

CFD-Abschätzung kritischer thermischer Abstände bei multiplen, stark rußenden Bränden

Prof. Dr. Axel Schönbacher, M. Sc. Stefan Schälike
Lehrstuhl für Technische Chemie I
Universität Duisburg-Essen, Campus Essen

1. Einleitung

In verfahrenstechnischen Anlagen kann es durch Freisetzung und anschließender Zündung von flüssigen Brennstoffen zu Schadenfeuern kommen [1-4]. Bei derartigen Schadenfeuern handelt es sich überwiegend um Lachen-, Pool- oder Tankfeuern [3], die für Menschen und benachbarte Schutzobjekte (z. B. Tanks, Gebäude, Anlagen, Verkehrswege) ein großes Gefahrenpotential, infolge der thermischen Strahlung insbesondere von gebildeten Rußpartikeln sowie von gasförmigen Verbrennungsprodukten (CO_2 und H_2O), darstellen. Im Unterschied zu Einzel-Feuern sind insbesondere frei brennende multiple Pool- und Tankfeuer, die aufgrund ihrer Wechselwirkungseffekte sicherheitstechnisch von besonderer Bedeutung sind, noch sehr wenig untersucht. Bei ersten Untersuchungen multipler Feuer wurde eine Zunahme der Flammenlänge [5, 6], eine Verschmelzung der einzelnen Feuersäulen [7-12], eine Zunahme der globalen Massenabbrandrate [12, 13] sowie eine Zunahme der Pulsationsfrequenz [13] gefunden. Eine Untersuchung der thermischen Strahlung multipler Feuer sowie CFD-Simulationen zur Vorhersage dieser Strahlungseigenschaften inklusive kritischer thermischer Abstände existiert bisher nicht.

2. Experimentelles

In einer Prüfhalle wurden mit n-Heptan als Leitsubstanz, Experimente mit $N = 5$ benachbarten Einzelpoolflammen ($d = 6$ cm) in horizontalen Abständen von $0.5 \text{ cm} < D < 3 \text{ cm}$ durchgeführt. Vier Pools befanden sich dabei auf den Eckpunkten eines Quadrats, während der fünfte Pool auf dem Schnittpunkt der Diagonalen platziert war. Dabei wurden die Flammentemperaturen mit Thermoelementen Typ S und die zeitlich gemittelten Flammenlängen der gesamten Flamme durch VHS-Aufnahmen bestimmt. Eine Bestimmung der klaren Verbrennungszone und der VIS-Strahldichtestrukturen war an den hier betrachteten Flammen aufgrund zu geringer Flammenlängen nicht möglich. Zur Bestimmung der Surface Emissive Power (SEP) wurde der Messung der entfernungsabhängigen Bestrahlungsstärken mit Radiometern aufgrund höherer Messgenauigkeit der Vorzug vor der Bestimmung mittels Thermokamera (Messung der Flammenoberflächentemperaturen und des Emissionsgrades) gegeben. Als Bezugswert wird die obige Matrix aus fünf Poolflammen als ein äquivalentes Einzelpoolfeuer gleicher Pooloberfläche mit dem äquivalenten Radius $d_{\text{eq}} = 13.4$ cm benutzt. Der Abstand zwischen den einzelnen Pools wird mit D bezeichnet.

3. CFD-Simulation

CFD-Simulationen mit fünf wechselwirkenden n-Heptan-Poolfeuern wurden unter Berücksichtigung eines laminaren Flamelet-Ansatzes [14] durchgeführt. Für die Turbulenzmodellierung wurde die Large-Eddy-Simulation (LES) [15] genutzt. Die Berechnung der thermischen Strahlung erfolgt mit der Discrete Ordinate Methode [16, 17]. Die Modellierung des

Bilanzgebietes erfolgt durch einen Zylinder mit runder Grundfläche auf der sich fünf Brennstoffeinlässe („Inlets“) befinden. Als Simulationstool wird das kommerzielle Programmpaket ANSYS FLUENT 14.5 verwendet.

4. Ergebnisse

4.1 Flammentemperaturen

In Abb. 1 ist das momentane Temperaturfeld eines multiplen n-Heptan Poolfeuers ($N = 5$) im relativen Abstand $D/d = 0.33$ dargestellt. Es zeigt sich jeweils über den äußeren Pools ein lokales Temperaturmaximum bei $x \approx 3$ cm mit Temperaturen von $T \approx 1600$ K. Das absolute Temperaturmaximum befindet sich über dem mittleren Pool in einer Höhe von $x \approx 7.5$ cm mit einer Temperatur von $T \approx 1950$ K.

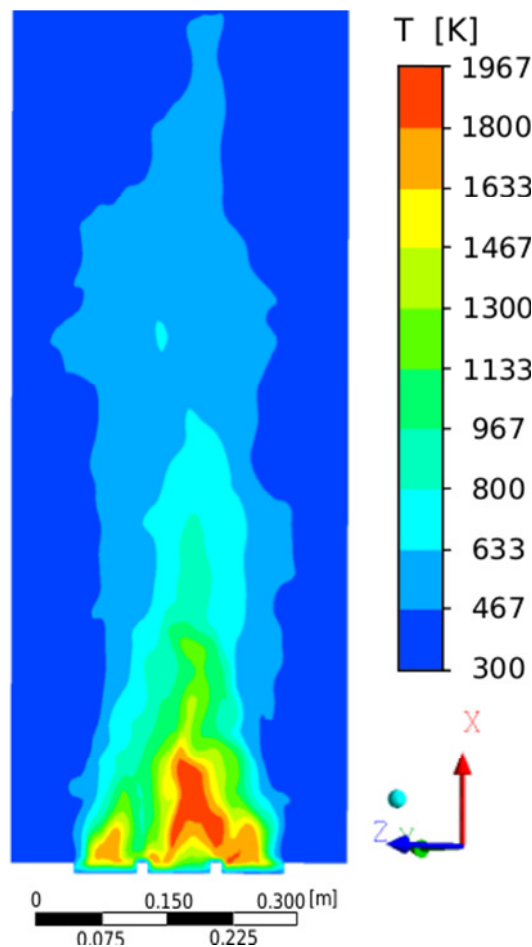


Abb. 1 Simuliertes zeitlich-gemitteltetes Temperaturfeld eines n-Heptan-Poolfeuers $d = 6$ cm, $N = 5$, $D/d = 0.33$

Ein Vergleich von experimentellen Werten mit der CFD-Simulation für ein multiples n-Heptan Poolfeuer mit $d = 6$ cm, $N = 5$, $D/d = 0.33$ ist in Abb. 2 dargestellt. Es zeigt sich, dass die Maxima der Temperaturverläufe richtig wiedergegeben werden. Lediglich die Maximalwerte der CFD-Simulation liegen über denen der experimentellen Werte, was mit der Trägheit der Thermoelemente erklärt werden kann. Insbesondere in der Plume-Zone stimmen die vorhergesagten Temperaturen gut mit den Messungen überein.

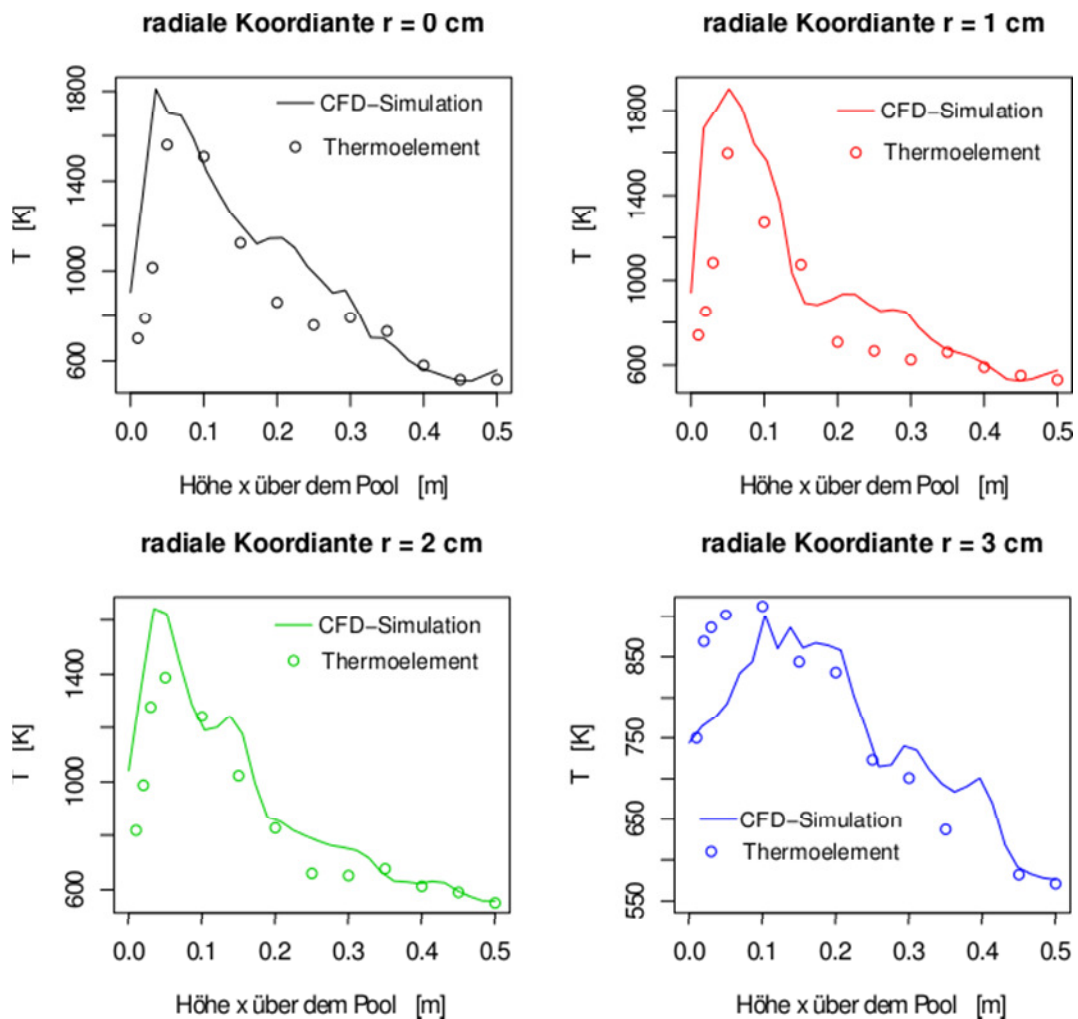


Abb. 2 Simulierte und gemessene axiale zeitlich-gemittelte Temperaturprofile eines n-Heptan-Poolfeuers $d = 6$ cm, $N = 5$, $D/d = 0.33$

Um die Genauigkeit der CFD-Simulation im Vergleich zu den experimentellen Werten zu berechnen, wird nach [18] das Konfidenzintervall für die Abweichung zwischen der Simulation und dem Experiment berechnet:

$$\left(T_{CFD} - \bar{T}_{exp}\right) - z_{0.05,n} \frac{s}{\sqrt{n}}; \quad \left(T_{CFD} - \bar{T}_{exp}\right) + z_{0.05,n} \frac{s}{\sqrt{n}}$$

Hierin ist s die Standardabweichung der experimentellen Ergebnisse auf Basis von n Experimenten. Die Temperatur bietet sich für eine solche Untersuchung besonders an, da sie sowohl stark vom Reaktionsmechanismus abhängt und gleichzeitig fundamental für die thermische Strahlung dominant ist. Die Temperatur kann somit als "system response quantity" angenommen werden. Es ergibt sich der absolute Fehler als halbe Breite des Konfidenzintervalls von $e = 51$ K. Hieraus ergibt sich ein gemittelter relativer Fehler von $(e/\bar{T}_{exp}) = 0.20$.

4.2 Spezieskonzentrationsprofile

Die zeitlich-gemittelten Massenanteile an Sauerstoff γ_{O_2} eines multiplen n-Heptan-Poolfeuers $d = 6$ cm, $N = 5$, $D/d = 0.33$ sind in Abb. 3 dargestellt.

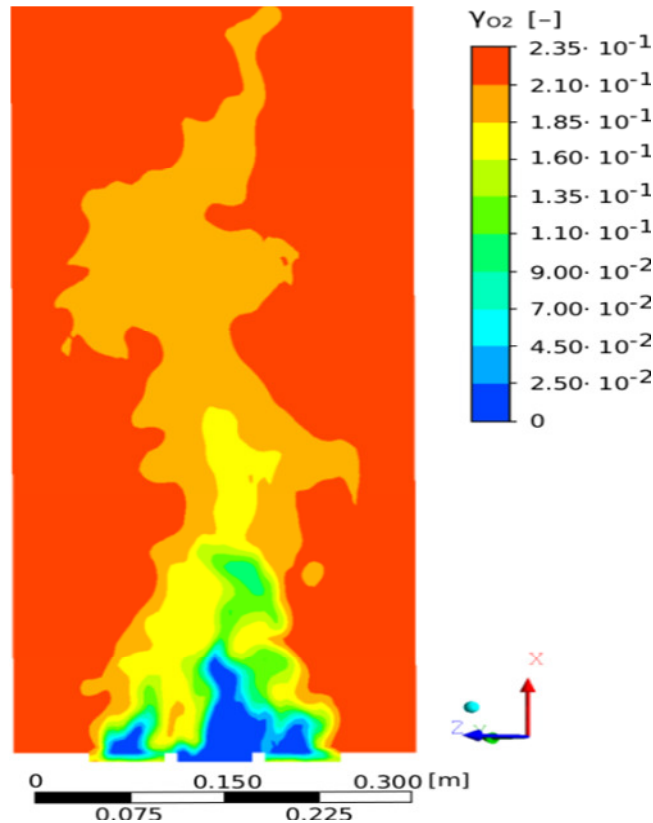


Abb. 3 Simulierte zeitlich-gemittelte Massenanteile an γ_{O_2} eines n-Heptan-Poolfeuers $d = 6$ cm, $N = 5$, $D/d = 0.33$

Die zeitlich-gemittelten Massenanteile γ_{O_2} der äußeren Flammen zeigen auf der Flammenachse bis in eine Höhe von $x = 3.5$ cm mit $\gamma_{O_2} = 0$ einen Sauerstoffmangel. Der Sauerstoffmangel mit $\gamma_{O_2} = 0$ ist auf der Flammenachse in der mittleren Flamme noch ausgeprägter und reicht bis in eine Höhe von $x = 11$ cm. Zwischen den Pools sind Zonen mit erhöhtem γ_{O_2} zu erkennen, wobei Werte bis zu $\gamma_{O_2} \leq 0.2$ erreicht werden. Es kann somit gezeigt werden, dass sich im Vergleich zu $D/d = 0$ höhere Sauerstoffmassenanteile an Stellen befinden, an denen ansonsten Sauerstoffmangel herrschen würde. Dieser erhöhte Sauerstoffanteil hat einen Einfluss auf die Spezies, die am Abbau der KW-Ketten beteiligt sind.

Die zeitlich-gemittelten Massenanteile an CH_3 -Radikalen γ_{CH_3} eines multiplen n-Heptan-Poolfeuers $d = 6$ cm, $N = 5$, $D/d = 0.33$ sind in Abb. 4 dargestellt.

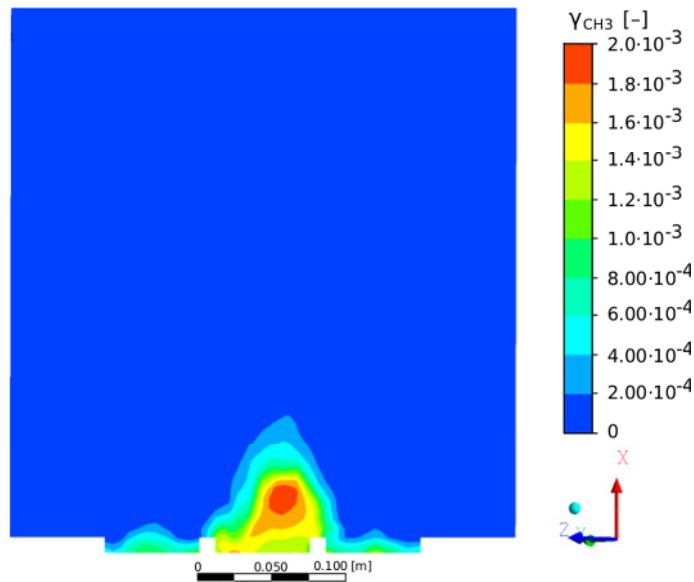


Abb. 4 Simulierte zeitlich-gemittelte Massenanteile an γ_{CH_3} eines n-Heptan-Poolfeuers $d = 6$ cm, $N = 5$, $D/d = 0.33$

Auf der Flammenachse der äußeren Pools zeigen sich geringe CH_3 -Konzentrationen mit den Werten $\gamma_{CH_3} < 1.5 \cdot 10^{-3}$. Über dem mittleren Pool steigt der Massenanteil γ_{CH_3} auf der Flammenachse an und erreichte bei $x = 2.5$ cm ein lokales Maximum mit $\gamma_{CH_3} = 2 \cdot 10^{-3}$. Anschließend fällt γ_{CH_3} stetig ab. Es kann festgestellt werden, dass CH_3 als Crack-Produkt eine Hauptspezies beim Brennstoffabbau im unteren Bereich der Flamme darstellt, insbesondere in Regionen mit Sauerstoffmangel.

Die zeitlich-gemittelten Massenanteile an OH-Radikalen γ_{OH} eines multiplen n-Heptan-Poolfeuers $d = 6$ cm, $N = 5$, $D/d = 0.33$ sind in Abb. 5 dargestellt.

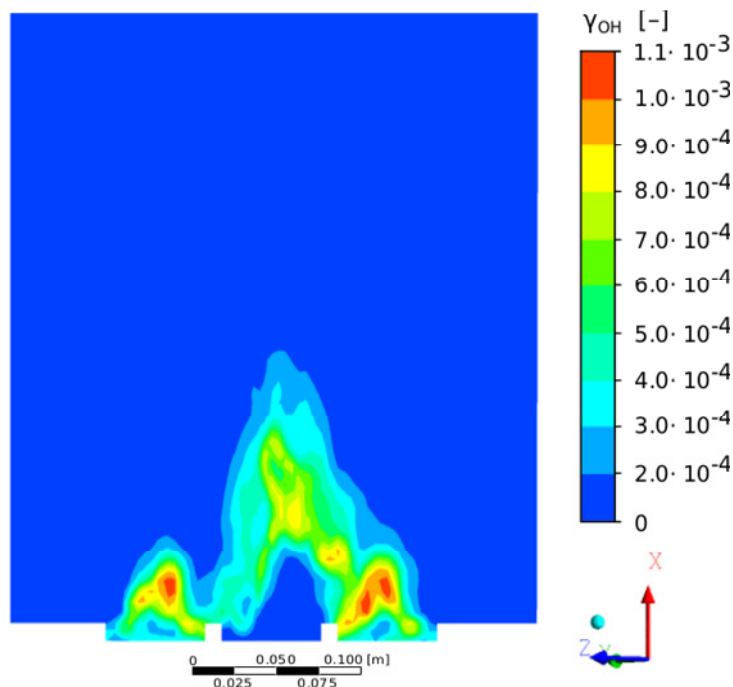


Abb. 5 Simulierte zeitlich-gemittelte Massenanteile γ_{OH} eines n-Heptan-Poolfeuers $d = 6$ cm, $N = 5$, $D/d = 0.33$

Durch das im Vergleich zur Einzelflamme relativ große γ_{O_2} ist die Bildung von OH bevorzugt möglich. Dabei steigt γ_{OH} über den äußeren Pools stark an und erreicht mit $\gamma_{OH} \approx 1.1 \cdot 10^{-3}$ ein Maximum bei $x \approx 2.5$ cm. In der mittleren Flamme kommt es erst durch den bei $x \approx 4$ cm eindringenden Sauerstoff zur Bildung von OH. Anschließend steigt der Massenanteil an OH an und erreicht bei $x \approx 7.5$ cm mit $\gamma_{OH} = 9 \cdot 10^{-4}$ ein Maximum und fällt anschließend wieder ab. Durch den zwischen den Pools eindringenden Sauerstoff ist an diesen Stellen die Bildung von OH-Radikalen möglich, was ein multiples Feuer von einem Einzelfeuer mit gleicher Brennstoffoberfläche unterscheidet. Zwischen den Pools sind Massenanteile an OH von $\gamma_{OH} = 6 \cdot 10^{-4}$ möglich. Dies führt zu einem stärkeren Abbau des Brennstoffes und somit zu einer zusätzlichen Wärmefreisetzung, die mit einem Temperaturanstieg und einem damit verbundenen Anstieg der SEP und einer Verkleinerung der Flammenlänge einhergeht.

4.3 Flammenlängen

In einer sicherheitstechnischen Betrachtung ist ein Vergleich der Flammenlängen von Feuern bezogen auf einen äquivalenten Durchmesser $d = d_{eq}$ notwendig. Oftmals ist ein vorher festgelegtes Volumen zu lagern, so dass die Verteilung des Gefahrgutes in einem Lager relevant ist. Die Flammenlängen multipler KW-Poolfeuer $d = 6$ cm und $N = 5$ in Bezug auf den äquivalenten Durchmesser sind in Abb. 6 dargestellt.

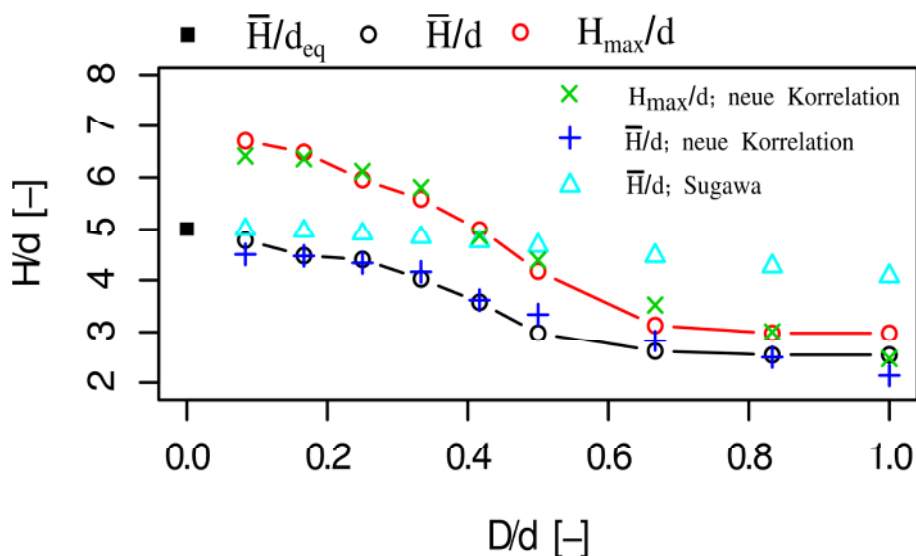


Abb. 6 Experimentelle und korrelierte zeitlich gemittelte Flammenlängen \bar{H} und maximale Flammenlängen H_{max} multipler KW-Poolfeuer mit $d = 6$ cm und $N = 5$

Für ein multiples KW-Poolfeuer mit $d = 6$ cm und $N = 5$ ergibt sich für kleine D/d ein Verhältnis der zeitlich-gemittelten relativen Flammenlängen von $\frac{\bar{H}/d(D/d=0.083)}{\bar{H}/d_{eq}} = 0.95$. Die Flammenlängen multipler KW-Poolfeuer sind somit kleiner als die eines Einzelpoolfeuers bezogen auf den äquivalenten Durchmesser. Für große D/d fallen die zeitlich-gemittelten Flammenlängen für $N = 5$ mit $\frac{\bar{H}/d(D/d=0.083)}{\bar{H}/d_{eq}} = 0.53$ weiter ab.

Der von Kamigawa in [11] eingeführte Parameter Q^* ist eine gute Basis zur Beschreibung von Flammenlängen, da Q^* fundamentale Parameter, wie die totalen Wärmefreisetzungsraten einbezieht sowie eine genaue Beschreibung der Geometrie des multiplen Feuers erfolgt:

$$\frac{\bar{H}}{d_{eq}} = 3.3 \left(\frac{\dot{Q}_c}{\rho_a c_{p,a} T_a \sqrt{g} W^{0.4}} \right)^{0.4} = 3.3 Q^{*0.4} \quad ,$$

mit dem geometrischen Faktor W

$$W = \sqrt{N}d + (\sqrt{N} - 1)D \quad .$$

Daher wird auf Basis von Q^* eine Korrelation der relativen Flammenlängen bezogen auf den äquivalenten Durchmesser $d = d_{eq}$ durchgeführt. Für multiple KW-Poolfeuer ergeben sich dabei für die zeitlich-gemittelten und maximalen Flammenlängen die folgenden empirischen Korrelationen:

$$\frac{\bar{H}}{d_{eq}} = 16.08 Q^{*0.1} \quad ,$$

und

$$\frac{H_{max}}{d_{eq}} = 14.55 Q^{*0.07} \quad .$$

4.4 Thermische Strahlung

Die zeitlich gemittelten \overline{SEP} s multipler KW-Poolfeuer sind in der Abb. 7 dargestellt.

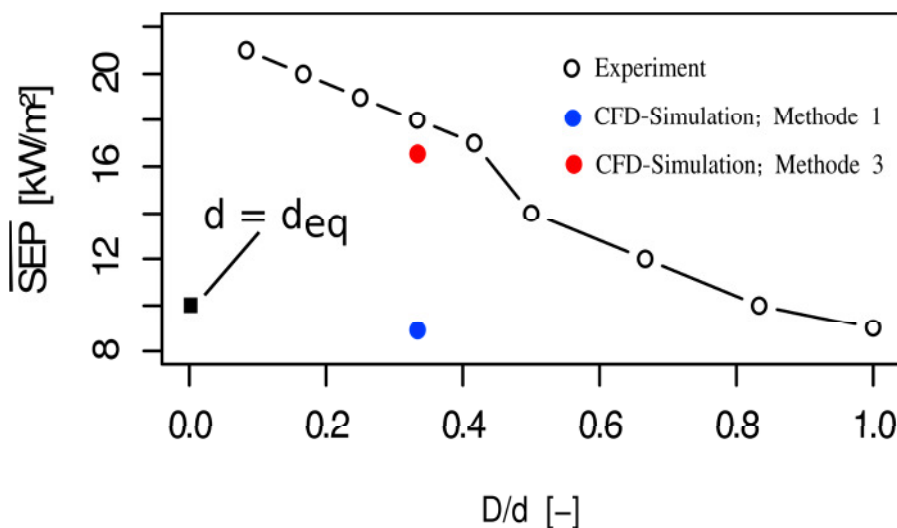


Abb. 7 Experimentelle und simulierte zeitlich gemittelte Surface Emissive Power \overline{SEP} multipler KW-Poolfeuer mit $d = 6$ cm und $N = 5$

Im Falle der thermischen Strahlung ist nur ein Vergleich mit einem Poolfeuer gleicher Brennstoffoberfläche ($d = d_{eq}$) möglich, da sich die Flammensäulen vereinen und somit nur eine gemeinsame Flammensäule mit einer entsprechenden optischen Weglänge entsteht. Eine Betrachtung bezogen auf den einzelnen Pool d_s ist somit nicht möglich.

Die SEP multipler Feuer mit $d = 6$ cm und $N = 5$ ist dabei im Vergleich zur \overline{SEP} eines Poolfeuers mit $d = d_{eq}$ um den Faktor $\overline{SEP}(D/d=0.16)/\overline{SEP}(d_{eq} = 13.4 \text{ cm}) = 2.2$ erhöht. Es ist zu erkennen, dass die \overline{SEP} für große D/d um den Faktor $\overline{SEP}(D/d=1)/\overline{SEP}(d_{eq} = 13.4 \text{ cm}) = 0.65$ niedriger ist, im Vergleich zur \overline{SEP} eines Einzelpoolfeuers mit $d = d_{eq}$.

Der stetig abfallende Verlauf kann wie folgt erklärt werden. Bei Poolfeuern kommt es auf der Flammenachse zu einem Sauerstoffmangel und dementsprechend zu einer fetten Verbrennung und entsprechender Rußbildung. Das Äquivalenzverhältnis $\Phi > 1$ bewirkt, dass keine vollständige Umsetzung in Wasser und Kohlenstoffdioxid stattfindet und ein Wirkungsgrad $\eta < 1$ erzielt wird. In einem multiplen Feuer kann aufgrund der Abstände zwischen den Pools, Luft an Stellen in die Flamme eindringen, an denen ansonsten Sauerstoffmangel herrschen würde, so dass der Wirkungsgrad der Verbrennung erhöht werden kann. Gleichzeitig führt das erhöhte Luft-Entrainment zu einer größeren Menge an Stickstoff, die durch die zusätzlich freigesetzte Energie erwärmt werden muss. Für kleine D/d ist die Erhöhung des Wirkungsgrades und damit zusätzlich freigesetzte Energie größer, als das zusätzliche Volumen an Stickstoff, welches erwärmt werden muss. Zu größeren D/d hingegen nimmt die zusätzlich eingesaugte, kalte Luft einen wesentlichen Stellenwert ein und die \overline{SEP} erniedrigt sich. Zudem führt eine weniger fette Verbrennung zu weniger Rußbildung und somit zu einem kleineren ε_F .

Die Bestimmung der \overline{SEP} mittels CFD-Simulation kann bei einem Einzelpoolfeuer über drei verschiedene Wege erfolgen [15]. Im ersten Weg wird der Wärmestrom, welcher eine realistische Flammenoberfläche verlässt, gemittelt. Als realistische Flammenoberfläche wird ein Sauerstoffmassenanteil von $\gamma_{O_2} = 0.22$ gewählt. Hieraus ergibt sich eine $\overline{SEP}_{CFD,1} = 9 \text{ kW/m}^2$ (s. Abb. 7). Eine zweite Möglichkeit ist die Vorhersage mittels Näherung über eine rechteckige Flammenoberfläche, um auf diese Weise CFD-vorhergesagte Thermogramme zu erhalten. Diese Methode ist bei multiplen Feuer nicht anwendbar, da die Definition einer rechteckigen Flammenoberfläche, durch die Anordnung eines multiplen Feuers, mit den entsprechenden Abständen zwischen den Pools, nicht möglich ist. Eine dritte Methode besteht in der Bestimmung der Bestrahlungsstärken E_{CFD} mittels virtueller Radiometer. Dabei gilt:

$$\overline{SEP}_{CFD} = E_{CFD} \alpha_E \tau_{at} \varphi_{E,F}$$

Durch Nutzung dieser Methode wird eine $\overline{SEP}_{CFD,3} = 16 \text{ kW/m}^2$ (s. Abb. 7) erzielt. Es zeigt sich somit, dass die Methode 1 den experimentellen Wert von $\overline{SEP}_{exp} = 18 \text{ kW/m}^2$ (s. Abb. 7) unterschätzt, während die Methode 3 eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen liefert.

4.4 Kritische thermische Abstände

Der Parameter Ψ stellt das Verhältnis der relativen kritischen thermischen Abstände $\Delta y_{crit}/d$ eines multiplen Feuers zu einem Einzelfeuer mit äquivalentem Durchmesser dar:

$$\Psi = \frac{(\Delta y_{crit}/d)_{multi}}{(\Delta y_{crit}/d)_{single}}$$

Ψ ist somit ein Maß für die Abweichung der kritischen thermischen Abstände eines multiplen Poolfeuers von denen eines Einzelfeuers. Der Parameter Ψ als Funktion des relativen Abstandes D/d zwischen den Pools ist für multiple n-Heptan Poolfeuer mit $N = 5$ in Abb. 8 dargestellt.

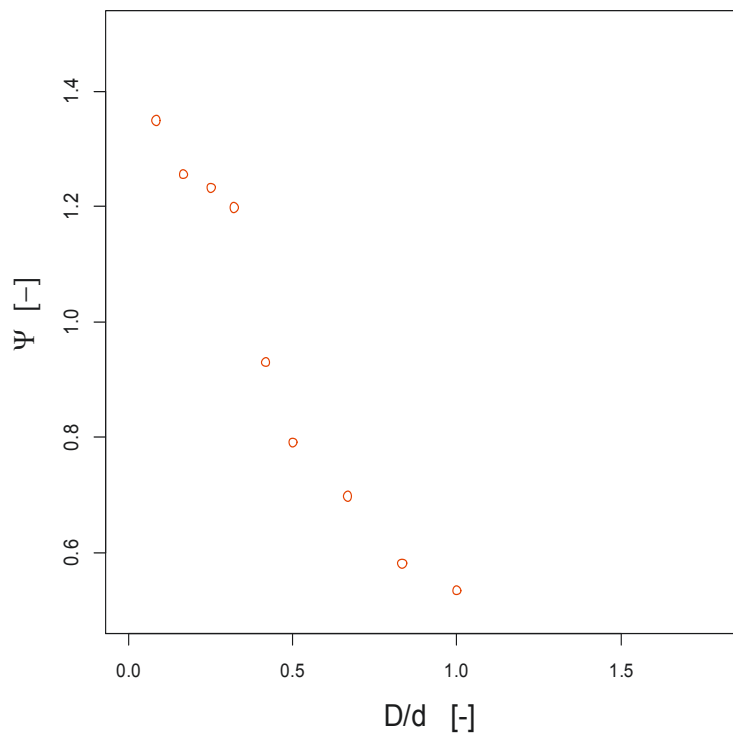


Abb. 8 Berechneter Parameter Ψ als Funktion von D/d für multiple KW-Poolfeuer

In Abb. 8 ist zu erkennen, dass der Parameter Ψ für $D/d < 0.33$ deutlich über eins liegt und somit mit einer Erhöhung des Gefahrenpotentials durch Wechselwirkung von Bränden zu rechnen ist. Für $D/d > 0.33$ fällt Ψ unter eins und das Gefahrenpotential liegt unterhalb dem eines Einzelfeuers.

5. Folgerungen

1. Die gemessenen und mit der CFD-Simulation vorhergesagten zeitlich-gemittelten Flammentemperaturen eines multiplen KW-Poolfeuers sind bis zu 200 K höher, im Vergleich zu einem entsprechenden Einzelpoolfeuer.
2. Mit der CFD-Simulation lassen sich transiente und zeitlich gemittelte Spezieskonzentrationen multipler n-Heptan Poolfeuer vorhersagen. Die durch den Abstand zwischen den Pools eintretende Luft führt zu einer erhöhten Bildung von OH-Radikalen, die zu einer Erhöhung der Flammentemperaturen führt.
3. Die relativen Flammenlängen multipler Feuer, bezogen auf den äquivalenten Durchmesser, sind für KW-Brennstoffe für $N = 5$ Feuer kleiner im Vergleich zu einem entsprechendem Einzelfeuer.
4. Multiple KW-Poolfeuer zeigen in Abhängigkeit des relativen Abstandes zwischen den Pools eine erhöhte thermische Strahlung. Daraus ergeben sich abhängig vom relativem Abstand zwischen den Pools vergrößerte kritische thermische Abstände basierend auf physikalischen Modellvorstellungen.

Literatur

- [1] M. Hailwood, M. Gawlowski, B. Schalau, A. Schönbacher, *Chem. Eng. Technol.* **32** (2009) 207-231
- [2] I. Vela, H. Chun, K. B. Mishra, M. Gawlowski, P. Sudhoff, M. Rudolph, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbacher, *Forsch. Ingenieurwes.* **73** (2009) 87-97
- [3] S. Mannan, *Lee's Loss Prevention in Process Industries*, Vol. **1-3**, Elsevier Butterworth-

Heinemann, 3. Aufl. (2005)

- [4] A. Schönbacher, *Thermische Verfahrenstechnik*, Kap. 1.7, Springer, 1. Aufl. (2002)
- [5] A. A. Putnam, C. F. Speich, *Proc. Combust. Inst.* **10** (1965) 983
- [6] P. H. Thomas, R. Baldwin, J. M. Heselden, *Proc. Combust. Inst.* **10** (1965) 983
- [7] R. Baldwin, *Combustion and Flame* **12** (1968) 318
- [8] O. Sugawa, W. Takahashi, *Fire and Materials* **17(3)** (1993) 111
- [9] O. Sugawa, Y. Oka, *Fire Safety Science – Proc. of the 7th Int. Symp.* (2002) 891
- [10] W. G. Weng, D. Kamikawa, K. Fukuda, Y. Hasemi, K. Kagiga, *Combustion Science and Technology* **176** (2004) 2105
- [11] D. Kamikawa, W. G. Weng, K. Kagiya, Y. Kukuda, R. Mase, Y. Hasemi, *Combustion and Flame* **142(1-2)** (2005) 17-23
- [12] N. Liu, Q. Liu, J. S. Lozano, L. Zhang, J. Zhu, Z. Deng, K. Satoh, *Proc. Combust. Int.* **31** (2007) 2589
- [13] M. Fukuda, Y. Kudo, A. Ito, *Bulletin of Japan Association for Fire Science and Engineering* **56(3)** (2006) 45
- [14] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble, *Combustion*, 4. Aufl., Springer, Berlin, 2006
- [15] I. Vela, H. Chun, K. B. Mishra, M. Gawłowski, P. Sudhoff, M. Rudolph, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbacher, *Forsch. Ingenieurwes.* **73** (2009) 87
- [16] S. Schälike, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbacher, CFD simulation to predict the thermal radiation of large LNG pool fires, *Proc. Europ. Combust. Meeting* (2011), Cardiff, 1-8.
- [17] S. Schälike, M. Gawłowski, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbacher, *Chem.-Ing. Tech.* **4** (2012) 179
- [18] W. L. Oberkampf, M. F. Barone, *J. Comput. Phy.*, **217** (2006) 5