CFD-Simulation von Schwelbränden mit Darstellung der Giftigkeit der Rauchgase

Dr. Andreas Spille-Kohoff
CFX Berlin Software GmbH

Frederik Rabe
Bundesanstalt für Material-forschung und -prüfung

ANSYS Conference & 33rd CADFEM Users' Meeting 2015
June 24-26, 2015, Messe Bremen

Gefördert durch:
Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie
aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages

Inhalt

CFX Berlin

- Einleitung
  - Vorstellung des Forschungsprojekts
- Grundlagen zu Schwelbränden
  - Was ist ein Schwelbrand?
  - Warum sind Schwelbrände bedeutsam?
  - Warum ist die Simulation von Schwelbränden wichtig?
- Simulation von Schwelbränden
  - Modellübersicht
  - Pyrolyse
  - Verbrennung
  - Giftigkeit
- Zusammenfassung und Ausblick

Vorstellung des Forschungsprojekts

CFX Berlin

- Titel:
  Simulation von Schwelbränden, Entwicklung, Anwendung
- Projektpartner:
  - CFX Berlin Software GmbH, Berlin
  - Bundesanstalt für Materialforschung und –prüfung, Berlin
- Förderung:
  - 1.6.2012 bis zum 31.5.2015
  - Programm "Zentrales Innovationsprogramm Mittelstand" (ZIM) durch das Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie über die AiF Projekt GmbH

BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung

ZIM Zentrales Innovationsprogramm Mittelstand

Gefördert durch:

Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie

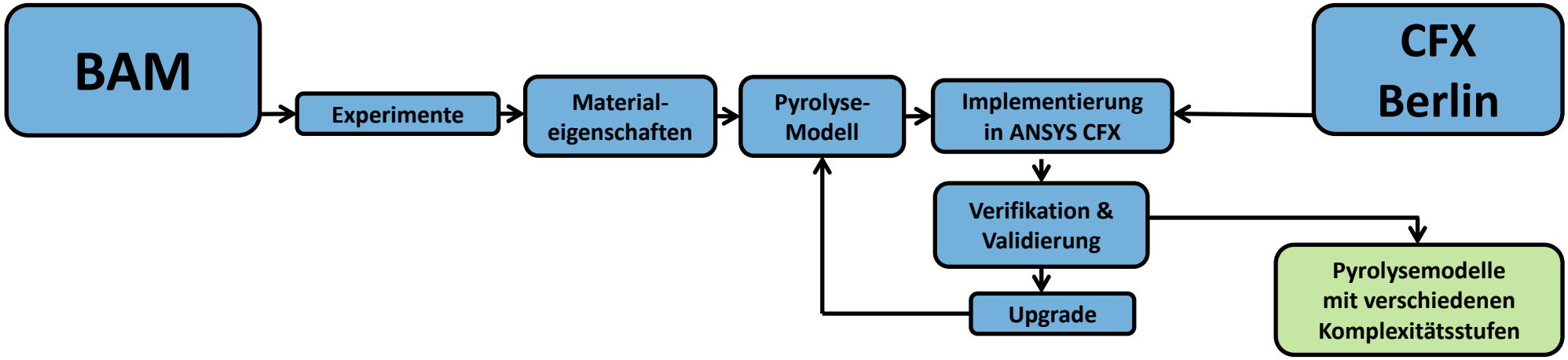
aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages

CFX Berlin

Ziele des Forschungsprojekts:

- **Schwelbrandmodelle**
  - beschreiben die Zersetzung und Erzeugung von Wärme und Rauchgasen
- **Materialdaten**
  - geben an, welche Wärmeenergie und was für Rauchgase ein Stoff unter welchen Voraussetzungen abgeben kann,
- **Rauchgasdaten**
  - beschreiben, wie brennbar, wie toxisch und wie sichtbehindernd ein entstandenes Gas ist,
- **Simulationsumgebung**
  - bildet die Wechselwirkungen zwischen den schwelenden Objekten und dem Brandraum ab, beschreibt die Ausbreitung von Wärme und Rauchgasen und stellt den Übergang in den Vollbrand dar
- **experimentelle Daten**
  - zur Kalibrierung und Validierung

Vorstellung des Forschungsprojekts
Einordnung



Experimente an der BAM:

- Hot Disk → Wärmeleitfähigkeit
- Thermogravimetrische Analyse (TGA) → Reaktionsparameter
- Vitiated Mass Loss-Kalorimeter → Masseverlust, Wärmefreisetzungsrate
- DIN-Rohr mit FTIR-Spektrometer → Gaszusammensetzung
- Großbrandversuche → Temperaturen, Gaskonzentrationen

Inhalt

CFX Berlin

- Einleitung
  - Vorstellung des Forschungsprojekts
- Grundlagen zu Schwelbränden
  - Was ist ein Schwelbrand?
  - Warum sind Schwelbrände bedeutsam?
  - Warum ist die Simulation von Schwelbränden wichtig?
- Simulation von Schwelbränden
  - Modellübersicht
  - Pyrolyse
  - Verbrennung
  - Giftigkeit
- Zusammenfassung und Ausblick

CFX Berlin

Was ist ein Schwelbrand?

- **Schwelen** (Pyrolyse): unvollständige Zersetzung / Verbrennung bei Wärmezufuhr und oft ungenügender Sauerstoffzufuhr
- Entstehung von **brennbaren Gase** und Dämpfen sowie un- oder teilverbrannten Folgeprodukten
- Viele Produkte sind stark **giftig** oder krebserregend:
  - Kohlenstoffdioxid CO_2
  - Kohlenstoffmonoxid CO
  - Salzsäure HCl, Brom-/Fluorwasserstoff HBr/HF
  - Blausäure (Cyanwasserstoff) HCN, Ammoniak NH_3
  - Ruß, Teere

CFX Berlin

Warum sind Schwelbrände bedeutsam?

- Schwelbrände sind häufig die **Initialphase** von Bränden.
- Rauchgase und Dämpfe **behindern die Sicht** und erschweren so die (Selbst-)Rettung.
- Giftige Rauchgase und Dämpfe führen zu **Bewusstlosigkeit** und Tod.
- Schwelphase wird intensiver und kürzer:
  - stark gestiegener Einsatz von Kunststoff bei Einrichtungs-gegenständen und Gebrauchsgütern (z.B. Kaltschaummatratzen, Kunststoffgefäße, Sitzbezüge, Vorhänge, Gehäuse)
  - Kinderzimmer mit viel Kunststoffspielzeug und Plüschtieren

CFX Berlin

Brandversuch an der BAM:

Brandversuch an der BAM:

Zeitpunkt: 0 min

Brandversuch an der BAM:

Zeitpunkt: 1 min

Brandversuch an der BAM:

Zeitpunkt: 2 min

CFX Berlin

Brandversuch an der BAM:

Zeitpunkt: 3 min

Brandversuch an der BAM:

Zeitpunkt: 4 min

CFX Berlin

Brandversuch an der BAM:

Zeitpunkt: 5 min

Brandversuch an der BAM:

Zeitpunkt: 6 min

Warum ist die Simulation von Schwelbränden wichtig?

- Brandversuche nur bedingt aussagekräftig:
  - realistische Brände erfordern reale Gebäude und Einrichtungen
  - hohe Temperaturen und Rauchbildung erschweren Messungen
  - Messungen meist nur punktuell möglich
  - Reproduzierbarkeit kaum zu gewährleisten (Ruß, Wasser)
- Rückschluss auf Brandverlauf nach echten Bränden kaum möglich (meist nur Endzustand mit Löschspuren)
- Schwelbrände Hauptgrund für Gesundheitsbedrohung und Fluchtbehinderung
  → Planung von Fluchtwegen und Entrauchung

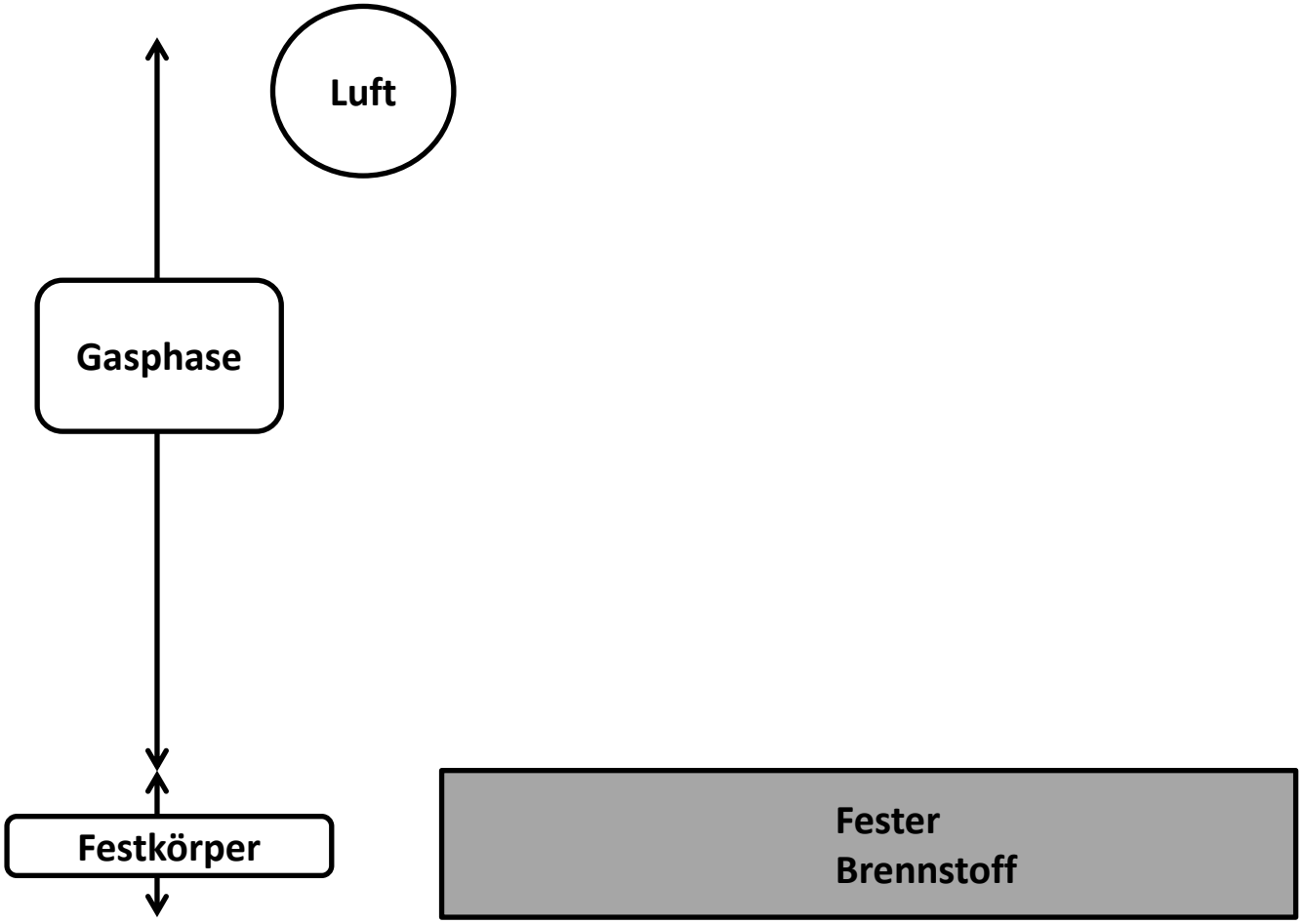
Inhalt

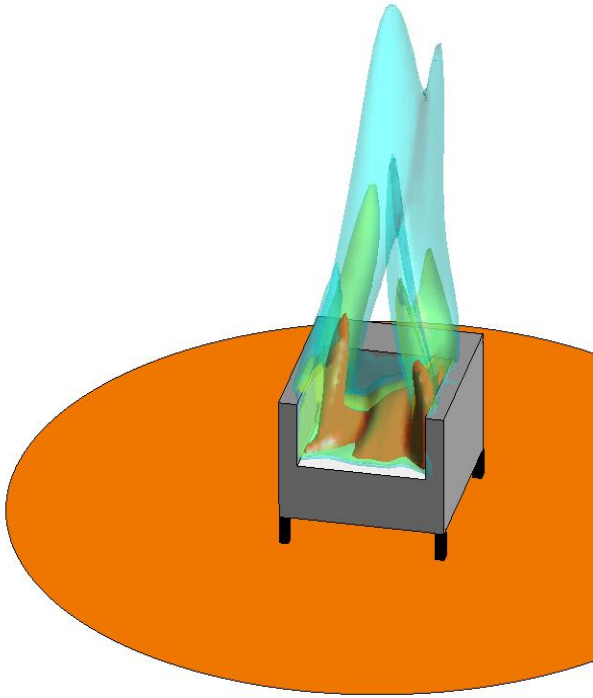
CFX Berlin

- Einleitung
  - Vorstellung des Forschungsprojekts
- Grundlagen zu Schwelbränden
  - Was ist ein Schwelbrand?
  - Warum sind Schwelbrände bedeutsam?
  - Warum ist die Simulation von Schwelbränden wichtig?
- Simulation von Schwelbränden
  - Modellübersicht
  - Pyrolyse
  - Verbrennung
  - Giftigkeit
- Zusammenfassung und Ausblick

Simulation von Schwelbränden

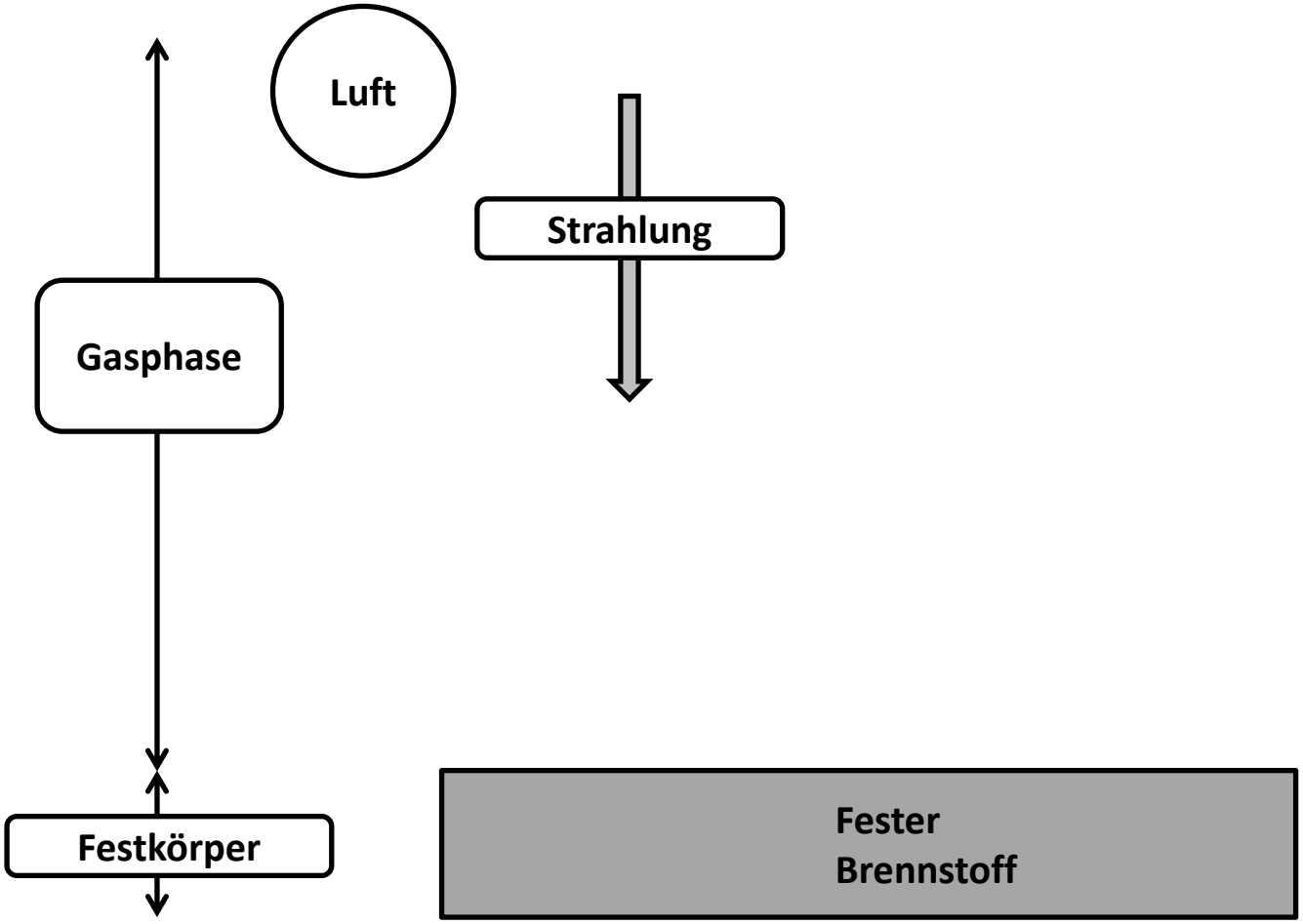
Modellübersicht

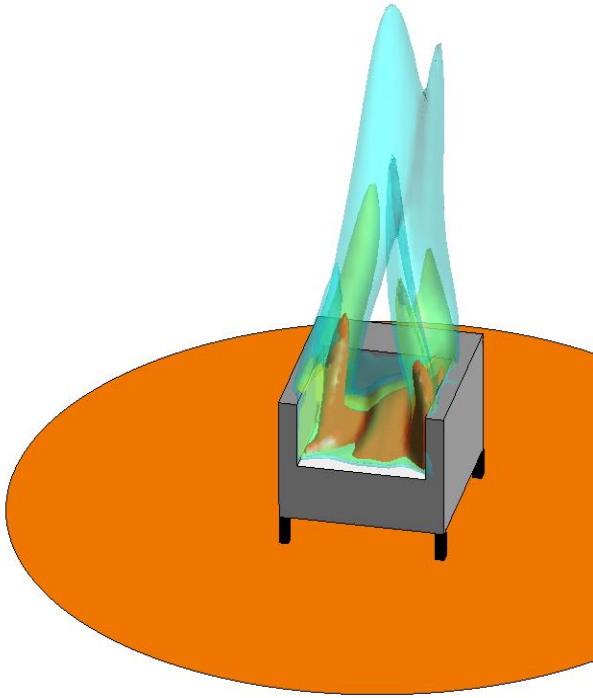




Simulation von Schwelbränden

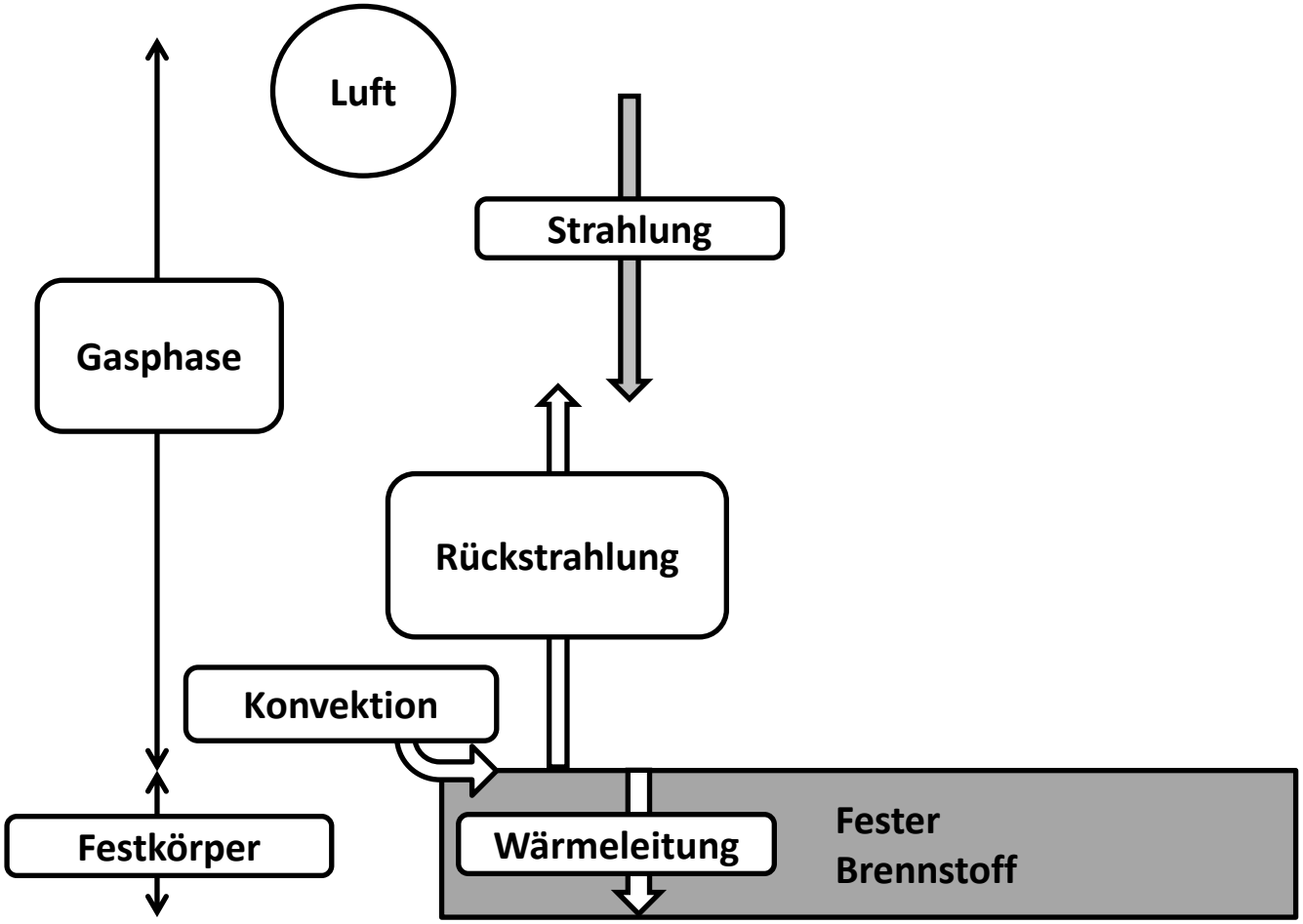
Modellübersicht

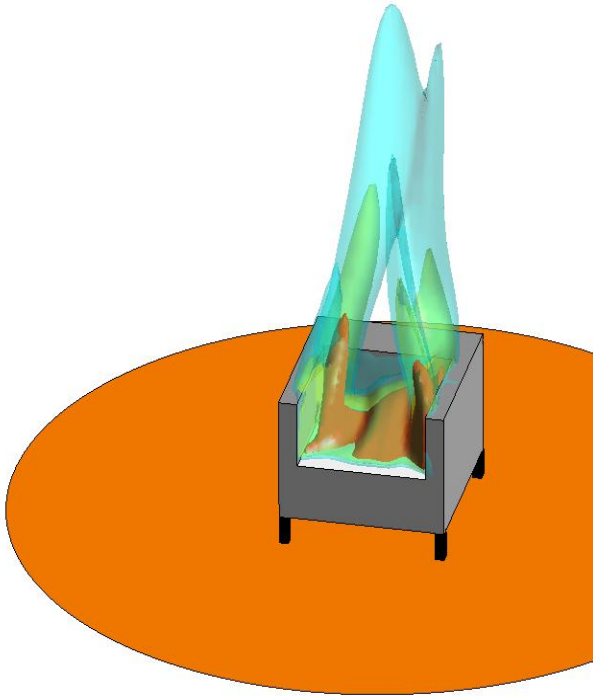




Simulation von Schwelbränden

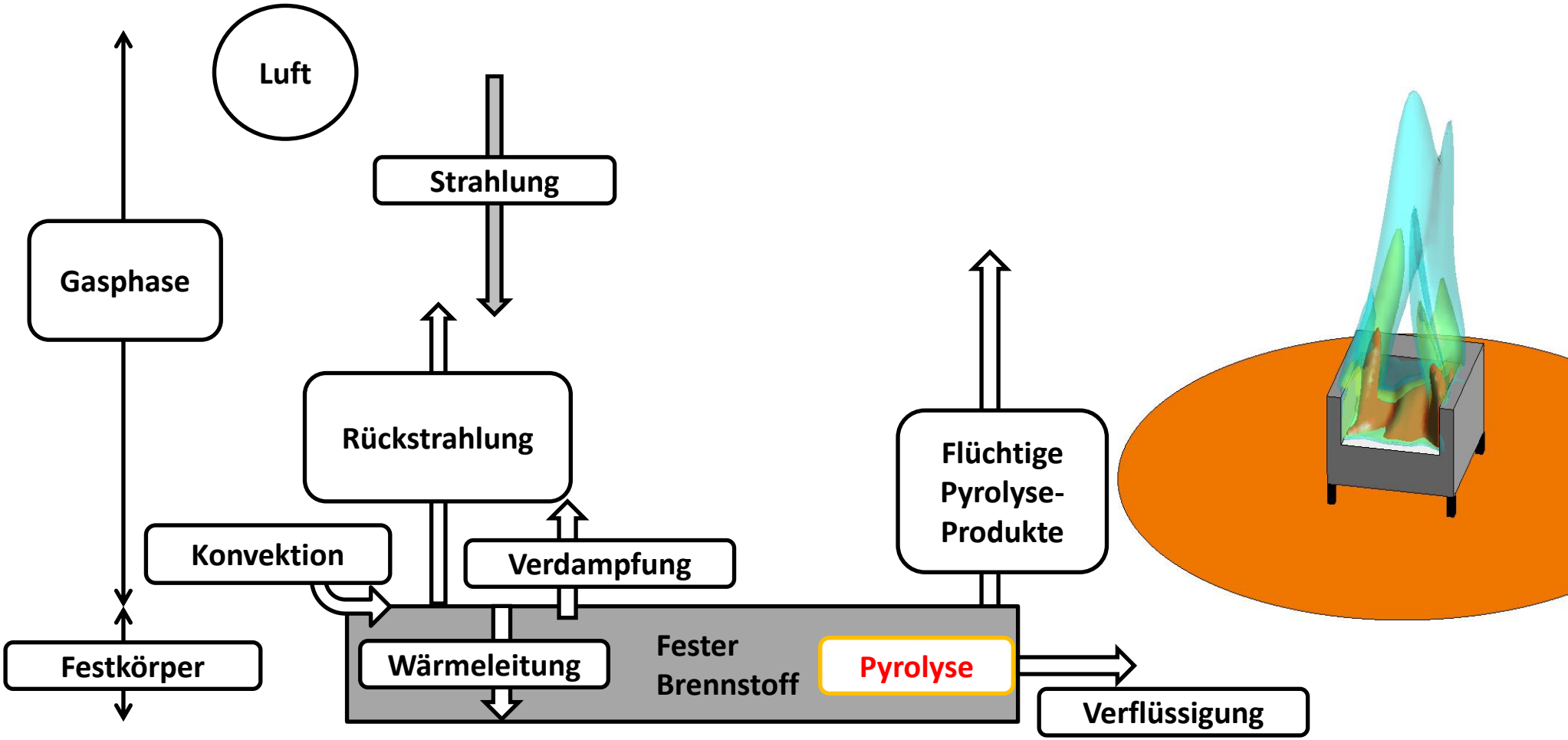
Modellübersicht





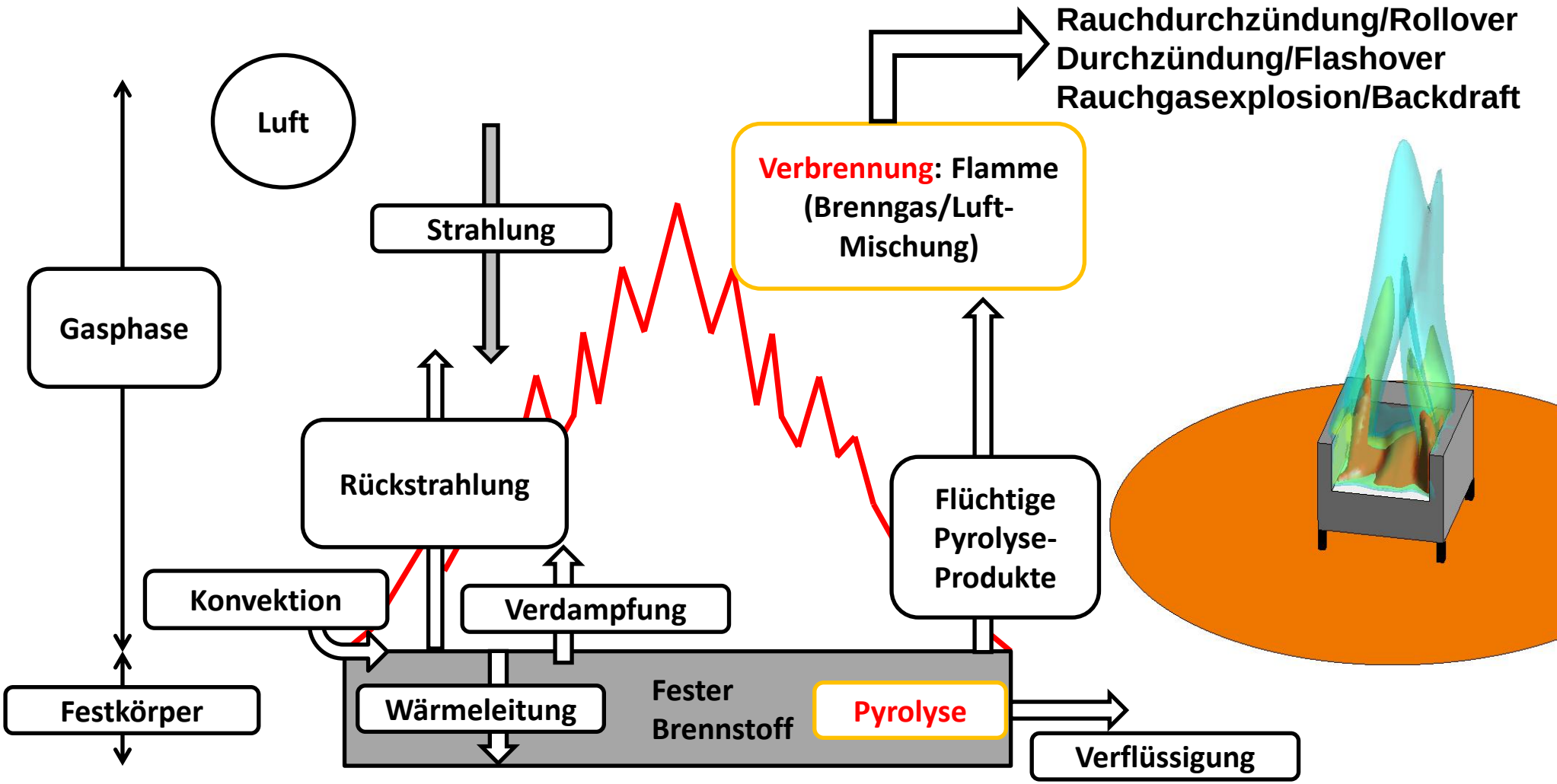
Simulation von Schwelbränden

Modellübersicht



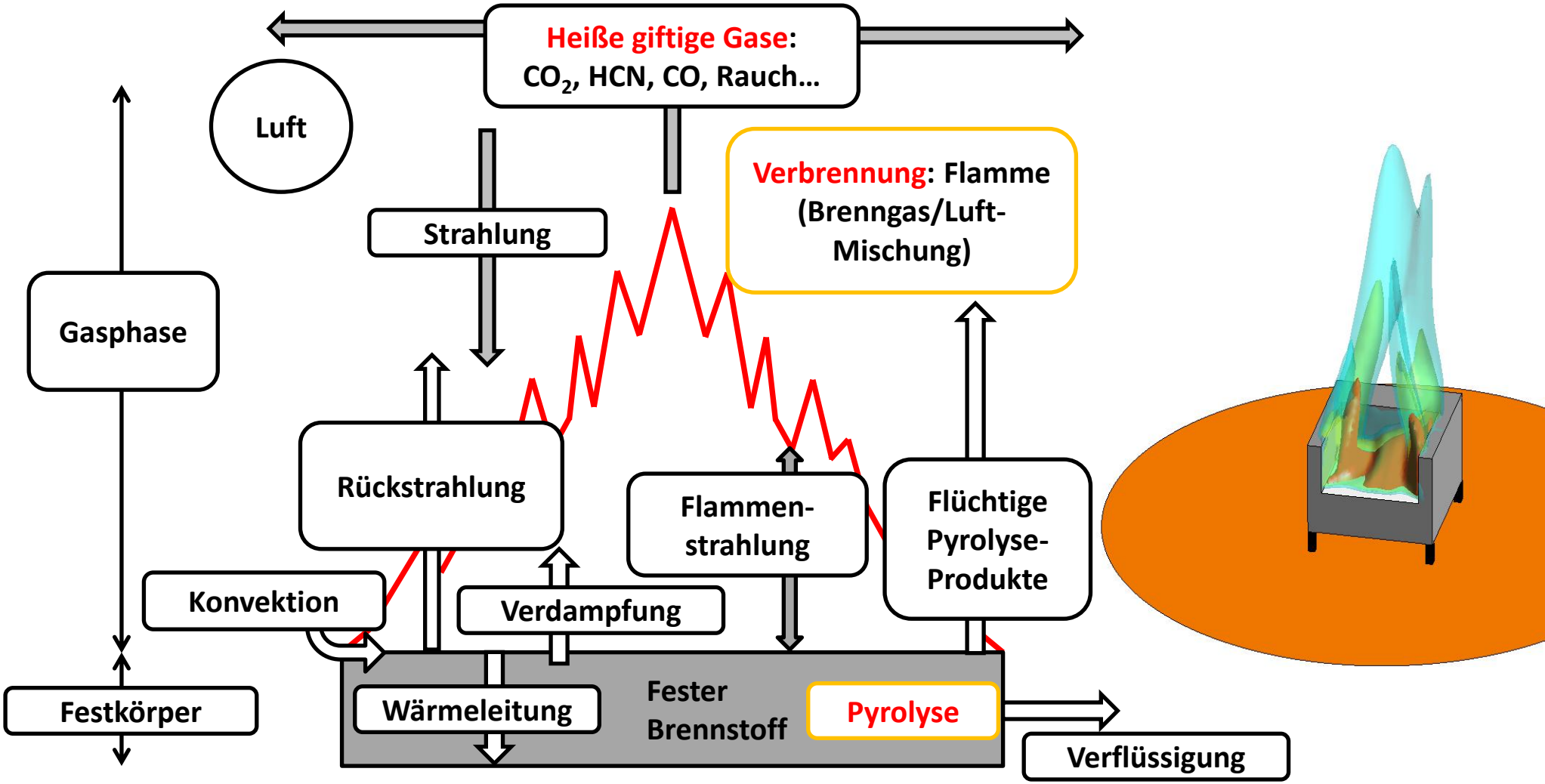
Simulation von Schwelbränden

Modellübersicht



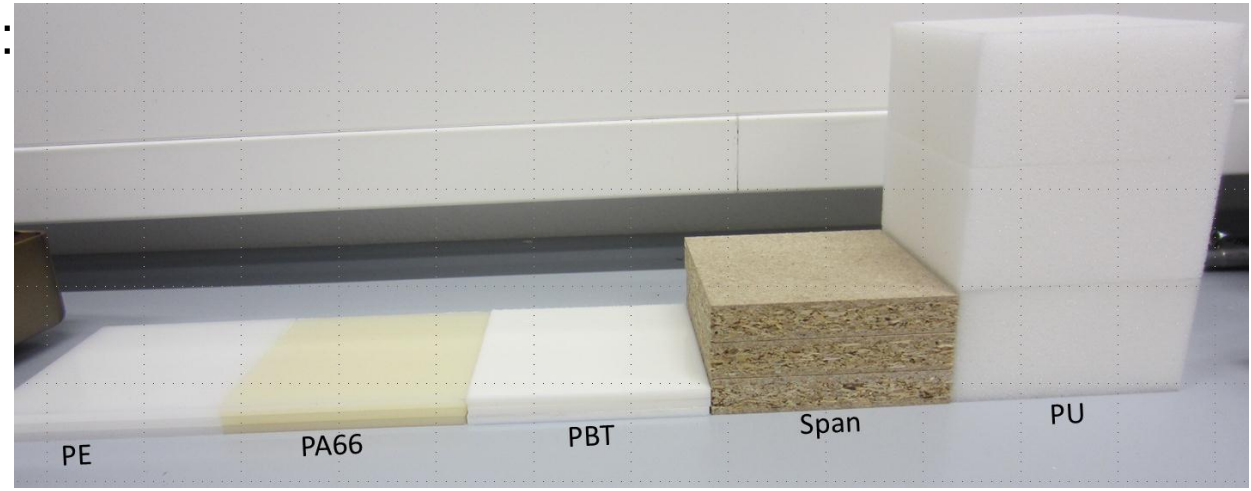
Simulation von Schwelbränden

Modellübersicht



Was ist zu modellieren?

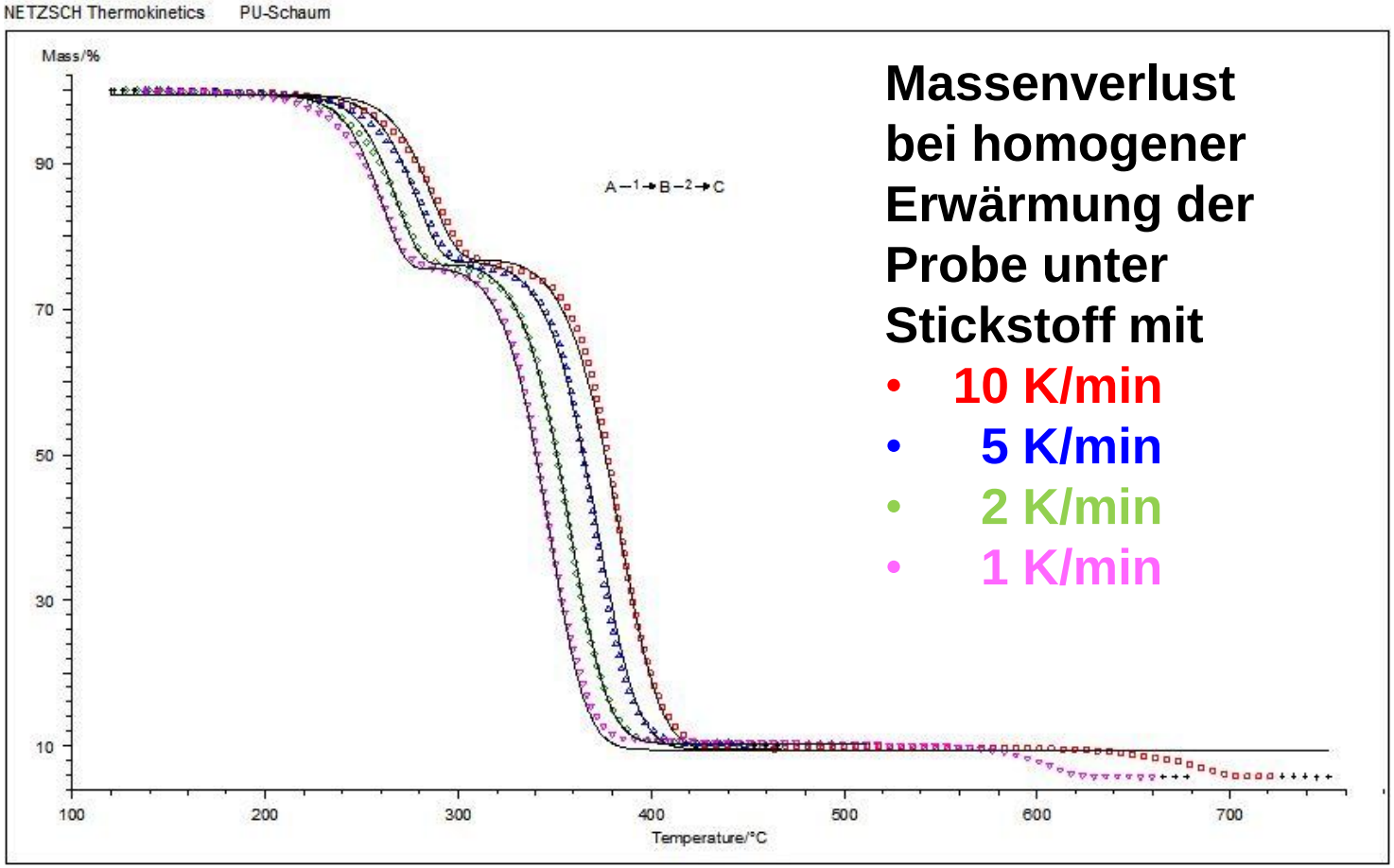
1. **Pyrolyse**:
   - Festkörper zersetzt sich unter Wärmezufuhr zu brennbarem Gas und Rückstand
   - Zersetzungsrate abhängig von Wärmezufuhr und Sauerstoffverfügbarkeit
   - teilweise unter Bildung von Zwischenprodukten, ggf. Verflüssigung
   - Messungen der BAM:
     - Haushalt: PE
     - Elektro: PA66, PBT
     - Holz: Pressspan
     - Polsterschaum: PU



PE = Polyetyhlen
PA = Polyamid
PBT=Polybutylenterephthalat
PU = Polyurethan

CFX Berlin

Thermogravimetrische Analyse (TGA) an der BAM



Massenverlust bei homogener Erwärmung der Probe unter Stickstoff mit

- **10 K/min**
- **5 K/min**
- **2 K/min**
- **1 K/min**

➔ **Arrhenius-Reaktions-parameter**

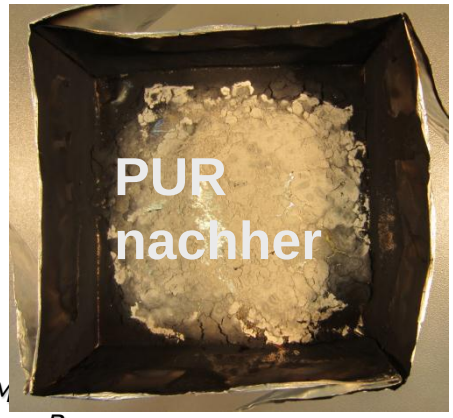
5-Schritt-Modell für PUR-Pyrolyse mit je einer Arrhenius-Gleichung für zwei Edukte, zwei Zwischenprodukte und zwei Produkte:

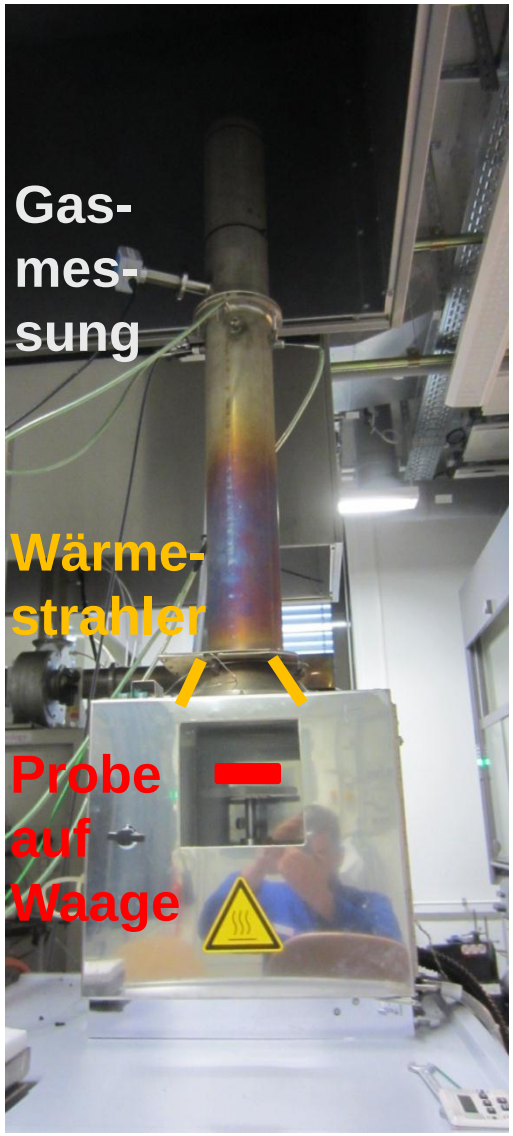
1.	PUR-Pyrolyse (p):	PUR → β-PUR + Gas	Δh_p = 50 J/g
2.	β-PUR-Pyrolyse (pβ):	β-PUR → Kohle + Gas	$\Delta h_{p\beta}$ = 750 J/g
3.	PUR-Oxidation (o):	PUR + O_2 → Kohle + Gas	Δh_o = -1600 J/g
4.	β-PUR-Oxidation (oβ):	β-PUR + O_2 → Kohle + Gas	$\Delta h_{o\beta}$ = -1500 J/g
5.	Kohle-Oxidation (c):	Kohle + O_2 → Rückstand + Gas	Δh_c = -3000 J/g

Quelle: G. Rein,
PhD Thesis 2005,
University of California

Vitiated Mass Loss-Kalorimeter:

- Probe auf Waage
- Wärmestrahlung erhitzt Materialprobe
- Spektrometer und Sauerstoff-analysator im Rauchabzug
- Messung von:
  - Massenverlust
  - Wärmefreisetzungsrate
  - Rauchgaszusammensetzung
  - bei verschiedenen Wärme-belastungen (25-50 kW/m²) und Sauerstoffanteilen



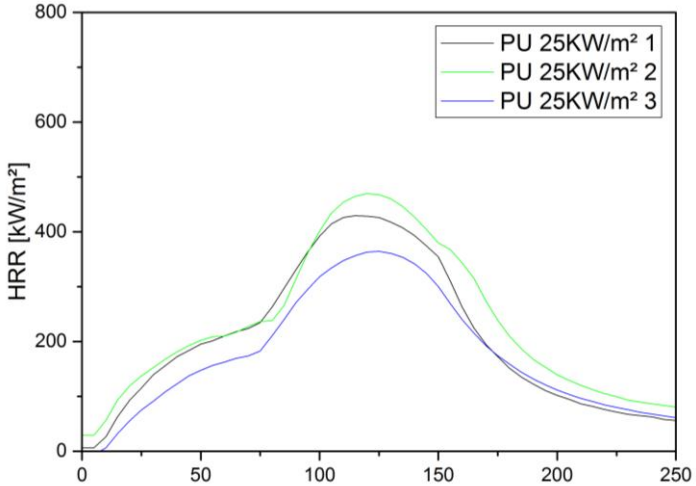


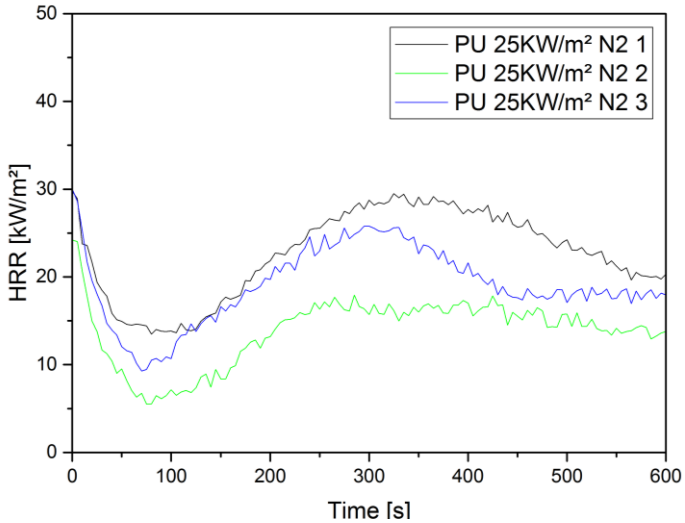
Simulation von Schwelbränden

Modell für Pyrolyse

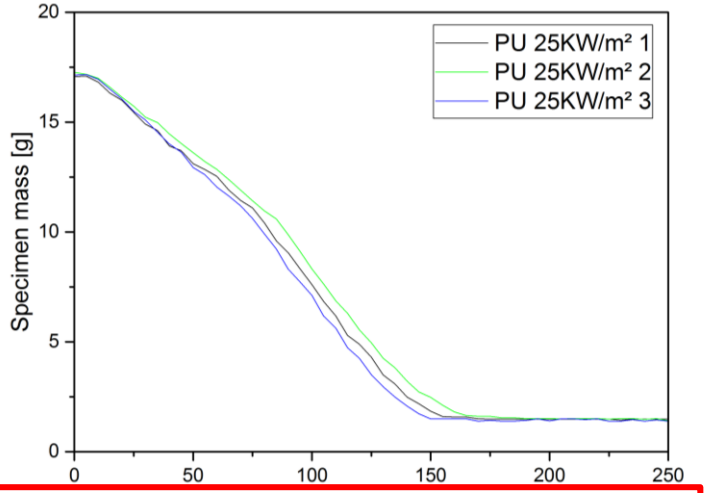
CFX Berlin

Wärmefreisetzungsrate

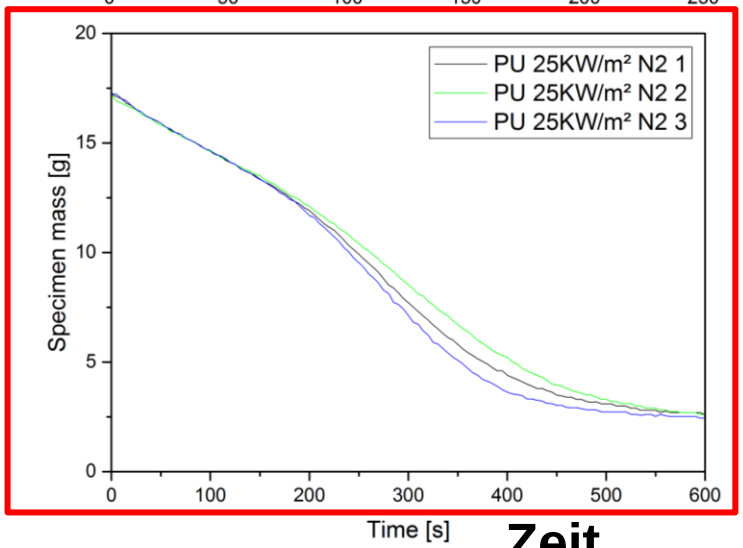




verbleibende Masse



unter Luft-atmos-phäre

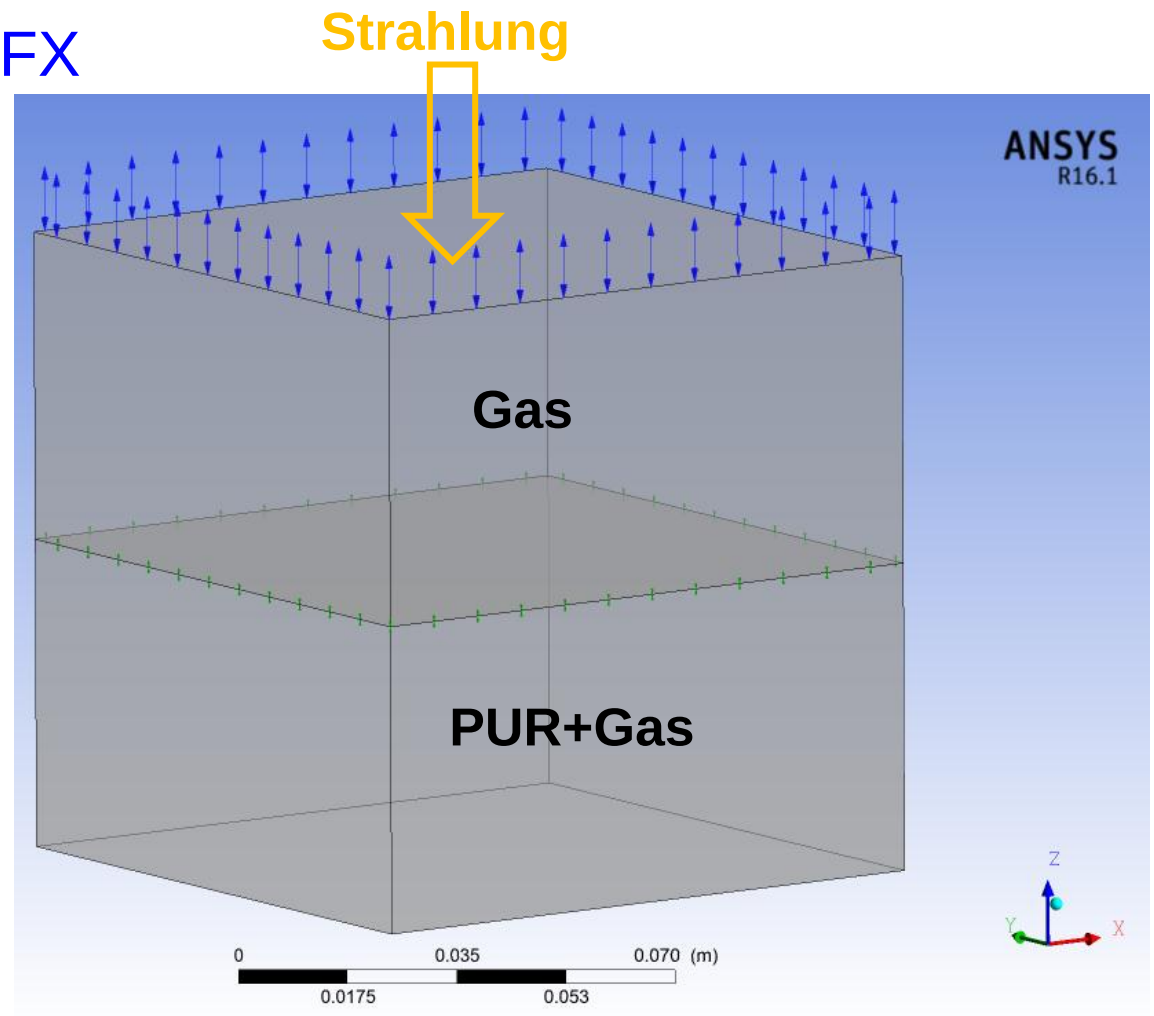


unter Stick-stoff-atmos-phäre

Zeit

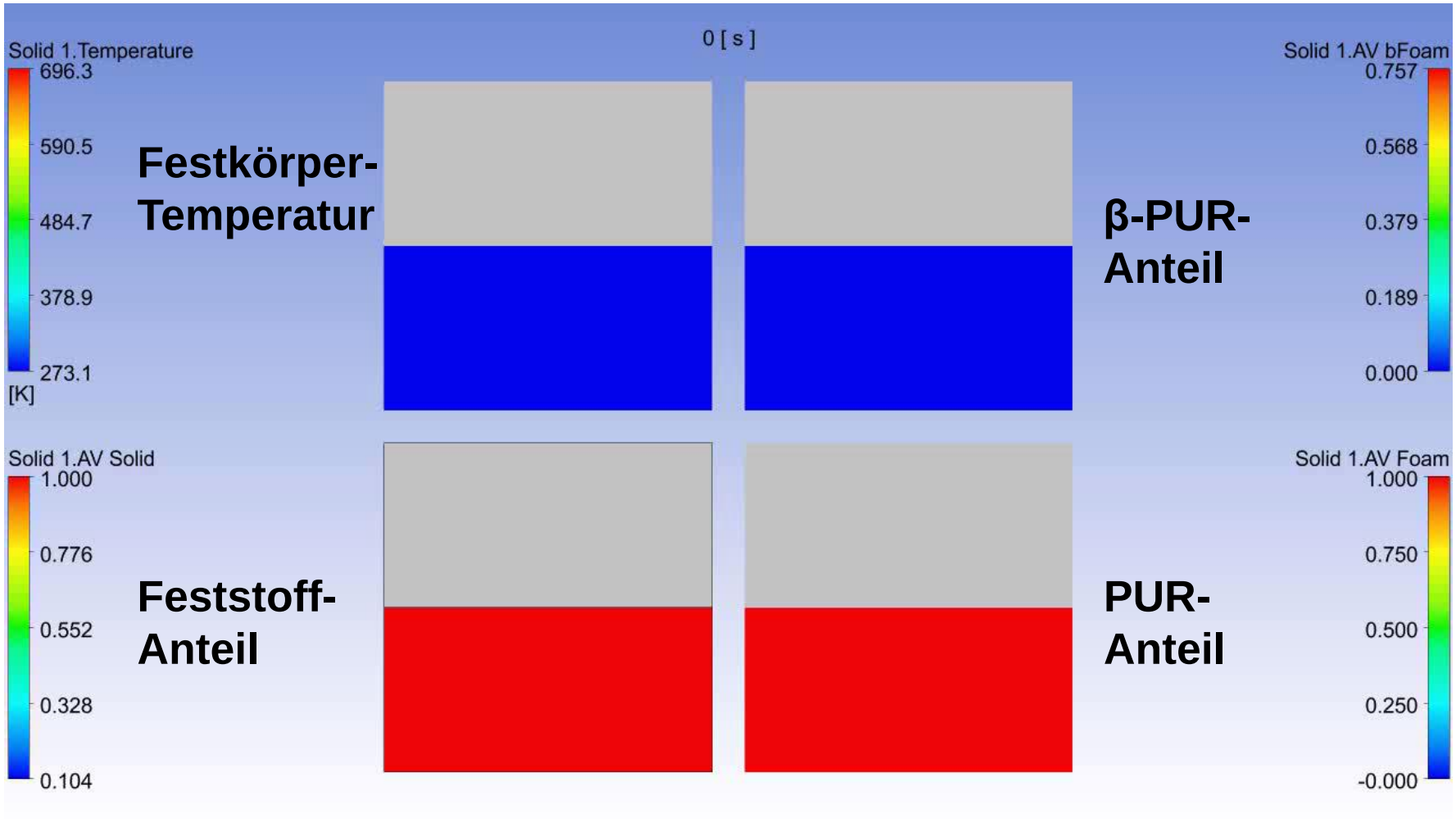
Pyrolysemodell in ANSYS CFX

- **Gasgemisch:**
  Stickstoff, Sauerstoff und Pyrolysegas
- **PUR als poröse Domain:**
  Porösität anfangs 97%
- **Reaktionen:**
  Transportgleichungen für PUR, β-PUR und Rückstand mit Arrhenius-Quellen/Senken, auch für Gaskomponenten und Energie
- **Transiente Simulation**
  initialisiert mit kaltem PUR



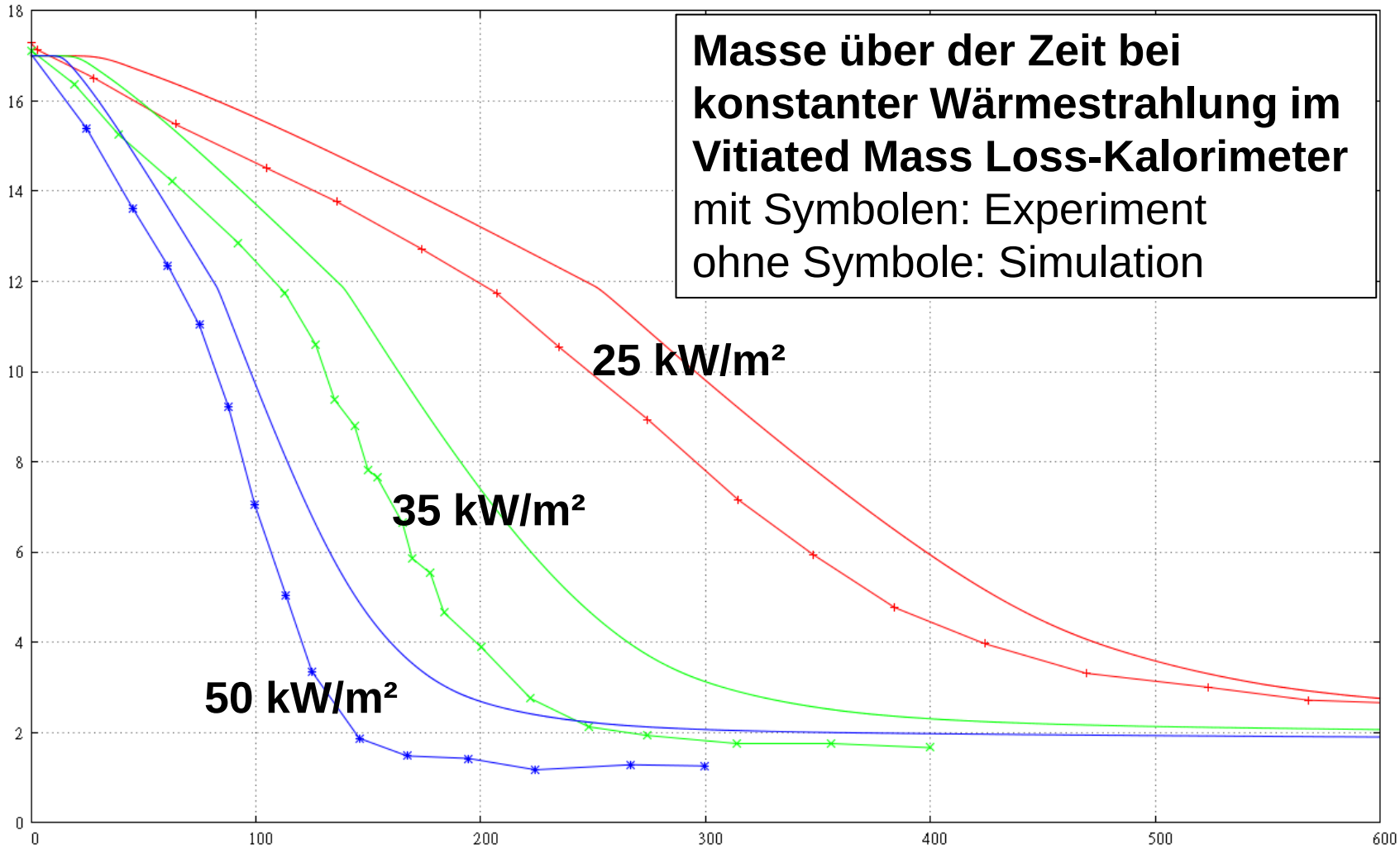
Simulation von Schwelbränden

Modell für Pyrolyse



Simulation von Schwelbränden

Modell für Pyrolyse



CFX Berlin

Was ist zu modellieren?

1. **Pyrolyse**
2. **Verbrennung** des entstehenden Gases
   - mehrere Verbrennungsmodelle, u.a.
     - Eddy-Dissipation-Modell („mixed-is-burned“)
     - Finite-Rate-Chemistry-Modell (Arrhenius-Gleichung)
     - mit Limitern für maximale Flammentemperatur, Auslöschungstemperatur, Mischungsrate,…
   - Verbrennung erzeugt Wärmestrahlung → Rückwirkung auf den Pyrolyseprozess im Festkörper
   - verschieden komplexe Verbrennungsreaktionen mit Zwischenprodukten möglich

CFX Berlin

Ein-Schritt-Reaktionen für Kunststoffe:

- Polyurethan PUR:

$$C_{25}H_{42}O_6N_2 + 27{,}16\ (O_2 + 3{,}76\ N_2) \rightarrow$$

$$19{,}62\ CO_2 + 0{,}167\ CO + 20{,}9\ H_2O + 5{,}06\ C + 103{,}0\ N_2 + 0{,}1602\ HCN$$

- Polyvinylchlorid PVC:

$$C_2H_3Cl + 2{,}57\ (O_2 + 3{,}76\ N_2) \rightarrow$$

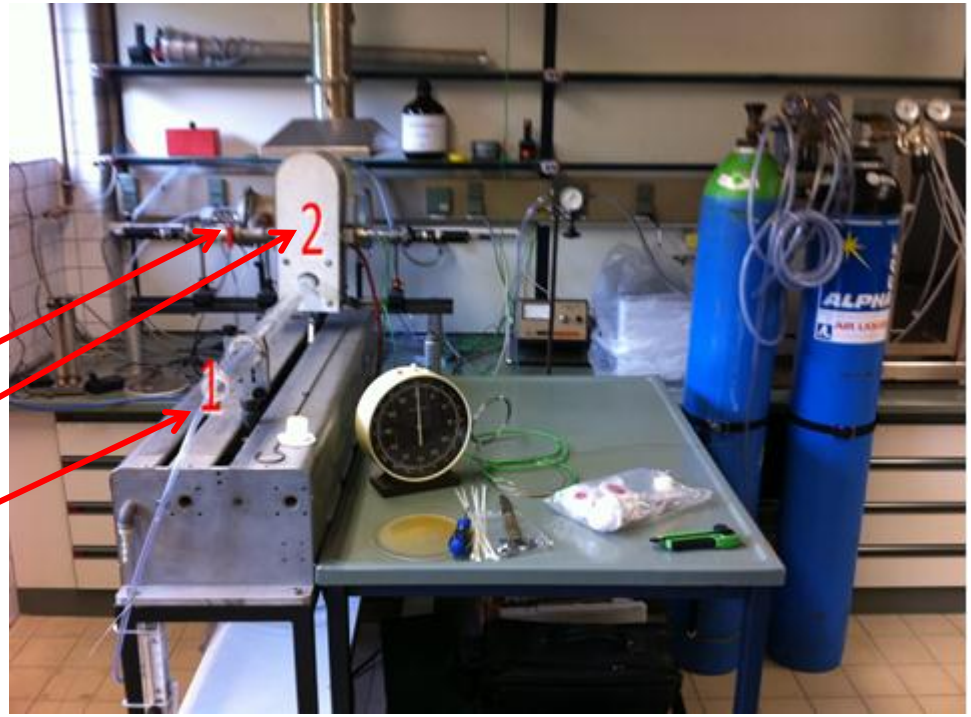
$$1{,}8\ CO_2 + 0{,}024\ CO + 1{,}45\ H_2O + 0{,}17\ C + 10{,}9\ N_2 + 0{,}0045\ HCl$$

CO_2	CO	C	HCN	HCl
Kohlenstoff-dioxid	**Kohlenstoff-monoxid**	**Russ**	**Blausäure**	**Salzsäure**

CFX Berlin

DIN-Rohr zur Messung der Rauchentwicklung:

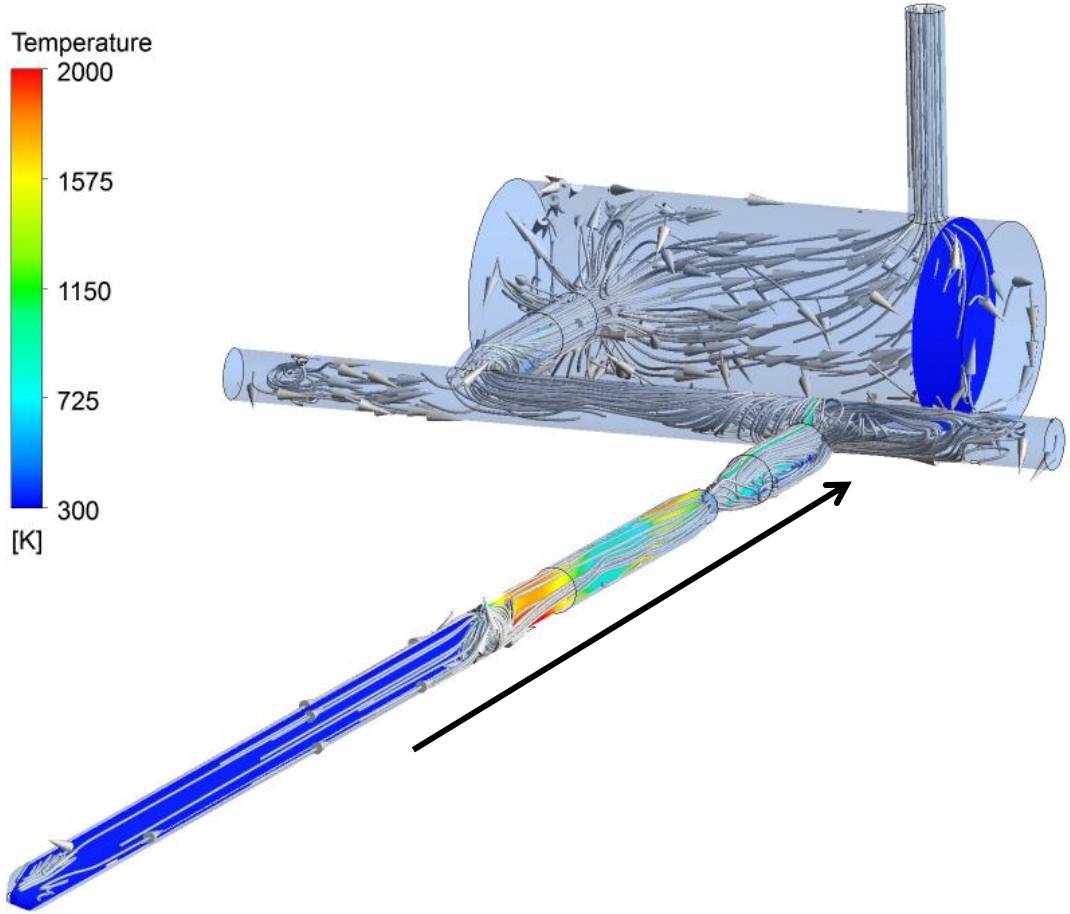
- Probekörper befindet sich in einem Quarzrohr
- Ofen wird über Probekörper hinweggefahren
- FTIR zur Bestimmung der chemischen Zusammensetzung der Rauchgase
- Messung der Lichtschwächung

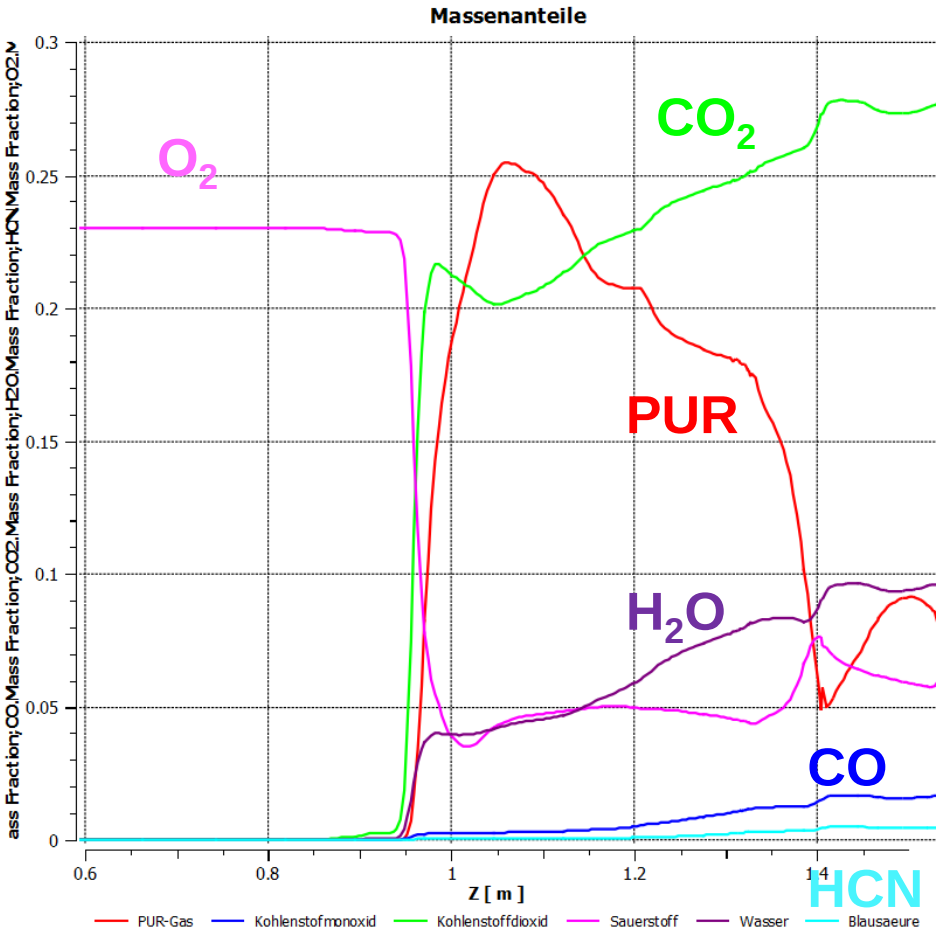


Messstrecke
Ofen
DIN-Rohr

Simulation von Schwelbränden

Modell für Verbrennung





CFX Berlin

Was ist zu modellieren?

1. **Pyrolyse**
2. **Verbrennung** des entstehenden Gases
3. Bewertung der **Giftigkeit**
   - Unterscheidung in erstickende und reizende Stoffe
   - Wärme- und Sichteinfluss mitentscheidend
   - Auswirkungen sehr individuell (physisch und psychisch)
   - verschiedene Modelle verfügbar
   - ➢ Fractional Effective Dose-Modell für erstickende Gase nach ISO 13571

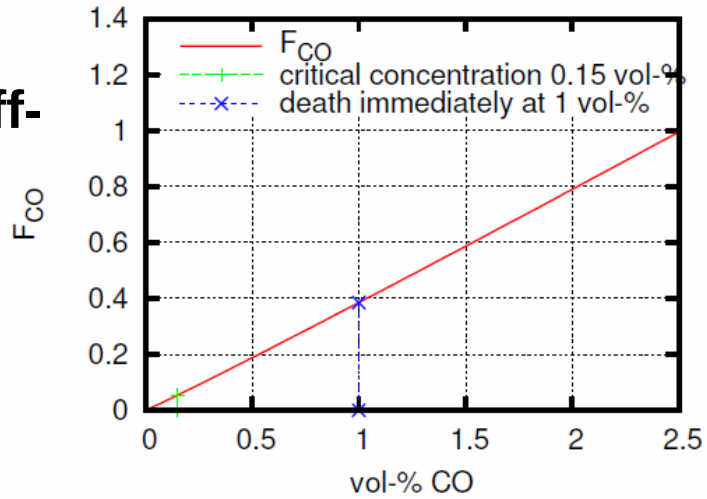
Was ist **Fractional Effective Dose** (FED)?

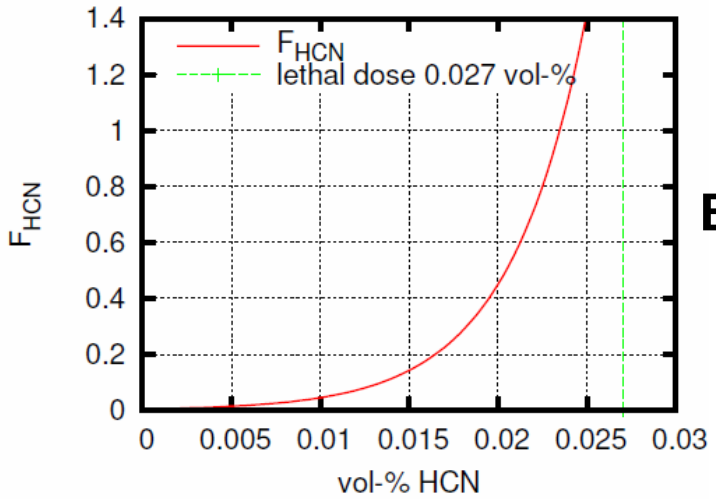
- FED = Vergiftungsteil, den man erhält, wenn man den konstanten Bedingungen eine Minute ausgesetzt ist
- Kehrwert von FED = Zeit t_I in Minuten, nach der man bei konstanten Bedingungen “außer Gefecht gesetzt” wird (“incapacitation time”)
- Gesamt-ED durch Addition der Minuten-FED
  - unter 0,1: fast alle Personen können sich gefahrlos retten
  - bei Erreichen von 1: Bewusstlosigkeit
  - Erreichen von 2-3: Tod
  - Daten basieren auf jungen, gesunden Personen (oder Tieren), problematisch für Kinder, Ältere, Asthmatiker,…

CFX Berlin

Grafische Darstellung der Einzelterme:

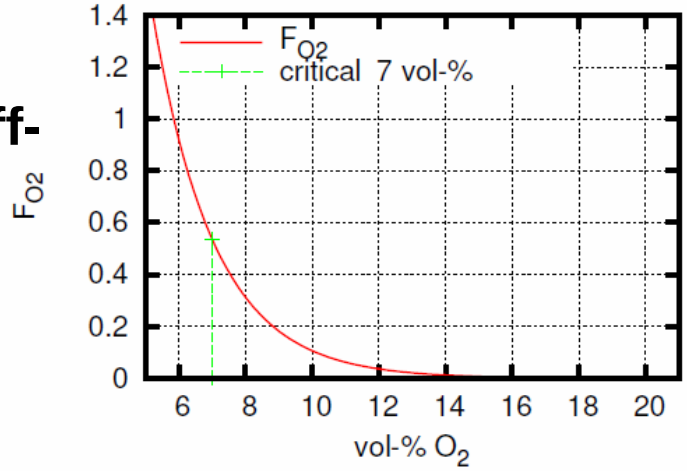
CO Kohlenstoff-monoxid

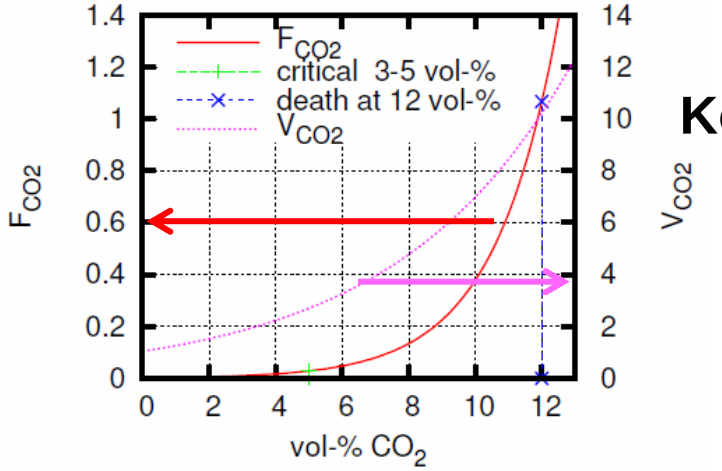




HCN Blausäure

O_2 Sauerstoff-mangel





CO_2 Kohlenstoff-dioxid

Fractional Effective Dose (FED)-Modell:

- Erstickung durch
  - Kohlenstoffmonoxid: $F_{CO} = K\ (\text{ppm CO})^{1.036}/D$
  - Cyanwasserstoff (Blausäure): $F_{HCN}=1/\exp[A-B(\text{ppm HCN})]$
  - Sauerstoffmangel: $F_{O2} = 1/\exp[A-B\{20{,}9-(\%\ O_2)\}]$
- Erhöhung des Atemvolumens durch Kohlenstoffdioxid:

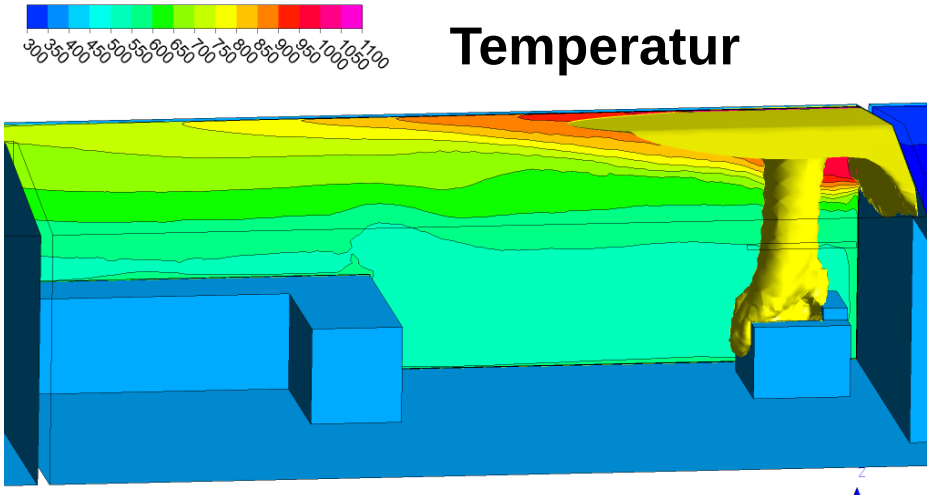
  $V_{CO2}=\exp[A\ (\%\ CO_2)+B]/C$
- Kombiniert zu FED:

  $F_{IN} = (F_{CO} + F_{HCN}) \times V_{CO2} + F_{O2}$
- Integration ergibt Gesamt-Belastung
  - ortsfeste Integration über “Transient Statistics” im Löser
  - Pfadintegration in CFD-Post über Session-Datei

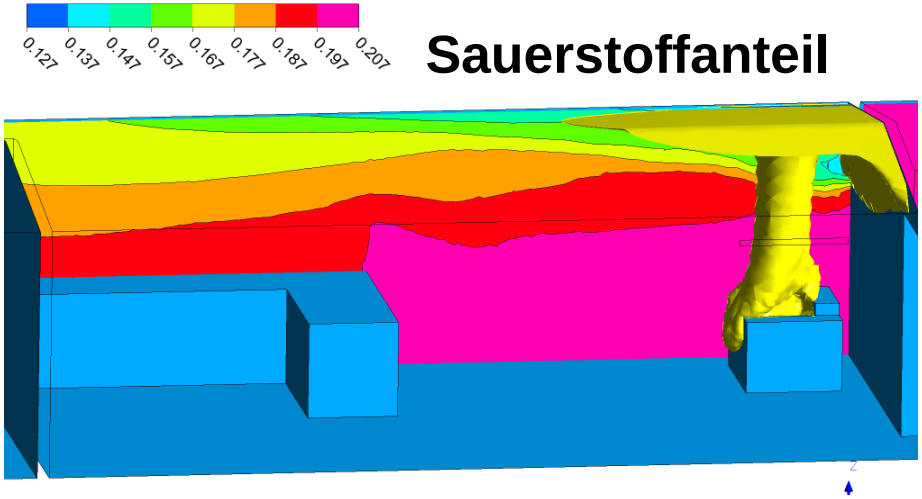
Simulation von Schwelbränden

Modell für Giftigkeit

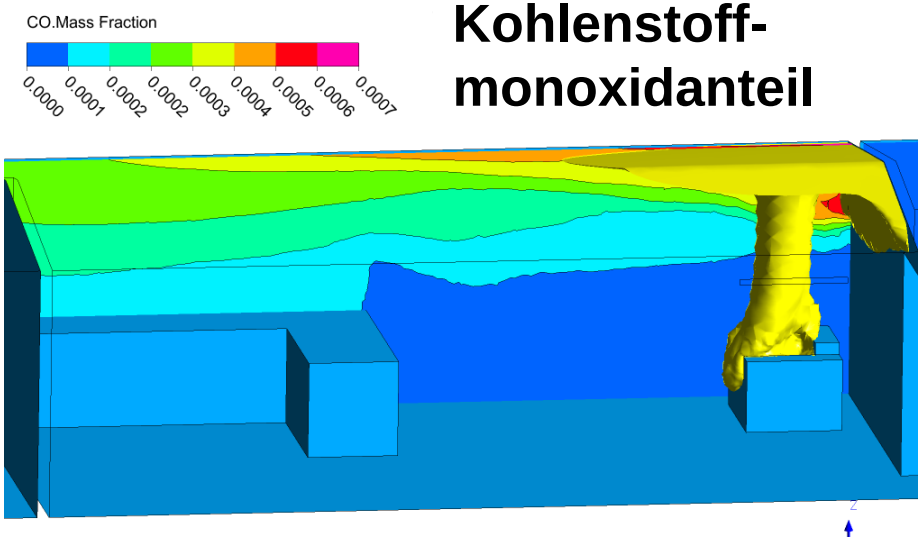
CFX Berlin



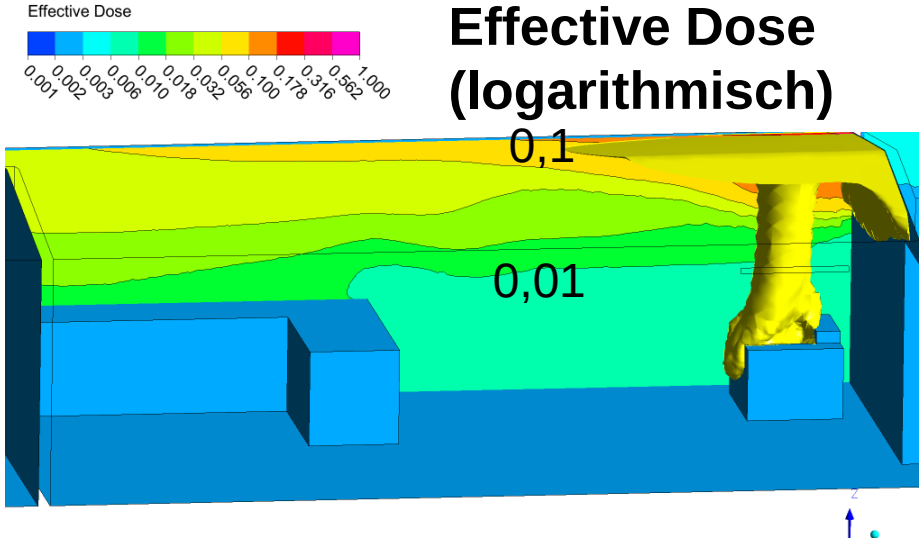
Temperatur



Sauerstoffanteil



Kohlenstoff-monoxidanteil

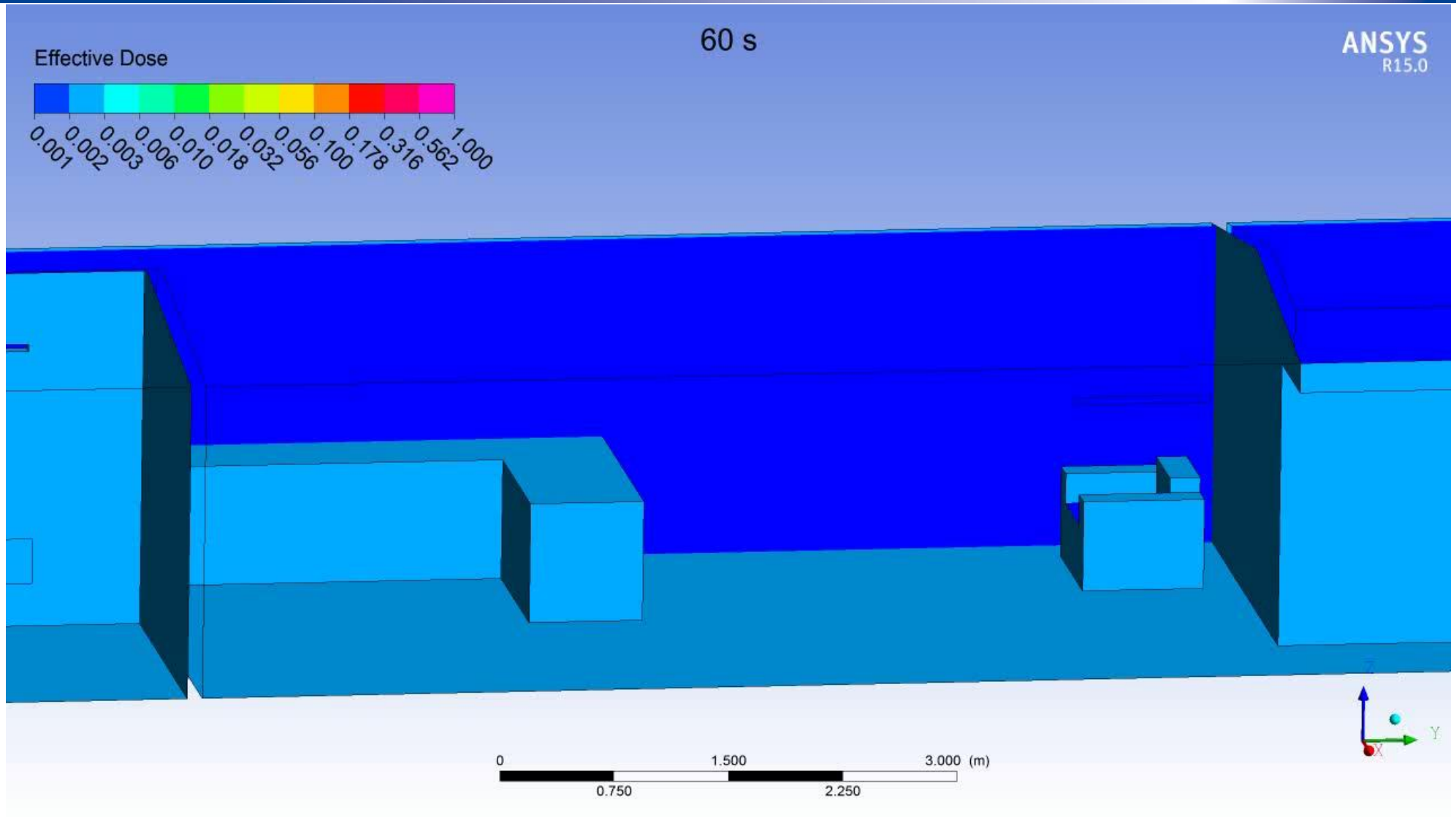


Effective Dose (logarithmisch)

Simulation von Schwelbränden

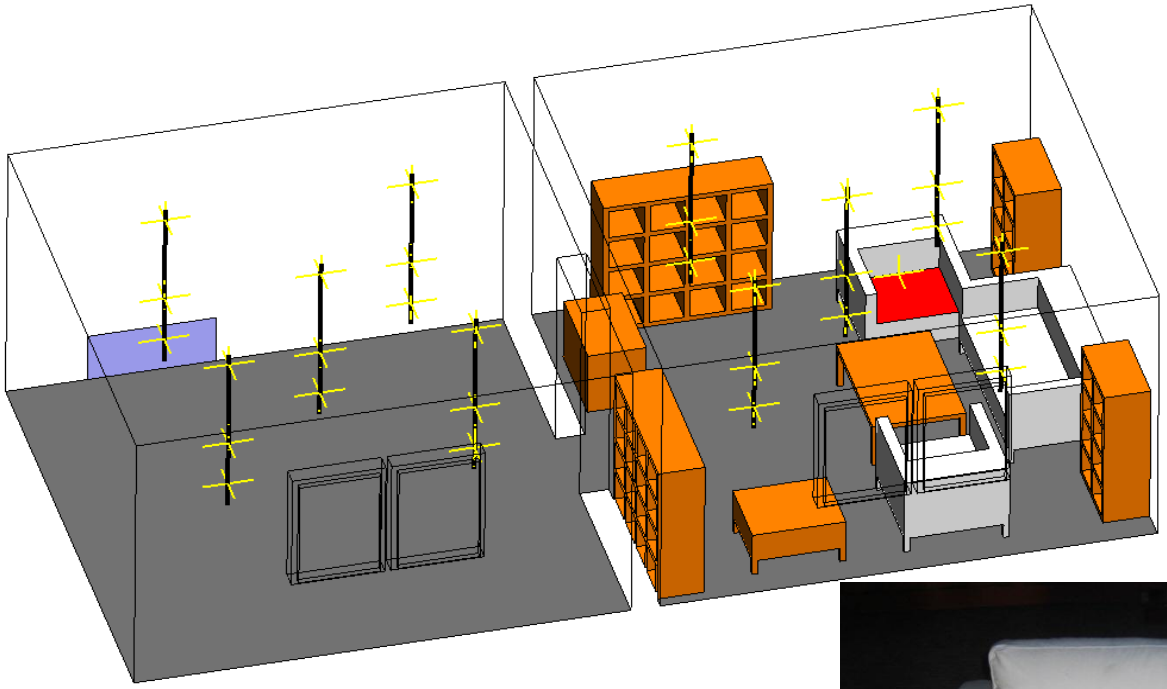
Modell für Giftigkeit

CFX Berlin



Simulation von Schwelbränden

Großbrandversuch der BAM

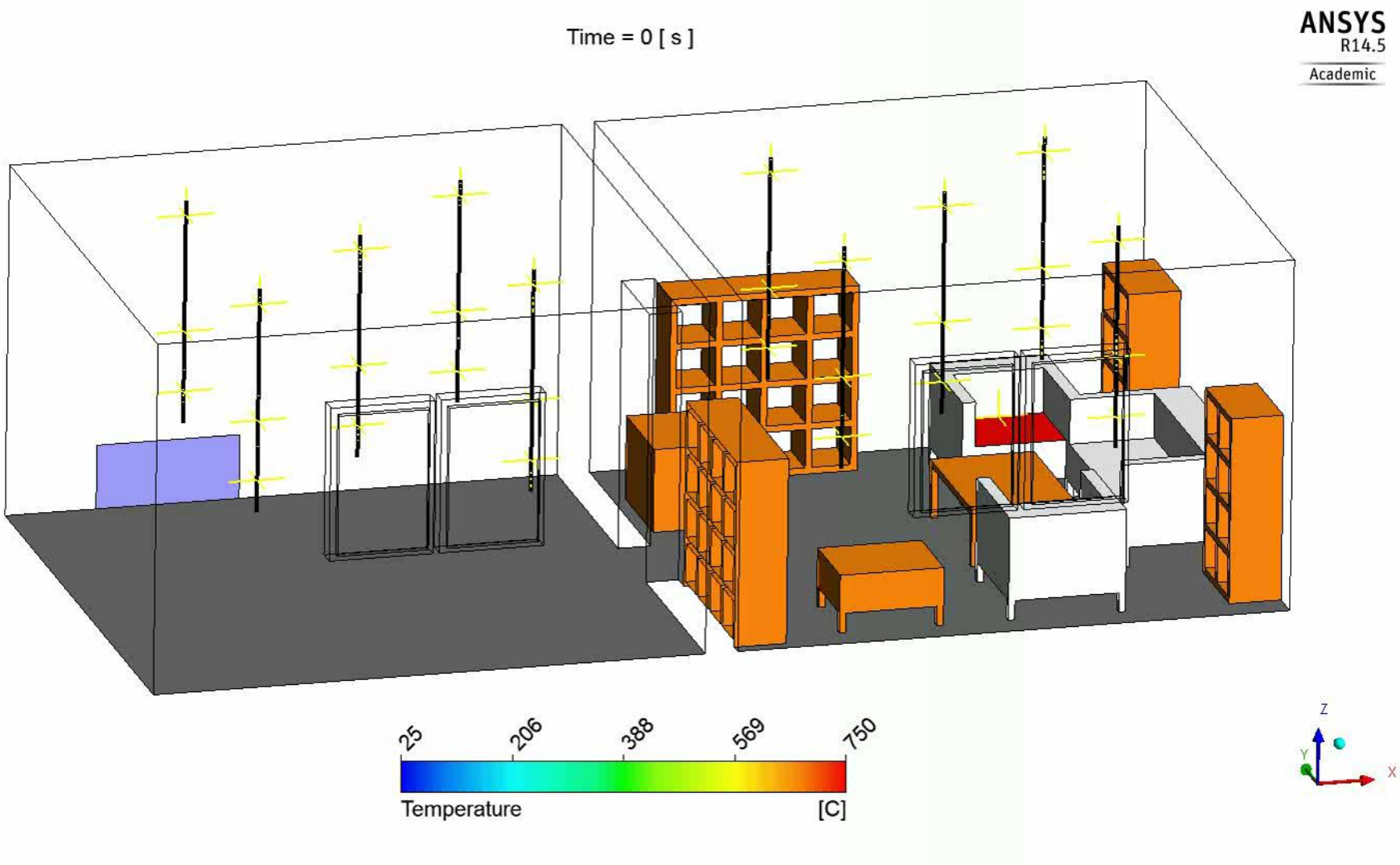


- **Vier Versuche:**
  - 2x neue Möbel
  - 2x alte Möbel
  - Variation von Ventilation und Brandlast

- **Brandquelle Sessel**
- **Entzündet mit Normbrandlast (Papierkissen)**

Simulation von Schwelbränden

Großbrandversuch der BAM



Zusammenfassung und Ausblick

CFX Berlin

- Untersuchung der ANSYS-Modelle auf Eignung für Brandsimulationen
- Implementierung verschieden komplexer Schwelbrand-modelle und deren Anbindung an die Vollbrandphase
- Entwicklung von Bewertungsmöglichkeiten für Toxizität und Sichtbehinderung

➢ Aufbau einer Datenbank für Schwelmodelle und Rauchgase

➢ Vergleich mit Schwelbrandexperimenten und Brandversuchen

Vielen Dank

- unserem Projektpartner

BAM
Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung

- dem Zuwendungsgeber

ZIM
Zentrales Innovationsprogramm Mittelstand

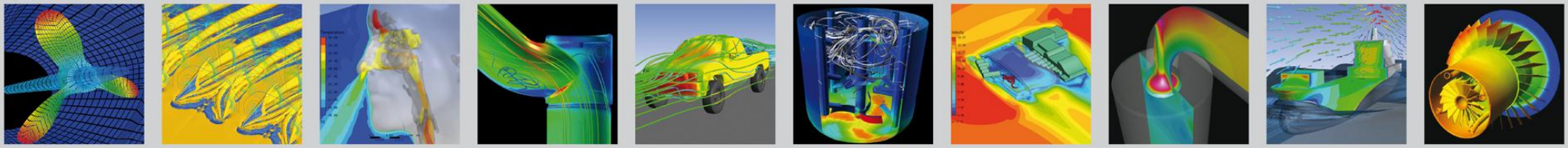
Gefördert durch:

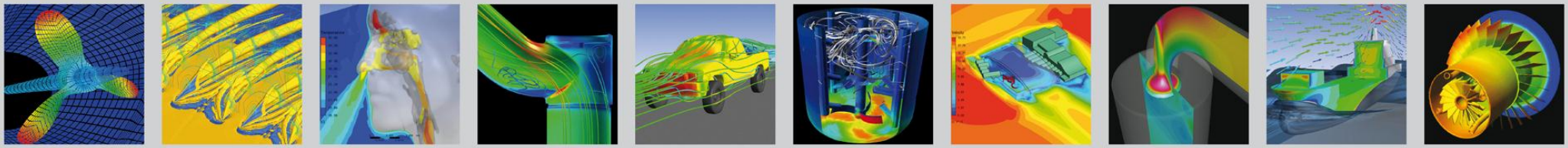
Bundesministerium für Wirtschaft und Technologie

aufgrund eines Beschlusses des Deutschen Bundestages

- und Ihnen für die Aufmerksamkeit!

CFX Berlin Software GmbH



ist kompetenter Partner für:

- ✓ ANSYS Simulationssoftware
- ✓ Berechnung & Optimierung
- ✓ Beratung & Schulung
- ✓ Forschung & Entwicklung