

**Modellierung des Abbrandverhaltens von Ein- und Mehrkomponenten-
brennstoffen unter Verbrennungsbedingungen in Poolfeuern**

Von der Fakultät für Georessourcen und Materialtechnik
der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen

zur Erlangung des akademischen Grades eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften

genehmigte Dissertation

vorgelegt von **Dipl.-Ing.**

Primpuna Habib Saptogino

aus Jakarta

Berichter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Herbert Pfeifer
Univ.-Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Krumm

Tag der mündlichen Prüfung: 24. Januar 2020

Diese Dissertation ist auf den Internetseiten der Universitätsbibliothek online verfügbar

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als Projektingenieur am Oel-Waerme-Institut (OWI), An-Institut der RWTH-Aachen. Während der Anfertigung meiner Arbeit haben mich zahlreiche Menschen begleitet und unterstützt, denen ich von Herzen danken möchte. Diese Menschen haben in hohem Maße zum Gelingen meiner Arbeit beigetragen.

Ich bedanke mich bei Prof. Dr.-Ing. Herbert Pfeifer für die zahlreichen Hinweise und die Begutachtung meiner Arbeit. Ebenso möchte ich Prof. Dr.-Ing. Wolfgang Krumm für die Übernahme des Koreferats danken.

Besonders Danken möchte ich Herrn Dr. Ing. Roy Hermanns für die wissenschaftliche Unterstützung und seinen Anmerkungen, Anregungen und Kommentare zu dieser Arbeit. Bei allen Arbeitskollegen am OWI bedanke ich mich für die tolle Zusammenarbeit und das hervorragende Arbeitsklima. Ich danke auch Herrn Darwin Jahja für die Beiträge im Rahmen seiner Abschlussarbeit.

Mein Dank gilt auch Frau Marga Riebe für das sorgfältige Korrekturlesen des Manuskriptes.

Meine tief empfundene Dankbarkeit gilt meinem leider vor kurzem verstorbenen Großonkel Prof. Dr.-Ing. B.J. Habibie, der mich für ein Studium des Maschinenbaus inspiriert und in allen Belangen stets unterstützt hat.

Mein besonderer Dank gilt meinen Eltern Dipl.-Pharm. Saraswati Chazanah und Dr. med. Adji Saptogino, die meine wissenschaftliche Neigung von Anfang an gefördert haben und auf deren Unterstützung ich immer aufbauen konnte.

Ganz besonders möchte ich meiner Frau Shirley und meiner Tochter Sharaina für die liebevolle Unterstützung, die unendliche Geduld und das mir entgegengebrachte Vertrauen danken. Sie haben mir immer viel Kraft und Rückhalt zur Fertigstellung dieser Arbeit gegeben. Ihnen widme ich diese Arbeit.

Primpuna Habib Saptogino
Geilenkirchen, September 2019

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	1
1.2	Zielsetzung und Gliederung der Arbeit	2
2	Grundlagen und Stand der Technik	5
2.1	Experimentelle Untersuchungen von Poolfeuern	6
2.2	Methoden zur Berechnung von Massenabbrandraten	7
2.3	Flüssigkeitsphase	9
2.4	Poolfeuer mit Mehrkomponentenbrennstoffen	10
3	Modellierung	11
3.1	Brennstoffoberfläche	11
3.1.1	Strahlung	12
3.1.2	Konvektion	13
3.1.3	Massenverdunstungsrate	14
3.2	Flüssigkeits- und Gasphase	15
3.3	Implementation und Diskretisierungsmethoden	16
3.3.1	Temperatur an der Brennstoffoberfläche	18
3.3.2	Absenkung der Brennstoffoberfläche	19
3.3.3	Übersicht des Verdunstungsmodells	20
3.4	Mehrkomponentenbrennstoffe	21
3.4.1	Zweikomponentensysteme	23
3.4.2	Quasi-discrete Model	27
4	Experimentelle Untersuchungen	31
4.1	Aufbau des Versuchstands	31
4.2	Versuchsvarianten	34
5	Experimentelle Ergebnisse	37
5.1	n-Heptan	37
5.2	Ethanol	41
5.3	Mischung Ethanol und n-Heptan	43
5.4	Heizöl	50
5.5	Geometrie- und Materialvarianten des Tiegels	51

6	Berechnete Ergebnisse	55
6.1	Ergebnisse Einzelkomponenten	55
6.1.1	Temperatur	58
6.1.2	Energiebetrachtung	61
6.1.3	Netzsensitivität	63
6.1.4	Variation der Anfangstemperatur	65
6.1.5	Variation der Geometrieabmessungen	66
6.1.6	Variation des Massentransferkoeffizienten und der Lewis-Zahl	68
6.1.7	Einfluss der Berücksichtigung des Stefan-Stroms	71
6.1.8	Einfluss des Zündungsvorgangs	72
6.1.9	Fazit	74
6.2	Ergebnisse Simulation Zweikomponentengemisch	77
6.2.1	Mischung 1	77
6.2.2	Mischung 2	78
6.2.3	Mischung 3	80
6.2.4	Mischung 4	82
6.2.5	Fazit	84
6.3	Simulation der Multikomponenten	87
6.3.1	TGA-Validierung	87
6.3.2	Simulationsergebnisse eines Heizöl-Poolfeuers	91
6.3.3	Fazit	94
7	Koppelung mit CFD	97
7.1	FireFOAM	97
7.2	Koppelung FireFOAM mit Matlab	99
7.3	Simulationseinstellungen	101
7.3.1	Geometrie und Gitter	101
7.3.2	Randbedingungen	102
7.3.3	Solver	102
7.3.4	Stoffwerte	103
7.3.5	Chemische Reaktion	104
7.3.6	Strahlung	104
7.3.7	Energieeintrag	105
7.4	Ergebnisse	106
7.5	Rechnung mit Zündungsvorgang	110
8	Zusammenfassung	111

9 Summary	115
Literaturverzeichnis	119
A Anhang	125
A.1 Gleichungen zur Berechnung von Stoffeigenschaften des Quasi-dicrete Modells für Mehrkomponenten	125
A.2 Einstellungen PIMPLE-Algorithmus	128
A.3 Thermodynamische Stoffwerte für n-Heptan	129
A.3.1 cp-Koeffizienten	129
A.3.2 Sutherland-Koeffizienten	129
A.4 Datenformat Koppelung FireFoam - Matlab	129

Formelverzeichnis

Formelzeichen

Zeichen	Bezeichnung	Einheit
a	Mittlere Plancksche Absorptionskoeffizient	$1/(\text{m atm})$
c_p	Wärmekapazität	$\text{J}/(\text{kg K})$
c_{pa}	Wärmekapazität von Luft	$\text{J}/(\text{kg K})$
f_m	Verteilungsfunktion	—
g	Schwerkraft	m/s^2
g^E	Mischungs-Gibbs-Energie	J
h	Enthalpie	J/kg
h_{fg}	Verdunstungsenthalpie	J/kg
h_i	Tiegelhöhe innen	m
h_m	Massenübergangskoeffizient	m/s
h_s	Sensible Enthalpie	J/kg
h_t	Wärmeübergangskoeffizient	$\text{W}/(\text{m}^2 \text{K})$
l	Anstromlänge	m
m	Masse	kg
$\dot{m}''$	Massenabbrandrate	$\text{kg}/(\text{m}^2 \text{s})$
n	Anzahl von Kohlenstoffatomen	—
$\bar{n}_j$	Anzahl von Kohlenstoffatomen für Quasi-Komponente	—
p	Druck	Pa
p_{sat}	Dampfdruck	Pa
p_u	Umgebungsdruck	Pa
p_{vap}	Partialdruck	Pa
$\dot{q}''$	Spezifischer Energiefluss	W/m^2
r	Stöchiometrisches Massenverhältnis von Sauerstoff zu Brennstoff	—
t	Zeit	s
t_w	Tiegelwanddicke	m
u	Geschwindigkeit	m/s
x	Stoffmengenanteil	—
x_l	Stoffmengenanteil in Flüssigkeit	—
x_z	Position	m
y_b	Blockungsfaktor	—

y_i	Massenanteil	—
z	Abstand, Ortskoordinate oder Position	m
A	Fläche	m ²
A_s	Sutherland-Koeffizient	kg/(m K ^{1/2} s)
D	Durchmesser	m
D_{AB}	Diffusionskoeffizient im Film	m ² /s
D_i	Innendurchmesser Tiegel	m
D_m	Molekulare Diffusivität	m ² /s
Gr	Grashof-Zahl	—
H_c	Verbrennungswärme	J/kg
H_u	Heizwert	J/kg
I	Intensität	W/sr
$I_{\lambda,0}$	Intensität vor Durchdringung in Medium	W/sr
I_b	Strahlungsintensität schwarzer Körper	W/sr
$I_{\lambda,L}$	Intensität in Tiefe L	W/sr
I_v	Verteilungsvariable	—
L	Tiefe	m
Le	Lewis-Zahl	—
L_j	Verdampfungsenthalpie	J/kg
M	Molekulare Masse	kg/mol
N_f	Anzahl von Quasi-Komponenten	—
Nu	Nusselt-Zahl	—
Pr	Prandtl-Zahl	—
$\dot{Q}$	Energiefluss	W
R	Universelle Gaskonstante	J/(mol K)
Ra	Rayleigh-Zahl	—
T	Temperatur	K
T_{cr}	Kritische Temperatur	K
T_f	Flammentemperatur	K
T_g	Gastemperatur	K
T_m	Filmtemperatur	K
T_s	Sutherland-Temperatur	K
$T_{surface}$	Temperatur der Brennstoffoberfläche	K
T_u	Umgebungstemperatur	K
V	Volumen	m ³
X	Stoffmengenanteil	—
Y	Massenbruch	—

Y_k	Massenbruch Spezies	—
Y_{ox}	Massenbruch von Sauerstoff	—

Griechische Formelzeichen

Zeichen	Bezeichnung	Einheit
α	Formparameter Verteilungsfunktion	—
α_l	Laminare Diffusivität	m^2/s
α_{sgs}	Turbulente Diffusivität	m^2/s
α_t	Thermische Diffusivität	m^2/s
β	Formparameter Verteilungsfunktion	g/mol
β_t	Wärmeausdehnungskoeffizienten	$1/\text{K}$
γ	Formparameter Verteilungsfunktion	g/mol
γ_a	Aktivitätskoeffizient	—
δ	Filmdicke	m
δz	Bestimmte Länge	m
ϵ_c	Gesamtemissionsgrad von CO_2	—
ϵ_{soot}	Spektral gemittelter Emissionsgrad von Ruß	—
ϵ_w	Gesamtemissionsgrad von H_2O	—
κ_λ	Absorptionskoeffizient	$1/\text{m}$
λ	Wärmeleitfähigkeit	$\text{W}/(\text{m K})$
μ	Dynamische Viskosität	Pa s
μ_e	Erwartungswert	—
ν	Spezifisches Volumen	m^3/mol
ν_k	Kinematische Viskosität	m^2/s
ν_{sgs}	Feinstruktur Viskosität	m^2/s
ν_t	Turbulente kinematische Viskosität	m^2/s
ρ	Dichte	kg/m^3
ρ_r	Reflexionsgrad	—
σ	Boltzmann Konstante	$\text{W}/(\text{m}^2\text{K})$
σ_v	Varianz	—
τ_t	Zeitskala	s
τ_λ	Transmissivität	—
χ_r	Wärmeanteil von Strahlung der Flamme	—
$\dot{\omega}_{Y_k}'''$	Brennstoffreaktionsrate	$\text{kg}/(\text{m}^3 \text{s})$

$\dot{\omega}_{h_s}'''$	Wärmefreisetzung	kg/(m ³ s)
Γ	Gammaverteilungsfunktion	—
Λ	Konstante	—

Indizes

<i>a</i>	Atmosphäre / Umgebungsluft
<i>cond</i>	Wärmeleitung
<i>conv</i>	Konvektion
<i>f</i>	Brennstoff
<i>g</i>	Gasförmig
<i>i</i>	Spezies / Gitterpunkt
<i>L</i>	Flüssigkeit
<i>rad</i>	Strahlung
<i>ref</i>	Referenz
<i>rerad</i>	Rückstrahlung
<i>sum</i>	Summe
<i>u</i>	Umgebung
<i>vap</i>	Verdunstung / Dampf
<i>zünd</i>	Zündung

Abkürzungen

CFD	Computational Fluid Dynamics
DLV	Diffusion-limited vaporization
FDS	Fire Dynamics Simulator
HOSL	Hertfordshire Oil Storage Terminal
HRR	Heat Release Rate
LES	Large Eddy Simulation
NASA	National Aeronautics and Space Administration
OpenFOAM	Open Source Field Operation and Manipulation
PIMPLE	Semi-Implicit Methods for Pressure-Linked Equations
PISO	Pressure Implicit with Splitting of Operators
QDM	Quasi-discrete Model
RTE	Radiative Transfer Equation
TGA	Thermogravimetrische Analyse

1 Einleitung

1.1 Motivation

In verfahrenstechnischen Anlagen sind unfallbedingte Feuer häufig Lachen-, Pool- oder Tankfeuer. Durch die unbeabsichtigte Freisetzung und Zündung von brennbaren Flüssigkeiten können hierbei größere Schadenfeuer entstehen.

Ein derartiger Unfall ereignetet sich im Morgengrauen des 11. Dezember 2005 im Öl-Tanklager Hertfordshire Oil Storage Terminal (HOSL) England [Comah 11], Abb. 1.1. Durch Überfüllung eines Tanks floß flüssiger Brennstoff über den Tankrand und bildete eine brennbare Poolfläche. Diese entzündete sich und es entstand ein großer Brand, welcher erst nach fünf Tagen gelöscht werden konnte.



Abbildung 1.1: Großfeuer im Tanklager Buncefield [Board 08]

Ein Ereignisbaum im Falle der Freisetzung von brennbarem Material ist in Abb. 1.2 dargestellt. Ein Poolfeuer entsteht bei einer verzögerten Zündung einer Ansammlung von Brennstoff (rechten Seite im Ereignisbaum).

Die Quantifizierung eines Poolfeuers erfolgt durch die Wärmefreisetzungsrate (Heat Release Rate oder HRR), welche eine Antwort liefert auf die Frage: „Wie groß ist das Feuer?“ [Hurley 15]. Die Wärmefreisetzungsrate lässt sich dabei als Produkt aus der Massenabbrandrate und der Verbrennungsenergie des Brennstoffs ermitteln. Die Massenabbrandrate

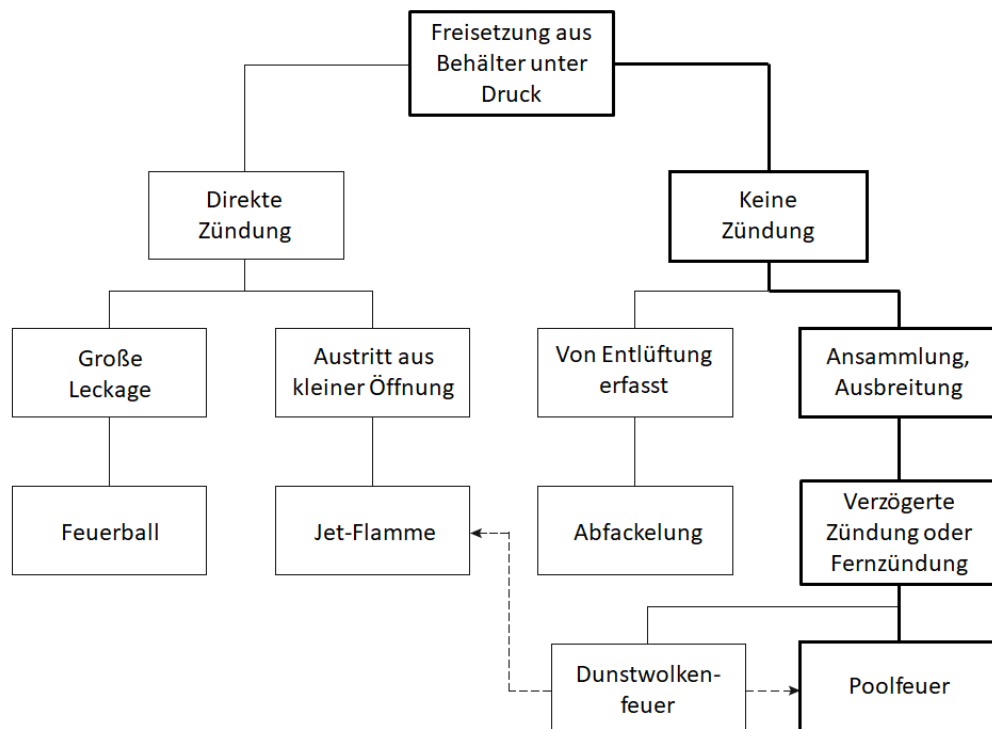


Abbildung 1.2: Ereignisbaum für die Freisetzung von brennbarem Material. Der rechte Verlauf beschreibt die Entstehung eines Poolfeuers. Angepasst aus [Hurley 15]

liefert demzufolge eine wichtige Größe zur Quantifizierung und Beschreibung von Poolfeuern.

In vielen Arbeiten zur Poolfeuer-Modellierung wird die Flüssigkeitsphase ignoriert und als Kontrollvolumen nur die reagierende Gasphase mit einer vorgegebenen Massenabbrandrate des Brennstoffs als Randbedingung angenommen. In realen Poolfeuern wird der Massenfluss dadurch bestimmt, dass der flüssige Brennstoff zunächst verdunstet bevor dieser verbrennt und dass die notwendige Energie für die Verdunstung von der Flamme geliefert wird. Die Massenabbrandrate ist demzufolge ein Teil der berechneten Lösung und ist gekoppelt mit dem Wärmetransport von der Flamme zur Brennstoffoberfläche.

1.2 Zielsetzung und Gliederung der Arbeit

Das Ziel dieser Arbeit ist die Erstellung eines Modells, welches realistische Massenabbrandraten, basierend auf analytisch-physikalischen Ansätzen, generiert. Dabei wird sowohl die zeitliche Aufwärmung des flüssigen Brennstoffs als auch die Wechselwirkung der Energieflüsse

zwischen der Gas- und Flüssigkeitsphase an der Brennstoffoberfläche berücksichtigt. Insbesondere der transiente Verlauf der Massenabbrandrate sowie die Dauer bis zum Verbrauch des Brennstoffs sollen durch das neue Modell abgeschätzt werden können. Zur Modellierung von realen Brennstoffen, welche aus mehreren Komponenten bestehen, wie zum Beispiel Heizöl, wird das Modell auf Mehrkomponentenbrennstoffe erweitert. Azeotrope Eigenschaften von Mehrkomponenten werden dabei berücksichtigt, welche bei bestimmten Mischungen die Verdunstungseigenschaften stark beeinflussen.

Das erstellte Modell kann zudem in Kombination mit CFD-Berechnungen für die Simulation von Poolfeuern verwendet werden. Das Verdunstungsmodell liefert dabei die Massenabbrandraten des Brennstoffs als Einlass-Randbedingung für die CFD-Simulation. Die CFD-Simulation der Flamme in der Gasphase liefert wiederum die Energieflüsse, welche an der Brennstoffoberfläche vorliegen, an das Verdunstungsmodell.

Die Arbeit ist in acht Kapitel aufgeteilt. Die Motivation und der Umfang der Arbeit werden im ersten Kapitel vorgestellt. Im Kapitel 2 werden die Eigenschaften von Poolfeuern sowie der Stand der Technik zur Modellierung der Verdunstung von flüssigen Brennstoffen in Poolfeuern beschrieben.

Das Kapitel 3 beschreibt das Modell, welches zur Modellierung des Verdunstungsverhaltens von flüssigen Brennstoffen in Poolfeuern verwendet wird. Beschrieben werden weiterhin die Ansätze zur Modellierung von azeotropen Brennstoffmischungen und Mehrkomponentenbrennstoffen.

Zur Validierung der Modells werden experimentelle Untersuchungen durchgeführt. Der Aufbau des experimentellen Versuchstands und die Untersuchungsmethoden sind in Kapitel 4 beschrieben. Die Variation der Versuche beinhaltet verschiedene Maße der Tiegel, die Materialien der Tiegel und unterschiedliche Brennstoffe.

Das Kapitel 5 beinhaltet die experimentellen Ergebnisse der Messungen von Massenabbrandraten und Temperaturverläufen während des Verbrennungsvorgangs. Messungen werden dabei für Poolfeuer mit den Brennstoffen n-Heptan, Ethanol sowie Zweistoffmischungen aus n-Heptan und Ethanol bzw. Heizöl durchgeführt.

Die Simulationsergebnisse werden in Kapitel 6 dargestellt. Im Kapitel 6.1 werden die berechneten Ergebnisse für Einzelkomponentenbrennstoffe behandelt. Variationsrechnungen werden durchgeführt, um die Einflüsse der Modellierungsparameter zu untersuchen. Im Kapitel 6.2 erfolgt die Darstellung der Simulationsergebnisse für azeotrope Zweikomponentengemische. Die Ergebnisse für Mehrkomponentenbrennstoffe sind in Kapitel 6.3 dargestellt. Dabei wird zunächst der verwendete Ansatz zur Modellierung der Brennstoffeigen-

schaften durch den Vergleich mit thermogravimetrischen Analysen (TGA) validiert und für die Brennstoffbeschreibung verwendet.

Im Kapitel 7 wird die Koppelung des Verdunstungsmodells mit dem Strömungslöser beschrieben. Das Kapitel 7.1 beschreibt die Grundlagen des Solvers FireFOAM. Die Simulationseinstellungen, bestehend aus Gitter, Randbedingungen und Solver, werden in Kapitel 7.3 dargestellt. Die Methodik zur Koppelung von FireFOAM mit Matlab sowie die Simulationsergebnisse werden in den Abschnitten 7.2 bzw. 7.4 beschrieben. Die Ergebnisse aus der gekoppelten Simulation werden dabei mit den vorherigen Simulationen und dem experimentellen Ergebnissen verglichen. In Kapitel 7.5 wird der Einfluss der Zündenergie auf das Ergebnis der gekoppelten Simulation untersucht.

Das Kapitel 9 umfasst die Arbeitsinhalte und gibt einen Ausblick für weiterführende Arbeiten.

2 Grundlagen und Stand der Technik

Für die Freisetzung von flüssigem brennbaren Material wird der Begriff „Pool“ als abgegrenzte Menge an Flüssigkeit mit einer Tiefe von mehr als 5 mm definiert [Hurley 15]. Für geringere Tiefen wird diese als „Lache“ kategorisiert. Ein Pool entsteht wenn flüssiges Brennmaterial freigesetzt wird und sich an einer niedrigeren Stelle oder in einem begrenzten Raum ansammelt.

Poolfeuer sind Diffusionsflammen mit horizontal ausgebreitetem flüssigem Brennstoff [Hamins 96]. Die Außenabgrenzung des Pools kann eine beliebige geometrische Form annehmen, wird aber in den meisten Studien einfachheitshalber als Kreis angenommen. In einem Poolfeuer verdunstet der flüssiger Brennstoff ausschließlich von der Brennstoffoberfläche in die Gasphase. Dabei haben Phänomene in der Flüssigkeitsphase, wie zum Beispiel Temperaturverteilung oder Blasenbildung, einen Einfluss auf das Verdunstungsverhalten des Brennstoffs.

Die Massenabbrandrate beschreibt die quantitative Masse des Brennstoffs, die im Verbrennungsvorgang über einen bestimmten Zeitraum durch die chemische Reaktion umgesetzt wird. Die Massenabbrandrate entspricht bei der Vernachlässigung der Masse von inerten Gasen und nicht verbranntem Ruß dem Massenverlust der flüssigen Phase während des Verbrennungsvorgangs [Quinti. 06]. Die Massenabbrandrate stellt dabei eine wichtige Größe zur Quantifizierung von Poolfeuern dar, deren Feststellung und Berechnung der Gegenstand von wissenschaftlichen Untersuchungen im Bereich der Feuersicherheitstechnik ist.

Im folgenden werden in Bezug auf die Untersuchung von Massenabbrandraten die relevanten wissenschaftlichen Arbeiten dargestellt. Für die allgemeine Beschreibung und die Eigenschaften von Poolfeuern wird auf die Arbeit von Drysdale [Drysdale. 11] hingewiesen.

In der Tabelle 2.1 sind die Brennstoffe aufgelistet, welche häufig für die Untersuchungen von Poolfeuern verwendet werden. Abhängig von deren Eigenschaften dienen diese Brennstoffe als Modellbrennstoffe für bestimmte Untersuchungen. In der vorliegenden Arbeit werden diese Brennstoffe ebenfalls für experimentelle und numerische Untersuchungen verwendet.

Tabelle 2.1: Verwendete Brennstoffe für die Untersuchungen von Poolfeuern

Brennstoff	Anwendung für Untersuchungen
n-Heptan	Modellbrennstoff für Diesel und Heizöl wegen ähnlicher Cetan-Zahl (beschreibt die Zündwilligkeit des Kraftstoffs)
Ethanol	Modellbrennstoff für niedrigsiedende Kohlenwasserstoffe in Mehrkomponentenbrennstoffen
Mischung n-Heptan und Ethanol	Modellbrennstoff für Mehrkomponentenbrennstoffe
Heizöl	Repräsentativ für reale Mehrkomponentenbrennstoffe

2.1 Experimentelle Untersuchungen von Poolfeuern

Experimentelle Studien haben gezeigt, dass die Massenabbrandrate in einem Poolfeuer während des Verbrennungsvorgangs nicht konstant ist. Messungen der Massenabbrandrate und Temperaturen innerhalb der Flüssigphase von Poolfeuern mit 50,5 mm Tiegeldurchmesser und 11 mm Höhe sowie verschiedenen Brennstoffen wurden von Hayasaka [Hayasa. 97] durchgeführt. Als Brennstoffe wurden n-Heptan, Methanol und Kerosin verwendet. Die Massenabbrandraten stiegen zügig nach der Zündung bis zu einem konstanten Wert in der sogenannten „Erwärmungsphase“. Die Massenabbrandraten stiegen nach dem Ende der Erwärmungsphase auf einen maximalen konstanten Wert in der Siedephase. In dieser Phase zeigten die Temperaturmessungen, dass die Siedetemperatur in der Flüssigkeitsphase erreicht wurde und konstant blieb. Die maximale Massenabbrandrate in der Siedephase wurde so begründet, dass zu diesem Zeitpunkt die verfügbare Energie vollständig für die Verdunstung des flüssigen Brennstoffs verwendet wird und keine Energie für die Erwärmung des Brennstoffs mehr aufgewendet wird. Für die verschiedenen Brennstoffe wurden unterschiedliche Massenabbrandraten gemessen. Als Grund dafür wurden unterschiedliche Verdunstungsenergien der Brennstoffe identifiziert.

n-Heptan Poolfeuer von geringer Höhe und mit unterschiedlichen Durchmessern des Brennstofftiegels wurden von Kang et al. [Kang 10] experimentell untersucht. Die konstanten Massenabbrandraten in der Erwärmungsphase sowie in der Siedephase zeigten einen ähnlichen Verlauf wie bei Hayasaka. Wegen der geringen Tiefe wird das Verdunstungsverhalten des Brennstoffs wesentlich von der Wärmeübertragung durch die Behälterwand beeinflusst. Als Ursache für die steigende Massenabbrandrate wurde das Auftreten von Blasensieden

während der Siedephase identifiziert. Dies tritt auf wenn die Temperatur der Tiegelwand die Siedetemperatur des Brennstoffs überschreitet und führt zu einer Beschleunigung des Siedeprozesses.

Der Einfluss der Anfangstemperatur des Brennstoffs auf das Verbrennungsverhalten von Poolfeuern wurde von Chen et al. [Chen 11] untersucht. Die Messungen der Massenabbrandraten ohne Vorwärmung ergaben dabei ähnliche Verläufe wie aus den Versuchen von Hayasaka [Hayasa. 97]. Die Dauer der Erwärmungsphase verkürzt sich bei höheren Anfangstemperaturen und verschwindet für Anfangstemperaturen am Siedepunkt. Die Begründung des Autors hierfür ist, dass, wenn die Flüssigkeitsphase am Anfang bereits eine höhere Temperatur hat, weniger Energie zur Erwärmung der Brennstoffs und Erreichen der Siedetemperatur benötigt wird. Die maximale Massenabbrandrate wird bei der Siedetemperatur erreicht.

Messungen von flüssigen organischen Peroxid-Poolfeuern wurden von Chun und Mishra durchgeführt [Chun 07, Mishra 10]. Poolfeuer mit Peroxiden wiesen eine wesentlich größere Massenabbrandrate im Vergleich zu flüssigen Kohlenwasserstoffen auf. Als Grund wurden die unterschiedlichen Verbrennungs- und Verdampfungsenthalpien angeführt. Die durch Experimente ermittelten Massenabbrandraten wurden für die nachfolgenden CFD-Simulationen zur Untersuchung von Bestrahlungsstärken verwendet, welche für die Ermittlung von Schutz- und Sicherheitsabständen notwendig sind. Abweichungen zu experimentellen Ergebnissen wurden durch die nicht optimale Modellierung der Rußbildung in der CFD-Simulation begründet.

2.2 Methoden zur Berechnung von Massenabbrandraten

Erste experimentelle Untersuchungen zur Ermittlung von Massenabbrandraten von Poolfeuern wurden von Blinov und Khudiakov durchgeführt [Hottel 59], deren Ergebnisse in Abb. 2.1 dargestellt sind. Die Abbrandgeschwindigkeit entspricht dabei der Massenabbrandrate dividiert durch die Dichte. Festzustellen ist, dass ab einem Durchmesser von 1 m sich die Abbrandgeschwindigkeit, unabhängig vom Brennstoff, einem konstanten Wert annähert. Für Poolfeuer dieser Größe ist die Strahlung der Flamme der dominierende Energieeintrag zum flüssigen Brennstoff. Für kleinere Poolfeuer leisten die Energieeinträge in Form von konvektiver Wärmeübertragung an der Flüssigkeitsoberfläche und Wärmeleitung durch die Behälterwand einen größeren Beitrag [Hurley 15].

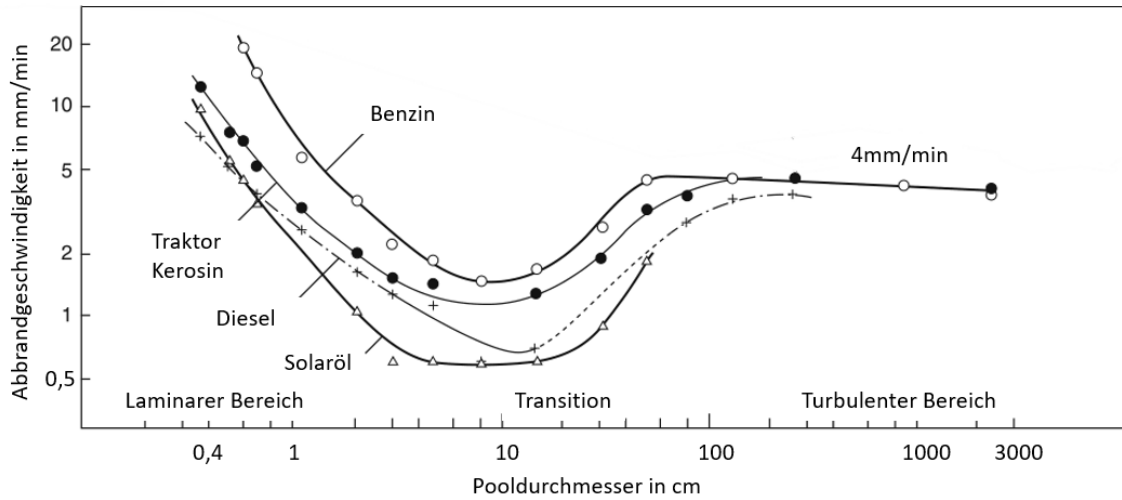


Abbildung 2.1: Abbrandgeschwindigkeiten von flüssigen Poolfeuern. Angepasst aus [Hottel 59]

Eine Methode zur Berechnung der Massenabbrandrate für größere Poolfeuer ($D > 0,2$ m) wurde von Babrauskas [Babrau. 83] vorgestellt. Die Massenabbrandrate $\dot{m}''$ im stationären Zustand wird dabei durch die folgende Gleichung berechnet:

$$\dot{m}'' = \dot{m}''_{\infty} (1 - e^{-k\beta D}) \quad (2.1)$$

mit $\dot{m}''_{\infty}$ als Massenabbrandrate für einen Pool mit unendlich großem Durchmesser, $k\beta$ als einem empirischen Faktor und D als Durchmesser des Pools. Die Werte für $\dot{m}''_{\infty}$ und $k\beta$ sind dabei für verschiedene Brennstoffe in [Babrau. 83] tabelliert. Babrauskas wies weiterhin darauf hin, dass sich die stationäre Massenabbrandrate erst nach einer gewissen Zeit einstellt, und dass ein Modell der transienten Massenabbrandrate zum Zeitpunkt der Publikation noch nicht vorhanden war.

In der Arbeit von Prasad et al. [Prasad 99] wurde ein mathematisches Modell entwickelt, welches die Massenabbrandrate zweidimensionaler und axialsymmetrischer Pools mit flüssigem Methanol als Brennstoff abbildet. Die Energiegleichung innerhalb der Flüssigkeit wird dabei gelöst und mit der Gasphase durch geeignete Bedingungen gekoppelt. Das Modell wird eingesetzt, um die Massenabbrandraten von Poolfeuern kleinerer Größen (Durchmesser von 1 cm) zu berechnen.

Ein Modell welches die transienten Massenabbrandraten von kleinen bis mittelgroßen Poolfeuern berechnet wurde von Novozhilov und Koseki [Novozh. 04] entwickelt. Dabei wurde die Strömung der Gasphase des Poolfeuers, welche durch Favre-gemittelte Navier-Stokes

Gleichungen beschrieben ist, mit der Flüssigkeitsphase durch die Energieeinträge aus Konvektion und Strahlung an der Brennstoffoberfläche gekoppelt. Eine eindimensionale Energiegleichung wurde für die Beschreibung der Flüssigkeitsphase verwendet. Die durchschnittliche Abweichung im Vergleich mit experimentellen Ergebnissen betrug 17 %, mit den höchsten Abweichungen für Poolfeuer mit stark rußenden Flammen.

Das sogenannte „responsive boundary model“ wurde von Eldredge et al. [Eldred. 11] entwickelt, um realistische Massenabbrandraten für die Randbedingungen numerischer Strömungssimulationen von Poolfeuern zu erhalten. Zur Koppelung der Gas- und Flüssigkeitsphase wird die Energiebilanz an der Brennstoffoberfläche gelöst. Die Massenabbrandrate berechnet sich dabei aus der Filmtheorie mit dem Stoffmengenanteil des Brennstoffs in der Gasphase. Die Flüssigkeitsphase wurde durch eine eindimensionale Energiegleichung beschrieben. Im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen wurden Abweichungen von 15 % festgestellt, welche im Bereich der Messgenauigkeiten liegen.

Sikanen und Hostikka [Sikanen 16] entwickelten in ihrer Arbeit ein Modell zur Vorausberechnung der Massenabbrandraten und der Wärmefreisetzung von Poolfeuern unter Berücksichtigung von Absorption der Strahlung in der Tiefe des Pools und konvektivem Wärmeübergang durch die Strömung im flüssigen Pool. Das Modell löst die eindimensionale Wärmeleitungsgleichung der Flüssigphase und dient gleichzeitig als Randbedingung für die Gasphase, welche mit dem Solver Fire Dynamics Simulator (FDS) gelöst wird.

2.3 Flüssigkeitsphase

Hayasaka [Hayasa. 97] teilt die Flüssigphase in eine Verdunstungsschicht, eine Erwärmungsschicht und eine untere Schicht auf. Die Verdunstungsschicht beschreibt eine sehr dünne Schicht an der Oberseite der Brennstoffphase, wo die Koppelung der Energieflüsse mit der Flamme erfolgt. Die Temperaturen befinden sich dabei in der Nähe des Siedepunkts. Unterhalb der Verdunstungsschicht befindet sich die Erwärmungsschicht, in der die Temperatur exponentiell abnimmt. In der unteren Schicht bleibt die Temperatur in vertikaler Richtung nahezu konstant. Der Wärmeaustausch der unteren Schicht mit der Verdunstungs- und Erwärmungsschicht erfolgt dabei ausschließlich durch Konvektion.

Transportphänomene innerhalb der Flüssigphase eines kreisförmigen Methanol-Poolfeuers wurden von Vali et al. [Vali 14] experimentell untersucht. Dabei wurden Temperatur- und

Geschwindigkeitsmessungen unter konstant gehaltender Bodentemperatur des Brennstoffbehälters durchgeführt. Der Pool hatte dabei eine Tiefe von 12 mm. Die Temperaturmessungen ergaben, dass eine sogenannte Zweistrukturschicht existiert, in welcher die obere Schicht eine nahe am Siedepunkt konstante Temperatur besitzt und die untere Schicht Temperaturgradienten aufweist. Die Messung der Geschwindigkeiten innerhalb der flüssigen Phase zeigten, dass in der oberen Schicht zwei gegenläufig rotierende Wirbel existieren, welche eine gute Durchmischung der oberen Schicht ermöglichen und Wärme von der Behälterwand zu der Poolmitte übertragen. Die untere Schicht wies vergleichsweise niedrige Geschwindigkeiten auf.

2.4 Poolfeuer mit Mehrkomponentenbrennstoffen

Poolfeuer mit Mischungen von n-Heptan und Ethanol, welche ein azeotropisches Gemisch bilden, wurden von Ding et al. [Ding 14] experimentell untersucht. Die Ergebnisse zeigten, dass nach der Zündung die Verbrennung der Mischung zuerst nach dem Verhältnis der Azeotropen verläuft. Nachdem eine Komponente aufgebraucht ist, verbrennt die Mischung mit der Massenabbrandrate der übrig gebliebenen Komponenten weiter. Der Massenabbrandratenverlauf bei azeotropen Mischungen wurde in vier Phasen unterteilt: Anfangsphase, azeotropische Verbrennung, Einkomponentenverbrennung und Abklingphase.

Das Verbrennungsverhalten von Rohöl als Mehrkomponentenbrennstoff zur kontrollierten Verbrennung von Ölverschmutzungen in der Arktis wurde von van Gelderen et al. [VanGel. 17] untersucht. Die Verdunstungsreihenfolge der Komponenten wurde anhand von Messungen von Oberflächentemperatur, Flammenhöhe und Massenabbrandrate festgestellt. Experimente mit Alkane-Mischungen zeigten, dass zunächst leichtere Komponenten verdunsteten und die schweren Komponenten gegen Ende des Verbrennungsvorgangs dominieren. Rohöl zeigte weiterhin sinkende Massenabbrandraten bei steigender Oberflächentemperatur während des Verbrennungsvorgangs, was auf eine flüchtigkeitsgesteuerte Verdunstungsreihenfolge hindeutet.

3 Modellierung

Die Energieübertragung von der Flamme an die Flüssigkeit sowie der Verdunstungsvorgang der Flüssigphase in den Gaszustand findet über die angrenzende Brennstoffoberfläche statt. Für die Modellierung der angrenzenden Gasphase über der Brennstoffoberfläche wird das Filmmodell angewendet [Taylor 93]. Dabei wird angenommen, dass unmittelbar über der Flüssigphase eine dünne Gasschicht, ein sogenannter Film, existiert. Innerhalb dieses Films befinden sich Temperatur- und Stoffkonzentrationsgradienten, sodass ein rein molekularer Transport durch Wärmeleitung und Stoffdiffusion stattfindet. In der Gasphase, außerhalb des Films, sind die Gradienten durch Mischungsvorgänge und Turbulenzen ausgeglichen.

Die Gasphase und die chemischen Reaktionen in der Flamme werden in der Modellierung nicht explizit berechnet. Die Energieeinträge von der Flamme an der Flüssigkeitsoberfläche werden durch geeignete Ansätze berechnet.

3.1 Brennstoffoberfläche

Die in Poolfeuern hauptsächlich auftretenden Energieflüsse bestehen aus Strahlung, Konvektion, Verdunstung und Rückstrahlung. Diese sind schematisch in Abb. 3.1 dargestellt, wobei $\dot{Q}_{conv}$ und $\dot{Q}_{rad}$ die Energieeinträge von der Flamme durch Konvektion bzw. Strahlung sind, $\dot{Q}_{vap}$ die Energie, die für den Verdunstungsvorgang benötigt wird, und $\dot{Q}_{rerad}$ die Energie, die von der Oberfläche an die Umgebung abgestrahlt wird. Die genannten Energieflüsse werden über die Brennstoffoberfläche an die Flüssigkeit übertragen. An der Brennstoffoberfläche gilt die Massenerhaltungsgleichung:

$$\frac{1}{A} \frac{dm}{dt} = -\dot{m}'' \quad (3.1)$$

Darin sind $\dot{m}''$ die Massenverdunstungsrate und A die Pooloberfläche. Die Massenabnahme der Flüssigkeit erfolgt ausschließlich über den Verdunstungsvorgang an der Brennstoffoberfläche.

Die instationäre Energiebilanz an der Brennstoffoberfläche liefert [Eldred. 11]:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_L}{\rho_L c_{pL}} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} + \frac{1}{\rho_L c_{pL} \delta z} [\dot{q}_{rad}'' + \dot{q}_{conv}'' - \dot{q}_{vap}'' - \dot{q}_{rerad}''] \quad (3.2)$$

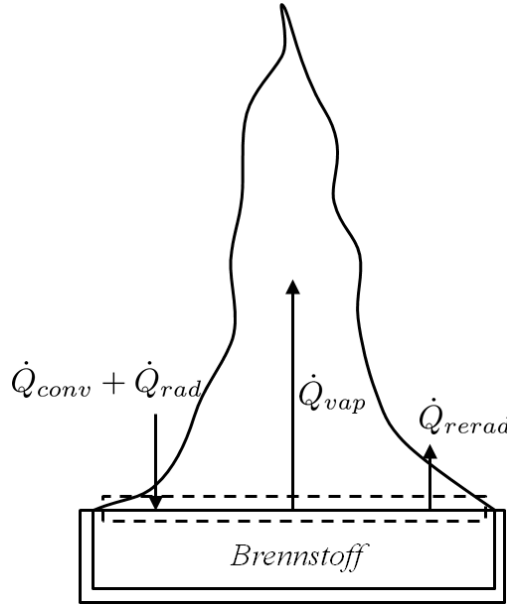


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung Energieflüsse in Poolfeuern

Es ist T die Flüssigkeitstemperatur, t die Zeit, λ_L die Wärmeleitung, ρ_L die Dichte und c_{pL} die spezifische Wärmekapazität der Flüssigkeit, z die Koordinate senkrecht zur Flüssigkeitsoberfläche, beginnend vom Tiegelboden, und δz eine bestimmte Länge. Es repräsentiert $\dot{q}''$ die Energieeinträge durch Strahlung und Konvektion an der Flüssigkeitsoberfläche und die Energieabzüge durch Verdunstung und Rückstrahlung. Auf die einzelnen Terme der Energieeinträge bzw. -abzüge wird im Folgenden detailliert eingegangen.

3.1.1 Strahlung

Der Energieeintrag durch Strahlung an die Flüssigkeitsoberfläche $\dot{q}_{rad}''$ kann, unter Annahme von isothermen Emissionen von gasförmigem CO_2 und H_2O sowie der Modellierung von Ruß als Graugas, wie folgt berechnet werden [Hamins 99]:

$$\dot{q}_{rad}'' = \sigma T_f^4 (1 - \rho_r) [1 - (1 - \epsilon_{soot})(1 - \epsilon_w)(1 - \epsilon_c)] \quad (3.3)$$

Darin sind $\sigma (= 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W/m}^2\text{K}^4)$ die Boltzmann-Konstante, T_f die Flammentemperatur, ρ_r der Reflexionsgrad der Brennstoffoberfläche, ϵ_{soot} der spektral gemittelte Emissionsgrad, ϵ_w der Gesamtemissionsgrad von H_2O und ϵ_c der Gesamtemissionsgrad von CO_2 . Der Reflexionsgrad ρ_r kann für Poolfeuer aller Brennstofftypen mit dem Wert 0,08 angenähert werden [Hamins 99] und T_f für n-Heptan ist 1010 K. Die Emissionsgrade können für n-Heptan aus Tabelle 3.1 entnommen werden und sind abhängig vom Pooldurchmesser.

Tabelle 3.1: Brennstoffparameter von n-Heptan und berechneter Energieeintrag durch Strahlung für verschiedene Pooldurchmesser. Brennstoffparameter aus [Hamins 99]. Energieeintrag durch Strahlung $\dot{q}_{rad}''$ berechnet aus Gl. 3.3.

D (m)	ϵ_{soot}	ϵ_w	ϵ_c	$\dot{q}_{rad}''$ (kW/m ²)
0,05	0,014	0,023	0,042	4,19
0,1	0,028	0,039	0,055	6,37
0,5	0,13	0,11	0,088	15,95
1	0,25	0,16	0,1	23,50

Die Rückstrahlung von der Pool-Oberfläche kann wie folgt berechnet werden [Hamins 99]:

$$\dot{q}_{rerad}'' = \sigma(T_{surface}^4 - T_u^4). \quad (3.4)$$

Darin ist $T_{surface}$ die Temperatur der Brennstoffoberfläche und T_u die Umgebungstemperatur.

3.1.2 Konvektion

Der konvektive Energieeintrag kann laut Rhodes [Rhodes 96], unter Annahme eines stagnierenden Films, wie folgt berechnet werden:

$$\dot{q}_{conv}'' = \frac{h_t}{c_{pa}} \left(\frac{y_b}{e^{y_b} - 1} \right) \left[Y_{ox,a}(1 - \chi_r) \frac{H_c}{r} - c_{pa}(T_{surface} - T_u) \right]. \quad (3.5)$$

Mit

$$y_b = \dot{m}'' \frac{c_{pa}}{h_t} \quad (3.6)$$

als Blockungsfaktor, welcher die Wärmeübertragung mit steigender Massenverdunstung vermindert. Die Massenverdunstungsrate ist mit $\dot{m}''$, die Verbrennungswärme mit H_c , der Massenbruch von Sauerstoff in der Umgebungsatmosphäre mit $Y_{ox,a}$, das stöchiometrische Massenverhältnis von Sauerstoff zu Brennstoff mit r , der Wärmeanteil der Strahlung der Flamme mit χ_r und die Wärmekapazität von Luft bei der repräsentativen Temperatur von $(T_f + T_{surface})/2$ mit c_{pa} bezeichnet.

Der Wärmeübergangskoeffizient h_t kann mit der Rayleigh-Zahl Ra für den Fall natürlicher

Konvektion an einer beheizten horizontalen Platte wie folgt bestimmt werden [Cengel 11]:

$$\begin{aligned} Nu &= 0,54 Ra^{\frac{1}{4}} & 10^4 < Ra < 10^7 \\ Nu &= 0,14 Ra^{\frac{1}{3}} & 10^7 < Ra < 10^{11} \end{aligned} \quad (3.7)$$

Mit der Nusselt-Zahl $Nu = h_t l_D / \lambda_g$. Die Anströmlänge ist für Kreisschreiben mit dem Durchmesser D als $l_D = D/4$ definiert. Die Wärmeleitfähigkeit der Luft ist mit λ_g bezeichnet. Die Rayleigh-Zahl wird definiert durch das Produkt von Grashof-Zahl Gr und Prandtl-Zahl Pr [Cengel 11]:

$$Ra = Gr Pr = \frac{g \beta_t (T_{surface} - T_u) l_D}{\nu^2} Pr \quad (3.8)$$

Mit der Erdbeschleunigung g , dem Wärmeausdehnungskoeffizienten β_t und der kinematischen Viskosität ν . Die Stoffwerte in Gleichung 3.8 sind für die Filmtemperatur $T_m = \frac{1}{2}(T_{surface} + T_u)$ zu bestimmen. Für ideale Gase gilt $\beta_t = 1/T_m$. Die Prandtl-Zahl von Luft beträgt 0,7. Mit dem ermittelten Wärmeübergangskoeffizienten h_t kann der konvektive Energieeintrag $\dot{q}_{conv}''$ nach Gl. 3.5 berechnet werden.

3.1.3 Massenverdunstungsrate

Eine wichtige zu modellierende Größe ist die Massenverdunstungsrate $\dot{m}''$, welche eine direkte Auswirkung auf die Größe des konvektiven Energieeintrags $\dot{q}_{conv}''$ und den Energieabzug durch Verdunstung $\dot{q}_{vap}''$ hat. Die Massenverdunstungsrate stellt dabei direkt die Massenabbrandrate dar, unter der Annahme, dass die gesamte Menge an verdunstetem Brennstoff vollständig verbrannt wird.

Die Massenverdunstungsrate wird nach der Filmtheorie unter Berücksichtigung der Aufdickung des Films (Stefan-Strom) wie folgt berechnet [Henley 11]:

$$\dot{m}'' = \frac{\rho D_{AB}}{\delta} \ln \left(\frac{1 - x_u}{1 - x_i} \right) \quad (3.9)$$

Darin sind D_{AB} der Diffusionskoeffizient, δ die Filmdicke, ρ die Dichte des Films und x_i und x_u der Molanteil von Brennstoff unmittelbar über der Flüssigkeitsoberfläche bzw. in der Umgebung. Es wird angenommen, dass in der Umgebung der Molanteil von Brennstoff Null ist ($x_u = 0$) und nur O_2 und N_2 vorhanden sind. Diese Gleichung sollte angewendet werden, wenn die Aufdickung des Films durch den verdunsteten Massenstrom signifikant ist, was für Poolfeuer zutrifft [Eldred. 11]. Da die Filmdicke δ unbekannt ist, wird in der

Praxis der Therm D_{AB}/δ durch den empirischen Massenübergangskoeffizienten h_m ersetzt. Gl. 3.9 wird demzufolge zu:

$$\dot{m}'' = \rho h_m \ln \left(\frac{1 - x_u}{1 - x_i} \right) \quad (3.10)$$

Dabei wird der Massenübergangskoeffizient h_m aus dem Wärmeübergangskoeffizient h_t mit der Grenzschicht-Analogie zwischen Wärme- und Massenübergang berechnet. Für das Verhältnis zwischen Wärme- und Massenübergangskoeffizient gilt [Bergman 11]:

$$\frac{h_t}{h_m} = \rho_g c_{pg} Le^{1-n} \quad (3.11)$$

Dabei wird der Exponent $n = 1/3$ und h_t nach Gleichung 3.7 berechnet. Für ideale Gase wird die Lewis-Zahl mit dem Wert 1 angenähert [Baehr 13].

Der Molanteil über der Flüssigkeitsoberfläche x_i kann nach dem Raoult'schem Gesetz aus dem Dampfdruck p_{vap} und dem Umgebungsdruck p_u wie folgt berechnet werden:

$$x_i = \frac{p_{vap}(T_{surface})}{p_u} \quad (3.12)$$

Der Dampfdruck p_{vap} kann wiederum in Abhängigkeit von der Temperatur der Flüssigkeitsoberfläche, tabelliert nach Daubert [Daubert 89], berechnet werden.

Die Energieabnahme für die Verdunstung des Brennstoffs wird wie folgt berechnet:

$$\dot{q}_{vap}'' = \dot{m}'' h_{fg} \quad (3.13)$$

Dabei ist die Verdunstungsenthalpie h_{fg} in Abhängigkeit von der Oberflächentemperatur, tabelliert nach Daubert [Daubert 89], zu berechnen.

3.2 Flüssigkeits- und Gasphase

In diesem Modell erfolgt der Wärmetransfer in der Flüssigphase ausschließlich durch Wärmeleitung. Die Energiebilanz wird dazu wie folgt beschrieben:

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda_L}{\rho_L c_{pL}} \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \quad (3.14)$$

Für die Flüssigkeitsphase werden folgenden Näherungen gemacht:

- Horizontale Wärmeleitung ist vernachlässigbar.
- Wärmeübertragung erfolgt nur durch vertikale Wärmeleitung. Konvektive Mischung ist vernachlässigbar.
- Wärmeleitung durch die Tiegelwand wird vernachlässigt.

Die Gasphase bzw. die Flamme werden in dem Modell durch die Energieeinträge von Strahlung (Gl. 3.3) und Konvektion (Gl. 3.5) modelliert. In der Gasphase oberhalb des Films werden Umgebungszustände angenommen.

3.3 Implementation und Diskretisierungsmethoden

Zur Lösung der aufgestellten Gleichungen wird die Finite-Differenzen-Methode verwendet. Das Lösungsgebiet wird hierbei in diskrete Volumen mit angeordneten Gitterpunkten unterteilt. Die partiellen Ableitungen werden für jeden Gitterpunkt, basierend auf Knotenwerten der Variablen und einer bestimmten Anzahl von Nachbarpunkten, durch Approximationen ersetzt. Pro Gitterpunkt ergibt sich dadurch eine algebraische Gleichung, in der die Variablenwerte und die bestimmten Nachbarpunkte als Unbekannte vorkommen [Ferzig, 08]. Das schematisch dargestellte Berechnungsnetz von Flüssigkeit und Gas/Luft ist in Abb. 3.2 dargestellt.

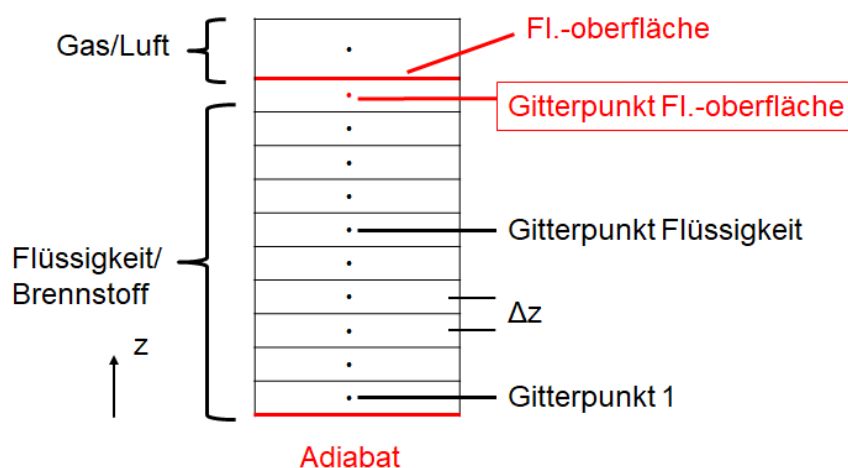


Abbildung 3.2: Schematische Darstellung des Berechnungsnetzes

Die Implementierung und Lösung der Gleichungen wird in Matlab durchgeführt. Zur Lösung der partiellen Differentialgleichungen der Energiegleichungen wird der Solver ode15s verwendet, welcher für steife Differentialgleichungen eingesetzt werden kann [Schwei. 16]. Der Einsatz eines steifen Löser führt zu einer effektive Lösung der Gleichungen.

Die flüssige Phase wird in eine bestimmte Anzahl von Gitterpunkten bzw. Volumina unterteilt, wobei der erste Gitterpunkt oberhalb des Bodens als Gitterpunkt 1 festgelegt wird. Der Boden unterhalb des untersten Gitterpunkts wird als adiabat definiert. Die Brennstoffoberfläche befindet sich zwischen dem obersten Brennstoffgitterpunkt und dem untersten Gitterpunkt der Gasphase. Die Gasphase wird in zwei Gitterpunkte unterteilt, welche als Platzhalter für Umgebungsbedingungen fungieren. In der vorliegenden Arbeit wird die flüssige Phase in 50 Gitterpunkte unterteilt.

In den Gleichungen wird die Taylor-Reihenentwicklung benutzt, um Approximationen der ersten und zweiten Ableitungen zu erhalten. Die räumliche zweite Ableitung der Temperatur in der Energiegleichung der Flüssigkeitsphase (Gl. 3.2 und 3.14) wird dadurch wie folgt approximiert:

$$\frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \approx \frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{\Delta z^2} \quad (3.15)$$

Dabei ist T_i die Temperatur am betrachteten Gitterpunkt und T_{i+1} und T_{i-1} sind die Temperaturen der benachbarten Gitterpunkte über bzw. unter dem betrachteten Gitterpunkt. Δz entspricht der Höhe einer Gitterzelle bzw. dem Abstand zwischen zwei Gitterpunkten. Für die bestimmte Länge δz in Gl. 3.2 wird der Abstand zwischen zwei Gitterpunkten Δz verwendet.

Die Strahlungsenergie, die von der Flamme an der Brennstoffoberfläche weitergegeben wird, durchdringt die Flüssigkeit bis zu einer bestimmten Tiefe. Das Lambert-Beersche Gesetz beschreibt dabei die Abschwächung der Intensität der Strahlung beim Durchgang durch ein absorbierendes Medium und wird als Transmissivität beschrieben durch [Bergman 11]:

$$\tau_\lambda = \frac{I_{\lambda,L}}{I_{\lambda,0}} = e^{-\kappa_\lambda L} \quad (3.16)$$

Dabei ist τ_λ die Transmissivität, $I_{\lambda,0}$ und $I_{\lambda,L}$ die Intensitäten vor der Durchdringung bzw. nach der Durchdringung in der Tiefe L des Mediums sowie κ_λ der Absorptionskoeffizient.

Der Absorptionskoeffizient κ_λ in Gl. 3.16 wird der Arbeit von Eldredge [Eldred. 11] folgend approximiert, sodass 97 % der Energien innerhalb von 3 cm unter der Brennstoffoberfläche

absorbiert werden. Dies gilt für alle flüssigen Brennstoffe. Die Tiefe des verwendeten Referenztiegels beträgt 11 mm.

Abschließend ergibt sich die diskretisierte Formulierung der instationären Energiebilanz (Gl. 3.2) für einen Gitterpunkt i innerhalb des flüssigen Brennstoffs, inklusive der Brennstoffoberfläche, wie folgt:

$$\left. \frac{\partial T}{\partial t} \right|_i = \frac{\lambda_L}{\rho_L c_{pL}} \left[\frac{T_{i+1} - 2T_i + T_{i-1}}{(\Delta z)^2} \right] + \frac{\tau_\lambda(L_i)}{\rho_L c_{pL} \Delta z} [\dot{q}_{rad}'' + \dot{q}_{conv}'' - \dot{q}_{vap}'' - \dot{q}_{rerad}''] \quad (3.17)$$

Dabei ist der Wert der Transmissivität τ_λ abhängig von dem Abstand L_i vom Gitterpunkt i zur Brennstoffoberfläche.

Am Boden wird die adiabate Randbedingung vorgegeben durch die diskretisierte Energiegleichung

$$\frac{dT}{dt} \approx \frac{\lambda_L}{\rho_L c_{pL}} \frac{T_2 - T_1}{(\Delta z)^2} = 0. \quad (3.18)$$

3.3.1 Temperatur an der Brennstoffoberfläche

Die eigentliche Brennstoffoberfläche befindet sich eine halbe Gitterhöhe über dem letzten Gitterpunkt der Flüssigkeit. Um die Temperatur an der Brennstoffoberfläche zu ermitteln, wird diese aus den Temperaturen der ersten und zweiten Gitterpunkte unter der Brennstoffoberfläche extrapoliert.

Der Annahme von Eldredge [Eldred. 11] folgend wird als Näherung davon ausgegangen, dass der Temperaturverlauf unterhalb der Brennstoffoberfläche mit dem Verlauf des Lambert-Beerschen Gesetzes (Gl. 3.16) übereinstimmt. Der Temperaturverlauf kann demzufolge durch die folgende Gleichung beschrieben werden:

$$T(z) = k_1 e^{-k_2 z} \quad (3.19)$$

Die Konstanten k_1 und k_2 werden dabei aus den Temperaturen der ersten und zweiten Gitterpunkte unter der Oberfläche ermittelt. Für ein n-Heptan-Poolfeuer ergibt sich für k_1 ein Wert von 293,15 bis 356,66 K und für k_2 ein Wert von 0 bis 2,3625 1/m.

3.3.2 Absenkung der Brennstoffoberfläche

Durch die Verdunstung des flüssigen Brennstoffs während des Verbrennungsprozesses verringert sich die Brennstoffmenge im flüssigen Pool. Der Brennstoffspiegel sinkt demzufolge mit der Zeit. Diese Bedingung wird modelliert indem die Gitterhöhe Δz entsprechend der verdunsteten Brennstoffmasse mit der Zeit abnimmt, sodass insgesamt das Brennstoffvolumen kleiner wird. Die Anzahl der Gitterpunkte bleibt dabei konstant.

Die Schritte zur Berechnung der Höhe des Brennstoffspiegels sind wie folgt:

1. Berechnung der Dichte der Flüssigkeit im jeweiligen Gitterpunkt in Abhängigkeit von Temperatur und Mischung.
2. Bildung des Mittelwerts der Dichte aus der Summe der Dichten der Flüssigkeit dividiert durch die Anzahl von Gitterpunkten.
3. Berechnung der Brennstoffhöhe durch die Division der aktuellen Masse durch die mittlere Dichte multipliziert mit der Querschnittsfläche.
4. Berechnung der Gitterhöhe Δz indem die Brennstoffhöhe durch die Anzahl von Gitterpunkten dividiert wird. Die Gitterhöhe ist dabei konstant über die gesamte Brennstoffhöhe.

Da die Gitterhöhe sich ändert, entspricht die Position des Mittelpunkts der Zellen nicht mehr der Position des vorherigen Zeitschritts. Eine Interpolation der neuen Temperaturwerte in Bezug auf die Position der vorherigen Zellenmitten ist demzufolge notwendig. Die Temperaturwerte an der neuen Position $T_{z_{neu}}$ werden mittels der Lagrangeschen Interpolationsformel wie folgt berechnet [Moler 08]:

$$T_{z_{neu},i} = \sum_{k=1}^4 \left(\prod_{j \neq k} \frac{z_{neu} - x_{z,j}}{x_{z,k} - x_{z,j}} \right) T_k \quad (3.20)$$

Dabei ist z die Position der Zellen und T_k die Temperatur für die Position $x_{z,k}$ in dem vorherigen Zeitschritt. Die Indizes sind:

$$i = 1 \dots \text{Zellenanzahl},$$

$$j = 1 \dots 4 \text{ und}$$

$$k = 1 \dots 4$$

Als Basis der Interpolation werden insgesamt vier Zellen verwendet, jeweils zwei Zellen über bzw. unter der neuen Position z_{neu} . Die Position x stellt dabei die Position des vorherigen Zeitschritts wie folgt das:

$$\begin{aligned}x_{z,1} &= z_{i-2}, \\x_{z,2} &= z_{i-1}, \\x_{z,3} &= z_i \text{ und} \\x_{z,4} &= z_{i+1}.\end{aligned}$$

Die Position z_i entspricht die Position der nächsten Zelle oberhalb der neuen Position z_{neu} in dem vorherigen Zeitschritt. Abweichend davon werden bei der ersten und zweiten Zelle unterhalb der Brennstoffoberfläche die ersten vier Zellen verwendet, und bei den drei ersten Zellen oberhalb des Bodens die vier Zellen oberhalb des Bodens.

Die temperaturabhängigen Stoffeigenschaften der verwendeten Brennstoffe werden aus der Stoffdatenbank des Oel-Waerme-Instituts entnommen. Die Datenbank basiert dabei auf temperaturabhängigen Polynomen aus der Arbeit von Poling [Poling 01].

3.3.3 Übersicht des Verdunstungsmodells

Die schematische Übersicht des Berechnungsvorgangs des Modells ist in Abb. 3.3 dargestellt. Beginnend mit der Energiebilanz beschrieben in Gl. 3.2 werden zur Berechnung der Massenabbrandrate ($\dot{m}''$) folgende Schritte durchgeführt:

1. Die Temperatur an der Flüssigkeitsoberfläche ($T_{surface}$) wird durch Lösen der instationären Energiebilanz an der Flüssigkeitsoberfläche berechnet. Die Berechnungsschleife wird solange wiederholt, bis die Masse der Flüssigkeit die Bedingung $m < 10^{-6}$ kg erreicht.
2. Der Dampfdruck (p_{vap}) wird aus den thermischen Stoffeigenschaften des Brennstoffs berechnet.
3. Der Molenbruch des Brennstoffs im Film über der Flüssigkeitsoberfläche (x) wird durch das Raoult'sche Gesetz bei Umgebungsdruck (p_u) berechnet.
- 4a. Der Massenübergangskoeffizient (h_m) ergibt sich aus dem Wärmeübergangskoeffizient (h_t) unter Annahme von $Le = 1$. Weiterhin wird h_t aus der Nusselt-Zahl für eine beheizte horizontale Platte bestimmt (Gl. 3.7).

- 4b. Die Massenabbrandrate ($\dot{m}''$) wird nach der Filmtheorie (Gl. 3.9) berechnet.
5. Mit $\dot{m}''$, h_t und $T_{surface}$ können die Einträge und Abzüge der Energie ($\dot{q}''$) berechnet werden (Gl. 3.3, 3.4, 3.5 und 3.13).

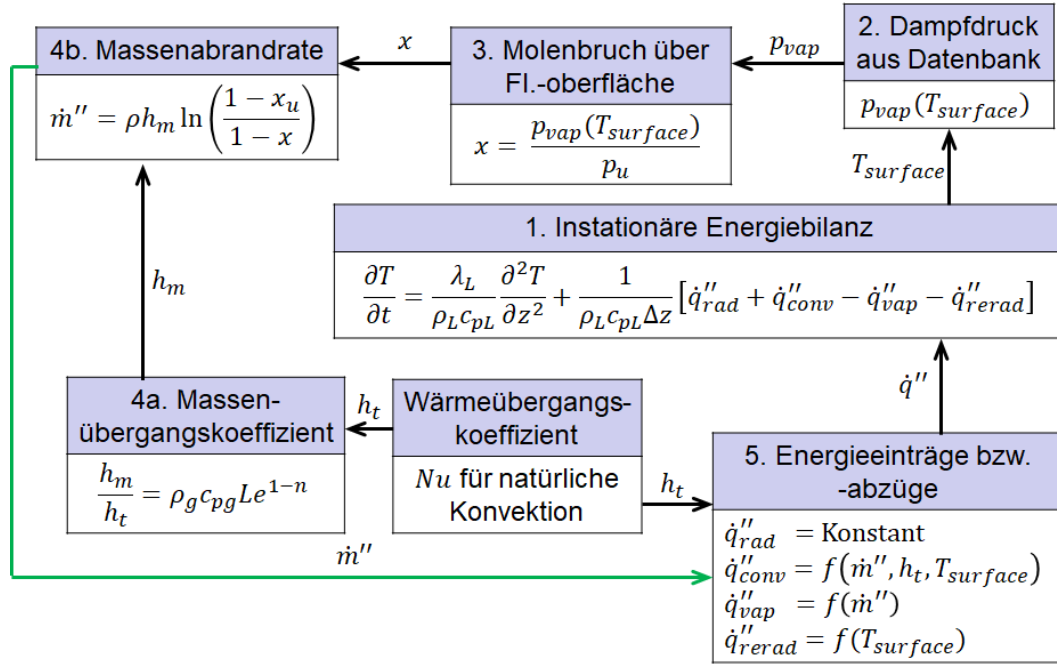


Abbildung 3.3: Übersicht der Berechnungsmethode für Poolfeuer mit Einzelkomponentenbrennstoffen

3.4 Mehrkomponentenbrennstoffe

Für die Berechnung der Massenabbrandrate wird bei den Mehrkomponentenbrennstoffen die Massenabbrandrate als Gesamtgemisch berechnet und der Wert für die einzelnen Komponenten mit den jeweiligen Massenanteilen ermittelt. Die Stoffeigenschaften werden dabei als eine Mischung berechnet und in jedem Zeitschritt als perfekt gemischt angenommen.

Eine Übersicht der Berechnungsmethode der Massenabbrandrate für Mehrkomponentenbrennstoffe ist in Abb. 3.4 dargestellt. Im Unterschied zu den Einzelkomponentenbrennstoffen wird bei den Mehrkomponentenbrennstoffen zusätzlich der Partialdruck der einzelnen Komponenten ($p_{vap,i}$) bestimmt und für die Berechnung des Molenbruchs der einzelnen Komponenten (x_i) in der Gasphase über der Flüssigkeitsoberfläche verwendet. Ergänzend zu den Schritten 1 bis 5 für die Einzelkomponentenbrennstoffe in Abb. 3.3 werden weitere Schritte benötigt. Nach der Berechnung der Oberflächentemperatur ($T_{surface}$) durch die

die Masse des Brennstoffs die Bedingung $m < 10^{-6}$ kg erfüllt.

8. Der Molenbruch des Brennstoffs im Film über der Flüssigkeitsoberfläche (x_i) wird berechnet aus dem Verhältnis von $p_{vap,i}$ zu dem Umgebungsdruck (p_u).
- 9a. Die Massenabbrandrate der Gesamtmischung wird berechnet. Der Molenbruch des Brennstoffs im Film ergibt sich dabei aus der Summe der Molenbrüche der Komponenten (x_i)
- 9b. Die Massenbrüche der einzelnen Komponenten (y_i) werden mit der Molmasse (M_i) berechnet.
10. Die Massenabbrandraten der einzelnen Komponenten werden durch Multiplikation der Massenabbrandrate der Gesamtmischung mit den Massenbrüchen ermittelt und für die Bestimmung der aktuellen Masse der Komponenten (m_i) sowie der neuen Zusammensetzung des flüssigen Brennstoffs ($x_{l,i}$) verwendet.
11. Die Zusammensetzung des flüssigen Brennstoffs $x_{l,i}$ wird verwendet, um die neuen Werte von $p_{vap,i}$ zu berechnen.

3.4.1 Zweikomponentensysteme

Für den Sonderfall des idealen Systems wird das Raoult'sche Gesetz (Gl. 3.12) für eine binäre Mischung verwendet, da es näherungsweise für Gemische aus physikalisch-chemisch ähnlichen Komponenten gilt. Das in dieser Arbeit verwendete binäre Gemisch aus n-Heptan und Ethanol weicht jedoch von dieser Bedingung deutlich ab. Die Mischung aus Ethanol und n-Heptan bildet ein sogenanntes azeotropes Gemisch. Dies bedeutet, dass für das Gemisch Ethanol-n-Heptan im Dampfdruckdiagramm bzw. im Siedediagramm ein Punkt existiert, in welchem die Gasphase und die Flüssigkeit dieselbe Zusammensetzung besitzen [Heintz 17].

Das reale Mischungsverhalten wird für ein nicht-ideales System mit dem Aktivitätskoeffizienten $\gamma_{a,i}$ erweitert und die Berechnungsgleichung lautet [Lucas 08]:

$$p_{vap,i} = x_{l,i} p_{sat,i} \gamma_{a,i} \quad (3.21)$$

Für die Mischung von n-Heptan mit Ethanol müssen die Werte von $\gamma_{a,i}$ berechnet werden. Als Basis werden die Messdaten aus der Arbeit von Raal [Raal 72] verwendet.

Zur Berechnung der Aktivitätskoeffizienten $\gamma_{a,i}$ wird die Methode nach Poling [Poling 01] angewendet. Diese wird im Folgenden beschrieben, wobei Ethanol mit dem Index $i = 1$ und n-Heptan mit $i = 2$ dargestellt wird.

1. Feststellung einer Methode zur Berechnung des Dampfdrucks der einzelnen Komponenten ($p_{sat,i}$) in Abhängigkeit von der Temperatur. In der vorliegenden Arbeit werden hierfür temperaturabhängige Polynome nach Daubert [Daubert 89] verwendet.
2. Ermittlung von experimentellen Datenpunkten. Für bestimmte Werte des Stoffmengenanteils Ethanol in der flüssigen Brennstoffmischung ($x_{l,1}$) sind die experimentell ermittelten Werte des Stoffmengenanteils in der Dampfphase (x_1), der Temperatur (T) und des Drucks (p) vorhanden. Für jeden Datenpunkt werden die Aktivitätskoeffizienten $\gamma_{a,1}$ und $\gamma_{a,2}$ berechnet entsprechend der Gleichungen:

$$\gamma_{a,1} = \frac{x_1 p}{x_{l,1} p_{sat,1}} \quad (3.22)$$

$$\gamma_{a,2} = \frac{x_2 p}{x_{l,2} p_{sat,2}} \quad (3.23)$$

3. Für jeden Datenpunkt wird die molare Mischungs-Gibbs-Energie g^E mit der folgenden Gleichung berechnet:

$$g^E = RT(x_{l,1} \ln \gamma_{a,1} + x_{l,2} \ln \gamma_{a,2}) \quad (3.24)$$

4. Die Gleichung von Wilson zur Berechnung von g^E lautet:

$$\frac{g^E}{RT} = -x_{l,1} \ln(x_{l,1} + \Lambda_{12}x_{l,2}) - x_{l,2} \ln(x_{l,2} + \Lambda_{21}) \quad (3.25)$$

Die Konstanten Λ_{12} und Λ_{21} werden so ermittelt, dass der Wert von g^E aus Gl. 3.25 und aus Schritt 3 für jede Temperatur T die kleinste Differenz aufweisen.

5. Mit Λ_{12} und Λ_{21} ergeben sich die Gleichungen für $\gamma_{a,1}$ und $\gamma_{a,2}$ in Abhängigkeit von $x_{l,1}$ und $x_{l,2}$:

$$\ln \gamma_{a,1} = -\ln(x_{l,1} + \Lambda_{12}x_{l,2}) + x_{l,2} \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_{l,1} + \Lambda_{12}x_{l,2}} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_{l,1} + x_{l,2}} \right) \quad (3.26)$$

$$\ln \gamma_{a,2} = -\ln(x_{l,2} + \Lambda_{21}x_{l,1}) + x_{l,1} \left(\frac{\Lambda_{12}}{x_{l,1} + \Lambda_{12}x_{l,2}} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_{l,1} + x_{l,2}} \right) \quad (3.27)$$

Die experimentellen Datenpunkte aus [Raal 72] für Schritt 2 sind in Tabelle 3.2 angegeben. Aus den Berechnungsschritten ergeben sich für die Konstanten Λ_{12} und Λ_{21} die Werte:

$$\begin{aligned}\Lambda_{12} &= 0,10488 \\ \Lambda_{21} &= 0,23313\end{aligned}\tag{3.28}$$

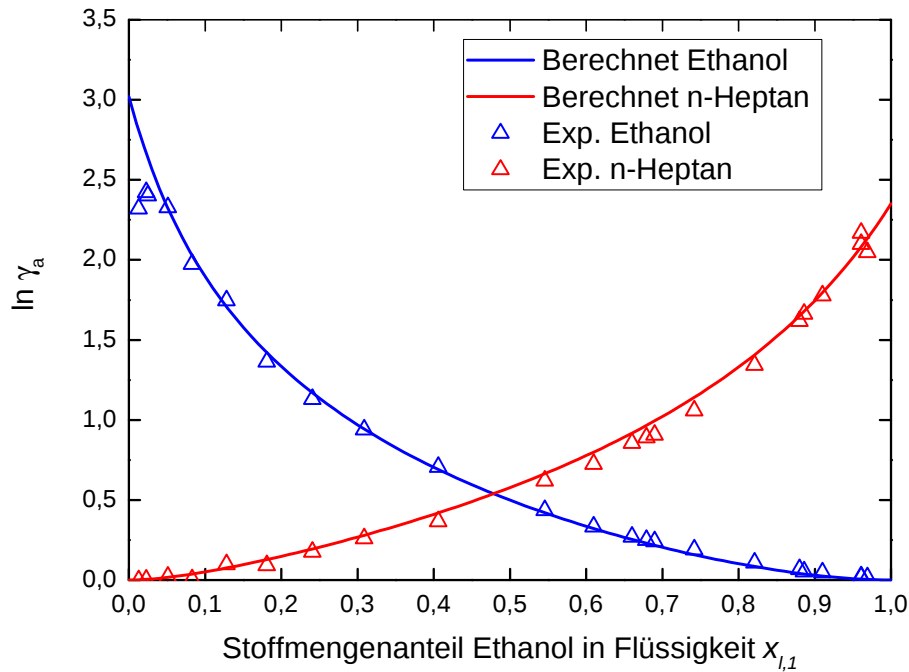


Abbildung 3.5: Aktivitätskoeffizienten für eine Mischung aus Ethanol und n-Heptan bei 1 atm. Experimentelle Werte aus [Raal 72]

Die Aktivitätskoeffizienten lassen sich aus Gl. 3.26 und 3.27 mit den Konstanten Λ_{12} und Λ_{21} berechnen. Die berechneten Aktivitätskoeffizienten sind in Abb. 3.5 dargestellt. Es ergibt sich eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten aus der Literatur.

Mit den ermittelten Aktivitätskoeffizienten lassen sich des Weiteren das Phasendiagramm und das Siedediagramm der Mischung bilden, welche in Abb. 3.6 bzw. 3.7 dargestellt sind. Der Vergleich der berechneten Werten mit den experimentellen Werten zeigt eine gute Übereinstimmung. Demzufolge liefert die Annäherung der Aktivitätskoeffizienten mit der Gleichung von Wilson gute Ergebnisse. Ersichtlich ist im Phasendiagramm in Abb. 3.6 der Ort der berechneten Azeotrope, welche bei $x_{l,1} = x_1 = 0,64$ auftritt. Der Siedepunkt der Azeotropen kann weiterhin aus dem Siedediagramm in Abb. 3.7 mit 71 °C entnommen werden. Die berechneten Werte der Azeotrope sind in guter Übereinstimmung mit den Werten $x_{l,1} = 0,68$ und $T = 70,9$ °C aus der Literatur [Dean 99].

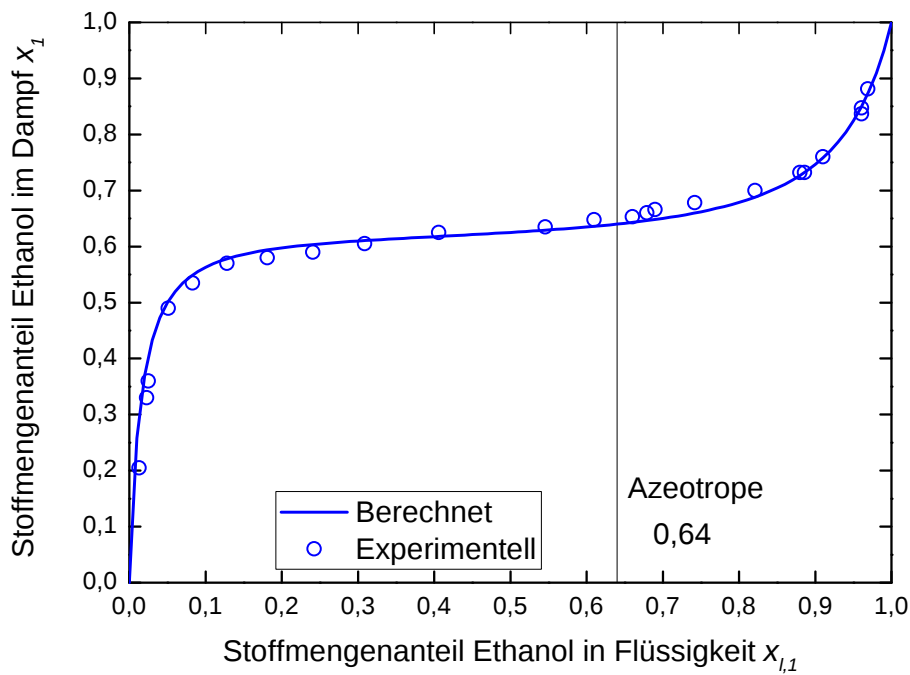


Abbildung 3.6: Phasendiagramm für eine Ethanol, n-Heptan-Mischung bei 1 atm. Experimentelle Werte aus [Raal 72]

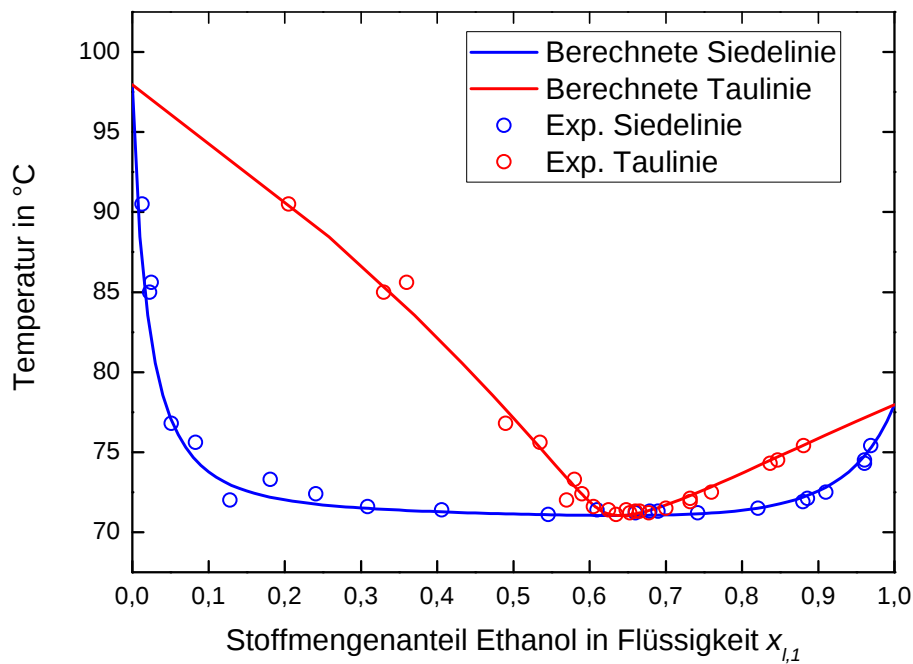


Abbildung 3.7: Siedediagramm für eine Ethanol, n-Heptan-Mischung bei 1 atm. Experimentelle Werte aus [Raal 72]

Tabelle 3.2: Experimentelle Datenpunkte der Stoffmengenanteile in der Flüssigkeit und der Dampfphase als Funktion der Temperatur für ein Gemisch aus n-Heptan und Ethanol bei 1 atm [Raal 72]

Stoffmengenanteil Ethanol (-)		Temperatur (°C)
Flüssigkeit $x_{l,1}$	Dampf x_1	
0,013	0,205	90,5
0,023	0,330	85,0
0,025	0,360	85,6
0,051	0,490	76,8
0,083	0,535	75,6
0,128	0,570	72,0
0,181	0,580	73,3
0,241	0,590	72,4
0,309	0,605	71,6
0,406	0,625	71,4
0,546	0,635	71,1
0,610	0,648	71,4
0,660	0,653	71,2
0,679	0,660	71,3
0,690	0,666	71,3
0,742	0,678	71,2
0,821	0,700	71,5
0,880	0,732	71,9
0,886	0,732	72,1
0,910	0,760	72,5
0,961	0,847	74,5
0,961	0,837	74,3
0,969	0,881	75,4

3.4.2 Quasi-discrete Model

Für die Beschreibung von komplexen Mehrkomponentenbrennstoffen wird in dieser Arbeit das Quasi-discrete Model (QDM) von Elwardany und Sazhin [Elward. 12] verwendet. Das Quasi-discrete Model basiert dabei auf der Methode der kontinuierlichen Thermodynamik [Tamim 95], in welcher die Zusammensetzung von Multikomponenten-Brennstoffen durch eine kontinuierliche Verteilungsfunktion $f_m(I_v)$ abgebildet wird. Für die Verteilungsfunktion gilt dabei:

$$\int_{I_{v,1}}^{I_{v,2}} f_m(I_v) dI_v = 1 \quad (3.29)$$

Dabei ist I_v die Verteilungsvariable, welche eine Stoffeigenschaft der Brennstoffkomponenten darstellt. Die Werte $I_{v,1}$ und $I_{v,2}$ beschreiben dabei die Grenzen von I_v . Im QDM wird mit I_v die Anzahl von Kohlenstoffatomen n für Alkane der Form C_nH_{2n+2} gewählt. Für die molekulare Masse M gilt folgende Beziehung:

$$M = 14n + 2 \quad (3.30)$$

Die Verteilungsfunktion ist gegeben durch:

$$f_m(n) = C_m(n_0, n_f) \frac{(M(n) - \gamma)^{\alpha-1}}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} \exp \left[- \left(\frac{M(n) - \gamma}{\beta} \right) \right] \quad (3.31)$$

Dabei steht $n_0 \leq n \leq n_f$ mit den Indizes 0 und f für den Anfangs- bzw. Endwert der Anzahl von Kohlenstoffatomen der Komponenten. Die Gammaverteilungsfunktion ist dabei mit $\Gamma(\alpha)$ dargestellt. Die Parameter α , β und γ beschreiben die Formparameter der Verteilungsfunktion. Weiterhin beschreibt $C_m(n_0, n_f)$ folgende Gleichung:

$$C_m(n_0, n_f) = \left\{ \int_{n_0}^{n_f} \frac{(M(n) - \gamma)^{\alpha-1}}{\beta^\alpha \Gamma(\alpha)} \exp \left[- \left(\frac{M(n) - \gamma}{\beta} \right) \right] dn \right\}^{-1} \quad (3.32)$$

Die Bedingung von Gl. 3.29 ist erfüllt durch:

$$\int_{n_0}^{n_f} f_m(n) dn = 1 \quad (3.33)$$

Die Werte der Formparameter α , β und γ sind für Diesel zur Nachbildung von experimentellen Daten von Tamim und Hallett [Tamim 95] ermittelt worden und in Tabelle 3.3 angegeben. Der Anfangs- bzw. Endwert (n_0 und n_f) der Anzahl von Kohlenstoffatomen ist dabei aus der Arbeit von Arias-Zugasti [Arias 03] entnommen. Mit den Formparametern ergibt sich für die Verteilungsfunktion von Diesel die Kurve in Abb. 3.8.

Tabelle 3.3: Formparameter für die Verteilungsfunktion von Diesel [Elward. 12]

Brennstoff	α	β (g/mol)	γ (g/mol)	n_0	n_f
Diesel	18,5	10	0	5	25

Im QDM wird angenommen, dass die Komponenten im Bereich von n ähnliche Stoffeigenschaften aufweisen. Dadurch lässt sich die kontinuierliche Verteilungsfunktion (Gl. 3.31) durch eine diskrete Gleichung mit einer bestimmten Anzahl N_f sogenannter Quasi-Komponenten

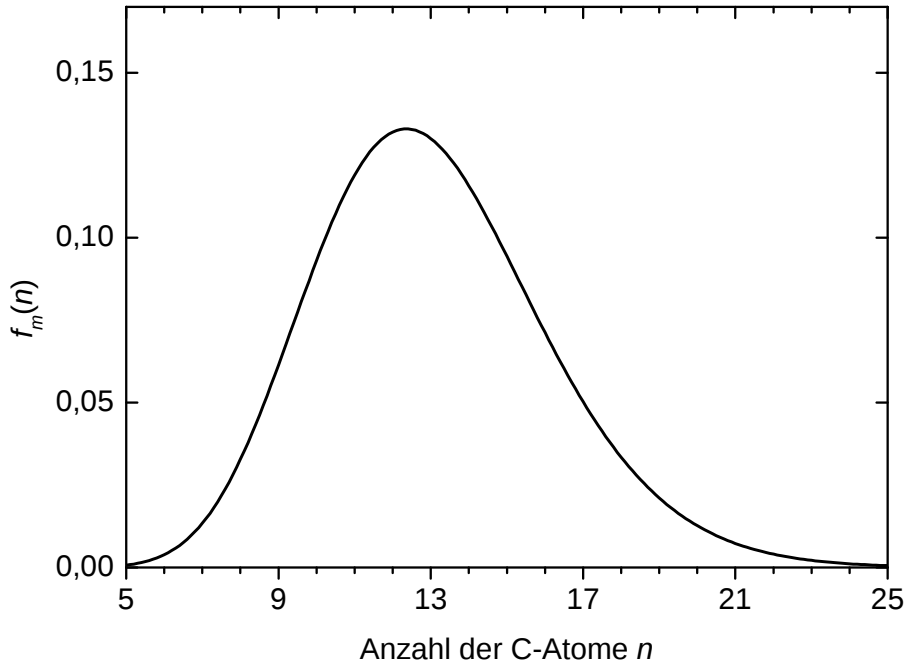


Abbildung 3.8: Darstellung der Verteilungsfunktion $f_m(n)$ in Abhängigkeit von der Anzahl an Kohlenstoffatomen (n) für Diesel [Elward. 12]

ersetzen. Für die Quasi-Komponenten ergeben sich für die Anzahl der Kohlenstoffatome, den Stoffmengenanteil und den Massenbruch folgende Gleichungen:

$$\bar{n}_j = \frac{\int_{n_{j-1}}^{n_j} n f_m(n) dn}{\int_{n_{j-1}}^{n_j} f_m(n) dn}, \quad (3.34)$$

$$X_j = \int_{n_{j-1}}^{n_j} f_m(n) dn \quad (3.35)$$

$$Y_j = \frac{M(\bar{n}_j) X_j}{\sum_{j=1}^{j=N_f} [M(\bar{n}_j) X_j]} \quad (3.36)$$

Dabei ist j eine ganze Zahl mit dem Wert zwischen $1 \leq j \leq N_f$. Die Werte von $\bar{n}_j$ sind im Allgemeinen keine ganzen Zahlen und entsprechen keiner physikalischen Anzahl von Kohlenstoffatomen. Die durch die Diskretisierung resultierenden Quasi-Komponenten werden für die Berechnung als eigenständige Komponenten behandelt und repräsentieren den Brennstoff als eine Multikomponenten-Mischung.

Als Beispiel wird in Abb. 3.9 die Verteilungsfunktion durch fünf Quasi-Komponenten diskretisiert ($N_f = 5$). Die Fläche unter der Kurve repräsentiert dabei nach Gl. 3.35 den Stoffmengenanteil der jeweiligen Quasi-Komponente.

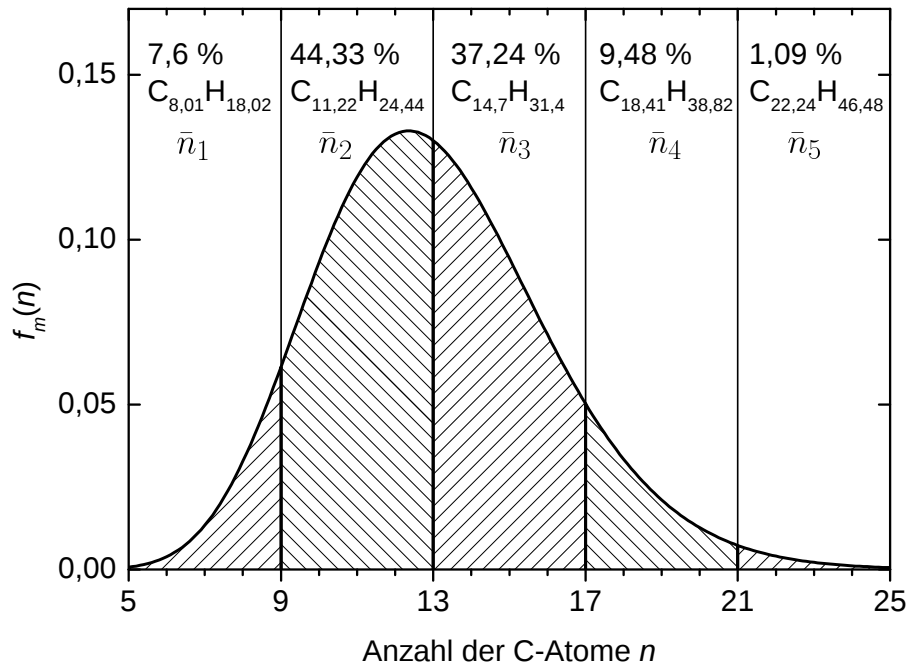


Abbildung 3.9: Diskretisierung der Verteilungsfunktion von Diesel in fünf Komponenten ($N_f = 5$). Die prozentuale Angaben beziehen sich auf die Stoffmengenanteile

Die Stoffeigenschaften der Quasi-Komponenten des flüssigen Brennstoffs werden in Abhängigkeit von der Temperatur T und der Anzahl der Kohlenstoffatome $\bar{n}_j$ berechnet. Aus den Stoffeigenschaften der Komponenten werden durch Mischungsregeln die Stoffeigenschaften der Gesamtmischung gebildet. Die Gleichungen zur Berechnung der Stoffeigenschaften können aus dem Anhang A.1 entnommen werden.

4 Experimentelle Untersuchungen

Experimentelle Untersuchungen von Poolfeuern werden durchgeführt, um die Verläufe der Massenabbrandrate und der Temperatur während des Verbrennungsprozesses zu ermitteln. Zur Messung der Massenabbrandrate werden dabei verschiedene Methoden angewendet, unter anderem durch die zeitliche Messung der Gewichtsabnahme mittels einer elektronischen Waage [Hayasa. 97, Chen 11] oder der Absenkung des Brennstoffspiegels mittels Ultraschallsensoren [Vali 14]. Die Temperatur des Brennstoffs wird durch Thermoelemente gemessen. Eine gängige Methode ist die Thermoelemente an den Brennstoffbehälter bzw. Tiegel anzuschweißen [Hayasa. 97]. Dadurch, dass die Thermoelemente an der Tiegelgeometrie befestigt sind, sind Messungen von Gewichtsabnahmen bei der Verwendung von Waagen jedoch mit Fehlern behaftet, da der Tiegel nicht freisteht. In der vorliegenden Arbeit werden die Thermoelemente berührungsfrei angeordnet, um diesen Fehler zu vermeiden.

Für die experimentelle Ermittlung von Massenabbrandraten und der Temperaturverläufe während des Verbrennungsvorgangs in Poolfeuern wurde ein Versuchsstand aufgebaut. Der Aufbau basiert dabei auf experimentellen Versuchen von Hayasaka [Hayasa. 97].

4.1 Aufbau des Versuchsstands

Der Versuchsstand ist in Abb. 4.1 schematisch dargestellt und besteht aus einem Tiegel, welcher auf einer elektronischen Waage platziert ist. Um eine adiabate Randbedingung am Boden des Tiegels anzunähern, wird eine Wärmedämmung zwischen Tiegel und Waage gelegt. Zur Messung der Temperaturen werden Thermoelemente vom Typ K mit 1 mm Durchmesser verwendet. Die Messung der Temperaturen erfolgt für das Thermoelement 1 in der Mitte des Tiegels und das Thermoelement 2 in 3 mm Abstand von der Tiegelwand. Es wird dabei beachtet, dass die Thermoelemente im Tiegel in 1 mm Höhe vom Boden des Tiegels berührungsfrei angeordnet sind, um die Messungen der Waage nicht zu beeinflussen. Die Wärmedämmung zwischen Tiegel und Waage ist eine kreisförmige Platte aus Holz. Bei dem Heizöl-Poolfeuer wurde wegen der langen Brennzeit zusätzlich eine Platte aus Graphit über dem Holz verwendet. Ein Foto der Anordnung von Tiegel, Waage und Thermoelementen zeigt Abb. 4.2.

Die transiente Datenaufnahme erfolgt, wie in Abb. 4.3 gezeigt, durch eine digitale Fotokamera zur Aufnahme der Waagenmessung sowie durch einen USB-Datenlogger für die Ther-

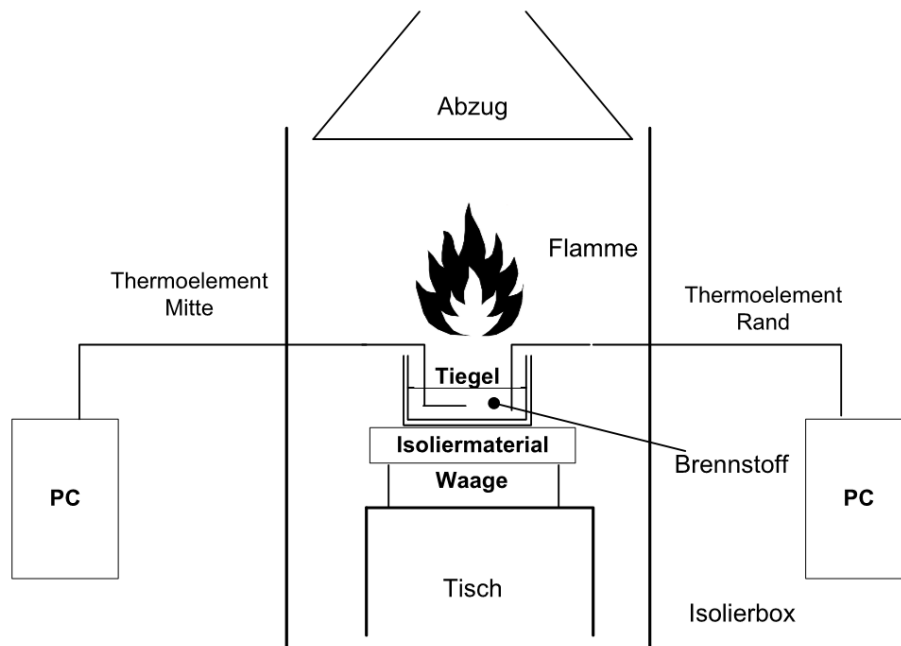


Abbildung 4.1: Schematische Darstellung des Versuchstands

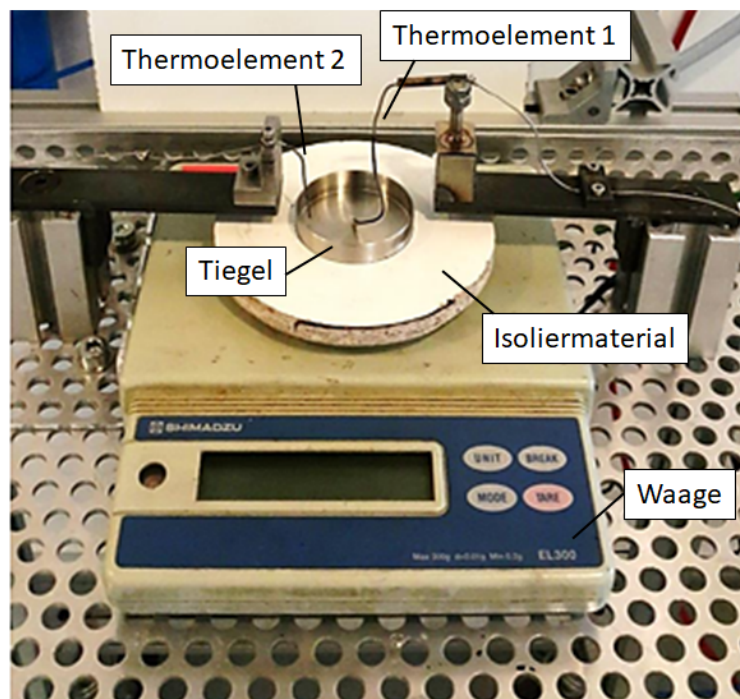


Abbildung 4.2: Foto von Tiegel, Waage und Thermoelementen

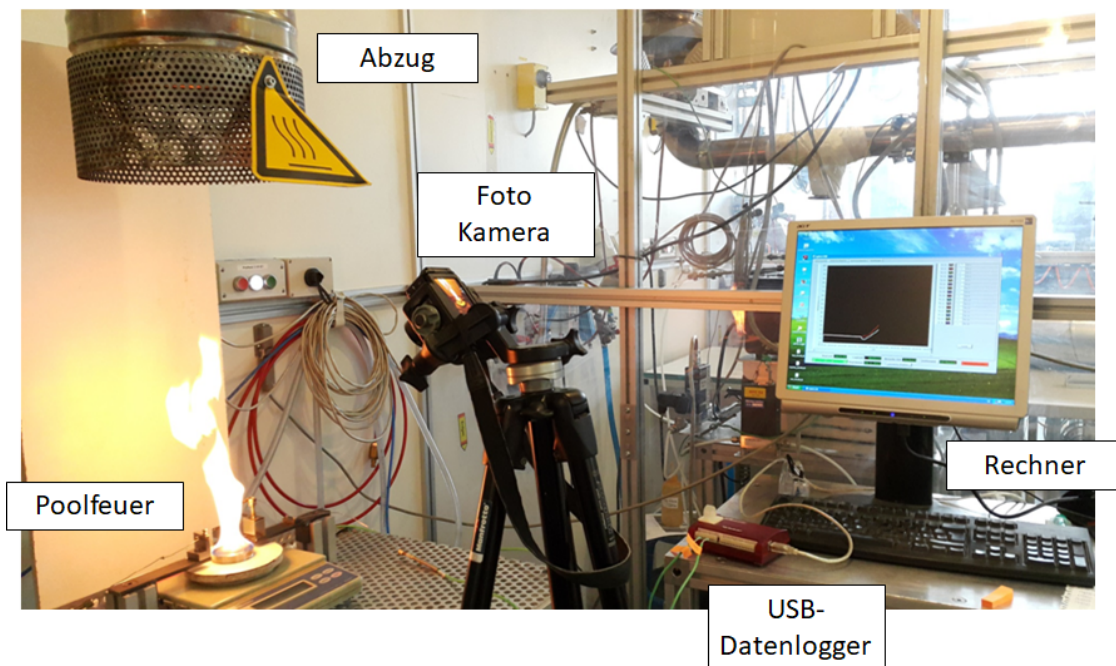


Abbildung 4.3: Versuchsaufbau Experiment

moelemente. Aus den Kameraaufnahmen wird die Masse jede 5 Sekunden ab dem Start des Zündvorgangs ausgewertet. Durch den mit dem Rechner verbundenen USB-Datenlogger werden die zeitlichen Temperaturmessungen direkt aufgezeichnet.

Der Tiegel besteht aus rostfreiem Edelstahl mit einem inneren Durchmesser von 50,5 mm, einer Tiefe von 11 mm sowie einer Wanddicke von 0,6 mm. Die Maße wurden aus den experimentellen Untersuchungen von Hayasaka [Hayasa. 97] als Referenz übernommen.

Verwendet wird eine elektronische Waage vom Typ Shimadzu EL300. Da kleinere Massenänderungen über einen Zeitraum gemessen werden, wird die Waage so eingestellt, dass kleine zeitliche Änderungen der Masse nicht automatisch ausgeglichen werden. Die Spezifikationen der Waage sind in Tabelle 4.1 ausgeführt.

Tabelle 4.1: Spezifikation der elektronischen Waage

Typ	Shimadzu EL300
Max. Wägebereich	300 g
Ablesbarkeit	0,01 g
Standardabweichung	$\sigma \leq 0,01$ g
Linearitätsabweichung	$\pm 0,02$ g
Temperaturbereich	5 bis 40 °C

Der Tiegel ist am Anfang bis zum Rand mit Brennstoff gefüllt. Die Zündung erfolgt über eine mit Propan betriebene Lötlampe. Der Verbrennungsvorgang läuft so lang, bis der Brennstoff vollständig aufgebraucht und die Flamme erloschen ist.

4.2 Versuchsvarianten

Zur Untersuchung des Einflusses der Geometrie des Tiegels auf die Messergebnisse werden weitere Tiegel mit unterschiedlichen Durchmessern und Tiefen verwendet. Der Einfluss der Wärmeleitung durch die Wand wird mit Tiegeln aus Quarzglas untersucht. Die Wärmeleitfähigkeit von Stahl ist dabei 33 mal so hoch wie die von Quarzglas. Eine Übersicht der verwendeten Tiegelgeometrien gibt Tabelle 4.2. Die verwendeten Tiegel sind in Abb. 4.4 dargestellt.

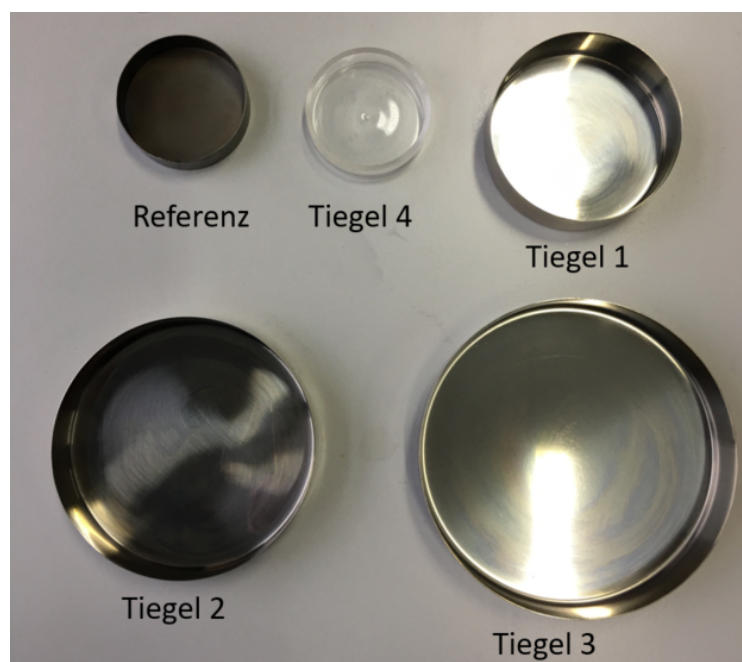


Abbildung 4.4: Verwendete Tiegelgeometrien

Als Brennstoff für die Einkomponenten-Poolfeuer werden n-Heptan und Ethanol verwendet. Für die Mehrkomponentenbrennstoffe werden Diesel und Mischungen von n-Heptan und Ethanol in verschiedenen Verhältnissen verwendet. Die verwendeten Mischungen sind:

- Mischung 0: 0 Vol.- % Ethanol; 100 Vol.- % n-Heptan
- Mischung 1: 20 Vol.- % Ethanol; 80 Vol.- % n-Heptan

- Mischung 2: 40 Vol.- % Ethanol; 60 Vol.- % n-Heptan
- Mischung 3: 60 Vol.- % Ethanol; 40 Vol.- % n-Heptan
- Mischung 4: 80 Vol.- % Ethanol; 20 Vol.- % n-Heptan
- Mischung 5: 100 Vol.- % Ethanol; 0 Vol.- % n-Heptan.

Tabelle 4.2: Übersicht der verwendeten Tiegelgeometrien im Experiment. D_i : Innendurchmesser; h_i : Tiegelhöhe innen; t_w : Wanddicke

Material	Tiegel	D_i (mm)	h_i (mm)	t_w (mm)	A/A_{ref} (-)	V/V_{ref} (-)
Stahl	Referenz	50,5	11	0,6	1,00	1,00
	1	73,4	20,3	0,65	2,11	3,90
	2	97,2	18,3	0,8	3,70	6,16
	3	118,2	20,4	0,8	5,48	10,16
Quarzglas	4	45,9	9,6	2	0,83	0,72

5 Experimentelle Ergebnisse

Der Versuchsstand, der in Kapitel 4 beschrieben wurde, wird verwendet, um experimentelle Untersuchungen von Massenabbrandraten und Temperaturen für Poolfeuer durchzuführen. Als Brennstoff werden die Modellbrennstoffe aus Tabelle 2.1 eingesetzt. Die experimentellen Versuche basieren dabei auf der Arbeit von Hayasaka [Hayasa. 97], mit dem Unterschied, dass die Temperaturmessungen berührungsfrei erfolgen und somit der Tiegel freistehend ist. Dadurch werden Fehler durch die Steifigkeiten der Thermoelemente bei der Gewichtsmessung vermieden.

5.1 n-Heptan

Die Ergebnisse des n-Heptan Poolfeuers sind in Abb. 5.1 dargestellt. Die rote Kurve entspricht dabei den Messergebnissen der Massenabbrandrate. Die gestrichelten vertikalen Linien teilen die einzelnen Phasen des Massenabbrandratenverlaufs auf und die schwarzen Linien stellen die gemittelten Massenabbrandraten in der jeweiligen Phase dar. Die blaue und die grüne Kurven entsprechen dabei den Temperaturmessungen der Thermoelemente in der Mitte bzw. nahe der Wand des Pools. Die Siedetemperatur von n-Heptan ist auf der gestrichelten horizontalen Linie eingezeichnet.

Der Verlauf der Massenabbrandrate kann dabei in fünf Phasen unterteilt werden. Die Unterteilung entspricht dabei den Beobachtungen früherer Experimente in der Literatur [Hayasa. 97, Chen 11, Sikanen 16].

1. *Startphase*: Unmittelbar nach der Zündung beginnt der Verbrennungsprozess, in welchem die Massenabbrandrate steil ansteigt. In der Flüssigphase steigt die Oberflächentemperatur zügig.
2. *Erwärmungsphase*: Die Oberfläche der Flüssigkeit erreicht die Siedetemperatur. Die gemessenen Temperaturen unterhalb der Oberfläche befinden sich unter der Siedetemperatur, wobei die gemessenen Temperaturen in der Wandnähe höher sind als in der Mitte. Während dieser Phase ist die Massenabbrandrate nahezu konstant.
3. *Transitionsphase*: In dieser Phase steigt die Massenabbrandrate stark an. Die gemessenen Temperaturen erreichen die Endtemperatur und es bilden sich Blasen in der Flüssigkeit in der Wandnähe die zu der Oberfläche aufsteigen.

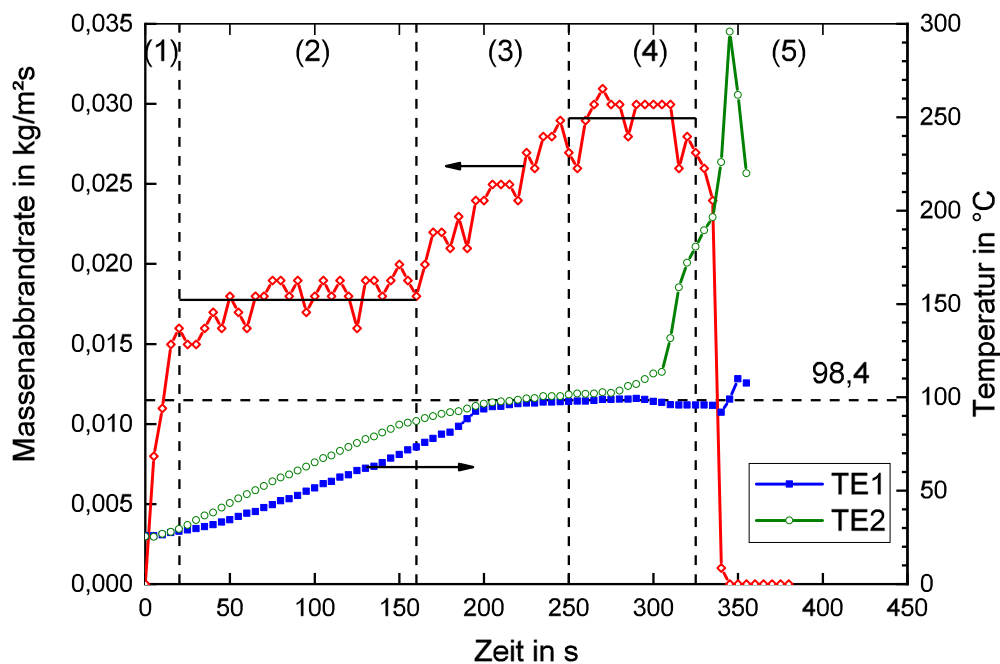


Abbildung 5.1: Gemessene Massenabbrandraten und Temperaturverlauf des n-Heptan-Poolfeuers mit Thermoelementen. Phaseinteilungen: 1) Startphase; 2) Erwärmungsphase; 3) Transitionsphase; 4) Siedephase; 5) Abklingphase. TE1 = Thermoelement Mitte; TE2 = Thermoelement Wandnähe

4. *Siedephase*: Die Endtemperatur ist im gesamten Fluid erreicht und es bilden sich Blasen im gesamten Pool. Die Massenabbrandrate erreicht dabei einen Maximalwert.
5. *Abklingphase*: In dieser Phase ist bereits der Großteil der Flüssigkeit verdunstet. Die Abbrandrate verringert sich und die Flamme erlischt am Ende dieser Phase.

Aus Beobachtungen der experimentellen Versuche können demzufolge zwei Ursachen für den Verlauf der Massenabbrandrate ausfindig gemacht werden: Der Temperaturanstieg innerhalb des flüssigen Brennstoffs und das Auftreten von Blasensieden.

Die Siedetemperatur wird an der Brennstoffoberfläche am Ende der Startphase zügig erreicht, die Temperatur der Flüssigkeit unterhalb der Brennstoffoberfläche steigt ebenfalls mit der Zeit an und die gesamte Brennstoffflüssigkeit erreicht die Siedetemperatur am Anfang der Siedephase. Nach Erreichen der Siedetemperatur wird keine Energie zur Erwärmung der Flüssigkeit mehr benötigt und es kann mehr Brennstoff verdunsten. Demzufolge steigt die Massenabbrandrate.

Die Bildung von Blasen ist ein Indikator für Blasensieden, welches eintritt, wenn eine ausreichende Überhitzung zwischen Oberfläche und Flüssigkeit vorliegt [Fischo. 07]. Beim Auftreten von Blasensieden hat die Brennstoffflüssigkeit bereits die Siedetemperatur erreicht, während gleichzeitig die Wand eine Temperatur über der Siedetemperatur der Flüssigkeit besitzt. Unter dieser Bedingung entstehen Blasen, welche eine Steigung der Verdampfungs- und Massenabbrandrate bewirken. Die Temperaturverläufe zeigen, dass in der Erwärmungsphase die Temperatur in der Nähe der Wand um ca. 10 K höher ist als in der Mitte der Flüssigkeit.

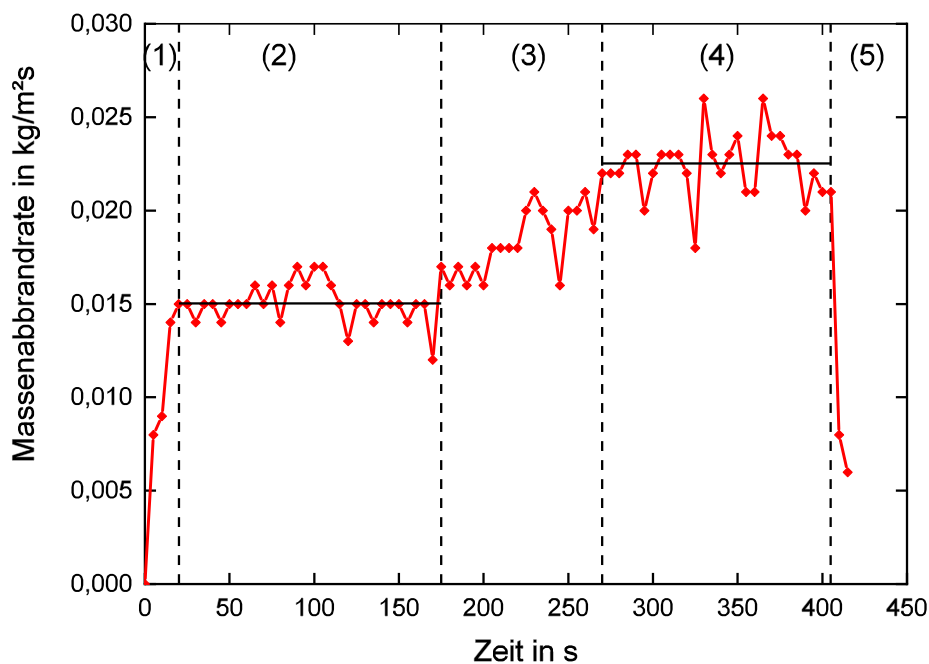


Abbildung 5.2: Gemessene Massenabbrandraten des n-Heptan-Poolfeuers ohne Thermoelemente. Phaseinteilungen: 1) Startphase; 2) Erwärmungsphase; 3) Transitionsphase; 4) Siedephase; 5) Abklingphase

Die Thermoelemente zur Messung der Temperaturen wurden berührungsfrei von oben in die Brennstoffflüssigkeit eingebracht, um einen Einfluss auf die Massenmessung zu vermeiden. Ein möglicher Einfluss bleibt jedoch durch die Wärmeleitung von der Flamme durch die Thermoelemente bestehen. Der Einfluss wird mit dem Experiment ohne Thermoelement untersucht. Abb. 5.2 zeigt den Massenabbrandratenverlauf für den Versuch ohne Thermoelemente. Insgesamt ergibt sich ohne Thermoelemente eine längere Abbrandzeit von ca. 20 %. Weiterhin wird die Massenabbrandrate in der Erwärmungs- und Siedephase um 17 % bzw. 24 % niedriger gemessen. Da die Thermoelemente die Messergebnisse der Massenabbrandraten in einem nicht zu vernachlässigenden Maß beeinflussen, werden für die folgende Validierung der Modelle die Messergebnisse des Experiments ohne Thermoelemente verwendet.

Tabelle 5.1: Messsergebnisse n-Heptan mit Thermoelementen

#	Phase	Anfang (s)	Ende (s)	Gemittelte Massenabbrandrate (kg/m ² s)	Standard- abweichung (kg/m ² s)
1	Startphase	0	20	-	-
2	Erwärmungsphase	20	160	0,018	0,001
3	Transitionsphase	160	250	-	-
4	Siedephase	250	325	0,029	0,002
5	Abklingphase	325	345	-	-

Tabelle 5.2: Messsergebnisse n-Heptan ohne Thermoelemente

#	Phase	Anfang (s)	Ende (s)	Gemittelte Massenabbrandrate (kg/m ² s)	Standard- abweichung (kg/m ² s)
1	Startphase	0	20	-	-
2	Erwärmungsphase	20	175	0,015	0,001
3	Transitionsphase	175	270	-	-
4	Siedephase	270	405	0,022	0,002
5	Abklingphase	405	415	-	-

Die Zahlenwerte der zeitlichen Phasenverläufe, bestehend aus Anfang- und Endzeit, gemittelter Massenabbrandrate und Standardabweichung sind in Tabelle 5.1 und Tabelle 5.2 für Untersuchungen mit bzw. ohne Thermoelemente aufgelistet. Die Werte der Massenabbrandraten des Experiments ohne Thermoelemente stimmen gut mit den Experimenten von Hayasaka [Hayasa. 97] überein, welcher die Massenabbrandrate von n-Heptan mit 0,014 kg/m²s in der Erwärmungsphase und 0,023 kg/m²s in der Siedephase ermittelte. Die Integration des Massenabbrandratenverlaufs mit bzw. ohne Thermoelemente ergibt dabei 14,75 g bzw. 14,84 g, welches einer Differenz von 2,1 % bzw. 1,5 % zur berechneten Masse von 15,07 g entspricht. Die Unterschiede zum berechneten Wert werden möglicherweise durch Abweichungen der Startmasse im Experiment verursacht.

Um die Reproduzierbarkeit der Messergebnisse zu untersuchen, wurden drei Versuche durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abb. 5.3 und die Zahlenwerte in Tabelle 5.3 dargestellt. Die Massenabbrandrate für die Erwärmungs- und Siedephase entspricht für alle drei Experimente den gemittelten Werten zwischen 20 - 175 s bzw. 270 - 405 s (375 s bei Exp. 2). Der Vergleich der Werte zeigt, dass die gemessenen Werte Schwankungen in der Größenordnung von ca. 10 % besitzen.

Tabelle 5.3: Massenabbrandraten für drei Versuche von n-Heptan Poolfeuern ohne Thermoelemente

Exp.	Erwärmungsphase		Siedephase	
	Massenabbrandrate (kg/m ² s)	Differenz zu Exp. 1 (%)	Massenabbrandrate (kg/m ² s)	Differenz zu Exp. 1 (%)
1	0,015		0,022	
2	0,016	5,9	0,025	11,4
3	0,016	8,5	0,026	13,8

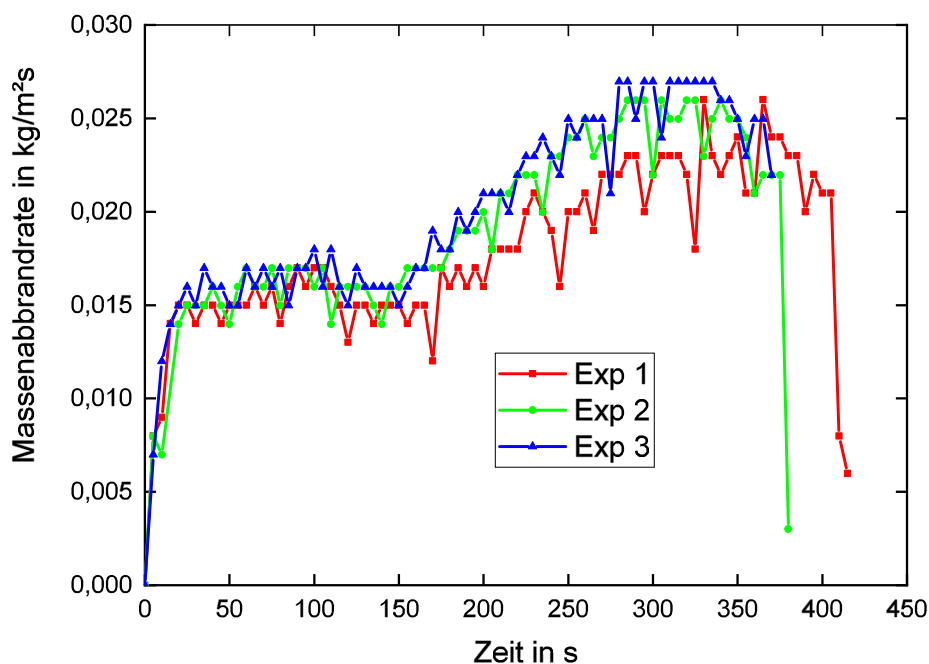


Abbildung 5.3: Drei Messungen von Massenabbrandraten des n-Heptan Poolfeuers ohne Thermoelemente

5.2 Ethanol

In den Abb. 5.4 und 5.5 ist der gemessene Massenverdunstungsverlauf von Ethanol im Poolfeuer mit bzw. ohne Thermoelemente abgebildet. In den Tabellen 5.4 und 5.5 sind die Ergebnisse der zeitlichen Phasenverläufe aufgelistet. Weiterhin ergibt sich durch die Integration des Massenabbrandratenverlaufs mit und ohne Thermoelemente eine verbrannte Masse von 17,09 g bzw. 16,82 g, welches einer Differenz von 1,7 % bzw. 3,2 % zum berechneten Wert von 17,38 g entspricht.

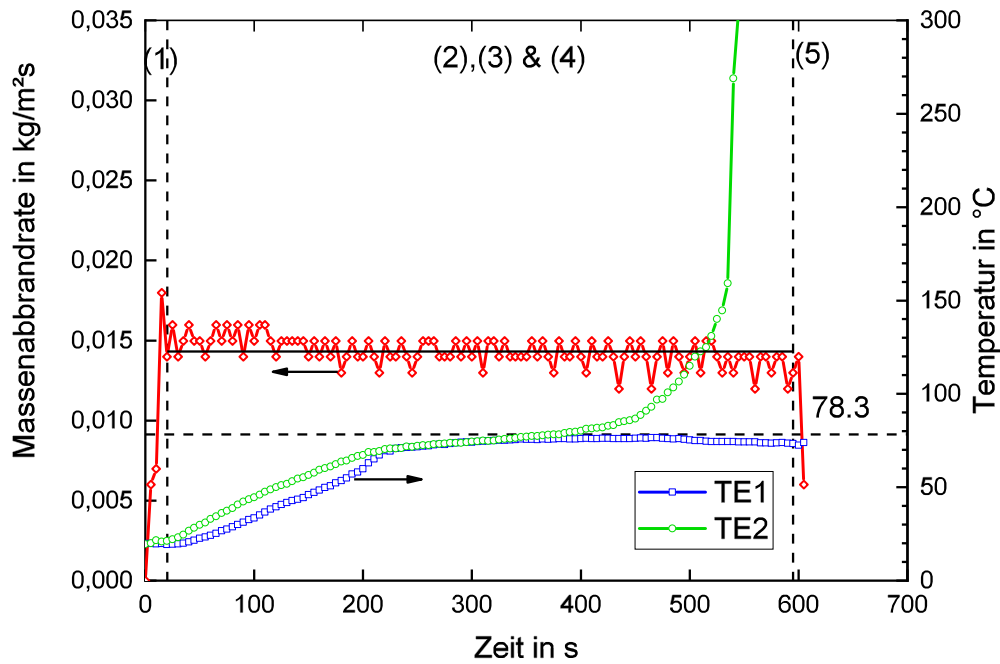


Abbildung 5.4: Gemessene Massenabbrandraten des Ethanol Poolfeuers mit Thermoelementen. Phaseinteilungen: 1) Startphase; 2) Erwärmungsphase; 3) Transitionsphase; 4) Siedephase; 5) Abklingphase. TE1 = Thermoelement Mitte; TE2 = Thermoelement in Wandnähe

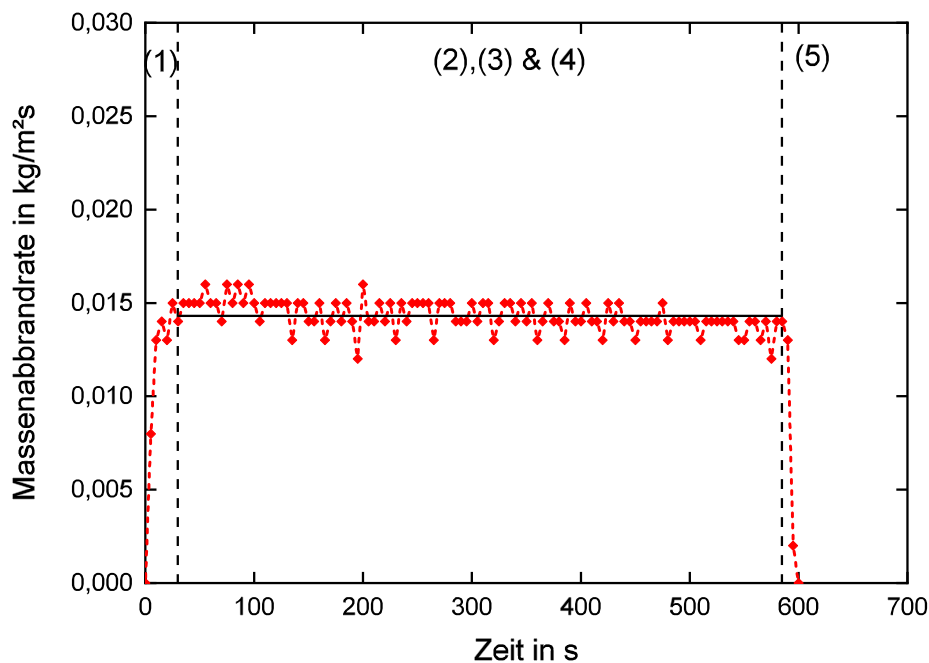


Abbildung 5.5: Gemessene Massenabbrandraten des Ethanol Poolfeuers ohne Thermoelemente. Phaseinteilungen: 1) Startphase; 2) Erwärmungsphase; 3) Transitionsphase; 4) Siedephase; 5) Abklingphase

Tabelle 5.4: Messsergebnisse des Ethanol-Poolfeuers mit Thermoelementen

#	Phase	Anfang (s)	Ende (s)	Gemittelte Massenabbrandrate (kg/m ² s)	Standard- abweichung (kg/m ² s)
1	Startphase	0	20	-	-
2,3,4	Erwärmungsphase, Transitionsphase und Siedephase	20	595	0,014	0,001
5	Abklingphase	595	605	-	-

Tabelle 5.5: Messsergebnisse des Ethanol-Poolfeuers ohne Thermoelemente

#	Phase	Anfang (s)	Ende (s)	Gemittelte Massenabbrandrate (kg/m ² s)	Standard- abweichung (kg/m ² s)
1	Startphase	0	30	-	-
2,3,4	Erwärmungsphase Transitionsphase und Siedephase	30	585	0,014	0,001
5	Abklingphase	585	600	-	-

Anders als beim n-Heptan Poolfeuer ist im Massenverdunstungsverlauf keine Unterscheidung zwischen der Erwärmungs-, Transitions- und Siedephase zu erkennen. Die Erklärung hierfür wird von Hayasaka [Hayasa. 97] analog zu Methanol geliefert. Ethanol besitzt eine Verdunstungsenthalpie welche 2,6 Mal höher ist als von n-Heptan. Das Verhältnis der benötigten Energie für die Aufwärmung der Flüssigkeit zur Verdunstungsenthalpie ist daher für Ethanol kleiner als für n-Heptan. Die Aufwärmung der Flüssigkeit in der Erwärmungsphase hat demzufolge für Ethanol im Vergleich zu n-Heptan einen geringeren Einfluss auf die Massenverdunstungsrate.

Der Vergleich der gemittelten Massenabbrandraten mit und ohne Thermoelement ergibt gleiche Werte. Dies ist ebenfalls darauf zurückzuführen, dass die zusätzliche Wärmeleitung der Thermoelemente relativ klein zu der Verdunstungsenthalpie ist und demzufolge einen relativ geringen Einfluss auf die Massenabbrandrate hat.

5.3 Mischung Ethanol und n-Heptan

Die gemessenen Massenabbrandraten der Poolfeuer mit verschiedenen Brennstoffmischungen von Ethanol und n-Heptan in verschiedenen Verhältnissen sowie Temperaturmessungen

in der Mitte des Pools sind in Abb. 5.6 dargestellt. Die Zusammensetzung der verwendeten Mischungen sind in Tabelle 5.6 angegeben. In Abb. 5.7 sind die gemessenen Massenabbrandraten der Versuche ohne Thermoelemente dargestellt. Die Thermoelemente beeinflussen die Abbrandzeit um weniger als 10 %, wohingegen die Werte der erreichten Massenabbrandraten kaum beeinflusst werden.

Das Verhalten der Mischung Ethanol und n-Heptan weicht von einer idealen Mischung ab und bildet ein sogenanntes azeotropes Gemisch. Das Verhalten des Gemischs weicht demzufolge von dem Raoult'schen Gesetz ab. Der azeotrope Punkt hat bei einem Ethanol-n-Heptan Gemisch die Zusammensetzung Ethanol zu n-Heptan von 0,49 zu 0,51 Massenanteil [Dean 99] (siehe Tabelle 5.6) und einen Siedepunkt von 70,9 °C. Der Siedepunkt der Azeotrope liegt unterhalb der Siedetemperatur der beiden Komponenten Ethanol und n-Heptan von 78,3 °C bzw. 98,4 °C [Daubert 89].

Tabelle 5.6: Zusammensetzung der Mischungen Ethanol-n-Heptan

Mischung	Vol.- %		Massenanteil		Stoffmengenanteil	
	Ethanol	n-Heptan	Ethanol	n-Heptan	Ethanol	n-Heptan
1	20	80	0,22	0,78	0,39	0,61
2	40	60	0,43	0,57	0,63	0,37
3	60	40	0,63	0,37	0,79	0,21
4	80	20	0,82	0,18	0,91	0,09
Azeotrop	45	55	0,49	0,51	0,68	0,32

Das Siedediagramm für ein Ethanol-n-Heptan Gemisch ist in Abb. 5.8 dargestellt. Die Stoffmengenanteile der verwendeten Mischungen sind dabei als vertikale Linie eingezeichnet. Die Mischung 1 befindet sich links von der Azeotropen, wohingegen sich die Mischungen 3 und 4 rechts von der Azeotropen befinden. Mischung 2 liegt nahe am azeotropen Punkt.

Zur Feststellung der Zusammensetzung der Dampfphase beim Erreichen der Siedetemperatur an der Brennstoffoberfläche wird in Abb. 5.8 ein Schnittpunkt zwischen der vertikalen Linie der Zusammensetzung mit der unteren Kurve gebildet. Vom diesen Schnittpunkt wird eine horizontale Gerade gebildet, welche die obere Kurve schneidet und die Zusammensetzung des Dampfes darstellt. Als Beispiel wird für die Zusammensetzung B1 (Stoffmengenanteil Ethanol 0,25) die Zusammensetzung des Dampfes mit dem Stoffmengenanteil Ethanol von 0,6 ermittelt. Als weiteres Beispiel für den höherem n-Heptan-Anteil B2 (Stoffmengenanteil Ethanol 0,05) ergibt sich eine Zusammensetzung des Dampfes mit den Stoffmengenanteil Ethanol von 0,5.

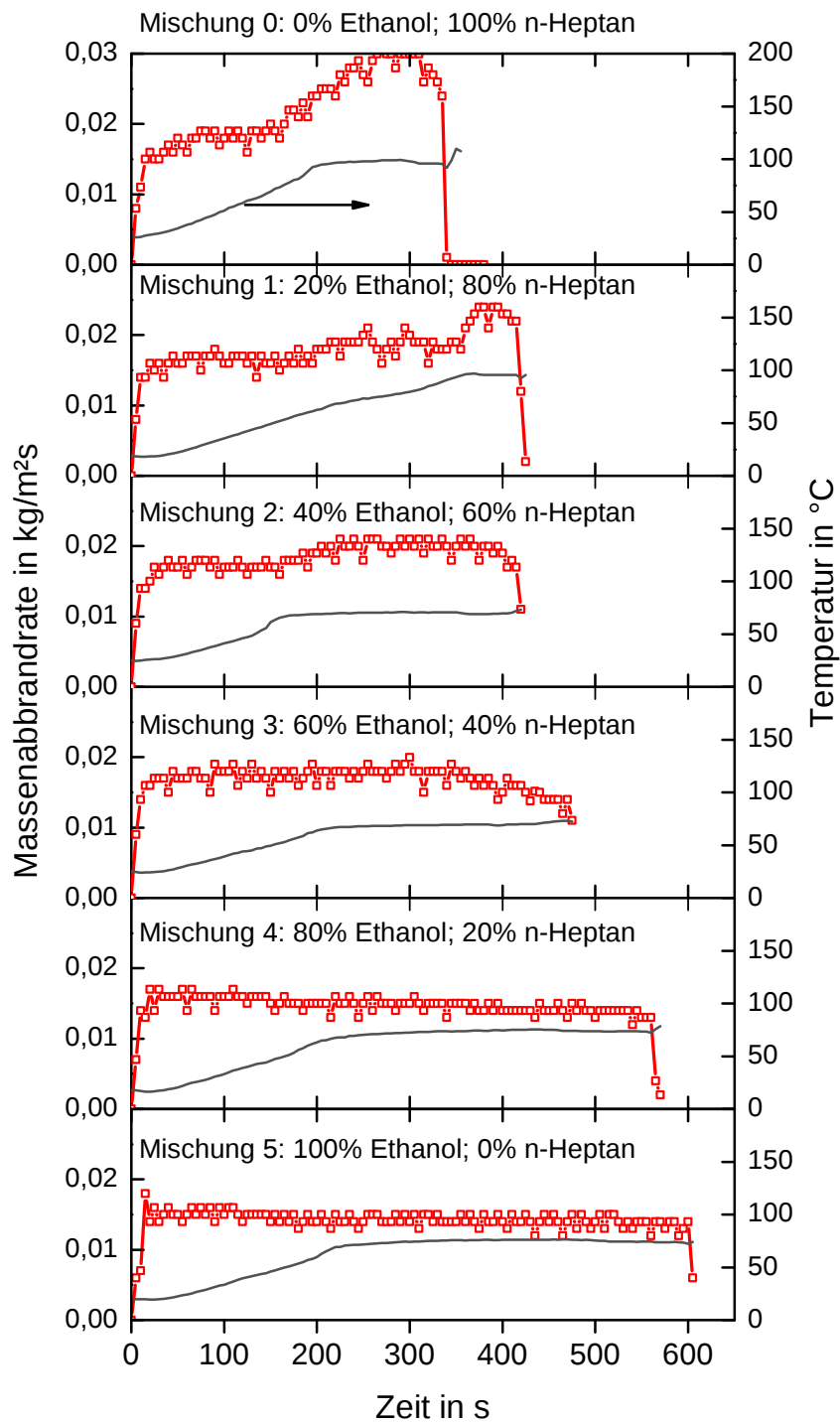


Abbildung 5.6: Gemessene Massenabbrandraten (rot) und Temperaturen (schwarz) von Poolfeuern mit der Brennstoffmischung Ethanol und n-Heptan mit Thermoelementen. Die prozentualen Angaben der Mischungen beziehen sich auf das Volumen

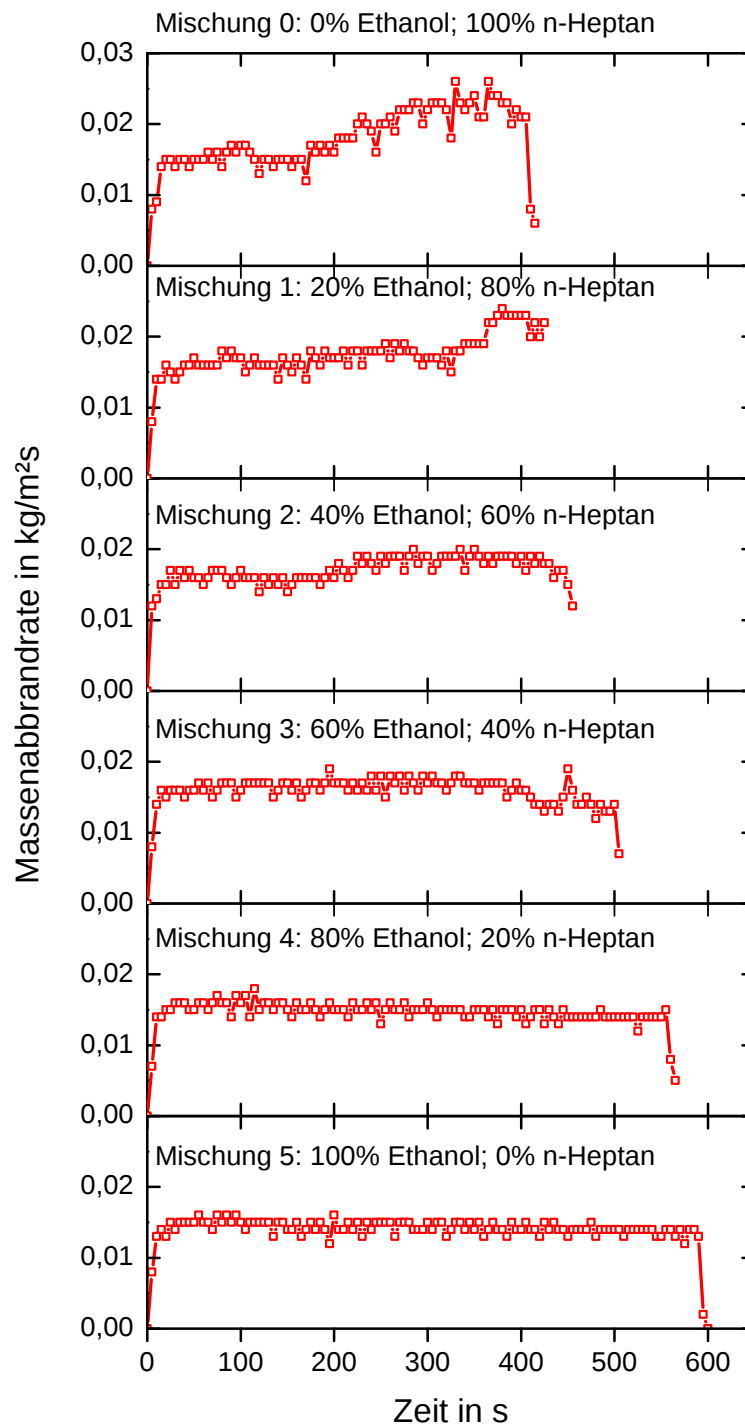


Abbildung 5.7: Gemessene Massenabbrandraten von Poolfeuern mit der Brennstoffmischung Ethanol und n-Heptan ohne Thermoelemente. Die prozentualen Angaben der Mischungen beziehen sich auf das Volumen

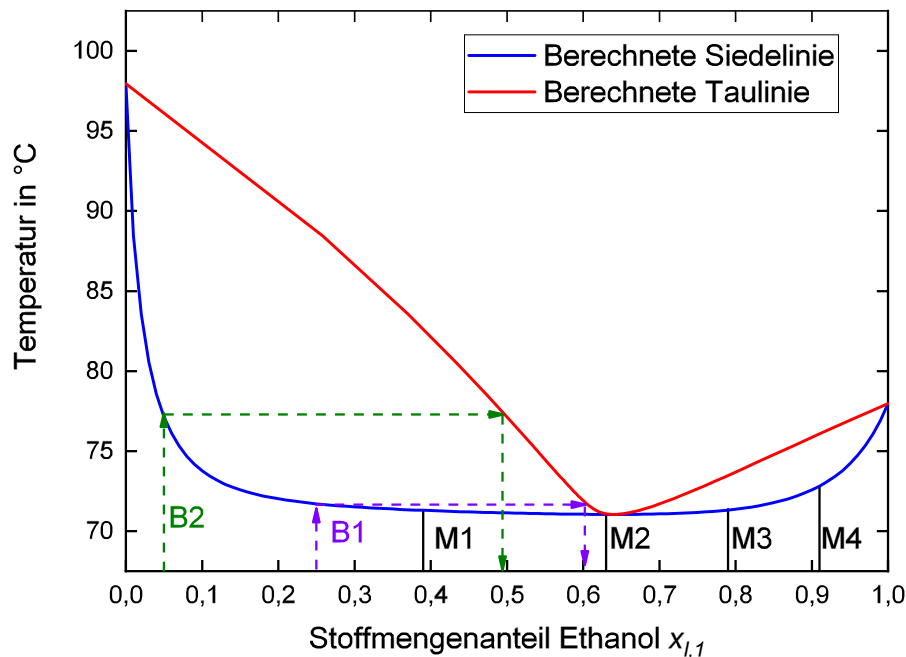


Abbildung 5.8: Siedediagramm für Ethanol-n-Heptan Mischung bei 1 atm. Die Mischungen 1 bis 4 sind auf der Linie M1-M4 eingezeichnet. Die gestrichelten Linien B1 und B2 zeigen Beispiele zur Feststellung der Zusammensetzung der Dampfphase.

Die Zusammensetzung der Dampf- und Flüssigkeitsphase der Mischungen während des Verbrennungsvorgangs ergibt sich wie folgt:

- Die Zusammensetzung der Mischung 1 liegt links von der Azeotrope. Aus dem Siedediagramm kann festgestellt werden, dass der Dampf gegenüber der flüssigen Phase mit Ethanol angereichert ist und die Zusammensetzung der Azeotrope annimmt. Die Zusammensetzung der verbleibenden Flüssigkeit verschiebt sich nach Abzug des Dampfes zu einer höheren Konzentration von n-Heptan. Mit fortschreitender Verbrennung wird der Ethanol-Anteil in der Flüssigkeit aufgebraucht, bis nur noch n-Heptan verbleibt.
- Die Mischung 2 hat näherungsweise die Zusammensetzung der Azeotrope. Demzufolge ist die Zusammensetzung von Dampf und Flüssigkeit gleich und verbleibt mit der selben Zusammensetzung bis zum Ende des Verbrennungsvorgangs.
- Die Zusammensetzung der Mischung 3 liegt rechts von der Azeotrope. Der Dampf ist gegenüber der flüssigen Phase mit n-Heptan angereichert und nimmt die Zusammensetzung der Azeotrope an. Die Zusammensetzung der verbleibenden Flüssigkeit verschiebt sich zur höheren Konzentration von Ethanol. Während des Verlaufs der Verbrennung wird der n-Heptan-Anteil in der Flüssigkeit aufgebraucht bis nur noch Ethanol übrig bleibt.

- Die Zusammensetzung der Mischung 4 liegt weiter rechts von der Azeotrope und verläuft ähnlich wie bei der Mischung 3. Die Zusammensetzung des Dampfes liegt jedoch rechts von der Azeotrope und ist demzufolge gegenüber der Azeotrope mit Ethanol angereichert. Im Laufe der Verbrennung wird ebenfalls n-Heptan aufgebraucht, bis nur noch Ethanol in der flüssigen Phase übrig bleibt.

Das Siedeverhalten der Mischungen kann verwendet werden, um den Verlauf der Massenabbrandrate im Falle von Poolfeuern zu analysieren. Mit der Kenntniss der Dampfzusammensetzung kann der Zeitpunkt berechnet werden, wann die Komponente mit kleinerer Masse aufgebraucht ist. Nach diesem Zeitpunkt verbleibt dann nur noch die zweite Komponente als Reinstoff. Da die Kurve der Siedetemperatur der Flüssigkeit im Siedediagramm für den Großteil der Stoffmengenzusammensetzung flach verläuft, wird zur Abschätzung des Zeitpunkts angenommen, dass vor diesem Zeitpunkt der Brennstoff nach der Zusammensetzung der Azeotrope verdampft.

Die gemessenen Massenabbrandraten der Poolfeuer mit Mischungen als Brennstoff sind in Abb. 5.9 dargestellt. Zum Vergleich sind die Massenabbrandraten der n-Heptan und Ethanol Poolfeuer ebenfalls eingezeichnet. Der berechnete Zeitpunkt, in welchem die erste Komponente aufgebraucht ist, wird mit einer vertikalen Linie gekennzeichnet.

Die Mischung 1 verbrennt am Anfang zunächst mit der Massenabbrandrate der Azeotrope, welche eine ähnliche Massenabbrandrate wie der von reinem Ethanol besitzt. Ethanol wird laut Berechnung in der Mischung nach ca. 210 s aufgebraucht. Danach verbleibt nur n-Heptan in der Flüssigkeit. Ab diesem Zeitpunkt entspricht die Massenabbrandrate dem Wert von n-Heptan in der Erwärmungsphase. Die gemessene Temperatur der Mischung 1 in Abb. 5.6 zeigt zudem, dass die Temperaturen über den Siedepunkt der Azeotrope steigen. Ab ca. 365 s steigt die Massenabbrandrate auf den Wert der Siedephase von n-Heptan während die Temperatur in der Mischung die Siedetemperatur von n-Heptan erreicht.

Die Zusammensetzung von Mischung 2 liegt nahe an der Azeotrope. Demzufolge verbrennt die Mischung größtenteils mit der Massenabbrandrate der Azeotrope. Die Siedetemperatur der Azeotrope wird dabei in Mischung 2 in Abb. 5.6 nach ca. 160 s erreicht. Es kann dabei beobachtet werden, dass der Massenabbrandratenverlauf der Azeotrope, ähnlich wie bei n-Heptan, eine Erwärmungs-, Transient- und Siedephase durchläuft. Nach 390 s ist laut Berechnung das Ethanol aufgebraucht. Die Massenabbrandrate des übriggebliebenen n-Heptans fällt schnell ab, da diese sich bereits in der Abkühlungsphase befindet.

In der Mischung 3 befindet sich mehr Ethanol als n-Heptan und demzufolge wird n-Heptan als erstes verbraucht sein. Am Anfang verbrennt die Mischung mit der Massenabbrandrate

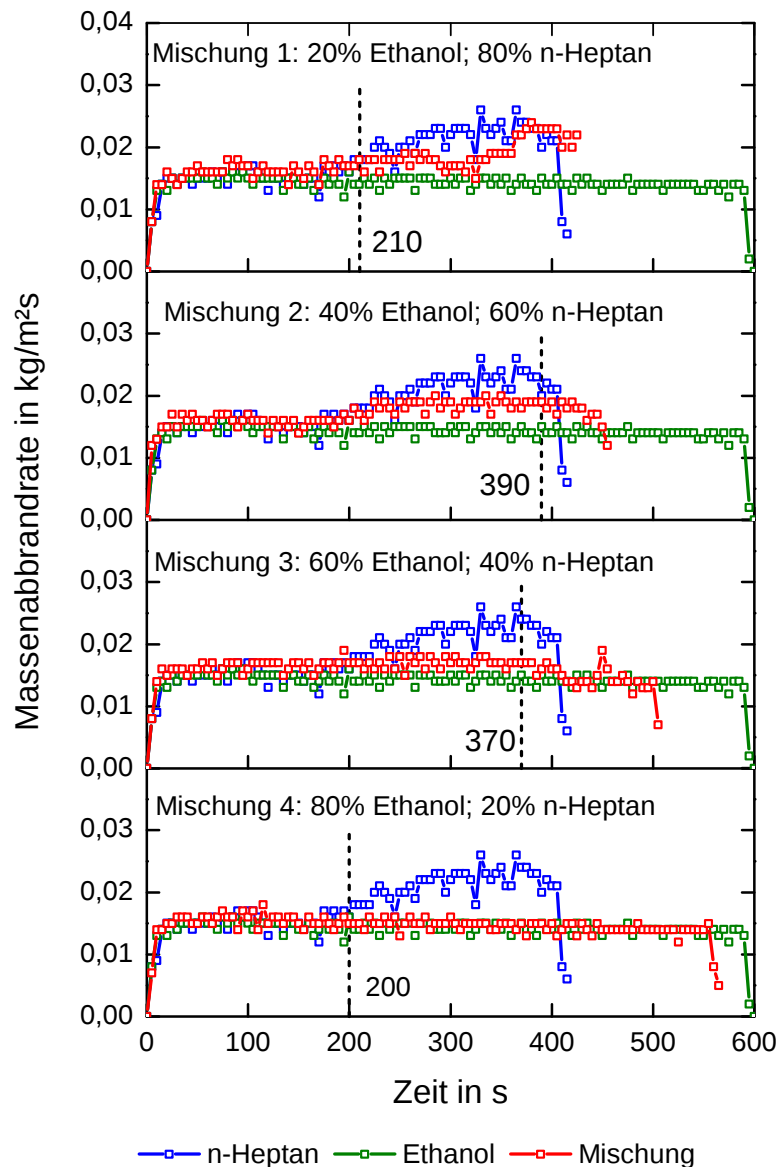


Abbildung 5.9: Gemessene Massenabbrandrate von Poolfeuern mit der Brennstoffmischung Ethanol und n-Heptan ohne Thermoelemente. Massenabbrandraten von reinen n-Heptan und Ethanol Poolfeuern sind zum Vergleich eingezeichnet. Die vertikalen Linien stellen den Zeitpunkt dar, wo die Komponenten Ethanol (Mischung 1 und 2) bzw. n-Heptan (Mischung 3 und 4) aufgebraucht sind. Prozentuale Angaben der Mischungen beziehen sich auf das Volumen.

der Azeotrope. Eine Steigung der Massenabbrandrate wie in Mischung 2 wird jedoch nicht beobachtet. Die Siedephase der Azeotrope tritt nur bei einer Ausgangszusammensetzung, die nahe an der Azeotrope liegt, auf. Laut Berechnung ist nach 370 s das n-Heptan aufgebraucht und die Massenabbrandrate sinkt auf dem Wert von reinem Ethanol.

Für die Mischung 4 wird n-Heptan laut Abschätzung bereits nach 200 s aufgebraucht sein. Der Rest des Massenabbrandratenverlaufs entspricht dem von reinem Ethanol.

5.4 Heizöl

Die gemessene Massenabbrandraten vom Heizöl EL Poolfeuern mit und ohne Temperaturmessung sind in den Abb. 5.10 bzw. 5.11 dargestellt. Der Massenabbrandratenverlauf bleibt bei Vorhandensein von Thermoelementen qualitativ gleich. Die Verbrennungszeit verlängert sich ohne Thermoelemente von 1100 s auf 1200 s. Der Massenabbrandratenverlauf steigt am Anfang auf den Wert von $0,009 \text{ kg/m}^2 \text{ s}$ und sinkt während des Verbrennungsvorgangs stufenweise. Das stufenweise Verhalten kann dabei auf die Messauflösung der Waage zurückgeführt werden. Die Temperatur innerhalb der Flüssigkeit steigt dagegen stetig. Nach ca. 790 s ist in Abb. 5.10 ein Sprung im Temperaturverlauf zu beobachten. Dieser Sprung markiert den Zeitpunkt, bei dem das Thermoelement über der Flüssigkeitsoberfläche steht. Somit wird nicht mehr die Temperatur der Flüssigkeit sondern die Temperatur der Gasphase oberhalb der Flüssigkeit gemessen. Die Integration des Massenabbrandratenverlaufs mit und ohne Thermoelemente ergibt eine verbrannte Masse von $15,77 \text{ g}$ bzw. $15,57 \text{ g}$.

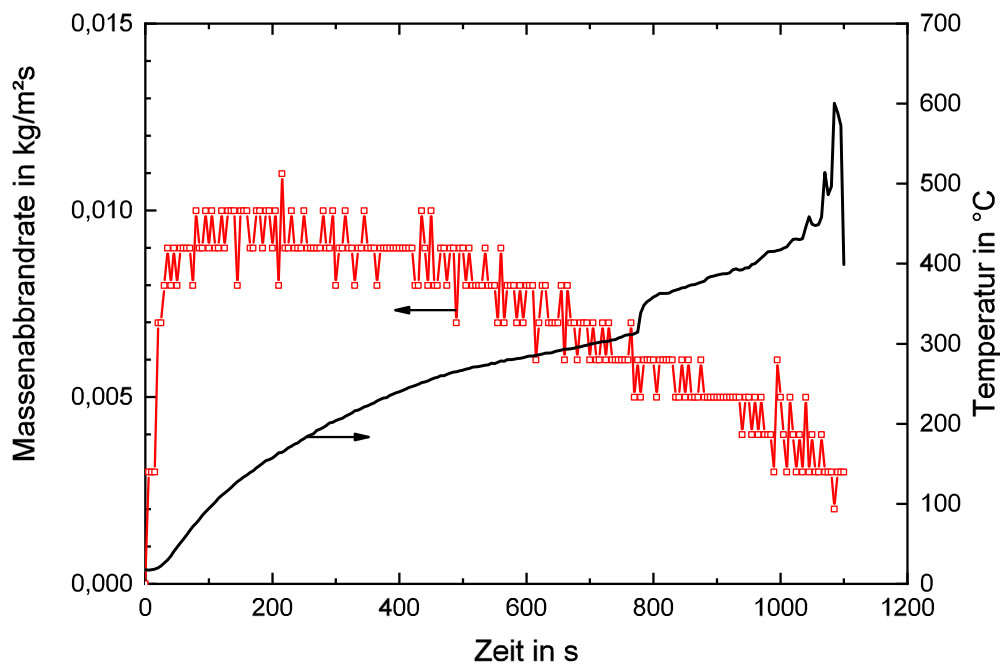


Abbildung 5.10: Gemessene Massenabbrandrate und Temperaturverlauf eines Heizöl Poolfeuers mit Thermoelementen (Referenztiegel mit Innendurchmesser 50,5 mm, Tiegelhöhe innen 11 mm und Wanddicke 0,6 mm).

Heizöl besteht aus mehreren Komponenten (Mehrkomponentenbrennstoff) in Form von Kohlenwasserstoffen, welche das Verbrennungsverhalten beeinflussen. Kohlenwasserstoffe zeigen dabei eine steigende Siedetemperatur und eine sinkende Massenabbrandrate mit größer werdender molarer Masse [VanGel. 17]. Diese beiden Eigenschaften sind in dem Verlauf von

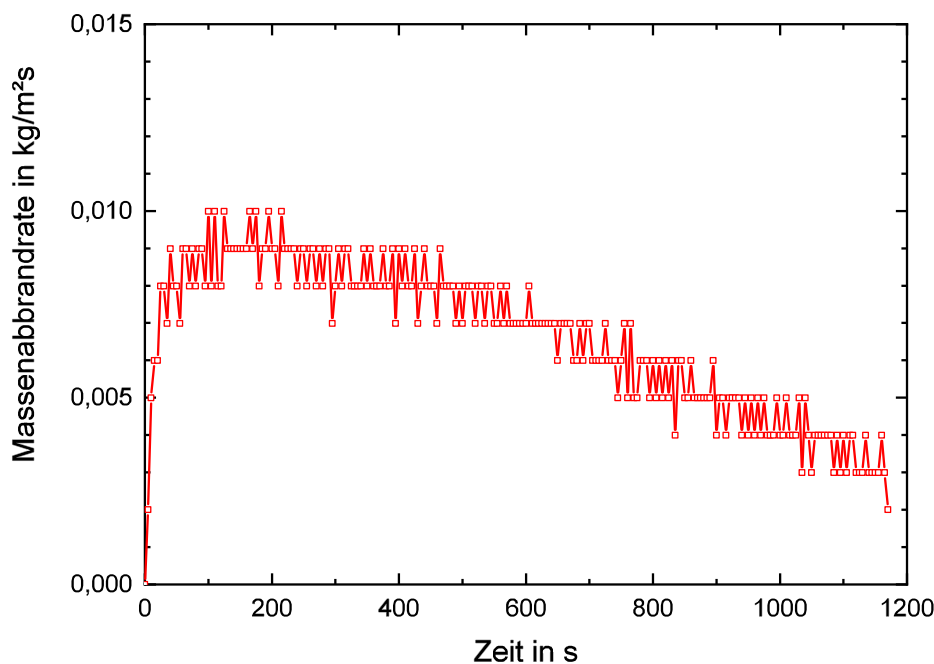


Abbildung 5.11: Gemessene Massenabbrandrate eines Heizöl Poolfeuers ohne Thermoelementen (Referenztiegel mit Innendurchmesser 50,5 mm, Tiegelhöhe innen 11 mm und Wanddicke 0,6 mm).

Massenabbrandrate und Temperatur in den Abb. 5.10 und 5.11 zu sehen. Die Kohlenwasserstoffe mit geringer molarer Masse werden wegen der geringeren Siedetemperatur zuerst verdunstet und geben somit die Massenabbrandrate vor. Wenn diese aufgebraucht sind bestimmt die Komponente mit einer nächsthöheren molaren Masse und Siedetemperatur die Massenabbrandrate. Der Prozess wiederholt sich bis der Brennstoff aufgebraucht ist und die Flamme erlischt.

5.5 Geometrie- und Materialvarianten des Tiegels

Um den Einfluss des Volumens und der Flächengröße des Pools sowie der Wärmeleitung durch die Tiegelwand auf die Massenabbrandrate zu untersuchen, wurden experimentelle Versuche mit der Variation der Geometriegröße und des Tiegelmaterials durchgeführt. Die Geometriedaten sind in Tabelle 4.2 angegeben. Die gemessenen Massenabbrandraten des n-Heptan Poolfeuers bei der Verwendung von Tiegel 1 sind in Abb. 5.12 dargestellt. Die Brennstoffoberfläche entspricht dabei dem 2-fachen und das Volumen dem 4-fachen des Referenztiegels. Die Massenabbrandrate in den ersten 170 Sekunden zeigt einen ähnlichen Verlauf zu dem Referenzfall und beinhaltet die Start- und Erwärmungsphase. Die gemessene Massenabbrandrate beträgt $0,015 \text{ kg/m}^2\text{s}$ und ist somit gleich dem Wert des Referenztiegels in der Erwärmungsphase.

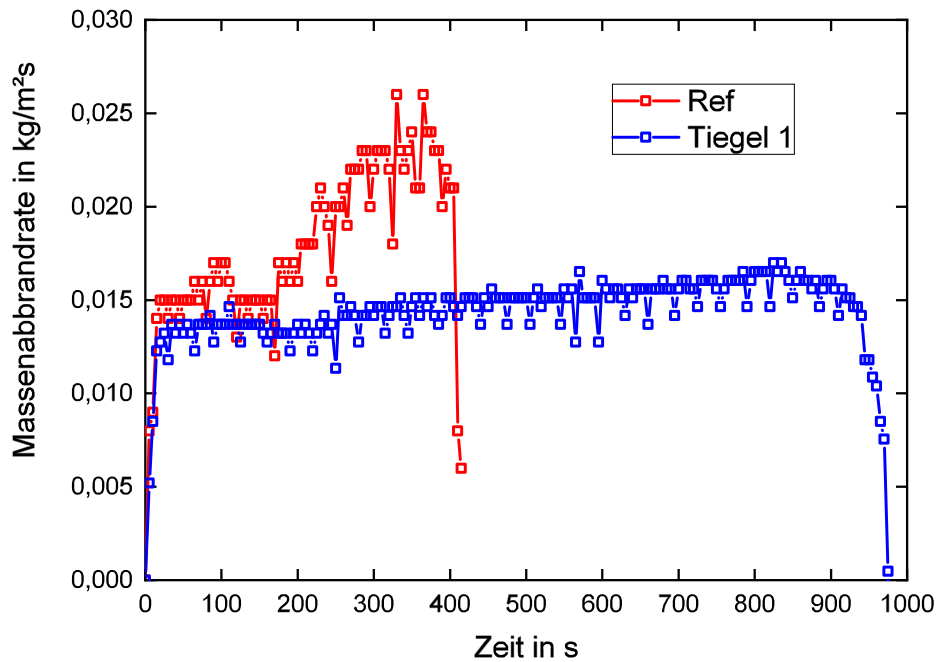


Abbildung 5.12: Verlauf der Massenabbrandrate des n-Heptan-Poolfeuers für den Tiegel 1 ($A/A_{\text{Ref}} = 2,11$; $V/V_{\text{Ref}} = 3,90$)

Die Massenabbrandrate für den Tiegel 1 bleibt relativ konstant bis zum Ende der Verbrennung und die Siedephase, welche an der deutlich steigenden Massenabbrandrate im Referenzfall zu erkennen ist, wird nicht durchfahren. Die Begründung hierfür ist, dass wegen der hohen Brennstoffmenge im Tiegel 1 im Vergleich zum Referenzfall diese noch nicht vollständig auf Siedetemperatur erwärmt ist. Die Siedephase bleibt aus, da bis zum Ende der Verbrennung ein Teil der verfügbaren Energie zur Aufwärmung des Brennstoffs verwendet wird. Diese Begründung steht im Einklang mit der Arbeit von Chen [Chen 11], in welcher die Siedephase mit erhöhten Massenabbrandraten ausblieb, wenn noch Temperaturgradienten innerhalb des flüssigen Brennstoffs bis zum Ende der Verbrennung existieren, wohingegen beim Erreichen einer einheitlichen Temperatur die Siedephase auftritt.

In den Abb. 5.13 und 5.14 sind die Verläufe der Massenabbrandraten der Tiegel 2 und Tiegel 3 dargestellt. Wie bereits beim Tiegel 1 beobachtet bleiben auch bei den Tiegeln 2 und 3 die Siedephasen aus. Weiterhin stimmt der Endwert der Massenabbrandrate überein mit dem des Tiegels 1. Beim Tiegel 2 ist ein niedrigerer Startwert der Massenabbrandrate zu beobachten, welche stetig steigt und nach ca. 450 Sekunden den Wert von $0,015 \text{ kg/m}^2\text{s}$ erreicht. Der Startwert der Massenabbrandrate des Tiegels 3 ist nochmals niedriger im Vergleich zum Tiegel 2 und erreicht nach ca. 400 Sekunden einen Wert von $0,015 \text{ kg/m}^2\text{s}$.

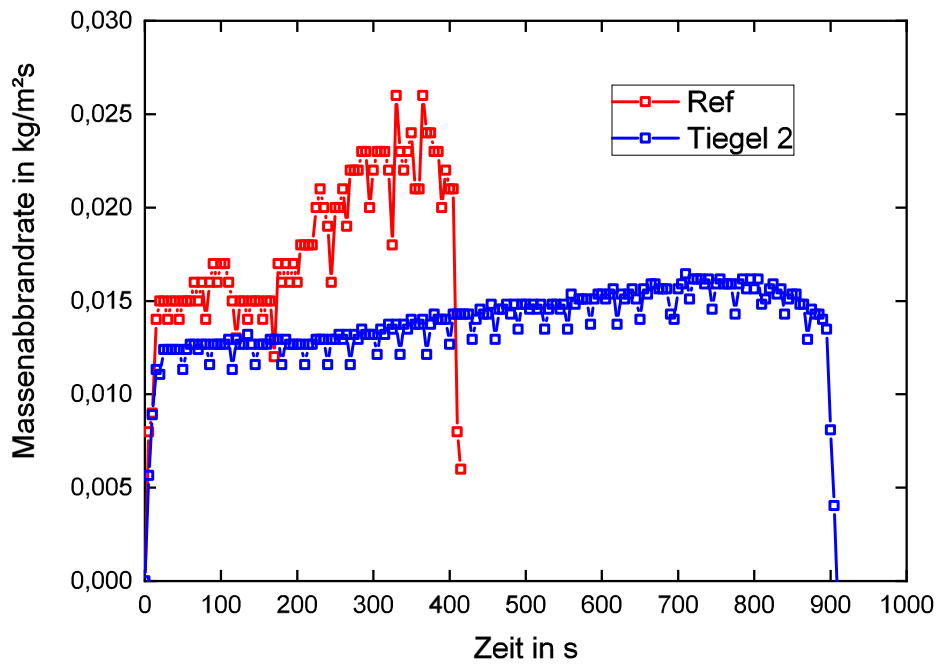


Abbildung 5.13: Verlauf der Massenabbrandrate des n-Heptan-Poolfeuers für den Tiegel 2 ($A/A_{\text{Ref}} = 3,70$; $V/V_{\text{Ref}} = 6,16$)

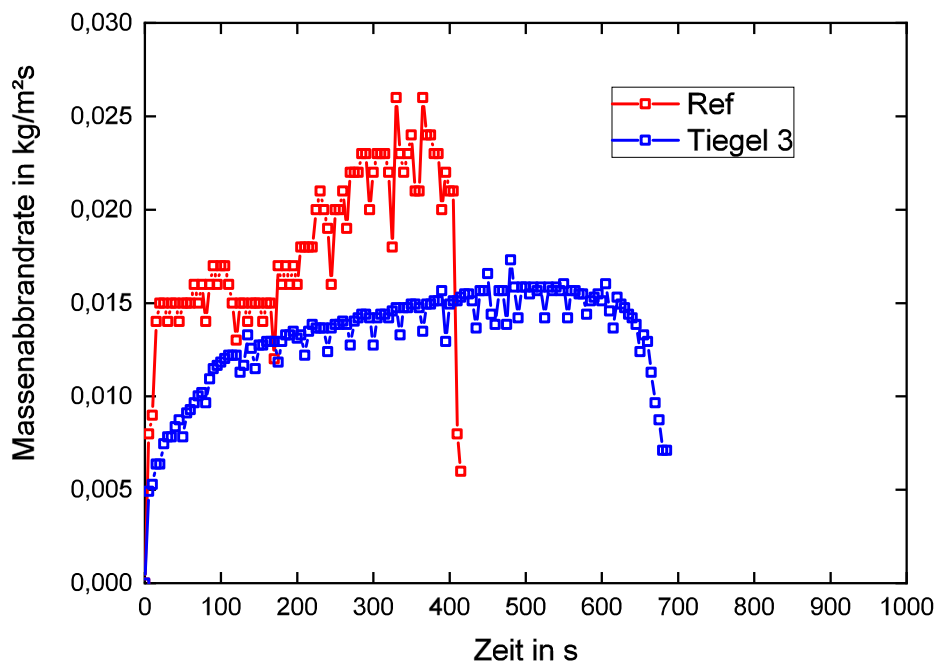


Abbildung 5.14: Verlauf der Massenabbrandrate des n-Heptan-Poolfeuer für den Tiegel 3 ($A/A_{\text{Ref}} = 5,48$; $V/V_{\text{Ref}} = 10,16$)

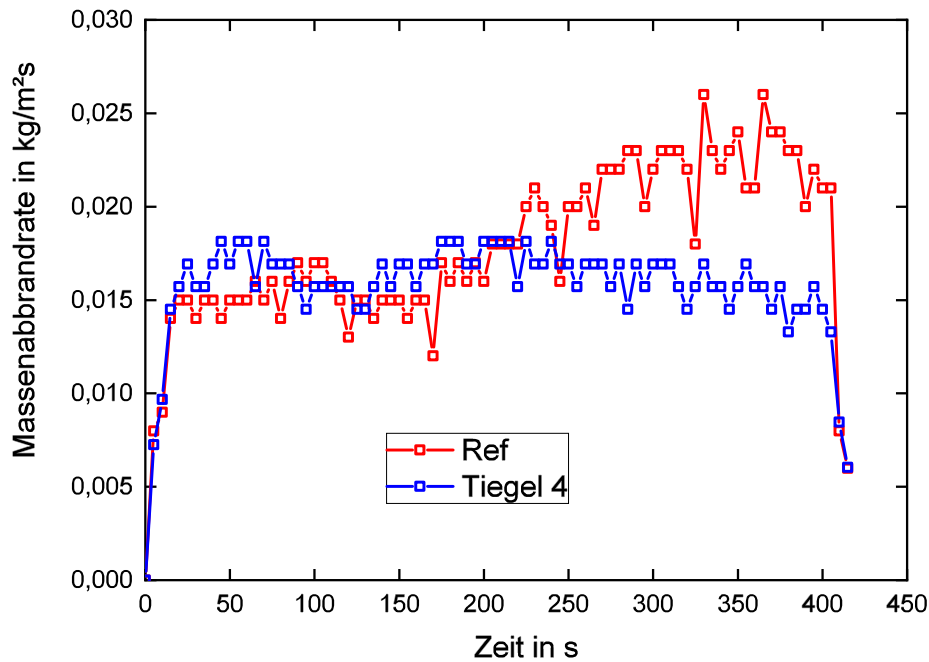


Abbildung 5.15: Verlauf der Massenabbrandrate des n-Heptan-Poolfeuers für den Tiegel 4 aus Glas ($A/A_{\text{Ref}} = 0,83$; $V/V_{\text{Ref}} = 0,72$)

Die Höhe des Endwertes der Massenabbrandrate ist für alle drei Tiegel vergleichbar. Demzufolge sind die Unterschiede in den Verläufen der Massenabbrandraten auf die unterschiedliche offene Flächengröße des Brennstoffs zurückzuführen. Die Steigung in der Startphase sinkt mit größerer Fläche, jedoch sind die erreichten Endwerte der Massenabbrandraten trotz unterschiedlicher Fläche gleich. Die Höhe der Massenabbrandrate von n-Heptan Poolfeuern in der Erwärmungsphase ist demzufolge als Stoffwert zuzuordnen und unabhängig von der Flächengröße.

Abb. 5.15 zeigt den Verlauf der Massenabbrandraten von n-Heptan Poolfeuern mit dem Tiegel 4, welcher aus Quarzglas besteht. Die Geometrie des Tiegels 4 ist dabei vergleichbar mit dem Referenztiegel. Es kann beobachtet werden, dass durch die Verwendung von Quarzglas die Siedephase nicht auftritt. Die Start- und Erwärmungsphase ist gleich der Referenzgeometrie. Wie bereits für die Tiegel 1 bis 3 festgestellt wurde, tritt dieser Fall auf, da noch ein Temperaturgradient innerhalb des Brennstoffs existiert. Die Schlussfolgerung hierfür ist, dass die hohe Wärmeleitung von Stahl die Erwärmung des Brennstoffs fördert und bei der Verwendung eines niedriger wärmeleitendem Materials wie Glas die Siedetemperatur später erreicht wird.

6 Berechnete Ergebnisse

In Kapitel 3 wurde das entwickelte Verdunstungsmodell vorgestellt. Das Modell ermöglicht die Vorausberechnung des Massenabbrandratenverlaufs von Poolfeuern. Zur Validierung des Verdunstungsmodells werden die Simulationsergebnisse mit den experimentell ermittelten Ergebnissen aus Kapitel 5 verglichen. Weiterhin werden Sensitivitätsanalysen der Parametern durchgeführt, um deren Einflüsse auf die Ergebnisse im Modell und Experiment zu untersuchen.

6.1 Ergebnisse Einzelkomponenten

Der zeitliche Verlauf der Massenabbrandrate des Modells und der Messungen ist in Abb. 6.1 dargestellt. Die schwarze Linie entspricht dabei der berechneten Massenabbrandrate. Die rote gestrichelte Linie mit Symbolen stellt die experimentell ermittelte Massenabbrandrate dar.

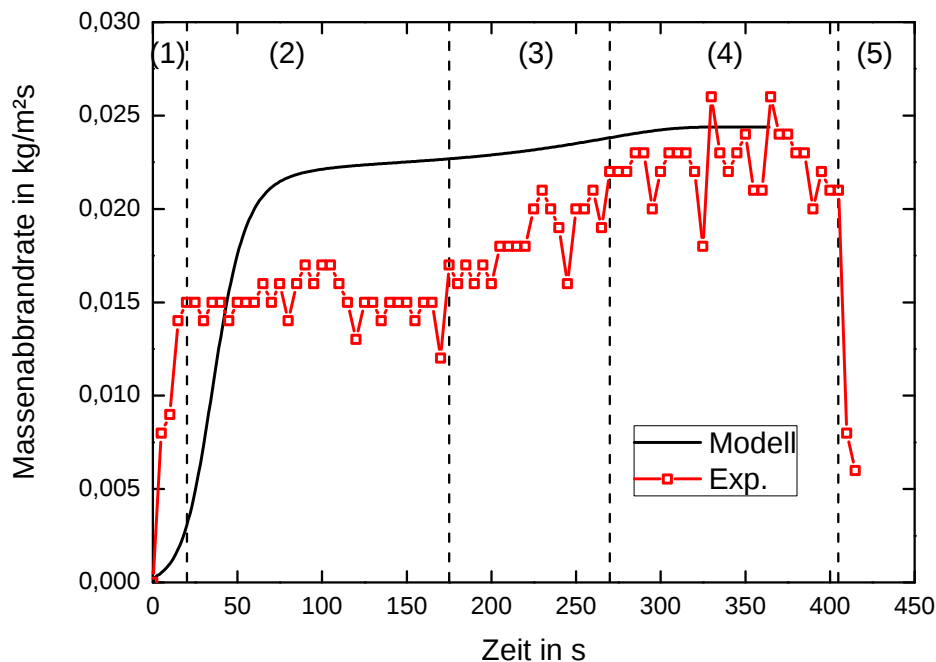


Abbildung 6.1: Vergleich der Verdunstungsmodellierung mit den Messungen für das n-Heptan-Poolfeuer (Referenztiegel mit Innendurchmesser 50,5 mm und Tiegelhöhe innen 11 mm). Phaseeinteilungen und -bezeichnungen entsprechen experimentellen Messungen ohne Thermoelemente von Abb. 5.2

Die in der Messung beobachteten Phasen werden von der Berechnung qualitativ wiedergegeben. Die Startphase verläuft bei der Berechnung dabei langsamer ab als nach den Messergebnissen. Weiterhin wird die Höhe der Massenabbrandrate in der anschließenden Erwärmungs- und Transitionsphase höher als im Experiment berechnet. Die Massenabbrandrate in der Siedephase zeigt weiterhin eine gute Übereinstimmung bei einem Unterschied von 8 %. Die Abklingphase wird im Modell aufgrund des Massenabbruchkriteriums nicht explizit modelliert und daher im berechneten Verlauf nicht wiedergegeben. Insgesamt wird die Abbrandzeit ca. 12 % kürzer berechnet. Die Integration des Massenabbrandverlaufs ergibt 15,11 g, dies entspricht eine Differenz von 1,8 % zum Experiment.

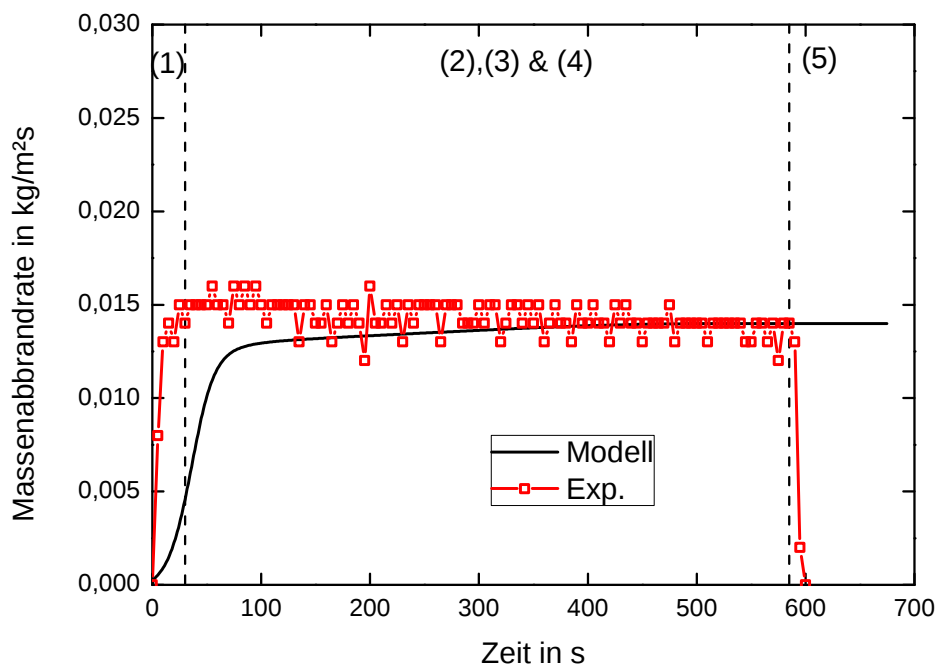


Abbildung 6.2: Vergleich der Verdunstungsmodellierung mit den Messungen für das Ethanol-Poolfeuer (Referenztiegel mit Innendurchmesser 50,5 mm und Tiegelhöhe innen 11 mm). Phaseinteilungen und -bezeichnungen entsprechen experimentellen Messungen ohne Thermoelemente von Abb. 5.5

Die Ergebnisse der Verdunstungsmodellierung von Ethanol sind in Abb. 6.2 dargestellt. Die Startphase wird wie bei n-Heptan vom Modell länger berechnet als in den Messungen. Anders als bei n-Heptan stimmen in der Erwärmungs- und Transitionsphase die Werte gut überein. Insgesamt ergibt sich eine längere Abbrandzeit von 12 %. Durch die Integration des Massenabbrandverlaufs ergibt sich die verbrannte Masse 17,42 g, welche einer Differenz von 3,5 % zu dem Experiment entspricht. Die Zahlenwerte der Berechnungsergebnisse von n-Heptan und Ethanol sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst.

Die unterschiedlichen Phasen während des Verbrennungsvorgangs werden durch das Steigungsverhalten der Massenabbrandrate gekennzeichnet. Zur Analyse der Steigung der be-

Tabelle 6.1: Berechnungsergebnisse für n-Heptan und Ethanol

Brennstoff	Abbrandzeit (s)	Diff. zu Exp.	Max. Abbrandrate ($\text{kg}/\text{m}^2 \text{ s}$)	Diff. zu Exp.
n-Heptan	365	-12,05 %	0,02439	8,26 %
Ethanol	675	12,45 %	0,01400	-2,17 %

rechneten Massenabbrandraten wird die erste Ableitung betrachtet. Die ersten Ableitungen der berechneten Massenabbrandraten für n-Heptan und Ethanol sind in Abb. 6.3 bzw. Abb. 6.4 als Linie dargestellt. Die Massenabbrandrate für beide Brennstoffe steigt am Anfang rapide an, gekennzeichnet durch ein lokales Maximum. Nach dieser Phase stellt sich ein konstanter Verlauf der ersten Ableitung ein, was einen linearen Anstieg der Massenabbrandrate andeutet. Für n-Heptan steigt die erste Ableitung noch einmal an bevor sich diese dem Wert Null annähert. Der Wert Null der ersten Ableitung deutet dabei an, dass die stationäre Massenabbrandrate die Siedephase erreicht hat. Anders als bei n-Heptan steigt der Wert der ersten Ableitung für Ethanol nicht wieder an sondern sinkt langsam direkt auf den Wert Null.

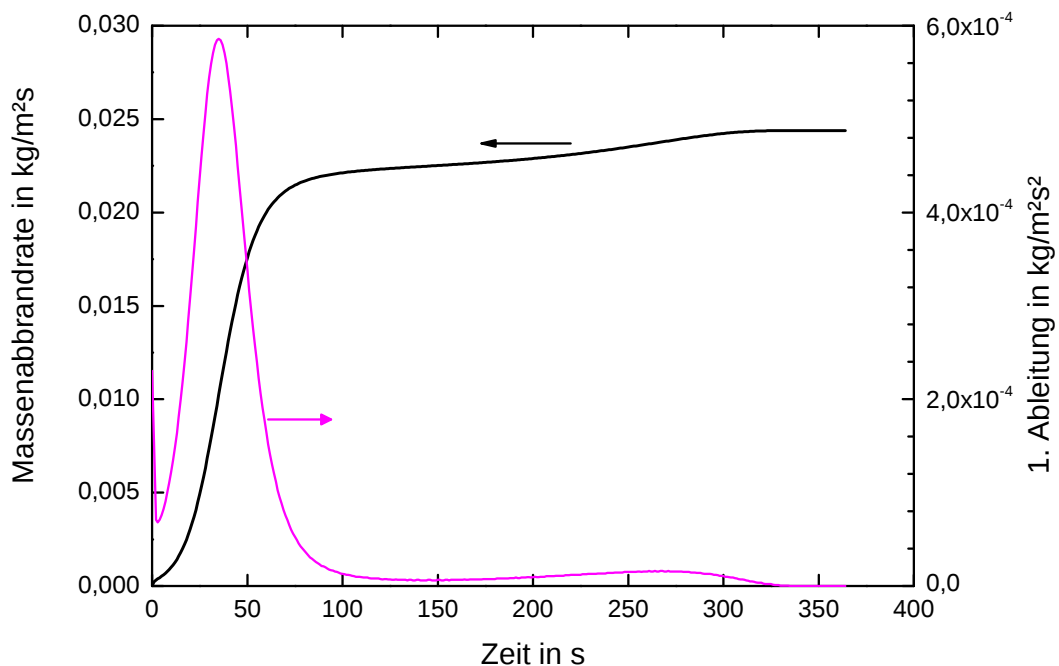


Abbildung 6.3: Verlauf und 1. Ableitung der berechneten Massenabbrandrate des n-Heptan-Poolfeuers

Die Verläufe der ersten Ableitung der berechneten Massenabbrandraten zeigen, dass die durchlaufenen Phasen im Experiment (Kapitel 5) vom Modell qualitativ wiedergegeben werden. Für n-Heptan in Abb. 6.3 wird die Startphase durch den Anstieg der 1. Ableitung

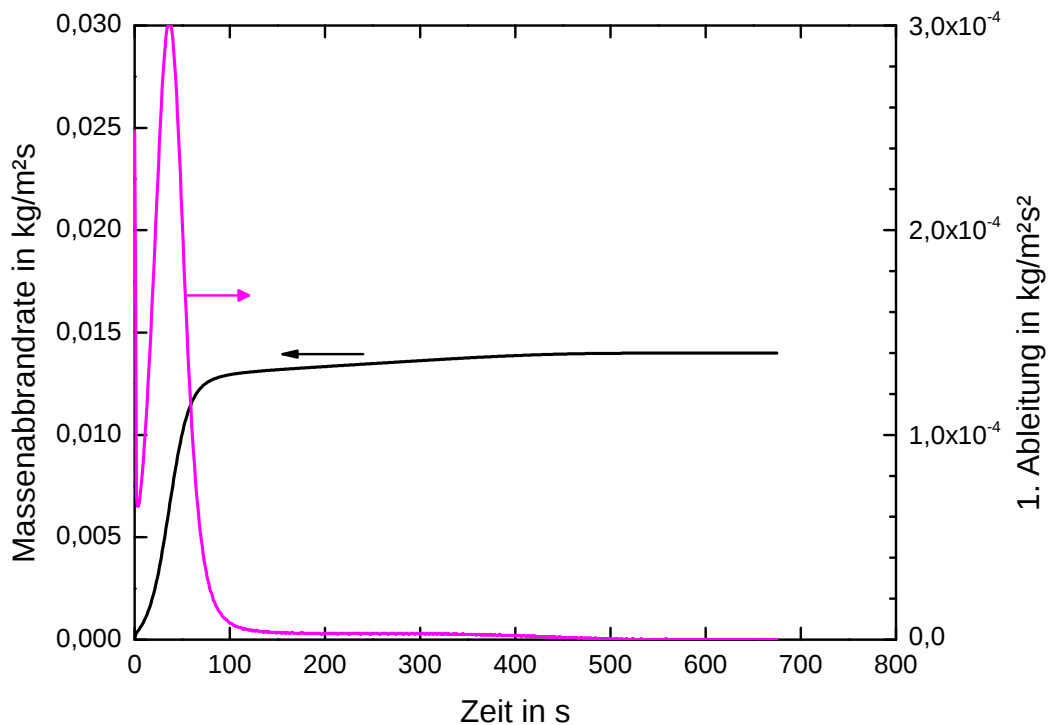


Abbildung 6.4: Verlauf und 1. Ableitung der berechneten Massenabbrandrate des Ethanol-Poolfeuers

gekennzeichnet. Die darauffolgende Ableitung nahe Null stellt die Erwärmungsphase mit nahezu konstanter Massenabbrandrate dar. Der leichte Anstieg der Ableitung im Anschluss zeigt die Transitionsphase und letztendlich wird die Siedephase mit konstanter Massenabbrandrate durch den Ableitungswert nahe Null gezeigt. Für Ethanol zeigt der Anstieg der Ableitung am Anfang ebenfalls die Startphase. Die Ableitungswerte verbleiben im Anschluss bei nahe Null, welche nach der Startphase eine konstanten Massenabbrandrate darstellen. Wie bereits in Experiment festgestellt, führt dies dazu, dass keine Unterscheidung zwischen der Erwärmungs-, Transitions- und Siedephase möglich ist.

6.1.1 Temperatur

Die Temperaturverläufe an der Brennstoffoberfläche für n-Heptan und Ethanol sind in Abb. 6.5 dargestellt. Die Oberflächentemperatur steigt während der Startphase zügig an, bis zu ca. 75 s auf 82 °C für n-Heptan bzw. bis ca. 75 s auf 67 °C für Ethanol. Die Oberflächentemperatur steigt bis zum Ende des Verbrennungsvorgangs noch leicht an bis zu der Endtemperatur von 83,7 °C für n-Heptan bzw. 68,2 °C für Ethanol. Die Endtemperatur

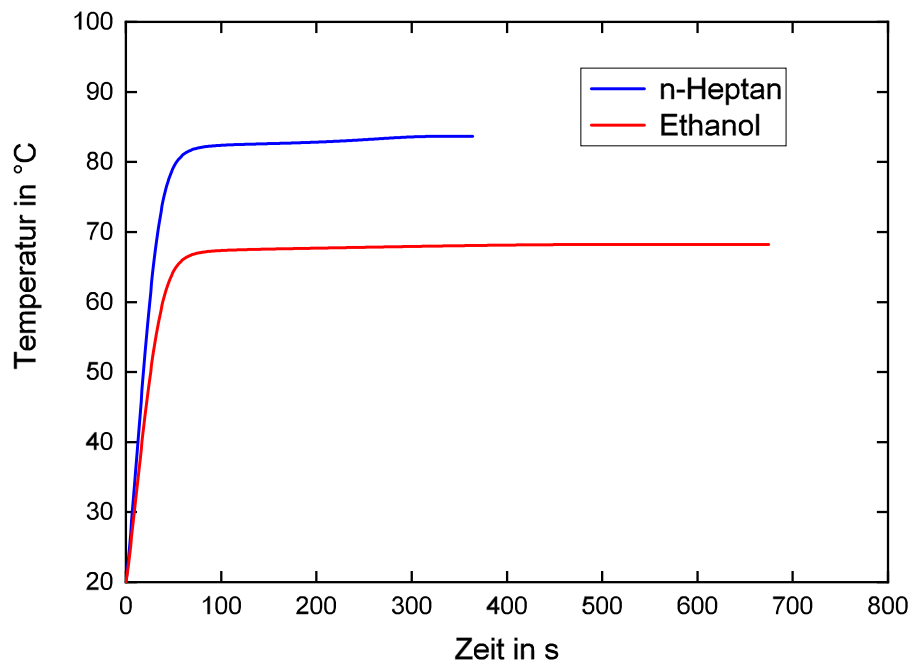


Abbildung 6.5: Temperatur an der Brennstoffoberfläche des n-Heptan- und Ethanol-Poolfeuers

liegt 14,7 K unterhalb der Siedetemperatur von n-Heptan bzw. 10,1 K unterhalb der von Ethanol.

Von Blinov [Blinov 61] wurde experimentell für Poolfeuern mit den Brennstoff Ethanol beobachtet, dass die Endtemperatur der Brennstoffoberfläche unterhalb der Siedetemperatur liegt. Diese lagen 7 K unter der Siedetemperatur. Die mitgelieferte Begründung hierfür ist, dass oberhalb der Brennstoffoberfläche eine Schicht verdunsteten Brennstoffs anliegt, dessen Dampfdruck abhängig von der Oberflächentemperatur ist aber den Umgebungsdruck nicht überschreiten kann. Ein Überschreiten würde die verdunstete Schicht von der Oberfläche abstoßen und als Konsequenz die Oberfläche kühlen. Es ergibt sich daher eine Oberflächentemperatur die unterhalb der Siedetemperatur liegt.

Die zeitlichen Temperaturverläufe für verschiedene Höhen innerhalb der Brennstoffflüssigkeit sind in Abb. 6.6 dargestellt. Die Linien repräsentieren feste Zellennummern innerhalb des Berechnungsgitters: Zelle 50 (Oberflächenzelle), 49 (Oberflächenzelle minus 1 Zelle), 38 (3/4 Höhe), 25 (1/2 Höhe), 13 (1/4 Höhe) und 1 (Boden). Alle Zellen nehmen qualitativ einen ähnlichen Verlauf: Die Temperaturen steigen zügig bis zum Ende der Startphase, danach folgt ein linearer Anstieg der Temperatur mit niedrigerem Gradienten bis zum Erreichen der Endtemperatur in der Siedephase. Das Erreichen der Endtemperatur erfolgt für alle Zellen gleichzeitig nach dem Verschwinden des Temperaturgradienten innerhalb der Flüssigkeit.

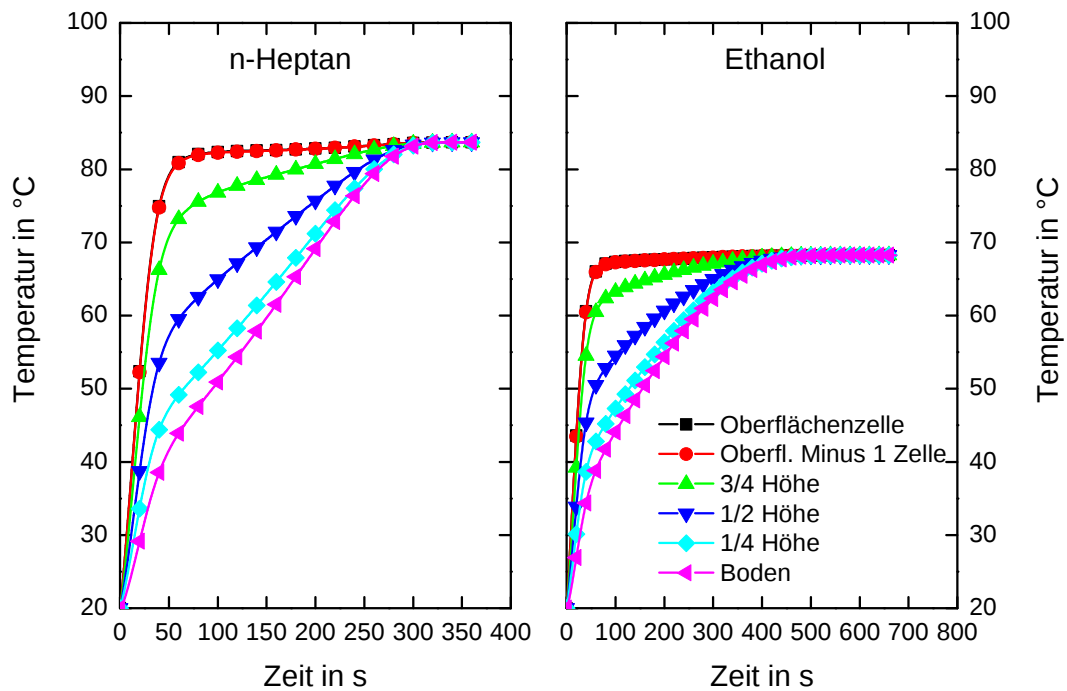


Abbildung 6.6: Temperatur in der Flüssigkeit von n-Heptan- und Ethanol-Poolfeuern für verschiedene Zellen

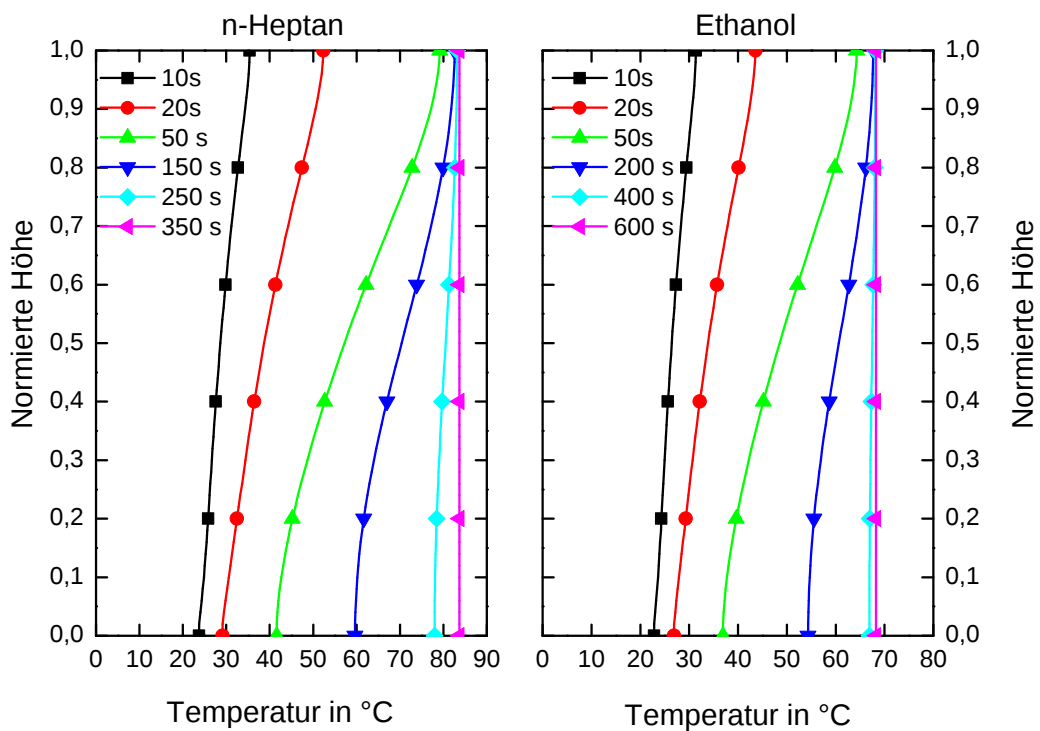


Abbildung 6.7: Temperatur in der Flüssigkeit von n-Heptan- und Ethanol-Poolfeuern für verschiedene Zeiten. Die Symbole zeigen jede 10. Zelle. Die normierte Höhe bezieht sich auf die Gesamthöhe der flüssigen Phase zum gegebenen Zeitpunkt

In Abb. 6.7 sind die Temperaturverläufe entlang der Höhe der Flüssigphase des n-Heptan- und Ethanol-Poolfeuers für verschiedene Zeiten dargestellt. Ebenfalls kann hier entnommen werden, dass der Temperaturgradient innerhalb der Flüssigphase erst am Ende (nach Eintreten der Siedephase) verschwindet.

6.1.2 Energiebetrachtung

In Abb. 6.8 sind die berechneten Wärmestromdichten der ersten Zelle unter der Flüssigkeitsoberfläche für das n-Heptan- und das Ethanol-Poolfeuer gezeigt. Die Energieverläufe entsprechen dabei den Termen der Energiebilanz von Gl. 3.2 wie folgt:

- $\dot{q}_{surf}''$ entspricht der Wärmestromdichte zur Aufwärmung der Flüssigkeitsoberfläche.
- $\dot{q}_{cond}''$ entspricht der Wärmestromdichte, die von der Flüssigkeit unter die Oberfläche weitergeleitet wird.
- $\dot{q}_{sum}''$ entspricht der Summe der Energieeinträge und -abzüge an der Oberfläche.
- $\dot{q}_{vap}''$ entspricht die Verdunstungsenergie, die zur Verdunstung der Masse erforderlich wird.

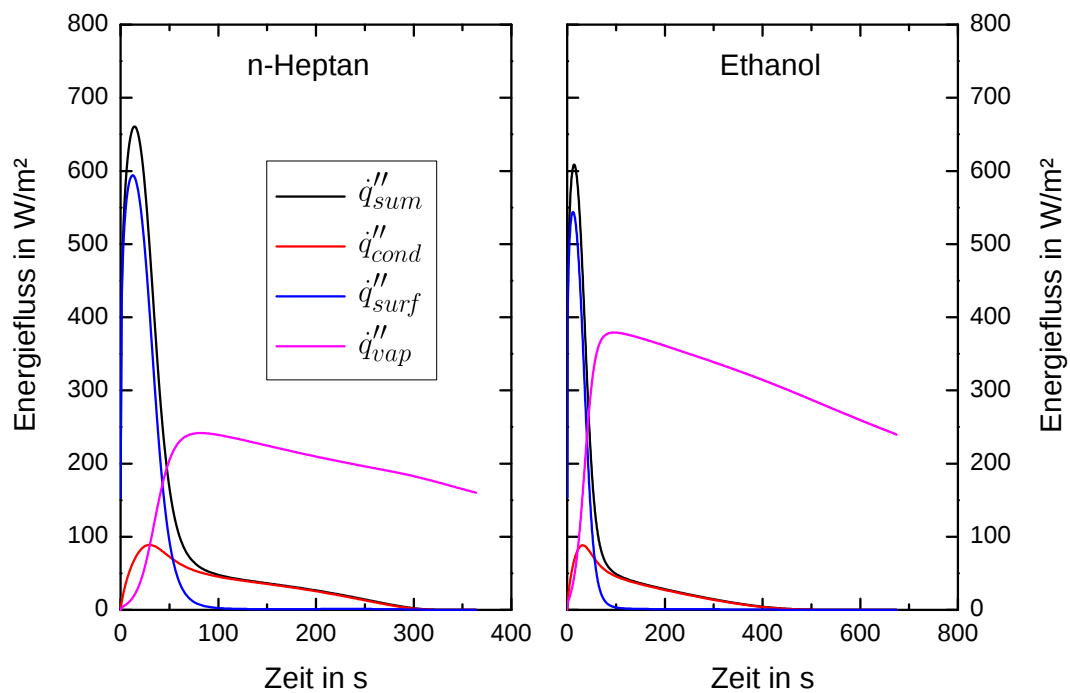


Abbildung 6.8: Berechnete Energieflüsse der ersten Zelle unter der Brennstoffoberfläche von n-Heptan- und Ethanol-Poolfeuern

Die oben genannten Terme haben die Beziehung

$$\dot{q}_{surf}'' = \dot{q}_{cond}'' + \dot{q}_{sum}'', \quad (6.1)$$

wobei $\dot{q}_{sum}''$ abhängig von $\dot{q}_{vap}''$ ist. Die Energie, welche nach der Bilanzierung der Energieeinträge und -verluste für die Erwärmung der Oberfläche und der Flüssigkeit zur Verfügung steht, wird durch $\dot{q}_{sum}''$ beschrieben. Am Anfang des Verbrennungsvorgangs wird die meiste Energie zur Erwärmung der Oberfläche verwendet ($\dot{q}_{surf}''$). Die Restenergie ist für die Erwärmung der Flüssigkeit unter der Oberfläche erforderlich ($\dot{q}_{cond}''$). Nachdem die stationäre Oberflächentemperatur erreicht ist und $\dot{q}_{surf}''$ den Wert Null erreicht hat (nach ca. 100 s für n-Heptan und Ethanol), wird die gesamte verfügbare Energie $\dot{q}_{sum}''$ für die Erwärmung der Flüssigkeit unter der Oberfläche $\dot{q}_{vap}''$ verwendet. Dies entspricht dem Ende der Startphase. Nach ca. 300 s für n-Heptan bzw. 500 s für Ethanol wird die Endtemperatur im gesamten Brennstoff erreicht und $\dot{q}_{cond}''$ nimmt den Wert Null an. Zu diesem Zeitpunkt wird keine Energie für die Erwärmung der Flüssigkeit aufgebraucht und die gesamte Energie wird für die Verdunstung des Brennstoffs verwendet. Die Massenabbrandrate erreicht somit den stationären Maximalwert.

Der Vergleich des Verhältnisses zwischen $\dot{q}_{cond}''$ und $\dot{q}_{vap}''$ für n-Heptan und Ethanol zeigt den Grund, weshalb keine Unterscheidung zwischen Erwärmungs-, Transition- und Siedephase beim Ethanol-Poolfeuer zu erkennen ist. Wie bereits bei den experimentellen Ergebnissen in Kapitel 5.2 beschrieben, ist bei Ethanol der Wert von $\dot{q}_{cond}''$ im Vergleich zu $\dot{q}_{vap}''$ relativ klein. Der Energieabzug für die Erwärmung der Brennstoffflüssigkeit hat einen geringeren Einfluss auf die Massenverdunstungsrate bei Ethanol.

Die Verläufe der Energiezufuhr und -verluste innerhalb der ersten Zelle unter der Brennstoffoberfläche von n-Heptan und Ethanol sind in Abb. 6.9 gezeigt. $\dot{q}_{sum}''$ ist dabei wie folgt zusammengesetzt:

$$\dot{q}_{sum}'' = \dot{q}_{rad}'' + \dot{q}_{conv}'' - \dot{q}_{vap}'' - \dot{q}_{rerad}'' \quad (6.2)$$

$\dot{q}_{rad}''$ und $\dot{q}_{conv}''$ sind dabei die Energieeinträge in die Zelle und $\dot{q}_{vap}''$ und $\dot{q}_{rerad}''$ entsprechende Energieabzüge. Die entsprechenden Definitionen der Energieeinträge bzw. -abzüge sind in Kapitel 3.1 gegeben.

Am Anfang besteht der höchste Energieeintrag durch Konvektion. Dieser wird durch den sogenannten Blockierungsfaktor $y_p/(e^{y_p} - 1)$ in Gl. 3.5 mit steigender Massenabbrandrate im weiteren Verbrennungsablauf reduziert [Quinti. 92]. Die gesamte berechnete Strahlungsenergie der Flamme $\dot{q}_{rad}''$ ist in der Berechnung konstant, da diese nur von der konstant

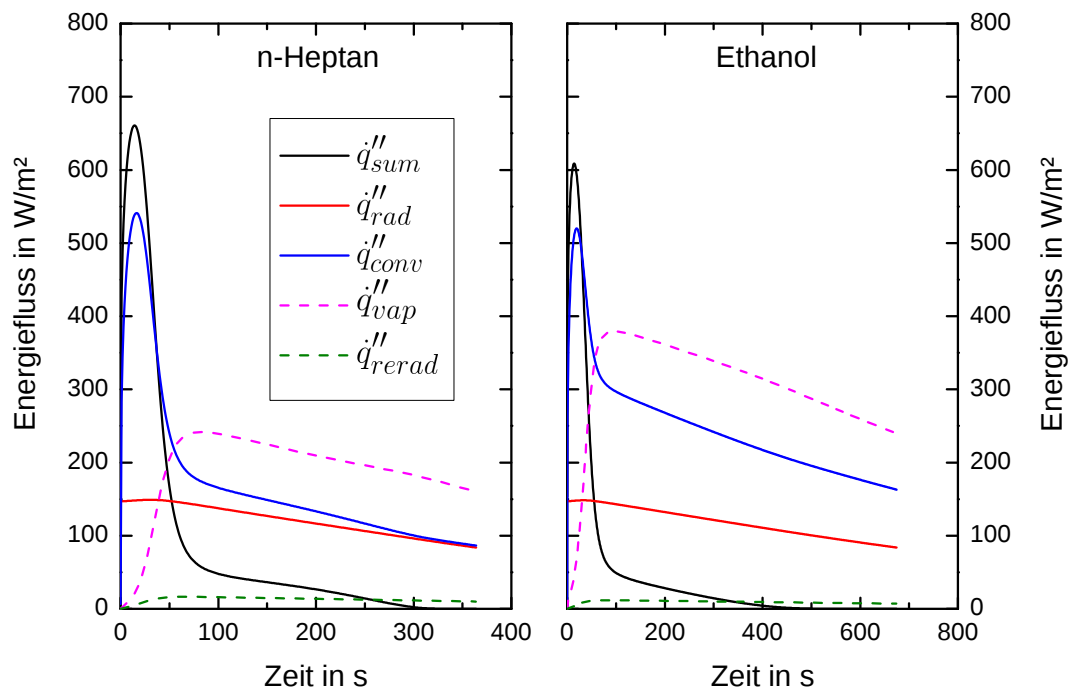


Abbildung 6.9: Energiezufuhr und -verluste der ersten Zelle unter der Brennstoffoberfläche von n-Heptan- und Ethanol-Poolfeuer. Gestrichelte Linien beschreiben Verluste

angenommenen Flammentemperatur abhängig ist. Die Abnahme der Strahlungsenergie in der 1. Zelle unter der Brennstoffoberfläche resultiert aus dem Faktor der Transmissivität τ_λ (Gl. 3.16). Die Verdunstungswärme steigt am Anfang entsprechend der steigenden Massenabbrandrate. Der anschließend sinkende Verlauf resultiert ebenfalls aus dem Faktor τ_λ . Die Rückstrahlungsenergie steigt am Anfang durch die ansteigende Oberflächentemperatur und verläuft auf einem konstanten Wert, ist jedoch im Vergleich mit den anderen Energieformen relativ klein. Der beschriebene Verlauf ist für beide Brennstoffe qualitativ ähnlich.

6.1.3 Netzsensitivität

Die Flüssigkeitsphase des Poolfeuers wird mit einer bestimmten Anzahl von Berechnungszellen diskretisiert. Um den Einfluss der Anzahl von Gitterzellen zu untersuchen, wird die Massenabbrandrate des n-Heptan-Poolfeuers mit einer Zellenanzahl von 20, 30, 50, 100 und 200 berechnet. Die Ergebnisse sind in Abb. 6.10 dargestellt. Die berechneten Massenabbrandraten zeigen dabei keine signifikanten Unterschiede.

Als Referenz wurde die Gittergröße von 50 Zellen gewählt. Der prozentuale Unterschied zu dem Referenzgitter ist in Abb. 6.11 abgebildet. Bei weiter steigender Anzahl von Gitterzellen

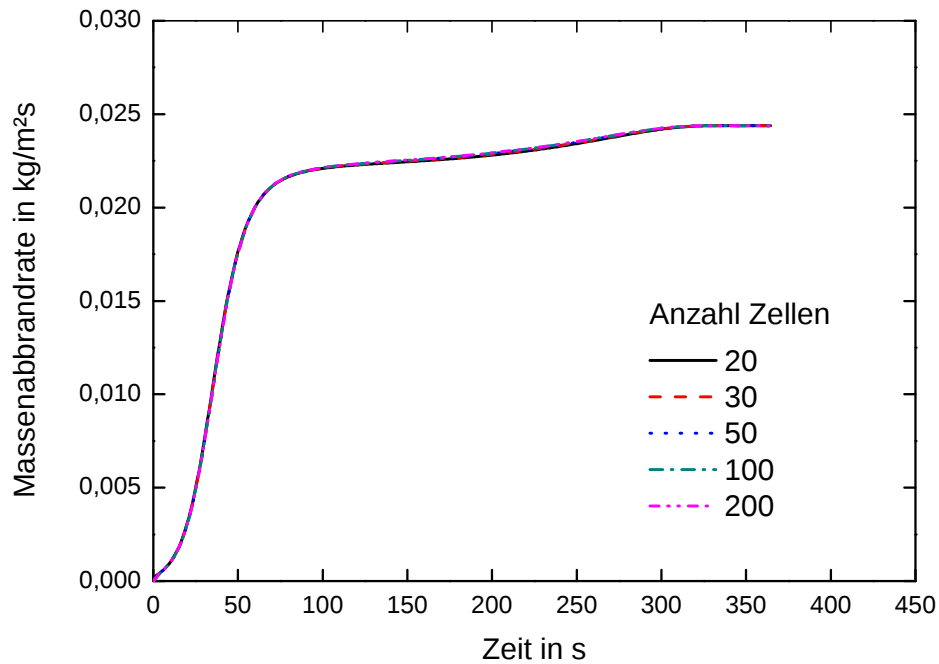


Abbildung 6.10: Berechnete Massenabbrandraten des n-Heptan-Poolfeuers für 20, 30, 50, 100 und 200 Zellen

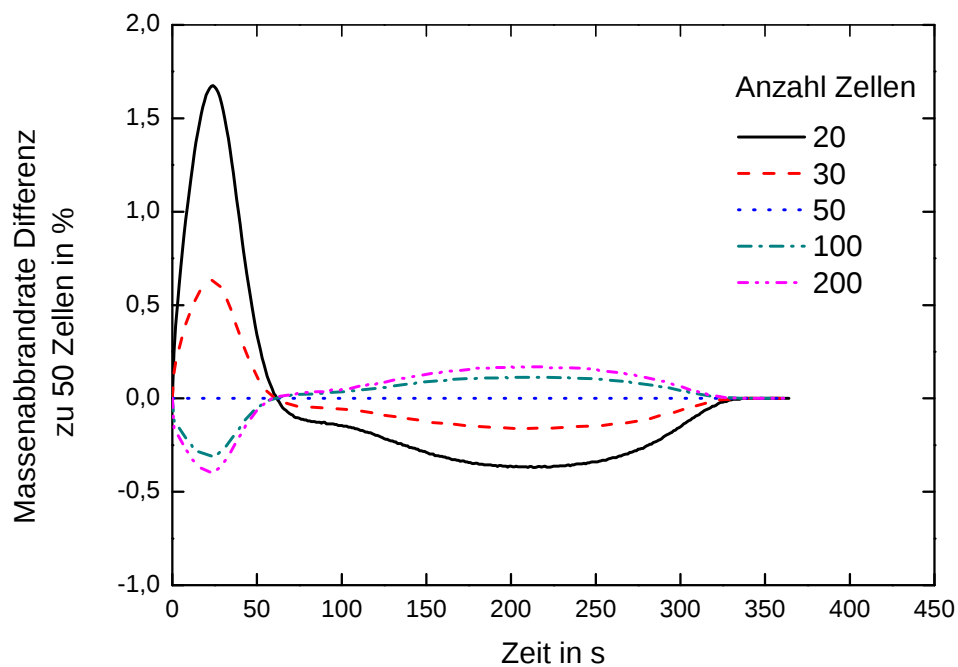


Abbildung 6.11: Differenz der Massenabbrandrate für verschiedene Netzgrößen zu der Massenabbrandrate des Gitters mit 50 Zellen in Prozent

ändern sich die Massenabbrandraten um weniger als 0,5 %. Eine Gittergröße von 50 Zellen wurde daher für die Berechnungen festgelegt.

6.1.4 Variation der Anfangstemperatur

In Abb. 6.12 ist der Verlauf der Massenabbrandrate für unterschiedliche Anfangstemperaturen dargestellt. Bei höherer Anfangstemperatur steigt der Anfangswert und die Steigung der Massenabbrandrate. Weiterhin wird bei höherer Anfangstemperatur die maximale Massenabbrandrate schneller erreicht. Der Wert der maximalen Abbrandrate bleibt bei den verschiedenen Anfangstemperaturen jedoch gleich.

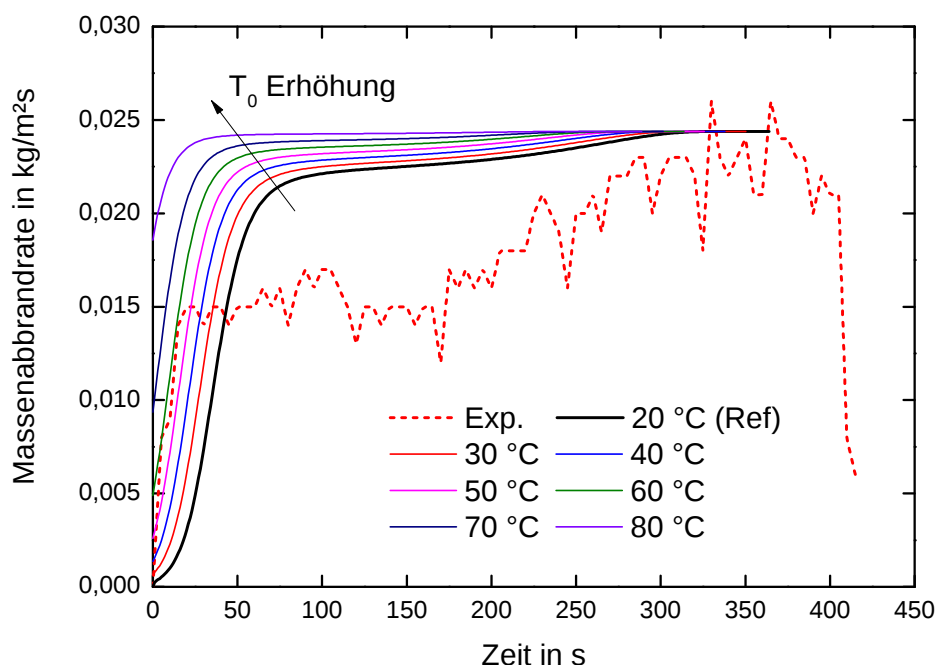


Abbildung 6.12: Massenabbrandrate für unterschiedliche Anfangstemperaturen T_0 der Flüssigkeit; n-Heptan-Poolfeuer

Für die Anfangstemperatur von 60 °C ergibt sich eine vergleichbare Steigung der Massenabbrandrate mit den experimentell gemessenen Werten. Eine mögliche Begründung hierfür ist, dass durch den Zündungsvorgang die Flüssigphase erwärmt wird und bereits zum Zeitpunkt der Zündung gegenüber der Ausgangstemperatur eine erhöhte Temperatur besitzt. Die Untersuchung und die Modellierung des Zündungsvorgangs erfolgt in Kapitel 6.1.8.

6.1.5 Variation der Geometrieabmessungen

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der Flächengröße und der Pooltiefe auf die Massenabbrandrate untersucht. Abb. 6.13 zeigt die Massenabbrandrate des n-Heptan-Poolfeuers für variierende Größen der Poolfläche. Die Pooltiefe wird dabei so angepasst, dass das Tiegelvolumen bzw. die Brennstoffmasse am Anfang gleich bleibt. Für eine kleinere Poolfläche von 50 % ergibt sich eine Erhöhung der maximalen Massenabbrandrate um 6,9 %. Für eine größere Poolfläche von 50 % ergibt sich wiederum eine niedrigere maximale Massenabbrandrate von 3,7 %. Die Massenabbrandrate bleibt demzufolge bei einer Änderung der Poolfläche von 50 % unter 10 %.

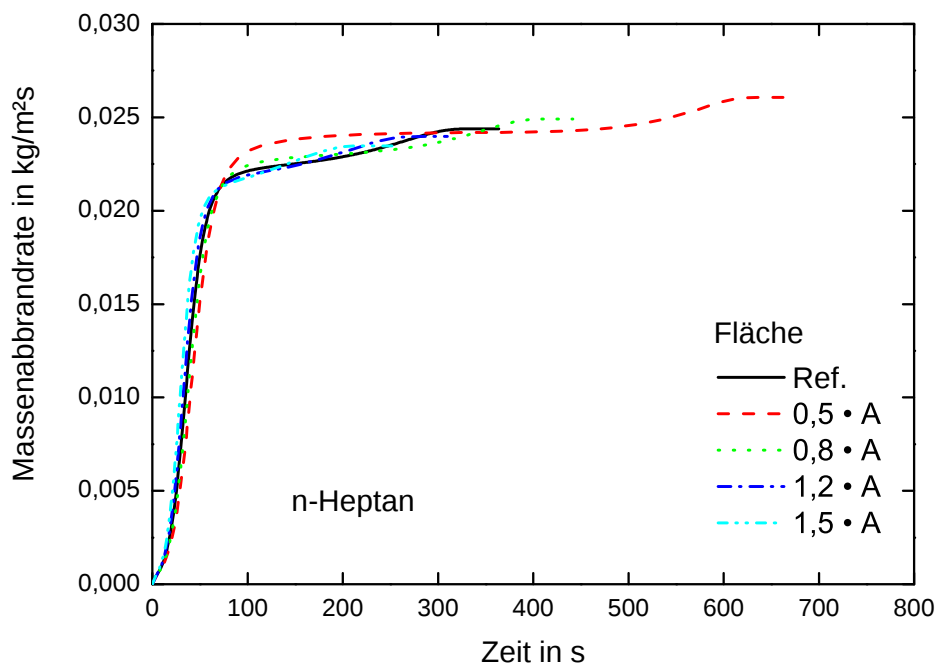


Abbildung 6.13: Massenabbrandrate bei variierender Poolfläche und gleichem Poolvolumen; n-Heptan-Poolfeuer (A = Referenz-Poolfläche)

Um den Bezug auf die Flächengröße zu eliminieren, wird der Verlauf des Massenstroms betrachtet. Der Massenstrom des verdunsteten Brennstoffs wird durch Multiplikation der Massenabbrandrate mit der Poolfläche berechnet und in Abb. 6.14 dargestellt. Der berechnete Massenstrom ist abhängig von der Poolfläche. Der Grund hierfür ist, dass die Poolfläche die Energiemenge bestimmt, welche durch die Brennstoffoberfläche aufgenommen wird. Für eine größere Poolfläche steht demzufolge mehr Energie für die Verdunstung bzw. das Aufwärmen des Brennstoffs zur Verfügung.

In Abb. 6.15 sind die berechneten Massenabbrandraten bei variierender Poolfläche und gleicher Pooltiefe abgebildet. Der Startwert des Brennstoffvolumens bzw. der Brennstoffmasse

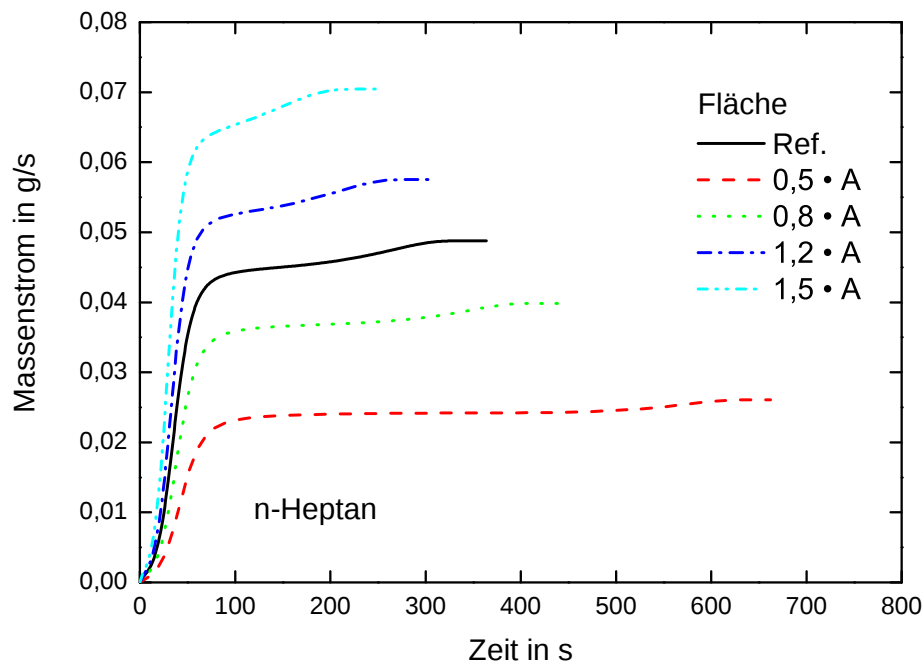


Abbildung 6.14: Massenstrom bei variierender Poolfläche mit gleichem Poolvolumen; n-Heptan-Poolfeuer. Der Massenstrom entspricht der Massenabbrandrate multipliziert mit der Fläche (A = Referenz-Poolfläche)

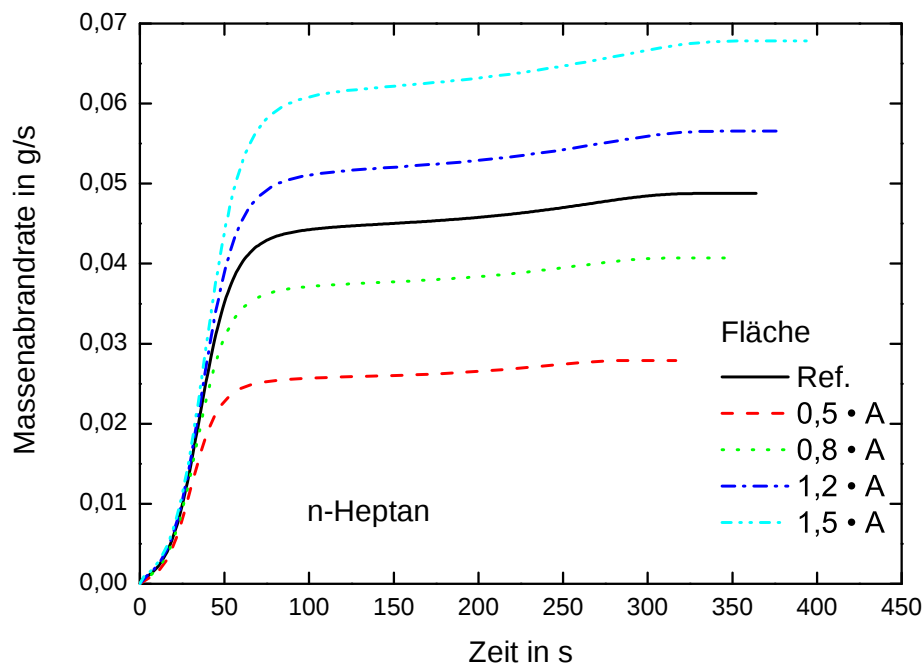


Abbildung 6.15: Massenabbrandrate bei variierender Poolfläche mit gleicher Pooltiefe; n-Heptan-Poolfeuer (A = Referenz-Poolfläche)

ist daher bei den Variationen nicht gleich. Da die Massenabbrandrate auf die Poolfläche bezogen ist, wird die Massenabbrandrate bei kleineren Poolflächen größer bzw. bei größeren Poolflächen kleiner. Die Betrachtung der Massenströme in Abb. 6.16 zeigt, dass für größere Poolflächen der Massenfluss wesentlich steigt, da mehr Energie durch die Poolfläche aufgenommen wird.

Abb. 6.17 zeigt die Massenabbrandrate für verschiedene Pooltiefen und gleicher Poolfläche. Der maximale Wert der Massenabbrandrate bleibt bei variierender Pooltiefe gleich. Die Pooltiefe hat demzufolge keinen Einfluss auf die Höhe der maximalen Massenabbrandrate und wirkt sich nur auf den zeitlichen Verlauf aus. Die maximale Massenabbrandrate wird von der Größe der Pooloberfläche bestimmt, welche den Betrag der Energieaufnahme an der Pooloberfläche beeinflusst.

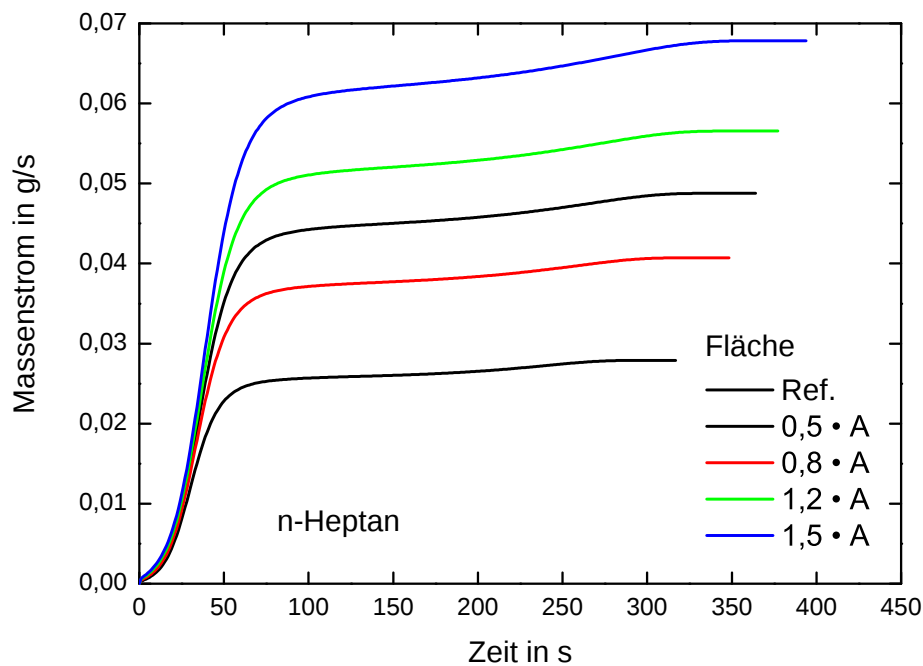


Abbildung 6.16: Massenstrom bei variierender Poolfläche mit gleicher Pooltiefe; n-Heptan-Poolfeuer. Der Massenstrom entspricht der Massenabbrandrate multipliziert mit der Fläche (A = Referenz-Poolfläche)

6.1.6 Variation des Massentransferkoeffizienten und der Lewis-Zahl

Zur Berechnung der Massenabbrandrate wird der Massenübergangskoeffizient h_m nach Gleichung 3.10 verwendet. Der Einfluss der Multiplikation von h_m auf den Massenabbrandratenverlauf wird in Abb. 6.18 für das n-Heptan-Poolfeuer dargestellt. Bei einem niedrigeren

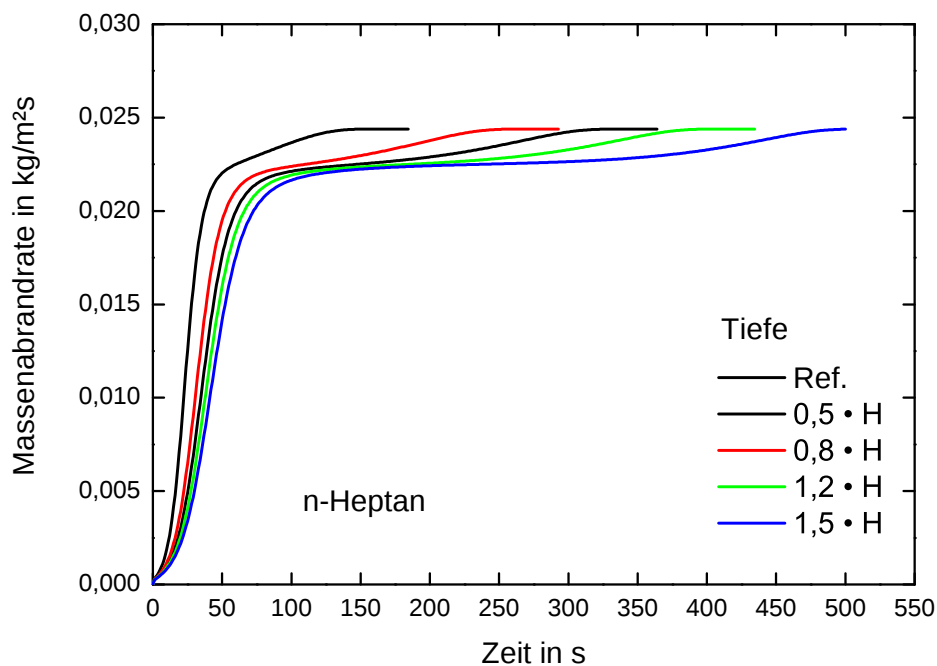


Abbildung 6.17: Massenabbrandrate bei variierender Pooltiefe mit gleicher Poolfläche; n-Heptan-Poolfeuer (H = Referenz-Pooltiefe)

Wert von h_m ergibt sich ein niedrigerer Wert der Massenabbrandrate in der Startphase und ein höherer Wert der Massenabbrandrate in der Siedephase. Bei einem höheren Wert von h_m tritt der entgegengesetzte Effekt auf.

Weiterhin kann ermittelt werden, dass die Abweichung der Massenabbrandrate von h_m bis zu einem Faktor von 2 relativ gering ist. Bei einem h_m -Multiplikationsfaktor von 0,5 und 2 ergibt sich eine Abweichung der Massenabbrandrate in der Siedephase von 1,4 % bzw. -2,1 %. Bei einem Multiplikationsfaktor von 10 ergibt sich eine Abweichung von -11 %. Es kann also gefolgert werden, dass eine geringe Abweichung des geschätzten Wertes von h_m keinen großen Einfluss auf den Wert der Massenabbrandrate hat.

Die Endtemperatur des n-Heptan-Poolfeuers für verschiedene Multiplikationen von h_m wird in Abb. 6.19 dargestellt. Hieraus kann geschlossen werden, dass der Wert der Endtemperatur stark von h_m abhängig ist. Die Endtemperatur des Referenzpunkts mit dem h_m -Wert von 1 beträgt 83,7 °C. Bei einem niedrigen h_m -Wert steigt die Endtemperatur. Umgekehrt sinkt die Endtemperatur bei einem höheren h_m -Wert. Mit einem 0,8-mal niedrigeren h_m -Wert steigt die Endtemperatur um 3,4 % auf 86,5 °C. Die Endtemperatur sinkt wiederum bei einem Multiplikationsfaktor 1,2 um 3 % auf 81,2 °C. Wie bereits bei der Auswertung der Temperaturen des Referenzfalls beobachtet und analysiert, liegen die Endtemperaturwerte unterhalb der Siedetemperatur von n-Heptan. Die physikalische Begründung hierfür ist, dass durch den Verdunstungsprozess die Brennstoffoberfläche gekühlt wird.

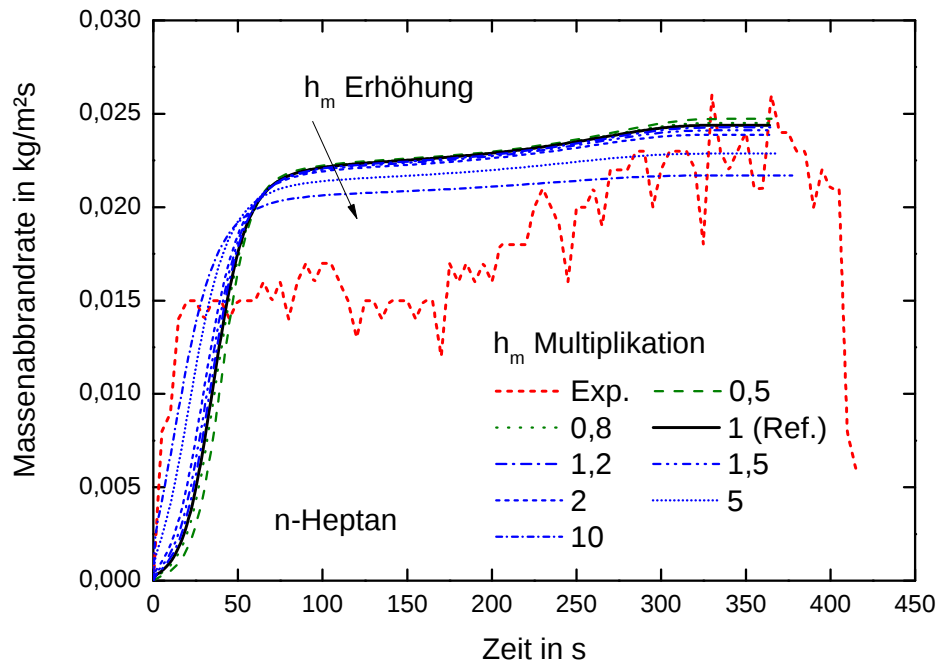


Abbildung 6.18: Massenabbrandrate bei variierender Multiplikation des Massentransferkoeffizienten h_m ; n-Heptan-Poolfeuer

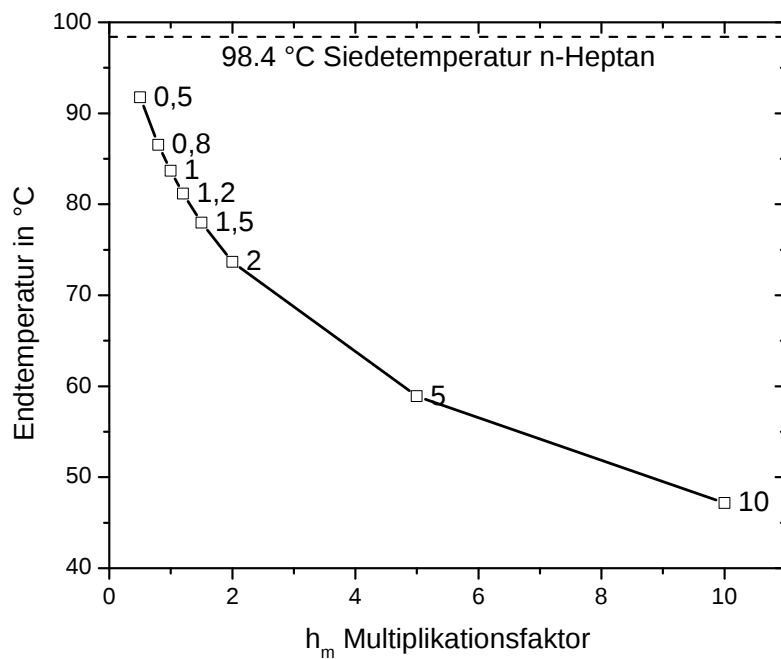


Abbildung 6.19: Endtemperatur bei variierender Multiplikation des Massentransferkoeffizienten h_m ; n-Heptan-Poolfeuer. Die Zahlen neben den Symbolen stellen den Multiplikationsfaktor dar

Der Wert von h_m wird ermittelt aus dem Wärmeübergangskoeffizienten h_t mit der Lewis-Zahl Le nach Gleichung 3.11. Die Lewis-Zahl wurde in den Berechnungen mit dem Wert $Le = 1$ für ideale Gase angenähert. Die relevanten Lewis-Zahlen für eine eindimensionale n-Heptan/Luft-Flamme liegen zwischen 1 (Sauerstoff) und 3,2 (n-Heptan) [Burali 16].

Der Massenabbrandratenverlauf für verschiedene Lewis-Zahlen eines n-Heptan-Poolfeuers ist in Abb. 6.20 gezeigt. Für Lewis-Zahlen von 0,8 und 3 ergeben sich Abweichungen der Massenabbrandrate zu dem Referenzwert $Le = 1$ von -0,39 % bzw. 1,45 %. Es kann also als Schlussfolgerung genommen werden, dass für den relevanten Bereich der Lewis-Zahlen die Abweichung der Massenabbrandrate zur Berechnung mit $Le = 1$ gering ist. Die Annahme $Le = 1$ wird daher in den Berechnungen beibehalten.

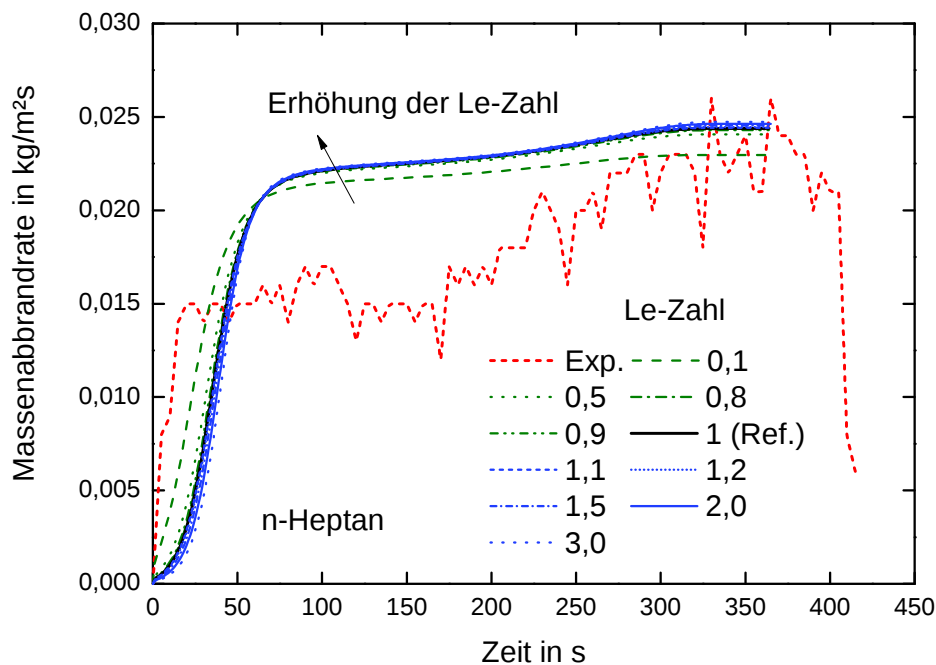


Abbildung 6.20: Massenabbrandrate bei variierender Lewis-Zahl; n-Heptan-Poolfeuer

6.1.7 Einfluss der Berücksichtigung des Stefan-Stroms

In den vorherigen Berechnungen wurde die Aufdickung des Films bzw. des Stefan-Stroms nach der Filmtheorie mit Gl. 3.9 berücksichtigt. Bei Vernachlässigung des Stefan-Stroms wird die Massenverdunstungsrate durch folgende Gleichung berechnet [Henley 11]:

$$\dot{m}'' = \frac{\rho D_{AB}}{\delta} (x_i - x_u) \quad (6.3)$$

Abb. 6.21 zeigt den Verlauf der berechneten Massenabbrandraten mit und ohne Berücksichtigung des Stefan-Stroms. Bei der Berechnung ohne Berücksichtigung des Stefan-Stroms wurde zur Berechnung der Massenverdunstungsrate die Gl. 6.3 anstelle der Gl. 3.9 verwendet. Ohne Stefan-Strom verläuft die Startphase langsamer und der Beginn der Siedephase wird verzögert. In der Siedephase ist die Massenabbrandrate mit $0,024769 \text{ kg/m}^2\text{s}$ um 1,57 % geringfügig höher als mit Berücksichtigung des Stefan-Stroms, sodass sich insgesamt nur eine leichte Verzögerung der Ausbrandzeit um 0,7 % ergibt. Für den vorliegenden Fall hat der Stefan-Strom demzufolge keinen großen Einfluss auf die Massenabbrandrate.

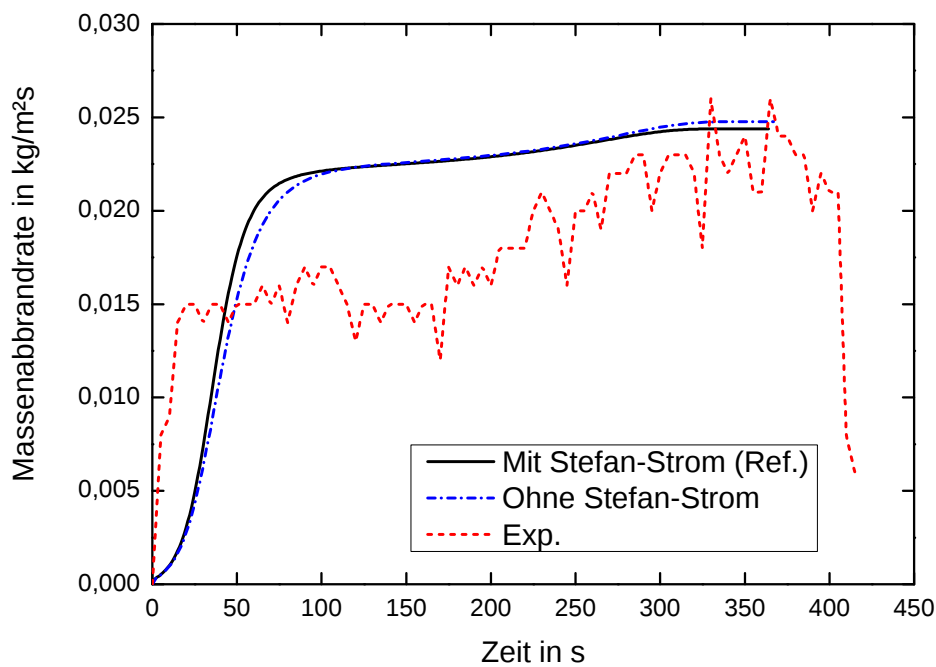


Abbildung 6.21: Massenabbrandrate mit und ohne Berücksichtigung des Stefan-Stroms; n-Heptan-Poolfeuer

6.1.8 Einfluss des Zündungsvorgangs

Wie in den vorigen Kapiteln ermittelt ist im Vergleich zwischen berechnetem und gemessenem Massenabbrandratenverlauf der Anstieg der Massenabbrandrate in der Startphase im Experiment deutlich höher. Eine mögliche Ursache hierfür ist der zusätzliche Energieeintrag durch den Zündvorgang. Im Experiment wird der Zündvorgang des Poolfeuers durch eine Lötlampe eingeleitet. Die Lötlampe wird mit gasförmigem Brennstoff, bestehend aus 30 Vol.- % Propan und 70 Vol.- % Butan, betrieben. Dies soll durch die Implementation einer Zusatzquelle für die Zündung in der Berechnung modelliert werden.

Tabelle 6.2: Heizwerte von Propan und Butan. Mischung besteht aus Propan 30 Vol.- % und Butan 70 Vol.- %

Brennstoff	Formel	H_u (MJ/kg)	Quelle
Propan	C_3H_8	46,35	[Schaef. 13]
n-Butan	C_4H_{10}	45,72	[Schaef. 13]
Mischung		45,875	

Die zusätzliche Energie durch die Lötlampe wird aus dem Brennstoff mit dem Heizwert H_u berechnet. Die Heizwerte sind in Tabelle 6.2 angegeben. Der Heizwert der Mischung wird aus dem Massenanteilen y_i wie folgt berechnet:

$$H_{u,Mischung} = \sum y_i H_{u,i} \quad (6.4)$$

Dies ergibt einen Wert von $H_{u,Mischung} = 45,875$ MJ/kg.

Der Brennstoffverbrauch der Lötlampe wird auf $\dot{m} = 120$ g/h geschätzt. Die flächenspezifische Größe der zusätzlichen Quelle $\dot{q}''_{zünd}$ wird dann berechnet mit:

$$\dot{q}''_{zünd} = \dot{m} H_{u,Mischung} \quad (6.5)$$

Der Zündungsvorgang wird in der Berechnung als eine normierte Gauß-Verteilung modelliert:

$$y(t) = C_m \frac{1}{\sigma_v \sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{(t - \mu_e)^2}{2\sigma_v^2} \right) \quad (6.6)$$

Dabei ist t die Zeit, μ_e der Erwartungswert und σ_v^2 die Varianz. μ_e beschreibt zudem den Zeitpunkt des Maximums. Der Normierungsfaktor C_m ist:

$$C_m = \left[\int_{t_0}^{t_{end}} \frac{1}{\sigma_v \sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{(t - \mu_e)^2}{2\sigma_v^2} \right) dt \right]^{-1} \quad (6.7)$$

Dabei sind t_0 und t_{end} die Anfangs- bzw. die Endzeit. Die Dauer des Zündvorgangs wird auf 2 s geschätzt. Für $\mu_e = 1$ und $\sigma_v = 0,2$ ergibt sich die in Abb. 6.22 dargestellte Funktion. Der Normierungsfaktor C_m bewirkt, dass die Fläche unter der Kurve im gesamten Zeitraum gleich 1 ist.

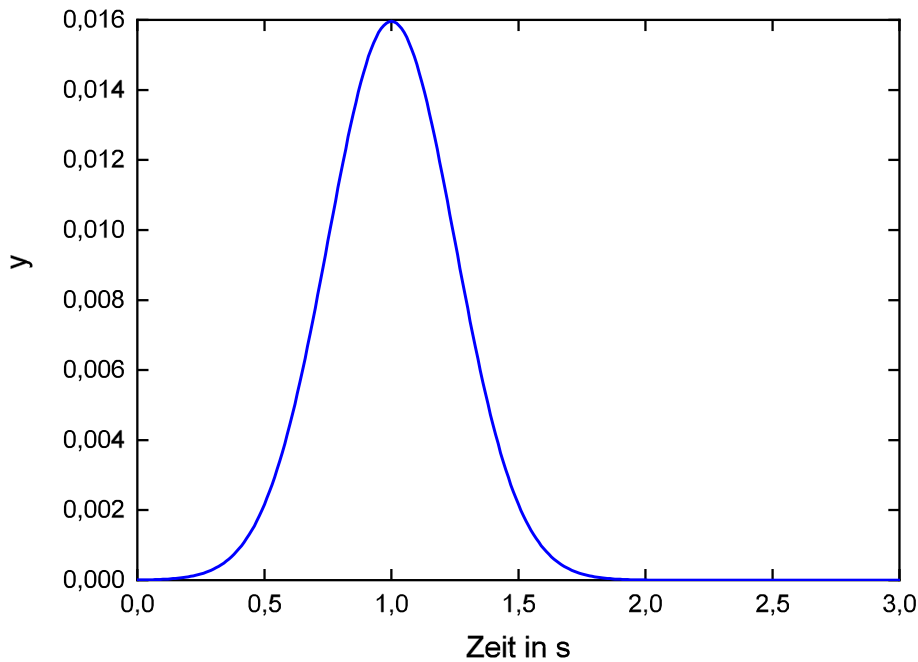


Abbildung 6.22: Funktion zur Modellierung des Zündvorgangs

Der zusätzliche Energieeintrag wird für jeden Zeitpunkt berechnet mit:

$$\dot{q}''_{\text{zünd}}(t) = y(t) \dot{q}''_{\text{zünd}} \quad (6.8)$$

Dieser Eintrag wird zu der instationären Energiebilanz (Gl. 3.17) addiert.

Der berechnete Verlauf der Massenabbrandrate ist in Abb. 6.23 dargestellt. Durch die zusätzliche Zündungsenergie ergibt sich ein Verlauf, dessen Steigung gut mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmt. Die Integration der beiden Kurven ergibt die gleiche Verdunstungsmenge von 7,544 kg/m². Der Verlauf der Oberflächentemperatur ist in Abb. 6.24 dargestellt. Durch die zusätzliche Zündungsenergie wird die Flüssigkeitsoberfläche auf 60 °C am Start vorgewärmt. Die mögliche Begründung, dass die Flüssigkeit durch den Zündungsvorgang bereits erwärmt ist, wird demzufolge durch die Berechnungen mit zusätzlicher Zündungsenergie bestätigt.

6.1.9 Fazit

Das Verdunstungsmodell kann die im Experiment beobachteten relevanten Phasen im Massenabbrandratenverlauf wiedergeben. Die berechneten Massenabbrandraten in der Siedephase zeigen dabei eine relativ gute Übereinstimmung mit den Messungen. Unter der

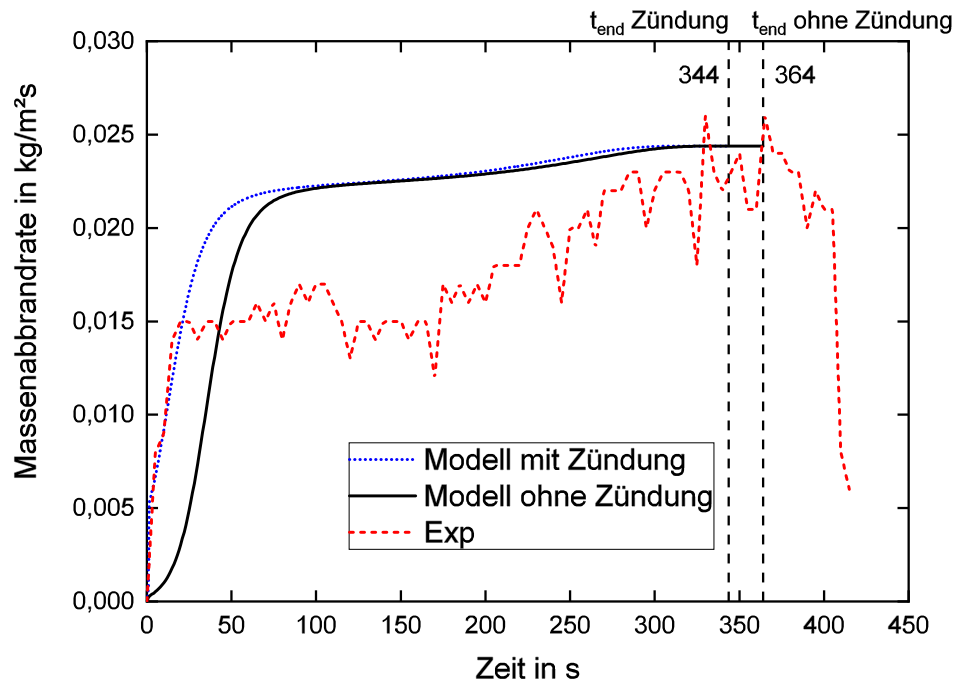


Abbildung 6.23: Vergleich der berechneten Massenabbrandrate mit Zündungsenergie

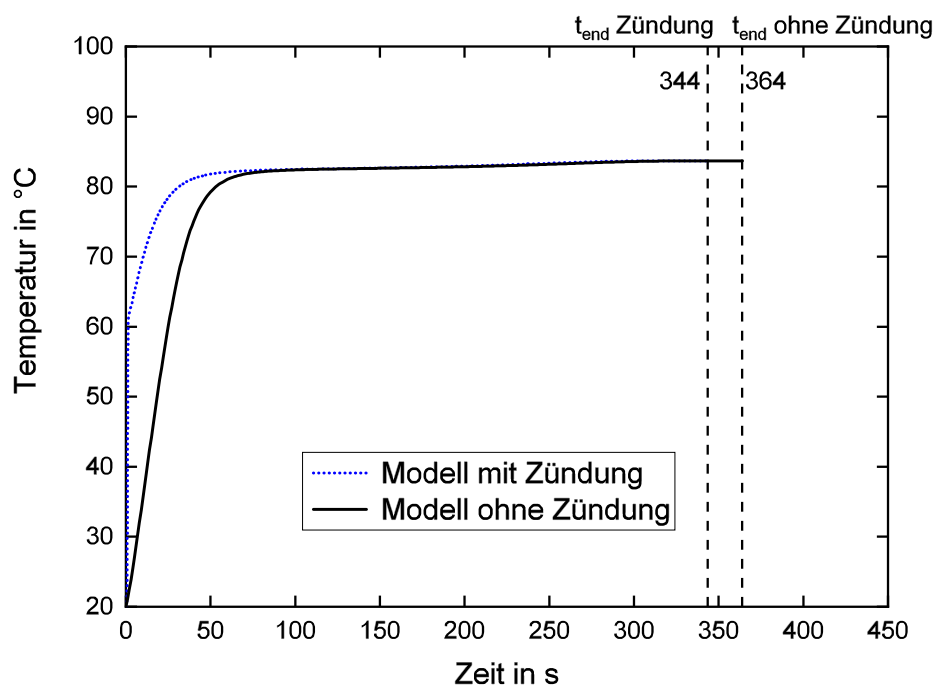


Abbildung 6.24: Berechneter Temperaturverlauf der Flüssigkeitsoberfläche mit und ohne Zündungsenergie

Voraussetzung, dass die Zündungsenergie berücksichtigt wird, wird die Startphase ebenfalls gut abgebildet. Die Analyse der Energiebilanz zeigt, dass die maximale Massenabbrandrate in der Siedephase stattfindet, da in dieser Phase die Endtemperatur erreicht und keine Energie für die Aufwärmung des flüssigen Brennstoffs verwendet wird.

Variationsrechnungen des Pooldurchmessers haben gezeigt, dass der Massenstrom bei größeren Pooldurchmessern steigt, jedoch die Massenabbrandrate wegen des Bezugs zur Fläche sinkt. Bei Änderung der Pooltiefe bleibt weiterhin die maximale Massenabbrandrate gleich. Für den relevanten Bereich der Lewis-Zahlen ist die Abweichung der Massenabbrandrate zur Annahme $Le = 1$ gering.

Aufgrund des Zündungsvorgangs ergibt sich in den experimentellen Ergebnissen eine höhere Steigung des Massenabbrandratenverlaufs im Vergleich zu den Berechnungen. Dies kann in der Berechnung durch das Einsetzen einer zusätzlichen Zündungsquelle ausgeglichen werden.

6.2 Ergebnisse Simulation Zweikomponentengemisch

Die Simulationsergebnisse für Zweikomponentengemische (Mischungen 1 bis 4) werden in folgenden dargestellt.

6.2.1 Mischung 1

Die berechnete Massenabbrandrate für ein Poolfeuer mit der Mischung 1 (20 Vol.- % Ethanol, 80 Vol.- % n-Heptan) ist Abb. 6.25 dargestellt. Gezeigt sind dabei der Verlauf der Gesamtmassenabbrandrate des Brennstoffs, der Verlauf der Massenabbrandrate der einzelnen Komponenten von n-Heptan und Ethanol und die experimentell ermittelte Gesamtmassenabbrandrate. Die Mischung 1 besteht aus 20 Vol.- % Ethanol und 80 Vol.- % n-Heptan und liegt im Siedediagramm für die Ethanol,-n-Heptan-Mischung (Abb. 5.8) links von der Azeotropen. Dementsprechend sollte die Komponente Ethanol zuerst aufgebraucht sein, sodass nur n-Heptan in der Mischung bleibt. Die Integration des Massenabbrandratenverlaufs ergibt für den Gesamtbrennstoff 15,57 g, n-Heptan 12,07 g und Ethanol 3,50 g, welches dem Massenverhältnis der Mischung 1 in Tabelle 5.6 entspricht. Die Zündungsenergie wurde in dieser und den folgenden Berechnungen nicht zusätzlich implementiert.

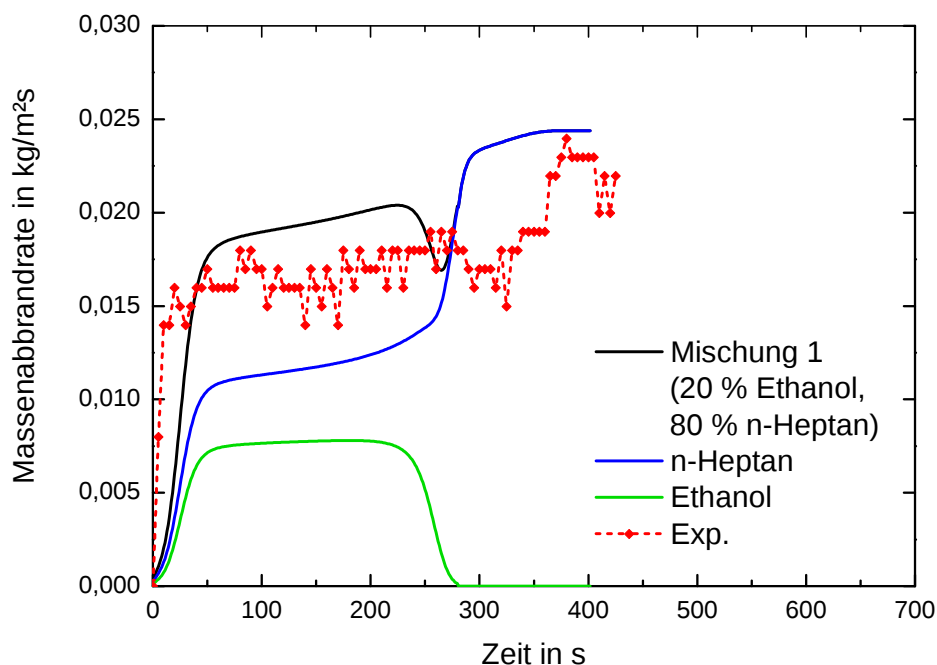


Abbildung 6.25: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate für ein Poolfeuer mit der Brennstoffmischung 1: 20 Vol.- % Ethanol, 80 Vol.- % n-Heptan

Die Massenabbrandrate der Komponenten ändert sich im Verlauf der Verbrennung. Zunächst steigen die Massenabbrandraten von n-Heptan und Ethanol bis zur Zeit von 60 s stetig an, wobei diese bei n-Heptan höher sind. Der Wert von n-Heptan steigt dann in geringerem Maße weiter an. Die Massenabbrandrate von Ethanol bleibt konstant und sinkt bis auf den Wert Null bei 282 s. Dies ist der Zeitpunkt, an dem Ethanol in der flüssigen Brennstoffmischung verbraucht ist. Kurz bevor Ethanol vollständig verbraucht ist, steigt die Massenabbrandrate von n-Heptan zügig bis zu dem Wert der Massenabbrandrate von reinem n-Heptan an.

Die Gesamtmassenabbrandrate bildet sich aus der Summe der Massenabbrandraten der Komponenten n-Heptan und Ethanol. Der im Experiment gemessene Verlauf der Massenabbrandrate wird qualitativ von der Gesamtmassenabbrandrate des Modells nachgebildet.

Abb. 6.26 zeigt die Verläufe von Masse m , Oberflächentemperatur T und Zusammensetzung von Flüssigkeit $x_{l,i}$ und Dampf x_i während des Verbrennungsvorgangs. Die Oberflächentemperatur nimmt beim Vorhandensein der beiden Komponente n-Heptan und Ethanol zunächst eine Temperatur von 60 °C an. Dieser Wert entspricht der Temperatur der modellierten Azeotrope. Nach dem Verbrauch der Komponente Ethanol steigt die Oberflächentemperatur auf 83,6 °C an. Die Temperaturen befinden sich unterhalb des Siedepunktes der Azeotrope (70,9 °C) im ersten Teil bzw. unterhalb der von reinem n-Heptan (98,4 °C) im zweiten Teil. Der Phasenübergang findet in den Berechnungen unterhalb des Siedepunktes als Verdunstungsvorgang statt. Entsprechend beträgt der Brennstoffanteil in der Gasphase oberhalb der flüssigen Oberfläche laut Abb. 6.26d $x_i = 0,63$ in der Berechnung. Weiterhin ist in Abb. 6.26d zwischen 250 s und 300 s ein kurzes Absinken von x_i zu sehen. Dies ist darauf zurückzuführen, dass das Gemisch fast vollständig aus n-Heptan besteht, jedoch die Temperatur noch unterhalb der Siedetemperatur bei 60 °C ist und bis zur Endtemperatur stetig ansteigt. In Abb. 6.26c ist zu sehen, dass die Stoffmengen Zusammensetzung von Ethanol im flüssigen Brennstoff stetig sinkt und nach 282 s vollständig aus n-Heptan besteht.

6.2.2 Mischung 2

Die Mischung 2 besteht aus 40 Vol.- % Ethanol und 60 Vol.- % n-Heptan und entspricht annähernd der Zusammensetzung der Azeotrope. Es ist deshalb zu erwarten, dass während des Verbrennungsvorgangs die Zusammensetzung konstant bleibt.

Der Verlauf der Massenabbrandrate der Mischung 2 in der Simulation ist in Abb. 6.27 dargestellt. Nach zügigem Anstieg am Anfang bleibt die Massenabbrandrate bis kurz vor

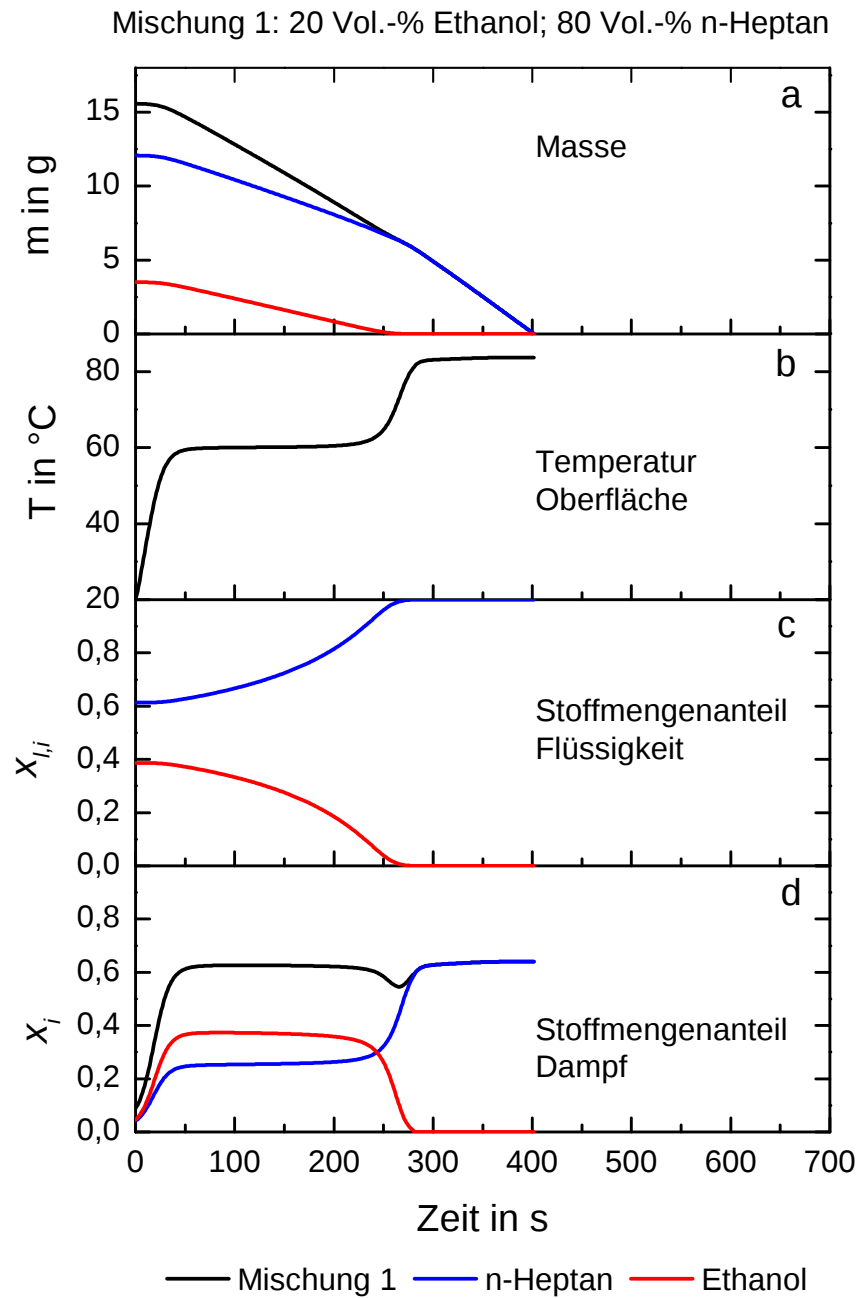


Abbildung 6.26: Berechneter Verlauf von (a) Masse, (b) Oberflächentemperatur, (c) Stoffmengenanteil in der Flüssigkeit $x_{l,i}$ und (d) Stoffmengenanteil im Dampf x_i für ein Poolfeuer mit der Brennstoffmischung 1: 20 Vol.-% Ethanol und 80 Vol.-% n-Heptan

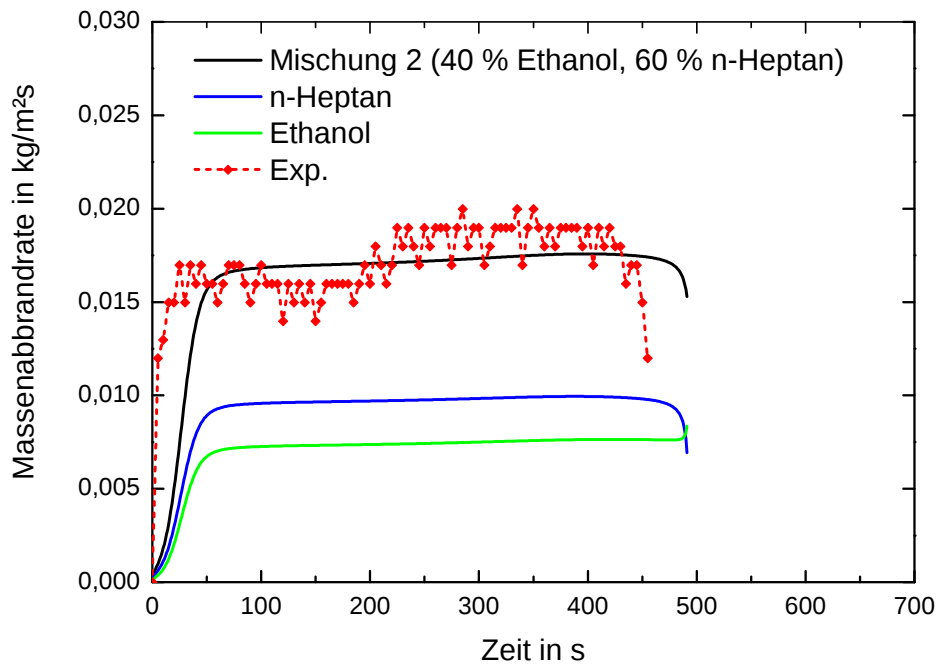


Abbildung 6.27: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate für ein Poolfeuer mit der Brennstoffmischung 2: 40 Vol.- % Ethanol und 60 Vol.- % n-Heptan

dem Ende konstant. Die berechneten Werte der Simulation stimmen dabei relativ gut mit den gemessenen Massenabbrandraten überein. Die Integration des Verlaufs ergibt für den Gesamtbrennstoff 15,93 g, n-Heptan 9,02 g und Ethanol 6,91 g.

Der Solver bricht während der Simulation der Mischung 2 gegen Ende des Verbrennungsvorgangs frühzeitig ab, da bei geringer übrigbleibender Brennstoffmenge eine sehr steile Änderung der Brennstoffzusammensetzung vorliegt. Dies geschieht bei einer Restbrennstoffmenge von 0,085 g, was 1,2 % der Anfangsmasse von 7 g entspricht.

Die berechneten Verläufe der Eigenschaften in Abb. 6.28 zeigen, dass die Zusammensetzung der flüssigen Brennstoffmischung in der Simulation bis fast ans Ende konstant bleibt, wie auch die Dampfzusammensetzung und die Oberflächentemperatur. Die Erwartung, dass die Mischung die azeotrope Zusammensetzung beibehält, wird von der Simulation erfüllt.

6.2.3 Mischung 3

Die Mischung 3 besteht aus 60 Vol.- % Ethanol und 40 Vol.- % n-Heptan. Dies entspricht einer Zusammensetzung rechts der Azeotrope (Abb. 5.8). Demzufolge wird zuerst n-Heptan aufgebraucht sein, sodass am Ende nur Ethanol in der Mischung verbleibt.

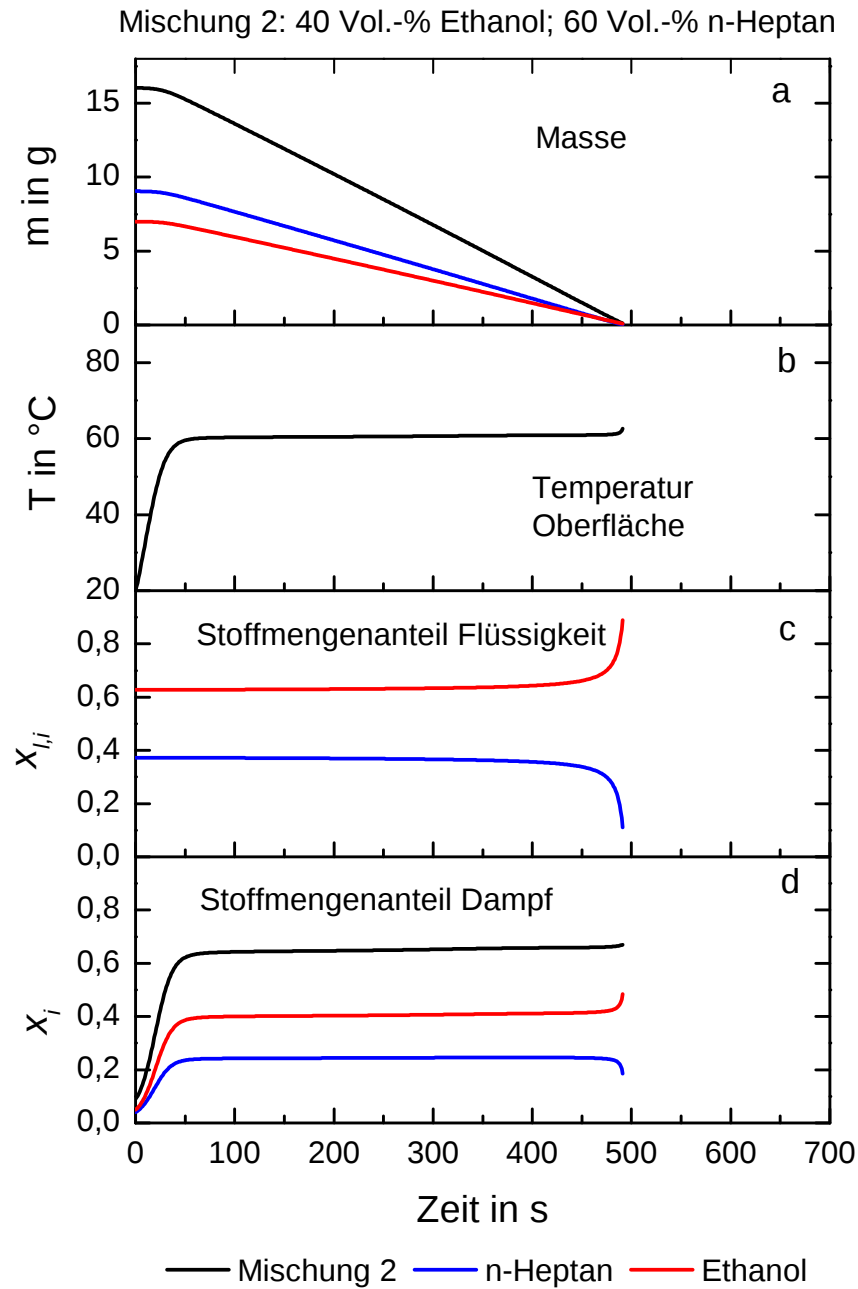


Abbildung 6.28: Berechneter Verlauf von (a) Masse, (b) Oberflächentemperatur, (c) Stoffmengenanteil in der Flüssigkeit $x_{l,i}$ und (d) Stoffmengenanteil im Dampf x_i für ein Poolfeuer mit der Brennstoffmischung 2: 40 Vol.-% Ethanol und 60 Vol.-% n-Heptan

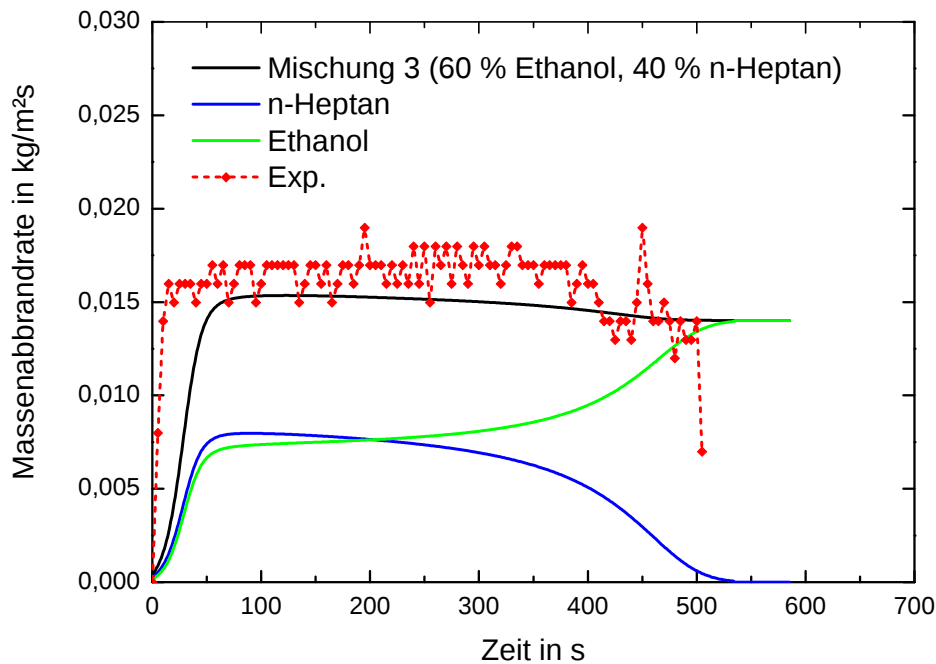


Abbildung 6.29: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate für ein Poolfeuer mit der Brennstoffmischung 3: 60 Vol.- % Ethanol und 40 Vol.- % n-Heptan

Der Verlauf der Massenabbrandrate in der Simulation ist in Abb. 6.29 gezeigt. Es ergeben sich gute Übereinstimmungen der Gesamtmassenabbrandrate mit den gemessenen Werten. Die Massenabbrandrate der Komponente n-Heptan liegt zunächst etwas über dem Ethanol, sinkt jedoch stetig bis zu dem Wert Null bei 535 s. Am Ende der Verbrennung bleibt, wie erwartet, die Komponente Ethanol in der Mischung übrig. Die Integration des Massenabbrandratenverlaufs ergibt für den Gesamtbrennstoff 16,50 g, n-Heptan 6,02 g und Ethanol 10,48 g.

Die Eigenschaften der Mischung 3 während des Verbrennungsvorgangs sind in Abb. 6.30 dargestellt. Die Oberflächentemperatur bleibt zunächst auf einem konstanten Wert von 61 °C und steigt auf die Temperatur von 68 °C, wenn nur noch Ethanol in der Mischung vorhanden ist. Der Stoffmengenanteil von Brennstoff im Dampf oberhalb der Brennstoffoberfläche beträgt nach der Steigung am Anfang $x_i = 0,66$.

6.2.4 Mischung 4

Die Mischung 4 besteht aus 80 Vol.- % Ethanol und 20 Vol.- % n-Heptan und entspricht wie bei der Mischung 3 einer Zusammensetzung rechts von der Azeotrope in Abb. 5.8.

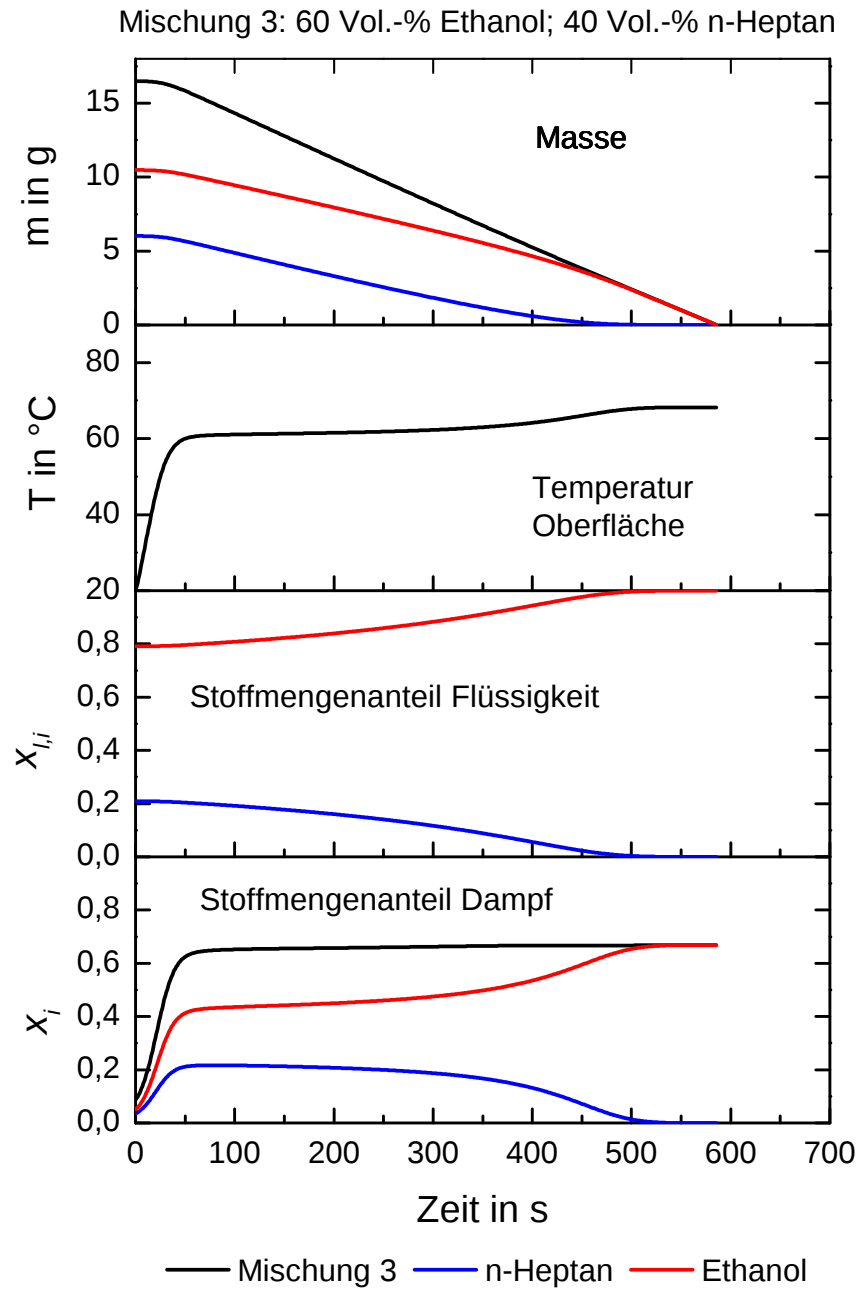


Abbildung 6.30: Berechneter Verlauf von (a) Masse, (b) Oberflächentemperatur, (c) Stoffmengenanteil in der Flüssigkeit $x_{l,i}$ und (d) Stoffmengenanteil in Dampf x_i für ein Poolfeuer mit der Brennstoffmischung 3: 60 Vol.-% Ethanol und 40 Vol.-% n-Heptan

Demzufolge wird am Ende der Verbrennung die Zusammensetzung nur noch aus Ethanol bestehen.

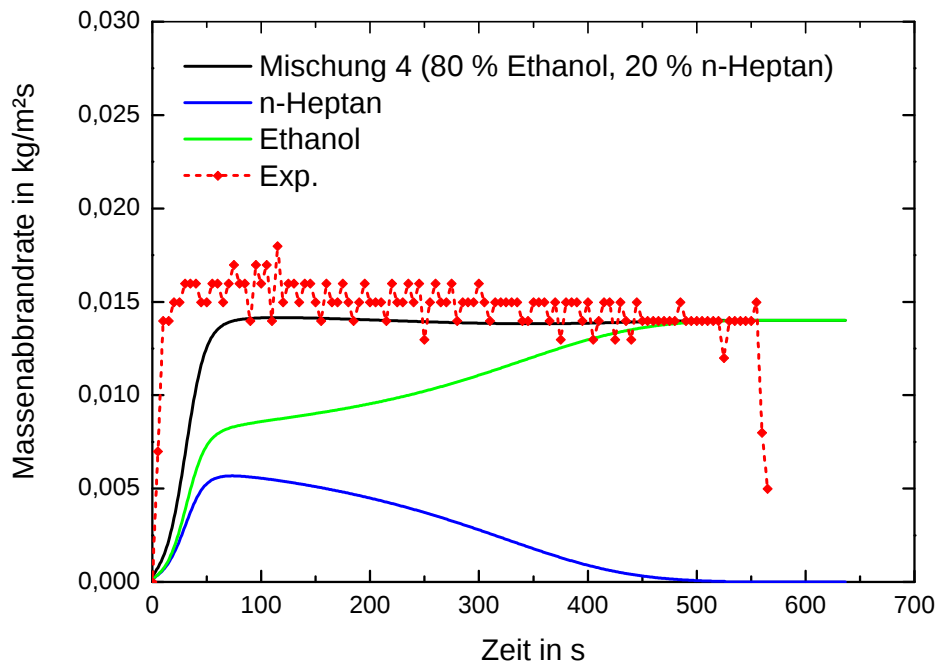


Abbildung 6.31: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate für ein Poolfeuer mit der Brennstoffmischung 4: 80 Vol.- % Ethanol und 20 Vol.- % n-Heptan

Der Verlauf der Massenabbrandrate der Mischung 4 ist in Abb. 6.31 dargestellt. Die Gesamtmassenabbrandrate bleibt relativ konstant in der Simulation und zeigt dabei eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Werten. Nach 527 s ist dabei n-Heptan verbraucht und es ist nur noch Ethanol in der Mischung übrig. Die Gesamtverbrennungszeit beträgt 636 s in der Simulation. Die Integration des Massenabbrandratenverlaufs ergibt für den Gesamtbrennstoff 16,96 g, n-Heptan 3,00 g und Ethanol 13,96 g.

Abb. 6.32 zeigt den Verlauf der Eigenschaften der Mischung 4 während des Verbrennungsvorgangs. Die Verläufe zeigen dabei ein ähnliches Verhalten wie bei der Mischung 3. Die Oberflächentemperatur steigt von der Temperatur 61 °C nach der Startphase auf 68 °C, wenn das n-Heptan verbraucht ist. Der Stoffmengenanteil von Brennstoff im Dampf beträgt nach der Startphase $x_i = 0,66$.

6.2.5 Fazit

Durch die Vergleiche der Massenabbrandraten der Simulationen und der experimentellen Messungen kann festgestellt werden, dass die Simulation die experimentellen Werte mit

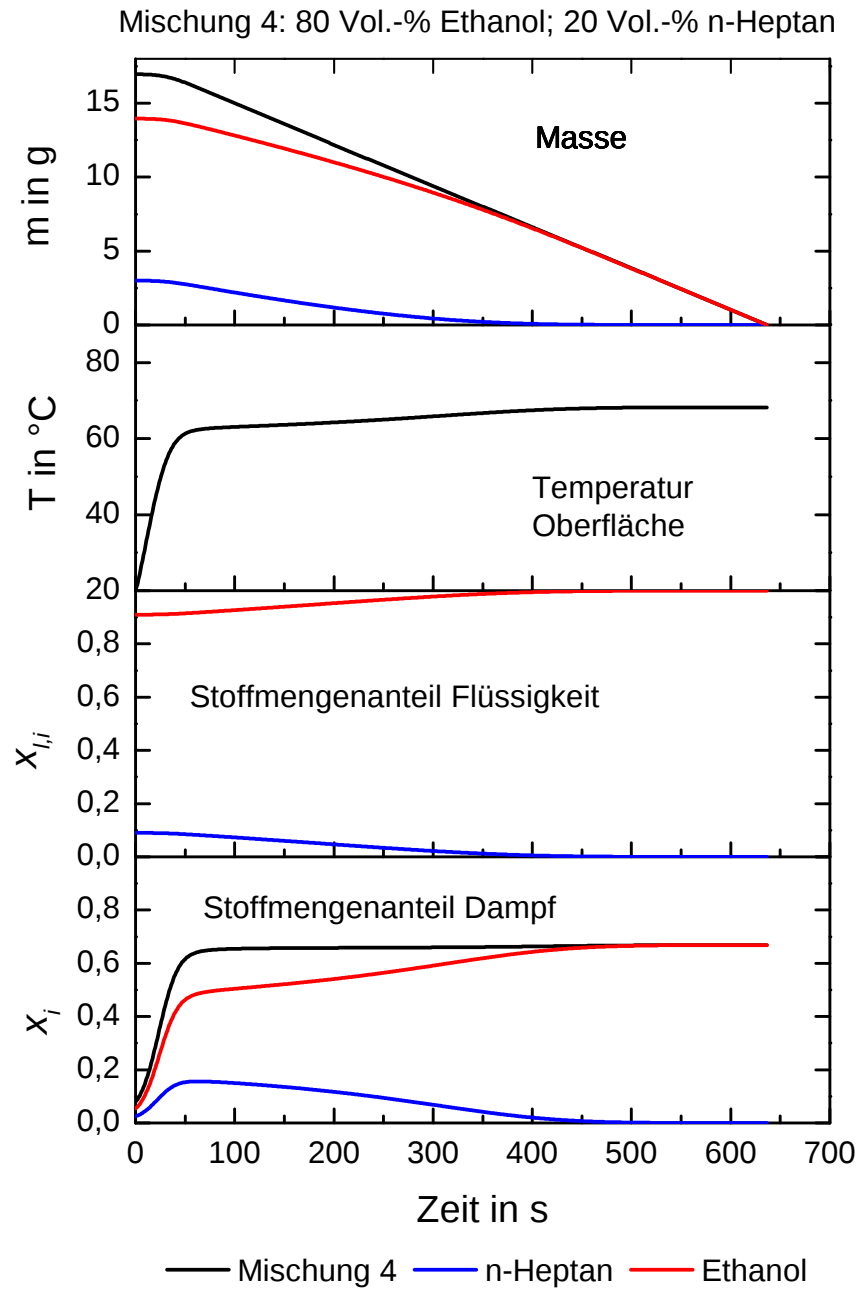


Abbildung 6.32: Berechneter Verlauf von (a) Masse, (b) Oberflächentemperatur, (c) Stoffmengenanteil in der Flüssigkeit $x_{l,i}$ und (d) Stoffmengenanteil in Dampf x_i für ein Poolfeuer mit der Brennstoffmischung 4: 80 Vol.-% Ethanol und 20 Vol.-% n-Heptan

guter Übereinstimmung berechnet. Der Zeitpunkt, wo die erste Komponente verbraucht ist, wird dabei für alle Mischungen in den Simulationen später berechnet als bei der Analyse der experimentellen Ergebnisse (Kapitel 5.3) ermittelt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass in den Simulationen der Siedepunkt nicht erreicht wird und der Phasenübergang durch Verdunstung stattfindet. Dementsprechend weicht die Zusammensetzung des Dampfs von der Zusammensetzung der Azeotrope ab. Die Zusammensetzung hat daher in den Simulationen nicht, wie bei der Analyse der experimentellen Ergebnisse angenommen, die Zusammensetzung der Azeotrope.

6.3 Simulation der Multikomponenten

Die Simulationsergebnisse der Multikomponentenbrennstoffe sind in die TGA-Validierung und die Simulation von Heizöl-Poolfeuern aufgeteilt.

6.3.1 TGA-Validierung

Zur Validierung des implementierten Quasi-discrete Modells wird der berechnete Siedeverlauf von Heizöl mit dem experimentell ermittelten Siedeverlauf verglichen. Der Siedeverlauf wird mittels thermogravimetrischer Analyse (TGA) ermittelt, in welcher die Massenänderung einer bestimmte Menge von Heizöl in Abhängigkeit von Zeit und Temperatur gemessen wird. Die Daten zur TGA sind in Tabelle 6.3 angegeben.

Tabelle 6.3: TGA Daten

TGA Anlage Typ	Mettler Toledo TGA 2 SF
Brennstoffmenge	90 μ L
Durchmesser Brennstofftiegel	5,25 mm
Anfangstemperatur	30 °C
Aufheizraten	1, 5, 10 und 20 K/min
Atmosphäre	25 mL/min O ₂

Die Modellierung von Heizöl erfolgt mit dem in Kapitel 3.4.2 beschriebenen Quasi-discrete Model (QDM). Die Massenabnahme und der Verdunstungsvorgang wurde nach dem Berechnungsschema in Kapitel 3.4 berechnet, mit der Anpassung, dass die Aufheizung bzw. der Temperaturanstieg der Brennstoffflüssigkeit mit einer vorgegebenen Aufheizrate erfolgt und die Flüssigkeitsphase durch nur eine Zelle modelliert wird. Die Simulationen werden dabei mit einer Anzahl von Quasi-Komponenten von 5 ($N_f = 5$) und 20 ($N_f = 20$) durchgeführt.

Die durch die TGA-Messungen und die Simulation ermittelten Siedeverläufe von Heizöl sind in Abb. 6.33 gezeigt. Der Vergleich zeigt, dass die Simulation eine schnellere Verdunstung berechnet als mit der TGA gemessen. Bei gleicher Temperatur ist bereits mehr Masse verdunstet als bei der Messung. Dies deutet an, dass in der Messung der Brennstoff aus mehreren höhersiedenden Komponenten besteht. In der Darstellung der Verteilungsfunktion im QDM (Abb. 3.8) bedeutet dies, dass der Schwerpunkt der Kurve nach rechts verschoben ist. Durch die Anpassung des Formparameters $\beta = 10$ auf $\beta = 11$ wird eine bessere Übereinstimmung der Simulationsergebnisse mit den TGA-Messungen erzielt (Abb. 6.34).

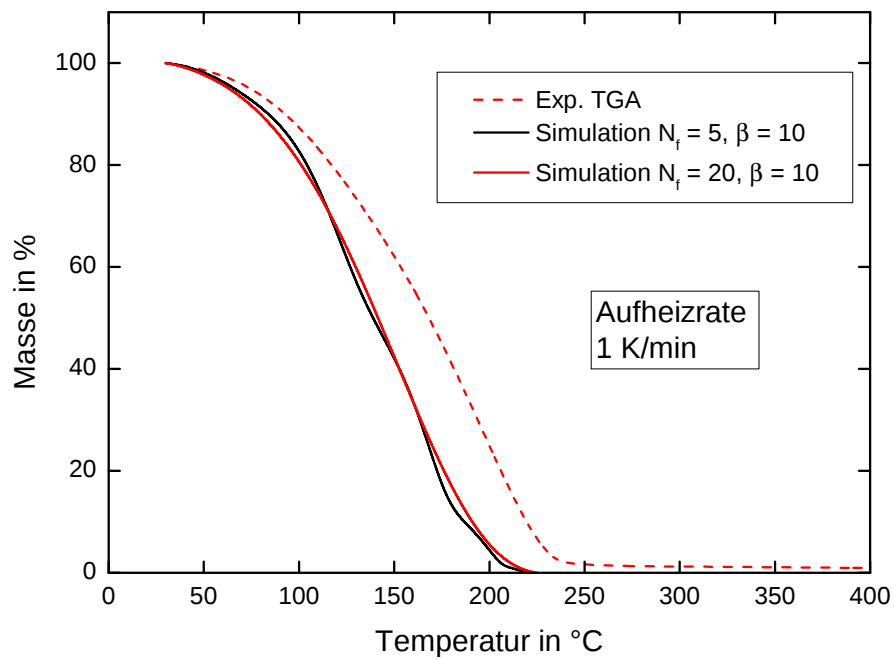


Abbildung 6.33: Berechneter und gemessener Siedeverlauf von Heizöl

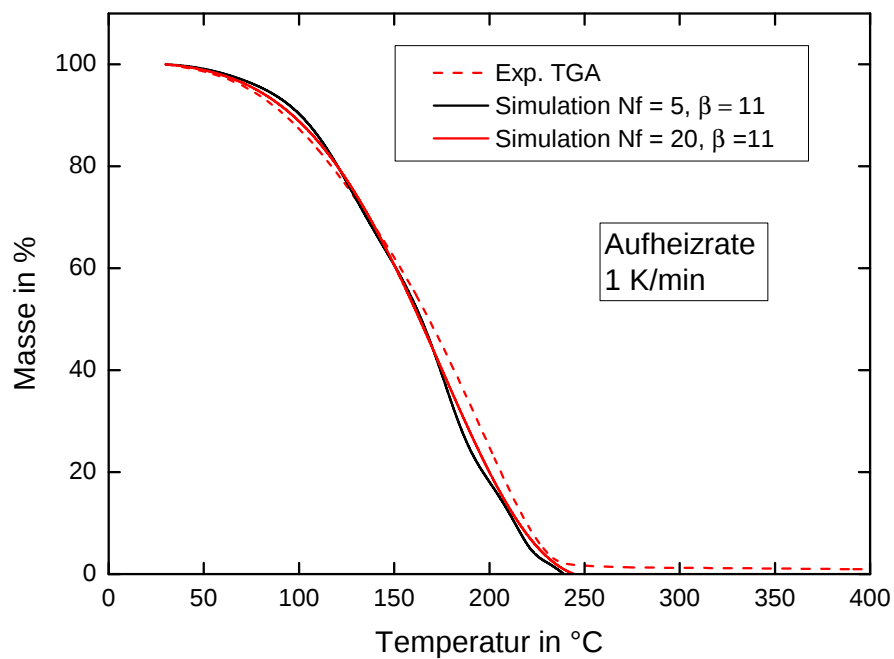


Abbildung 6.34: Berechneter Siedeverlauf von Heizöl mit modifizierter Verteilungsfunktion $\beta = 11$

Es kann also zusammengefasst werden, dass der Brennstoff, der ursprünglich für die Beschreibung der Formparameter im QDM verwendet wurde, sich von dem in dieser Arbeit verwendeten Brennstoffen unterscheidet. Durch die Änderung des Formparameters β kann jedoch die Verteilungsfunktion angepasst werden.

Die Messergebnisse von Heizöl-Poolfeuern (Kapitel 5.4) zeigen, dass die Massenabbrandrate während des Verbrennungsvorgangs stetig abnimmt. Dies ist darauf zurückzuführen, dass niedrigsiedende Komponenten zuerst verdunsten und diese eine höhere Massenabbrandrate besitzen als hochsiedende Komponenten.

Tabelle 6.4: Formparameter für die angepasste Verteilungsfunktion von Diesel

Brennstoff	α	β (g/mol)	γ (g/mol)	n_0	n_f
Diesel	18,5	11	0	5	25

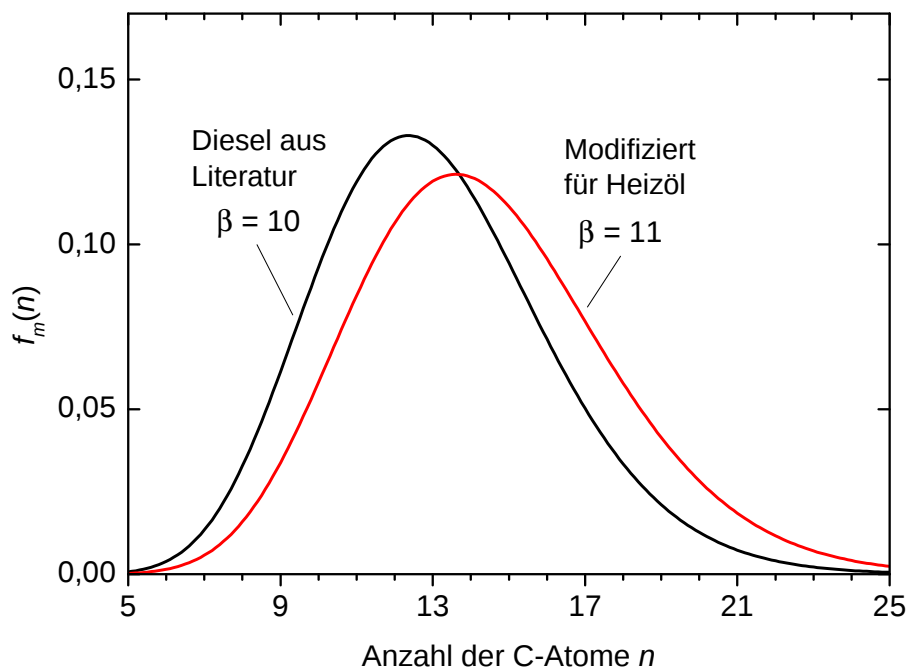


Abbildung 6.35: Darstellung der Verteilungsfunktion $f_m(n)$ in Abhängigkeit von der Anzahl Kohlenstoffatome (n): $\beta = 10$ (Diesel aus Literatur [Elward. 12]) und $\beta = 11$ (Heizöl)

Die Stoffeigenschaften des Heizöls werden mit dem QDM mit der Modifizierung $\beta = 11$, entsprechend der Anpassung mit den TGA-Messungen, abgebildet. Die Formparameter sind in Tabelle 6.4 angegeben. Die resultierende Verteilungsfunktion ist in Abb. 6.35 dargestellt und zeigt, dass die Verteilungsfunktion durch die Modifikation nach rechts in Richtung der

Komponenten höherer molarer Massen verschoben wird. Die Diskretisierung der Verteilungsfunktion durch fünf Quasi-Komponenten ($N_f = 5$) ist in Abb. 6.36 dargestellt.

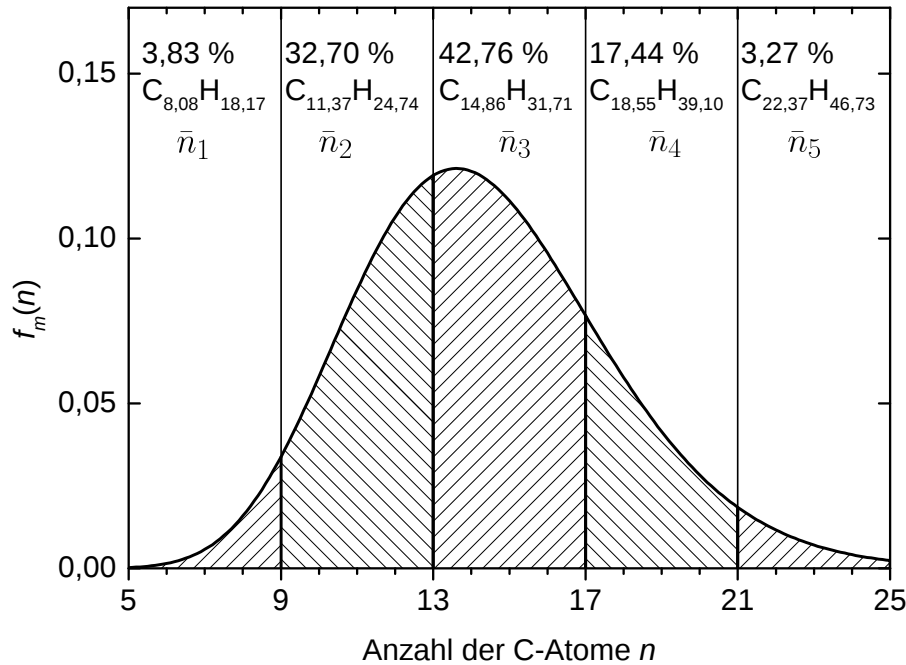


Abbildung 6.36: Diskretisierung der Verteilungsfunktion von Diesel mit $\beta = 11$ in fünf Komponenten ($N_f = 5$)

Die Ergebnisse der TGA-Messungen und der Simulation des Siedeverlaufs von Heizöl für Aufheizraten von 1 und 5 K/min sind in Abb. 6.37 dargestellt. Weiterhin ist als Vergleich der berechnete Siedeverlauf für 50 K/min dargestellt, welcher die Größenordnung der Aufheizrate des gemessenen Temperaturanstiegs von Heizöl im Experiment in Kapitel 5.4 beschreibt (Abb. 5.10). Die einzelnen Aufheizraten zeigen dabei unterschiedliche Siedeverläufe. Die Begründung hierfür ist die Dauer der Verweilzeit der Komponenten. Die höhersiedenden Komponenten erfahren, trotz Temperaturen unter dem Siedepunkt, Massenabnahmen durch Verdunstung. Dadurch ist bei einer niedrigen Aufheizrate beim Erreichen der gleichen Temperatur bereits mehr Brennstoff verdunstet als bei einer hohen Aufheizrate. Demzufolge wird der Brennstoff für eine geringere Aufheizrate bei einer niedrigeren Temperatur aufgebraucht sein. Der Vergleich zwischen der TGA-Messungen und der Simulation zeigen für beide Aufheizraten gute Übereinstimmung.

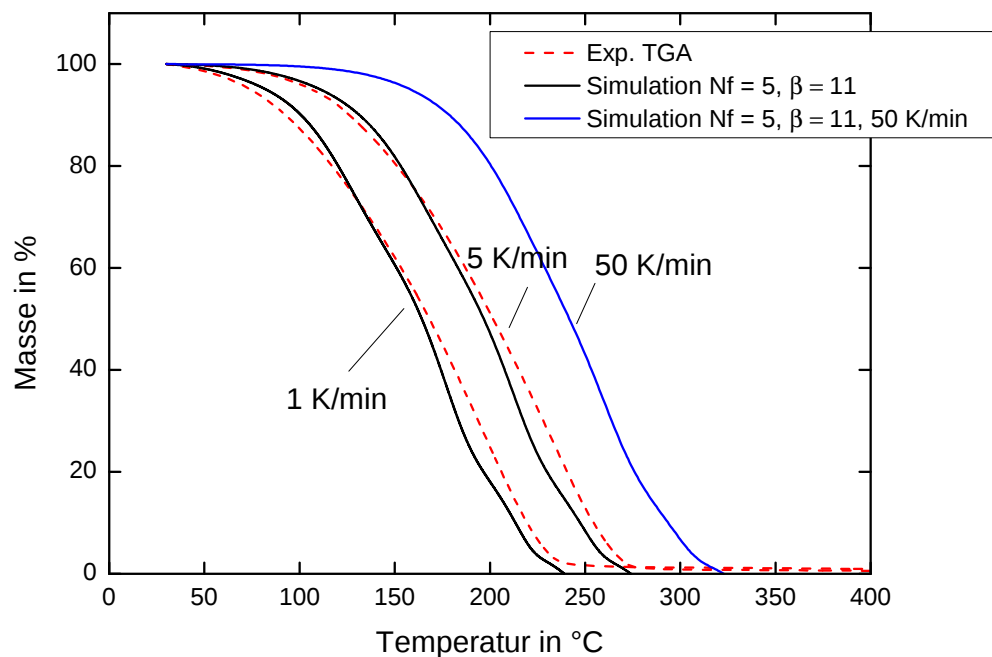


Abbildung 6.37: Vergleich berechneter und gemessener Siedeverläufe von Heizöl für Aufheizraten von 1 K/min und 5 K/min sowie berechneter Siedeverlauf für 50 K/min

6.3.2 Simulationsergebnisse eines Heizöl-Poolfeuers

In der Berechnung wird das Heizöl-Poolfeuer mit dem Tiegeldurchmesser von 50,5 mm und der Tiefe von 11 mm nachgebildet.

Abb. 6.38 zeigt den Massenabbrandratenverlauf für das Poolfeuer mit dem aus den einzelnen Quasi-Komponenten bestehenden Brennstoff. In diesen Fall wird angenommen, dass der gesamte Brennstoff nur aus der jeweiligen Quasi-Komponente besteht. Die Berechnungen zeigen, dass die Massenabbrandrate mit steigender Molmasse niedriger wird. Die qualitative stufenweise Abnahme der Massenabbrandrate, welche bei den experimentellen Ergebnissen beobachtet wurde, kann demzufolge durch fortschreitende Quasi-Komponenten während des Verbrennungsvorgangs abgebildet werden.

Bei der Verwendung von mehreren Komponenten mit definierter Verdunstungsreihenfolge existieren zwei Ansätze zur Modellierung des Verdunstungsverhaltens [VanGel. 17]:

- Diffusion-limited vaporization (DLV) und
- Batchdestillation

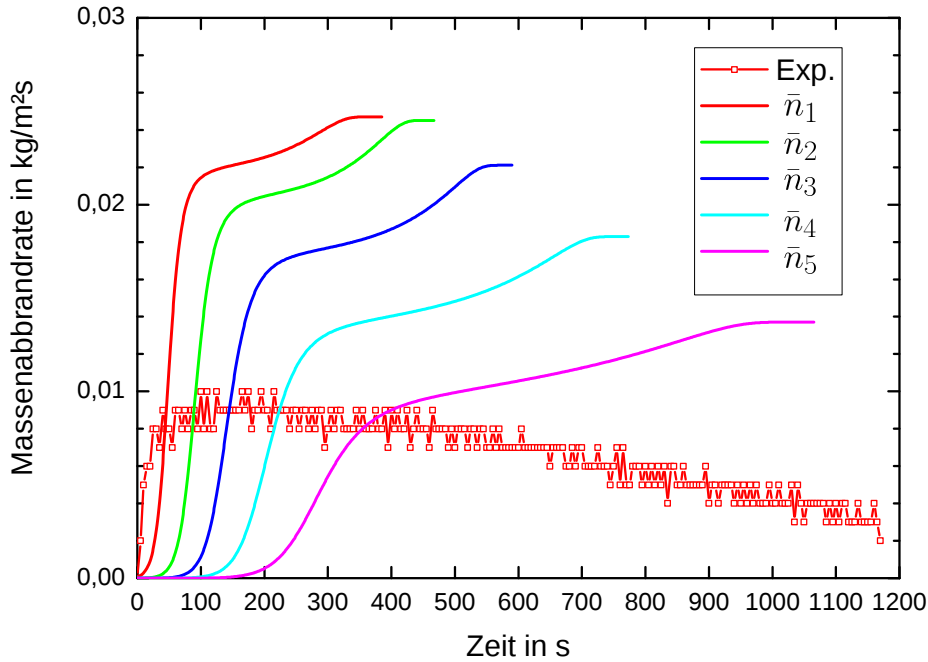


Abbildung 6.38: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate einzelner QDM-Komponenten

Bei der Batchdestillation verdunsten die Komponenten einzeln nacheinander, wohingegen bei DLV mehrere Komponenten gleichzeitig verdunsten können. Beide Ansätze werden durch die Anpassung des Verdunstungsmodells untersucht.

In Abb. 6.39 ist der Verlauf der Massenabbrandrate mit DLV dargestellt. Die Anzahl von Quasi-Komponenten beträgt dabei $N_f = 5$. Dargestellt sind die Kurven der Massenabbrandraten der einzelnen Komponenten und die Summierung der Massenabbrandrate. Wie in DLV-Modell definiert, tritt die Verdunstung der Komponenten gleichzeitig auf. Die Spitzenwerte der Massenabbrandraten werden nacheinander in Reihenfolge erreicht. Die berechneten Massenabbrandraten zeigen, im Vergleich zum Experiment, einen höheren Wert.

Der berechnete Verlauf der Massenabbrandrate mit Batchdestillation und einer Anzahl von Quasi-Komponenten von $N_f = 5$ ist in Abb. 6.40 dargestellt. Ein Absinken der Massenabbrandraten ist weiterhin ab n_3 zu beobachten. Bei der Zunahme der Anzahl von Quasi-Komponenten ist dieser Effekt noch besser zu erkennen, wie im Verlauf in Abb. 6.41 für $N_f = 10$ dargestellt wird. Der berechnete Verlauf zeigt im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen zu hohe Massenabbrandraten.

Die berechneten Massenabbrandraten zeigen einen deutlich höheren Wert als im Experiment gemessen. Eine mögliche Ursache hierfür ist, dass die Energieeinträge von der Flamme für Heizöl niedrigere Werte aufweisen als für n-Heptan, welches als Basis für die Berechnungen

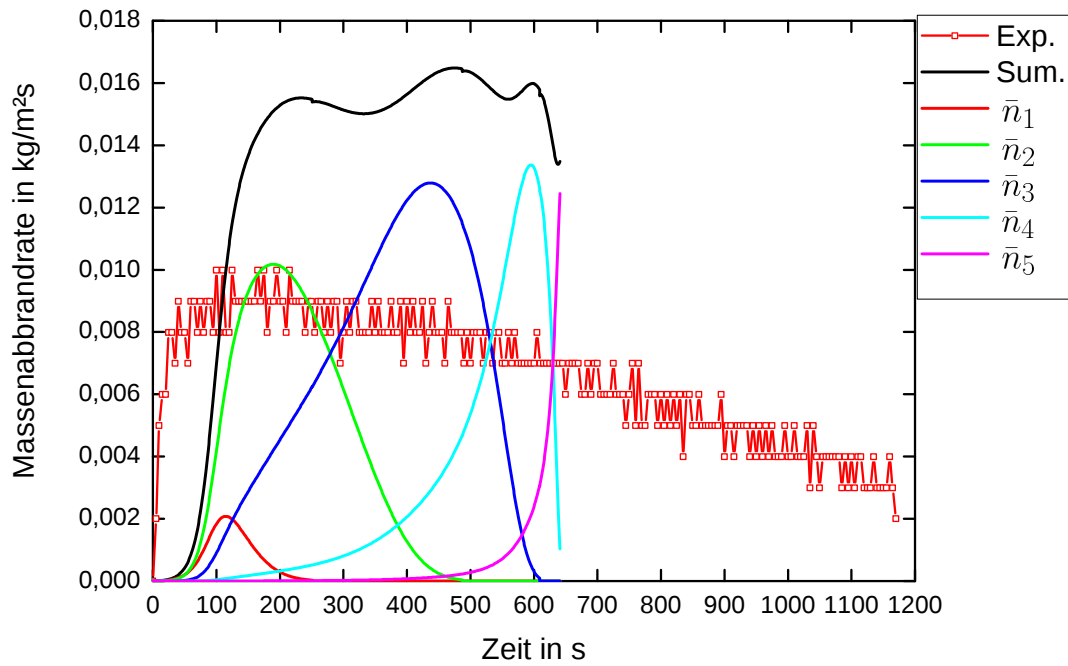


Abbildung 6.39: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate für Heizöl-Poolfeuer mit QDM und DLV ($N_f = 5$)

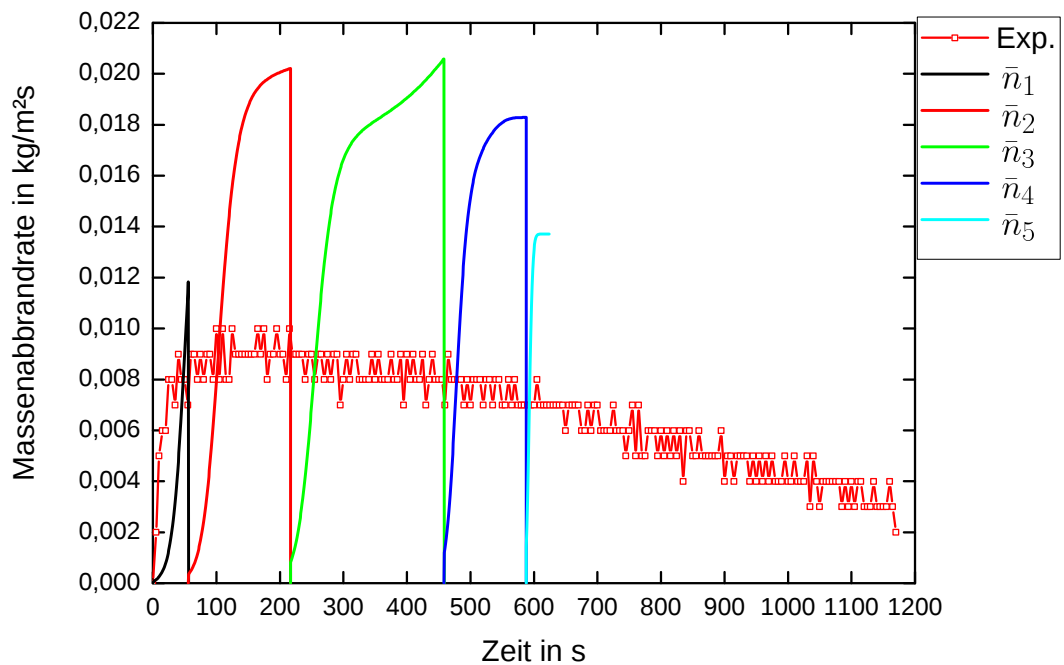


Abbildung 6.40: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate für Heizöl-Poolfeuer mit QDM und Batchdestillation ($N_f = 5$)

genommen wurde. In den experimentellen Versuchen wurde bei der Verwendung von Heizöl eine stark rußende Flamme beobachtet, welche einen niedrigeren Energieeintrag verursachen kann. Dies hat Einfluss auf den Energieeintrag durch Strahlung ($\dot{q}_{rad}''$) und Konvektion ($\dot{q}_{conv}''$).

Für die Annahme von 50 % des Energieeintrags aus Strahlung und Konvektion ergibt sich ein Verlauf der Massenabbrandrate für das DLV-Modell wie in Abb. 6.42 dargestellt. Das Ergebnis mit Batchdestillation ist in Abb. 6.43 und 6.44 für $N_f = 5$ bzw. $N_f = 10$ gezeigt. Durch die Reduzierung des Energieeintrags ergeben sich vergleichbare Ergebnisse der Rechnung mit den experimentellen Messungen. Die Spitzenwerte der Massenabbrandraten der einzelnen Komponenten werden dabei noch zu hoch berechnet.

6.3.3 Fazit

Die Validierung und die Berechnungsergebnisse zeigen, dass das QDM für die Berechnung von Heizöl-Poolfeuern geeignet ist. In der vorliegenden Arbeit wurden die Gleichungen zur Berechnung von Energieeinträgen aus Strahlung und Konvektion auf der Basis von n-Heptan verwendet. Die Verbesserung der Übereinstimmung zu den experimentellen Ergebnissen ist entsprechend durch die Anpassung dieser Gleichungen für Heizöl zu erzielen. Eine mögliche Methode ist die Energieeinträge einer Heizöl-Flamme durch die Nachbildung aus CFD-Berechnungen zu berechnen und diese als Eingang für die Berechnung der Massenabbrandraten zu verwenden.

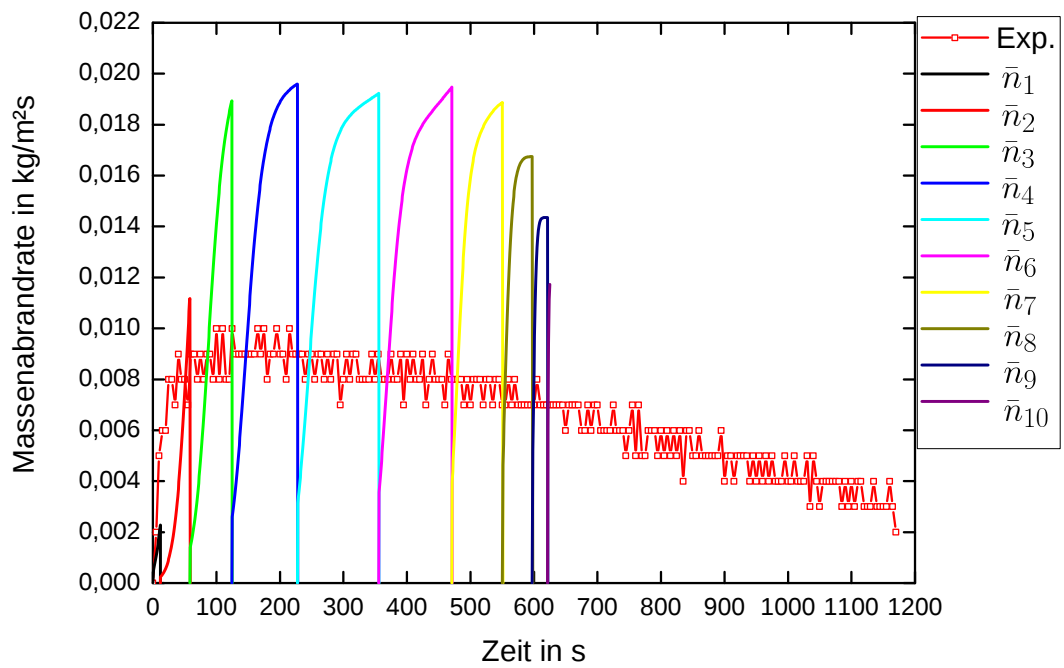


Abbildung 6.41: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate für Heizöl-Poolfeuer mit QDM und Batchdestillation ($N_f = 10$)

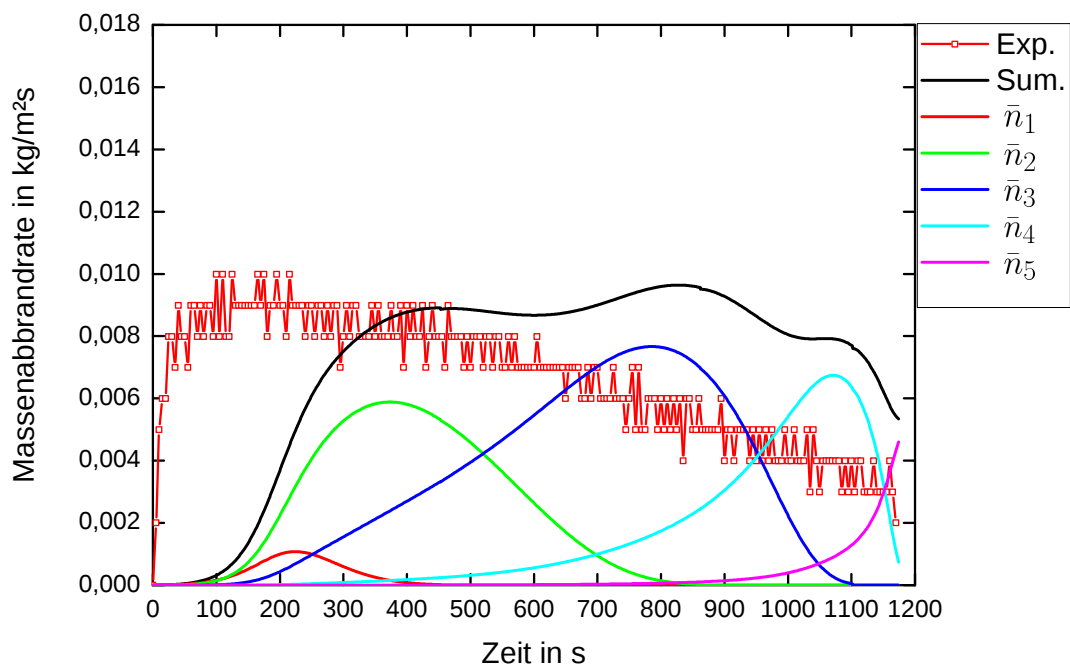


Abbildung 6.42: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate für Heizöl-Poolfeuer mit QDM und DLV bei 50 % Energieeintrag ($N_f = 5$)

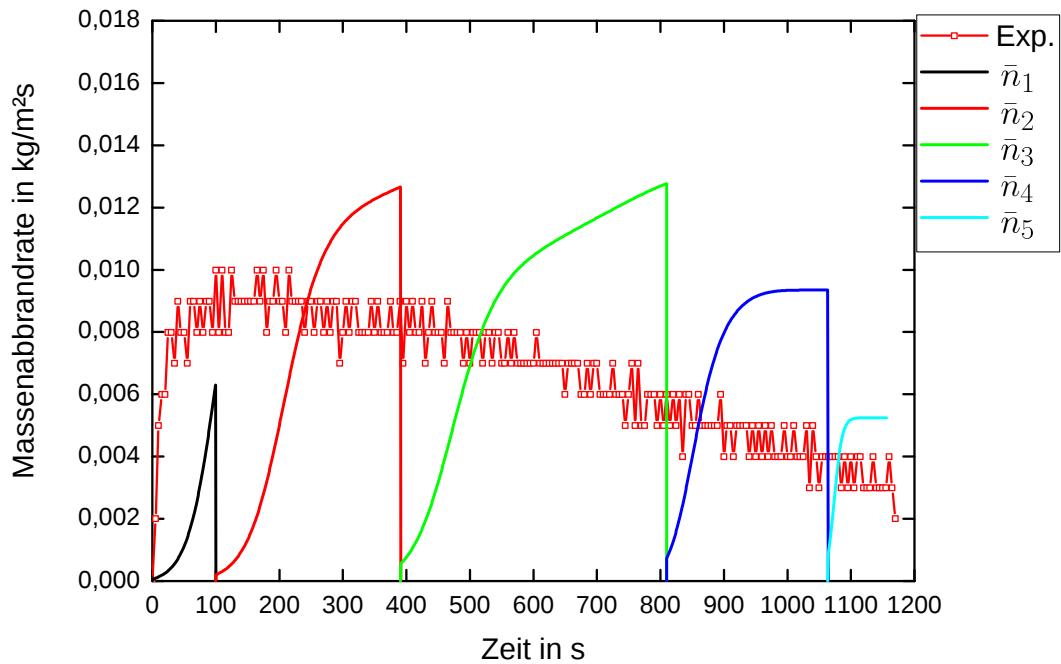


Abbildung 6.43: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate für Heizöl-Poolfeuer mit QDM und Batchdestillation bei 50 % Energieeintrag ($N_f = 5$)

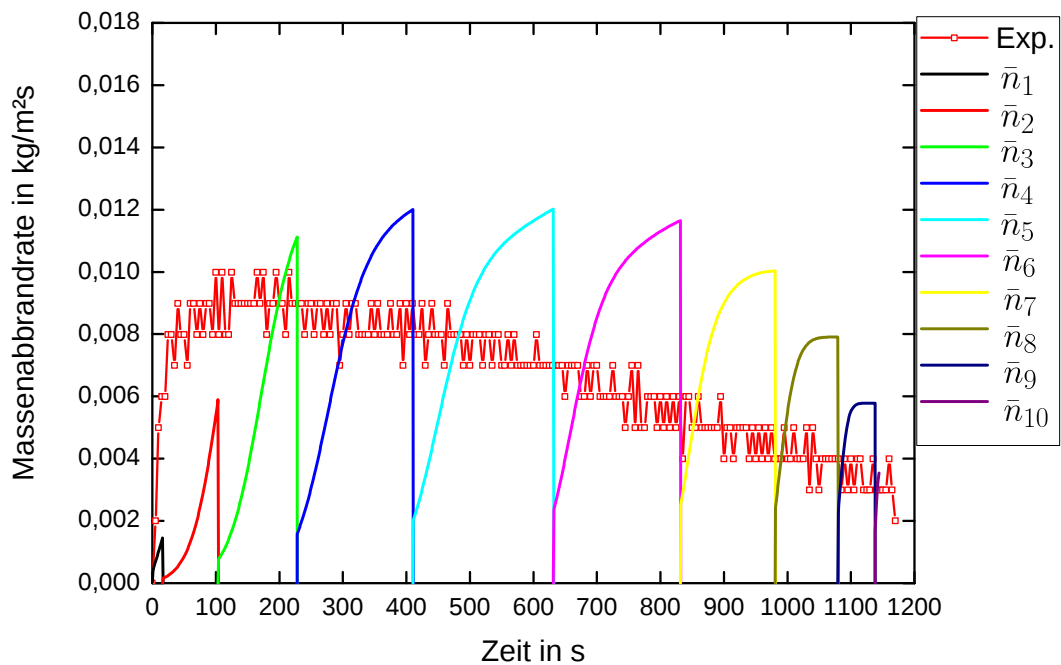


Abbildung 6.44: Berechneter Verlauf der Massenabbrandrate für Heizöl-Poolfeuer mit QDM und Batchdestillation bei 50 % Energieeintrag ($N_f = 10$)

7 Koppelung mit CFD

Das in den vorherigen Kapiteln entwickelte Verdunstungsmodell zur Berechnung der Massenabbrandrate von flüssigem Brennstoff in Poolfeuern kann in der Anwendung mit einer CFD-Simulation gekoppelt werden. Für die Koppelungsrechnung wird das n-Heptan-Poolfeuer mit dem Durchmesser 50,5 mm nachgebildet (s. Kapitel 5.1 und 6.1).

Als CFD-Software wird der Open Source Strömungslöser OpenFOAM und als Solver FireFOAM gewählt. Aufgrund des offenen Quellcodes ist die Implementierung einer Verbindung mit dem in Matlab geschriebenen Verdunstungsmodell möglich. Eine schematische Darstellung der Koppelung zwischen Matlab und OpenFOAM ist in Abb. 7.1 dargestellt. Dabei liefert das Verdunstungsmodell die Einlassrandbedingung für die Massenzufuhr und die Temperatur des verdunsteten Brennstoffs. Die CFD-Simulation wiederum liefert die Eingangsenergie für die Berechnung der Massenabbrandrate im Verdunstungsmodell.

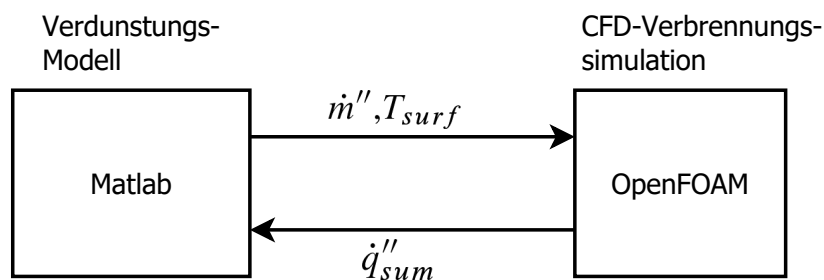


Abbildung 7.1: Darstellung Koppelung Matlab und OpenFOAM

7.1 FireFOAM

FireFOAM ist ein Strömungslöser für numerische Flammen- und Verbrennungssimulationen, welcher in der Open Source Simulationssoftware OpenFOAM 2.3.0 enthalten ist. FireFOAM löst dabei die Favre gemittelte und spatial gefilterte kompressible Navier-Stokes Gleichungen [Wang 11]. Die Turbulenzmodellierung erfolgt bei FireFOAM durch das Large Eddy Simulation (LES) Modell.

Folgende Erhaltungsgleichungen werden von FireFOAM gelöst [Vilfay. 15]:

- Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = 0 \quad (7.1)$$

- Impulserhaltung

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} (\nu_k + \nu_{sgs}) \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \right) + \bar{\rho} g_i \quad (7.2)$$

- Energieerhaltung

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{h}_s)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{h}_s)}{\partial x_j} = \frac{D\bar{p}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \left(\alpha_t + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial(\tilde{h}_s)}{\partial x_j} \right) + \overline{\dot{\omega}_{h_s}'''} - \frac{\partial \bar{q}}{\partial x_k} \quad (7.3)$$

- Massenfraktion Spezies

$$\frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_k)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\bar{\rho} \left(D_{m,Y_k} + \frac{\nu_t}{Pr_t} \right) \frac{\partial(\tilde{Y}_k)}{\partial x_j} \right) + \overline{\dot{\omega}_{Y_k}'''} \quad (7.4)$$

- Zustandsgleichung

$$\bar{p} = \bar{\rho} R \tilde{T} \quad (7.5)$$

Darin ist ρ die Dichte, u die Geschwindigkeit, ν_k die molekulare kinematische Viskosität, ν_{sgs} die Feinstruktur (sub-grid scale) Viskosität, ν_t die turbulente Viskosität, p den Druck, g die Schwerkraft, Y_k der Massenbruch der Spezies, D_{m,Y_k} die molekulare Diffusivität, h_s die sensible Enthalpie, α_t die thermische Diffusivität und R die spezifische Gaskonstante. Die Notation $\sim$ bezeichnet den Favre gefilterten Wert.

Die Berechnung des chemischen Quellterms bzw. der Brennstoffreaktionsrate $\overline{\dot{\omega}_{Y_k}'''}$ und der volumetrischen Wärmefreisetzung $\overline{\dot{\omega}_{h_s}'''}$ erfolgt durch das Eddy Dissipation Model (EDM), unter der Annahme von unendlich schneller Reaktionsgeschwindigkeit (infinitely fast chemistry). Die Reaktionsrate des Brennstoffs wird dabei berechnet durch:

$$\overline{\dot{\omega}_{Y_k}'''} = \frac{\bar{p}}{C\tau_t} \min \left(\tilde{Y}_f, \frac{\tilde{Y}_{O_2}}{r_s} \right) \quad (7.6)$$

Dabei ist $\bar{\rho}$ die LES-gefilterte Dichte, $\tilde{Y}_f$ und $\tilde{Y}_{O_2}$ den LES-gefilterten Brennstoff- bzw. Sauerstoff Massenanteil, C ein Modell-Koeffizient ($C = 5$), τ_t die Zeitskala aus dem Turbulenzmodell und r_s das stöchiometrische Massenverhältnis von Sauerstoff zu Brennstoff.

Der Strahlungsterm $\partial \bar{q} / \partial x_k$ in Gl. 7.3 wird durch das Strahlungsmodell fvDOM (finite volume Discrete Ordinates Model) [Chai 06] berechnet. Zur Berechnung des Absorptions- und Emissionskoeffizienten wird die Gasphase als grau betrachtet. Das verwendete Strahlungsmodell wird in Kapitel 7.3.6 beschrieben.

7.2 Koppelung FireFOAM mit Matlab

Die Koppelung von FireFOAM mit Matlab erfolgt mit der OpenFOAM-Funktion `externalCoupled`. Die gekoppelte Randbedingung wird dabei als `externalCoupled` definiert und dient als Schnittstelle für eine externe Applikation, in diesen Fall Matlab.

Der Transfer der Werte erfolgt durch definierte Textdateien. Das Datenformat der Textdateien ist im Anhang A.4 dargestellt. Die Ausgabe von FireFOAM, die von Matlab eingelesen wird, besteht aus der Zeit und dem am Inlet gemittelten Wärmefluss.

Zur Koppelung von OpenFOAM mit Matlab werden folgende Schritte durchgeführt:

1. Definition der Pooloberfläche (Inlet) als gekoppelte Randbedingung für Brennstoffgeschwindigkeit und -temperatur. Dies erfolgt durch den Befehl


```
runApplication createExternalCoupledPatchGeometry U,T
```
2. Starten des FireFOAM-Solvers. Die Einstellung von `externalCoupled` bewirkt, dass FireFOAM auf eine Initialisierungsdatei für U (Geschwindigkeit) und T (Temperatur) wartet.
3. Erstellen von Initialwerten für U und T. Als Initialwert wird eine geringe Massenabbrandrate von $1 \cdot 10^{-3} \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$ bei $293 \text{ }^\circ\text{C}$ festgelegt. Dies ergibt eine Einlassgeschwindigkeit von $3,04 \cdot 10^{-4} \text{ m/s}$ mit einer Dichte von $3,286 \text{ kg/m}^3$.
4. FireFOAM startet mit den Initialwerten. Nach jedem Zeitschritt entfernt FireFOAM die Lockdatei `OpenFOAM.lock` und wartet, dass die Lockdatei wieder vorhanden ist. Die Koppelung mit Matlab erfolgt nach jeder 1 Sekunde Berechnungszeit. Nach jeder Sekunde wird die Wärmemenge am Inlet ausgeschrieben.

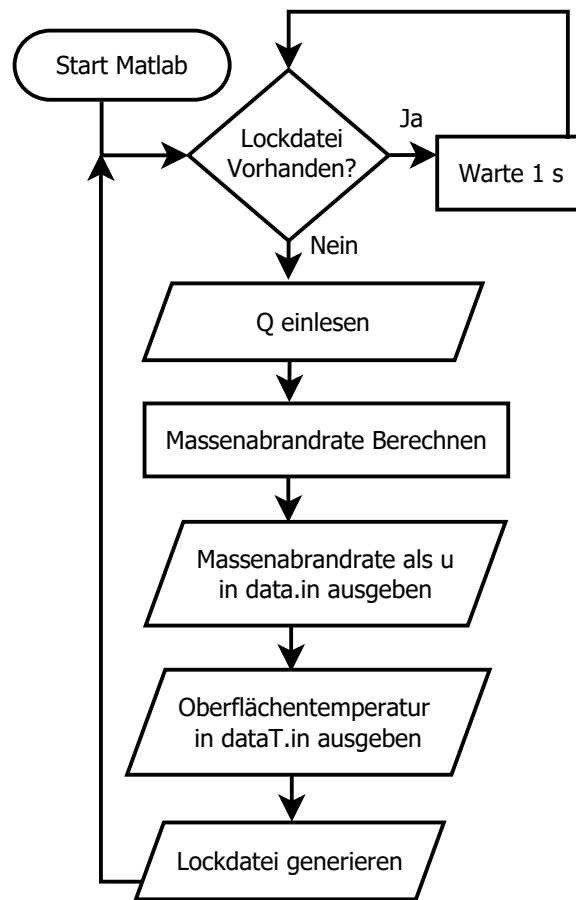


Abbildung 7.2: Matlab Programmablaufplan für die Koppelung mit OpenFOAM

5. Matlab wird gestartet. Eine Übersicht der durchgeführten Schritte ist in Abb. 7.2 dargestellt. Zunächst wird geprüft, ob die Lockdatei vorhanden ist. Falls diese vorhanden ist wird 1 Sekunde gewartet und dann nochmals geprüft ob die Lockdatei bereits gelöscht wurde. Wenn die Lockdatei nicht vorhanden ist, wird im ersten Schritt der von FireFOAM berechnete Energieeintrag an der Pooloberfläche aus der entsprechenden Textdatei eingelesen. Mit diesem Energieeintrag wird die Massenabbrandrate nach Kapitel 3 berechnet. Die Massenabbrandrate wird dann als Geschwindigkeit und die Oberflächentemperatur in `data.in` bzw. `dataT.in` ausgeschrieben. Zuletzt wird die Lockdatei wieder generiert.
6. Durch das Vorhandensein der Lockdatei wird FireFOAM wieder gestartet und die Schritte 4 und 5 wiederholt. Die Berechnung wird abgebrochen, wenn die Masse des Brennstoffs $1 \cdot 10^{-3}$ g erreicht.

7.3 Simulationseinstellungen

Die OpenFOAM Simulationseinstellungen sind unterteilt in Geometrie und Gitter, Randbedingungen, Solver, Stoffwerte, chemische Reaktion, Strahlung und Energieeintrag.

7.3.1 Geometrie und Gitter

Für die Berechnung wird ein dreidimensionales Rechengitter mit der Software ICEM-CFD 14.5 erstellt. Die Geometrie des Rechengebietes in Abb. 7.3a hat die Form eines Rechtecks mit einem kreisförmigen Einlass, welcher die Pooloberfläche darstellt. Die Seitenkanten haben dabei eine Länge $11 \times D$ (D : Pooldurchmesser), wohingegen die Höhe $20 \times D$ beträgt. Der Pooldurchmesser beträgt $D = 50,5 \text{ mm}$ und entspricht der Geometrie des Referenzriegels. Das Gitter besteht aus 260 000 Hexaeder-Zellen und ist in den Abb. 7.3b und 7.3c dargestellt.

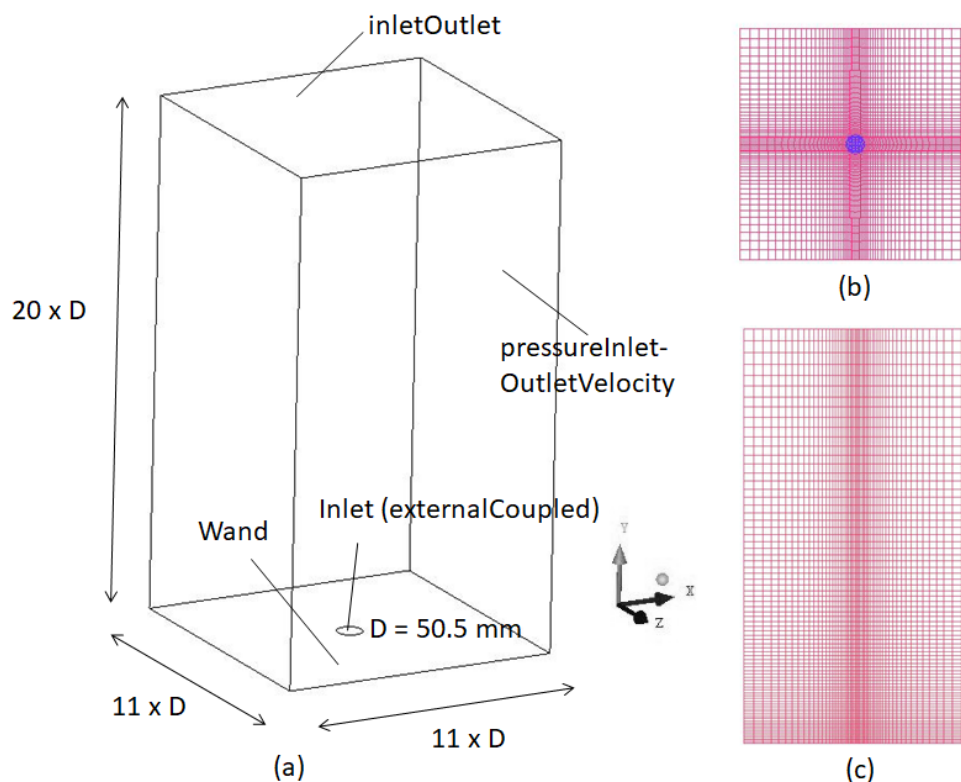


Abbildung 7.3: a) Geometrie und Randbedingung zur Modellierung des n-Heptan Poolfeuers in FireFOAM; b) Gitter zur Modellierung des n-Heptan Poolfeuers in FireFOAM Ansicht Unten; c) Seitenansicht

7.3.2 Randbedingungen

Die in der Simulation verwendeten Randbedingungen werden in Abb. 7.3a angegeben. Die quadratische Grundfläche wird als adiabate Wand mit einem kreisförmigen Einlass (**Inlet**) definiert. Das **Inlet** ist dabei als gekoppelt (**externalCoupled**) definiert und liest die Ausgaben der Massenabbrandrate (Gl. 3.10) und die Temperatur des verdunsteten Brennstoffs (Gl. 3.19) aus der Matlab-Berechnung ein.

Die obere Fläche und die Seitenflächen stellen die Atmosphäre dar und werden als **inletOutlet** bzw. **pressureInletOutletVelocity** Randbedingung definiert. Die Definitionen der Randbedingungen sind dabei [Openfo. 14]:

- Obere Fläche: **inletOutlet**
Der Gradient ist Null (**zeroGradient**) für eine austretende Strömung, wohingegen **fixedValue** für eine eintretende Strömung gilt.
- Seitenflächen: **pressureInletOutletVelocity**
Der Gradient ist Null (**zeroGradient**) für eine austretende Strömung. Für eine eintretende Strömung gilt **fixedValue** für tangentielle Komponenten.

Bei beiden Randbedingungen wird für **fixedValue** der Wert Null definiert. Demzufolge tritt keine Strömung durch die obere Fläche ein.

7.3.3 Solver

Für die Lösung der Druck-Geschwindigkeit-Kopplung der transienten Berechnung wird der PISO-Algorithmus (pressure implicit with splitting of operators) verwendet. Dazu wird der PIMPLE-Algorithmus als Einstellung mit einer äußeren Korrekturschleife von 1 ausgewählt (**nOuterCorrectors**), sodass sich der PISO-Algorithmus ergibt. Die Einstellungen sind in Anhang A.2 angegeben.

Der PIMPLE-Algorithmus ist eine Kombination aus dem PISO Algorithmus und dem SIMPLE Algorithmus (semi-implicit methods for pressure-linked equations). Das Ablaufdiagramm des PIMPLE-Algorithmus ist in Abb. 7.4 dargestellt.

Der Zeitschritt für die Iterationen wird vom Solver automatisch angepasst unter Berücksichtigung der vorgegebenen Courant-Zahl. Die maximale Courant-Zahl wird als 1 eingestellt.

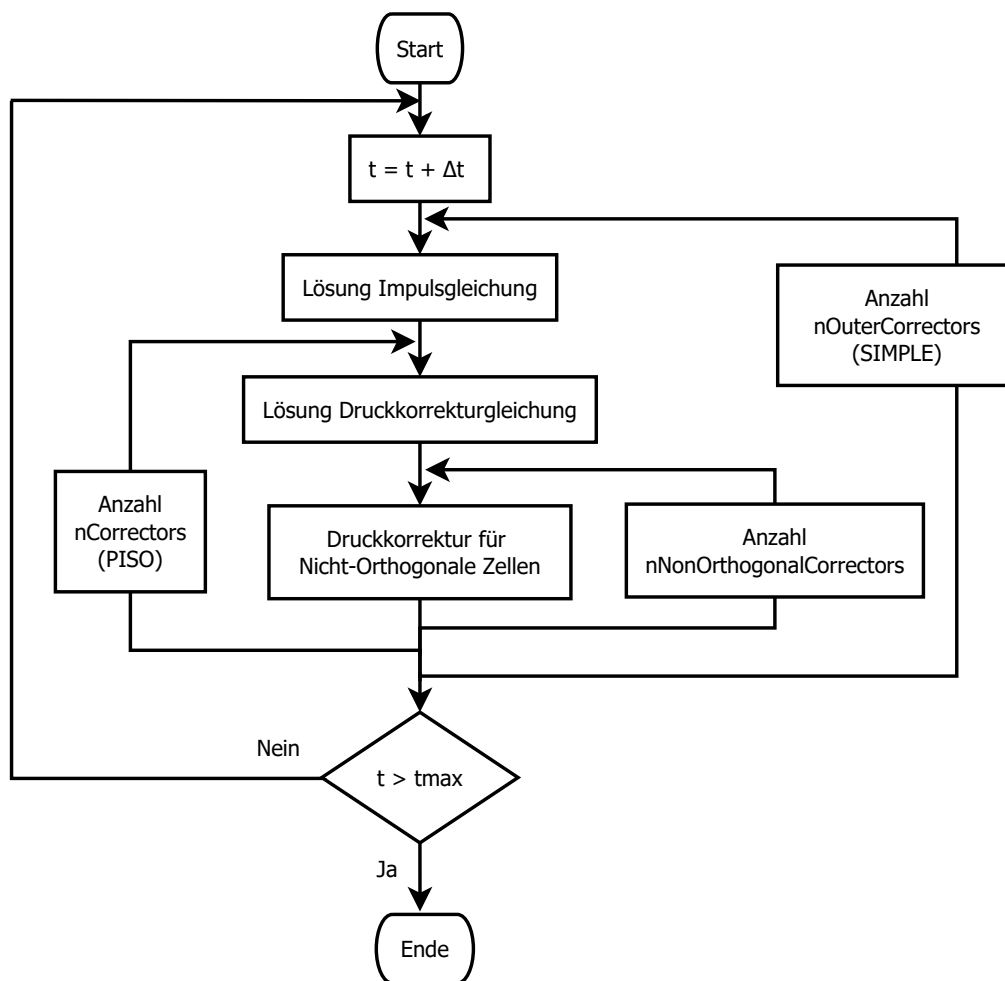


Abbildung 7.4: Ablaufdiagramm des PIMPLE-Algorithmus (Rekonstruiert und angepasst aus [Pendar 15])

7.3.4 Stoffwerte

Die Angabe der thermodynamischen Daten erfolgt aus der thermodynamischen Datenbank der NASA [McBrid. 93]. Die Koeffizienten zur Berechnung der thermodynamischen Daten von n-Heptan sind in Anhang A.3.1 angegeben.

Der c_p -Wert wird berechnet durch:

$$c_p = R(((a_4 T + a_3)T + a_2)T + a_1)T + a_0 \quad (7.7)$$

Dabei werden die Konstanten a_0 bis a_4 aus der Angabe von `highCpCoeffs` und `lowCpCoeffs` aus den thermodynamischen Daten in Anhang A.3.1 für Temperaturwerte ober- bzw. unterhalb $T_{\text{common}} (=1000 \text{ K})$ verwendet.

Die Viskositätswerte werden angegeben nach der Sutherland-Formel [Openfo. 14]:

$$\mu = \frac{A_s \sqrt{T}}{1 + T_s/T} \quad (7.8)$$

Dabei stellen A_s und T_s den Sutherland-Koeffizient bzw. die Temperatur dar. Für die Viskosität von n-Heptan wird die Kurve aus [Daubert 89] an die Sutherland-Formel angepasst, sodass sich die Werte in Anhang A.3.2 für A_s und T_s ergeben.

7.3.5 Chemische Reaktion

Zur Beschreibung der Verbrennungsreaktion von n-Heptan wird der globale Mechanismus



verwendet. Die Reaktionsrate ergibt sich mit der Gleichung 7.6 aus dem Massenanteilen von n-Heptan und Sauerstoff.

7.3.6 Strahlung

Die Strahlungsgleichung (radiative transfer equation oder RTE) wird gelöst durch das Strahlungsmodell fvDOM. Das Gas wird weiterhin als grau betrachtet, d. h. dass die spektralen Abhängigkeiten der Strahlungs vernachlässigt werden. Die Änderung der Strahlungsintensität wird in FireFOAM berechnet mit [Vilfay. 15]:

$$\frac{d\bar{I}}{ds} = \kappa_\lambda (\bar{I}_b - \bar{I}), \quad (7.10)$$

Dabei ist I die Strahlungsintensität, s die Weglänge und κ_λ der Absorptionskoeffizient. Die Strahlungsintensität eines schwarzen Körpers I_b wird dabei berechnet mit $I_b = \sigma \bar{T}^4 / \pi$.

Der Absorptionskoeffizient κ_λ wird nach dem Model `greyMeanAbsorptionEmission` gebildet durch:

$$\kappa_\lambda = p(X_{\text{CO}_2} a_{\text{CO}_2} + X_{\text{H}_2\text{O}} a_{\text{H}_2\text{O}} + X_{\text{C}_7\text{H}_{16}} a_{\text{C}_7\text{H}_{16}}), \quad (7.11)$$

Dabei ist p der Druck in atm, X_i der Stoffmengenanteil der Komponente i und a_i der mittlere Plancksche Absorptionskoeffizient ($\text{m}^{-1} \text{atm}^{-1}$). Der mittlere Plancksche Absorptionskoeffizient a_i wird weiterhin für die Komponenten CO_2 und H_2O durch Kurvenanpassungen nach

[Labora.] beschrieben durch die Gleichung:

$$a_i = c0 + c1(1000/T) + c2(1000/T)^2 + c3(1000/T)^3 + c4(1000/T)^4 + c5(1000/T)^5 \quad (7.12)$$

Die Koeffizienten sind in der Tabelle 7.1 angegeben.

Tabelle 7.1: Koeffizienten zur Berechnung der Absorptionskoeffizienten von H₂O und CO₂

	H ₂ O	CO ₂
c0	-0,23093	18,741
c1	-1,1239	-121,31
c2	9,4153	273,5
c3	-2,9988	-194,05
c4	0,51382	56,31
c5	-1,87E-05	-5,8169

7.3.7 Energieeintrag

Der Energieeintrag von der Flamme an die Pooloberfläche besteht aus Konvektion und Strahlung und liefert die benötigte Energie zur Aufwärmung und Verdunstung des flüssigen Brennstoffs. In der gekoppelten Berechnung werden die Energieeinträge durch Konvektion und Strahlung von FireFOAM berechnet und an Matlab für die Massenabbrandrechnung übergeben.

Der Energieeintrag durch Konvektion am Inlet wird berechnet durch [Vilfay. 15]:

$$\dot{q}_{conv}'' = -(\alpha_l + \alpha_{sgs})\rho c_p \frac{T_{surface} - T_g}{\delta z/2} \quad (7.13)$$

Dabei ist α_l und α_{sgs} die laminare bzw. turbulente Wärmediffusivität, $T_{surface}$ die Temperatur der Pooloberfläche, T_g die Gastemperatur in der Mitte der ersten Zelle oberhalb der Pooloberfläche und δz die Zellhöhe Normal zur Pooloberfläche.

Gleichung 7.13 kann umgeschrieben werden zu:

$$\dot{q}_{conv}'' = -(\alpha_l) \frac{\partial h}{\partial z} \quad (7.14)$$

Dabei ist h die Enthalpie. Es wird dabei angenommen, dass der laminare konvektive Energieeintrag überwiegt und der turbulente Anteil der Wärmediffusivität Null ist ($\alpha_{sgs} = 0$). In FireFOAM kann der konvektive Energieeintrag berechnet werden durch den Code

```
-al thermo:alpha*snGrad(h).
```

Die Strahlungsenergie, die an der Pooloberfläche eintritt, ergibt sich aus der Differenz zwischen der auftreffenden (incident radiative flux) und der emittierten Strahlungsenergie. Die Strahlungsenergie wird von dem Strahlungsmodell berechnet und durch die Variable Q_r geliefert.

7.4 Ergebnisse

Der zeitlichen Verlauf der Massenabbrandraten des n-Heptan-Poolfeuers, welcher durch die Koppelung des Verdunstungsmodells mit FireFOAM berechnet wurde, ist in Abb. 7.5 dargestellt. Weiterhin sind die Ergebnisse ohne Koppelung aus dem Kapitel 6.1 und die Messergebnisse aus Kapitel 5 angegeben. Bei der mit FireFOAM gekoppelten Rechnung steigt die Massenabbrandrate zügig innerhalb von 100 s auf den Wert von $0,036 \text{ kg}/(\text{m}^2\text{s})$. Danach steigt die Massenabbrandrate stetig auf ca. $0,044 \text{ kg}/(\text{m}^2\text{s})$ bis zum vollständigen Verbrauch des Brennstoffs nach 251 s. Der Vergleich zeigt, dass die Massenabbrandrate der gekoppelten Rechnung fast doppelt so groß ist wie die der ungekoppelten Rechnung. Wie bereits bei der ungekoppelten Berechnung festgestellt, ist der Anstieg der Massenabbrandrate in der Startphase geringer als bei den experimentellen Ergebnissen.

In Abb. 7.6 ist der berechnete zeitliche Verlauf der Masse des Brennstoffs dargestellt. Wegen der höheren Massenabbrandrate ist die Massenabnahme des Brennstoffs der gekoppelten Rechnung deutlich schneller.

Die Energieeinträge an der Brennstoffoberfläche, bestehend aus Strahlung und Konvektion, sind in Abb. 7.7 dargestellt. Die berechneten Energieeinträge von Strahlung der gekoppelten Berechnung zeigen dabei einen relativ konstanten Verlauf von $7000 \text{ W}/\text{m}^2$. Der konvektive Energieeintrag steigt von $5000 \text{ W}/\text{m}^2$ auf $7000 \text{ W}/\text{m}^2$ innerhalb von 100 s und bleibt konstant auf dem Wert von $7000 \text{ W}/\text{m}^2$. In Summe beträgt der Energieeintrag konstant ca. $14000 \text{ W}/\text{m}^2$ nach 100 s. Der Vergleich zeigt, dass die Energieeinträge der gekoppelten Rechnung fast doppelt so groß sind wie die der ungekoppelten Rechnung. Durch die höheren Energieeinträge steht für die gekoppelte Rechnung mehr Energie zur Verdunstung des Brennstoffs zur Verfügung, sodass sich eine doppelt so große Massenabbrandrate im Vergleich zur ungekoppelten Rechnung ergibt.

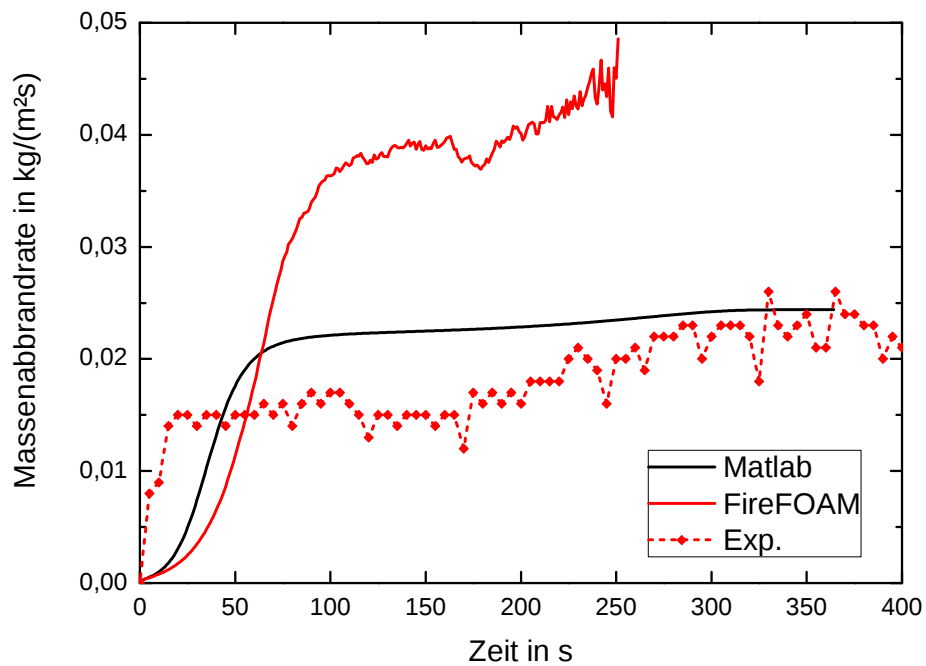


Abbildung 7.5: Vergleich der berechneten Massenabbrandraten des n-Heptan-Poolfeuers von Matlab und FireFOAM

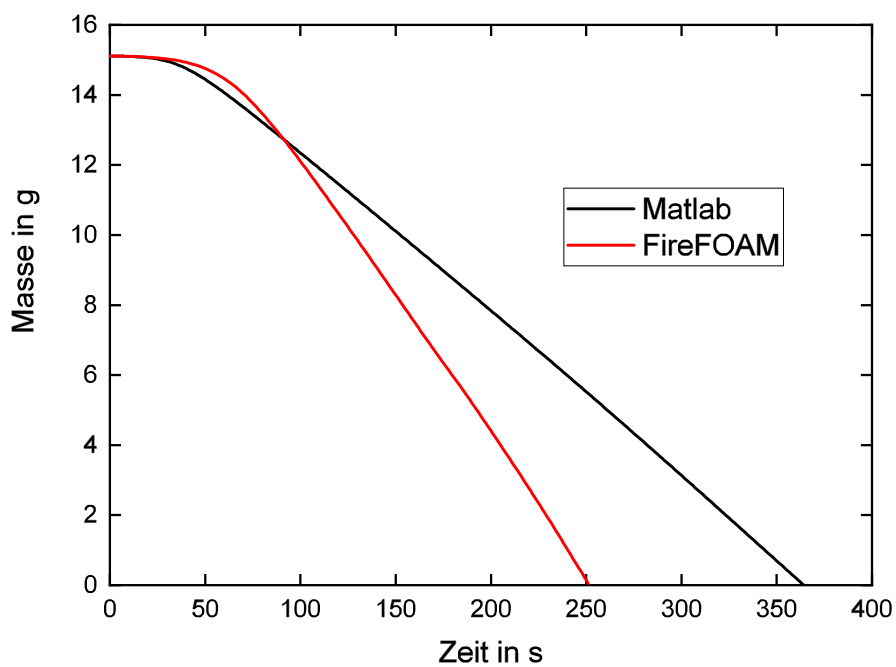


Abbildung 7.6: Vergleich der berechneten Massenverläufe des n-Heptan-Poolfeuers von Matlab und FireFOAM

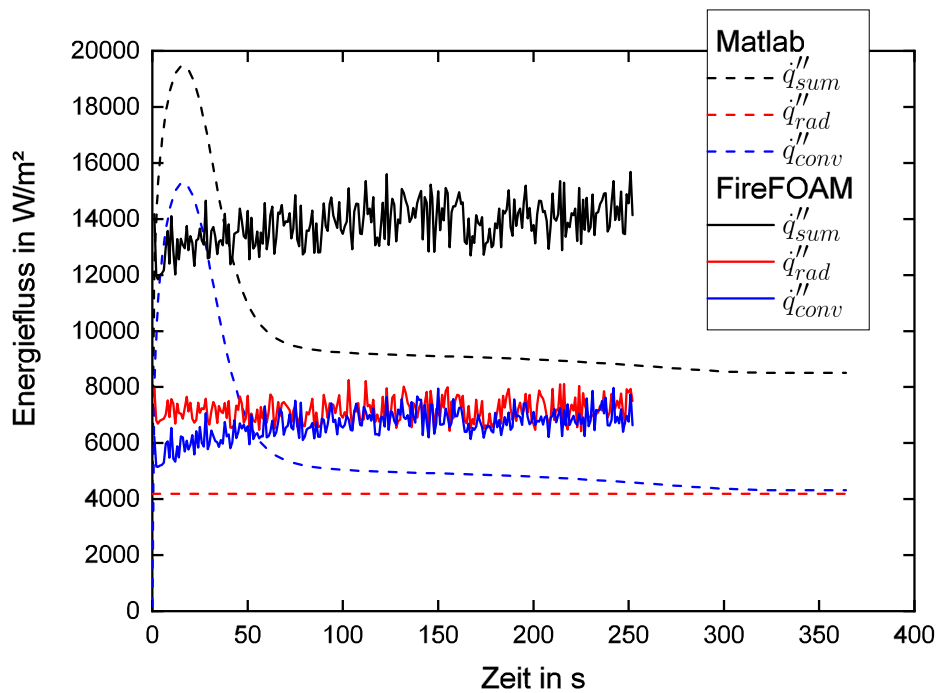


Abbildung 7.7: Vergleich der berechneten Energieeinträge an der Brennstoffoberfläche des n-Heptan-Poolfeuers von Matlab und FireFOAM

Weiterhin ergibt sich eine höhere Endtemperatur der Brennstoffoberfläche von 90°C , wie aus Abb. 7.8 entnommen werden kann. Die höhere Endtemperatur ergibt sich dadurch, dass in der Siedephase der Energieeintrag höher ist als bei der ungekoppelten Berechnung.

Die Werte der Massenabbrandrate der gekoppelten Berechnung ergeben sich aus den Energieeinträgen der in FireFOAM berechneten Strahlungs- und Konvektionswerte. Da die Werte der Massenabbrandrate der ungekoppelten Rechnung eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Messungen nachweisen (Kapitel 6.1), kann gefolgert werden, dass die bislang berechneten Energieeinträge von Strahlung und Konvektion von FireFOAM zu hoch berechnet werden. Eine weitere Schlussfolgerung ist, dass geringe Abweichungen der Energieeinträge von Strahlung und Konvektion bereits große Auswirkungen auf die berechnete Massenabbrandrate haben. Es besteht die Möglichkeit, dass eine bessere Übereinstimmung durch die Verwendung von mehr detaillierten Modellen und Annahmen in FireFOAM erreicht werden kann.

Mögliche Modelleinstellungen in FireFOAM zur Verbesserung der Übereinstimmung mit der ungekoppelten Rechnung und experimentellen Messungen sind:

- Verbrennungsmodell. In dieser Arbeit wird durch das verwendete Verbrennungsmodell EDM und unendlich schnelle Reaktion das Gas als "Vermischt ist gleich Verbrannt" betrachtet und somit die Verbrennungsrate vereinfacht bestimmt und oft

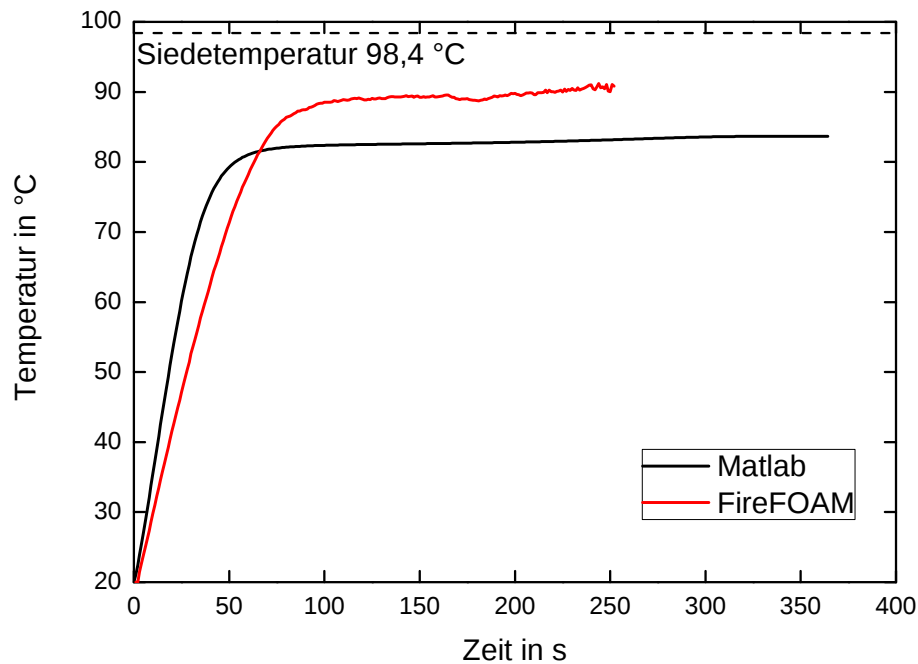


Abbildung 7.8: Vergleich der berechneten Oberflächentemperaturen des n-Heptan-Poolfeuers von Matlab und FireFOAM

überschätzt. Eine detaillierte Verbrennungsbetrachtung liefert das Eddy-Dissipation-Concept (EDC) [Magnus. 05]. Bei dem EDC-Modell wird angenommen, dass die turbulenten Mischungsvorgänge und chemische Reaktionen in Feinstrukturen mit der Größenordnung der Kolmogorov-Länge stattfinden. Durch die Verwendung des EDC-Modells lassen sich weiterhin mehr detaillierte Reaktionsmechanismen anstatt der globalen Reaktion verwenden.

- Strahlungsmodell. In der aktuellen Arbeit wurden die Strahlungseigenschaften von Gas als grau betrachtet. Somit wird die spektrale Abhängigkeit vernachlässigt. Die Berücksichtigung der spektralen Abhängigkeit der Strahlungseigenschaften ermöglicht das Wide-Band Model, in welchem die Kurven zur Absorption bzw. Emission der Gase in Bändern definiert werden. Die Bänder teilen dabei das Spektrum der Wellenlängen auf. Spektrale Modelle erhöhen die Genauigkeit, sind jedoch mit einem größeren Rechenaufwand verbunden.

7.5 Rechnung mit Zündungsvorgang

Im Kapitel 6.1.8 wurde der Zündungsvorgang bei der ungekoppelten Berechnung durch einen zusätzlichen Energieeintrag modelliert. Bei der gekoppelten Berechnung mit Zündungsenergie ergibt sich der in Abb. 7.9 dargestellte Verlauf der Massenabbrandrate.

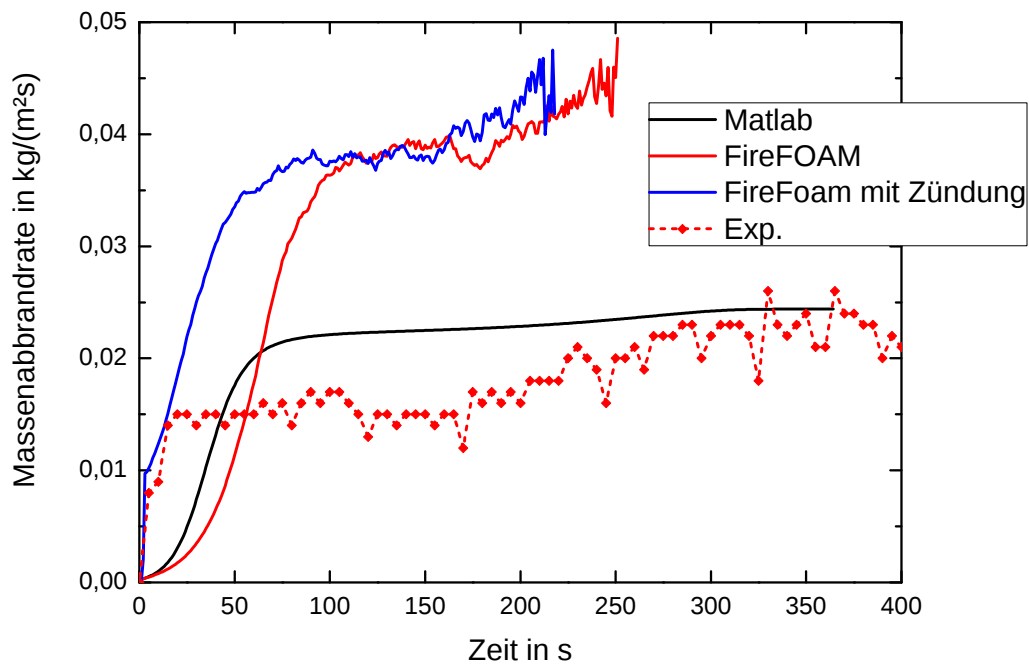


Abbildung 7.9: Vergleich der berechneten Massenabbrandraten des n-Heptan-Poolfeuers von Matlab und FireFOAM unter Berücksichtigung des Zündungsvorgangs

Am Ende der Startphase im Experiment, nach 15 s, ergibt sich bei der gekoppelten Berechnung der Wert $0,015 \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$, was einen Unterschied von 7 % zu dem Wert des Experiments von $0,014 \text{ kg}/(\text{m}^2 \text{ s})$ darstellt. Aus dem Vergleich der gekoppelten Berechnung mit Zündungsenergie mit den experimentellen Ergebnissen kann gefolgt werden, dass durch die zusätzliche Zündungsenergie die Steigung der Massenabbrandrate in der Startphase gut übereinstimmt.

8 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein Modell entwickelt, welches das transiente Verdunstungsverhalten von Poolfeuern während des Verbrennungsprozesses wiedergeben kann. Berechnet wird dabei die Massenabbrandrate, welche die Menge an verdunstetem flüssigem Brennstoff wiedergibt. Das Verdunstungsmodell wurde weiterhin erweitert, um das Verdunstungsverhalten von Mehrkomponentenbrennstoffen wiederzugeben. Das Verdunstungsmodell liefert bei einer gekoppelten CFD-Berechnung die Einlass-Randbedingungen des verdunsteten Brennstoffs.

Ein Prüfstand zur Durchführung von Messungen der Massenabbrandrate und der Temperaturen innerhalb des flüssigen Brennstoffs wurde aufgebaut. Die experimentellen Ergebnisse wurden dabei für die Validierung der berechneten Ergebnisse verwendet. Als Brennstoff für die Poolfeuer wurden n-Heptan, Ethanol, Mischungen von n-Heptan und Ethanol in verschiedenen Verhältnissen sowie Heizöl eingesetzt.

Experimentelle Ergebnisse haben gezeigt, dass die Massenabbrandrate in Poolfeuern für Einkomponentenbrennstoffe nicht konstant ist und somit transient verläuft. Dieser Massenabbrandratenverlauf besteht aus der Startphase, Erwärmungsphase, Transitionsphase, Siedephase und Abklingphase. Die Massenabbrandrate verläuft dabei in der Erwärmungs- und Siedephase konstant, wobei die maximale Massenabbrandrate während der Siedephase erreicht wird. Weiterhin steigen die Temperaturen nach der Zündung innerhalb der Brennstoffflüssigkeit bis zur Siedetemperatur stetig an, wenn die Siedephase erreicht ist. Die höhere Massenabbrandrate in der Siedephase kann durch zwei Phänomene erklärt werden: Während der Erwärmungsphase wird ein Teil der Energiezufuhr für die Erwärmung des Brennstoffs verwendet. In der Siedephase wird keine Energie für die Erwärmung der Flüssigphase benötigt, sodass die gesamte verfügbare Energie für die Verdunstung des Brennstoffs verwendet wird. Weiterhin treten während der Siedephase Blasen auf, welche den Siedeprozess beschleunigen.

Die Mischung von n-Heptan und Ethanol bildet ein azeotropes Gemisch. Diese Eigenschaft hat Einfluss auf das Verdunstungsverhalten bei Poolfeuern. Aus den Messungen der Massenabbrandratenverläufe kann geschlossen werden, dass der Brennstoff zunächst nach der Zusammensetzung der Azeotrope verdunstet und nachfolgend das Verdunstungsverhalten der übriggebliebenen Brennstoffkomponente aufweist. Für Heizöl als Mehrkomponentenbrennstoff wurde ein sinkender Massenabbrandratenverlauf gemessen. Die Massenabbrandrate folgt dabei während des Verbrennungsvorgangs dem Verdunstungsverhalten

ten der jeweils niedrigsten Kohlenwasserstoffkomponente. Nachdem die niedrigste Kohlenwasserstoffkomponente aufgebraucht ist, bestimmt die nächsthöhere Komponente das Verdunstungsverhalten.

Weitere Messungen wurden für Poolfeuer mit Einkomponentenbrennstoffen an Tiegeln mit verschiedenen Durchmessern durchgeführt. Für Tiegel mit größerem Volumen blieb die Siedephase bis zum Ende des Verbrennungsvorgangs aus. Als Ursache konnte ermittelt werden, dass der flüssige Brennstoff durch das höhere Brennstoffvolumen während des Verbrennungsvorgangs noch nicht vollständig auf Siedetemperatur erwärmt wurde. Eine weitere Messung von Poolfeuern mit Tiegel aus Quarzglas zeigte ebenfalls, dass die Siedephase ausblieb. Durch fehlenden Energieeintrag durch die Tiegelwand aufgrund der niedrigen Wärmeleitung des Quarzglases wird der Brennstoff bis zum Ende des Verbrennungsvorgangs nicht vollständig auf Siedetemperatur erwärmt.

Validierungen mit experimentellen Ergebnissen haben gezeigt, dass das entwickelte Verdunstungsmodell den Massenabbrandratenverlauf qualitativ gut wiedergeben kann. Die Massenabbrandraten von n-Heptan und Ethanol in der Siedephase konnten dabei durch die Simulation im Vergleich zu den Messergebnissen mit Abweichungen von 8 % bei n-Heptan bzw. 2 % bei Ethanol festgestellt werden. Abweichungen zeigten die berechneten Ergebnisse in der Startphase und in der Erwärmungsphase. In der Erwärmungsphase werden die Massenabbrandraten für n-Heptan höher bzw. für Ethanol niedriger berechnet. Der zügige Anstieg der Massenabbrandrate während der Startphase wurde weiterhin langsamer als in den Messungen berechnet. Weitere Analysen ergaben, dass der rapide Anstieg der Massenabbrandrate in den experimentellen Ergebnissen durch die zusätzliche Energiezufuhr des Zündungsprozesses resultierten. Beim Einbringen einer zusätzlichen Zündungsenergie wurden in der Berechnung eine gute Übereinstimmungen der Steigung der Massenabbrandrate in der Startphase erzielt. Insgesamt ergibt sich für n-Heptan eine 12 % kürzere bzw. bei Ethanol eine 12 % längere Abbrandzeit.

Für Mischungen von n-Heptan und Ethanol wurden die Massenabbrandraten in guter Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen berechnet. Der Zeitpunkt, in welchem die erste Komponente aufgebraucht ist, wird jedoch später berechnet als experimentell ermittelt. Die Ursache hierfür ist, dass in der Berechnung die Endtemperatur des flüssigen Brennstoffs unterhalb der Siedetemperatur liegt und demzufolge die Zusammensetzung des Dampfs von der Azeotrope abweicht.

Die Mehrkomponentenbrennstoffe wurden durch das Quasi-discrete Modell modelliert und durch Vergleiche mit TGA-Messungen validiert. Zwei Ansätze wurden für die Verdunstungsreihenfolge verwendet: DLV und Batchdestillation. Die Simulation eines Poolfeuers

mit Heizöl zeigt eine stufenweise Abnahme der Massenabbrandrate, wobei der stufenweise Verlauf für die Batchdestillation ausgeprägter ist. In der Simulation zeigen die berechneten Massenabbrandraten noch einen höheren Wert im Vergleich zu den experimentellen Ergebnissen. Eine mögliche Ursache hierfür ist, dass der Energieeintrag der Flamme für Heizöl niedriger ist als in der Simulation berechnet, da in der Berechnung der Energieeintrag auf dem Brennstoff n-Heptan basiert. Eine Berechnung mit 50 % Energieeintrag ergab bessere Übereinstimmungen mit den experimentellen Ergebnissen.

Das Verdunstungsmodell liefert die Menge an verdunstetem Brennstoff als Einlass-Randbedingung für eine CFD-Simulation mit den Strömungslöser FireFOAM. Die Energiezufuhr für die Verdunstung und Erwärmung des flüssigen Brennstoffs im Verdunstungsmodell wird wiederum von der CFD-Simulation geliefert. Die gekoppelte Berechnung zeigt eine fast doppelt so hohe Massenabbrandrate im Vergleich zur ungekoppelten Rechnung und den experimentellen Ergebnissen. Der Energieeintrag von der Flamme an die Brennstoffoberfläche wurde weiterhin als doppelt so groß im Vergleich zur ungekoppelten Rechnung ermittelt, was auf zu hohe berechnete Energieeinträge in Form von Strahlung und Konvektion von FireFOAM zurückzuführen ist. Bei der Verwendung von detaillierteren Verbrennungs- und Strahlungsmodellen in FireFOAM ist eine Verbesserung der Berechnungsergebnisse möglich.

Das entwickelte Verdunstungsmodell generiert realistische Massenabbrandraten, welche zur Voraussage des Verbrennungsverhaltens von Poolfeuern verwendet werden können. Das Modell wurde weiterhin erfolgreich mit dem Strömungslöser FireFOAM gekoppelt und zur Berechnung der Einlass-Randbedingungen für eine CFD-Simulation eines n-Heptan-Poolfeuers verwendet.

9 Summary

In this work a model that reproduces the transient evaporation behaviour of pool fires during the combustion process is developed. The model calculates the mass burning rate which represents the amount of evaporated liquid fuel during a pool fire. The evaporation model is further extended to include multicomponent fuels. The evaporation model can be used to provide the inlet boundary conditions of the evaporated fuel for a coupled CFD simulation.

An experimental setup for conducting measurements of the mass burning rate and the temperature inside the liquid fuel of a pool fire has been constructed. The experimental results were used for the validation of the calculated results. The fuel used for the pool fires were n-Heptane, Ethanol, mixture of n-Heptane and Ethanol in various ratios and heating oil.

Experimental results have shown that the mass burning rate in pool fires is not constant and thus transient. The progress of the mass burning rate consists of starting, preheating, transition, boiling, and decay stage. During the preheating and boiling stage the mass burning rate stays constant and the maximum mass burning rate is reached at the boiling stage. The temperature in the liquid fuel rises after ignition until it reaches the boiling temperature at the boiling stage. The higher mass burning rate during the boiling stage can be explained by two phenomena. First that during the preheating stage, a part of the available energy is used to heat up the liquid fuel. In the boiling stage the end temperature is already reached and so no energy is needed to heat up the liquid fuel, thus all of the available energy can be used to evaporate the liquid fuel. Second, bubbles occur during the boiling stage, which accelerate the evaporation process.

The mixture of n-heptane and ethanol forms an azeotropic mixture, which influences the evaporation behaviour of the corresponding pool fire. From the measurements of the mass burning rate it can be concluded that the fuel mixture first evaporates with the azeotropic composition and afterwards with the properties of the remaining fuel. A decreasing mass burning rate progress has been measured for heating oil. The mass burning rate follows the evaporation behaviour of the lowest hydrocarbon component during combustion. After the lowest hydrocarbon component is depleted, the next higher component determinates the evaporation behaviour.

Measurements were made for pool fires with single component fuels using pans with different diameters. The boiling phase was not observed at pans with larger volume. The reason for this is that the temperature of the liquid fuel has not fully reached the boiling temperature due to the larger fluid volume that need to be heated. Measurements of pool fires using glass pans showed that the boiling phase was absent. In this case the fuel has also not reached the boiling temperature due to the low heat conduction on the glass wall of the pan until the end of the burning process.

Validation using experimental results have shown that the developed evaporation model is capable of qualitatively reproducing the mass burning rate for pool fires. The mass burning rate in the boiling stage for n-heptane and ethanol calculated by the simulations showed differences of 8 % for n-heptane and 2 % for ethanol in comparison to the experimental measurements. Deviations have been observed for the starting and preheating stage. The mass burning rate during the preheating stage is calculated higher for n-heptane and lower for ethanol. The rapid increase of the mass burning rate during the starting stage is calculated slower than in the measurements. Further analysis showed that the observed rapid increase of the mass burning rate in the experimental measurements occurs because of the additional energy input from the ignition process. By introducing an additional ignition energy, the calculations showed a good agreement for the slope of the mass burning rate in the starting stage. The burn time is calculated 12 % shorter for a n-heptane and 12 % longer for an ethanol pool fire. Further calculations were carried out to determine the sensitivity of the modelling parameters.

For the mixtures of n-heptane and ethanol, the mass burning rate were calculated with good agreements to the experimental results. The time at which the first component is depleted were calculated later than in the experimental results. The reason for this is that in the calculations the final temperature of the liquid fuel is calculated below the boiling temperature and therefore the evaporated fuel has a deviated composition from the azeotropic point.

The multicomponent fuels were modelled using the quasi-discrete model and validated with TGA measurements. Two approaches consisting of DLV and batch distillation were used for the evaporation order of the components. The simulation of the multicomponent pool fire with heating oil as fuel showed a gradual decrease in the mass burning rate. The batch distillation showed a more pronounced gradual decrease of the mass burning rate than the DLV. The calculated mass burning rates were higher in the simulation than in the experimental results. A possible reason for this is that the energy input from the flame for heating oil is lower than used in the simulation, which are based on a n-heptane flame.

Further calculation using 50 % energy input showed better agreement with the experimental results.

The evaporation model provides the amount of evaporated fuel for the inlet boundary condition for a coupled CFD simulation using the FireFOAM flow solver. The energy input for the evaporation and heating of the liquid fuel of the evaporation model is in turn given as output of the CFD simulation. The coupled simulation showed a mass burning rate almost double of the uncoupled simulation and the experimental results. The energy input from the flame to the fuel surface was also found to be twice as large compared to the uncoupled calculation due to larger energy input in the form of radiation and convection from FireFOAM. Possible improvement could be achieved by using a more detailed combustion and radiation model in the CFD simulation.

The developed evaporation model is capable of generating realistic mass burning rates which can be used to predict the combustion behaviour of pool fires. The model was also successfully coupled with the FireFOAM solver and was used to calculate the inlet boundary for the CFD simulation of a n-heptane pool fire.

Literaturverzeichnis

- [Arias 03] Arias-Zugasti, M.; Rosner, D. E.: *Multicomponent fuel droplet vaporization and combustion using spectral theory for a continuous mixture*, Combustion and Flame, Band 135, 2003, Heft 3, Seiten 271–284, ISSN 0010-2180
- [Babrau. 83] Babrauskas, V.: *Estimating large pool fire burning rates*, Fire Technology, Band 19, 1983, Heft 4, Seiten 251–261, ISSN 0015-2684
- [Baehr 13] Baehr, H. D.; Stephan, K.: *Wärme- und Stoffübertragung*, 8. Auflage, Springer Vieweg, Berlin Heidelberg 2013, ISBN: 978-3-642-36557-7
- [Bergman 11] Bergman, T. L.; Incropera, F. P.; Lavine, A. S.: *Fundamentals of heat and mass transfer*. 7. Auflage, John Wiley & Sons, Chichester 2011, ISBN: 978-0-470-5019-9
- [Blinov 61] Blinov, V.; Khudyakov, G.: *Diffusion burning of liquids*, Army Engineer Research and Development Labs Fort Belvoir, Virginia, 1961
- [Board 08] Buncefield Major Incident Investigation Board: *The Buncefield Incident, 11 December 2005: The Final Report of the Major Incident Investigation Board*. Office of Public Sector Information, England 2008, ISBN: 978-0-7176-6270-8
- [Burali 16] Burali, N.; Lapointe, S.; Bobbitt, B.; Blanquart, G.; Xuan, Y.: *Assessment of the constant non-unity lewis number assumption in chemically-reacting flows*, Combustion Theory and Modelling, Band 20, 2016, Heft 4, Seiten 632–657, ISSN 1364-7830
- [Cengel 11] Cengel, Y. A.; Ghajar, A. J.; Ma, H.: *Heat and Mass Transfer: Fundamentals & Applications*, 4. Auflage, McGraw-Hill, New York 2011, ISBN: 978-0-0733-9812-9
- [Chai 06] Chai, J.; Rath, P.: *Discrete-ordinates and finite-volume methods for radiation heat transfer*, in: International Workshop on Discrete-Ordinates and Finite-Volume Methods for Radiation Heat Transfer, 2-3 January 2006, Indian Institute of Technology, Guwahati

- 2006, <http://dspace.nitrkl.ac.in/dspace/handle/2080/341>, abgerufen am 15.02.2018
- [Chen 11] Chen, B.; Lu, S. X.; Li, C. H.; Kang, Q.-S.; Lecoustre, V.: *Initial fuel temperature effects on burning rate of pool fire*, Journal of hazardous materials, Band 188, 2011, Heft 1, Seiten 369–374, ISSN 0304-3894
- [Chun 07] Chun, H.: *Experimentelle Untersuchungen und CFD-Simulationen von DTBP-Poolfeuern*, Dissertationsschrift, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin, 2007, ISBN: 978-3-9811655-0-0
- [Comah 11] COMAH Control of Major Accident Hazards: *Buncefield: Why did it happen*, 2011, <http://www.hse.gov.uk/comah/buncefield/buncefield-report.pdf>, abgerufen am 15.02.2018
- [Daubert 89] Daubert, T.; Danner, P.: *Physical and Thermodynamic properties of pure chemicals*, Hemisphere Pub. Corp., New York 1989, ISBN: 978-0-891-16948-2
- [Dean 99] Dean, J. A.: *Lange's handbook of chemistry*, 15. Auflage, McGraw-Hill, New York 1999, ISBN: 0-07-016384-7
- [Ding 14] Ding, Y.; Wang, C.; Lu, S.: *The effect of azeotropism on combustion characteristics of blended fuel pool fire*, Journal of hazardous materials, Band 271, 2014, Seiten 82–88, ISSN 0304-3894
- [Drysdale 11] Drysdale, D.: *An introduction to fire dynamics*, 3. Auflage, John Wiley & Sons, UK 2011, ISBN: 978-0-470-31903-1
- [Eldredge 11] Eldredge, W. M.; Thornock, J.; Smith, P.: *Development, verification, and validation of the responsive boundary model for pool fire simulations*, in: 20th AIAA Computational Fluid Dynamics Conference, 27-30 Juni 2011, Honolulu, Hawaii 2011, <https://doi.org/10.2514/6.2011-3391>, abgerufen am 15.02.2018
- [Elward 12] Elwardany, A.; Sazhin, S.: *A quasi-discrete model for droplet heating and evaporation: application to diesel and gasoline fuels*. Fuel, Band 97, 2012, Seiten 685–694, ISSN 0016-2361
- [Ferziger 08] Ferziger, J. H.; Peric, M.: *Numerische Strömungsmechanik*, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg 2008, ISBN: 978-3-540-67586-0

- [Fischo. 07] Fischoeder, A. G.: *Ablagerungsbildung durch Heizöl EL und 5% Heizöl EL-FAME-Blends bei der Verdampfung*, Dissertationsschrift, Oel-Wärme-Institut, RWTH Aachen, 2007, ISBN: 978-3-8322-5897-9
- [Hamins 96] Hamins, A.; Kashiwagi, T.; Burch, R. R.: *Characteristics of pool fire burning*, in: Fire Resistance of Industrial Fluids, 20 Juni 1995, Indianapolis, ASTM International, 1996, ISSN 0066-0558
- [Hamins 99] Hamins, A.; Yang, J. C.; Kashiwagi, T.: *A global model for predicting the burning rates of liquid pool fires*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, 1999, NISTIR 6381
- [Hayasa. 97] Hayasaka, H.: *Unsteady burning rates of small pool fires*, Fire Safety Science, Band 5, 1997, Seiten 499–510, ISSN 1817-4299
- [Heintz 17] Heintz, A.: *Thermodynamik der Mischungen*, Springer Spektrum, Berlin 2017, ISBN: 978-3-662-49923-8
- [Henley 11] Henley, E. J.; Seader, J. D.; Roper, D. K.: *Separation process principles*, 3. Auflage, John Wiley & Sons, Hoboken 2011, ISBN: 9780470646113
- [Hottel 59] Hottel, H.: *Review: Certain laws governing diffusive burning of liquids*, Fire Research Abstracts and Reviews, Band 1, 1959, Seiten 41-44, ISSN 0015-265X
- [Hurley 15] Hurley, M. J.: *SFPE handbook of fire protection engineering*, 5. Auflage, Springer, New York Heidelberg Dordrecht London 2015, ISBN: 978-1-4939-2564-3
- [Kang 10] Kang, Q.; Lu, S.; Chen, B.: *Experimental study on burning rate of small scale heptane pool fires*, Chinese Science Bulletin, Band 55, 2010, Heft 10 Seiten 973–979, ISSN 1001-6538
- [Labora.] Laboratories, Sandia National: *International workshop on measurement and computation of turbulent nonpremixed flames*, <http://public.ca.sandia.gov/TNF/radiation.html>, abgerufen am 15.02.2018
- [Lucas 08] Lucas, K.: *Thermodynamik: Die Grundgesetze der Energie-und Stoffumwandlungen*, 6. Auflage, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg 2008, ISBN: 978-3-540-73515-1

- [Magnus. 05] Magnussen, B. F.: *The eddy dissipation concept a bridge between science and technology*, in *ECCOMAS thematic conference on computational combustion*, 21-24 Juni 2005, Lisbon, Portugal, 2005
- [McBrid. 93] McBride, B. J.; Gordon, S.; Reno, M. A.: *Coefficients for calculating thermodynamic and transport properties of individual species*, NASA technical memorandum 4513, Hampton, Va.: NASA Langley Research Center, 1993.
- [Mishra 10] Mishra, K. B.: *Experimental investigation and CFD simulation of organic peroxide pool fires (TBPB and TBPEH)*, Dissertationsschrift, Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung (BAM), Berlin, 2010, ISBN: 978-3-9813550-6-2
- [Moler 08] Moler, C. B.: *Numerical Computing with MATLAB: Revised Reprint*, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia 2008, ISBN: 978-0-898-71660-3
- [Novozh. 04] Novozhilov, V.; Koseki, H.: *Cfd prediction of pool fire burning rates and flame feedback*, Combustion science and technology, Band 176, 2004, Heft 8, Seiten 1283–1307, ISSN 0010-2202
- [Openfo. 14] The OpenFOAM Foundation: *OpenFOAM v2.3 user guide*, OpenFOAM Foundation Ltd, 2014
- [Pendar 15] Pendar, M. R.; Roohi, E.: *Investigation of cavitation around disk and conical cavitators using different sets of turbulence and cavitation models*, in: *4th International Conference on Advances in Mechanical Engineering-ICAME*, 13-15 Mai 2015, Istanbul, Turkei, 2015
- [Poling 01] Poling, B. E.; Prausnitz, J. M.; O'connell, J. P.: *The properties of gases and liquids*, Volume 5, McGraw-Hill, New York 2001, ISBN: 978-6-610-91317-6
- [Prasad 99] Prasad, K.; Li, C.; Kailasanath, K.; Ndubizu, C.; Ananth, R.; Tatem, P.: *Numerical modelling of methanol liquid pool fires*, Combustion Theory and Modelling, Band 3, 1999, Heft 4, Seiten 743–768, ISSN 1364-7830
- [Quinti. 92] Quintiere, J. G.: *A semi-quantitative model for the burning rate of solid materials*, Fire Safety Science, Heft 1, 1992, Seiten 3–25, <http://www.iafss.org/publications/aofst/1/3>, abgerufen am 15.02.2018

- [Quinti. 06] Quintiere, J.: *Fundamentals of fire phenomena*, John Wiley & Sons, Chichester 2006, ISBN: 0-470-09113-4
- [Raal 72] Raal, J. D.; Code, R. K.; Best, D. A.: *Examination of ethanol-n-heptane, methanol-n-hexane systems using new vapor-liquid equilibrium still*, Journal of Chemical and Engineering Data, Heft 17, 1972, Band 2, Seiten 211–216, ISSN 0021-9568
- [Rhodes 96] Rhodes, B. T.; Quintiere, J. G.: *Burning rate and flame heat flux for pmma in a cone calorimeter*, Fire Safety Journal, Heft 26, 1996, Band 3, Seiten 221–240, ISSN 0379-7112
- [Sazhin 11] Sazhin, S.; Elwardany, A.; Sazhina, E.; Heikal, M.: *A quasi-discrete model for heating and evaporation of complex multicomponent hydrocarbon fuel droplets*, International Journal of Heat and Mass Transfer, Heft 54, 2011, Band 19, Seiten 4325–4332, ISSN 0017-9310
- [Schaefer. 13] Schaefer, H.: *VDI-Lexikon Energietechnik*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg 2013, ISBN 978-3-642-95749-9
- [Schwei. 16] Schweizer, W.: *MATLAB kompakt*, 6. Auflage, Walter de Gruyter, Berlin Boston 2016, ISBN 978-3-11-046585-3
- [Sikanen 16] Sikanen, T.; Hostikka, S.: *Modeling and simulation of liquid pool fires with in-depth radiation absorption and heat transfer*, Fire Safety Journal, Heft 80, 2016, Seiten 95–109, ISSN 0379-7112
- [Tamim 95] Tamim, J.; Hallett, W. L.: *A continuous thermodynamics model for multicomponent droplet vaporization*, Chemical Engineering Science, Band 50, 1995, Heft 18, Seiten 2933–2942, ISBN: 978-0-612-20955-8
- [Taylor 93] Taylor, R.; Krishna, R.: *Multicomponent mass transfer*, volume 2, John Wiley & Sons, New York 1993, ISBN: 978-0-471-57417-0
- [Vali 14] Vali, A.; Nobes, D. S.; Kostiuik, L. W.: *Transport phenomena within the liquid phase of a laboratory-scale circular methanol pool fire*, Combustion and Flame, Band 161, 2014, Heft 4, Seiten 1076–1084, ISSN 0010-2180
- [VanGel. 17] Van Gelderen, L.; Malmquist, L. M.; Jomaas, G.: *Vaporization order and burning efficiency of crude oils during in-situ burning on water*, Fuel, Band 191, 2017, Seiten 528–537, ISSN 0016-2361

- [VDI 06] VDI Verein Deutscher Ingenieure: *VDI-Wärmeatlas*, 10. Auflage, Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York 2006, ISBN: 978-3-540-25504-8
- [Vilfay. 15] Vilfayeau, S.: *Large eddy simulation of fire extinction phenomena*, Dissertationsschrift, University of Maryland, College Park, 2015, <http://doi.org/10.13016/M2QB0M>, abgerufen am 15.02.2018
- [Wang 11] Wang, Y.; Chatterjee, P.; de Ris, J. L.: *Large eddy simulation of fire plumes*. Proceedings of the Combustion Institute, Heft 33, 2011, Band 2, Seiten 2473–2480, ISSN 1540-7489

A Anhang

A.1 Gleichungen zur Berechnung von Stoffeigenschaften des Quasi-dicrete Modells für Mehrkomponenten

Die Gleichungen zur Berechnung der Stoffeigenschaften stammen aus [Elward. 12].

Molare Masse

Die Molare Masse M_j der einzelnen Quasi-Komponenten wird berechnet mit

$$M_j = 14\bar{n}_j + 2 \quad (\text{A.1})$$

in der Einheit kg/kmol.

Spezifische Wärmekapazität

Die spezifische Wärmekapazität $c_{pL,j}$ der einzelnen Quasi-Komponenten wird berechnet mit

$$c_{pL,j} = 1000 \left[\frac{43,9 + 13,99(\bar{n}_j - 1) + 0,0543(\bar{n}_j - 1)T}{M_j} \right] \quad (\text{A.2})$$

wobei $c_{pL,j}$ die Einheit J/(kg K) besitzt.

Die spezifische Wärmekapazität c_{pL} der gesamten Mischung wird weiterhin mit den einzelnen Massenanteilen Y_j durch die Gleichung

$$c_{pL} = \sum_{j=1}^{j=N_f} c_{pL,j} Y_j \quad (\text{A.3})$$

bestimmt.

Dichte

Die Dichte $\rho_{L,j}$ der Quasi-Komponenten in kg/m³ wird berechnet mit

$$\rho_{L,j} = 1000 A_\rho B_\rho^{-\left(1 - \frac{T}{T_{cr,j}}\right)^{C_\rho}} \quad (\text{A.4})$$

und den Koeffizienten

$$\begin{aligned} A_\rho &= 0,00006196104 \bar{n}_j + 0,234362 \\ B_\rho &= 0,00004715697 \bar{n}_j^2 - 0,00237693 \bar{n}_j + 0,2768741 \\ C_\rho &= 0,000597039 \bar{n}_j + 0,2816916. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Die kritische Temperatur $T_{cr,j}$ in K wird bestimmt durch die Gleichung [Sazhin 11]

$$T_{cr,j} = a_c + b_c \bar{n}_j + c_c \bar{n}_j^2 + d_c \bar{n}_j^3 \quad (\text{A.6})$$

mit dem Koeffizienten

$$\begin{aligned} a_c &= 242,3059898052 \\ b_c &= 55,9186659144 \\ c_c &= -2,1883720897 \\ d_c &= 0,0353374481. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Für die gesamte Mischung wird die Dichte aus den einzelnen Quasi-Komponenten gebildet mit

$$\rho_L = \left(\sum_{j=1}^{j=N_f} Y_j / \rho_{L,j} \right)^{-1}. \quad (\text{A.8})$$

Wärmeleitfähigkeit

Die Wärmeleitfähigkeit $\lambda_{L,j}$ in W/(m K) der einzelnen Quasi-Komponenten wird berechnet durch

$$\lambda_{L,j} = 10 \left[A_\lambda B_\lambda \left(1 - \frac{T}{T_{cr,j}} \right)^{2/7} \right] \quad (\text{A.9})$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} A_\lambda &= 0,002911 \bar{n}_j^2 - 0,071339 \bar{n}_j - 1,319595 \\ B_\lambda &= -0,002498 \bar{n}_j^2 + 0,058720 \bar{n}_j + 0,710698. \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

Die Kritische Temperatur $T_{cr,j}$ wird dabei nach Gl. A.6 berechnet.

Als Mischungsregel für die Wärmeleitfähigkeit der Gesamtmischung wird die Methode von Li [VDI 06] angewendet

$$\lambda_L = \sum_{i=1}^{i=N_f} \sum_{j=1}^{j=N_f} \frac{2\Phi_i\Phi_j}{\lambda_{L,i}^{-1} + \lambda_{L,j}^{-1}} \quad (\text{A.11})$$

mit

$$\Phi_i = \frac{X_i \nu_{L,i}}{\sum_{j=1}^{j=N_f} X_j \nu_{L,j}} \quad (\text{A.12})$$

und dem spezifischen Volumen $\nu_{L,j}$ in m^3/kmol der einzelnen Quasi-Komponenten

$$\nu_{L,j} = \frac{M_j}{\rho_{L,j}}. \quad (\text{A.13})$$

Dampf- und Partialdruck

Der Dampfdruck $p_{sat,j}$ in MPa der einzelnen Quasi-Komponenten wird berechnet nach der Antoine-Gleichung

$$p_{sat,j} = \exp \left(A_p - \frac{B_p}{T - C_p} \right) \quad (\text{A.14})$$

mit den Koeffizienten

$$\begin{aligned} A_p &= 6,318 \bar{n}_j^{0,05091} \\ B_p &= 1178 \bar{n}_j^{0,4652} \\ C_p &= 9,467 \bar{n}_j^{0,91431}. \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

Die Mischung aus den Quasi-Komponenten wird als ideal betrachtet, sodass für den Partialdruck $p_{vap,j}$ der einzelnen Quasi-Komponenten das Raoultssches Gesetz gilt:

$$p_{vap,j} = X_j p_{sat,j}. \quad (\text{A.16})$$

Verdampfungsenthalpie

Die Verdampfungsenthalpie L_j in J/kg der einzelnen Quasi-Komponenten wird berechnet mit der Gleichung

$$L_j = \frac{RB_p T^2}{M_j(T - C_p)} \quad (\text{A.17})$$

wobei die Universelle Gaskonstante

$$R = 8,3144598 \cdot 10^3 \text{ J/(kmol K)} \quad (\text{A.18})$$

beträgt, und die Koeffizienten B_p und C_p nach Gl. A.15 berechnet werden.

A.2 Einstellungen PIMPLE-Algorithmus

Die Einstellungen am PIMPLE-Algorithmus wird für die Simulation vorgenommen wie folgt:

```
PIMPLE
{
    momentumPredictor yes;
    nOuterCorrectors 1;
    nCorrectors 2;
    nNonOrthogonalCorrectors 0;
}
```

`nOuterCorrectors` und `nCorrectors` stellen dabei die Anzahl von Korrekturschleifen dar, die vom SIMPLE bzw. PISO Algorithmus durchgeführt werden.

A.3 Thermodynamische Stoffwerte für n-Heptan

A.3.1 cp-Koeffizienten

```
thermodynamics
{
    Tlow                200;
    Thigh               6000;
    Tcommon             1000;
    highCpCoeffs        ( 1.85354704E+01 3.91420468E-02
                        -1.38030268E-05 2.22403874E-09 -1.33452580E-13
                        -3.19500783E+04 -7.01902840E+01);
    lowCpCoeffs          ( 1.11532484E+01 -9.49416433E-03
                        1.95571181E-04 -2.49752520E-07 9.84873213E-11
                        -2.67711735E+04 -1.59096110E+01);
}
```

A.3.2 Sutherland-Koeffizienten

```
transport
{
    As                9.433e-07;
    Ts                585;
}
```

A.4 Datenformat Koppelung FireFoam - Matlab

Die Daten die von OpenFOAM eingelesen werden haben die Form:

```
<value1> <gradient1> <valueFraction1>
<value2> <gradient2> <valueFraction2>
<value3> <gradient3> <valueFraction3>
...
<valueN> <gradientN> <valueFractionN>
```

wobei **value** der Wert in x-y-z Koordinaten, **gradient** der Gradient und **valueFraction** den Anteil darstellt.