

بررسی مدت زمان کاهش غلظت گازسومان در محیط داخلی با دینامیک سیالات محاسباتی

حسن توکلی^۱، مسلم ابروفراخ^۲، رسول امیرخانی^۳

چکیده

بررسی توزیع گاز سومان و زمان ایمن (زمانی که غلظت گاز سومان کمتر از ۱ میلی گرم بر متر مکعب باشد) از نظر دفاعی و ایمنی بسیار مهم است. به همین دلیل، در این مطالعه، زمان ایمن و توزیع گاز سومان در یک محیط داخلی با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی سه بعدی ناپایا تحلیل شد. در مرحله اول، استقلال از مش و اعتبارسنجی مدل انجام شد و سپس توزیع گاز و غلظت آن در محیط داخلی مورد بررسی قرار گرفت. نتایج نشان داد که غلظت اولیه گاز سومان و سرعت ورودی هوا تأثیر قابل توجهی بر مدت زمان ایمن دارند. با افزایش سرعت ورودی هوا از ۱ متر بر ثانیه به ۲ متر بر ثانیه، زمان ایمن حدود ۵۰ درصد کاهش یافت. این کاهش به دلیل افزایش نرخ انتقال جرم و جابه جایی هوا در محیط است. زمان ایمن در سرعت ۱ متر بر ثانیه ۴/۶۵ دقیقه، در سرعت ۱/۵ متر بر ثانیه ۳/۵۵ دقیقه و در سرعت ۲ متر بر ثانیه ۲/۳ دقیقه به دست آمد. از سوی دیگر، غلظت اولیه نیز تأثیر مهمی بر زمان ایمن دارد؛ به طوری که زمان ایمن در غلظت اولیه ۱۰ میلی گرم بر متر مکعب ۲/۳ دقیقه، برای ۲۰ میلی گرم ۳/۰۵ دقیقه و برای ۳۰ میلی گرم ۳/۵۵ دقیقه به دست آمد. بنابراین، افزایش غلظت اولیه گاز سومان از ۱۰ میلی گرم به ۳۰ میلی گرم باعث افزایش ۵۴ درصدی زمان ایمن شد.

کلمات کلیدی: گاز سومان، محیط داخلی، مدل سازی، دینامیک سیالات محاسباتی

۱- استادیار گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه امام علی (ع)، تهران، ایران: (نویسنده مسئول:

hs.tavakoli51@gmail.com)

۲- گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه امام علی (ع)، تهران، ایران

۳- گروه شیمی، دانشکده علوم پایه، دانشگاه امام علی (ع)، تهران، ایران

مقدمه

عوامل شیمیایی جنگی در مقیاس وسیع در نقاط مختلف جهان انباشته شده‌اند که این امر نگرانی‌های زیست‌محیطی و امنیتی قابل توجهی ایجاد می‌کند (آلبرگشو^۴ و همکاران). مدیریت این ذخایر به دلیل ماهیت خطرناک مواد و پیچیدگی‌های مرتبط با حمل‌ونقل و ذخیره‌سازی آن‌ها چالش‌برانگیز است (الدحاق^۵ و همکاران). از بین بردن سریع و ایمن این مواد، به‌ویژه در مناطق دورافتاده یا دشوار برای دسترسی، اقدامی ضروری است تا از انتشار آن‌ها به محیط‌های اطراف و ایجاد خطرات بالقوه برای سلامت انسان‌ها و اکوسیستم‌ها جلوگیری شود (کیه^۶ و همکاران). علاوه بر این، روش‌های تخریب باید کارایی بالا و ایمنی کافی را برای کاهش اثرات جانبی و آلودگی‌های ثانویه تضمین کنند (ما^۷ و همکاران). توسعه فناوری‌های نوین در این حوزه می‌تواند نقش مهمی در بهبود فرآیندهای تخریب و کاهش خطرات ناشی از ذخایر این مواد ایفا کند (موخوپادیای^۸ و همکاران، ۲۰۲۱).

تهدید ناشی از عوامل شیمیایی جنگی مانند سومان در سطح جهانی، لزوم بهبود روش‌های شناسایی، انهدام ذخایر و پاکسازی محیط‌های آلوده را برجسته کرده است (بالو^۹ و همکاران، ۲۰۲۱). این اقدامات به‌منظور کاهش خطرات بالقوه و محافظت از سلامت نظامیان و غیرنظامیان در برابر اثرات مخرب این عوامل انجام می‌شود (دیویس^{۱۰} و همکاران). در این میان، درک دقیق رفتار سارین روی سطوح مختلف، از جمله سطوح فلزی و غیر فلزی، نقش کلیدی در توسعه روش‌های مؤثر برای کاهش آلودگی دارد (لی^{۱۱} و همکاران، ۲۰۲۳). با این حال، به دلیل سمی بودن بالای سارین و خطرات مرتبط با کار با آن، اکثر آزمایش‌های آزمایشگاهی با استفاده از مواد جایگزین و ایمن‌تر انجام می‌شود تا ایمنی پژوهشگران تضمین شود (سینگر^{۱۲} و همکاران، ۲۰۰۵). این رویکرد امکان بررسی دقیق خواص فیزیکی و شیمیایی مشابه را بدون قرار گرفتن در معرض خطرات مستقیم فراهم می‌کند (تیسوشفسکی^{۱۳} و همکاران، ۲۰۲۰).

چوهان^{۱۴} و همکاران (۲۰۱۵) توزیع گاز در محیط‌های داخلی را با استفاده از مدل‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی در یک اتاق نشیمن با تهویه طبیعی بررسی کردند. هدف این مطالعه، ارزیابی میزان فعالیت و تحلیل تأثیر تهویه طبیعی بر غلظت گاز رادون در فضای داخلی بود. نتایج شبیه‌سازی تطابق خوبی با داده‌های اندازه‌گیری شده داشت. ژو^{۱۵} و همکاران، (۲۰۰۱) نیز از دینامیک سیالات محاسباتی برای بررسی توزیع سه‌بعدی گازهای خطرناک رادون و توروون استفاده کردند. شبیه‌سازی‌های آن‌ها نشان داد که در یک اتاق با تهویه طبیعی، توزیع گاز به‌طور کلی یکنواخت است. صدیقی^{۱۶} و همکاران (۲۰۱۲) به کمک یک مدل دینامیک سیالات محاسباتی، خطرات زیست‌محیطی ناشی از نشت مداوم و تشخیص‌نداده‌شده گاز کلر در محیط‌های صنعتی داخلی را بررسی کردند. شبیه‌سازی‌ها نشان داد که گاز کلر، به دلیل تراکم بالا، به‌صورت لایه‌ای در کف پخش شده و با افزایش ارتفاع، غلظت آن نیز افزایش می‌یابد که این پدیده به لایه‌بندی و رقیق شدن گاز اشاره دارد (یانگ^{۱۷} و همکاران (۲۰۱۴) به کمک شبیه‌سازی دینامیک سیالات محاسباتی،

⁴Aalbergsjø

⁵Aldahhak

⁶Kye

⁷Ma

⁸Mukhopadhyay

⁹Balow

¹⁰Davis

¹¹Li

¹²Singer

¹³Tsyshevsky

¹⁴Chauhan

¹⁵Zhuo

¹⁶Siddiqui

¹⁷Yang

نحوه توزیع دما، سرعت باد و سن هوا را در یک اتاق خواب با تهویه دیواری در تابستان بررسی کردند. نتایج نشان داد که این سیستم به خوبی بار حرارتی اتاق را کنترل کرده و شرایط آسایش حرارتی را با سرعت مناسب باد در محیط فراهم می‌کند. ویدیاتموجو^{۱۸} و همکاران (۲۰۱۶) برای مدل‌سازی انتشار گاز در ایستگاه‌های مترو از دینامیک سیالات محاسباتی و اصول انتقال جرم گسسته استفاده کردند. نتایج مدل آن‌ها که با آزمایش‌های انتشار گاز اعتبارسنجی شد، دقت مناسبی را نشان داد. دولزال^{۱۹} و همکاران (۲۰۲۰) با استفاده از نرم‌افزار انی لجیک^{۲۰}، شبیه‌سازی حمله گاز سارین در متروی توکیو را انجام داده و با بررسی سناریوهای مختلف، راهکارهایی برای کاهش تلفات در حوادث مشابه پیشنهاد دادند. حسینی^{۲۱} و همکاران (۲۰۲۲) با به‌کارگیری دینامیک سیالات محاسباتی، انتشار گاز سارین در یک ایستگاه مترو را در شرایط حضور و عدم حضور قطار مدل‌سازی کردند. یافته‌های آن‌ها نشان داد که در غیاب قطار، غلظت سارین به سطح مرگبار (۸۰ میلی‌گرم دقیقه بر متر مکعب) طی ۲۰ دقیقه می‌رسد. با این حال، اثر پیستون قطار به‌طور چشمگیری دوز سارین را به ۲۵ میلی‌گرم دقیقه بر متر مکعب کاهش داد و بر اهمیت تهویه و واکنش سریع برای کاهش تهدید تأکید کرد. فاژی^{۲۲} و همکاران (۲۰۲۳) با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی و فرض‌های ساده‌شده، مدل‌های عددی برای ایستگاه‌های مترو ایجاد کردند. هدف اصلی مطالعه آن‌ها پیش‌بینی تأثیر باد ناشی از حرکت قطار بر جریان هوا بود، اما به دلیل پیچیدگی منابع جریان، قابلیت تعمیم مدل محدود بود. همچنین، آن‌ها نتایج شبیه‌سازی‌های خود را با داده‌های میدانی مقایسه کردند. پارکاش^{۲۳} و همکاران (۲۰۲۴) با بررسی کاربرد دینامیک سیالات محاسباتی در محیط‌های داخلی و مرور مدل‌های مختلف انتشار گاز، بر اهمیت این روش در شناسایی خطرات داخلی تأکید کردند و به حوزه‌هایی که نیازمند تحقیقات بیشتری هستند اشاره نمودند. در مطالعه لین^{۲۴} و همکاران (۲۰۲۴)، از یک شبکه عصبی مبتنی بر دینامیک سیالات محاسباتی برای تحلیل انتشار آلاینده‌ها در محیط‌های شهری استفاده شد. یافته‌ها نشان داد که جریان معکوس در نواحی پشت به باد ساختمان‌ها مانع از تخلیه آلاینده‌ها می‌شود، اما کاهش انتشار آلاینده‌ها نقش مؤثری در بهبود کیفیت هوا داشت.

مطالعات پیشین به بررسی انتشار گازهای عصبی با استفاده از مدل‌های دینامیک سیالات محاسباتی پرداخته‌اند، اما تاکنون توجه کافی به مطالعه مدت زمان کاهش غلظت گاز سومان در محیط‌های داخلی معطوف نشده است. در حالی که یکی از سناریوهای محتمل، وقوع حمله شیمیایی در فضاهای بسته است. در چنین شرایطی، ممکن است امکان دسترسی سریع به محل حادثه یا تخلیه فوری افراد وجود نداشته باشد. بنابراین، استفاده از سیستم‌های تهویه هوا می‌تواند نقش مؤثری در کاهش غلظت گاز و فراهم کردن زمان کافی برای انجام اقدامات اضطراری جهت کاهش تلفات ایفا کند. علاوه بر این، برای افزایش ایمنی، لازم است تمامی شرایط محتمل در سناریوهای دفاعی مورد بررسی قرار گیرد. بنابراین، بررسی کاهش غلظت گاز سومان در محیط‌های داخلی که در آن غلظت گاز عصبی به ۱ میلی‌گرم بر متر مکعب می‌رسد، که به‌عنوان غلظت ایمن برای انسان‌ها در نظر گرفته می‌شود، امری ضروری است. این مدل می‌تواند در طراحی فضاهای داخلی ایمن مؤثر واقع شده و خطرات احتمالی را به حداقل برساند. به این ترتیب، مطالعه دقیق مدت زمان کاهش غلظت گاز سومان، برای پیش‌بینی زمان ایمن از اهمیت بالایی برخوردار است.

¹⁸ Widiatmojo

¹⁹ Dolezal

²⁰ Any Logic

²¹ Hossaini

²² Faugier

²³ Parkash

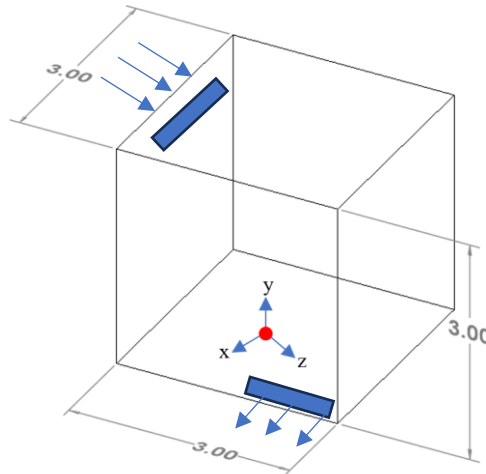
²⁴ Lin

این پژوهش با هدف تحلیل مدت زمان کاهش گاز عصبی سومان در محیط‌های داخلی، از مدل‌سازی سه‌بعدی دینامیک سیالات محاسباتی استفاده می‌کند. ابتدا مدل دینامیک سیالات محاسباتی مورد اعتبارسنجی قرار گرفته و سپس توزیع سرعت و غلظت گاز سومان بررسی می‌شود. اثرات سرعت هوای ورودی و غلظت گاز اولیه بر مدت زمان کاهش غلظت گاز سومان از طریق شبیه‌سازی‌های دینامیک سیالات محاسباتی تحلیل می‌گردد.

روش‌شناسی پژوهش

در این مطالعه، انتشار گاز سومان در محیط داخلی با استفاده از مدل سه‌بعدی گذرا دینامیک سیالات محاسباتی بررسی می‌شود. برای مدل دینامیک سیالات محاسباتی، از معادلات پیوستگی، مومنتوم و انتقال جرم به همراه معادله آشفته $k-\epsilon$ با استفاده از توابع استاندارد دیواره استفاده می‌شود. توابع استاندارد دیواره^{۲۵} روشی برای مدل‌سازی جریان‌های آشفته نزدیک دیواره‌ها در شبیه‌سازی‌های دینامیک سیالات محاسباتی (CFD) هستند. این توابع به جای حل دقیق معادلات آشفته در نزدیکی دیواره، که نیازمند شبکه‌بندی بسیار ریز و محاسبات سنگین است، از روابط تجربی برای تقریب رفتار جریان در این ناحیه استفاده می‌کنند.

مدل دینامیک سیالات محاسباتی جریان هوای تازه که وارد محیط داخلی می‌شود را شبیه‌سازی کرده و زمان رسیدن غلظت گاز سومان به کمتر از ۱ میلی‌گرم بر متر مکعب (زمان ایمن) را محاسبه می‌کند. در این مطالعه، محیط داخلی به‌عنوان یک اتاق استاندارد با ورودی هوا و منطقه باز مانند ناحیه زیر درب در نظر گرفته می‌شود. در شکل محیط سه بعدی داخلی نشان داده شده است. عرض کانال ورودی ۱ متر و ارتفاع آن ۰/۲ متر است. همچنین عرض کانال خروجی ۱ متر و ارتفاع آن ۰/۱ متر می‌باشد.



شکل ۱: محیط سه بعدی داخلی به همراه کانال ورودی و خروجی (ابعاد برحسب متر است)

معادلات و شرایط مرزی

در مدل محاسباتی فرض می‌شود که جریان به‌صورت سه‌بعدی، آشفته و ناپایدار است و سیستم به شکل ایزوترمال در نظر گرفته می‌شود. با توجه به این شرایط، معادلات حاکم شامل پیوستگی، مومنتوم، آشفته‌گی و انتقال جرم به‌صورت

زیر قابل بیان هستند (ما^{۲۶} و همکاران، ۲۰۱۸). همچنین ضریب نفوذ از طریق معادله ۸ محاسبه می‌شود (اندرنگارد^{۲۷} و همکاران، ۲۰۱۰).

$$\begin{aligned}
 (۱) \quad & \text{معادله پیوستگی} \quad \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \\
 (۲) \quad & \text{معادله مومنتوم} \quad \rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho (\nabla \cdot \mathbf{u}) \mathbf{u} = \nabla \cdot [-p\mathbf{I} + \mathbf{K}] \\
 & \quad \mathbf{K} = \mu (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) \\
 (۳) \quad & \text{معادله آشفته‌گی (انرژی جنبشی)} \quad \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) k = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_k} + \mu \right) \nabla k \right] + P_k - \rho \varepsilon \\
 (۴) \quad & \text{معادله آشفته‌گی (پراکندگی)} \quad \rho (\mathbf{u} \cdot \nabla) \varepsilon = \nabla \cdot \left[\left(\frac{\mu_T}{\sigma_k} + \mu \right) \nabla \varepsilon \right] + \frac{C_{\varepsilon 1} \varepsilon}{k} P_k - \frac{C_{\varepsilon 2} \rho \varepsilon^2}{k} \\
 (۵) \quad & \text{ترم آشفته‌گی} \quad P_k = \mu_T [\nabla \mathbf{u} : (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) - \frac{2}{3} (\nabla \mathbf{u})^2] - \frac{2}{3} \rho k \nabla \cdot \mathbf{u} \\
 (۶) \quad & \text{گرانروی آشفته} \quad \mu_T = \frac{\rho C_\mu k^2}{\varepsilon} \\
 (۷) \quad & \text{انتقال جرم} \quad \frac{\partial c}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c) + \mathbf{u} \cdot \nabla c = 0 \\
 (۸) \quad & \text{ضریب نفوذ} \quad D = \frac{4.14 \times 10^{-4} T^{1.9} \sqrt{\frac{1}{MW_B} + \frac{1}{MW_A}} MW_A^{-0.33}}{p}
 \end{aligned}$$

در این معادلات، $\mathbf{u}$ به‌عنوان بردار سرعت، ρ چگالی سیال، p فشار و μ ویسکوزیته تعریف می‌شوند. متغیر c غلظت عامل عصبی را نشان می‌دهد، D ضریب نفوذ گاز A در هوا و MW وزن مولکولی گاز هستند. همچنین، k انرژی جنبشی آشفته و ε نرخ اتلاف آن را بیان می‌کنند. ویسکوزیته آشفته با μ_T مشخص می‌شود، T نشان‌دهنده دما است و مقادیر C_{μ} ، $C_{\varepsilon 1}$ و $C_{\varepsilon 2}$ به‌عنوان ثابت‌های مورد استفاده در مدل‌های آشفته‌گی به کار می‌روند.

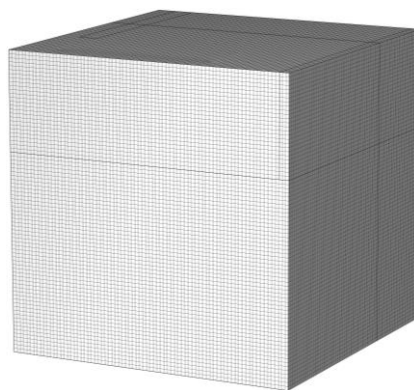
شرایط مرزی این مدل به شرح زیر است: در ناحیه ورودی، سرعت جریان هوا برای شبیه‌سازی جریان سیال تعیین می‌گردد. در ناحیه خروجی، فشار اتمسفری به‌عنوان شرط مرزی جریان سیال اعمال شده و برای انتقال جرم از شرط بدون گرادیان استفاده می‌شود. در خروجی هر سیستم معمولاً برای معادله نفوذ و جابه‌جایی جایی مانند معادله انتقال جرم، شرط مرزی گرادیان برابر صفر ($\nabla c = 0$) در نظر گرفته می‌شود. دلیل این موضوع این است که در مرز خروجی سیستم، تغییرات غلظت بین المان‌های مرز خروجی با المان‌های همسایه مرز خروجی ناچیز است این شرایط منجر به شرط گرادیان غلظت برابر با صفر می‌شود. سایر مرزها دارای شرط بدون لغزش برای جریان سیال و شرط بدون شار

برای انتقال جرم هستند. تمامی معادلات با بهره‌گیری از نرم‌افزار COMSOL Multiphysics و به روش اجزای محدود حل می‌شوند. همچنین شرط اولیه مدل شامل غلظت اولیه گاز سومان در محیط داخلی است. شرط همگرایی در هر گام زمانی وابسته به همگرایی معادلات پیوستگی، مومنتوم، آشفستگی و انتقال جرم است. شرط همگرایی در این معادلات خطای نسبی $0/0001$ در نظر گرفته شد.

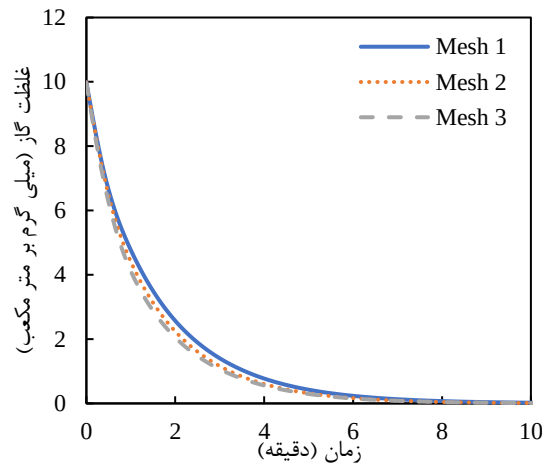
نتایج و بحث

استقلال از مش

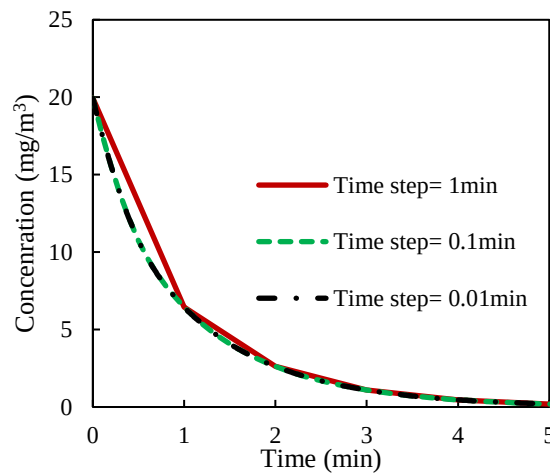
در این مطالعه از مش ساختاریافته برای انجام محاسبات استفاده شده است. شکل ۲ شبکه مش مدل فعلی را نمایش می‌دهد. در شکل ۳، سه شبکه با تعداد المان‌های ۲۲۴۰۰، ۴۴۵۰۰ و ۹۴۲۰۰ به ترتیب نشان داده شده‌اند که به منظور بررسی استقلال از شبکه مورد استفاده قرار گرفته‌اند. در این شکل، تغییرات غلظت گاز سومان بر حسب زمان بررسی شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، اختلاف بین مش ۱ و ۲ معادل $1/3$ درصد و بین مش ۲ و ۳ معادل $0/8$ درصد است. بنابراین، برای دستیابی به دقت بالاتر، مش ۲ برای محاسبات انتخاب شد. در شکل ۴، برای بررسی استقلال نتایج از گام زمانی، غلظت گاز سومان در محیط برای چندین گام زمانی رسم شده است. با توجه به شکل، مشخص است که تفاوت بین گام زمانی $0/1$ دقیقه و $0/01$ دقیقه تقریباً صفر است. بنابراین، گام زمانی $0/1$ دقیقه برای محاسبات استفاده شده است.



شکل ۲: مش مدل حاضر



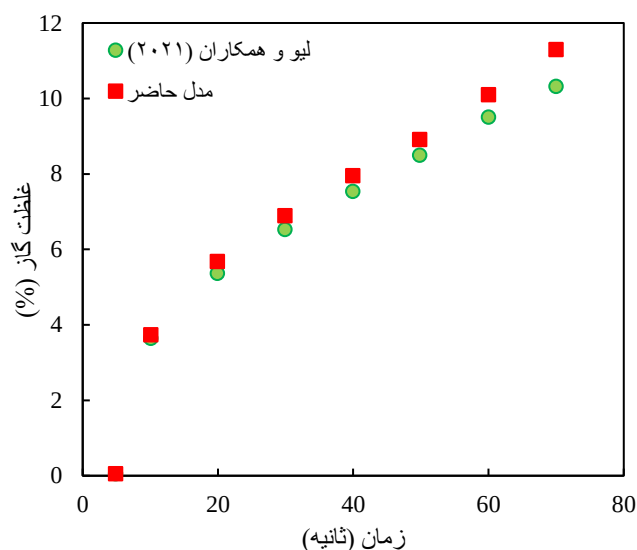
شکل ۳: بررسی استقلال از مش مدل



شکل ۴: بررسی استقلال از گام زمانی

اعتبارسنجی مدل

به دلیل خطرات موجود در آزمایش گاز سومان، انجام مطالعات تجربی در این حوزه توصیه نمی‌شود. به همین منظور، برای اعتبارسنجی مدل، از داده‌های ارائه‌شده توسط لیو و همکاران که به بررسی جریان هوا همراه با یک گاز ردیاب در محیط سه‌بعدی پرداخته‌اند، استفاده شده است. در مطالعه آن‌ها از سنسور غلظت ردیاب در فاصله ۰/۴ متر از محل ورودی استفاده شده است. برای مدل حاضر، غلظت گاز در محل سنسور ردیاب محاسبه شده است. شکل ۵ تغییرات غلظت گاز را در طول زمان برای داده‌های تجربی لیو^{۲۸} و همکاران و مدل شبیه‌سازی حاضر نمایش می‌دهد. نتایج نشان می‌دهد که میانگین خطای نسبی بین مدل شبیه‌سازی و داده‌های تجربی برابر با ۵ درصد است که حاکی از تطابق مناسب مدل با داده‌های تجربی می‌باشد.



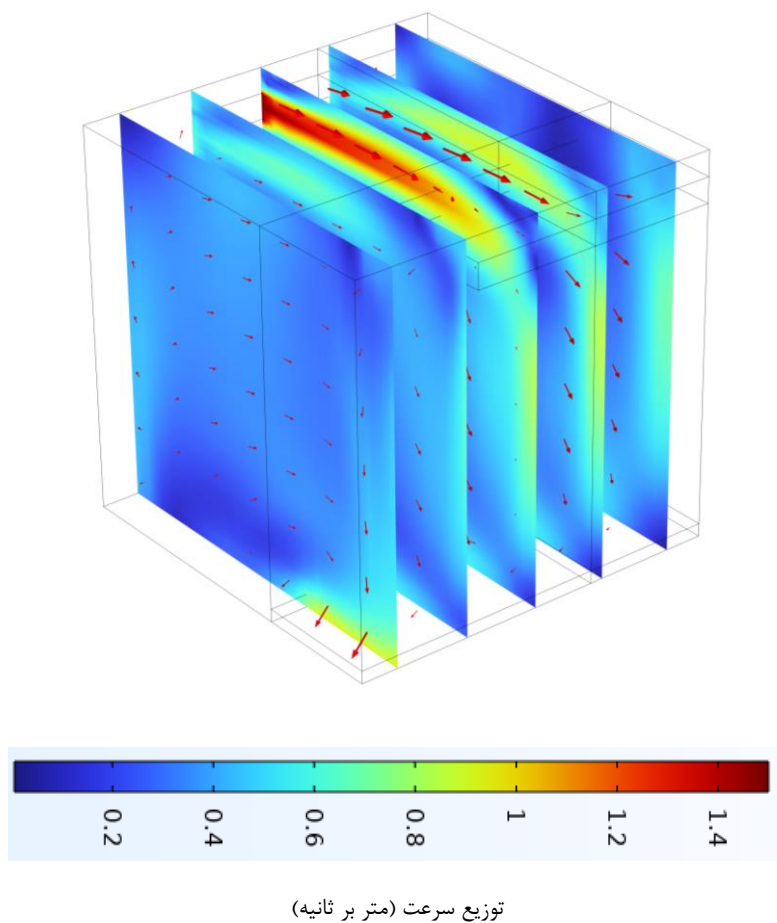
شکل ۵: اعتبار سنجی مدل با داده‌های لیو و همکاران (۲۰۲۱)

توزیع سرعت و غلظت

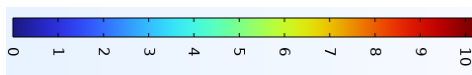
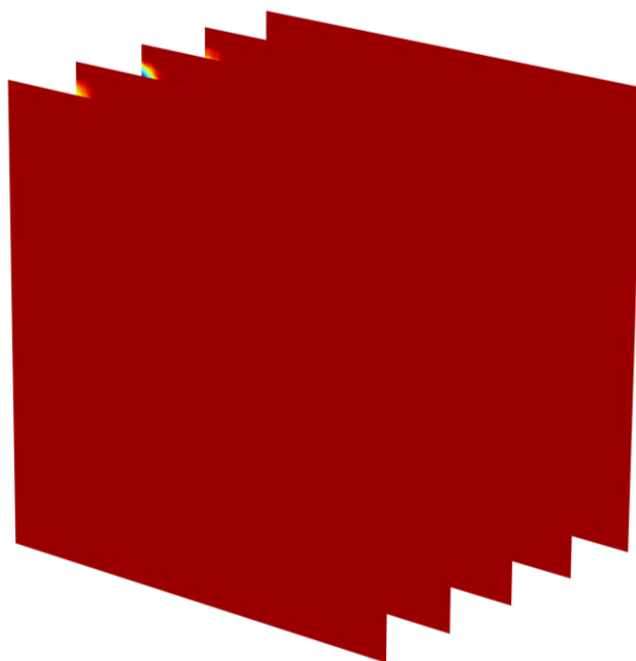
در شکل ۶ توزیع سرعت هوا در محیط داخلی به تصویر کشیده شده است که در آن سرعت ورودی جریان برابر با ۱/۵ متر بر ثانیه در نظر گرفته شده است. همان‌طور که مشاهده می‌شود، بخش عمده جریان هوا در امتداد مسیر ورودی متمرکز است و سرعت بیشتری در این ناحیه مشاهده می‌شود. پس از برخورد جریان به دیوار مقابل، هوا به جهات مختلف منحرف شده و در کل محیط داخلی پخش می‌شود. این پدیده منجر به کاهش تدریجی سرعت در نواحی دورتر از ورودی می‌شود. همچنین، توزیع سرعت نشان می‌دهد که جریان به تدریج به سمت خروجی هدایت شده و الگوی یکنواختی در نزدیکی خروجی شکل می‌گیرد. این نتایج اهمیت موقعیت ورودی و خروجی هوا و تأثیر آن‌ها بر الگوی توزیع سرعت در محیط داخلی را برجسته می‌کند.

در شکل‌های ۷، ۸ و ۹، توزیع غلظت گاز سومان به ترتیب در زمان‌های صفر، پنج و ده دقیقه نمایش داده شده است. همان‌طور که در این شکل‌ها مشاهده می‌شود، با گذشت زمان، غلظت گاز سومان در محیط کاهش می‌یابد. این کاهش به دلیل ورود جریان هوا به محیط است که با جابه‌جایی مؤثر هوا، غلظت گاز را رقیق می‌کند. همچنین، توزیع غلظت نشان می‌دهد که در لحظات اولیه، غلظت گاز در ناحیه مرکزی محیط بیشتر است و کاهش غلظت ابتدا از نواحی کناری که جریان هوا وارد می‌شود آغاز می‌گردد. سپس این اثر به سمت مرکز محیط گسترش پیدا می‌کند. این رفتار با توزیع سرعت جریان هوا هماهنگ است، زیرا توزیع غلظت گاز به شدت تحت تأثیر الگوی سرعت جریان قرار دارد. عامل اصلی انتقال جرم در این محیط، جابه‌جایی ناشی از سرعت بالای جریان ورودی است که باعث ایجاد یک جریان غالب در محیط می‌شود.

در مجموع، این نتایج نشان می‌دهند که ورود جریان هوا به محیط، باعث کاهش تدریجی غلظت گاز را تضمین می‌کند. این الگوی جابه‌جایی، به دلیل سرعت بالای جریان ورودی و مکانیزم غالب انتقال به روش جابه‌جایی، از اهمیت بالایی برخوردار است.

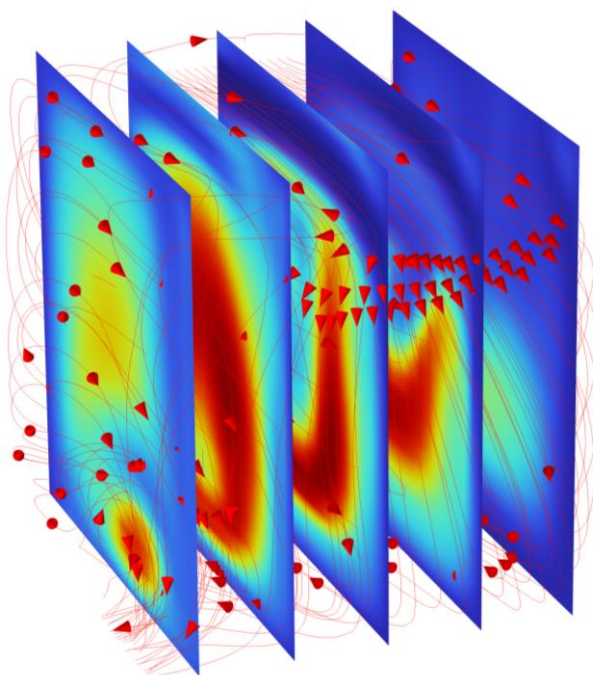


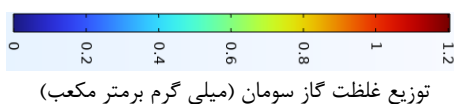
شکل ۶: توزیع سرعت گاز سومان در محیط داخلی: سرعت ورودی هوا ۱/۵ متر بر ثانیه



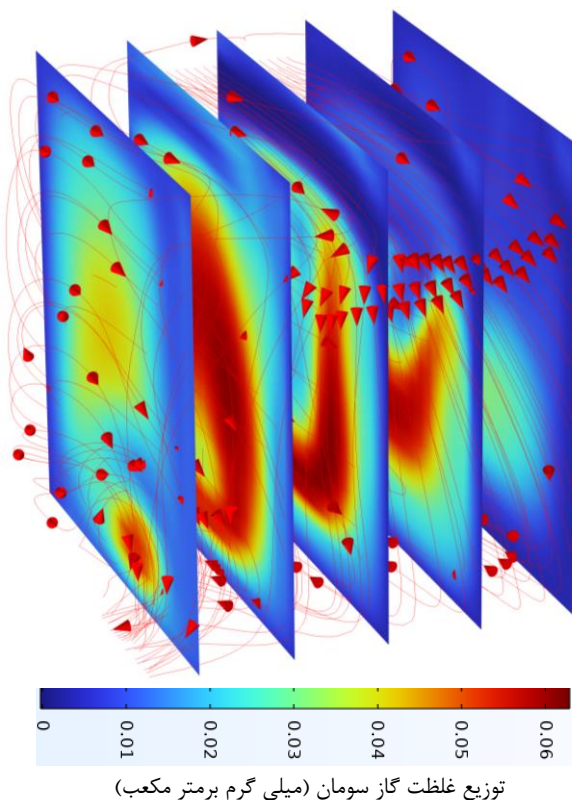
توزیع غلظت گاز سومان (میلی گرم بر متر مکعب)

شکل ۷: غلظت گاز سومان (میلی گرم بر متر مکعب): سرعت ورودی ۱/۵ متر بر ثانیه و غلظت اولیه ۱۰ میلی گرم بر متر مکعب در شرایط اولیه





شکل ۸: غلظت گاز سومان (میلی گرم بر متر مکعب): سرعت ورودی ۱/۵ متر بر ثانیه و غلظت اولیه ۱۰ میلی گرم بر متر مکعب بعد از ۵ دقیقه



شکل ۹: غلظت گاز سومان (میلی گرم بر متر مکعب): سرعت ورودی ۱/۵ متر بر ثانیه و غلظت اولیه ۱۰ میلی گرم بر متر مکعب بعد از ۱۰ دقیقه

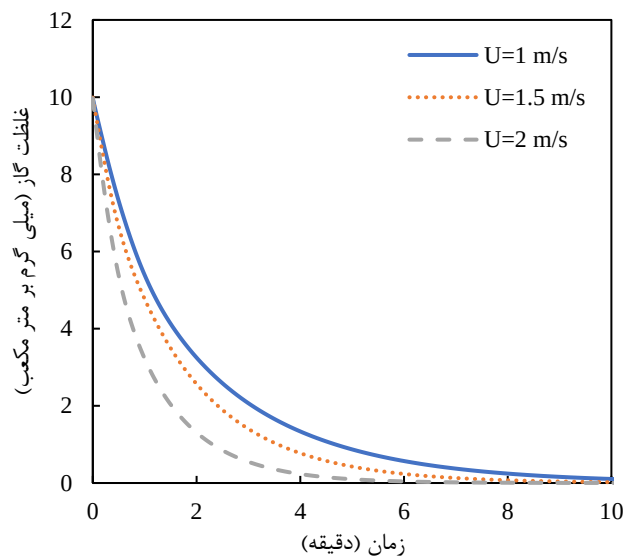
اثر سرعت ورودی هوا بر توزیع غلظت

در شکل ۱۰، تأثیر سرعت‌های مختلف ورودی هوا بر توزیع غلظت گاز سومان به صورت تابعی از زمان ارائه شده است. تمامی شبیه‌سازی‌ها با غلظت اولیه ۱۰ میلی گرم بر متر مکعب انجام شده‌اند. بر اساس داده‌های به دست آمده، می‌توان مشاهده کرد که افزایش سرعت ورودی هوا تأثیر قابل توجهی بر کاهش زمان رسیدن به غلظت ایمن دارد. در این مطالعه، غلظت ایمن به عنوان سطحی تعریف شده است که کمتر از ۱ میلی گرم بر متر مکعب باشد، زیرا در این غلظت خطرات ناشی از مواجهه با گاز سومان به میزان قابل توجهی کاهش می‌یابد.

تحلیل داده‌ها نشان می‌دهد که با افزایش سرعت ورودی از ۱ متر بر ثانیه به ۲ متر بر ثانیه، زمان لازم برای رسیدن به غلظت ایمن تقریباً ۵۰ درصد کاهش یافته است. این کاهش زمان به دلیل افزایش نرخ جابه‌جایی و انتقال جرم در محیط بسته رخ می‌دهد. در سرعت ورودی ۱ متر بر ثانیه، زمان لازم برای رسیدن به غلظت ایمن برابر با ۴/۶۵ دقیقه

است، درحالی‌که این مقدار در سرعت ورودی ۱/۵ متر بر ثانیه به ۳/۵۵ دقیقه و در سرعت ورودی ۲ متر بر ثانیه به ۲/۳ دقیقه کاهش می‌یابد.

افزایش سرعت ورودی باعث می‌شود نرخ انتقال جرم و جابه‌جایی هوای آلوده با هوای تازه افزایش یابد، که این امر به بهبود فرآیند رقیق‌سازی گاز کمک می‌کند. در واقع، افزایش سرعت هوا منجر به تقویت مکانیسم‌های انتقال جرم شده و باعث می‌شود گاز سمی سریع‌تر به سمت غلظت‌های ایمن حرکت کند. این نتایج حاکی از آن است که در شرایط اضطراری، استفاده از سیستم‌های تهویه با سرعت بالاتر می‌تواند نقش حیاتی در کاهش خطرات ناشی از انتشار گازهای سمی در محیط‌های بسته ایفا کند.



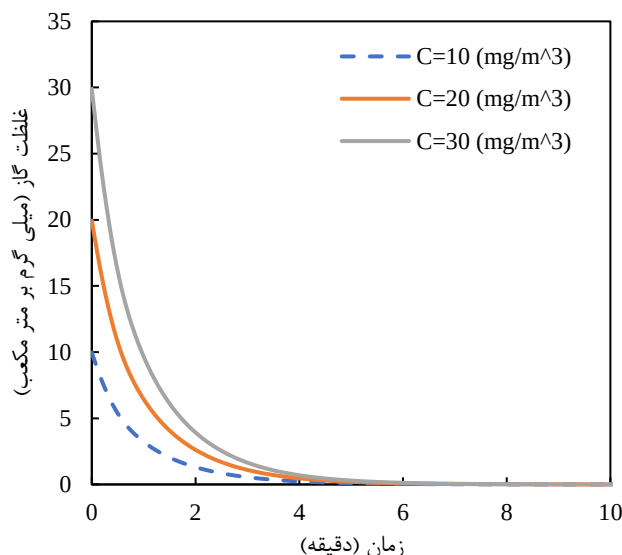
شکل ۱۰: اثر سرعت ورودی هوا بر توزیع غلظت گاز سومان: غلظت اولیه ۱۰ میلی‌گرم بر متر مکعب

اثر غلظت اولیه گاز سومان بر توزیع غلظت

در شکل ۱۱، تأثیر غلظت اولیه گاز سومان بر توزیع غلظت این گاز به صورت تابعی از زمان نمایش داده شده است. تمامی شبیه‌سازی‌ها با سرعت ورودی ثابت ۲ متر بر ثانیه انجام شده‌اند تا اثر غلظت اولیه بر زمان رسیدن به غلظت ایمن به صورت دقیق بررسی شود. نتایج نشان می‌دهند که با افزایش غلظت اولیه، مدت زمان لازم برای رسیدن به غلظت ایمن به طور قابل توجهی افزایش می‌یابد.

این روند به این دلیل است که با افزایش غلظت اولیه، میزان ماده آلاینده در محیط بیشتر بوده و در نتیجه مدت زمان بیشتری برای رقیق‌سازی و کاهش غلظت آن به سطح ایمن لازم است. در غلظت اولیه ۱۰ میلی‌گرم بر متر مکعب، زمان رسیدن به غلظت ایمن برابر با ۲/۳ دقیقه است، درحالی‌که این زمان برای غلظت اولیه ۲۰ میلی‌گرم بر متر مکعب به ۳/۰۵ دقیقه و برای غلظت ۳۰ میلی‌گرم بر متر مکعب به ۳/۵۵ دقیقه افزایش می‌یابد. بنابراین، افزایش غلظت اولیه از ۱۰ میلی‌گرم به ۳۰ میلی‌گرم بر متر مکعب منجر به افزایش حدود ۵۴ درصدی زمان رسیدن به غلظت ایمن می‌شود. به طور خلاصه، این نتایج نشان می‌دهند که غلظت اولیه آلاینده، فاکتوری کلیدی در تعیین زمان رقیق‌سازی و رسیدن

به شرایط ایمن است. برای غلظت‌های بالاتر، اقدامات پیشگیرانه و استفاده از سیستم‌های تهویه با ظرفیت بالا ضروری به نظر می‌رسد.



شکل ۱۱: اثر غلظت اولیه بر توزیع غلظت گاز سومان: سرعت ورودی ۲ متر بر ثانیه

نتیجه‌گیری

در این مطالعه، با استفاده از دینامیک سیالات محاسباتی سه‌بعدی ناپایا، توزیع گاز سومان و زمان ایمن در یک محیط داخلی بررسی شد. از نتایج این مطالعه، نکات زیر نتیجه‌گیری شدند:

- ۱- نتایج نشان داد که سرعت ورودی هوا و غلظت اولیه گاز سومان عوامل کلیدی در تعیین زمان ایمن هستند.
- ۲- افزایش سرعت ورودی هوا از ۱ متر بر ثانیه به ۲ متر بر ثانیه باعث کاهش ۵۰ درصدی زمان ایمن شد که این امر به دلیل افزایش نرخ جابه‌جایی و انتقال جرم در محیط داخلی است.
- ۳- تأثیر غلظت اولیه نیز به‌صورت قابل‌توجهی مشاهده شد؛ افزایش غلظت اولیه از ۱۰ میلی‌گرم بر متر مکعب به ۳۰ میلی‌گرم بر متر مکعب منجر به افزایش ۵۴ درصدی زمان ایمن شد.
- ۴- دینامیک سیالات محاسباتی روشی کارآمد برای تحلیل توزیع و ارزیابی ایمنی گازهای اعصاب است.
- ۵- این نتایج نشان می‌دهد که استفاده از سیستم‌های تهویه با سرعت بالا و کاهش غلظت اولیه می‌تواند به‌طور مؤثری مدت زمان لازم برای رسیدن به غلظت ایمن را کاهش دهد.
- ۶- پایش دقیق غلظت گازهای سمی و بهره‌گیری از تهویه کارآمد می‌تواند به بهبود شرایط ایمنی در محیط‌های داخلی کمک کند.

فهرست منابع

- Aalbergsjø, S. G., & Vik, T. (2016). Indoor dispersion of sarin by evaporation from liquid pools .
- Aldahhak, H., Powroźnik, P., Pander, P., Jakubik, W., Dias, F. B., Schmidt, W. G., Gerstmann, U., & Krzywiecki, M. (2020). Toward efficient toxic-gas detectors: Exploring molecular interactions of sarin and dimethyl methylphosphonate with metal-centered phthalocyanine structures. *The Journal of Physical Chemistry C*, 124(11), 6090-6102 .
- Balow, R. B., McEntee, M., Schweigert, I. V., Jeon, S., Peterson, G. W., & Pehrsson, P. (2021). Battling chemical weapons with zirconium hydroxide nanoparticle sorbent: impact of environmental contaminants on sarin sequestration and decomposition. *Langmuir*, 37(23), 6923-6934 .
- Chauhan, N., & Chauhan, R. (2015). Active-passive measurements and CFD based modelling for indoor radon dispersion study. *Journal of environmental radioactivity*, 144, 57-61 .
- Endregard, M., Reif, B. A. P., Vik, T., & Busmundrud, O. (2010). Consequence assessment of indoor dispersion of sarin—A hypothetical scenario. *Journal of hazardous materials*, 176(1-3), 381-388.
- Davis, E. D., Gordon, W. O., Wilmsmeyer, A. R., Troya, D., & Morris, J. R. (2014). Chemical warfare agent surface adsorption: hydrogen bonding of sarin and soman to amorphous silica. *The Journal of Physical Chemistry Letters*, 5(8), 1393-1399 .
- Dolezal, O., & Tomaskova, H. (2020). An agent-based simulation to minimize losses during a terrorist attack. *Applied Sciences*, 10(9), 3213 .
- Faugier, L., Marinus, B. G., Bosschaerts, W., Laboureur, D., & Limam, K. (2023). CFD model for airflow in a subway station compared to on-site measurements: The challenges of as-built environment. *Tunnelling and Underground Space Technology*, 140, 105248 .
- Hosseini, M., Madani, H., & Shahriar, K. (2022). CFD-based Modeling of Sarin Gas Dispersion in a Subway Station—A Hypothetical Scenario. *Journal of Mining and Environment*, 13(1), 235-251 .
- Kye, Y.-S., Chung, W.-Y., & Kim, Y.-J. (2008). A Study on the Chemical Warfare Agents Dispersion Modelling in a Naturally Ventilated Indoor System. *Journal of the Korea Institute of Military Science and Technology*, 11(4), 133-140 .
- Li, Q., Wang, Y., Li, L., Hao, H., Wang, R., & Li, J. (2023). Prediction of BLEVE loads on structures using machine learning and CFD. *Process Safety and Environmental Protection*, 171, 914-925 .
- Li, T., Leonard, M., Tsyshevsky, R., McEntee, M., Karwacki, C., Durke, E. M., Kuklja, M. M., & Rodriguez, E. E. (2023). High reactivity of mesoporous CeO₂ to dissociate chemical warfare agent sarin. *Materials Chemistry Frontiers*, 7(9), 1855-1866 .
- Lin, X., Fu, Y., Peng, D. Z., Liu, C.-H., Chu, M., Chen, Z., Yang, F., Tim, K., Li, C. Y., & Feng, X. (2024). CFD-and BPNN-based investigation and prediction of air pollutant dispersion in urban environment. *Sustainable Cities and Society*, 100, 105029 .
- Liu, C., Liao, Y., Liang, J., Cui, Z., & Li, Y. (2021). Quantifying methane release and dispersion estimations for buried natural gas pipeline leakages. *Process Safety and Environmental Protection*, 146, 552-563 .
- Ma, L., Chen, B., Qiu, S., Li, Z., & Qiu, X. (2017). Agent-based modeling of emergency evacuation in a railway station square under sarin terrorist attack. *International Journal of Modeling, Simulation, and Scientific Computing*, 8(02), 1750022.
- Ma, R., Castro-Dominguez, B., Dixon, A. G., & Ma, Y. H. (2018). CFD study of heat and mass transfer in ethanol steam reforming in a catalytic membrane reactor. *international journal of hydrogen energy*, 43(15), 7662-7674.

- Mukhopadhyay, S., Schoenitz, M., & Dreizin, E. L. (2021). Vapor-phase decomposition of dimethyl methylphosphonate (DMMP), a sarin surrogate, in presence of metal oxides. *Defence Technology*, 17(4), 1095-1114 .
- Parkash, R., Chauhan, N., & Chauhan, R. (2024). Application of CFD modeling for indoor radon and thoron dispersion study: A review. *Journal of environmental radioactivity*, 272, 107368 .
- Siddiqui, M., Jayanti, S., & Swaminathan, T. (2012). CFD analysis of dense gas dispersion in indoor environment for risk assessment and risk mitigation. *Journal of hazardous materials*, 209, 177-185 .
- Singer, B. C., Hodgson, A. T., Destailats, H., Hotchi, T., Revzan, K. L., & Sextro, R. G. (2005). Indoor sorption of surrogates for sarin and related nerve agents. *Environmental science & technology*, 39(9), 3203-3214 .
- Tsyshevsky, R., Head, A. R., Trotochaud, L., Bluhm, H., & Kuklja, M. M. (2020). Mechanisms of Degradation of Toxic Nerve Agents: Quantum-chemical Insight into Interactions of Sarin and Soman with Molybdenum Dioxide. *Surface Science*, 700, 121639 .
- Widiatmojo, A., Sasaki, K., Widodo, N. P., Sugai, Y., Sahzabi, A. Y., & Nguele, R. (2016). Predicting gas dispersion in large scale underground ventilation: A particle tracking approach. *Building and Environment*, 95, 171-181 .
- Yang, L., & Ye, M. (2014). CFD simulation research on residential indoor air quality. *Science of the Total Environment*, 472, 1137-1144 .
- Zhou, W., Iida, T., Moriizumi, J., Aoyagi, T., & Takahashi, I. (2001). Simulation of the concentrations and distributions of indoor radon and thoron. *Radiation protection dosimetry*, 93(4), 357-367 .

Investigation of the Reduction Time of Soman Gas Concentration in an Indoor Environment Using Computational Fluid Dynamics

Hassan Tavakoli¹, Moslem Abrofarakh¹, Rasool Amirkhani¹

Abstract

The investigation of soman gas distribution and the safe time (defined as the time when the sarin gas concentration is less than 1 mg/m³) is critically important for safety and defense purposes. Therefore, in this study, the safe time and sarin gas distribution in an indoor environment were analyzed using unsteady three-dimensional computational fluid dynamics (CFD). Firstly, mesh independence and model validation were conducted, followed by the analysis of gas distribution and concentration in the indoor environment. The results showed that the initial soman gas concentration and the air inlet velocity have a significant effect on the safe time. By increasing the air inlet velocity from 1 m/s to 2 m/s, the safe time was reduced by approximately 50%, which is attributed to the increased mass transfer and air flow rate in the indoor environment. The safe time was 4.65 minutes at an inlet velocity of 1 m/s, 3.55 minutes at 1.5 m/s, and 2.3 minutes at 2 m/s. Moreover, the initial concentration significantly influenced the safe time, where the safe time for an initial concentration of 10 mg/m³ was 2.3 minutes, increasing to 3.05 minutes for 20 mg/m³ and 3.55 minutes for 30 mg/m³. Therefore, increasing the initial soman gas concentration from 10 mg/m³ to 30 mg/m³ resulted in a 54% increase in the safe time.

Keywords: soman gas, indoor environment, modeling, computational fluid dynamics (CFD)

1- Corresponding Author (hs.tavakoli51@gmail.com): Chemistry Group, Faculty of Basic Sciences, Imam Ali University, Iran

2- Chemistry Group, Faculty of Basic Sciences, Imam Ali University, Iran

3- Chemistry Group, Faculty of Basic Sciences, Imam Ali University, Iran

