

Simulation und experimentelle Untersuchungen der Schwergasausbreitung

Abdelkarim Habib¹, Bernd Schalau¹, Dirk Schmidt¹

¹ Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung, Fachbereich 2.1 „Gase, Gasanlagen“, Berlin

Aufgrund gestiegener Rechnerleistung finden heutzutage numerische Strömungssimulationen aus dem Bereich der CFD (Computational Fluid Dynamics) immer mehr Eingang in die Sicherheitstechnik. Bisherige Berechnungsverfahren zur Schwergasausbreitung basieren zum Teil auf empirischen Annahmen und sind in ihrem Anwendungsbereich eingeschränkt. Die zugrunde liegenden Formeln und Theorien erlauben außerdem meist nur eindimensionale Aussagen bezüglich der Konzentrationsverteilung in der Umgebung. Anhand von Literaturdaten und eigenen Freifeldversuchen zur Schwergasausbreitung soll die Leistungsfähigkeit von CFD-Berechnungen hinsichtlich ihres Kosten/Nutzen-Verhältnisses sowie im Vergleich zu herkömmlichen Modellen bewertet werden. Während die eigenen Freifeldversuche hauptsächlich zur Validierung der numerischen Simulationen dienen, können anhand der in der Literatur veröffentlichten Daten Vergleiche mit z.B. der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 durchgeführt werden.

1 Einleitung

Zur Untersuchung der Leistungsfähigkeit neuer Berechnungsverfahren wie z.B. CFD-Methoden (Computational Fluid Dynamics) wurden in der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung experimentelle Untersuchungen der Schwergasausbreitung unter atmosphärischen Bedingungen im Freifeld durchgeführt. Hierbei wurden unterschiedliche Massenströme, Flächen- und Punktquellen sowie Umgebungen mit und ohne Strömungshindernisse untersucht. Unter anderem soll der Einsatz verschiedener Quellgeometrien die Frage klären, inwiefern bei einer Lachenverdunstung, welche durch die Flächenquelle nachgestellt wird, tatsächlich mit einem Schwergascharakter bei der Ausbreitung zu rechnen ist. Während die eigenen Versuche den Bereich mit Ausbreitungslängen von maximal 100 m abdecken, wurden zusätzlich Literaturdaten zu Schwergasausbreitungsversuchen mit Ausbreitungslängen bis zu 1 km herangezogen, um die Simulationen mit ANSYS CFX v14.0 [1] mit einfacheren Berechnungsmodellen wie einem Grenzschichtverfahren [6] und der VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 [2] zu vergleichen. Hierbei wird ein besonderes Augenmerk auf die Vorhersagegenauigkeit gelegt, ebenso wie auf den notwendigen Berechnungsaufwand. Während Modelle wie die VDI-Richtlinie 3783 und das Grenzschichtverfahren modellbedingt teilweise starken Einschränkungen unterliegen, versprechen CFD-Modelle die Möglichkeit, die Realität sehr genau abzubilden und für fast alle Anwendungszwecke geeignet zu sein. Aufgrund des sehr hohen finanziellen und zeitlichen Aufwandes bei der Durchführung von CFD-Berechnungen stellt sich die Frage, in welchem Verhältnis dies zu einer möglichen besseren Vorhersagegenauigkeit steht.

2 Theoretischer Hintergrund

2.1 Die VDI-Richtlinie 3783

Die VDI-Richtlinie 3783, Blatt 2 [2] zur Berechnung der Schwergasausbreitung basiert auf Windkanalexperimenten mit verschiedenen Modellkonfigurationen an Hindernissen. Die Übertragbarkeit der Windkanaldaten auf den Realmaßstab wird anhand einer Dimensionsanalyse gewährleistet. Neben der Definition der notwendigen Anfangsparameter bei der Freisetzung wie Dichte und Volumen bzw. Volumenstrom, um von einem „schweren“

Gas ausgehen zu können, definiert die Richtlinie weiterhin, dass bei Unterschreiten einer Konzentration von 1 Vol.% die Schwergaseffekte vernachlässigbar werden. Somit ist an dieser Stelle dann mit Blatt 1 [3] der Richtlinie für dichteneutrale oder leichte Gase weiterzurechnen. Blatt 1 basiert auf einem Gauss'schen Ausbreitungsmodell, bei dem angenommen wird, dass sich der Mittelpunkt der Gaswolke mit konstanter Windgeschwindigkeit fortbewegt. Einmischung von Luft führt zu einer Verdünnung der Wolke bei gleichzeitig anwachsendem Volumen. Diesem Mischungsprozess wird durch Streuungsparameter Rechnung getragen, welche für den Bereich zwischen 100 m und 10.000 m Entfernung zur Quelle experimentell bestimmt wurden. Berechnungen für Entfernungen unterhalb von 100 m sind somit zwar theoretisch möglich, jedoch aufgrund der Extrapolation der Streuungsparameter stark fehlerbehaftet und nicht zu empfehlen.

Zwar wurden für Blatt 2 der Richtlinie 26 Modellkonfigurationen an Hindernissen vermessen, diese bilden jedoch nur sehr selten die real vorliegende Bebauung ab. In Blatt 1 der Richtlinie werden Hindernisse nicht mehr einzeln abgebildet sondern als Bodenrauigkeit parametrisiert.

2.2 Lachenverdunstung / Grenzschichtverfahren

Bisher wurde die Lachenverdunstung anhand von empirischen Modellen wie z.B. Mackay/Matsugu [4] oder Sutton/Pasquill [5] berechnet und der resultierende Massenstrom als Eingangsparemeter für Gasausbreitungsmodelle wie z.B. die VDI Richtlinie 3783 benutzt. Das verwendete Grenzschichtverfahren [6] basiert auf der Lösung der zweidimensionalen Grenzschichtgleichungen ergänzt um ein algebraisches Turbulenzmodell und erlaubt bei vertretbarem Rechenaufwand eine genauere Vorhersage des Verdunstungsmassenstroms ebenso wie die direkte Abschätzung der Konzentrationsverteilung im Nahbereich der Lache. Im Fernbereich werden, aufgrund der zweidimensionalen Formulierung der Gleichungen, die Konzentrationen deutlich überschätzt, da die laterale Ausbreitung der Wolke quer zur Windrichtung nicht berücksichtigt werden kann. Da das Grenzschichtverfahren explizit für die Berechnung der Lachenverdunstung entwickelt wurde, können nur Flächenquellen am Boden adäquat berücksichtigt werden.

2.3 ANSYS CFX v14.0

Der kommerzielle CFD Code ANSYS CFX v14.0 [1], der zur Simulation der Gasausbreitung eingesetzt wurde, verwendet Reynolds gemittelte Navier-Stokes-Gleichungen zur Berechnung des Impuls- und Wärmeaustauschs. Weiterhin können unterschiedliche Modelle zur Berücksichtigung der Turbulenz eingestellt und verwendet werden. Der Vorteil der Berechnungen mit ANSYS CFX im Vergleich zu konventionellen Gasausbreitungsmodellen ist der dreidimensionale Charakter der zu lösenden Gleichungen. Somit ist die Lösung nicht auf eine Raumdimension beschränkt, sondern liefert ein vollständiges dreidimensionales Abbild der Gaswolke während der Ausbreitung. Weiterhin ermöglicht die Verwendung der zeitabhängigen Navier-Stokes-Gleichungen die Berücksichtigung instationärer Randbedingungen. Als maßgeblichen Nachteil bei der Durchführung von CFD-Simulationen ist der hohe finanzielle und zeitliche Aufwand zu nennen.

3. Experimentelle Untersuchungen

Die zur Validierung der Berechnungen herangezogenen eigenen Freifeldversuche umfassten drei unterschiedliche Versuchsaufbauten. Es wurde die impulsfreie Freisetzung aus einer Flächenquelle mit einem Durchmesser von 1 m, 2 m und 3 m und Massenströmen von jeweils rund 6 g/s zur Simulation der Lachenverdunstung untersucht. Weiterhin wurde die Freisetzung von Massenströmen um die 50 g/s aus einer Punktquelle in einem

hindernisfreien Gelände, sowie unmittelbar neben einem Zylinder (5 m Durchmesser, 4 m Höhe) als Strömungshindernis untersucht, außerdem die Freisetzung von Massenströmen im Bereich von 475 g/s auf einem hindernisfreien Feld.

Bei allen Versuchen wurde R134a (1,1,1,2-Tetrafluorethan) freigesetzt, welches aufgrund seiner Dichte von rund 4,3 kg/m³ bei 20°C und 1 bar als Schwergas gilt.

Die Gaskonzentrationen im Nahbereich der Quelle wurden anhand von Sauerstoffsensoren des Typs DRAEGER Polytron 7000 gemessen. Hierbei wurde die Verdrängung des Sauerstoffs aus der Umgebungsluft durch das freigesetzte Gas gemessen und in die dazu gehörige Gaskonzentration umgerechnet. Im Fernbereich, mit Konzentrationen unterhalb von 1 Vol.%, wurden Halbleitersensoren des Typs FIGARO TGS 832 eingesetzt. Anzumerken ist, dass die Figaro Sensoren deutlich langsamere Reaktionszeiten aufweisen als die Draeger-Sensoren.

Während die eigenen Freifeldversuche Entfernungen bis maximal 100 m abdecken, wurden zur Untersuchung der Modelle bei großmaßstäblichen Freisetzungen Daten aus der Literatur herangezogen. Hierbei wurden die Daten aus den Prairie-Grass-Versuchen [7] verwendet. Bei dieser Versuchsreihe wurde in 68 Experimenten die Ausbreitung von SO₂ gemessen. Die Sensoren befanden sich hierbei in Entfernungen von 50m, 100m, 200m, 400m und 800 m zur Quelle.

4 Ergebnisse

In Abbildung 1 ist der Vergleich der experimentelle Daten aus einem Versuch mit einer 2-m-Durchmesser-Flächenquelle und einem Massenstrom von 6 g/s mit den Ergebnissen des Grenzschichtverfahrens und einer transienten Berechnung mit CFX dargestellt.

Beide Simulationsmodelle zeigen eine ähnlich gute Übereinstimmung mit den Messwerten. Der Sprung im Verlauf der Messdaten bei einer Entfernung zur Quelle von 1 m ist sicherlich dem Umstand geschuldet, dass bis 1 m die Draeger Polytron und ab 1 m die Figaro TGS 832 zum Einsatz kamen. Aufgrund der konstanten Schwankungen der Windrichtung während der Versuche können die Figaro Sensoren mit ihrer langsameren Reaktionszeit schlechter kurze Konzentrationsspitzen aufspüren, als die Draeger Sensoren.

Mit steigendem Abstand zur Quelle erhöht sich auch die Abweichung zwischen simulierten und gemessenen Werten. Während das Grenzschichtverfahren aufgrund seiner zweidimensionalen Formulierung, durch die somit fehlende laterale Wolkenausbreitung, mit grösser werdender Entfernung zu hohe Konzentrationswerte vorhersagt, ist die Abschätzung anhand der Simulationen mit CFX stark vom eingestellten Windfeld abhängig. Da die Messungen des Windfeldes, welches als Randbedingung in CFX eingestellt wurde, stromaufwärts von der Quelle durchgeführt wurden, ist mit steigender Entfernung zur Quelle stromabwärts mit einer größeren Abweichung des simulierten Windfeldes vom real vorliegenden zu rechnen.

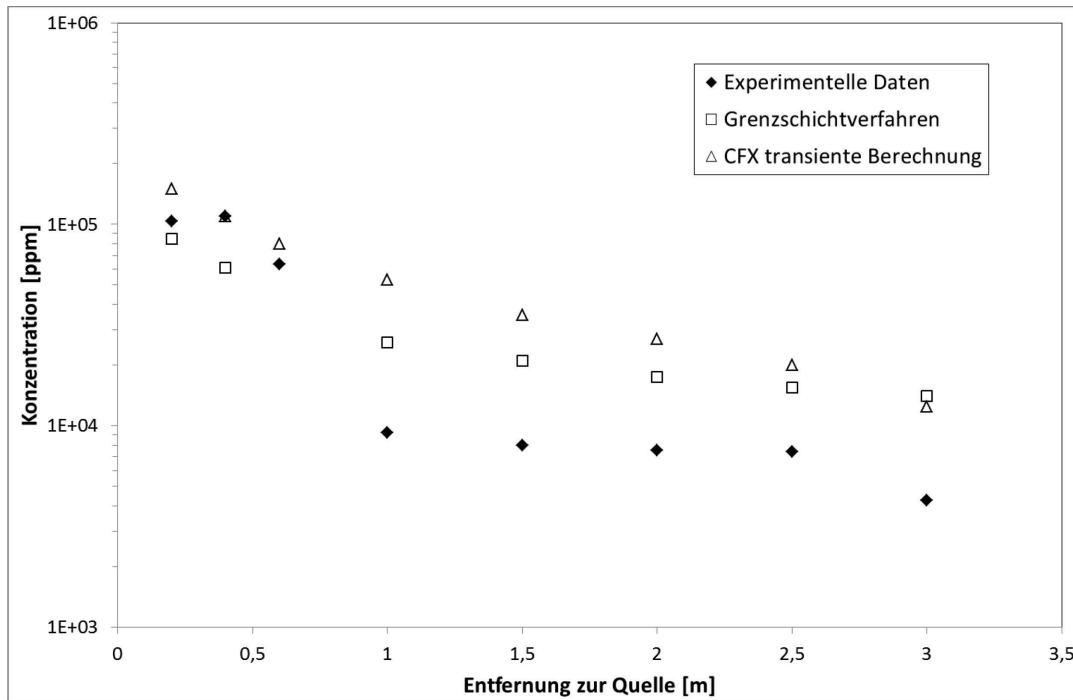


Abbildung 1: Maximalwerte der Konzentration für eine Flächenquelle mit 2 m Durchmesser und einem Massenstrom von 6 g/s R134a.

In Abbildung 2 sind exemplarisch die Messwerte eines Versuches für die Freisetzung von 55 g/s R134a aus einer Punktquelle im Windschatten eines Zylinders mit 5 m Durchmesser und einer Höhe von 4 m abgebildet. Zu sehen sind die Messwerte aller eingesetzten Sensoren, ebenso wie die jeweils zugehörigen Simulationsergebnisse. Die gute Übereinstimmung der Mess- und Simulationsergebnisse zeigt, dass CFX die durch das Strömungshindernis induzierte Turbulenz gut wiedergibt. Die steigende Abweichung zwischen Simulation und Messung mit größer werdender Entfernung zum Hindernis ist durch die konstanten Schwankungen der Windrichtung zu erklären. Während in CFX jeweils der zu jedem Zeitpunkt vorliegende maximale Konzentrationswert berechnet wird, geben die Messwerte nur die maximalen Konzentrationen wieder, die die FIGARO Sensoren mit ihren langsamen Reaktionszeiten erfassen konnten. Ähnliche Beobachtungen wurden bei allen weiteren Versuchen der Messreihe gemacht.

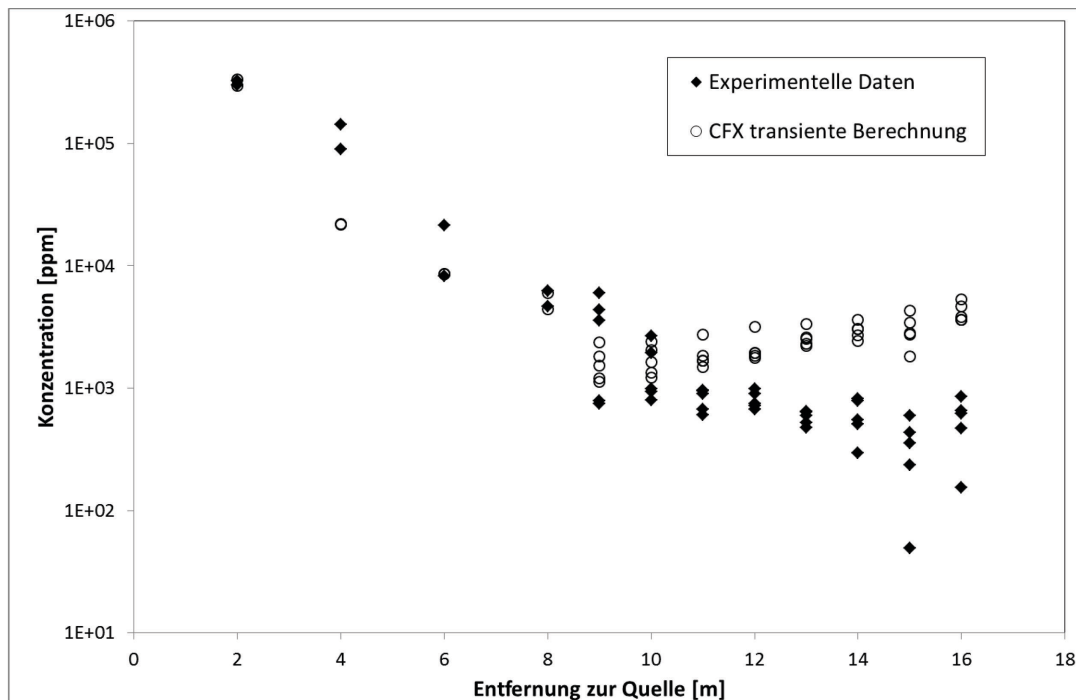


Abbildung 2: Maximalwerte der Konzentration für eine Punktquelle mit einem Massenstrom von 55 g/s R134a in der Nähe eines Zylinders mit 5 m Durchmesser und 4 m Höhe

Der Vergleich der Simulationen mit CFX, der Berechnungen mit der VDI-Richtlinie 3783 und den Messwerten aus der Literatur zu den Prairie Grass Versuchen Nr. 10 (Abbildung 3) und Nr. 36 (Abbildung 4) zeigt zum einen, dass die VDI-Richtlinie an dieser Stelle die auftretenden Konzentrationen unterschätzt, während die Berechnungen mit CFX konservative Abschätzungen liefern. Dass CFX im Falle des Versuchs Nr. 10 eine starke Überschätzung der Werte liefert, während bei Versuch Nr. 36 eine gute Übereinstimmung vorliegt, ist auf zwei Faktoren zurückzuführen. Zum einen ist in der Literatur nur eine mittlere Windgeschwindigkeit dokumentiert, ohne jegliche Angaben zur Windrichtung und deren Schwankung während der Versuche. Es ist davon auszugehen, dass bei Versuch Nr. 10 die Windrichtung seltener als bei Versuch Nr. 36 direkt in Richtung der Sensoren orientiert war und häufiger wechselte, was zu einer stärkeren Verdünnung der Wolke führt. Die Randbedingungen für CFX waren hier aufgrund der Datenlage als konstant eingestellt mit konstanter Windrichtung. Die Ergebnisse der Simulation stellen somit den Idealfall einer konstanten Beaufschlagung der Sensoren mit geringerer Verdünnung der Wolke dar. Des Weiteren unterscheiden sich die beiden Versuche durch die zum Zeitpunkt der Durchführung herrschende Pasquill-Gifford-Stabilitätsklasse. Während bei Versuch Nr. 10 eine instabile Schichtung herrschte, war diese bei Versuch Nr. 36 sehr stabil. Da die Stabilitätsklasse einen direkten Einfluss auf die Turbulenz der atmosphärischen Strömung hat, liegen in beiden Versuchen unterschiedliche Turbulenzprofile vor. Da in CFX keine Stabilitätsklassen, sondern nur Turbulenzprofile eingestellt werden können, diese aber nicht dokumentiert waren, wurden beide Fälle mit derselben Turbulenzeinstellung berechnet. Diese Beobachtungen gelten analog für alle weiteren Versuche der Prairie Grass Reihe, die untersucht wurden.

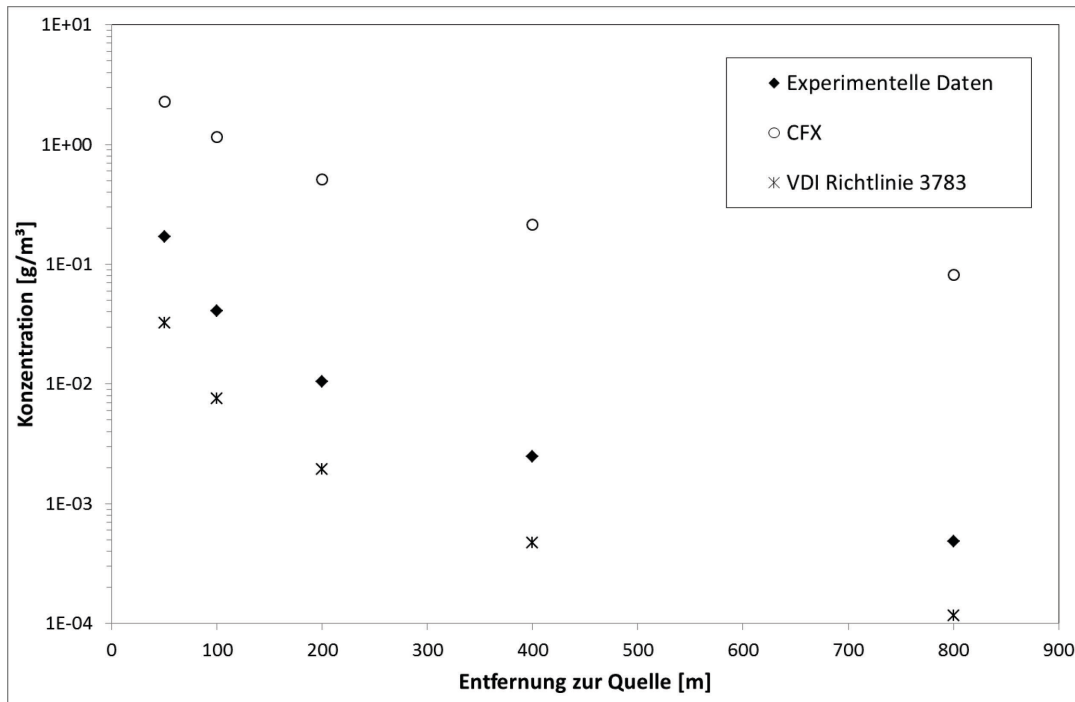


Abbildung 3: Prairie Grass Versuch Nr. 10, Vergleich der Messwerte mit den Ergebnissen der VDI Richtlinie und der CFX Simulationen

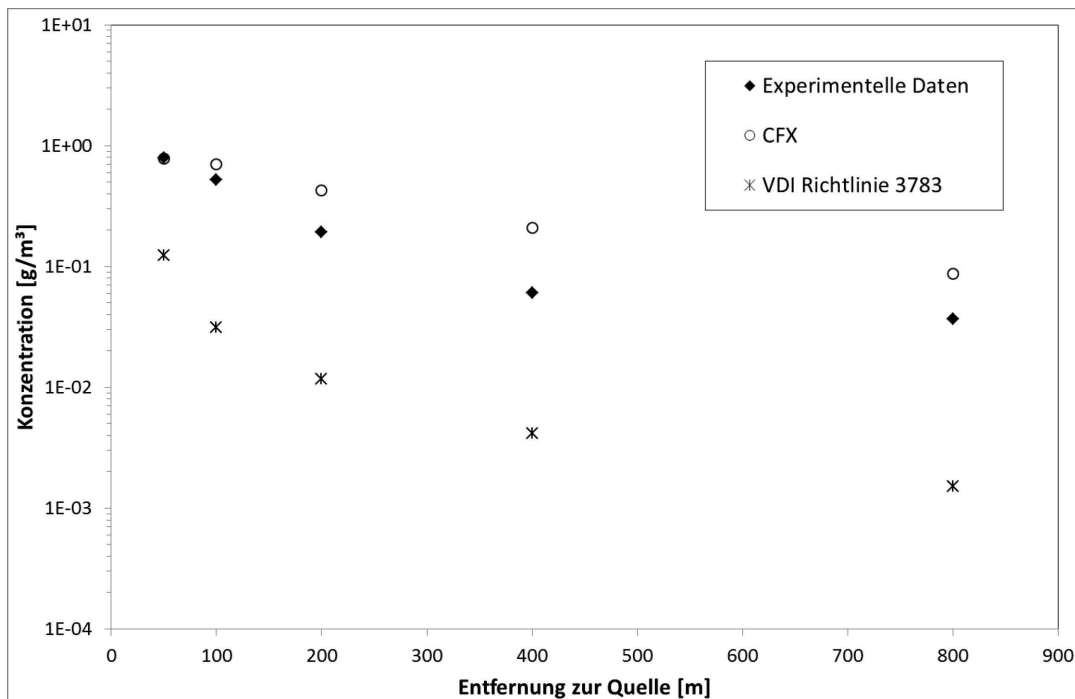


Abbildung 4: Prairie Grass Versuch Nr. 36, Vergleich der Messwerte mit den Ergebnissen der VDI Richtlinie und der CFX Simulationen

5 Zusammenfassung

Der Vergleich experimenteller Daten mit verschiedenen Gasausbreitungsmodellen hat gezeigt, dass CFD-Modelle (hier CFX) eine gute, eher konservative Vorhersage der zu

erwartenden Konzentrationsverteilung für die unterschiedlichsten Szenarien und Randbedingungen ermöglicht. Spezialisierte Modelle wie das Grenzschichtverfahren können, innerhalb ihres Anwendungsbereichs, genauso gute Vorhersagen bei gleichzeitig deutlich geringerem Aufwand ermöglichen. Zwar hat sich gezeigt, dass die VDI Richtlinie die zu erwartenden Konzentrationen unterschätzt, nichts desto trotz ist es ein anerkanntes Gasausbreitungsmodell, das sich insbesondere im Bereich der Flächennutzungsplanung bewährt hat und eines der ganz wenigen Modelle, die speziell für den Fall der Schwergasausbreitung entwickelt wurden. Der Vorteil beim Einsatz von CFD-Modellen liegt in der universellen Einsetzbarkeit verglichen mit den spezialisierten Modellen, die auf einen sehr engen Anwendungsbereich beschränkt sind. Weiterhin liefern CFD-Modelle detaillierte Informationen über die räumlichen Phänomene. Spätestens bei der Untersuchung der Auswirkungen spezifischer Hindernisse wie z.B. eines neuen Gebäudes in einer Industrieanlage auf die Gasausbreitung ist CFD sicherlich Methode der Wahl.

Literaturverzeichnis

- [1] www.ansys.com
- [2] VDI-Richtlinie 3783 Blatt 2; Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen schwerer Gase - Sicherheitsanalyse, Beuth Verlag GmbH
- [3] VDI-Richtlinie 3783 Blatt 1; Ausbreitung von störfallbedingten Freisetzungen - Sicherheitsanalyse, Beuth Verlag GmbH
- [4] D. Mackay, R. S. Matsugu. Evaporation Rates of Liquid Hydrocarbon Spills On Land and Water. The Canadian Journal of Chemical Engineering, Vol. 51, 1973
- [5] Pasquill, F. „Evaporation from a plane, free liquid surface into a turbulent air Stream“, Proceedings of the royal society of London, Series A182.
- [6] Habib, A., Instationäre Berechnung der Lachenverdunstung mittels eines Grenzschichtverfahrens, Dissertation, Technische Universität Berlin, Deutschland, 2011
- [7] Project Prairie Grass, A Field Programm in Diffusion, Geophysical Research Papers No. 59

Terms of Use

Any party may pass on this Work by electronic means and make it available for download under the terms and conditions of the Digital Peer Publishing License (DPPL) Version 3.0. The text of the license may be accessed and retrieved via Internet at <http://nbn-resolving.de/urn:nbn:de:0009-dppl-v3-en8>.

Beyond the conditions of the DPPL, the data which is contained in this catalog May only be used by any party for signal processing if the data is inserted into the source code of the program together with a reference to the catalog and if the program documentation (if available) also contains a reference to this catalog.

Exclusion of Liability

Deviating from paragraphs 12 and 13 of the DPPL Version 3.0, a comprehensive exclusion of liability applies. This states: This catalog is made available without any special or implied guarantee, which – among others – includes the implicit guarantee of the use of the catalog for a certain purpose. Under no circumstances is PTB responsible for any direct or indirect damage, independent of how it arose, through the use of the catalog. This also applies to damage due to errors of the catalog, which were already known at the occurrence of the damage.