vstupem do isoentropického modelu pokles tlaku a hmotnostního toku plynu z nádrže počáteční teplota plynu v nádrži. Při požáru je tlaková láhev vystavena tepelnému namáhání a teplota plynu uvnitř nádrže roste. Při výtoku naopak dochází k expanzi plynu a jeho následnému ochlazení. Vliv počáteční teploty na



Obrázek 4: pokles tlaku v nádrži naměřený experimentálně při mechanicky iniciovaném otevření pojistky s počátečním tlakem v nádrži 200 bar a pokles tlaku vypočítaný isoentropickým modelem s různými hodnotami výtokového koeficientu (počáteční tlak v nádrži 200 bar, počáteční teplota plynu 25 °C).



Obrázek 5: Průřez zjednodušenou geometrií multifunkčního ventilu a bezpečnostní pojistky a řez rovinou výtokového otvoru se zobrazenou hodnotou celkového tlaku.



Obrázek 6: vliv počáteční teploty plynu na hmotnostní tok plynu vypočítaný isoentropickým modelem (počáteční tlak 200 bar, výtokový koeficient 0,2).

předpovídaný pokles tlaku respektive hmotnostní tok plynu přitom není zanedbatelný (Obrázek 6). S rostoucí teplotou hmotností tok plynu klesá. Skutečný průběh nárůstu teploty uvnitř nádoby při požáru a ochlazení plynu při výtoku z tepelné pojistky je ale velmi obtížné předpovědět.

#### 7.4. Závěr

Izoentropický model představuje inženýrskou metodu pro stanovení výtokové rychlosti, poklesu tlaku a hmotnostního toku plynu z palivové nádrže, která vyžaduje malé množství vstupních dat a poskytuje výsledek v krátkém čase. Jedná se o metodu, která může poskytnout vhodnou prvotní informaci pro další posouzení následků úniku CNG ze systému. Porovnání modelu s experimentálním měřením ale ukazuje, že vstupní data do modelu hrají výraznou roli a není snadné je přesně určit. Skutečný tlak a teplota plynu v rovině výtokového otvoru nemusí být nutně rovny okolní teplotě a tlaku v nádrži a silně ovlivňují vypočtenou výtokovou rychlost. Hmotnostní tok plynu je pak silně ovlivněn plochou výtokového otvoru, která se může pro různé tepelné pojistky značně lišit a výtokovým koeficientem. Hodnota výtokového koeficient jako korekce na reálný výtok je volba uživatele modelu a výrazně ovlivňuje hodnotu vypočteného hmotnostní tok plynu a tak i dobu výtoku. Uživatel modelu musí dobře definovat podmínky, za kterých chce izoentropický model použít, respektive aplikaci, pro kterou chce model využít a dle toho odůvodnit volbu vstupních parametrů model.

## 8. CFD

### 8.1. Teoretický úvod

CFD (angl. Computational Fluid Dynamics) je numerická metoda jak získat představu o proudění tekutin, přenosu tepla a hmoty, průběhu chemických reakcí a dalších souvisejících jevů v předem definovaném prostředí. Metoda pracuje s představou spojitého prostředí, kdy zanedbáváme síly působící mezi molekulami. Tento předpoklad platí pro většinu inženýrských problémů.

Pro použití CFD je třeba nejprve vytvořit model (virtuální napodobeninu zkoumaného systému), na který jsou následně aplikovány vhodné matematické rovnice tak, aby byly ze zadaných okrajových a počátečních podmínek jejich řešením získány vybrané údaje o dějích probíhajících v celé zkoumané oblasti při respektování fyzikálních zákonů. Výsledkem řešení jsou například informace o rozložení teplot, tlaků, koncentrací a vektorů rychlosti v libovolném místě modelovaného systému a komplexní vizualizace dějů uvnitř zařízení. Protože se jedná o děje obecně trojrozměrné a časově závislé, jsou popsány soustavou parciálních diferenciálních rovnic. Mezi základní rovnice pro řešení proudění patří rovnice kontinuity (bilance hmotnostního toku) a Navierovy-Stokesovy rovnice (bilance hybnosti, pohybové rovnice). V případě úniku zemního plynu ze zásobníku a jeho zahoření doplňujeme základní rovnice dalšími rovnicemi např. bilance energie, transportní rovnice, modely hoření, modely turbulence a další. K řešení rovnic se nejčastěji používá metoda konečných objemů, při které se pomocí prostorové diskretizace (rozdělení geometrie daného systému do sítě objemových elementů) převede soustava parciálních diferenciálních rovnic na soustavu algebraických rovnic, která se následně řeší vhodnými numerickými metodami.

### 8.2. Numerické řešiče

Pro řešení soustavy rovnic existují různé numerické řešiče. Nejrozšířenějším obecným komerčním řešičem je v současné době skupina produktů od firmy ANSYS<sup>1</sup>, konkrétně ANSYS CFX nebo ANSYS Fluent. Vedle komerčních řešičů existují také open-source řešiče, kde v současnosti nejvíce používaný obecný řešič je program OpenFOAM<sup>2</sup>. Existují také specializované CFD řešiče. Například komerční program Flame Acceleration Simulator<sup>3</sup> (FLACS) je zaměřený na modelování šíření plynných látek a exploze. Pro požárně-bezpečnostní výpočty, tj. spojené modelování proudění a hoření, je nejčastěji užívaný CFD open-source program Fire Dynamics Simulator [FDS User's Guide] od National Institute of Standards and Technology (NIST), USA. FDS je určeno pro simulace proudění tekutin do rychlosti 0,3 Machova čísla, je vhodný pro modelování za běžných podmínek, ale nehodí se pro modelování výtoku plynu při vysokých rychlostech. Porovnáním dosažených výsledků pro shodné úlohy obecných řešičů ANSYS CFX/Fluent a OpenFOAM lze konstatovat, že oba typy (komerční a open-source) dosahují shodných výsledků. Výhoda komerčních řešičů je standardní uživatelská podpora poskytovatele a jsou více uživatelsky přívětivé, např. užitím grafického uživatelského rozhraní. U open-source řešičů se většinou pracuje v textovém režimu (textové soubory a příkazová řádka terminálu) a grafické uživatelské rozhraní bývá za úplaty od různých poskytovatelů. Nároky na uživatele jsou u open-source programů většinou větší, neboť je nutné znát prostředí operačních systémů, např. Linux, programování atd.

<sup>1</sup> [www.ansys.com](http://www.ansys.com)

<sup>2</sup> [www.openfoam.com](http://www.openfoam.com); [openfoam.org](http://openfoam.org)

<sup>3</sup> [www.gexcon.com/products-services/FLACS-Software/22/en](http://www.gexcon.com/products-services/FLACS-Software/22/en)

Nutné znalosti všech uživatelů programů CFD jsou následující

- principy numerického popisu proudění tekutin (min. úroveň vysokoškolského kurzu Mechanika tekutin)
- znalost metody konečných objemů (včetně pravidel tvorby výpočetní sítě) a řešení soustav algebraických rovnic (min. úroveň vysokoškolského kurzu Numerické metody)
- kreslení 3D modelů (základní znalosti CAD programů)
- specializační program pro tvorbu sítí dle zvoleného řešiče
- program pro vizualizaci výsledků.

Další podmínkou jsou znalosti OS Linux v případě užití řešiče v tomto operačním systému. Výhodou jsou znalosti programovacích jazyků Python<sup>1</sup> nebo C++.

### 8.3. Základní kroky při řešení CFD úlohy

Základní kroky při řešení CFD úlohy jsou následující:

- |  |   |                 |
|--|---|-----------------|
| 1. Definice cílů výpočtu.                                  | } | Přípravná část  |
| 2. Stanovení modelované oblasti, tvorba geometrie systému. |   |                 |
| 3. Tvorba výpočetní sítě.                                  |   |                 |
| 4. Volba numerického řešiče.                               | } | Výpočetní část  |
| 5. Výběr modelových rovnic, nastavení parametrů modelů.    |   |                 |
| 6. Nastavení numerické metody.                             |   |                 |
| 7. Numerické řešení.                                       |   |                 |
| 8. Vizualizace a zhodnocení výsledků řešení.               | } | Analytická část |
| 9. Adaptace výpočetní sítě.                                |   |                 |
| 10. Revize modelu.   |   |                 |

Při řešení většinou postupujeme od jednodušších po složitější modely, např. od 2D úloh po složité 3D. Od základního proudění (řešení Navierových-Stokesových rovnic, rovnice kontinuity, rovnice pro modelování turbulencí a bilance energie) k vícesložkovému (přidáním ke stávajícím rovnicím transportní rovnici) až po hoření (model hoření, model sdílení tepla sáláním popřípadě model tvorby sazí).

#### 8.3.1. Přípravná část

Přípravná část (angl. preprocessing) začíná stanovením cíle výpočtu. Z cíle výpočtu vychází složitost geometrie a také modelu. Na počátku přípravného procesu většinou uživatel řeší základní otázky:

- Jaké jsou požadované výsledky a k čemu budou dále používány?
- Jaká je požadovaná přesnost?
- Jak rychle chci výsledky získat?
- Co je o modelovaném systému známé?
- Jaké modelové rovnice budou potřebné?

Následně musí uživatel vytvořit geometrický obraz modelovaného systému ve zvoleném CAD programu. Lze použít obecné 3D CAD programy, např. komerční program AutoCAD firmy

<sup>1</sup> [www.python.org/](http://www.python.org/)

AUTODESK<sup>1</sup>, nebo open-source, např. FreeCAD<sup>2</sup>. Produkty firmy ANSYS používají modul ANSYS DesignModeler. Uživatelé OpenFOAM často používají open-source program Salome<sup>3</sup>. Programy umožňují import/export do standardních formátů jako jsou STEP, IGES, STL a další. Programy FreeCAD a Salome mohou spouštět skripty Pythonu nebo příkazy na konzoli pro usnadnění či automatizaci práce s tvorbou geometrie. Toto je výhodné především při automatické optimalizaci tvaru na základě CFD výpočtů.

Dalším krokem je převedení vytvořené geometrie a včetně okolí do výpočetní domény, kterou následně diskretizujeme, tj. doménu rozdělíme na síť výpočetních buněk. K tvorbě výpočetní sítě se opět používají pomocné programy. Firma ANSYS nabízí moduly ANSYS Meshing, ANSYS ICEM CFD, ANSYS Fluent Meshing. Uživatelé programu OpenFOAM mohou vytvořit výpočetní síť v programu Salome, nebo užijí utilit OpenFOAM *blockMesh* nebo *snappyHexMesh* na vyexportovaný soubor z CAD programu povrchových dat ve formátu STL. STL soubor popisuje nestrukturovaný triangulovaný povrch pomocí jednotkových normálových vektorů a vrcholů trojúhelníků v trojrozměrné kartézské soustavě souřadnic. Další možností je konverze výpočetní sítě vytvořené v programech ANSYS do tvaru vhodný pro OpenFOAM pomocí utility *fluent3DMeshToFoam*.

FLACS používá pro vytvoření geometrického obrazu modelovaného systému (pokud není importován z 3D CAD aplikace) a pro diskretizaci výpočetní domény modul CASD. Výpočetní síť může být pouze krychlová nebo obdélníková. Není tedy možné síť přizpůsobit zakřiveným nebo nakloněným objektům. Z tohoto důvodu FLACS používá tzv. „POROSITY CONCEPT“, který buňkám, které obsahují malé nebo zakřivené objekty, přiřadí určitou hodnotu porosity. Jedná se o podsíťový model, který buňce zcela bez překážek přiřadí hodnotu porosity 0. Buňce, která je zcela vyplněna pevnou překážkou přiřadí hodnotu porosity 1. Buňka, která je z části vyplněna překážkou, je dle zaplněnosti přiřazena hodnota mezi 0 a 1.

Řešič FLACS se tedy chová odlišně od jiných běžných CFD řešičů. Pevná stěna nemusí nutně navazovat na hranici výpočetní buňky. Z těchto důvodů CASD neobsahuje utilitu pro konverzi z jiných programů.

Při tvorbě sítě je především důležité vyřešit následující otázky, neboť kvalita výpočetní sítě velmi ovlivňuje rychlost konvergence, přesnost a časovou náročnost výpočtu:

- Jaký typ buněk bude použit: quad/hexa, tri/tetra nebo hybridní síť (co umožňuje užitý řešič)?
- Jaká hustota výpočetní sítě je pro jednotlivé oblasti nutná, nedošlo užitím řídkší výpočetní sítě ke zkreslení geometrie domény?
- V případě turbulentního proudění bude zahuštěná síť v oblasti viskozitní podvrstvy, nebo bude použita stěnová funkce pro výpočet rychlosti v blízkosti pevné stěny?
- Bude použita adaptace výpočetní sítě?
- Kolik buněk bude pro úlohu potřeba, je k dispozici dostatek RAM paměti?
- Je síť dostatečně kvalitní?

Kvalita výpočetní sítě se posuzuje podle:

- hustoty sítě s ohledem na studovaný děj,

---

<sup>1</sup>www.autodesk.cz

<sup>2</sup> www.freecadweb.org

<sup>3</sup> www.salome-platform.org



- uspořádání sousedních buněk (poměr délka/objem),
- zhuštění v oblasti mezní vrstvy u pevných stěn,
- kvality buněk:
  - nesouměrnost (Skewness),
  - poměr hran/ploch buněk (Aspect Ratio).

Strukturovaná výpočetní síť (quad/hexa) potřebuje zhruba polovinu uzlů (nodes) než síť nestrukturovaná (tri/tetra) při shodném řešení. Strukturovanou síť se hůře popisují oblé tvary a její vytvoření je uživatelsky mnohem náročnější. Také je třeba rozhodnout, kolik geometrických detailů bude nutné zahrnout do simulačních výpočtů, neboť zbytečné geometrické detaily ve výpočetní doméně zvyšují počet výpočetních buněk a tím výpočetní náročnost. Před tvorbou výpočetní sítě je vhodné zvát charakter proudění ve výpočetní doméně (například z experimentu) a v místech, kde je očekáván velký gradient tlaku, rychlosti nebo teploty příslušně zahustit výpočetní síť. Není dovolena náhlá změna velikosti mezi sousedními buňkami, maximální změna ve velikosti sousedících buněk výpočetní sítě by měla být menší než 20%. V případě síťování v oblasti mezní vrstvy je doporučeno umístění první výpočetní buňky v bezrozměrné vzdálenosti od stěny  $y^+ \approx 1$  (definováno stěnovou funkcí) a minimálně 15 buněk strukturované výpočetní sítě (quad/hexa) ve vrstvě s maximální možnou změnou velikosti násobkem 1,2. Nestrukturovaná výpočetní síť (pyramidové nebo tetrahedrální buňky) bezprostředně sousedící se stěnou není v mezní oblasti doporučovaná. Výsledek CFD výpočtu musí být na výpočetní síti tzv. nezávislý, tzn. zvýšení jemnosti výpočetní sítě, nesmí mít významný dopad na hodnoty výsledků. Pro určení správné velikosti výpočetní sítě je nutné provést několik výpočtů s různou hustotou výpočetní sítě a porovnat výsledky. Lze použít takovou hustotu sítě, při které se po přidání výpočetních buněk (jemnější síť) a dalším výpočtu výrazně nezmění vypočtené hodnoty. Před užitím výpočetní sítě je nutno udělat kontrolu kvality sítě v příslušném řešiči např. utilitou *checkMesh* v OpenFOAM, nebo Mesh -> Check v případě ANSYS Fluent Meshing 2019R1. Následně po výpočtu je třeba udělat analýzu výpočetní sítě a podle výsledků simulace provést její adaptaci.

### 8.3.2. Výpočetní část

Výpočetní část (angl. processing) zahrnuje nastavení numerického řešiče, volbu rovnic a dalších parametrů vedoucích k úspěšnému řešení úlohy. Postupy pro různé programy jsou podobné, hlavní odlišnost je v uživatelské přívětivosti. Programy ANSYS používají grafické uživatelské rozhraní (GUI) kombinované s příkazovou řádkou (textové uživatelské rozhraní, TUI). Uživatel je logicky naváděn nastavením řešení a podle předchozí volby se v GUI znázorňují další alternativy voleb. V některých případech se v TUI znázorňují varovné nebo informační texty. V případě OpenFOAM uživatel modifikuje předem definované textové soubory v textovém editoru. Většinou upravuje odladěnou úlohu dostupnou v OpenFOAM, kde aplikuje vlastní výpočetní doménu. V tomto případě musí být uživatel znalý v zadávaných parametrech řešiče.

Řešení začíná načtením výpočetní sítě do numerického řešiče, kontrolou její kvality a nastavením měřítka pro výpočet. Informaci o geometrii výpočetní domény lze získat v OpenFOAM utilitou *checkMesh*. Změnu na správnou hodnotu měřítka lze udělat pomocí *transformPoints -scale '(x x x)'*. V produktech ANSYS lze správné měřítko nastavit General -> Mesh -> Scale.

Dále následují nastavení/volby:

- numerický řešič, diskretizace
- stacionární/nestacionární úloha

- stlačitelné/nestlačitelné proudění
- další modelové rovnice (turbulence, energie, vícefáze, vícesložek, radiace, ...)
- materiálové vlastnosti látek v doméně
- určení oblastí ve výpočetní doméně (tekutina, pevná fáze, ...)
- okrajové podmínky a počáteční podmínky
- relaxační podmínky
- přesnost řešení

Zvláštní pozornost se musí věnovat výběru modelu turbulence. Obecně můžeme modelovat turbulentní proudění třemi způsoby: přímou numerickou simulací (angl. Direct Numerical Simulation, DNS), metodou velkých vírů (angl. Large Eddy Simulation) nebo středováním základních rovnic (angl. Reynold's Averaged Navier Stokes Equations, RANS) s následným užitím některého ze statistických modelů turbulence, např.  $k-\varepsilon$ ,  $k-\omega$  a další. DNS se používá velmi málo v malých doménách, neboť metoda vyžaduje velmi jemnou výpočetní síť pro zachycení i nejmenších vírů. Velikost buněk řádově odpovídá velikosti nejmenších vírů (tzv. Kolmogorovo mikroměřítko turbulence). Počet buněk prudce roste s Reynoldsovým číslem. LES metoda velké víry počítá přímo a malé víry modeluje tzv. podsíťovými modely. Pro metodu LES lze použít hrubší síť a větší časový krok než u metody DNS, ale oproti metodám RANS musí být síť podstatně jemnější a výpočty jsou mnohem více výpočetně náročné. Metody RANS modelují všechny velikosti turbulentních vírů a jsou nejpoužívanější pro řešení inženýrských úloh. Přesnost modelů turbulence se liší podle řešené úlohy. Mezi nejvíce používané patří modely  $k-\epsilon$  a  $k-\omega$  ve variantě SST.

Časovou a prostorovou diskretizací parciálních diferenciálních rovnic do buněk výpočetní sítě vzniká velká soustava algebraických rovnic, kterou obvykle řešíme iteračními metodami. Pro iterační metody (např. Gauss-Seidelova metoda, relaxační metody, víceúrovňové metody, ...) je charakteristické postupné přibližování (konvergování) ke konečnému výsledku. Konvergenci úlohy můžeme sledovat pomocí tzv. reziduí, což je rozdíl mezi hodnotou veličiny v současném a předchozím časovém kroku. Konvergenci lze dosáhnout užitím relaxace, která redukuje změny každé proměnné v každé iteraci v každé buňce. Nastavení relaxačního faktoru můžeme provádět během řešení úlohy: hodnota faktoru pod 1 zpomaluje rychlost výpočtu, ale zlepšuje jeho stabilitu; naopak hodnota relaxačního faktoru nad 1 vede k zrychlení výpočtu, ale na úkor stability.

Pro výpočet soustavy rovnic volíme správný typ řešiče. Vybíráme ze dvou základních typů: Pressure-Based, nebo Density-Based. **Pressure-Based** řešič je založený na získání tlakového pole řešením rovnice tlaku, které dostane odvozením z rovnice kontinuity a rovnice hybnosti. Rychlostní pole získáme řešením pohybových rovnic. Řešič byl původně vyvinut pro nízkorychlostní nestlačitelné proudění, kde je  $Ma < 0,1$ . **Density-Based** řešič byl původně vyvinut pro vysokorychlostní stlačitelné proudění. Rychlostní pole získáme řešením pohybových rovnic, pole hustoty získáme řešením rovnice kontinuity a tlakové pole ze stavové rovnice. V současné době jsou oba typy řešičů použitelné pro široký rozsah rychlosti proudění. Pro nadzvukové proudění je obecně více doporučován Density-Based řešič.

Před začátkem řešení je nutné specifikovat okrajové podmínky (známé hodnoty nebo funkce proměnných na hranici výpočetní domény) a počáteční podmínky (hodnoty hledaných proměnných v každé buňce výpočetní sítě na počátku řešení). Špatně zadané okrajové nebo počáteční podmínky jsou nejčastějším důvodem divergence (odklonu) od správného řešení úlohy. Zvláštní okrajovou podmínkou je „symetrická“ okrajová podmínka, kdy proudění je symetrické kolem roviny, tj. stačí modelovat pouze polovinu oblasti.

### 8.3.3. Analytická část

Cílem analytické části výpočtu (angl. Postprocessing) je kritické posouzení dosažených výsledků a návrh možných úprav řešení. Současně lze požadovaným způsobem znázornit vypočtené hodnoty ve výpočetní doméně ve formě:

- kontur veličin,
- vektorového pole rychlostí,
- grafů,
- animací atd.

Pro vizualizaci CFD výsledků lze použít k tomu účelu specializované programy. Firma ANSYS nabízí univerzální nástroj pro zpracování výstupů z CFD řešičů CFD-Post. Pro vizualizaci a analýzu dat z OpenFOAM lze použít open-source program ParaView<sup>1</sup>. FLACS využívá pro zpracování dat utilitu Flowvis. Všechny tři programy lze užívat jak v OS Windows, tak OS Linux.

## 9. Modelování výtoku plynu pomocí CFD

Výpočet výtoku plynu CFD metodou má oproti jednorozměrným metodám, které jsou založeny na řešení Saint Vénantovy–Wantzelovy rovnice (kapitola 7), řadu **výhod**.

- Řešením můžeme získat plnou představu o 3D prostorovém proudění plynu v okolí za výtokovým otvorem. V případě výtoku zemního plynu do okolního vzduchu získáme koncentrační profily metanu a snadno určíme oblasti, kde lze očekávat zahoření resp. výbuch v případě iniciace.
- Další výhodou je získání teplotního pole zapojením energetické rovnice do výpočtu.
- V případě časově neustálené simulace získáme časově-prostorovou dynamiku výtoku.

Hlavní **nevýhodou** CFD modelování je:

- Větší časová zátěž výpočtu.
- Nezbytnou nutností je pokročilá znalost uživatele v oblasti CFD modelování.
- Způsob modelování výtoku plynu, tj. predikce rychlostního, tlakového pole nebo koncentračního pole, silně ovlivňují počáteční a okrajové podmínky. Plyn vstupuje do výpočetní domény přes vstupní okrajovou podmínku definovanou rychlostní funkcí, hmotnostním tokem nebo tlakem.

### 9.1. Obecné komentáře

#### 1) Přípravná část

Složitost geometrie výpočetní domény volíme podle typu úlohy a cíle výpočtu. Pokud importujeme geometrie z předcházejících CAD projektových souborů, je nutné provést zjednodušení a odstranit zbytečné plochy před vytvořením výpočetní domény. Při tvorbě výpočetní sítě je nutné zkontrolovat kvalitu sítě na ostrých hranách a v oblasti návaznosti sousedících ploch. Konkrétní doporučení týkající se přípravné části jsou uvedeny u každé studované úlohy.

---

<sup>1</sup> [www.paraview.org](http://www.paraview.org)

## 2) Výpočetní část

Modelování dynamiky výtoku plynů z prostředí o vysokém tlaku patří mezi velmi obtížné úlohy pro řešení metodou CFD. Z tohoto důvodu vždy postupujeme od nejjednodušších variant výpočtu. Často je vyžadován zásah uživatele do nastavení v průběhu výpočtu ať už změnou okrajových podmínek nebo nastavení řešičů. Řešení úlohy tedy vyžaduje zkušené uživatele, kteří volí jak fyzikálně, tak numericky správné postupy nastavení vedoucí ke konvergenci úlohy.

- *Diskretizace (výpočetní síť)* - špatná konvergence úlohy může být způsobena užitím běžného přístupu při tvorbě výpočetní sítě, kdy v oblastech, kde není rychlost proudění vysoká, se pro ušetření výpočetního času užívají větší výpočetní buňky. V případech výtoku z trysek jsou výtokové rychlosti značné, proto je třeba z globálního hlediska kvality sítě mít na paměti, že musí být dodržena podmínka nemít velký rozdíl mezi největší a nejmenší buňkou v doméně.
- *Numerický řešič* – pro nadzvukové proudění jsou doporučeny následující řešiče:
  - ANSYS Fluent – density based
  - ANSYS CFX – pressure based (jiný nemá)
  - OpenFOAM – density based *rhoCentralFoam* nebo pressure based *sonicFoam*
  - FLACS – pressure based
- *Stacionární nebo nestacionární výpočet* – úloha výtoku plynu z palivové nádrže je nestacionární úloha. Stacionární řešení významně šetří výpočetní čas, ale konečné řešení nemusí existovat a bude oscilovat kolem pseudoustálené hodnoty. Pseudoustálené řešení nám může poskytnout prvotní důležité informace o rychlostním poli nebo rozložení tlaků. Nestacionární řešení umožní získat představu o časové dynamice studovaného děje, ale za cenu extrémní (v inženýrské praxi neúnosné) výpočetní náročnosti. Čas simulace je dlouhý (řádově až desítky vteřin), a časový krok je velmi malý v rozmezí od  $10^{-8}$  do  $10^{-6}$  vzhledem k rychlým změnám proudových veličin.
- *Stlačitelnost* – při „pomalém“ proudění do hodnoty Machova čísla 0,3 lze plyn považovat za nestlačitelný (rychlost plynu do cca 370 kmh<sup>-1</sup>). Nad hodnotou Machova čísla 0,3 musíme považovat tekutinu za stlačitelnou a hustota tekutiny se mění s tlakem. Při podzvukovém proudění v rozsahu Ma od 0,3 do 0,8 je vztah mezi hustotou a tlakem slabý a v proudění se nevyskytují žádné rázové vlny. Nad hodnotou 0,8 se v proudění mohou rázové vlny vyskytovat. Rázová vlna vzniká na rozhraní mezi nadzvukovým a podzvukovým prouděním. Mění se v ní skokově tlak, teplota a hustota. Výpočty proudění stlačitelných tekutin jsou tak mnohem citlivější na okrajové podmínky a materiálové vlastnosti než výpočty nestlačitelných tekutin. V případě, že nastavení bude fyzikálně vzdálené reálnému toku, řešení může být nestabilní a úloha nemusí konvergovat. Z tohoto důvodu je lepší nejdříve zjistit charakter toku ve výpočetní doméně a správné nastavení testovat relativně rychle ve 2D doméně. Následně provést výpočet ve 3D doméně, kdy bude docházet pouze k úpravě výpočetní sítě v doméně, ale již nikoliv základní nastavení úlohy.
- *Další modelové rovnice*
  - Termodynamické děje – použít stavovou rovnici pro ideální plyn, stavové rovnice pro reálné plyny příliš zvyšují složitost řešeného problému z hlediska fyziky a tím pádem také z hlediska numeriky, důsledkem může být špatná konvergence až nestabilita (divergence) úlohy.
  - Model turbulence – z hlediska časové náročnosti je jedinou praktickou možností využít metody časového (Reynoldsova) středování Navierových-Stokesových rovnic (Reynolds Averaged Navier-Stokes, RANS) s vhodným modelem turbulence:

- ANSYS CFX – *k-epsilon* nebo *k-omega* SST
  - ANSYS Fluent – *k-epsilon* nebo *k-omega* SST (model turbulence lze měnit v průběhu výpočtu)
  - OpenFOAM – *k-omega* SST
- Vícesložkové proudění – pro více plynných složek (např. vzduch [kyslík a dusík] – zemní plyn [metan]) ve výpočetní doméně musíme navíc řešit transportní rovnici(e). To je důležité v případě výpočtu koncentrace složek např. pro výpočet hoření plynu. Pokud nás zajímá pouze proudění plynu (rychlostní nebo tlakové pole) na výstupu z trysky lze použít pouze jedna složka – vzduch a tím snížit výpočetní náročnost úlohy. Experimentálně bylo zjištěno, že vzduch se chová při výtoku z tlakových zásobníků podobně jako metan. Metan má sice o trochu menší hustotu než vzduch (je lehčí a v klidu stoupá vzhůru), ale při rychlých dějích jsou setrvačné síly daleko dominantnější než síly vztlakové. V případě pomalého volného proudění směsi metan-vzduch již musíme řešit vícesložkové proudění.
- *Okrajové podmínky* – volba je závislá na řešené úloze. Ať už jsou okrajové podmínky tlakové nebo rychlostní, tak není vhodné na začátku výpočtu úlohy začít s vysokým rozdílem hodnot na vstupu do domény a hodnotami v doméně. Velké gradienty vedou k divergenci úlohy. Při výtoku plynu z trysky do domény doporučujeme začít řešení úlohy na hodnotách přetlaku řádově deset bar. Jakmile se vytvoří proudové pole, můžeme začít tlak na vstupu zvyšovat.
  - *Počáteční podmínky* – stejně jako okrajové podmínky mají zásadní vliv na konvergenci úlohy.
    - Pro stacionární úlohu – pokud se počáteční stav hodně liší od stavu ustáleného proudového pole, bude řešič špatně konvergovat nebo dokonce divergovat.
    - Neustálená úloha – pro konvergenci úlohy musíme mnohdy volit extrémně malé výpočetní kroky, např.  $10^{-6}$  s.
  - *Relaxační podmínky* – specifikují míru tlumení iterací pro každou stavovou veličinu.
    - Komerční programy mají vždy předem nastavené výchozí hodnoty relaxačních faktorů, které vyhovují pro řešení většiny praktických úloh. Hodnoty doporučujeme měnit jen tehdy, pokud nejsme schopni donutit úlohu konvergovat všemi ostatními způsoby popsanými v předchozích bodech. Relaxační podmínky spadají do tzv. expertních parametrů, ovlivňují průběh numerického řešení.
    - U řešiče OpenFOAM nesmíme pro konvergenci úlohy zapomenout do souboru *system/fvSolution* zadat hodnoty podrelaxačních faktorů do sekce *relaxationFactors*.
  - *Konvergence* – týká se rozhodnutí, kdy úlohu ukončit. Pokud metoda nekonverguje, nemůže být řešení správné. Pokud metoda konverguje, řešení může být správné v souladu s realitou. Posouzení správnosti řešení je na uživateli. U stacionární úlohy sledujeme vývoj reziduí a zároveň sledujeme hodnoty vybraných veličin ve vybraných místech domény. Dobrým pravidlem je usilovat o řešení odchyly menší než 1%.

## 9.2. Proudění v bezprostřední blízkosti výtokového otvoru – neomezený výtok

Jedná se o silně směrově ohraničený tok plynu s vysokou hybností. Podél osy výtokového otvoru dochází k postupnému vyrovnávání tlaku plynu na tlak okolí a v jeho blízkosti jsou patrné rázové vlny. Výtokový otvor má velikost v řádech milimetrů, ale výpočetní doména musí být velká v řádech metrů, protože výtoková struktura nesmí zasahovat do okrajové podmínky. To klade vysoké nároky na strukturu výpočetní sítě a výrazně zvyšuje počet výpočetních buněk.

## Cíle výpočtu

### Rozměry tryskového proudu (jetu)

- Při numerických CFD výpočtech se často řeší axiální výtok z trysky jako symetrická úloha podle středové osy jetu. V případě TPRD, když zahrneme do výpočtu také vnitřní oblast bezpečnostní pojistky, tak poloha navrtání výtokových otvorů ovlivňuje tok do/z výtokových otvorů a rychlostní pole uvnitř výtokového otvoru není rovnoměrné.

### Struktura tryskového proudu – poloha Machova disku, změna rychlostního pole

- Strukurovaná výpočetní síť (obdélníky, šestistěny) při nadzvukovém proudění má tendenci zkreslovat „tvar“ rázové vlny se „skokovým“ přechodem. Rázová vlna má tendence „chytat se“ hran buněk. Nestrukturovaná výpočetní síť (trojúhelníky, čtyřstěny) nemá tendenci zkreslovat rázovou vlnu, ale je zapotřebí více výpočetních buněk, takže úloha je časově náročnější.
- Pro zjištění struktury proudu je dostatečná 2D simulace.

#### 9.2.1. Fluent

- U souměrného jetu lze s výhodou použít axisymetrický řešič a modelovat pouze polovinu výpočetní domény se symetrickou okrajovou podmínkou. Výrazně se tím úloha zjednoduší a urychlí.
- Pokud uživatel dodrží pravidla definovaná výše včetně iniciace úlohy, tak úloha úspěšně konverguje. Pro udržení konvergence je někdy nutné výrazně snížit hodnoty relaxačních faktorů u veličin.

#### 9.2.2. CFX

- Nedisponuje speciálním řešičem, který by umožňoval řešení symetrických úloh na zjednodušených geometriích.
- Úlohu je možné řešit jako osově symetrickou, ale doména musí mít specifický tvar.
- Bez zásahu do výchozího nastavení numerického řešiče je prakticky nemožné získat fyzikálně relevantní řešení.

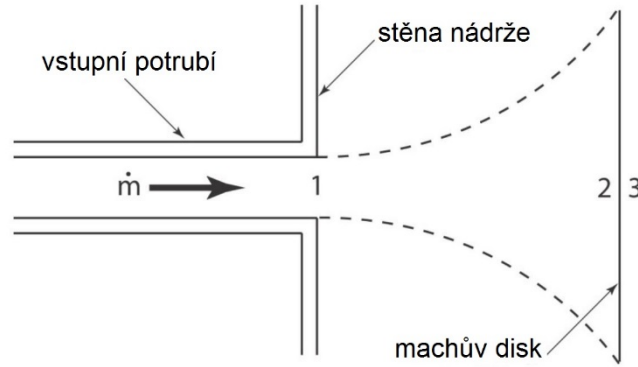
#### 9.2.3. OpenFoam

- Stacionární simulace pomocí *rhoSimpleFoam* je velmi náročná pro dosažení konvergence. Uživatel musí dodržet výše uvedená doporučení a navyšovat tlakový nebo rychlostní rozdíl mezi vstupem a doménou velmi pomalu, navíc musí razantně snížit hodnoty relaxačních faktorů (zejména hustotu:  $\rho$  0.005 a tlak:  $p$  0.01). Jednodušší je užití nestacionárních řešičů *rhoCentralFoam* nebo *sonicFoam*. Nevýhodou je nutnost velmi krátkého časového kroku, což značně navyšuje výpočetní čas. Turbulentní model *k-epsilon* většinou diverguje, proto je lepší použít *k-omega SST*.

#### 9.2.4. FLACS

- Standardně řešič vůbec nedovoluje překročit rychlost zvuku, toto kritérium je nastaveno z důvodů použití tzv. porosity konceptu. Pro modelování rychlých úniků ze zásobníků lze využít tzv. *Jet utility* nebo modelování pomocí *Entrainment modelu*.
- *Jet utilita* počítá s nahrazením reálného zdroje, zdrojem virtuálním (Obrázek 7), který je umístěn až za vyvinutým sonickým proudem (oblast 3), modelovaný problém tedy již neobsahuje proudění o rychlosti vyšší než rychlosti zvuku. Použití této utility neumožňuje sledování vznikajících Machových struktur a sledování proudu v sonické oblasti.



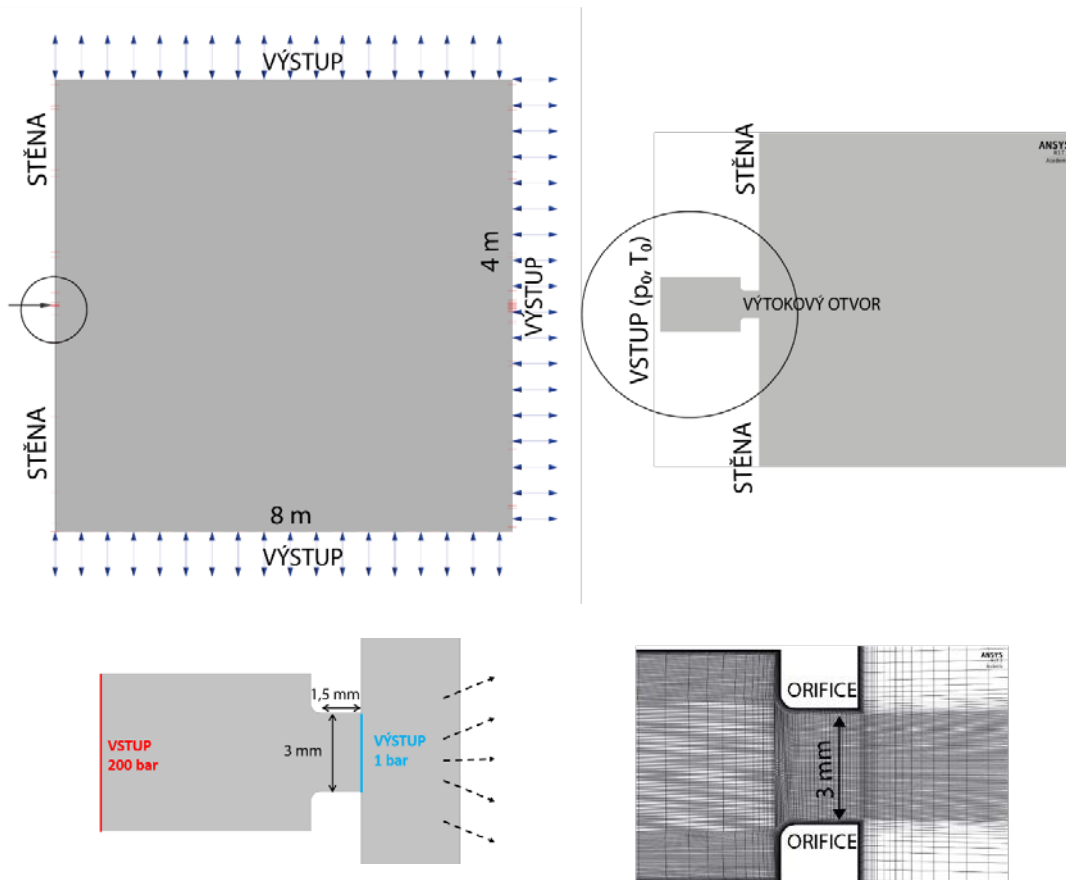


Obrázek 7: Vysvětlení FLACS jet utility

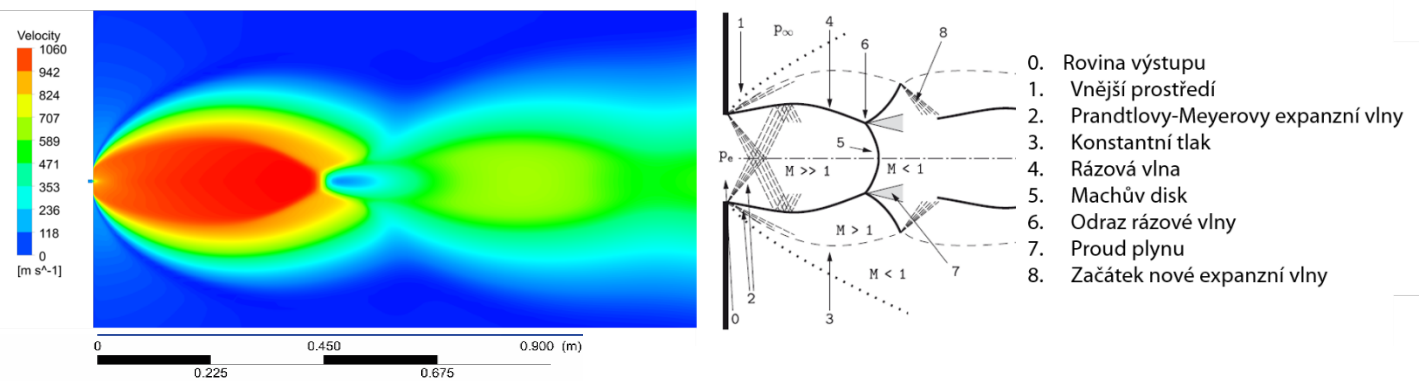
- *Entrainment model* je omezen použitím pro jety které mají proporcionální hmotnostní průtok a rychlost.
- Sledování vývoje proudění v sonické oblasti není s použitím těchto modelů možné.

### 9.2.5. Příklad

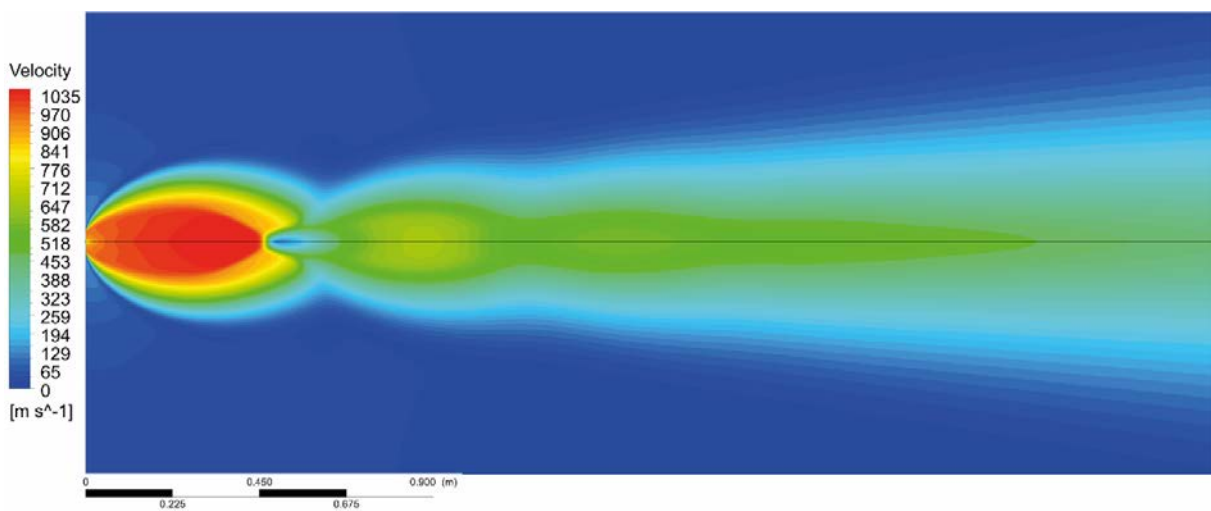
Pro případ CFD simulace výtoku plynu z otvorů bezpečnostní pojistky, který není ničím omezen a může volně proudit do okolí, byla vytvořena doména zobrazena na Obrázku 8. Výtokový otvor měl průměr 3 mm. Ukázky výsledků modelu jsou na Obrázcích 9 až 12. Bylo simulováno tlakové, rychlostní a koncentrační pole.



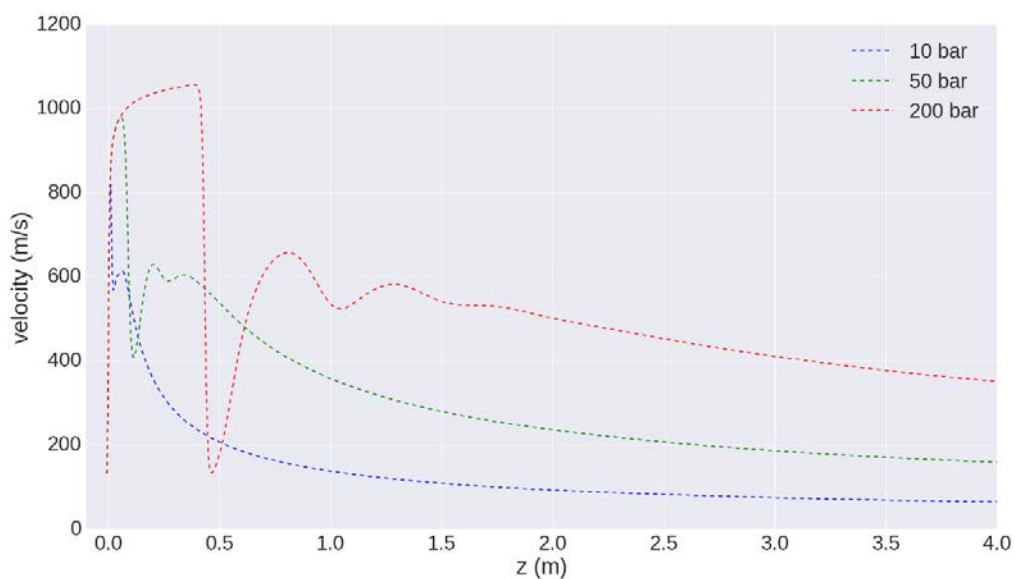
Obrázek 8: Výpočetní doména modelu volného výtoku otvorem o průměru 3mm, detail výtokového otvoru a výpočetní síť.



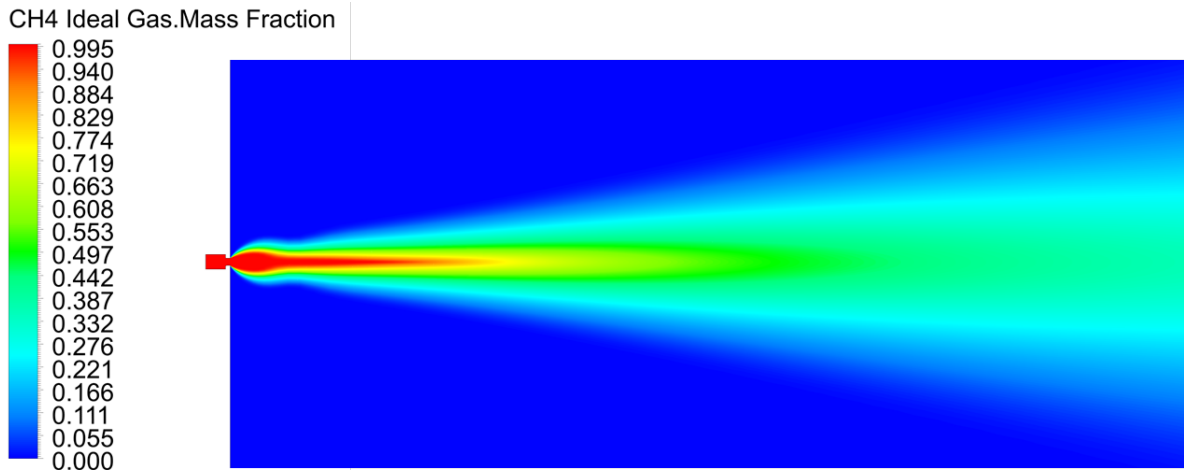
Obrázek 9: Porovnání proudové struktury vytvořené za výtokovým otvorem simulované CFD model a teoretického popisu nadkritické proudové struktury (převzato z Franquet a kol., 2015).



Obrázek 10: Rychlostní pole proudové struktury, která se vytvoří za 3 mm výtokovým otvorem při tlaku na vstupu 200 bar. Ustálená simulace.



Obrázek 11: Rychlost proudění podél osy proudové struktury v závislosti na počátečním tlaku na vstupu do domény.



Obrázek 12: Koncentrační pole metanu za výtakovým otvorem pro tlak na vstupu 10 bar.

### 9.3. Nadkritické proudění pod vozidlem a v bezprostředním okolí – omezený výtok

Proudové struktury vycházejí z výtakových otvorů TPRD a šíří se pod vozidlem a následně do okolí vozidla. Z pohledu tvorby výpočetní domény musí uživatel striktně dodržet pravidla tvorby výpočetních sítí, neboť musí řešit 3D tok v oblasti od výtakových otvorů po širší okolí vozidla. Navíc je třeba dodržet reálnou geometrii v oblasti umístění tlakových zásobníků a geometrii vozidla. Geometrie (především vzdálenost podvozku vozidla od vozovky, nebo plastové součásti karoserie) se v průběhu požáru mění, postihnout ale změnu během CFD výpočtu je prakticky nemožné. V případě otevření výtoku do volného prostoru se vytváří jet, jinak výstupní proudy z výtakových otvorů naráží na pevné části v blízkém okolí ventilů.

Důležité je správné nastavení okrajové podmínky. Maximální tlak v zásobnících je 200 bar. Průchodem ventilem dochází ke tření a důsledkem je tlaková ztráta. Kvalita sítě v těle ventilu a TPRD výrazně ovlivňuje, jaké proudění se za otvorem vyvine. CFD model musí zahrnovat všechny výtokové otvory bezpečnostních pojistek.

#### Cíle výpočtu

*Proudové struktury pod vozidlem v závislosti na geometrii*

- Platí stejná pravidla jako v případě proudění v bezprostřední blízkosti výtakového otvoru. Počáteční vysoká rychlost proudění z trysky se interakcí s pevnými stěnami v okolí utlumuje. Ve výpočetní doméně existují velké gradienty rychlosti a tlaku.
- Na proudění v doméně má výrazný vliv proudění okolního vzduchu, které je vyvoláno rychlým prouděním plynu z TPRD a jeho cirkulací v oblasti ventilů. Doporučeno nechat větší prostor mezi zadní částí vozu a okrajem výpočetní domény pro predikci proudění vzduchu.

#### 9.3.1. Fluent

Doporučená stacionární simulace, při dodržení pravidel úloha dobře konverguje.

#### 9.3.2. CFX

Z důvodu rozdílné velikosti výpočetních buněk a odlišné rychlosti proudění v různých částech domény, je nutné během výpočtu lokálně škálovat časový krok.

### 9.3.3. OpenFoam

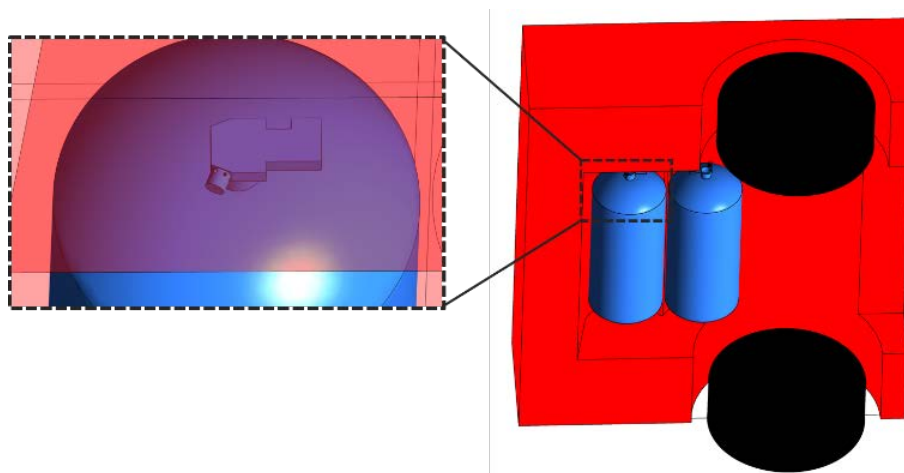
Stacionární simulace diverguje, nutnost použít nestacionární simulaci, výpočet trvá extrémně dlouho díky rozsáhlé doméně a krátkým časovým krokům.

### 9.3.4. FLACS

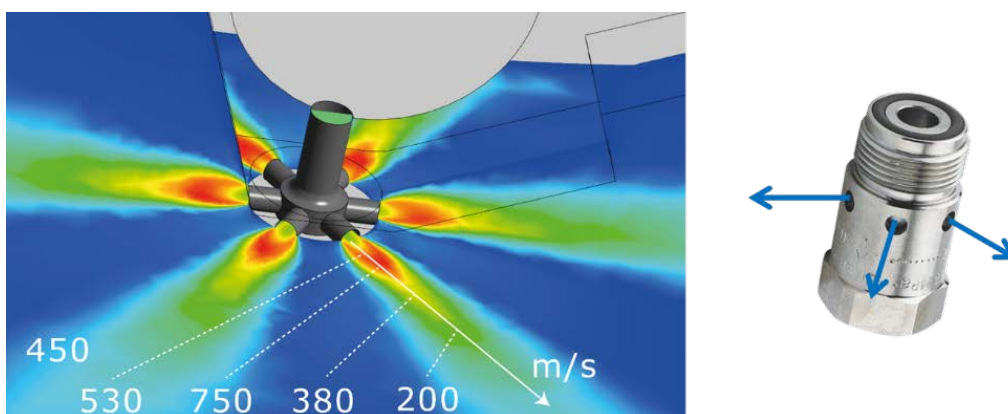
Jak bylo uvedeno i v předchozím případě. FLACS neumožňuje modelování sonických jetů. Při řešení tohoto problému jsou využity „virtuální zdroje“. Pro studium chování úniku plynu v bezprostředním okolí trysky, navíc ohraničené složitou geometrií vozu nelze tento SW použít.

### 9.3.5. Příklad

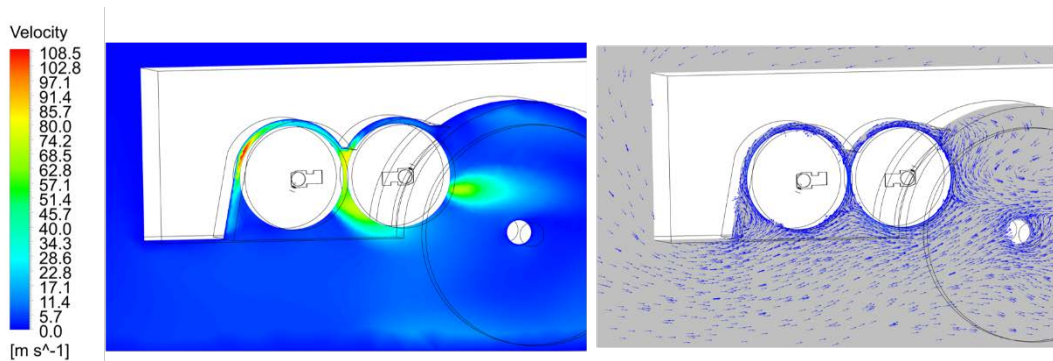
Pro případ CFD simulace výtoku plynu z bezpečnostní pojistky vozidla, který je omezen konstrukčními částmi vozidla, byla vytvořena zjednodušená geometrie zadní části vozu (Obrázek 13). Ve spodní části byly umístěny dvě palivové nádrže. Na každé nádrži byl umístěn multifunkční ventil s bezpečnostní pojistkou s šesti otvory o průměru 3 mm. Byly sledovány směry a rychlost proudění v okolí výtokových otvorů a pod vozidlem.



Obrázek 13: Geometrie výpočetní domény s detailem umístění multifunkčního ventilu a bezpečnostní pojistky.



Obrázek 14: Ukázka šesti proudových struktur, které se vytvoří v bezprostřední blízkosti za výtokovým otvorem bezpečnostní pojistky a odhad rychlosti proudění podél osy proudové struktury. Tlak na vstupu do domény je 100 bar.



Obrázek 15: Predikce směru proudění a velikost rychlosti po rozbití proudové struktury o konstrukční části vozu a samotné zásobníky při tlaku v nádrži 200 bar. Podélný řez uprostřed zadní části vozidla.

#### 9.4. Ekvivalentní tok

Z hlediska modelování disperze plynu do okolí vozidla nás nezajímá detailní struktura proudu plynu v blízké nebo přechodové oblasti, ale pouze charakteristika proudění (rychlost, teplota, hustota) právě v oblasti plně vyvinuté proudové struktury. Modelovat proudění v blízké oblasti metodou CFD je stále výpočetně extrémně náročné a nepoužitelné pro velké domény jako garáže a tunely.

V odborné literatuře [Franquet 2015] se popisuje náhrada nadzvukového proudu pomocí ekvivalentního (fiktivního) proud plynu, který je již v režimu podzvukového proudění. Metoda ekvivalentního toku ale není pro modelování výtoku ze zásobníku vhodná, protože nejsme schopni zachovat hybnost proudů a tím postihnout dynamiku proudění pod vozidlem a zároveň zachovat hmotnostní tok a tím určit množství uvolněného hořlavého plynu do výpočetní domény.

#### 9.5. Disperze plynu do okolí v podkritickém režimu proudění

Řešíme proudění směsi zemní plyn – vzduch v podkritickém režimu proudění, kde rychlost proudění je v řádu metrů za sekundu. Může jít o simulaci úniku zemního plynu např. netěsnostmi v palivové soustavě. Jedná se o standartní úlohu proudění, kdy se navíc přidává řešení transportní rovnice. Díky pomalým rychlostem můžeme uvažovat hustoty složek konstantní. Zemní plyn je reprezentován jedinou složkou – metan, která nebude se vzdušným kyslíkem reagovat.

#### Cíle výpočtu

*Koncentrační pole zemního plynu v okolí vozidla*

- Většinou se jedná o velké výpočetní domény, např. vnitřní garáže nebo otevřené prostory. Základním cílem je většinou detekce spodní nebo horní meze hoření/výbušnosti hořlavého plynu. Při tvorbě geometrie výpočetní oblasti není nutné zahrnovat přesné detaily geometrie vozidel, většinou je postačující zjednodušená geometrie z důvodu výpočetní náročnosti a pomalého proudění tekutin. Důležité je správné (reálné) nastavení okrajových podmínek na hranici výpočetní domény (otvory do otevřeného prostoru, odvětrávání). Pro sledování dynamiky šíření používáme nestacionární výpočet, v tomto případě nepotřebujeme extrémně krátké časové kroky pro udržení konvergence.

##### 9.5.1. Fluent

V případě velkých 3D domén je výhodné převést výpočetní síť z čtyřstěnnů na mnohostěny. Řešení úlohy se urychlí se zachováním přesnosti výpočtu.



### 9.5.2. CFX

- CFX nepodporuje polyhedrální ani kartézské sítě a s velikostí domény komplexního tvaru počet buněk rapidně narůstá.
- Konvergenci výpočtu prospívá použití různého časového kroku v odlišných částech domény.

### 9.5.3. OpenFoam

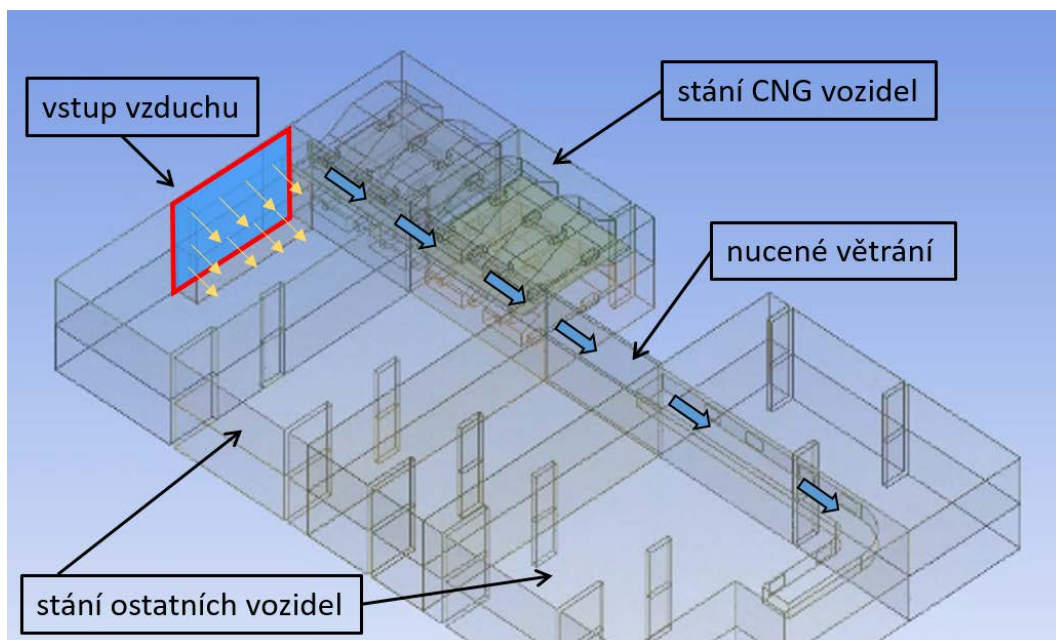
Výpočet koncentračního pole pro pasivní skalár lze provést pomocí základního řešiče *scalarTransportFoam*.

### 9.5.4. FLACS

Výpočet koncentračního pole lze realizovat pomocí modulu *dispersion and ventilation*. Pro modelování výtoku FLACS nabízí několik možností. Pro výtok s nenulovou hybností lze využít model „JET“ nebo „ENTRAINING“. Model „ENTRAINING“ slouží k modelování výtoků o větší rychlosti než 100 m/s. Jedná se o model, který nahrazuje skutečné místo úniku, virtuálním místem úniku, kde je plocha úniku větší a rychlost výtoku nižší. Model zahrnuje i přísun vzduchu pro zachování informace pro výpočet výbušné koncentrace.

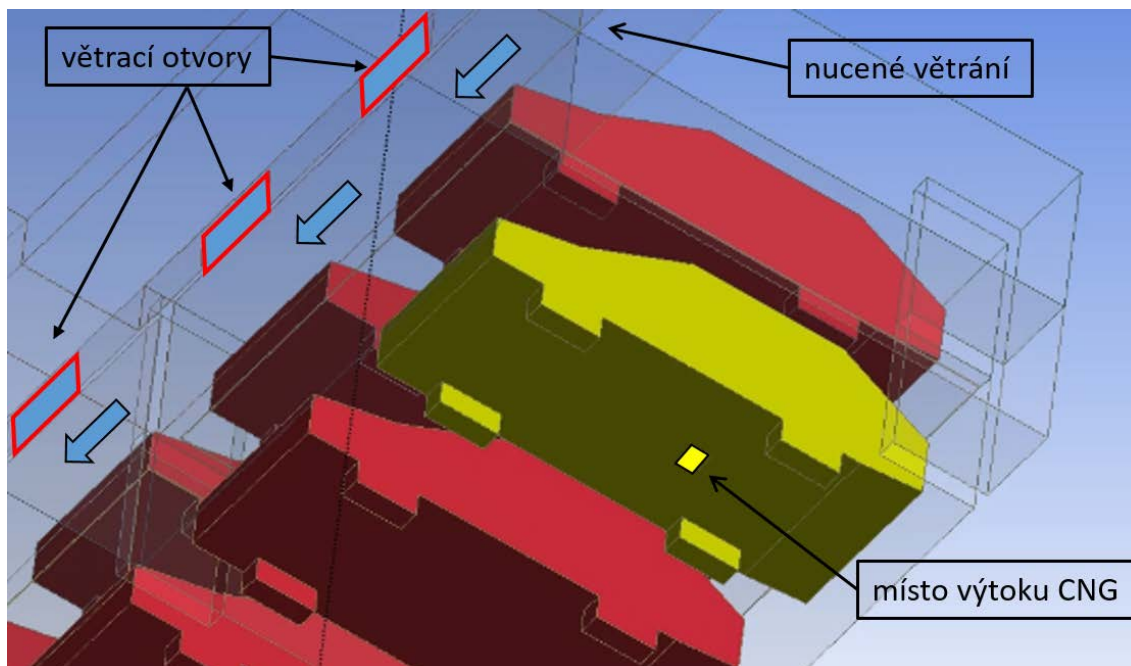
### 9.5.5. Příklad

Pro případ CFD simulace disperze metanu, který uniká podkritickou rychlostí do okolí vozidla, byla vytvořena zjednodušená geometrie celého vozu, která byla umístěna do prostoru uzavřené garáže. Součástí garáže je nucené/havarijní odvětrávání prostoru, přičemž okolní vzduch vstupuje do prostoru garáží přirozeně vjezdovým otvorem. Geometrie výpočetní domény je ukázána na Obrázku 16. Pro simulaci koncentračních profilů zemního plynu (v simulaci nahrazen metanem) byl zvolen únik z vozidla nejvíce vzdáleného od vjezdu do garáží, viz Obrázek 17.

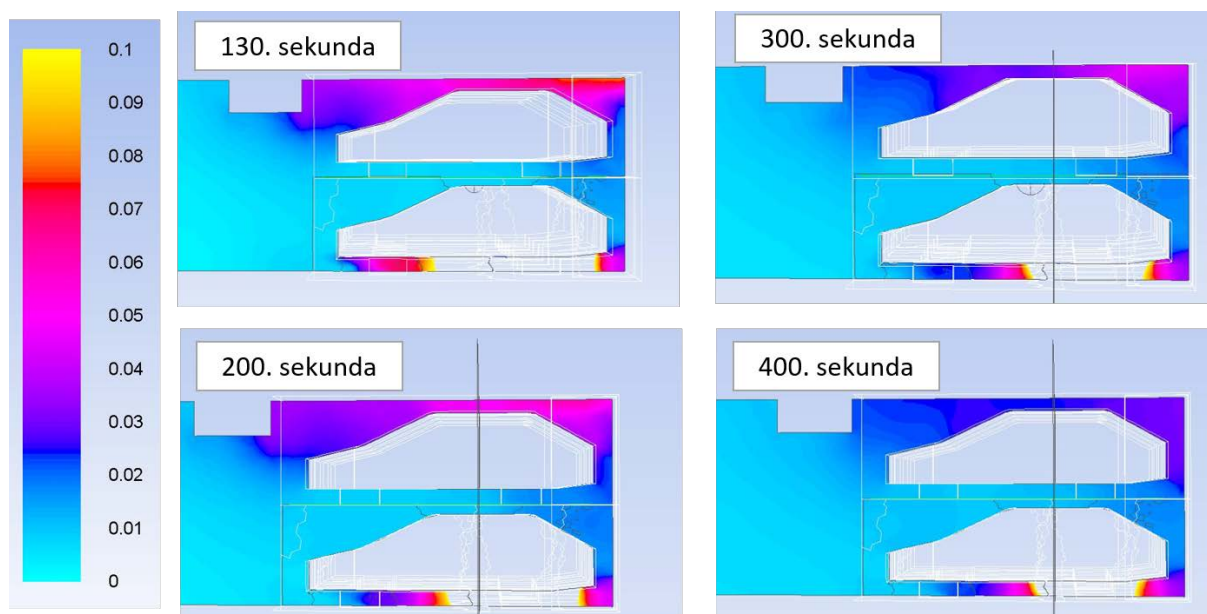


Obrázek 16: Schéma geometrie výpočetní oblasti podzemní garáže





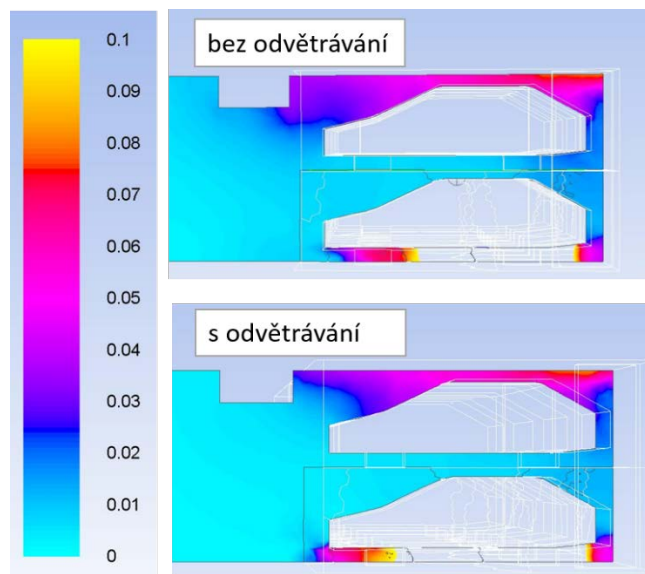
Obrázek 17: Detail vyhrazené části garáže pro CNG vozidla a místo úniku plynu



Obrázek 18: Kontury objemového zlomku metanu v čase při přirozené ventilaci

Kontury objemového zlomku metanu v čase jsou ukázány na Obrázku 18. Pro lepší přehled je zvolen rozsah koncentrací od 0 do 10 obj. %. Metan vytváří výbušnou směs se vzdušným kyslíkem v okrajových oblastech pod vozidlem a u stropu díky menší hustotě. Metan se po dosažení stropní konstrukce pohybuje dále od zdroje úniku.

Při zapnutí havarijního odsávání metan vstupuje do odsávacího potrubí a nedochází k dalšímu šíření od zdroje úniku. V obou případech (přirozené a nucené větrání) vzniká výbušná směs u zadní stěny garáže a přilehlé podstropní oblasti, jak je patrné na Obrázku 19.



Obrázek 19: Kontury objemového zlomku metanu v čase 130 sekund, srovnání přirozené a nucené ventilace

## 9.6. Zahoření plynu

Zahoření plynu (chemická reakce mezi metanem a vzdušným kyslíkem) znamená přidání k základním rovnicím a modelům navíc transportní rovnice, modely spalování (kinetika chemické reakce, zdroj tepla) a model radiace. Jedná se o nejsložitější úlohu, protože společně řešíme mnoho numerických modelů. Řešení je citlivé na udržení konvergence.

### 9.6.1. Cíle výpočtu

*Teplotní pole vzniklé exotermní reakcí*

Pro zjednodušení většinou předpokládáme, že se v systému na počátku vyskytují pouze složky metan, kyslík a dusík. Okamžitou reakcí metanu s kyslíkem vznikají oxid uhličitý a vodní pára. Zanedbáváme vznik oxidu uhelnatého, oxidů dusíku NO<sub>x</sub> a dalších složek (celkově může probíhat víc než 300 reakcí a vznikat kolem 50 různých složek). Volba složitosti reakčního systému záleží na uživateli a zadání. Rychlost proudění ovlivňuje promíchávání složek, naopak intenzita hoření ovlivňuje rychlost proudění. K rovnicím sdílení tepla se přidává rovnice pro přenos tepla sáláním. Většinou se volí jednodušší model P1 před modelem Discrete Ordinates (DO). DO model je přesnější než P1, ale výpočetně náročnější.

### 9.6.2. Fluent

Fluent má připravený interaktivní modul pro specifikaci modelu hoření, počtu reakcí a složek využívající vnitřní databázi.

### 9.6.3. CFX

- Vzhledem k tomu, že úloha zahrnuje více fyzikálních procesů, není doporučeno ji v první kroku řešit komplexně. Doporučujeme oddělit klíčové procesy a modelovat je samostatně. Získané poznatky je pak možné použít pro inicializaci komplexní úlohy.
- Radiační model výrazně prodlužuje dobu výpočtu a zvyšuje složitost modelu. Úlohu je vhodné nejprve vyřešit bez jeho použití.
- Použití reálného popisu plynů přítomných v doméně není doporučeno.

#### 9.6.4. OpenFoam

Řešení v OpenFOAM vyžaduje opravdu zkušeného uživatele. K dispozici jsou různé řešiče např. *rhoReactingFoam* nebo *fireFoam*. Musíme rozlišovat dva různé řešiče *fireFoam*. V rámci distribuce OpenFOAM existuje řešič hoření *combustion/fireFoam*. Utilitu *FireFoam* s řešičem *fireFoam* vytvořila pojišťovací společnost FM Global z důvodu plánování a snížení počtu finančně náročných velkorozměrných požárních zkoušek. Utilita *FireFoam* zahrnuje modely pro hoření, hašení a také samostatné modely turbulence, neboť pro modelování turbulence využívá metodu velkých vírů (Large Eddy Simulation, LES). *FireFoam* od FM Global je kompilována pro verzi OpenFOAM 2.2. Pro použití v řešiči OpenFOAM 6.x je nutno provést úpravy a následnou kompilaci.

#### 9.6.5. FLACS

Pro případ zahoření lze použít buď modul *FLACS-Explosion*, nebo *FLACS-Fire*, podle toho jaké chování plynu chceme studovat.

*Flacs-Explosion* slouží k předpovězení výbuchových parametrů exploze směsi plynu s oxidovadlem. Výbušný mrak je možné buď vytvořit pomocí modulu *FLACS-Dispersion*, nebo využít přednastavené scénáře. Scénáře byly vyvinuty pro usnadnění tvorby analýz rizik. Jedná se o koncept, který skutečný mrak hořlavého plynu nahrazuje mrakem se stechiometrickou koncentrací a velikostí odpovídající velikosti předpokládaného hořlavého mraku. Čas iniciace se nastavuje uživatelsky. Pomocí tohoto modulu lze modelovat explozi již vyvinutého mraku plynu. Modul *FLACS-Fire* slouží k modelování tzv. „jet fires“ a „pool fires“. Tento modul lze použít pro simulaci úniku CNG, který je následně ihned iniciován a odhořívá.

Oba zmíněné moduly mají zapnutí expertního nastavení omezeny volby pro uživatelskou změnu, tak aby bylo usnadněno použití pro inženýrskou praxi.

## 10. Literatura

[Assael a Kakosimos 2010] Assael, M., J., Kakosimos K., E., 2010. Fires, explosions and toxic gas dispersions. Effect calculation and risk analysis, CRC Press, USA.

[Brumovská 1995] Brumovská, I. Speciální chemie pro požární ochranu: učební texty. Vyd. 2., Praha: Uniapress, 1995.

[EHK/OSN č. 110] EHK/OSN č. 110, 2007. Jednotná ustanovení pro schvalování typu. I. zvláštních součástí motorových vozidel, která ve svém pohonném systému používají stlačený zemní plyn (CNG); II. vozidel s ohledem na zástavbu zvláštních součástí schváleného typu pro použití stlačeného zemního plynu (CNG) k jejich pohonu; Dodatek 109: Předpis č. 110.

[FDS User's Guide] Fire Dynamics Simulator User's Guide, NIST Special Publication 1019.

[Franquet 2015] Franquet, E., Perrier, V., Gibout, S., Bruel, P., 2015. Free underexpanded jets in a quiescent medium: A review, *Progress in Aerospace Sciences* **77**, 25-53.

[Sullivan 1981] Sullivan, D. A., 1981. Historical review of real-fluid isentropic flow models, *Journal of Fluids Engineering* **103**, 258–267.

[Toman 2016] Toman, S., 2016. Větrání hromadných garáží s vozidly na plynná paliva, Sborník konference Požární ochrana 2016, 21. - 22. září 2016 Ostrava.

## 11. Seznam obrázků

Obrázek 1: Schéma možných míst úniku plynu z CNG systému v osobním vozidle.....	4
Obrázek 2: Umístění nádrží ve vozidle, umístění lahví v držáku, detail multifunkčního solenoidového .....	5
Obrázek 3: Rychlost proudění a hmotnostní tok plynu jako funkce poměru tlaků uvnitř a vně tlakové nádoby.....	6
Obrázek 4: pokles tlaku v nádrži naměřený experimentálně při mechanicky iniciovaném otevření pojistky s počátečním tlakem v nádrži 200 bar a pokles tlaku vypočítaný isoentropickým modelem s různými hodnotami výtokového koeficientu (počáteční tlak v nádrži 200 bar, počáteční teplota plynu 25 °C).....	11
Obrázek 5: Průřez zjednodušenou geometrií multifunkčního ventilu a bezpečnostní pojistky a řez rovinou výtokového otvoru se zobrazenou hodnotou celkového tlaku.....	11
Obrázek 6: vliv počáteční teploty plynu na hmotnostní tok plynu vypočítaný izoentropickým modelem (počáteční tlak 200 bar, výtokový koeficient 0,2).....	12
Obrázek 7: Vysvětlení FLACS jet utility.....	22
Obrázek 8: Výpočetní doména modelu volného výtoku otvorem o průměru 3mm, detail výtokového otvoru a výpočetní sítě.....	22
Obrázek 9: Porovnání proudové struktury vytvořené za výtokovým otvorem simulované CFD model a teoretického popisu nadkritické proudové struktury (převzato z Franquet a kol., 2015). .....	23
Obrázek 10: Rychlostní pole proudové struktury, která se vytvoří za 3 mm výtokovým otvorem při tlaku na vstupu 200 bar. Ustálená simulace.....	23
Obrázek 11: Rychlost proudění podél osy proudové struktury v závislosti na počátečním tlaku na vstupu do domény.....	23

---

Obrázek 12: Koncentrační pole metanu za výtokovým otvorem pro tlak na vstupu 10 bar.....	24
Obrázek 13: Geometrie výpočetní domény s detailem umístění multifunkčního ventilu a bezpečnostní pojistky.....	25
Obrázek 14: Ukázka šesti proudových struktur, které se vytvoří v bezprostřední blízkosti za výtokovým otvorem bezpečnostní pojistky a odhad rychlosti proudění podél osy proudové struktury. Tlak na vstupu do domény je 100 bar. ....	25
Obrázek 15: Predikce směru proudění a velikost rychlosti po rozbití proudové struktury o konstrukční části vozu a samotné zásobníky při tlaku v nádrži 200 bar. Podélný řez uprostřed zadní části vozidla.....	26
Obrázek 16: Schéma geometrie výpočetní oblasti podzemní garáže .....	27
Obrázek 17: Detail vyhrazené části pro CNG vozidla a pozice úniku plynu .....	28
Obrázek 18: Kontury objemového zlomku metanu v čase při přirozené ventilaci .....	28
Obrázek 19: Kontury objemového zlomku metanu v čase 130 sekund, srovnání přirozené a nucené ventilace.....	29