

FDS-OHJELMAN UUSIA OMINAISUUKSIA

Simo Hostikka
VTT
PL 1000, 02044 VTT

Tiivistelmä

Fire Dynamics Simulator (FDS) –ohjelman viides versio tuo mukanaan joukon muutoksia, jotka vaikuttavat ohjelman käyttöön ja käytettävyyteen. Tärkeimmät fysikaalisten mallien parannukset ovat kaasufaasin palamismallin päivitys, joka mahdollistaa happirajoitteisten palojen entistä tarkemman simuloinnin, ja uusi kiinteän aineen lämmönsiirtomalli, jonka avulla voidaan entistä realistisemmin simuloida kerroksellisia ja monista materiaaleista koostuvia rakenteita. Uusien pyrolyysimallien hyödyntäminen vaatii kuitenkin myös entistä suuremman joukon parametreja, joiden määrittämiseksi simulointien tekijät joutuvat ponnistelemaan. Erityistä huomiota FDS-ohjelman päivityksen yhteydessä on kiinnitetty ohjelman kelpoisuuden osoittamiseen luomalla erityinen verifointi- ja validointitapausten tietokanta ja dokumentaatio.

JOHDANTO

Fire Dynamics Simulator – ohjelmasta on viime vuosien aikana muodostunut tärkein yksittäinen paloturvallisuussuunnittelun työkalu. Kehitystyötä koordinoi edelleen National Institute of Standards and Technology. Muita kehittäjiä ovat VTT ja Hughes Associates Inc. Ohjelman viides versio tuo mukanaan useita parannuksia ohjelman fysikaalisiin malleihin sekä käytettävyyteen. Tärkeimmät fysikaalisten mallien päivityksen liittyvät kaasufaasin palamisreaktioihin, ja epätäydellisen palamisen mallintamiseen, sekä kiinteän aineen mallintamiseen. Uudessa mallissa on mahdollista kuvata kiinteitä monikerroksisia ja monikomponenttisia materiaaleja, jolle voidaan lisäksi määrittellä mielivaltaiset kemialliset hajoamisreaktiot.

Tässä esitelmässä luodaan katsaus uusiin fysikaalisiin malleihin ja niiden käyttöön paloturvallisuussuunnittelussa. Uudet fysikaaliset mallit luovat tarpeen entistä tarkemmille ja monimuotoisemmille simuloinnin lähtötiedoille. Kiinteän aineen reaktioiden yksityiskohtainen kuvaus esimerkiksi vaatii neljä reaktioon liittyvää parametria per reaktio. Tämän lisäksi tarvitaan tavallisimmat termodynaamiset ominaisuudet kuten lämmönjohtavuudet ja ominaislämpökapasiteetit. Reaktioparametreja voidaan määrittää kemiallisilla pienen mittakaavan termogravimetrisilla kokeilla sekä muilla pienen mittakaavan kokeilla, kuten kartiokalorimetri. Parametrien määrittäminen voi olla kuitenkin hyvinkin monimutkainen matemaattinen prosessi, koska mikään koemenetelmä ei suoraan mittaa tarvittavia suureita. Materiaaliominaisuuksien määrittämiseen kokeellisista tuloksista onkin kehitetty uusia epälineaariseen ja moniulotteiseen optimointiin perustuva laskentamenetelmiä [1,2].

Palosimuloinnin soveltamisen ja sen avulla tehtyjen suunnitelmien hyväksyttävyyden kannalta on tärkeää, että palosimulointiohjelma on huolellisesti dokumentoitu, verifioitu ja validoitu. Erityisesti nämä tarpeet korostuvat ydinvoimaloiden turvallisuustarkasteluissa. FDS-ohjelman dokumentoinnissa onkin kiinnitetty entistä enemmän huomiota verifointi ja validointitietokannan dokumentointiin ja toistettavuuteen. Perinteisesti mallien validoinnissa on viitattu mallien kehitysvaiheessa julkaistuihin tieteellisiin artikkeleihin ja teknisiin raportteihin. Jatkuvasti kehittyvien ohjelman yhteydessä validointisimuloinnit on kuitenkin toistettava ja raportoitava jokaisen olennaisen versiopäivityksen jälkeen. FDS-ohjelmalle onkin tehty uuden

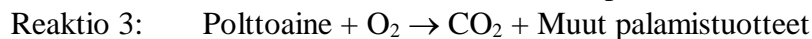
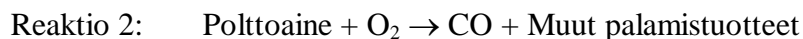
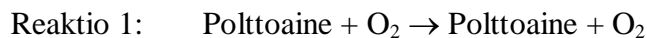
tyyppinen, erillinen verifiointi ja validointiraportti, jota päivitetään jatkuvasti, ja johon liittyy avoimesti saatavilla olevien laskentatapausten tietokanta.

UUSIA OMINAISUUKSIA

Palamismalli

Palosimulointiohjelman tärkein yksittäinen fysikaalinen malli on palamismalli. Palamismalli laskee missä ja kuinka voimakkaasti kaasumainen polttoaine ja happi reagoivat tuottaen lämpöä ja palamistuotteita. Reaktiossa syntyvä lämpö on tärkein virtausta ja lämmönsiirtoa ajava lähdetermi.

Aiemmissä FDS-versioissa palamismalli on perustunut nopean kemian oletukseen, jonka mukaan palamista tapahtuu aina, kun polttoaine ja happi kohtaavat. Tilanteita, joissa reaktiota ei tapahdu, kuvattiin hyvin yksinkertaisella lämpötilan ja happipitoisuuden perusteella toimivalla mallilla. Nämä pääperiaatteet ovat edelleen voimassa, mutta uudessa versiossa etenkin happirajoitteisten palojen simulointiin on tullut joitakin parannuksia. Ennen yhdestä reaktioaskeleesta muodostuva palamisreaktio on jaettu kolmeen osaan siten, että hiili-monoksidin muodostumiselle ja edelleen hapettumiselle on varattu omat reaktionsa. Lisäksi palamattomat hiilivedyt voivat palaa myöhemmin jouduttuaan kosketuksiin hapen kanssa riittävän korkeassa lämpötilassa. Edellisissä versioissa palamattomat hiilivedyt eivät enää myöhemmissä vaiheissa osallistua palamiseen. Palamisreaktio voidaan esittää kolmen askeleen reaktiona



Ensimmäinen reaktio tarkoittaa nyt pelkkää sekoittumista, jonka yhteydessä ei tapahdu palamista.

Käytännön tulipaloissa palamiseen osallistuu suuri joukko erilaisia kemiallisia yhdisteitä. Simuloinnissa tämä kemiallisten reaktioiden suuri joukko on kuitenkin yleensä tyypistettävä yhteen tyyppiseen reaktioon. Uudessa FDS-versiossa tästä rajoituksesta voidaan luopua, jos käytetään äärellisen reaktionopeuden mallia (finite rate reactions). Äärellinen reaktionopeus tarkoittaa, että reaktionopeus riippuu konsentraatioiden lisäksi myös lämpötilasta.

Yllä kuvatuissa parannuksissa on vain osittain kyse varsinaisista uusista fysikaalisista malleista; enemmänkin kyse on kemiallisten komponenttien entistä tarkemmasta kirjanpidosta. Käyttäjälle nämä parannukset voivat kuitenkin näkyä happirajoitteisten palojen entistä tarkempana ja realistisempaan kuvauksena.

Kiinteän aineen lämmönsiirto

Kiinteän aineen lämmönsiirto ja pyrolyysireaktioiden mallinnus ovat oleellinen osa palosimulointia. Uudessa FDS-versiossa on toteutettu joukko parannuksia, jotka helpottavat materiaalien entistä realistisempaa simulointia. Tärkein uusista ominaisuuksista on kerroksellisten rakenteiden mallintaminen. Käyttäjä voi määrittellä useita päällekkäisiä

kerroksia, jotka voivat koostua eri materiaaleista tai materiaalien seoksista. Laskenta perustuu edelleen yksiulotteisen lämmönsiirtoyhtälön ratkaisemiseen differenssimenetelmällä.

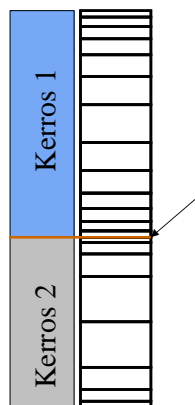
Lämmönjohtumisen lisäksi uudessa FDS-versiossa voidaan laskea myös säteilyn kulkeutuminen aineen sisällä. Tällä on huomattava merkitys lämmön tunkeutumiselle ja palamisnopeudelle erityisesti infrapunasäteilylle läpinäkyvissä aineissa kuten joissakin palavissa nesteissä. Myös monien kiinteiden aineiden palamiskäyttäytyminen muuttuu merkittävästi, kun säteilyn annetaan tunkeutua aineen sisälle. Tällaista käyttäytymistä voidaan olettaa erityisesti huokoisissa aineissa, jotka sisältävät paljon säteilylle läpinäkyvää ilmaa, mutta ovat näkyvän valon alueella läpinäkymättömiä.

Kiinteän aineen reaktioissa aine itse reagoi ja muuttuu muiksi aineiksi. Ainekomponentin massan muutoksen ja reaktionopeuden kaavat ovat

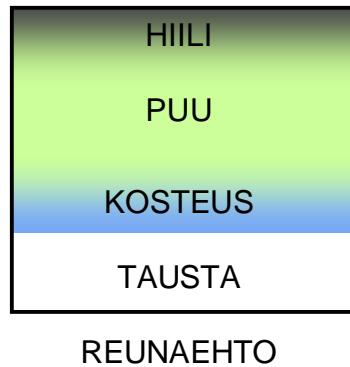
$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\rho_i}{\rho_{i0}} \right) = - \sum_{j=1}^{N_i} r_{ij} + S_i \quad ; \quad r_{ij} = A_{ij} \cdot \left(\frac{\rho_i}{\rho_{i0}} \right)^{n_{ij}} \cdot e^{(-E_{A,ij}/RT_s)} \cdot \max[0, (T_s - T_{ign,ij})]^{p_{T,ij}} \quad (1)$$

Kerroksellisen rakenteen laskentaverkkoa on havainnollistettu kuvassa 1. Kuva 2 havainnollistaa reagoivien materiaalien laskentaa. Reaktiovyöhykkeitä ei enää oleteta äärimmäisen ohuiksi (korkean lämpövirran oletus) vaan reaktiot ovat jatkuvia tilavuusreaktioita.

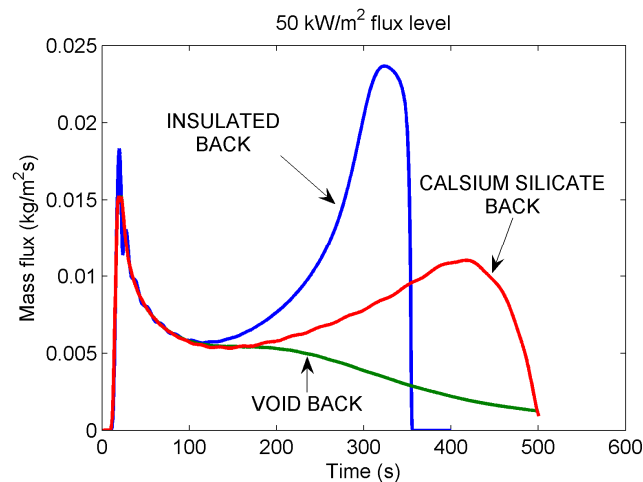
Kuvassa 3 on havainnollistettu esimerkinomaisesti taustamateriaalin vaikutusta puumateriaalin laskettuun palamisnopeuteen kartiokalorimetrikokeessa. Kokeen alussa aine syttyy ja reaktiot tapahtuvat lähellä aineen pintaa, eikä taustalla ole juurikaan vaikutusta palamisnopeuteen. Hiili-kerroksen muodostuttua reaktiot tapahtuvat aineen sisällä, ja palamisnopeus pienenee. Taustalla ei edelleenkään ole suurta merkitystä. Palamisen loppupuolella reaktiot tapahtuvat lähellä aineen takapintaa, ja tausta vaikuttaa voimakkaasti palamisnopeuteen. Jos tausta oletetaan täysin eristetyksi (insulated back), palamisnopeus kasvaa erittäin voimakkaasti. Jos taas oletetaan, että lämmönsiirto takapinnasta tapahtuu vapaan konvektion avulla normaaliin huonelämpötilaan (void back), laskee palamisnopeus keskivaihetta alhaisemmaksi. Edellisissä FDS-versioissa oli valittava nämä kaksi ”ääripäätä”. FDS:n versiossa 5 voidaan puumateriaalin alle määritellä todellisen kaltainen taustamateriaali, jolloin simuloitu palamisnopeus on näiden kahden ääripään välillä, ja vastaavuus kokeellisiin tuloksiin on huomattavasti helpompi saavuttaa.



Kuva 1. Kerroksellisen rakenteen diskretointi. Nuoli osoittaa kahden aineen rajapintaa.



Kuva 2. Esimerkki kerroksellisesta rakenteesta.



Kuva 3. Taustareunaehdon vaikutus puulevyn palamisnopeuteen kartiokalorimetrikokeessa.

LÄHTÖTIETOJEN HANKKIMINEN JA DOKUMENTOINTI

Kun palosimulointia käytetään osana toiminnallista suunnittelua, on ohjelman käyttäjällä suuri vastuu tulosten oikeellisuudesta. Simulointiohjelman kehittäjillä on toki vastuunsa siitä, että ohjelma toimii niin kuin sen dokumentit antavat ymmärtää. Suunnittelutyössä tärkein tuloksiin vaikuttava tekijä ovat kuitenkin ohjelman lähtötiedot. Erityisesti tämä korostuu, jos simuloinnissa yritetään ennustaa tulipalon tehoa materiaalien pyrolyysimallin avulla. Edellisten FDS-versioiden mukana tuli erillinen tietokanta kaasumaisten, kiinteiden ja nestemäisten materiaalien ominaisuuksia (database-tiedosto). Tietokanta oli alun perin tarkoitettu varsinkin kiinteiden aineiden osalta vain esimerkiksi käyttäjille, jotta nämä voisivat määrittellä omia, tapauskohtaisia materiaalejaan. Varsinaiset lukuarvot eivät olleet yleispäteviä, vaan liittyivät johonkin tiettyyn sovellukseen. Aikaa myöden kävi kuitenkin selväksi, että tietokantaa käytettiin ”väärin”, eräänlaisena referenssidatan lähteenä käsikirjojen tapaan.

Uudessa FDS-versiossa materiaalitietokantaa ei enää ole. Näin ohjelman käyttäjät pyritään pakottamaan ottamaan vastuu käyttämistään materiaaliominaisuuksista. Samalla materiaaliominaisuuksien lähde tulee dokumentoida kuten kaikki muutkin simuloinnin lähtötiedot. Tämä tarve tulee korostumaan erityisesti uuden pyrolyysimallin myötä. Entistä monimutkaisempien reaktioiden käyttö edellyttää myös entistä suurempaa joukkoa materiaali-kohtaisia malli-

parametreja. Yhtä reaktiota kohden tarvitaan käytännössä kolmesta viiteen parametria: reakti nopeuden parametrit A ja E_A , reaktiolämpö (höyrystymislämpö) ΔH sekä reaktiotuotteiden suhteet v_s , v_f ja v_w . Lisäksi tarvitaan jokaiselle ainekomponentille termiset ominaisuudet ja mahdollinen absorptiokerroin.

Näiden materiaaliominaisuuksien ja malliparametrien määrittämiseen ei ole olemassa ajan tasalla olevaa ohjetta. Edellinen palomallien syötteiden määrittämistä koskeva ohje, ASTM E1591-07 koski lähinnä vyöhykemallien syötteitä, eikä riitä kattamaan nykyisten simulointimallien huomattavasti laajempaa syötejoukkoa. Yhdysvalloissa ollaankin juuri aloittamassa hanketta, jossa aiheesta kirjoitetaan uusi SFPE Engineering Guide.

YHTEENVETO

Fire Dynamics Simulator (FDS) –ohjelman uuden version tärkeimmät fysikaalisten mallien parannukset ovat kaasufaasin palamismallin päivitys, joka mahdollistaa happirajoitteisten palojen entistä tarkemman mallintamisen, ja uusi kiinteän aineen lämmönsiirtomalli, jonka avulla voidaan entistä realistisemmin simuloida kerroksellisia ja monista materiaaleista koostuvia rakenteita. Uusien pyrolyysimallien hyödyntäminen vaatii kuitenkin myös entistä suuremman joukon parametreja, joiden määrittämiseksi simulointien tekijät joutuvat ponnistelemaan. Erityistä huomiota FDS-ohjelman päivityksen yhteydessä on kiinnitetty ohjelman kelpoisuuden osoittamiseen luomalla erityinen verifiointi- ja validointitapausten tietokanta ja dokumentaatio.

LÄHDELUETTELO

1. Lautenberger, C.; Rein, G.; Fernandez-Pello, C. Application of a Genetic Algorithm to Estimate Material Properties for Fire Modeling From Bench-Scale Fire Test Data. *Fire Safety Journal*, Vol. 41, No. 3, 204-214, 2006.
2. Rein, G.; Lautenberger, C.; Fernandez-Pello, A. C.; Torero, J. L.; Urban, D. L. Application of Genetic Algorithms and Thermogravimetry to Determine the Kinetics of Polyurethane Foam in Smoldering Combustion. *Combustion and Flame*, Vol. 146, No. 1/2, 95-108, 2006.