

BRANDSCHUTZ- FORSCHUNG

DER LÄNDER

DER BUNDESREPUBLIK DEUTSCHLAND

BERICHTE

**Ertüchtigung eines kommerziellen Strömungssimulations-
programmes zum praktikablen Gebrauch bei realen Brandszenarien**

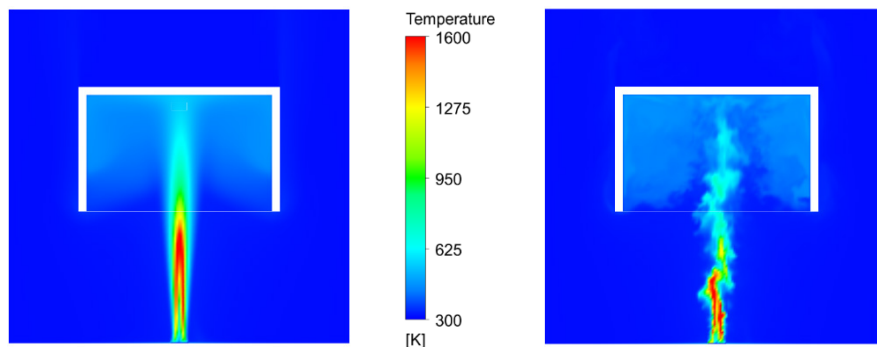
von

M. Sc. Karen Böhler

Dr.-Ing. Ilian Dinkov

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)

Forschungsstelle für Brandschutztechnik



206

STÄNDIGE KONFERENZ DER INNENMINISTER UND -SENATOREN DER
LÄNDER, ARBEITSKREIS V, AUSSCHUSS FÜR FEUERWEHR-
ANGELEGENHEITEN, KATASTROPHENSCHUTZ UND ZIVILE VERTEIDIGUNG

**Ständige Konferenz der Innenminister und -Senatoren der Länder,
Arbeitskreis V, Ausschuss für Feuerwehrangelegenheiten,
Katastrophenschutz und Zivile Verteidigung**

Forschungsbericht Nr. 206

**Ertüchtigung eines kommerziellen Strömungssimulations-
programmes zum praktikablen Gebrauch bei realen Brandszenarien**

von

M. Sc. Karen Böhler
Dr.-Ing. Ilian Dinkov

Karlsruher Institut für Technologie (KIT)
Forschungsstelle für Brandschutztechnik

Karlsruhe

November 2020

FA. Nr. 235 (2/2016)

ISSN 0170-0060

Berichtskennblatt

Nummer des Berichtes: 206	Titel des Berichtes: Ertüchtigung eines kommerziellen Strömungs-simulationsprogrammes zum praktikablen Gebrauch bei realen Brandszenarien		ISSN: 0170-0060
Autor: M. Sc. Karen Böhler Dr.-Ing. Ilian Dinkov		durchführende Institution: Karlsruher Institut für Technologie (KIT), Forschungsstelle für Brandschutztechnik Hertzstrasse 16, D-76187 Karlsruhe	
Nummer des Auftrages: FA. Nr. 235 (2/2016)		auftraggebende Institution: Ständige Konferenz der Innenminister und –senatoren der Länder, Arbeitskreis V, Ausschuss für Feuerwehrangelegenheiten, Katastrophenschutz und zivile Verteidigung	
Abschlussdatum: November 2020			
Seitenzahl: 62	Bilder: 22	Tabellen: 7	Literaturverweise: 34
Kurzfassung: <p>In dem vorliegenden Forschungsbericht wurde eine Referenzkombination an numerischen Schalter und Modelle für die Durchführung einer Brandsimulation erstellt und mit experimentellen Daten validiert. Ein Fokus bei der Bewertung der Modelle lag dabei, neben der Genauigkeit, auch auf einem geringen Zeit- und Ressourcenbedarf für die Simulation. Verschiedene numerische Modelle wurden anhand eines stationären Brandes untersucht. Die Ergebnisse dieser Studie zeigen u. a., dass mit einer Auflösung mit Zellgrößen kleiner 50 mm die Genauigkeit der Berechnung ausreichend ist um die relevanten Brandgrößen wie Flammenlänge, Rauchschichthöhe und –temperatur zu approximieren. Eine zu grobe Auflösung führt jedoch zu nicht verwertbaren Ergebnissen. Die Variation unterschiedlicher numerischer Schalter hat gezeigt, dass stationäre Flammen gut durch RANS-Simulationen mit Einschnitt-Reaktion und eines einfachen, diffusen Strahlungsmodells beschrieben werden können. Anschließend wurde die Referenzkombination numerischer Modelle für die instationäre Berechnungsweise eingesetzt. Ein Vergleich beider Berechnungsmethoden hat gezeigt, dass die Verwendung von weniger rechenintensiven RANS-Simulationen (Berechnungsdauer unter 2 Tage) bei der Simulation stationärer Bränden für die Abschätzung globaler Größen ausreicht, während für die Betrachtung von Maximalwerten in der Flamme eine instationäre Berechnung nötig ist.</p> <p>Insgesamt lässt sich festhalten, dass Brandsimulationen einen potentiell sinnvollen Beitrag zum vorbeugenden Brandschutz liefern können. Zu beachten ist dabei jedoch immer, ob die gewählte Auflösung ausreichend ist. Dies gilt insbesondere bei der Simulation instationärer Brände.</p>			
Schlagwörter: Modellierung, Brandsimulation, CFD, DES, Feldmodell, Brandszenarien, Brände			

Inhaltsverzeichnis

Berichtskennblatt	I
ABBILDUNGSVERZEICHNIS	V
Tabellenverzeichnis	VII
1 Einleitung	1
1.1 Motivation und Zielsetzung	1
1.2 Aufbau und Struktur	2
2 Theoretische Grundlagen	3
2.1 Verbrennungstechnische Grundlagen	4
2.1.1 Verbrennung	4
2.1.2 Chemische Verbrennungsreaktionen	5
2.1.3 Flammenformen bei Bränden.....	7
2.1.4 Branddynamik.....	8
2.1.5 Luftzahl und Äquivalenzverhältnis.....	10
2.1.6 Flammenlänge	12
Optische Flammenlänge	12
Chemische Flammenlänge	13
Korrelationen zur Abschätzung der Flammenlänge.....	15
2.1.7 Verlöschung	17
2.2 Erhaltungsgleichungen	18
2.2.1 Massenerhaltung	18
2.2.2 Impulserhaltung	19
2.2.3 Energieerhaltung.....	20
2.2.4 Spezieserhaltung	21
2.2.5 Zustandsgleichungen.....	22
2.2.6 Diskretisierung der Differentialgleichungen.....	22
3 Verwendete Modelle	26

3.1	Turbulenzmodell	26
3.1.1	Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS)	27
3.1.2	Large Eddy Simulation (LES).....	29
3.1.3	Detached Eddy Simulation (DES).....	30
3.1.4	Auftrieb	31
3.2	Chemische Reaktion	31
3.2.1	Eddy Dissipation Modell.....	31
3.2.2	Flamelet-Modell	32
3.3	Strahlung	33
3.3.1	P ₁ -Modell	36
3.3.2	Discrete Transfer Modell.....	36
3.3.3	Spektralmodelle	37
4	Simulation eines stationären Brandes.....	39
4.1	Numerisches Setup	39
4.1.1	Geometrie	39
4.1.2	Stationäre Simulationen	40
4.1.3	Instationäre Simulation	40
4.2	Ergebnisse	42
4.2.1	Gitterunabhängigkeitsanalyse.....	42
4.2.2	Qualitativer Vergleich zwischen RANS und DES Simulation	45
4.2.3	Referenzkombination	48
4.2.4	Untersuchungen der instationären Flamme	52
4.2.5	Schlussfolgerungen	55
5	Simulation einer frei-brennenden Gasflamme	57
6	Zusammenfassung und Ausblick.....	58
	Literaturverzeichnis.....	60

Bemerkung zu den vorliegenden Untersuchungen

Jede Nennung kommerzieller Produkte geschieht nur zu Informationszwecken. Damit ist keine Empfehlung des genannten Produkts durch die Forschungsstelle für Brandschutztechnik am Karlsruher Institut für Technologie verbunden.

ABBILDUNGSVERZEICHNIS

Abbildung 1: Ablaufschema zur Durchführung einer Brandsimulationsrechnung mit Feldmodellen [1]	3
Abbildung 2: Schematische Darstellung der Wärme- und Stoffströme sowie deren Mechanismen für den Abbrand eines flüssigen Brennstoffes [1]	4
Abbildung 3: Integrale Reaktionsflussanalyse einer vorgemischten stöchiometrischen (a), bzw. brennstoffreichen (b) CH_4 -Luft-Flamme bei Standardbedingungen [2]	6
Abbildung 4: Schematische Darstellung der Bereiche innerhalb eines Brandes [1] ...	8
Abbildung 5: Schematische Darstellung des Verlaufs der Wärmefreisetzung bei einem Brandereignis	9
Abbildung 6: Adiabate Flammentemperatur und Reaktionsprodukte in Abhängigkeit des Äquivalenzverhältnisses Φ bei der Verbrennung von Propan [9]	11
Abbildung 7: Auftriebseinfluss auf die Flammenlänge [15].	16
Abbildung 8: Schematische Darstellung der differentiellen Bilanzierung nach [18] ..	19
Abbildung 9: Schematische Darstellung der Interpolationsmethoden	24
Abbildung 10: Energiespektrum isotroper Turbulenz und dessen Auflösung durch numerische Strömungssimulationen [24]	26
Abbildung 11: Spektraler Emissionsgrad mit spezifischen Banden von CO_2 im infraroten Wellenlängenbereich für eine Gasschicht von 40 cm bei $p = 0,1$ bar [29]	34
Abbildung 12: Simulationsgeometrie für die Referenzkombination	39
Abbildung 13: Gitterstudie für einen Einschnitt-Mechanismus und ohne Strahlungsmodell	44
Abbildung 14: Untersuchung der Netzabhängigkeit von Flammenlänge (a) und Temperaturerhöhung in der Rauchsicht (b) für verschiedene Modellkombinationen	45
Abbildung 15: Flammentemperaturen bei RANS-Simulation (a) und DES (b)	46
Abbildung 16: Strömungsfeld bei RANS-Simulation (a) und DES (b)	47
Abbildung 17: CO_2 Konzentration in Flamme und Rauchsicht bei RANS-Simulation (a) und DES (b)	47
Abbildung 18: Rauchsichttemperaturen bei RANS-Simulation (a) und DES (b) ...	48
Abbildung 19: Vergleich verschiedener Simulationssetups	50

Abbildung 20: Vergleich der Flammenlängen nach verschiedenen Definitionen bei den verschiedenen Modellen.....	52
Abbildung 21: Verteilungsfunktion der relativen Flammenlänge.....	53
Abbildung 22: Flammenlänge im Bereich von 20-30 s.	54

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: NPFA-Standardwerte für Flammenausbreitungsparameter für das quadratische Ausbreitungsmodell [8].....	10
Tabelle 2: Obere und untere Zündgrenze von reinen Brennstoff-Luft-Gemischen bei Standard-Bedingungen [9].....	17
Tabelle 3: Emissivitätsparameter für die grauen Modellgase nach [31].....	38
Tabelle 4: Verwendete Einstellungen für die Simulation des stationären Brandes ...	41
Tabelle 5: Gitterparameter und Rechenaufwand der untersuchten Gitter.....	43
Tabelle 6: Überblick über die verwendeten Modellkombinationen.....	49
Tabelle 7: Überblick über die für weitere Untersuchungen gewählten Modelle und deren Einfluss.....	55

1 Einleitung

1.1 Motivation und Zielsetzung

Die Brandsimulation mittels Computational Fluid Dynamics (CFD) erfährt bei der brandschutztechnischen Auslegung von Gebäuden eine steigende Bedeutung. Im Gegensatz zu den in der Vergangenheit verwendeten Zonenmodellen ermöglicht sie Aussagen bei flexiblen Geometrien und Randbedingungen [1]. Verschiedene Berechnungsansätze stehen in kommerziellen und nichtkommerziellen Programmen zur Verfügung. Dabei stellt die Simulation im Bereich der Brandschutzforschung besondere Herausforderungen im Vergleich zur konventionellen Verbrennungssimulation bei technischer Verbrennung.

In erster Linie sind die großen Geometrien zu berücksichtigen. Da Brandereignisse außerdem über einen langen Zeitraum instationär ablaufen, führt dies zu einem großen Rechenaufwand und einer dadurch limitierten räumlichen und zeitlichen Diskretisierung. Ein Modell in der Brandsimulation muss daher integrale Zielgrößen gut approximieren, ohne dabei alle vorliegenden mikroskaligen Prozesse vollständig auflösen zu können.

Außerdem sind die Randbedingungen in der Brandschutzforschung im Vergleich zur technischen Verbrennung nicht klar definiert. So müssen für die Wärmefreisetzungsrate und die Lokalisation der Flamme sinnvolle Annahmen getroffen werden, um numerische Randbedingungen definieren zu können. Weiterhin müssen ein sinnvoller Modellbrennstoff gewählt und die Ventilationsbedingungen, d.h. die Luftzufuhr modelliert werden.

Ziel des Forschungsvorhabens ist die Implementierung dieser genannten Randbedingungen mit oder ohne der Hilfe von Modellerweiterungen zur Berücksichtigung des Brandleistungsverlaufs, der Brandausbreitung sowie der Feuerlöschung durch Sauerstoffmangel im kommerziellen CFD-Programm Ansys CFX. Dazu soll zuvor im ersten Schritt eine Referenzkombination von numerischen Modellen erstellt und validiert werden. Ein Fokus bei der Bewertung der Modelle liegt dabei auf einem geringen Zeit- und Ressourcenbedarf für die Simulation.

1.2 Aufbau und Struktur

Der vorliegende Forschungsbericht gliedert sich in folgende vier Hauptabschnitte:

- Kapitel 2: Theoretische Grundlagen
- Kapitel 3: Verwendete Modelle
- Kapitel 4: Simulation eines stationären Brandes
- Kapitel 5: Simulation einer frei-brennenden Gasflamme

In Kapitel 2 werden zunächst Grundbegriffe der Verbrennungstechnik und der Brandschutzforschung sowie fundamentale Grundlagen der CFD-Simulation eingeführt. Die Modelle, die in der vorliegenden Arbeit verwendet werden, um Turbulenz, Reaktion und Strahlung zu beschreiben werden anschließend in Kapitel 3 vorgestellt.

Im Rahmen der Arbeit wird zunächst ein stationärer Brand untersucht, um eine Kombination numerischer Modelle zu erstellen. In Kapitel 4 findet sich ein Überblick über den verwendeten Referenzfall sowie damit durchgeführte Untersuchungen zu Gittergröße und den Einflüssen der modellierten Phänomene.

Die Berechnung einer frei-brennenden Gasflamme bei unterschiedlichen thermischen Leistungen erfolgt in Kapitel 5. Die Ergebnisse der Simulation werden mit Hilfe einer eigenen Methode zur gradienten-basierten Auswertung von optisch-bestimmte Flammenlängen validiert.

2 Theoretische Grundlagen

Im Folgenden sollen die grundlegenden physikalischen Vorgänge bei einem Brand erläutert und wichtige numerische Grundlagen vorgestellt werden. Dabei wird zunächst auf Grundbegriffe aus der Verbrennungstechnik und Brandschutzforschung eingegangen, um die Problematik einzuordnen.

In der vorliegenden Arbeit sollen verschiedene Brände mittels CFD-Simulation untersucht werden. Die wesentlichen Komponenten zur Entwicklung eines Brandsimulationsmodells sind in Abbildung 1 dargestellt. Die physikalischen Randbedingungen sind teilweise bekannt, für einige Randbedingungen müssen sinnvolle Annahmen getroffen werden. CFD basiert auf der Lösung von Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie. Dabei sind Modelle für Turbulenz, Strahlung und chemische Reaktion sowie Bilanzen für einzelne Spezies zu berücksichtigen.

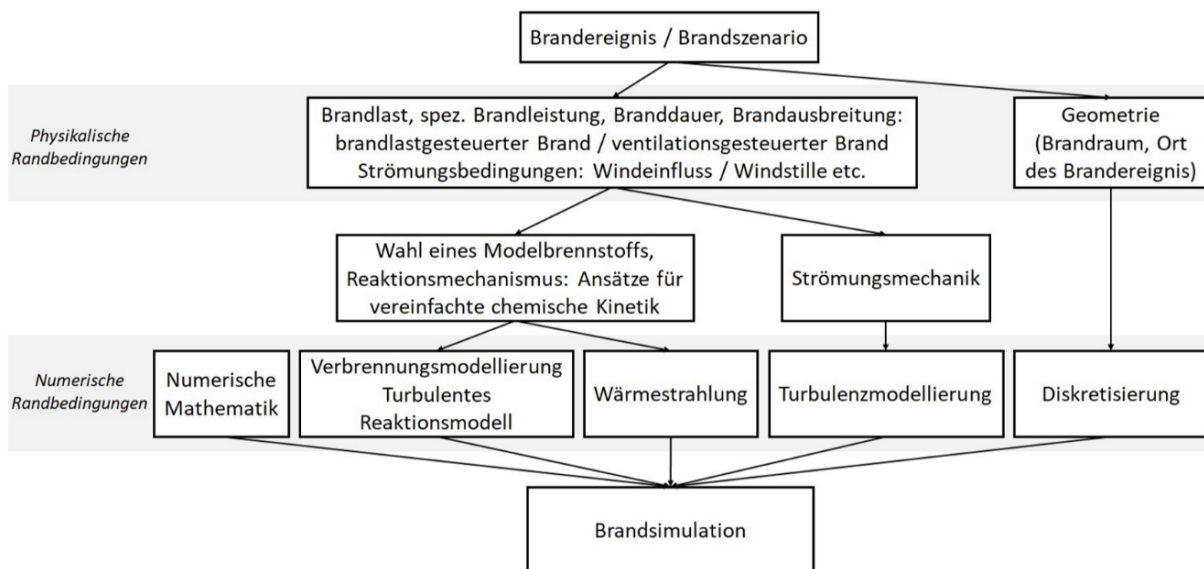


Abbildung 1: Ablaufschema zur Durchführung einer Brandsimulationsrechnung mit Feldmodellen [1]

Im weiteren Verlauf dieses Kapitels werden daher zunächst die Bilanzgleichungen der Strömungssimulation vorgestellt, um im folgenden Kapitel auf die Modelle für die in dieser Arbeit benötigten Quellterme eingehen zu können. Weiterhin wird auf die Grundlagen der numerischen Lösung dieser Gleichungen eingegangen.

2.1 Verbrennungstechnische Grundlagen

2.1.1 Verbrennung

Unter Verbrennung versteht man im Allgemeinen die sich selbst erhaltende exotherme chemische Reaktion eines Brennstoffes mit einem Oxidator. Der Brennstoff ist in den meisten Fällen ein Kohlenwasserstoff, als Oxidator dient in der Regel Sauerstoff [2].

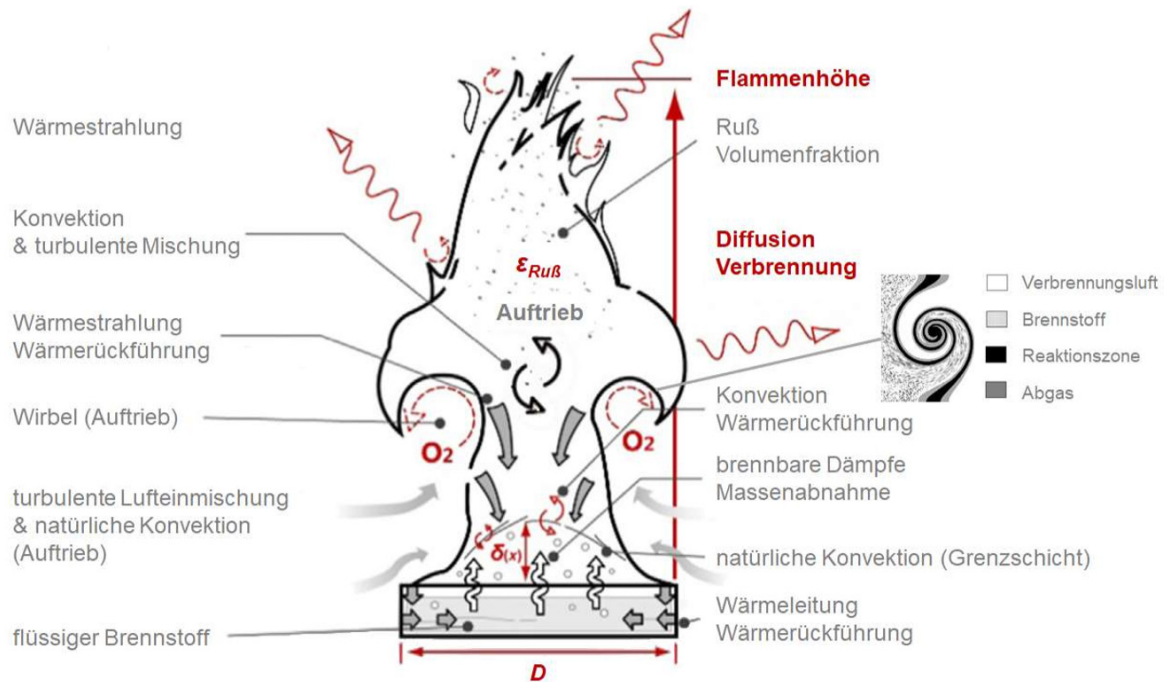


Abbildung 2: Schematische Darstellung der Wärme- und Stoffströme sowie deren Mechanismen für den Abbrand eines flüssigen Brennstoffes [1]

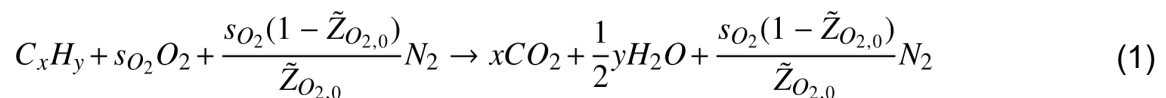
Innerhalb der Reaktionszone sowie zwischen Reaktionszone und Umgebung finden zahlreiche Wärme- und Stoffübertragungsvorgänge statt, die die Form der Flamme sowie die Temperaturprofile definieren. Diese sind in Abbildung 2 für eine Diffusionsflamme mit flüssigem Brennstoff veranschaulicht. Diese teils kleinskaligen Prozesse müssen in der Simulation numerisch erfasst oder durch Modelle approximiert werden. Dabei sind Stofftransport durch Konvektion und im Bereich der Reaktionszone durch Diffusion zu berücksichtigen. Für den Wärmetransport sind sowohl Wärmeleitung als auch Konvektion und Wärmestrahlung relevant.

Die Verbrennung findet in der Regel in der Gasphase statt. Werden Flüssigkeiten verbrannt, so heizen sich diese zunächst auf und verdampfen. Durch Diffusion mischt

sich der Brennstoff mit Luft bzw. Sauerstoff und es bildet sich ein brennbares Gemisch [2]. Bei der Verbrennung fester Brennstoffe werden flüchtige Stoffe ebenfalls verdampft und verbrennen in der Gasphase. Bei einigen festen Brennstoffen bleibt jedoch ein Teil als kohlenstoffhaltiger Feststoff zurück und wird durch Sauerstoff zu CO oder CO_2 oxidiert [2]. Diese Phasenübergangsprozesse werden in der vorliegenden Arbeit nicht näher betrachtet, es wird stets von einer Verbrennung von bei Umgebungsbedingungen gasförmigen Stoffen ausgegangen.

2.1.2 Chemische Verbrennungsreaktionen

Die vollständige Verbrennung von Kohlenwasserstoffen kann global beschrieben werden durch:



Mit der Anzahl der Kohlenstoffteilchen x , der Anzahl der Wasserstoffteilchen y im Brennstoff, dem stöchiometrischen Koeffizienten $s_{O_2} = \left(x + \frac{1}{4}y\right)$ sowie dem molaren Sauerstoffanteil in der Luft $\tilde{Z}_{O_2,0}$.

Diese Globalreaktion setzt sich jedoch aus einer Vielzahl von Elementarreaktionen zusammen. Bereits die Reaktion von Sauerstoff und Wasserstoff umfasst 40 Teilreaktionen, die Verbrennung längerer Kohlenwasserstoffe häufig über 1000 [2]. Wichtige Reaktionswege und Teilreaktionen sind in Abbildung 3 dargestellt. Dicke Pfeile zeigen dabei die hauptsächlich relevanten Reaktionen, die von der Lage des chemischen Gleichgewichts bestimmt sind.

Vollständige Reaktionsmechanismen stehen nur für wenige Brennstoffe zur Verfügung. Die Simulation eines solchen Mechanismus würde außerdem eine hohe Anzahl an Speziesbilanzen erfordern und ein steifes, d. h. numerisch schwer zu lösendes Differentialgleichungssystem erzeugen. Daher greift man in der Regel auf vereinfachte Reaktionsmodelle zurück [2].

In dieser Arbeit wird der Einfluss verschiedener Reaktionsmechanismen untersucht. Die größtmögliche Vereinfachung besteht dabei in der Verwendung eines Einschritt-Mechanismus:

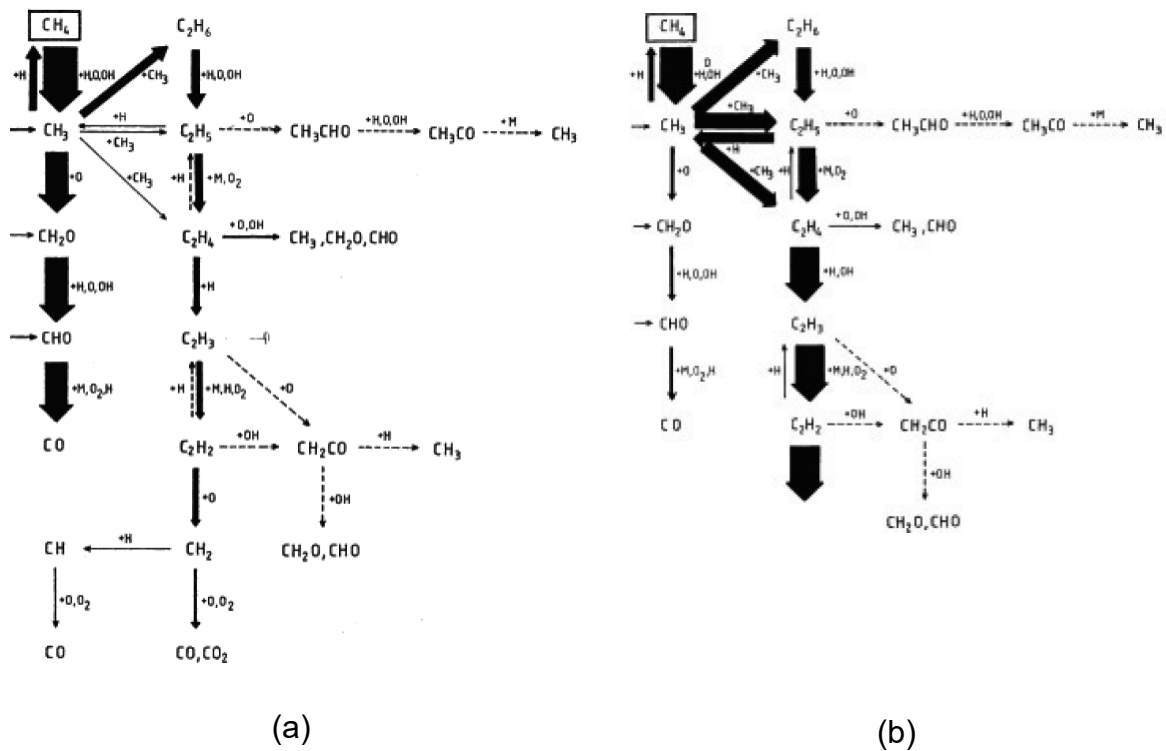
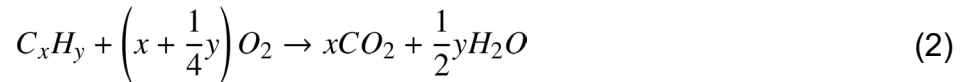
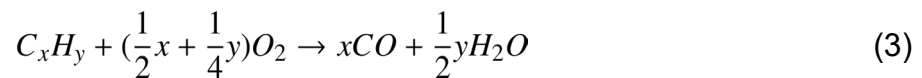


Abbildung 3: Integrale Reaktionsflussanalyse einer vorgemischten stöchiometrischen (a), bzw. brennstoffreichen (b) CH_4 -Luft-Flamme bei Standardbedingungen [2]

Untersuchungen von Westbrook und Dryer haben die Oxidation von CO als wesentlichen Zwischenschritt der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen identifiziert und daher einen Zweischnitt-Mechanismus vorgeschlagen [3]:



Weiterhin wird ein Flameletansatz verwendet, der als Zwischenprodukte neben CO den rechten Reaktionsweg in Abbildung 3 durch die Spezies C_2H_6 , C_2H_4 und C_2H_2 berücksichtigt. Der linke Reaktionsweg wird in diesem Modell über die Verwendung der Zwischenprodukte CH_2O CH_3 modelliert.

2.1.3 Flammenformen bei Bränden

Im Gegensatz zur technischen Verbrennung unter definierten und kontrollierten Randbedingungen handelt es sich bei einem Brand laut DIN 14011 um ein "nicht bestimmungsgemäßes Verbrennen, das sich unkontrolliert ausbreiten kann" [4]. Besonderheiten eines Brandes sind daher insbesondere die Art der Brennstoffe und deren Zufuhr, die Umgebungsgeometrie sowie die Strömungs- und Randbedingungen. Während bei der technischen Verbrennung stationäre Prozesse eine wichtige Rolle spielen, liegen bei Bränden in der Regel zeitabhängige Brandleistungsprofile und nicht stabilisierte Flammen vor.

Gängige Klassifizierungen von Flammen sind die Unterscheidung in laminare bzw. turbulente Flammen sowie in vorgemischte bzw. nicht vorgemischte Flammen. Während in technischen Prozessen sowohl vorgemischte als auch nicht vorgemischte turbulente Flammen relevant sind, handelt es sich bei Bränden um nicht vorgemischte Flammen, die auch Diffusionsflammen genannt werden. [2].

Weiterhin unterscheidet man auftriebsdominierte Flammen und Impulsflammen. In industriellen Anwendungen wird der Brennstoff in der Regel mit einer definierten Geschwindigkeit in die Brennkammer geleitet. Die Flammenlänge ist hierbei im Wesentlichen durch Diffusionsprozesse von Sauerstoff in den Brennstoffstrahl bestimmt. Bei Bränden liegt im Brennstoff häufig eine geringe Geschwindigkeit in Flammenrichtung vor. Der Auftrieb, der durch Dichteunterschiede aufgrund des Temperaturanstieges im Bereich der Flamme entsteht, spielt bei solchen Flammen eine große Rolle und beeinflusst das Flackern der Flamme und die Einmischung von Sauerstoff, die Temperaturverteilung sowie die Rußbildung [5].

Bei Bränden werden verschiedene räumliche Bereiche unterschieden, die in Abbildung 4 schematisch dargestellt sind: Oberhalb der Flamme bildet sich ein so genannter Plume, ein aufwärtsgerichteter Freistrahle mit Abgasen, der durch Auftriebskräfte angetrieben wird. Im Brandraum bildet sich eine Rauchschiicht mit erhöhter Temperatur sowie CO_2 , H_2O und Schadstoffkonzentration. Zu Beginn eines Brandes oder bei guter Ventilation bleibt in Bodennähe eine kalte Luftschicht bestehen [1].

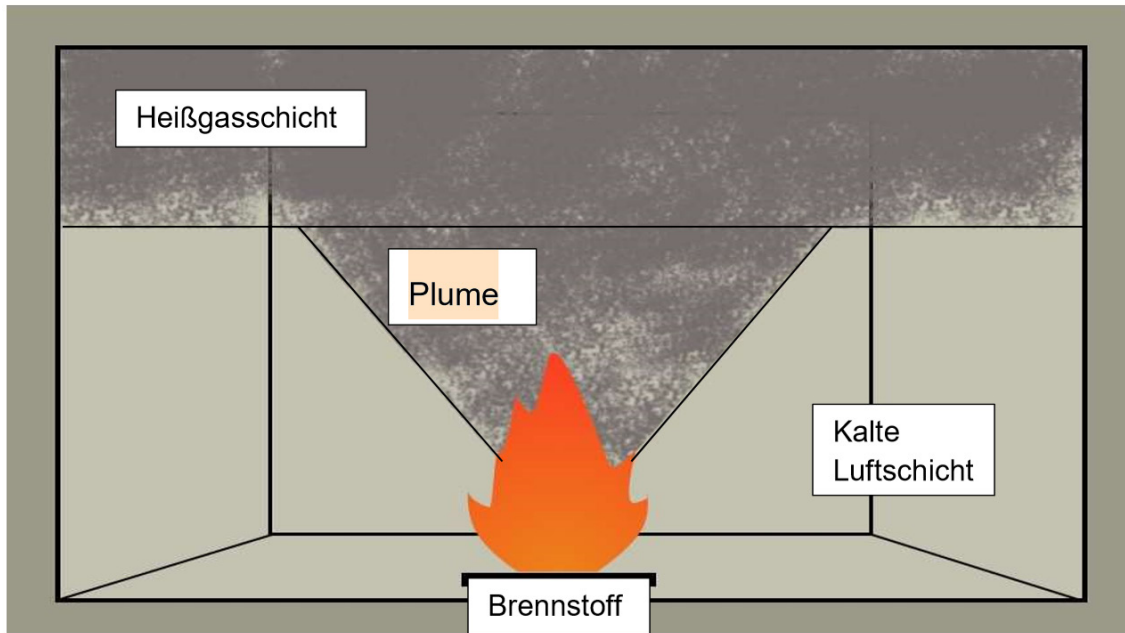


Abbildung 4: Schematische Darstellung der Bereiche innerhalb eines Brandes [1]

Interessierende Größen in der Brandschutzforschung sind die Temperaturverteilung im Raum, die Verteilung von Schadstoffen und CO_2 , sowie die Luftströmung und Brandausbreitung.

2.1.4 Branddynamik

Ein Bestandteil dieser Arbeit ist die Simulation eines Brandverlaufes. Hier unterscheidet man ventilationsgesteuerte und brandlastgesteuerte Brände. Ist der Brandraum ausreichend belüftet bzw. ausreichend groß, um den Brennstoff vollständig umzusetzen, spricht man von einem brandlastgesteuerten Brand. Der Brand verlöscht in diesem Fall, sobald kein Brennstoff mehr zur Verfügung steht. Bei ventilationsgesteuerten Bränden dagegen steht mehr Brennstoff zur Verfügung als durch den Sauerstoff oxidiert werden kann. Die Flamme erlischt, sobald nicht mehr genug Sauerstoff zur Verfügung steht, um die Verbrennung aufrecht zu erhalten [6].

Der Nachweis der Brandsicherheit auf Basis numerischer Simulationen erfolgt in der Regel durch empirisch gewonnene Design Fires zur Beschreibung der Wärmefreisetzungsrate eines brandlastgesteuerten Brandverlaufes [6].

Ein Brand kann dabei in mehrere Phasen unterteilt werden. Ein typischer Verlauf der Wärmefreisetzungsrate ist in Abbildung 5 zu sehen. In der Entstehungsbrandphase entwickelt sich der Brand zunächst langsam, die Temperaturen bleiben gering und die

Reaktion ist räumlich beschränkt. Die Umgebung der Brandfläche wird durch den Wärmetransport aus der Flamme erhitzt, sodass aus festen Brennstoffen Pyrolysegase entstehen und sich entzünden. Der Brand breitet sich so räumlich über die brennbaren Materialien aus. Im realen Brandfall kann diese Phase mehrere Stunden andauern. Ein starker Anstieg der Wärmefreisetzungsrate, der sogenannte Flash Over bildet den Übergang zum Vollbrand. Die Brandleistung bleibt nun so lange annähernd konstant, bis der größte Teil der Brandlast verbrannt ist oder der Oxidator so weit verbraucht ist, dass die Reaktion nicht mehr aufrechterhalten werden kann. Die folgende Abklingphase ist von sinkenden Temperaturen gekennzeichnet und endet mit dem Verlöschen des Brandes [7].

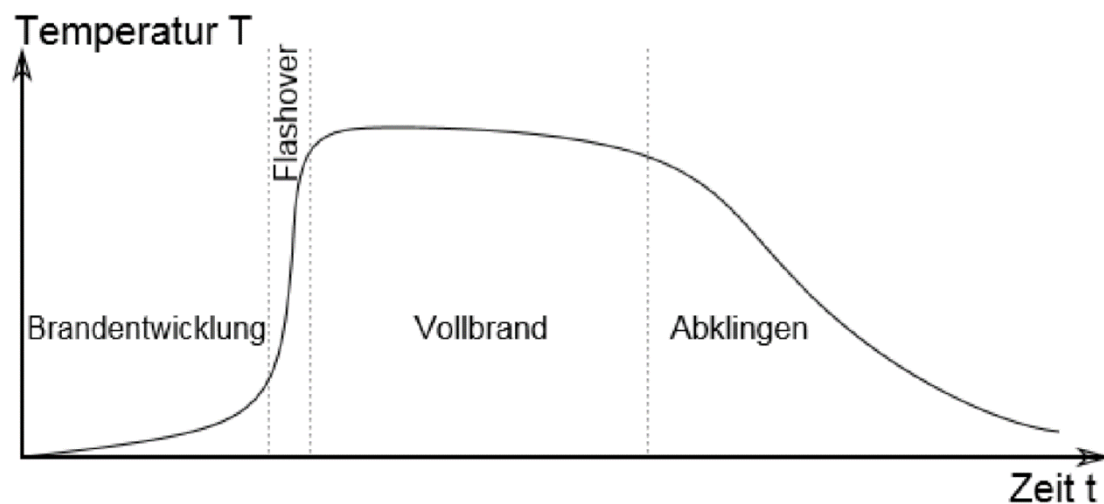


Abbildung 5: Schematische Darstellung des Verlaufs der Wärmefreisetzung bei einem Brandereignis.

Die Abschätzung eines Brandereignisses kann gemäß der US-amerikanischen National Fire Protection Association (NFPA) über Brandleistungskurven erfolgen, in denen die Brandentstehungsphase durch eine quadratische Funktion der Zeit approximiert wird

$$\dot{Q} = \alpha(t - t_0)^2 \quad (5)$$

Für den Vollbrand wird eine konstante Brandleistung angenommen. Empirische Werte für den Ausbreitungsfaktor α verschiedener Stoffe gemäß NFPA sind in Tabelle 1 dargestellt [6]:

Tabelle 1: NPFA-Standardwerte für Flammenausbreitungsparameter für das quadratische Ausbreitungsmodell [8]

Stoffgruppen	Flammenausbreitung	α in W/s^2
Keine Angabe	Langsam	0,29
Baumwolle lose, Polyestermatraze	mittel	11,7
Kunststoffschaum, gestapelte Holzplatten, gefüllte Postsäcke	schnell	46,9
Methylalkohol, schnellbrennende Polstermöbel	Sehr schnell	188

2.1.5 Luftzahl und Äquivalenzverhältnis

Eine wichtige Kenngröße zur Charakterisierung von Flammen ist das Verhältnis von Sauerstoff zu Brennstoff. Liegen die Produkte in stöchiometrischem Verhältnis vor, werden die höchsten Flammentemperaturen erreicht.

Liegt mehr Brennstoff vor, als durch den vorhandenen Sauerstoff vollständig oxidiert werden kann, spricht man von einer fetten Flamme. Aufgrund der unvollständigen Reaktion hat diese eine geringere Temperatur und setzt weniger Wärme frei als eine stöchiometrische Flamme. Die Abgase einer fetten Flamme enthalten verschiedene kohlenstoffhaltige Schadstoffe.

Steht mehr Sauerstoff zur Verfügung, als zur vollständigen Verbrennung des Brennstoffes benötigt, spricht man von einer mageren Flamme. Hier wird die selbe Energie freigesetzt wie bei einer stöchiometrischen Flamme, da der inerte Stickstoff jedoch als thermischer Ballast wirkt, ist die Flammentemperatur auch hier geringer als bei der stöchiometrischen Flamme.

Aufgrund lokaler Inhomogenitäten wird in der Regel ein leichter Luftüberschuss benötigt, um eine vollständige Verbrennung zu CO_2 , CO und H_2O zu erreichen [2]. Der Einfluss des Verhältnisses von Brennstoff zu Luft ist in Abbildung 6 dargestellt.

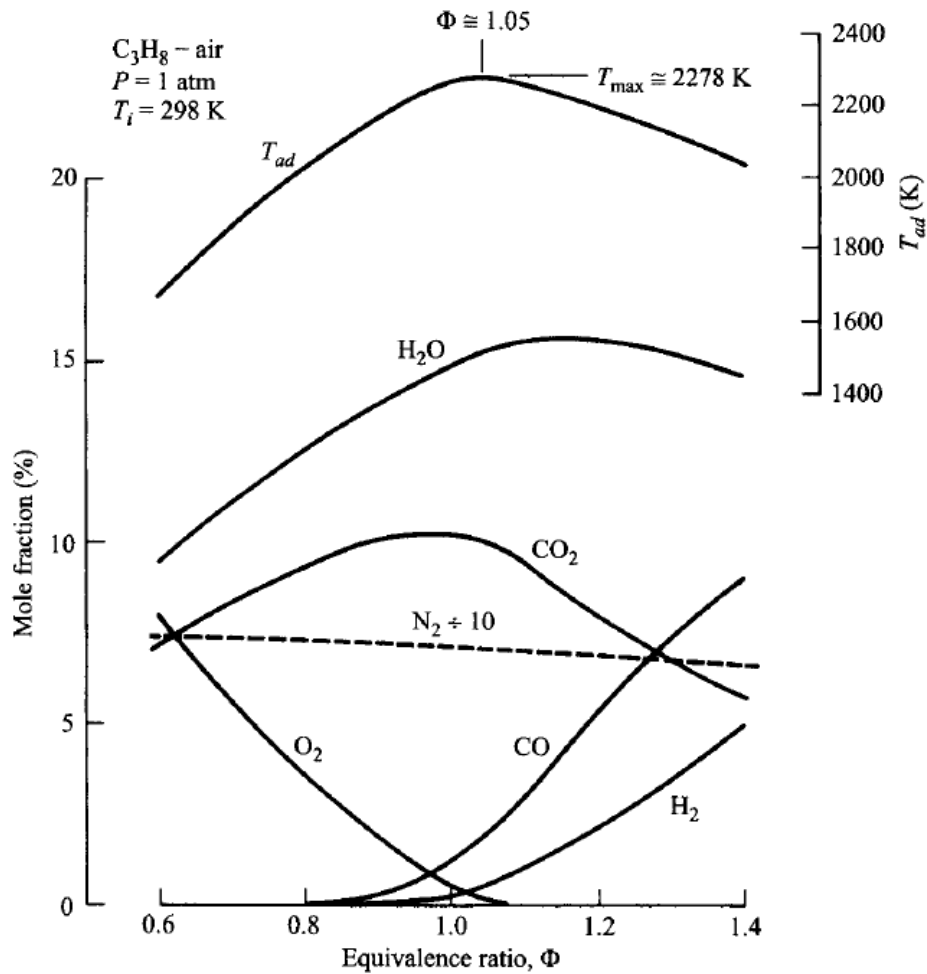


Abbildung 6: Adiabate Flammentemperatur und Reaktionsprodukte in Abhängigkeit des Äquivalenzverhältnisses Φ bei der Verbrennung von Propan [9]

Das Verhältnis von Oxidator und Brennstoff wird in der Regel auf das stöchiometrische Verhältnis bezogen durch die Luftzahl λ bzw. das Äquivalenzverhältnis Φ ausgedrückt.

$$\lambda = \frac{\frac{Z_A}{Z_F}}{\frac{Z_{A,st}}{Z_{F,st}}} \quad (6)$$

$$\Phi = \frac{1}{\lambda} = \frac{\frac{Z_F}{Z_A}}{\frac{Z_{F,st}}{Z_{A,st}}} \quad (7)$$

Das Äquivalenzverhältnis kann lokal ausgewertet werden, um Aussagen über die Brennbarkeit eines Gemisches zu treffen.

Zur Charakterisierung der Flamme können die Reaktionsprodukte in die Betrachtung mit einbezogen werden, um den insgesamt eingetragenen Brennstoff- und Luftstrom zu betrachten. Der Brennstoffstrom wird dabei über den Kohlenstoffanteil bestimmt. Unter Berücksichtigung der Massenfraktionen Z_i an Brennstoff C_xH_y , und den Produkten zu CO_2 , CO und H_2O mit den molaren Massen \tilde{M}_i ergibt sich der totale Brennstoffanteil zu

$$Z_{F,t} = \left(Z_F \frac{x\tilde{M}_C}{\tilde{M}_{C_xH_y}} + Z_{CO_2} \frac{\tilde{M}_C}{\tilde{M}_{CO_2}} + Z_{CO} \frac{\tilde{M}_C}{\tilde{M}_{CO}} \right) \frac{\tilde{M}_F}{\tilde{M}_C} \quad (8)$$

Analog ergibt sich für den insgesamt eingesaugten Sauerstoffmassenstrom:

$$Z_{A,t} = \left(Z_{O_2} + Z_{CO_2} \frac{\tilde{M}_{O_2}}{\tilde{M}_{CO_2}} + \frac{1}{2} \left(Z_{CO} \frac{\tilde{M}_{O_2}}{\tilde{M}_{CO}} + Z_{H_2O} \frac{\tilde{M}_{O_2}}{\tilde{M}_{H_2O}} \right) \right) \frac{Z_{O_2,0} \tilde{M}_{O_2} + (1 - Z_{O_2,0}) \tilde{M}_{N_2}}{\tilde{M}_{O_2}} \quad (9)$$

Damit ergibt sich ein im Folgenden mit Φ_t bezeichnetes Äquivalenzverhältnis:

$$\Phi_t = \frac{\frac{Z_{F,t}}{Z_{A,t}}}{\frac{Z_{F,st}}{Z_{A,st}}} \quad (10)$$

Wertet man Φ_t in der Rauchsicht aus, erhält man eine charakteristische Größe für einen Brand, die in der Literatur als Global Equivalence Ratio (GER) bezeichnet wird [10].

2.1.6 Flammenlänge

Eine in der Brandschutzforschung häufig verwendete charakteristische Kenngröße ist die Flammenlänge. Sie stellt eine integrale Kenngröße zur Beschreibung der Flamme dar, ist jedoch sowohl experimentell als auch analytisch mit großen Unsicherheiten belastet.

Optische Flammenlänge

Bei Brandexperimenten wird diese häufig visuell gemessen und unterliegt einer großen Unsicherheit. Einerseits gibt es aufgrund der zeitlichen Schwankungen der Flammenlänge verschiedene Methoden, die mittlere Flammenlänge zu bestimmen. So wird häufig in Aufnahmen der Flamme die Länge gewählt, bei der die Flamme zu 50 % der Zeit sichtbar ist (Medianflammenlänge). Weiterhin werden Abschätzungen nach Augenmaß getroffen oder die maximale beobachtete Länge als Flammenlänge

angegeben [11]. Außerdem hängt die Messung der Flammenlänge zu einem gegebenen Zeitpunkt vom Beobachter bzw. der verwendeten Kamera und den Umgebungsverhältnissen ab [12]. Zudem sind die Messwerte nur bedingt reproduzierbar. Madrzykowski und Fleischmann wiederholten einzelne Versuche bei gleicher Versuchsanordnung mehrmals und stellen für Methan-Luft-Flammen Schwankungen von $\pm 15\%$ der Medianflammenlänge fest [11]. Cumber und Spearpoint vergleichen Daten aus verschiedenen Studien und stellen Abweichungen von bis zu 30% bei kleinen Flammendurchmessern fest, wobei die Abweichungen für große Durchmesser, wie hier verwendet, deutlich sinken [13].

Chemische Flammenlänge

Zur objektiven Bestimmung der Flammenlänge sowie der Definition der Flammenlänge aus Simulationsergebnissen wurden verschiedene Kriterien vorgeschlagen. Zur Abgrenzung gegenüber der sichtbaren Flammenlänge wird dabei der Begriff der *chemischen Flammenlänge* verwendet.

Für den in der Brandschutzforschung relevanten Fall der nicht vorgemischten turbulenten Flamme haben Mei et al. [12] verschiedene Kriterien evaluiert. Allgemein gilt dabei als Flammenlänge der Abstand zum Punkt, an dem die Verbrennung zu 99% vollständig ist [14]. Dieser Punkt wird je nach Definition bestimmt durch einen geringen Brennstoffanteil, stöchiometrische Gemischzusammensetzung, einen definierten Anteil an CO oder den Punkt, an dem die Brennstoffkonzentration der stöchiometrischen Konzentration der Produkte entspricht [12]. Einige Kriterien zur Bestimmung der chemischen Flammenlänge sind in Tabelle 2 aufgelistet.

Die Definition der Flammenlänge über einen Brennstoffanteil nahe null liefert chemische Flammenlängen, die höher liegen als die sichtbare Flammenlänge und nicht zwingend denselben Skalierungsgesetzen wie die sichtbare Flammenlänge gehorchen [12].

Unter der Annahme von unendlich schneller Verbrennung kann der Punkt, an dem Sauerstoff und Brennstoff in stöchiometrischer Mischung vorliegen, ebenfalls als sinnvolle Definition von fast vollständiger Verbrennung herangezogen werden.

Die Untersuchungen von Mei et al. [12] zeigen, dass die besten Übereinstimmungen von sichtbarer und chemischer Flammenlänge bei Kriterien auf Basis der CO -Konzentration bestehen. Allerdings können diese nicht bei allen später verwendeten

Simulationen angewandt werden, da die CO -Konzentration nicht immer berechnet wird.

Die Definition von Yang et al. unter Verwendung des Sauerstoff-Mischungsverhältnisses überschätzt die Flammenlänge bei Sauerstoffkonzentrationen $< 21\%$ im Luftstrom. Bei höheren Konzentrationen wird die Flammenlänge unterschätzt [12]. Die Definitionen über Äquivalenzverhältnis Φ , Mischungsbruch ξ sowie die maximale Temperatur unterschätzen die sichtbare Flammenlänge in den in [12] gezeigten Fällen. Zu berücksichtigen ist dabei aber, dass hier die Definitionen nur mit Messungen von Kim et al. in abgedunkelten Räumen verglichen wurden. Die Unsicherheit in den experimentellen Werten ist somit in diesen Abschätzungen nicht enthalten.

Tabelle 2: Übersicht über verschiedene Definitionen der chemischen Flammenlänge

Quelle	Kategorie	Kriterium	Formel
Wade et al. [12]	Brennstoff	$\tilde{Z}_{CH_4} = 0,005$	\tilde{Z} = Molenbruch Brennstoff
Yang et al.	Brennstoff	$R_O = 0,99$	$R_O = \frac{Z_{O_2}}{Z_{O_2} + Z_{O_2}^+}$ $Z_{O_2}^+$ = Massenbruch Sauerstoff, der zur vollst. Verbrennung nötig wäre
Turns [12]	Stöchiometrische Mischung	$\xi = \xi_{st} = 0.548$ für Methan	$\xi = \frac{x_F - x_{O_2} + x_{O_2,0}}{x_{F,1} - x_{O_2,0}}$ [2] mit $m_{O_2,0}, m_{F,1}$ = Massenanteil an den Strömen vor der Verbrennung
Turns [9]	Stöchiometrische Mischung	$\Phi = 1$	$\Phi = \frac{1}{\lambda} = \frac{\frac{Z_F}{Z_A}}{\frac{Z_{F,st}}{Z_{A,st}}}$
Turns et al. [12]	Stöchiometrische Mischung	$T = T_{max}$	
Newman et al. [15]	CO	$Z_{CO}/Y_{CO_2} = 0.02$ für Methan	Z_i =Massenbruch
Mei et al. [12]	CO	$R_{CO} = 0.01$	$R_{CO} = Z_{CO}/Z_{CO,max}$
Cetegen [15]	Temperatur	$T = 1400K$	

Korrelationen zur Abschätzung der Flammenlänge

Eine Vielzahl von Versuchen mit verschiedenen Flammen hat gezeigt, dass das dimensionslose Verhältnis von Flammenhöhe L zum Durchmesser D der Flamme im Ursprung als Funktion einer modifizierten Froude-Zahl Q^* dargestellt werden kann.

$$Q^* = \frac{\dot{Q}}{\rho_{\infty} c_p T_{\infty} \sqrt{g D D^2}} \quad (11)$$

Verschiedene Korrelationen zur Bestimmung der Flammenlänge in Abhängigkeit von Q^* sind in Abbildung 7 gezeigt.

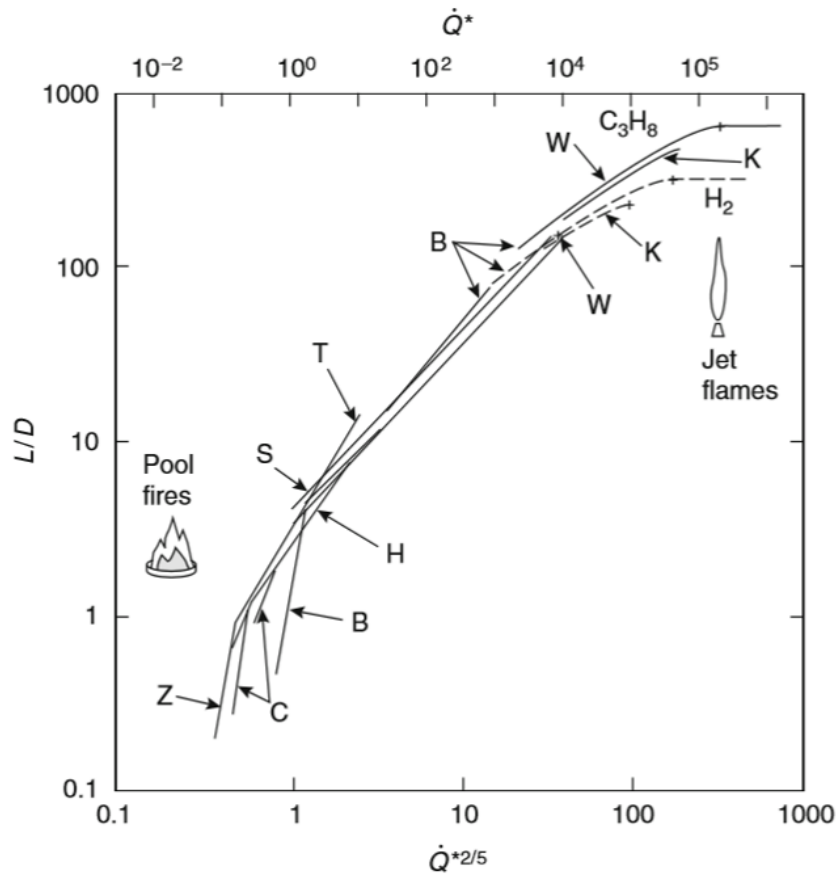


Abbildung 7: Auftriebseinfluss auf die Flammenlänge [15].

Impulsflammen haben demnach ein Verhältnis L/D , welches um das 100- bis 1000-fache höher liegt als bei auftriebsdominierten Flammen. Eine geringe Eintrittsgeschwindigkeit des Brennstoffes führt zu einem kleinen Wert des Verhältnisses Q^*/D^2 und damit zu einer kleinen Froude-Zahl, die der einer Pool-Flamme entspricht. Für den Bereich der auftriebsdominierten Flammen der in dieser Arbeit betrachtet wird, gilt nach Hekestad et al. [15]:

$$\frac{L}{D} = 1,02 + 3,7 \cdot Q^{*2/5} \quad (12)$$

2.1.7 Verlöschung

Verschiedene Mechanismen können dazu führen, dass innerhalb der Flamme lokale Verlöschung stattfindet. In stark turbulenten Regionen kommt es durch starke Streckung der Flammenfront zu Verlöschung. Ein weiterer wichtiger Mechanismus ist die Verlöschung durch Wärmeabfuhr, z.B. durch Verdunstung von Wasser. Auch durch Zugabe bestimmter Stoffe kann ein Brand chemisch gelöscht werden [16].

Ein wichtiger Aspekt bei der Verlöschung von Bränden ist das Verlöschen aufgrund der Verdünnung der Edukte, das heißt infolge von zu wenig Brennstoff oder zu wenig Sauerstoff. Die minimale Sauerstoffkonzentration (obere Zündgrenze) bzw. Brennstoffkonzentration (untere Zündgrenze) hängt dabei vom Brennstoff, der Temperatur und dem Druck ab [16], [17]. Für gegebene Druck und Temperaturverhältnisse wird oft ein brennbarer Bereich der Luftzahl zwischen λ_{UG} für die magere und λ_{OG} für die fette Verbrennung definiert. Typische Werte für verschiedene Kohlenwasserstoffe mit Luft bei Standardbedingungen sind in Tabelle 3 dargestellt.

Bei der Verlöschung von Bränden spielen jedoch der Temperatureinfluss und die Verdünnung des Luft-Brennstoff-Gemisches durch Edukte ebenfalls eine Rolle. Die Verlöschung durch Streckung wird auf Grund der geringen Strömungsgeschwindigkeiten vernachlässigt.

Tabelle 3: Obere und untere Zündgrenze von reinen Brennstoff-Luft-Gemischen bei Standard-Bedingungen [9]

Brennstoff	λ_{UG}	λ_{OG}
Methan	2,17	0,60
Propan	1,96	0,35
Wasserstoff	7,14	0,39

2.2 Erhaltungsgleichungen

Die numerische Strömungssimulation basiert auf der Bilanzierung von Erhaltungsgrößen. Im Folgenden wird dafür als Bilanzraum ein differentielles Volumenelement gewählt. Das zeitliche Differential der jeweiligen Bilanzgröße ergibt sich aus der Summe der momentan ein- und austretenden Übertragungsgrößen sowie der im Volumen liegenden Quell- und Senkentermen.

2.2.1 Massenerhaltung

Die Massenbilanz beinhaltet die Änderung der Masse $m = \rho \cdot V$ und der Massenströme $\dot{m} = u_i \cdot \rho \cdot A$ der Dichte ρ , der Geschwindigkeit in eine Raumrichtung i u_i des Volumens des Bilanzraumes KV sowie der Eintritts- bzw. Austrittsfläche des Bilanzraumes A . Da Masse unter nicht-relativistischer Betrachtung weder erzeugt noch vernichtet oder umgewandelt werden kann, ergibt sich die zeitliche Änderung der Masse im System durch die Differenz der im betrachteten Zeitraum ein- und austretenden Flüsse [18]:

$$\frac{\partial m}{\partial t} = (\dot{m}_{i,ein} - \dot{m}_{i,aus}) \quad (13)$$

Die Herleitung der differentiellen Bilanzen erfolgt durch Linearisierung der einzelnen Terme im Volumenelement. Somit ergibt sich für den Massenstrom, der in x-Richtung aus dem Element austritt:

$$\dot{m}_{x,aus} = \dot{m}_{x,ein} + \frac{\partial \rho u_x}{\partial x} dx \cdot dy dz \quad (14)$$

Wie in Abbildung 8 visualisiert, ergibt sich damit aus Gl.13 [18]

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} dx dy dz = \left(\rho u_x - \left(\rho u_x + \frac{\partial(\rho u_x)}{\partial x} dx \right) \right) dy dz + \left(\rho u_y - \left(\rho u_y + \frac{\partial(\rho u_y)}{\partial y} dy \right) \right) dx dz + \left(\rho u_z - \left(\rho u_z + \frac{\partial(\rho u_z)}{\partial z} dz \right) \right) dx dy \quad (15)$$

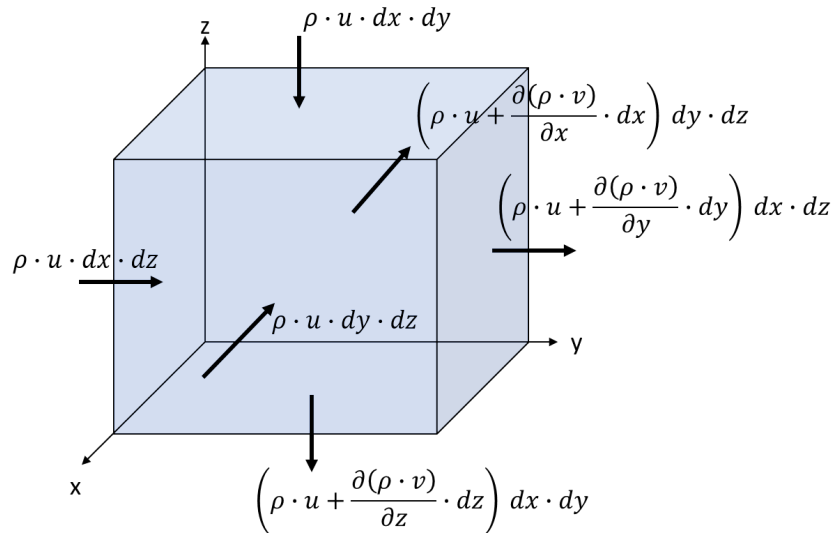


Abbildung 8: Schematische Darstellung der differentiellen Bilanzierung nach [18]

Diese Gleichung lässt sich vereinfachen zur gängigen Form der differentiellen Massenbilanz, die auch als Kontinuitätsgleichung bekannt ist [19]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u_i}{\partial x_i} = 0 \quad (16)$$

Dieser Ansatz kann analog auch für die anderen Erhaltungsgrößen angewandt werden. Die Bilanzen dieser Größen werden außerdem ergänzt durch weitere Quellterme. Es ergibt sich eine allgemeine Form der Erhaltungsgleichung für die Größe φ mit ihrem Diffusionskoeffizienten Γ [2].

$$\underbrace{\frac{\partial(\rho\varphi)}{\partial t}}_{\text{zeitliche Änderung}} + \underbrace{\nabla \cdot (\rho\varphi u)}_{\text{Konvektion}} = \underbrace{\nabla \cdot \Gamma \nabla \varphi}_{\text{Diffusion}} + \underbrace{\dot{Q}}_{\text{Quellen und Senken}} \quad (17)$$

2.2.2 Impulserhaltung

Analog zur Massenbilanz ergeben sich für die Erhaltung des Impulses die Terme für den Transport über die Bilanzraumgrenze und die zeitliche Veränderung des Systems. Zusätzlich gibt es auf der rechten Seite der Gleichung Quellterme zur Berücksichtigung von Spannungen im Innern des Fluidelementes σ , sowie äußeren Kräften, wie z.B. der Schwerkraft. Die Impulserhaltungsgleichung ergibt sich damit zu [20]:

$$\frac{\partial \rho u_j}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = \frac{\partial \sigma_{i,j}}{\partial x_i} + \rho \sum_k Y_k f_{k,j} \quad (18)$$

Der Spannungstensor σ setzt sich zusammen aus Normalspannungen, verursacht durch Druckgradienten sowie Scherspannungen aufgrund der inneren Reibung im Fluid. Für Newtonsche Fluide sind die Scherspannungen linear abhängig von der Deformationsgeschwindigkeit. Die Spannungen können daher dargestellt werden als [20]:

$$\sigma_{i,j} = p I_{i,j} - \tau = p I - 2 \frac{\nu}{\rho} \frac{\partial u_i}{\partial x_i} + \frac{2}{3} \frac{\nu}{\rho} \frac{\partial u_j}{\partial x_j} \quad (19)$$

Chemische Reaktionen verursachen Temperatur- und Druckgradienten. Wegen der starken Temperaturabhängigkeit der kinematischen Viskosität ν und der Dichte ρ der Komponenten hat die Verbrennung auch auf die Impulsbilanz einen Einfluss.

2.2.3 Energieerhaltung

Weiterhin betrachtet wird die Erhaltung der Energie. Nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik setzt sich die Änderung der totalen Energie aus der mechanischen Arbeit aufgrund angreifender Kräfte und Spannungen und dem Wärmestrom \dot{Q} zusammen. Der Wärmestrom setzt sich dabei neben Konvektion aus Wärmeleitung $\lambda_R \nabla T$ und Wärmestrahlung \dot{Q}_{rad} sowie der Wärmefreisetzung durch die Reaktion zusammen. Somit ergibt sich [19]:

$$\rho \frac{Dh_d}{Dt} = \omega_T + \frac{Dp}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\lambda_R \frac{\partial T}{\partial x_i} - \rho \sum_k h_{s,k} \tilde{Z}_k V_{k,i} \right) + \tau_{i,j} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{Q}_{rad} + \rho \sum_k \tilde{Z}_k f_{k,i} V_{k,i} \quad (20)$$

Mit den totalen Differentialen

$$\rho \frac{D\varphi}{Dt} = \rho \left(\frac{\partial \varphi}{\partial t} + u_i \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right) \quad (21)$$

2.2.4 Spezieserhaltung

Bei Simulationen mit chemischen Reaktionen sind zusätzlich zur Gesamtmasse im betrachteten Gebiet auch die Konzentrationen der einzelnen Komponenten relevant. Für Reaktionen mit n verschiedenen Stoffen können daher n Komponentenbilanzen aufgestellt werden. Diese Bilanzen enthalten einen Quellterm, der die Zu- bzw. Abnahme der Komponente durch chemische Reaktion beschreibt. Bei der Bilanzierung des Flusses über die Bilanzraumgrenzen ist zusätzlich der diffusive Stofftransport relevant. Die konvektive Geschwindigkeit u aus Gl. 16 wird demnach für die Komponente i ersetzt durch $u + V_k$ mit der Diffusionsgeschwindigkeit V_i . Mit Hilfe des Massenbruches Z_i lässt sich außerdem die Masse bzw. der Massenstrom der jeweiligen Spezies berechnen. Die Komponentenbilanzen lauten daher mit der Reaktionsrate $\dot{\omega}_i$ der Komponenten allgemein [19]:

$$\frac{\partial \rho Z_i}{\partial t} + \frac{\partial (\rho Z_i (u_i + V_k))}{\partial x_i} = \dot{\omega}_i \quad (22)$$

Details zur Reaktionsrate $\dot{\omega}_i$ finden sich in Kapitel 3.2. Die Diffusionsgeschwindigkeit der Komponente i in der Komponente k lässt sich theoretisch herleiten zu [19]:

$$\nabla \tilde{Z}_i = \sum_{k=1}^n \frac{\tilde{Z}_k Z_i}{\mathcal{D}_{pk}} (V_k - V_i) + (\tilde{Z}_i - Z_i) \frac{\nabla P}{P} + \frac{\rho}{P} \sum_{k=1}^N \tilde{Z}_i \tilde{Z}_k (f_i - f_k) \quad (23)$$

Mit dem Diffusionskoeffizienten D , den Volumenkräften f . Da das entstehende mehrdimensionale System numerisch aufwendig zu lösen ist, wird in der Regel das Ficksche Gesetz verwendet, um die Diffusion der Komponente k in Richtung j zu beschreiben [19]:

$$V_{k,j} \tilde{Z}_k = -D \frac{\partial \tilde{Z}_k}{\partial x_j} \quad (24)$$

Aus dem Prinzip der Massen- bzw. Teilchenerhaltung folgt für ein System mit N Komponenten:

$$\sum_{k=1}^N \dot{\omega}_k = 0 \quad \text{und} \quad \sum_{k=1}^N V_k = 0 \quad (25)$$

Die Summe der Komponentengleichungen ergibt demnach die Gesamtmassenbilanz aus Gl. 16. Das vorgestellte Differentialgleichungssystem ist daher überbestimmt. Um

ein System aus linear unabhängigen Differentialgleichungen zu erhalten, muss daher eine der Komponentenbilanzen oder die Gesamtmassenbilanz unberücksichtigt bleiben. Durch die Verwendung des Fickschen Gesetzes kommt es zu Fehlern in den Speziesbilanzen, sodass die Summe der Stoffmengenbilanzen nicht immer konservativ ist. In der Regel werden daher für ein System mit n Komponenten die Gesamtmassenbilanz sowie $n-1$ Stoffmengenbilanzen gelöst. Die Spezies, deren Massenbilanz nicht gelöst wird, gleicht diese Fehler somit aus. In der Verbrennungstechnik ist es üblich, die Stickstoffmassenfraktion aus der Schließbedingung zu errechnen. Da diese die größte Fraktion darstellt und außerdem nicht an der Reaktion teilnimmt, wird somit der Fehler so gering wie möglich gehalten [19].

$$Z_{N_2} = 1 - \sum_{k=1}^{n-1} Z_k \quad (26)$$

2.2.5 Zustandsgleichungen

Um aus den in den vorherigen Abschnitten gewonnenen Bilanzgleichungen ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten, werden Zustandsgleichungen benötigt. Als thermische Zustandsgleichung kann z.B. das ideale Gasgesetz verwendet werden [21]:

$$pM = \rho R^0 T \quad (27)$$

Die kalorische Zustandsgleichung ist gegeben durch:

$$dh = \int c_p dT \quad (28)$$

2.2.6 Diskretisierung der Differentialgleichungen

Da eine analytische Lösung der Erhaltungsgleichungen in der Regel nicht möglich ist, greift man zu numerischen Methoden für die Simulation von strömungsmechanischen Problemen. Dafür muss der Berechnungsraum in seinen Raumdimensionen und der Zeit diskretisiert werden. Ansys CFX basiert dabei auf der Finite - Volumen - Methode.

Diese gängige Methode hat den Vorteil, dass die Diskretisierung der konvektiven und diffusiven Terme konservativ ist [22]. Dabei wird ein Rechenpunkt innerhalb des Volumenelementes definiert und die differentielle Bilanz der Erhaltungsgröße φ aus Gl. 17 über das Kontrollvolumen (KV) integriert [22]:

$$\int_{KV} \frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} dV = \int_{KV} \left(\nabla \cdot (\Gamma \nabla \varphi) - \nabla \cdot (v \rho \varphi) + Q_\varphi \right) dV \quad (29)$$

Mit Hilfe des Gaußschen Satzes lässt sich diese Gleichung umformen, sodass die Flüsse senkrecht über die Oberflächen explizit dargestellt werden:

$$\int_{KV} \frac{\partial \rho \varphi}{\partial t} dV = \oint_{OF} (\Gamma \nabla \varphi) \vec{n} dA + \oint_{OF} (v \rho \varphi) \vec{n} dA + \int_{KV} Q_\varphi dV \quad (30)$$

Die erhaltenen Differentialgleichungen werden zur numerischen Lösung durch Reihenentwicklung in ein lineares Gleichungssystem überführt. Der Zeitterm wird dabei in der Regel durch die finite Differenzenmethode berechnet [23].

Die Flächenintegrale können als Summe der Flüsse über die Randflächen des Kontrollvolumens definiert werden. Der Wert der betrachteten Variable φ an den Oberflächen kann dabei entweder über Quadraturformeln oder durch Interpolation der Knotenwerte oder durch finite Differenzen approximiert werden [23].

Für die Volumenintegrale kann die Integration im einfachsten Fall als Produkt aus der Größe im Rechenpunkt mit dem Volumen erfolgen. Um den Fehler gering zu halten, verwendet man jedoch in der Regel eine Funktion der Zielgröße in Abhängigkeit der Raumrichtungen, was die Werte dieser Zielgrößen an den umrandenden Flächen benötigt [23].

Um die Werte an anderen Punkten als dem Rechenpunkten zu erhalten, sind Interpolationsmethoden erforderlich. Diese Interpolation kann über eine Taylorreihenentwicklung erfolgen. Die vorgestellten Verfahren sind in Abbildung 9 schematisch dargestellt.

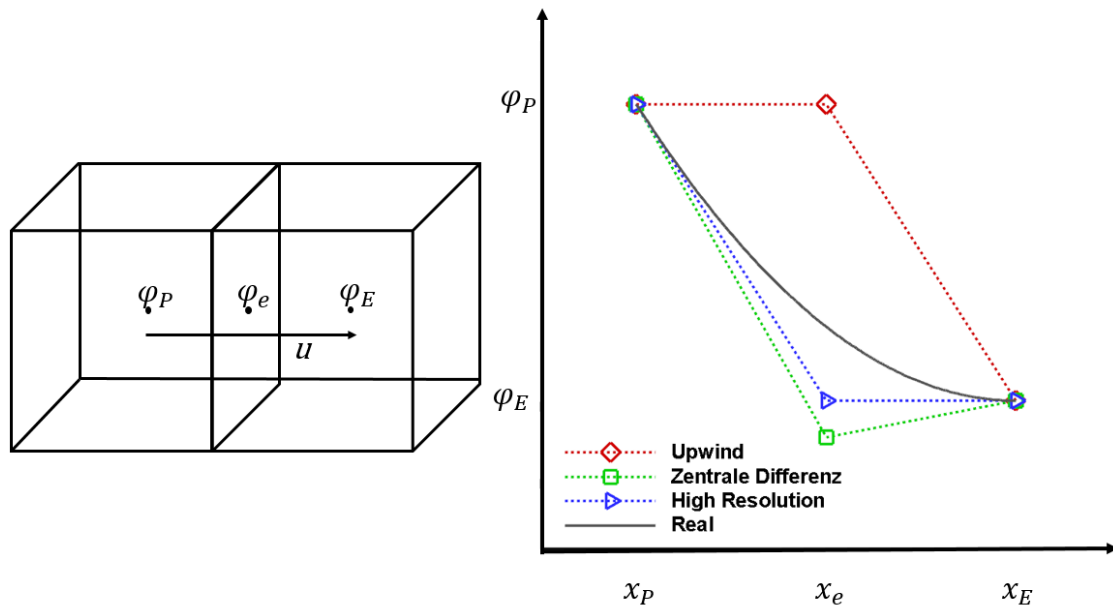


Abbildung 9: Schematische Darstellung der Interpolationsmethoden.

Bricht man diese Reihe nach dem ersten Glied ab, ergibt sich das Upwind-Verfahren. Der Wert an der Oberfläche entspricht dabei dem im Rechenpunkt des Kontrollvolumens stromaufwärts:

$$\varphi_e = \begin{cases} \varphi_P & (v \cdot \vec{n})_e > 0 \\ \varphi_E & (v \cdot \vec{n})_e < 0 \end{cases} \quad (31)$$

Der entstehende Fehler durch den Abbruch der Reihenentwicklung führt zu so genannter numerischen Diffusion. Diese kann durch verbesserte Interpolationsschemata verbessert werden. Ein Abbruch nach dem zweiten Glied führt für $u \cdot n > 0$ auf Gl. 32. Die in der Gleichung enthaltene erste Ableitung kann dabei über die zentrale Differenz mit Hilfe der angrenzenden Kontrollvolumina gebildet werden.

$$\varphi_e = \varphi_P + (x_e - x_P) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_P \quad (32)$$

Bei sich ändernden Gradienten kann dies dazu führen, dass der Wert an der Oberfläche des Kontrollvolumens größer bzw. kleiner ist als die Werte in den Rechenknoten der benachbarten Zellen. Solche Extremwerte sind häufig physikalisch nicht sinnvoll.

In den hier durchgeführten Simulationen wird das in Ansys CFX implementierte High Resolution Schema verwendet. Hierbei wird Gl. 32 um einen Faktor β erweitert [24]:

$$\varphi_e = \varphi_P + \beta(x_e - x_P) \left(\frac{\partial \varphi}{\partial x} \right)_P \quad (33)$$

Der Faktor β wird so gewählt, dass keine Minima oder Maxima entstehen. Mit Hilfe eines nichtlinearen Verfahrens wird jener Wert von β bestimmt, der unter dieser Bedingung am nächsten bei 1 liegt. [24]. Dieses Verfahren verhindert numerisch induzierte Oszillationen, kann jedoch auch physikalisch sinnvolle Extremwerte dämpfen.

3 Verwendete Modelle

Zu modellierende Phänomene in der Brandsimulation sind die Turbulenz, die Strahlung sowie die Reaktionsgeschwindigkeit (siehe Abbildung 1). Im Rahmen der Modellkombination des stationären Brandes in Kapitel 4.2.3 werden verschiedene numerische Modelle zur Modellierung von Reaktionsgeschwindigkeit und Wärmestrahlung untersucht. Diese Modelle werden im Folgenden vorgestellt. Weiterhin wird auf die verwendeten Turbulenzmodelle für alle Simulationen eingegangen.

3.1 Turbulenzmodell

Die meisten technisch relevanten Strömungen sind turbulent, das heißt sie beinhalten dreidimensionale, zufällige Wirbelstrukturen von verschiedenen Größenordnungen. Je höher die Reynoldszahl einer Strömung, desto stärker ist die Turbulenz. Unterhalb einer kritischen Reynoldszahl werden Störungen sofort gedämpft und es kann keine Turbulenz entstehen. Turbulenz erhöht Diffusivität, Viskosität und Wärmeleitung in einer Strömung [19].

Große Wirbel beinhalten viel kinetische Energie und zerfallen nach und nach in kleinere Wirbel (Abbildung 10). Durch viskose Effekte wird dabei kinetische Energie in innere Energie umgewandelt. Die von der Strömung abhängige so genannte Kolmogorov-Länge definiert die Größe der kleinstmöglichen Wirbel, unterhalb der die vollständige Dissipation stattfindet. Während die Kolmogorov-Wirbel als isotrop betrachtet werden können, sind die großen Wirbelstrukturen anisotrop [21].

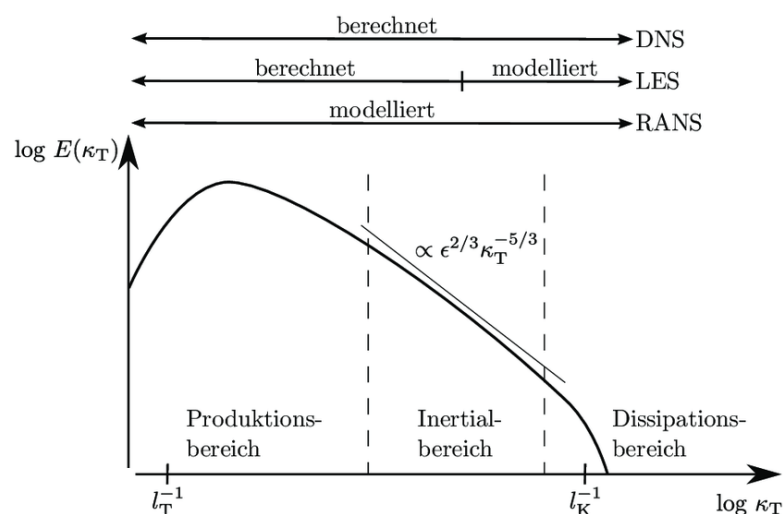


Abbildung 10: Energiespektrum isotroper Turbulenz und dessen Auflösung durch numerische Strömungssimulationen [24]

Kleine Änderungen der Randbedingungen bei turbulenten Strömungen können aufgrund des chaotischen Charakters der Turbulenz zu großen Schwankungen im Ergebnis führen [19].

Aufgrund der Energieerhaltung muss die dissipierte Energie in den kleinen Wirbeln der kinetischen Energie der großen Wirbel entsprechen. Die Kolmogorov-Länge beschreibt die Größe, die durch ein Gitter für eine Direkte numerische Simulation (DNS) einer turbulenten nicht reagierenden Strömung aufgelöst werden muss. Da dies in den meisten Anwendungsfällen nicht möglich ist, werden Turbulenzmodelle benötigt, die je nach Modell alle (RANS) oder die Wirbel ab einer definierten Größe (LES) durch Modelle approximieren (siehe Abbildung 10) [21].

3.1.1 Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS)

Eine verbreitete Methode der Modellierung von Turbulenz verwendet zeitliche Mittelwerte der Erhaltungsgrößen, um damit eine stationäre mittlere Lösung ohne Wirbel zu berechnen. Die jeweilige Erhaltungsgröße wird dafür aufgeteilt in einen mittleren Anteil und einen stochastisch fluktuierenden Anteil. Um die Anzahl der zu modellierenden Terme gering zu halten, wird bei kompressiblen Medien in der Regel eine Favre-Mittelung (dichtegewichtete Mittelung) durchgeführt. Der Favre-Mittelwert $\tilde{\varphi}$ einer Größe φ ergibt sich mit dem fluktuierenden Anteil φ'' [21]:

$$\tilde{\varphi} = \frac{\overline{\rho \varphi}}{\bar{\rho}} \quad \text{mit} \quad \varphi(t) = \tilde{\varphi} + \varphi''(t) \quad (34)$$

Die überstrichenen Größen $\bar{\rho}, \overline{\rho \varphi}$ etc. sind dabei Reynolds-gemittelte Größen, d.h. durch Zeitmittelung gebildet.

Damit ergeben sich folgende dichte-gemittelte Erhaltungsgleichungen:

Massenbilanz [19]:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} \quad (35)$$

Speziesbilanz [19]:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)}{\partial x_i} = - \frac{\partial (\overline{\rho V_{k,i} Y_k} + \overline{\rho u_i'' Y_k''})}{\partial x_i} + \bar{\omega}_k \quad (36)$$

Impulsbilanz [19]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_i} + \frac{\bar{p}}{\partial x_j} = \frac{\partial (\bar{\tau}_{ij} - \bar{\rho} \tilde{u}_i'' \tilde{u}_j'')}{\partial x_i} \quad (37)$$

Energiebilanz [19]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}_s}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}_s}{\partial x_i} = \bar{\dot{\omega}}_T + \frac{D\bar{p}}{Dt} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\lambda_R \partial T}{\partial x_i} - \bar{\rho} u_i'' h_s'' \right) + \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\bar{\rho} \sum V_{ki} Y_k h_{s,k}}{\partial x_i} \quad (38)$$

mit

$$\frac{D\bar{p}}{Dt} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \overline{u_i'' \frac{\partial p}{\partial x_i}} \quad (39)$$

Um zwischen Molenbruch \tilde{Z} und Favre-gemittelten Erhaltungsgleichungen unterscheiden zu können, wird der Molenbruch in diesen Gleichungen mit Y_K dargestellt.

In diesen Gleichungen tauchen Terme auf, die modelliert werden müssen: Reynolds-Spannungen $\overline{u_i'' u_j''}$, turbulente Flüsse $\overline{u_i'' \varphi''}$ von Komponenten und von Enthalpie, diffusive Flüsse $\overline{V_{ki} Y_k}$ und $\overline{\lambda_R \frac{\partial T}{\partial x_i}}$ sowie die mittleren Reaktionsraten $\bar{\dot{\omega}}_k$.

Zu beachten ist außerdem, dass die Simulation Favre-gemittelte Ergebnisse liefert, die im Allgemeinen von einer Zeitmittelung abweichen:

$$\bar{\rho} \tilde{\varphi} = \bar{\rho} \bar{\varphi} + \overline{\rho' \varphi'} \quad (40)$$

Die Reynolds-Spannungen werden durch ein Turbulenzmodell dargestellt. Hierfür wurde eine Vielzahl an verschiedenen Methoden entwickelt. Generell können jedoch nicht alle auftretenden Phänomene mit RANS-Modellen richtig wiedergegeben werden.

Ein häufig für stationäre Brandsimulationen verwendetes Turbulenzmodell ist das $k-\epsilon$ Model [25]. Im $k-\epsilon$ -Modell werden die Reynolds-Spannungen mit Hilfe einer turbulenten Wirbelviskosität ν_t modelliert [20]. Dafür werden zwei zusätzliche Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie k und die Dissipation ϵ gelöst [23]:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{k}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{k}) = \nabla \cdot \left(\frac{\bar{\rho} v_t}{\sigma_k} \nabla \tilde{k} \right) - P_K - \bar{\rho} \tilde{\epsilon} \quad (41)$$

sowie analog für die Dissipation:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\epsilon}}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{\epsilon}) = \nabla \cdot \left(\frac{\bar{\rho} v_t}{\sigma_\epsilon} \nabla \tilde{\epsilon} \right) - c_{\epsilon 1} P_K \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}} - c_{\epsilon 2} \bar{\rho} \frac{\tilde{\epsilon}^2}{\tilde{k}} \quad (42)$$

Darin beschreibt P_k die Turbulenzproduktion durch viskose Kräfte:

$$P_k = \bar{\rho} v_T \left(\frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial v_i}{\partial x_j} - \frac{2}{3} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \left(3 \bar{\rho} v_t \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \right) + \rho k \quad (43)$$

Durch diese Größen können die Reynoldsspannungen dargestellt werden:

$$\bar{\rho} \tilde{v} \tilde{v} = \bar{\rho} v_t \left(2 \tilde{S} - \frac{2}{3} \delta \nabla \cdot \tilde{v} \right) - \frac{2}{3} \delta \bar{\rho} \tilde{k} \quad (44)$$

mit:

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \widetilde{v'' \cdot v''} \quad (45)$$

$$v_t = c_v \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (46)$$

3.1.2 Large Eddy Simulation (LES)

Einen Kompromiss zwischen RANS und DNS stellen Large-Eddy-Simulationen (LES) dar. Dabei werden große Wirbelstrukturen numerisch aufgelöst und berechnet, während kleine Wirbel durch Modelle erfasst werden. Dafür werden Filterfunktionen verwendet, um die Variablen in einen großskaligen Anteil, der berechnet wird, und einen kleinskaligen Anteil, der simuliert wird, zu unterteilen [19]. Es gibt verschiedene Filterfunktionen. Ansys CFX nutzt einen räumlichen Gaussfilter. Die gefilterte Variable lässt sich darstellen als [26]:

$$\bar{\rho} \tilde{f}(\vec{x}) = \int_V \rho f(\vec{x}') F(\vec{x} - \vec{x}') d\vec{x}' \quad (47)$$

Dabei ist F die Filterfunktion:

$$F(\vec{x}) = \left(\frac{6}{\pi\Delta^2} \right) \exp\left(-\frac{6}{\Delta^2}(x^2 + y^2 + z^2) \right) \quad (48)$$

Setzt man für die physikalischen Größen $\varphi = \tilde{\varphi} + \varphi''$ in die Erhaltungsgleichungen ein, ergeben sich ungeschlossene Terme analog zu RANS. Dabei beschreibt $\tilde{\varphi}$ den Teil der Größe, der numerisch aufgelöst wird, während die Differenz zur physikalischen Größe φ'' durch ein sogenanntes Subgrid-Modell gelöst wird.

Es gibt eine Vielzahl an Subgrid-Modellen. Ein weit verbreitetes Modell, welches auch in Ansys verwendet wird ist das Smagorinsky-Modell. Ähnlich wie bei den oben beschriebenen Reynolds-Spannungsmodellen, wird eine Wirbelviskosität ν_t definiert, die höher als die physikalische Viskosität ist und somit die Dissipation von kinetischer in thermische Energie ausdrückt [26], [19].

$$\tau_{i,j} - \frac{\delta_{i,j}}{3} \tau_{k,k} = -\nu_t \bar{S}_{i,j} \quad (49)$$

Darin ist τ der Renoldsspannungstensor, δ das Kronecker-delta und \bar{S} der numerisch aufgelöste Spannungstensor.

$$\bar{S}_{i,j} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad (50)$$

Die Wirbelviskosität wird modelliert durch

$$\nu_t = (C_S \Delta)^2 * |\bar{S}| \quad (51)$$

Die Modellkonstante C_S stellt eine empirisch bestimmte Größe, die von der Strömung abhängig ist. Die nimmt Werte zwischen 0,065 und 0,25 an.

3.1.3 Detached Eddy Simulation (DES)

Während RANS eine nicht immer ausreichende Genauigkeit bieten, fordern LES eine deutlich erhöhte Rechenzeit. Hybride Modelle kombinieren die Vorteile beider Methoden. Dabei wird das Modell räumlich in Bereiche getrennt, wo RANS angewandt wird während im Rest eine LES durchgeführt wird. Eine Möglichkeit hierzu ist das in Ansys CFX implementierte Detached-Eddy-Simulation Modell (DES) [26]. Dieses kann erfolgreich in der Brandsimulation eingesetzt werden.

3.1.4 Auftrieb

Wie in Abschnitt 2.1.3 beschrieben, liegt im Bereich der Brandquelle oft eine sehr geringe Geschwindigkeit vor. Im Gegensatz zu Impulsflammen kommt damit der freien Konvektion eine entscheidende Bedeutung zu. Durch die großen Temperaturgradienten kommt es zu Auftriebskräften, die die Flamme maßgeblich beeinflussen. Daher muss in der Momentenbilanz der in vielen Strömungssimulationen vernachlässigte Buoyancy-Term berücksichtigt werden [26]:

$$S_{M,Bouy} = (\rho - \rho_{ref})g \quad (52)$$

Darin sind ρ_{ref} die Umgebungsdichte und g die Erdbeschleunigung mit $9,81 \text{ m s}^{-2}$. Der hydrostatische Druckunterschied in der Impulsbilanz wird dabei mit dem Druck [26]:

$$p = p_{abs} - p_{ref} - \rho_{ref} * g * (r - r_{ref}) \quad (53)$$

gebildet. Darüber hinaus können Interaktionen zwischen Turbulenz und Auftrieb durch einen Summanden P_{KB} in der Transportgleichung der turbulenten kinetischen Energie und $C_{\epsilon 1} R_{\epsilon B}$ in der Transportgleichung für die Dissipation im $k-\epsilon$ -Modell berücksichtigt werden. Diese Erweiterung wird in der vorliegenden Arbeit jedoch nicht verwendet.

3.2 Chemische Reaktion

3.2.1 Eddy Dissipation Modell

Beim Eddy-Dissipation-Modell (EDM) wird angenommen, dass die chemische Reaktion im Verhältnis zu den Stofftransportprozessen im Fluid sehr schnell abläuft. Das Modell geht somit vom Vorliegen eines chemischen Gleichgewichtes aus. Da es sich um eine nicht-vorgemischte Flamme handelt, ist die Mischung von Brennstoff und Oxidator geschwindigkeitsbestimmend [27] und die Reaktionsrate $\dot{\omega}_K$ der Elementarreaktion k hängt nicht von der Reaktion, sondern von der turbulenten Mischungszeit, die sich aus dem Verhältnis der turbulenten Größen ϵ/k ergibt und der Konzentration der limitierenden Spezies ab [26]:

$$\dot{\omega}_K = \mathcal{A} \frac{\epsilon}{k} \min \left(\frac{[I]}{v'_{kl}} \right) \quad (54)$$

Dabei ist A eine Modellkonstante und $[I]$ die molare Konzentration des limitierenden Eduktes i mit dem stöchiometrischen Koeffizienten ν'_{ki} . Darüber hinaus kann die Begrenzung der Reaktionsrate durch eine Gleichgewichtskonzentration der Produkte oder die Definition einer Maximaltemperatur modelliert werden [26]. Beides wird in der vorliegenden Arbeit jedoch nicht berücksichtigt.

3.2.2 Flamelet-Modell

Um die Chemie detailliert zu erfassen, müssten viele Komponentenbilanzen gelöst werden, die eine Vielzahl an Reaktionsgeschwindigkeitstermen enthalten. Aufgrund der verschiedenen Zeitskalen der Reaktionen und der Strömung würde dabei ein steifes Gleichungssystem entstehen. In der Praxis werden daher häufig tabellierte Kinetikmodelle verwendet, um die Modellierung vieler Reaktionsschritte zu vermeiden [2].

Dabei wird die Flamme als Ensemble von sogenannten flamelets dargestellt, die kleiner als die Kolmogorov-Länge sind und somit als laminar betrachtet werden können. Die flamelet-Gleichung nutzt dabei den Mischungsbruch, um die Flammenoberfläche zu berechnen. Die skalare Dissipationsrate wird zur Beschreibung der Mischung herangezogen. Zunächst wird dabei das Feld des Mischungsbruches berechnet [28]:

$$\rho \frac{\partial \xi}{\partial t} + \rho v \nabla \xi = \nabla \cdot (\rho D \nabla \xi) \quad (55)$$

Die Reaktions- und Diffusionsvorgänge in der Umgebung der Flammenoberfläche können durch die Flameletgleichung beschrieben werden:

$$\rho \frac{\partial \varphi_i}{\partial t} = \frac{\rho \chi}{Le_i} \frac{\partial^2 \varphi_i}{\partial \xi^2} + \omega_i \quad (56)$$

Die Flammenoberfläche wird dabei über die Orte definiert, an denen der stöchiometrische Mischungsbruch vorliegt.

Anschließend werden über Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen die Massenanteile der einzelnen Spezies, die Temperatur und die Dichte ermittelt. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist dabei eine Funktion von Mischungsbruch und Dissipationsrate in Abhängigkeit von Ort und Zeit. Vereinfachend wird oft

angenommen, dass diese beiden Größen statistisch unabhängig sind. Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\tilde{\varphi}$ der Größe φ ist dann gegeben durch [28]:

$$\tilde{\Phi}(x, t) = \int_0^1 \int_0^\infty \Phi(Z, \chi) \tilde{P}_Z \times \tilde{P}_\chi d\chi dZ \quad (57)$$

Mit der skalaren Dissipationsrate

$$\chi = 2D|\nabla Z|^2 \quad (58)$$

Diese Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen werden unabhängig von der Strömungssimulation in Voraus ausgewertet und in Tabellen abgelegt, auf die während der Simulation mit dem Flameletmodell zurückgegriffen wird. Entsprechende Tabellen sind in Ansys CFX bereits integriert.

3.3 Strahlung

Neben dem Wärmetransport durch Konvektion und Wärmeleitung ist bei der Verbrennung aufgrund der hohen Temperaturen auch die Wärmestrahlung relevant. Diese entsteht vor allem durch die Gasstrahlung von Wasser und Kohlendioxid sowie durch Ruß, der zu der typischen gelb-leuchtenden Farbe von rußenden Flammen führt [2].

Wärmestrahlen sind elektromagnetische Wellen mit Wellenlängen von 0,3-100µm. Die Intensität I der Wärmestrahlung eines schwarzen Strahlers kann mit dem Planckschen Strahlungsgesetz in Abhängigkeit der Wellenlänge λ_R , der Temperatur T sowie der Naturkonstanten c_1 und c_2 beschrieben werden [29]:

$$I_{\lambda_R} = \frac{c_1}{\lambda_R^5 \cdot \left(\exp\left(\frac{c_2}{\lambda_R T}\right) - 1 \right)} \quad (59)$$

Der schwarze Strahler ist ein Modellkörper, der bei einer gegebenen Temperatur die maximale Strahlungsintensität aufweist. Durch Integration über die Wellenlänge und Verwendung der Boltzmann-Konstante σ kann aus Gl. 59 die Wärmestromdichte eines schwarzen Strahlers berechnet werden [29]:

$$\dot{q}_S = \frac{\pi \cdot c_1}{15 \cdot c_2^4} \cdot T^4 = \sigma \cdot T^4 \quad (60)$$

Festkörper, z.B. Rußpartikel, können häufig als so genannte graue Strahler beschrieben werden. Das bedeutet, dass die Wärmestrahlung wie beim schwarzen Strahler beschrieben werden kann, jedoch um einen festen Faktor geringer ist. Dieser Emissionsgrad ϵ ist vom Material abhängig.

$$\dot{q}_{\text{grau}} = \epsilon \sigma T^4 \quad (61)$$

In einfachen Modellen (grey gas) wird diese Annahme auch auf Gase übertragen [30]. In der Realität sind Gase jedoch in den meisten Wellenlängenbereichen durchlässig für Wärmestrahlung und senden in diesen Bereichen auch keine Strahlung aus. In Abhängigkeit der Molekülstruktur emittieren und absorbieren vor allem dreiatomige Gase Strahlung in bestimmten Wellenlängenbereichen, während Edelgase und zweiatomige Gase weitgehend strahlungsdurchlässig sind [29]. Der Emissionsgrad ϵ ist somit, wie in Abbildung 11 exemplarisch für den Emissionsgrad von CO_2 gezeigt, wellenlängenabhängig [29].

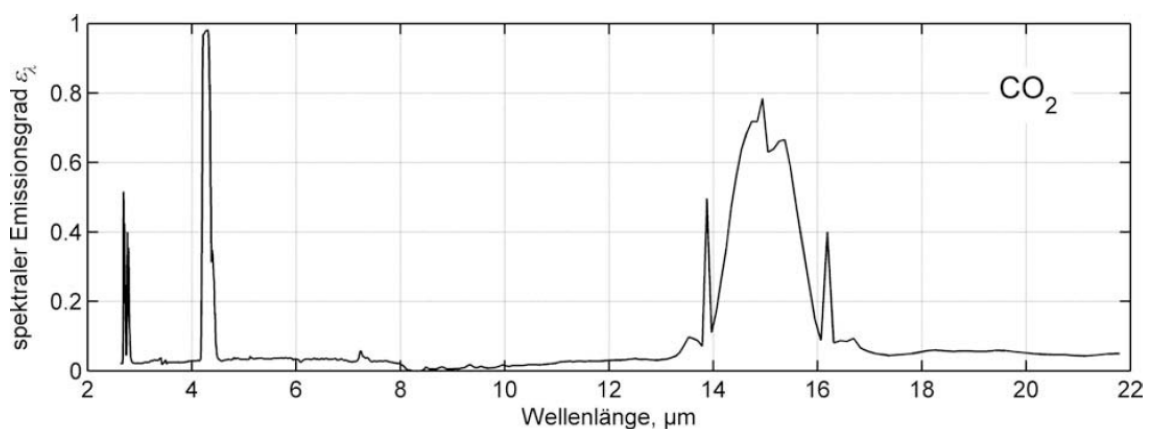


Abbildung 11: Spektraler Emissionsgrad mit spezifischen Banden von CO_2 im infraroten Wellenlängenbereich für eine Gasschicht von 40 cm bei $p = 0,1$ bar [29]

Grundlage der in dieser Arbeit verwendeten Strahlungsmodelle ist die radiative transport equation (RTE), eine Strahlungsbilanz in Abhängigkeit der Frequenz f und Strahlungsrichtung d . Diese setzt sich zusammen aus Anteilen für Absorption, Emission und der Umlenkung von Strahlung durch Streuung. Bilanzgröße ist dabei die Strahlungsintensität, d.h. die flächenbezogene Strahlungsleistung orthogonal zur

Ausbreitungsrichtung. Die Integration über alle Raumrichtungen ergibt somit den Energiestrom durch Strahlung.

Die Menge absorbiertes Strahlung ist direkt proportional zur einfallenden Energie und der Weglänge. Die Energie wird in innere Energie umgewandelt [30]:

$$\frac{dI_{abs}}{ds} = -K_{f,a}I_f \quad (62)$$

Ein ähnliches Gesetz gilt für die Wärmeabfuhr durch Streuung (out-scattering), wobei die Energie hier nicht umgewandelt, sondern lediglich umgelenkt und in der Bilanz für andere Raumrichtungen als in-scattering wieder bilanziert wird [30]:

$$\frac{dI_{sca}}{ds} = -K_{f,s}I_v \quad (63)$$

Die Energiezufuhr durch Strahlung erfolgt aus allen Raumrichtungen. Zur Bestimmung wird daher die Streuungsphasenfunktion $\Psi_v(d, d_i)$ über den Raumwinkel Ω integriert. Die Streuungsphasenfunktion beschreibt dabei die Wahrscheinlichkeit, dass Strahlung von einer Raumrichtung d_i auf die bilanzierte Raumrichtung d umgelenkt wird. Unter der in dieser Arbeit getroffenen Annahme der isotropen Streuung gilt $\Psi_f(d, d_i) = 1$ und für die einfallende Strahlung [30]:

$$\frac{dI_{sca}}{ds} = \frac{K_{fd}}{4\pi} \int_{4\pi} \Psi_n u(d, d_i) d\Omega \quad (64)$$

Die Strahlungsemission eines Volumenelements ist proportional zum Energiegehalt des Volumenelements. Mit Hilfe der Strahlung des Schwarzen Strahlers bei der gegebenen Temperatur und Wellenlänge lässt sich dieser Anteil ausdrücken als [30]:

$$\frac{dI_{sca}}{ds} = K_{va}I_{b,f} \quad (65)$$

Damit ergibt sich die RTE zu [30], [26]:

$$\frac{dI_v}{ds} = \left(-(K_{av} + K_{sv})I_v + K_{af}I_b + \frac{K_{sf}}{4\pi} \int_{4\pi} dI_f \Psi d\Omega' + S \right) \quad (66)$$

3.3.1 P₁-Modell

Bei den P_N-Modellen handelt es sich um diffuse Strahlungsmodelle, bei denen die RTE mit Hilfe sphärischer harmonischer Funktionen in ein System partieller Differentialgleichungen umgewandelt wird. Grundvoraussetzung ist dabei die Annahme isotroper Strahlung [30].

Allgemein wird bei P_N-Modellen die Strahlung auf dem Radius r durch eine Fouriertransformation dargestellt [30]:

$$I = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l I_l^m Y_l^m \quad (67)$$

Darin sind I_l^m die vom Radius abhängigen Koeffizienten und Y_l^m die richtungsabhängigen harmonischen Kugelfunktionen. Für $l \rightarrow \infty$ ergibt sich eine exakte Lösung. Für die Anwendung im P₁-Modell erfolgt ein Abbruch nach dem Glied $l = 1$. Wird die Reihe um weitere Glieder entwickelt, steigt die Genauigkeit, allerdings steigt damit auch der Rechenaufwand signifikant an. In der Praxis wird daher neben dem P₁ Modell lediglich das P₃-Modell angewandt [30].

3.3.2 Discrete Transfer Modell

Grundannahme des Discrete Transfer Modells ist die Annahme isotroper Streuung, d.h. $\Omega = 1$ in Gl. 66. Unter der Annahme eines homogenen Strahlungsfeldes kann die RTE nun entlang einzelner Strahlen in definierte Richtungen gelöst werden [26].

$$I_f = I_{0,f} + ep(-(K_{a,f} + K_{s,f})s) + I_{b,f} * (1 - exp(K_a d)) + K_{s,f} I_f \quad (68)$$

Darin ist $I_{0,f}$ die Strahlung im Berechnungsursprung. Um den Wärmestrom zu berechnen wird über den Raumwinkel integriert. Weiterhin muss über den Frequenzbereich integriert werden, um Absorption und Emission zu berechnen [26]. Iterationen sind notwendig auf Grund von Nichtlinearitäten durch Streuung, Reflektion und Temperaturabhängigkeit der Strahlungseigenschaften und führen zu einem erhöhten Rechenaufwand gegenüber dem diffusen P_N-Modell. Ein weiterer Nachteil ist, dass die Methode nicht zwingend konservativ ist [30].

3.3.3 Spektralmodelle

Um die Wellenlängenabhängigkeit der Gasstrahlung zu beschreiben, werden Simulationen mit zwei verschiedenen Spektralmodellen durchgeführt. Diese sind auf beide Strahlungsmodelle anwendbar.

Grey Gas

Hierbei wird die in Abbildung 11 dargestellte Wellenlängenabhängigkeit der Gase vernachlässigt. Jedem Gas wird stattdessen ein Emissionsgrad ϵ_t definiert. Somit muss nur eine Gleichung für das gesamte Spektrum gelöst werden.

Weighted sum of grey gases

Die Absorption und Emission realer Gase hängt von der Temperatur T und dem Spektralbereich L_p , dargestellt als Produkt aus Weglänge und Partialdruck ab. Die Emissivität kann dann durch eine Summe von N_g grauen Gasen mit dem Absorptionskoeffizienten k dargestellt werden mit dem Emissionskoeffizienten [30].

$$\epsilon_g = \sum_{i=1}^{N_g} a_{gi} (1 - e^{-k_i L_p}) \quad (69)$$

Mit der Schließbedingung

$$\sum_{i=1}^{N_g} a_{gi} = 1 \quad (70)$$

Für eine große Anzahl grauer Gase N_g kann der Koeffizient a_{gi} als der Anteil im Verhältnis zur Strahlung des Schwarzen Körpers interpretiert werden, für den der Absorptionskoeffizient ungefähr k_i entspricht [26].

Bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen sind die Strahlungsemissionen von CO_2 und Wasser dominierend. Für typische Partialdruckverhältnisse dieser Produkte wurden geeignete Modellparameter empirisch ermittelt. Es wird eine Parametrisierung aus vier grauen Gasen von Beer Foster und Sindall verwendet. [26]:

$$\epsilon_g = \sum_{i=1}^4 a_{gi} (1 - \exp(-K_i(p_{H_2O} + p_{CO_2} + p_{CO}) - K_{HC,i} p_{HC}) L) \quad (71)$$

Mit den temperaturabhängigen Koeffizienten

$$a_{gi} = b_{1i} + 10^{-5} b_{2i} T_g \quad (72)$$

mit

$$\sum_{i=1}^{N_g} b_{1i} = 1 \quad \text{und} \quad \sum_{i=1}^{N_g} b_{2i} = 0 \quad (73)$$

Dabei sind b_{1i} , b_{2i} , K_i und $K_{HC,i}$ Modellparameter aus Tabelle 4, und p_x die Partialdrücke von Produkten und unverbrannten Kohlenwasserstoffen HC .

Tabelle 4: Emissivitätsparameters für die grauen Modellgase nach [31]

i	b_{1i}	b_{2i}	K_i	$K_{HC,i}$
1	0,364	4,74	0	3,85
2	0,266	7,19	0,69	0
3	0,252	-7,14	7,4	0
4	0,118	-4,52	80	0

4 Simulation eines stationären Brandes

Anhand eines stationären Brandes bzw. Feuers soll zunächst die Methodik validiert werden. Dazu wird eine Gitterstudie durchgeführt und es wird eine Referenzkombination mit verschiedenen Strahlungs- und Reaktionsmodellen erstellt. Ein Überblick über die verwendeten Einstellungen findet sich in Tabelle 5. Die im Rahmen der Untersuchungen variierten Parameter sind dabei farblich gekennzeichnet.

4.1 Numerisches Setup

4.1.1 Geometrie

Es wird ein Versuchsaufbau von Cetegen [32] untersucht, der in Abbildung 12 dargestellt ist. Es handelt sich dabei um einen Raum mit einer Brandquelle am Boden aus der Methan mit einem durch die Brandleistung von 104 kW definierten Massenstrom (ca. 2 Gramm pro Sekunde) ausströmt. Die Brandquelle wird als Quadrat mit einer Seitenlänge von 20 cm dargestellt. Luft wird seitlich in den Plumen eingesaugt. In 2 m Höhe über der Brandquelle befindet sich eine quadratische Haube mit einer Seitenlänge von 2,4 m mit einem Lüfter, über den ein definierter Massenstrom aus der Haube in die Umgebung abgezogen wird. Dieser wurde von Cetegen so eingestellt, dass sich eine stabile Rauchschicht ausbildet [32].

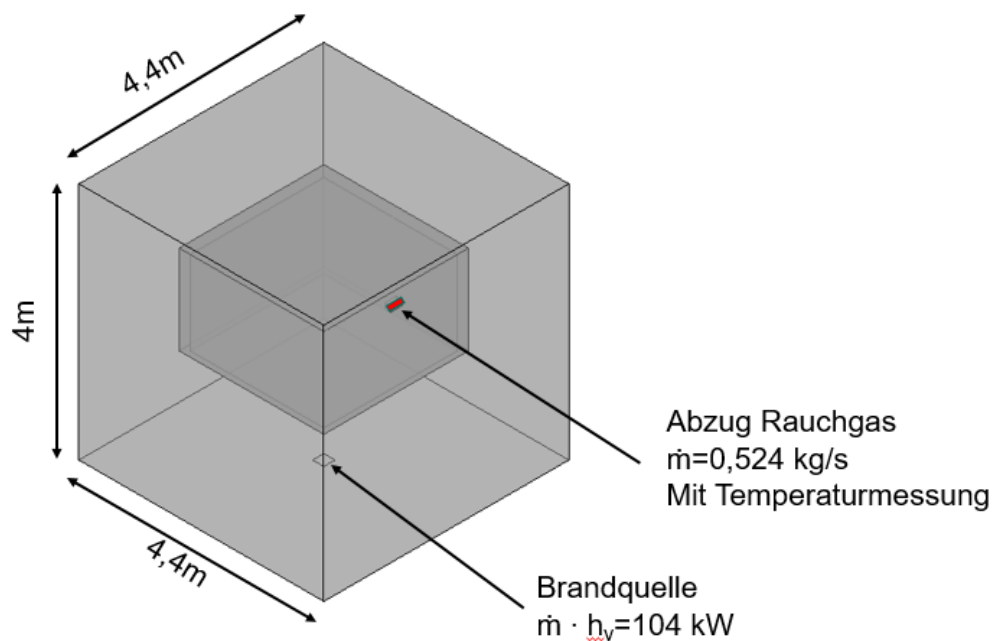


Abbildung 12: Simulationsgeometrie für die Referenzkombination

Um das Entrainment darstellen zu können, wird das Berechnungsgebiet als Würfel mit einer Kantenlänge von 4,4 m definiert. Die Seiten und die obere Fläche sind als Opening definiert.

4.1.2 Stationäre Simulationen

Der Brennstoff strömt mit einer Reynoldszahl von $Re = 2054$ aus der Brandquelle aus. Das bedeutet, die Strömung ist laminar jedoch nahe des Übergangsbereiches zur turbulenten Strömung. Innerhalb der Flamme bilden sich aufgrund des Auftriebseinflusses dennoch turbulente Wirbelstrukturen aus. Ein Turbulenzmodell ist daher erforderlich. Es wird für alle RANS-Simulationen das $k-\epsilon$ -Modell gewählt. Wichtig ist die Berücksichtigung des Auftriebes.

Es wird zunächst eine Netzunabhängigkeitsanalyse durchgeführt, anschließend werden Kombinationen aus verschiedenen Strahlungs- und Reaktionsmodellen verglichen.

Zwei den experimentell bestimmten Parametern werden herangezogen, um die Simulationsergebnisse zu validieren: Die Flammenlänge, und die Temperatur des an der Haube abgezogenen Massenstroms. Für die experimentelle Bestimmung der Flammenlänge wurden Aufnahmen der Flamme ausgewertet und die Medianflammenlänge bestimmt. Aus jeweils mehreren Untersuchungen zur gleichen Geometrie und Brandleistung wird der arithmetische Mittelwert gebildet [32]. Dieser wird mit der Flammenlänge verglichen, die durch den Maximalwert in Z-Richtung der Fläche $\Phi = 1$ mit Φ gemäß Gl. 7 gegeben wird.

4.1.3 Instationäre Simulation

Durch die RANS-Simulationen werden Ergebnisse für die mittleren Größen gewonnen (vgl. Kap. 3.1). Obwohl Brände mit konstanter Leistung und stabil ausgebildeter Rauchsicht als stationäre Brände bezeichnet werden, ändert sich die Flammenlänge aufgrund der Auftriebskräfte und der instationären Lufteinmischung ständig mit der Zeit. Diese Prozesse können mittels einer DES-Simulation untersucht werden. Es wird ein Einschritt Eddy Dissipation (EDM) Reaktionsmodell und das P_1 -Strahlungsmodell unter Annahme grauer Gase verwendet. Die Rechnungen werden mit einem Gitter mit einer Zellgröße von 25 mm durchgeführt.

Die Flammenlänge wird in Experimenten in der Regel als der zeitliche Median über die gemessenen Flammenlängen definiert. Diese Definition wird auch hier zur Bestimmung der Flammenlänge angewandt.

Tabelle 5: Verwendete Einstellungen für die Simulation des stationären Brandes

Rechengebiet	Länge: 4,4 m, Breite: 4,4 m, Höhe: 4 m
Brandquelle	Länge: 0,2 m, Breite: 0,2 m
Haube	Länge: 2,4m , Breite: 2,4 m, Höhe: 1 m
Massenstrom durch Haube	0,524 kg/s
Gitter	Hexagonale Gitter, Kantenlänge 8,5 mm-275 mm, 0,005-37 Mio Zellen
Umgebung	Luft, $Z_{O_2} = 0,232$, $T=311$ K, $p=1$ atm
Brennstoff	CH_4 , $\dot{Q} = 104$ kW
Turbulenzmodell	RANS, $k-\varepsilon$ /DES
Reaktionsmechanismus	Einschritt / Zweischnitt nach [3] /Flamelet nach [26]
Verbrennung	Eddy Dissipation/Flamelet
Strahlung	P_1 /Discrete Transfer
Spektralmodell	grey gas/weighted sum of grey gases
Diskretisierungsschema	High Resolution
Randbedingungen	Boden: adiabate Wand Brandquelle: Inlet, $\dot{m} = 2,19 \cdot 10^{-3}$ kg/s Haube: Wand mit Wärmeübergang $\alpha = 3$ W/m ² K Lüfter: Outlet, 0,524 kg/s Rand : Opening, $\Delta p=0$

4.2 Ergebnisse

4.2.1 Gitterunabhängigkeitsanalyse

Zur Durchführung einer CFD-Simulation muss ein Rechengitter erzeugt werden, das die bilanzierten Kontrollvolumina (Vgl. Kapitel 2.2.6) definiert. Aufgrund der Tatsache, dass in der Brandsimulation häufig große Geometrien betrachtet werden, stellt die Wahl des Gitters eine wesentliche Herausforderung in diesem Bereich dar. Durch die Verwendung sehr feiner Gitter nimmt die Simulation großer Bilanzräume bei begrenzter Rechenleistung viel Zeit in Anspruch oder kann mangels Speicherkapazität gar nicht durchgeführt werden. Grobe Gitter führen zu größeren Diskretisierungsfehlern und können so zu äußerst ungenauen oder falschen Ergebnissen führen, während für kleine Zellen das Ergebnis asymptotisch der exakten Lösung entgegenstrebt.

Im ersten Schritt werden daher Ergebnisse von Simulationen mit hexagonalen Gittern mit verschiedenen Zellgrößen und ansonsten gleichen Setups verglichen. Die Gittergrößen sowie die jeweils benötigte Rechenzeit sind in Tabelle 6 dargestellt.

Für diese Simulationen wird ein Eddy-Dissipation Einschnitt-Mechanismus gewählt. Der Wärmeübergang durch Strahlung wird dabei vernachlässigt.

Ein Parameter zur Charakterisierung der Zellgröße bei Brandsimulationen ist das Verhältnis R^* von Froude-Zahl Q^* gemäß Gl. 11, Brandflächendurchmesser D und Zellgröße in Richtung i , δ_i [33].

$$R^* = \frac{\max(\delta_x, \delta_y, \delta_z)}{Q^{*2/5} D} \quad (74)$$

In der Literatur gibt es verschiedene Angaben zum maximalen Wert dieses Verhältnisses. Er sollte einen Wert von 0,1 [4] - 0.05 [33] nicht überschreiten.

Tabelle 6: Gitterparameter und Rechenaufwand der untersuchten Gitter

Zellgröße (mm)	Anzahl Zellen (Mio)	R*	Dauer der Simulation
275	0,005	0,71	13 min auf 16 CPU
180	0,015	0,47	55 min auf 12 CPU
100	0,083	0,26	5 h auf 4 CPU
50	0,77	0,13	16,5 h auf 4 CPU
25	5,3	0,064	1,85 d auf 12 CPU
12,5	25	0,032	6,96 d auf 16 CPU
8,5 (im Plumenbereich)	37	0,022	14,8d auf 16 CPU

In Abbildung 13 sind die Ergebnisse dieser Gitterstudie aufgeführt. Es besteht eine gute Übereinstimmung der Ergebnisse auf den unterschiedlichen Gittern unterhalb einer Zellgröße von 100 mm. Die berechneten Flammenlängen der Simulationen mit kleinerem Gitter weichen nur geringfügig voneinander ab. Allerdings zeigt sich, dass keine vollständige Unabhängigkeit vom Netz mit der gegebenen Rechenleistung erreicht werden kann.

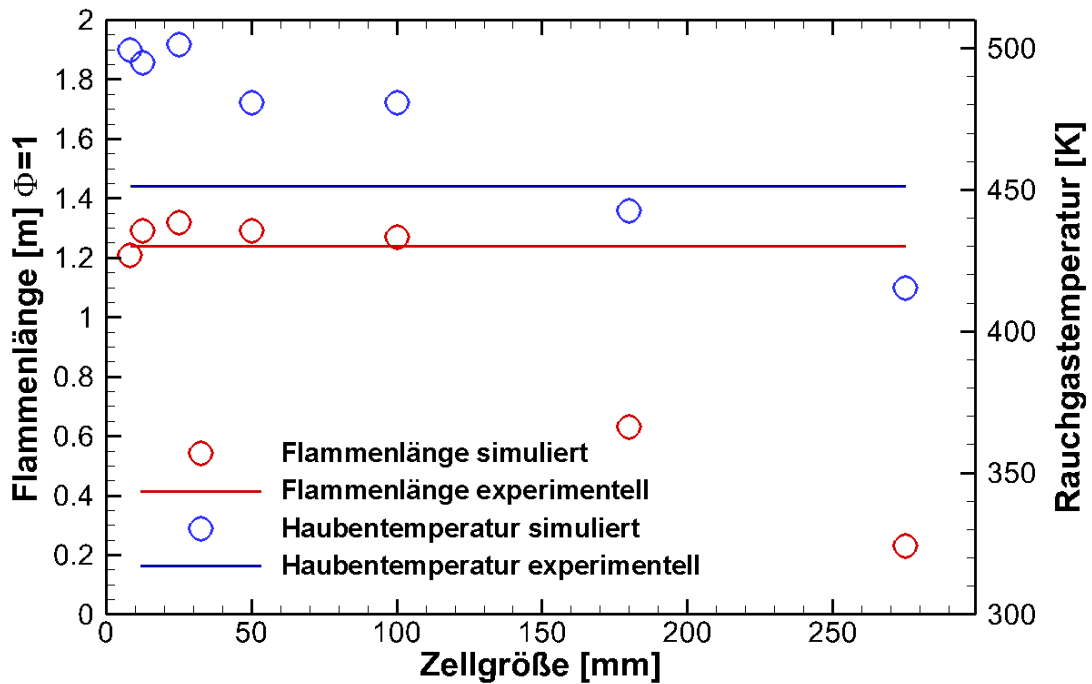


Abbildung 13: Gitterstudie für einen Einschritt-Mechanismus und ohne Strahlungsmodell

Vergleiche der gemessenen Rauchgastemperatur mit der massenstromgemittelten Temperatur am Lüfter aus der Simulation zeigen ebenfalls nur noch geringfügige Abweichungen des Ergebnisses bei Zellen mit einer Zellgröße ≤ 100 mm. Hier wird bei Zellen ≤ 25 mm eine nahezu vollständige Netzunabhängigkeit zu beobachten. Die Temperaturen liegen deutlich oberhalb der experimentell ermittelten, was auf die fehlende Berücksichtigung der Wärmestrahlung zurückzuführen ist.

Für die weiteren Simulationen wird eine Zellgröße von 25 mm gewählt, was auch den Wert von $R^* \approx 0,05$ bestätigt. Um eine Gitterabhängigkeit bei den weiteren in Kapitel 4.2.3 untersuchten Modellen auszuschließen, werden jeweils Untersuchungen mit der gewählten Gittergröße von 25 mm und einem feineren Gitter mit einer Auflösung von 12,5 mm durchgeführt. Die Ergebnisse sind in Abbildung 14 dargestellt. Es zeigt sich, dass bei Verwendung des Zweischrittmechanismus und der gewichteten Summe grauer Gase Abweichungen von $>10\%$ in der Flammenlänge auftreten. Dennoch wird für alle Modelle eine gute Übereinstimmung mit einer Abweichung $<14\%$ erreicht.

Noch bessere Übereinstimmungen ergeben sich bei den Rauchschichttemperaturen, wo alle Modelle Abweichungen $<8\%$ aufweisen. Ausgewertet wird in Abbildung 14b

die Temperaturerhöhung im Rauchgas, das heißt die Temperaturdifferenz zwischen der Temperatur an der Haube und der Umgebungstemperatur. Die Modellkombinationen für die in der Legende aufgeführten Abkürzungen sind Tabelle 7 zu entnehmen.

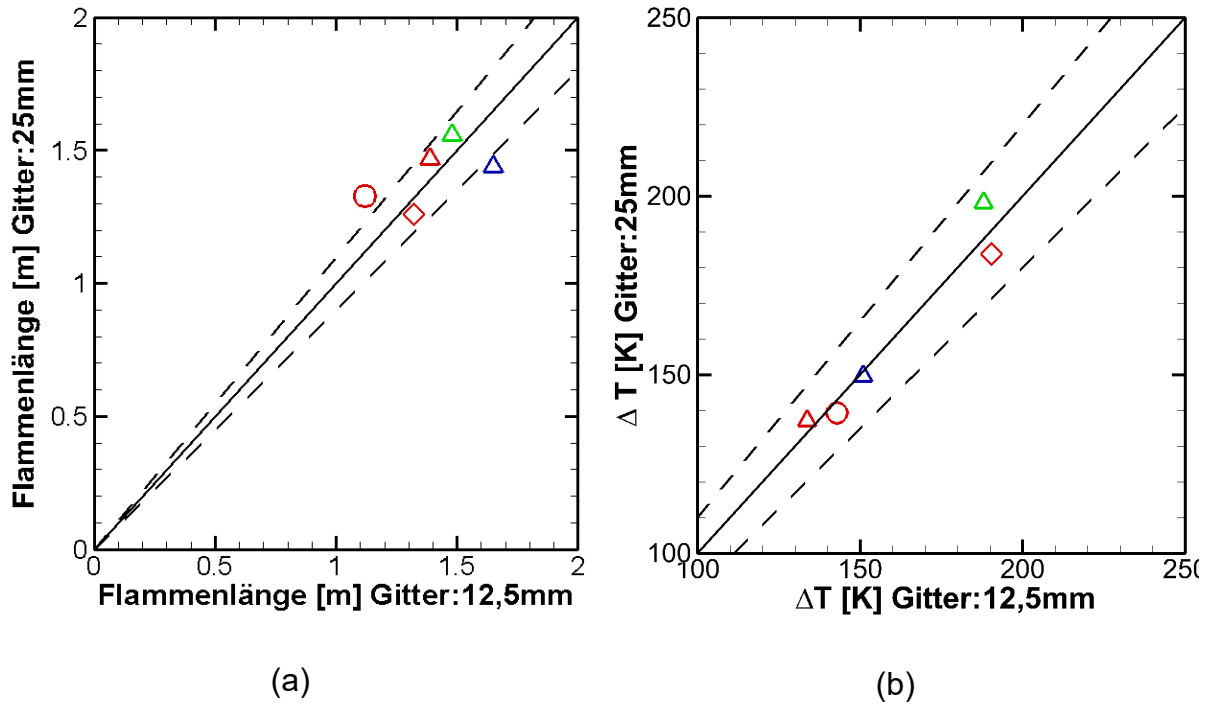


Abbildung 14: Untersuchung der Netzabhängigkeit von Flammenlänge (a) und Temperaturerhöhung in der Rauchschiicht (b) für verschiedene Modellkombinationen

4.2.2 Qualitativer Vergleich zwischen RANS und DES Simulation

Die Ergebnisse werden qualitativ untersucht und die Unterschiede zwischen RANS und DES bei gleichen Strahlungs- und Reaktionsmodellen dargestellt.

Unterschiede zwischen den beiden Simulationen zeigen sich in der Betrachtung der Flammentemperaturen (siehe Abbildung 15). Die Maximaltemperaturen stimmen gut überein. Der Bereich in dem diese vorliegen, das bedeutet der Bereich, in dem zum

gegebenen Zeitpunkt von $t = 32 \text{ s}$ in der DES eine Reaktion vorliegt, ist allerdings bei der DES deutlich kürzer. Dies lässt sich mit dem in Abbildung 21 dargestellten Flackern der Flamme erklären. Danach weicht die Flammenlänge einer realen Flamme zu einem gegebenen Zeitpunkt um bis zu $> \pm 20 \%$ von der mittleren Flammenlänge ab. Der Vergleich der Medianflammenlänge in Abbildung 21 zeigt eine gute Übereinstimmung mit der Flammenlänge die in der RANS ermittelt wird.

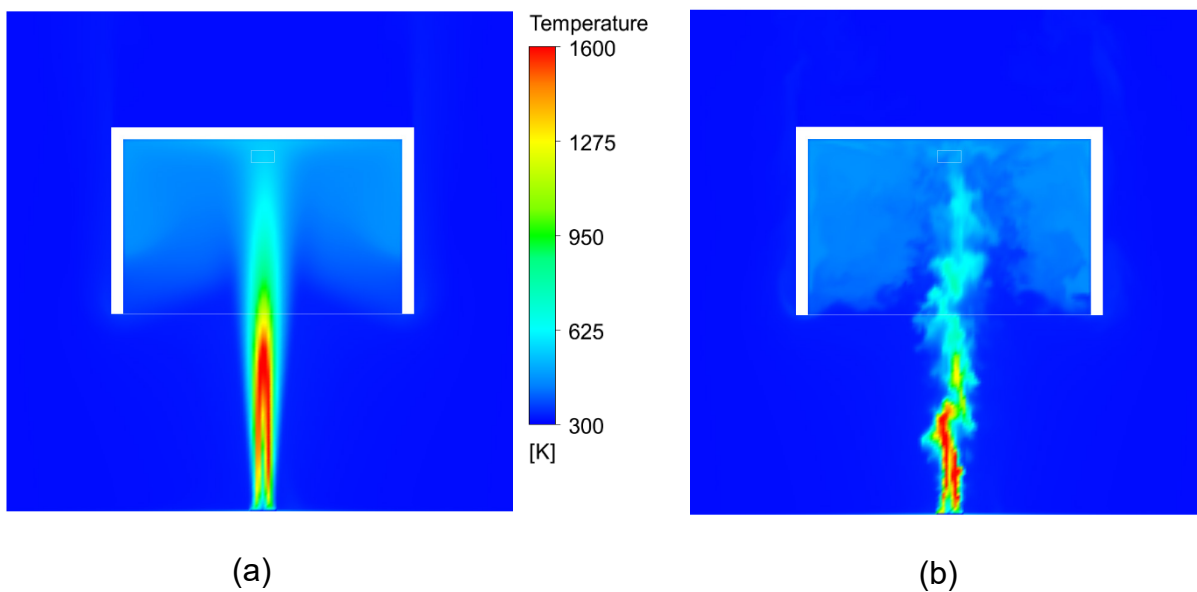


Abbildung 15: Flammentemperaturen bei RANS-Simulation (a) und DES (b)

Die Flammentemperaturen und deren Verteilung sind entscheidend für die durch den Auftrieb angetriebene Strömung. Das Strömungsfeld ist in Abbildung 16 durch die schwarzen Vektoren dargestellt. Umgebungsluft wird in die Plume eingesaugt und steigt in die Haube auf. Es entsteht eine Aufwärtsströmung in die Rauchschicht und außerhalb der Haube. Innerhalb der Rauchschicht ist besonders in der RANS-Simulation die Ausbildung symmetrischer Wirbel zu erkennen, während die DES auf Grund der zeitlichen turbulenten Schwankungen ein weniger eindeutiges Strömungsfeld ergibt. In der RANS-Simulation ist innerhalb des Plumes eine gerichtete Aufwärtsströmung mit hohen Strömungsgeschwindigkeiten zu erkennen. In der DES werden die selben Maximalgeschwindigkeiten erreicht, wobei das Geschwindigkeitsfeld kleinere Wirbelstrukturen enthält. Innerhalb der Haube bildet sich eine Rauchschicht aus, die anhand des CO_2 -Massenbruchs in Abbildung 17 zu erkennen ist. Im Bereich der Plume herrscht eine hohe CO_2 -Konzentration, die in der Haube durch Einmischung von Luft in die Rauchschicht absinkt. Dieser

Einmischungsprozess ist bei der DES (Abbildung 17b) aufgelöst, während sie in der RANS (Abbildung 17a) auf Grund der Mittelung (vgl. Kap. 3.1) nicht explizit zu erkennen ist. Die Mittelung in der RANS-Simulation führt zu einer CO_2 -armen Schicht im unteren Bereich der Rauchsicht, welche in der DES deutlich weniger stark ausgeprägt ist und durch die zeitlich variierenden Gebiete der Lufteinsaugung entsteht. Der Wert des CO_2 -Anteils im oberen Teil der Rauchsicht stimmt zwischen DES und RANS gut überein.

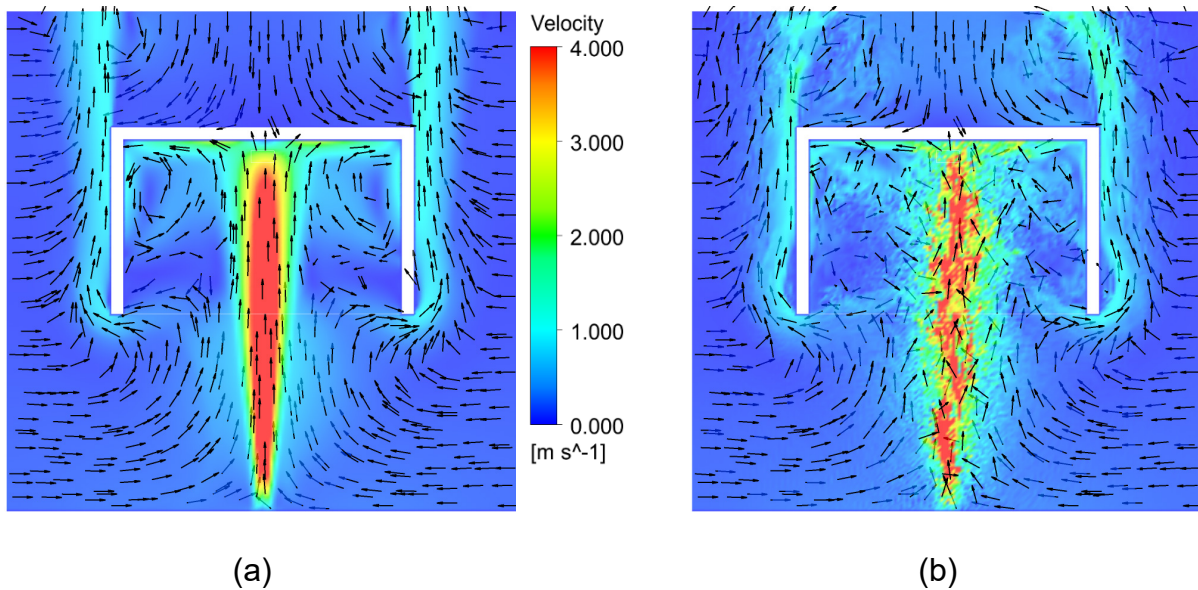


Abbildung 16: Strömungsfeld bei RANS-Simulation (a) und DES (b)

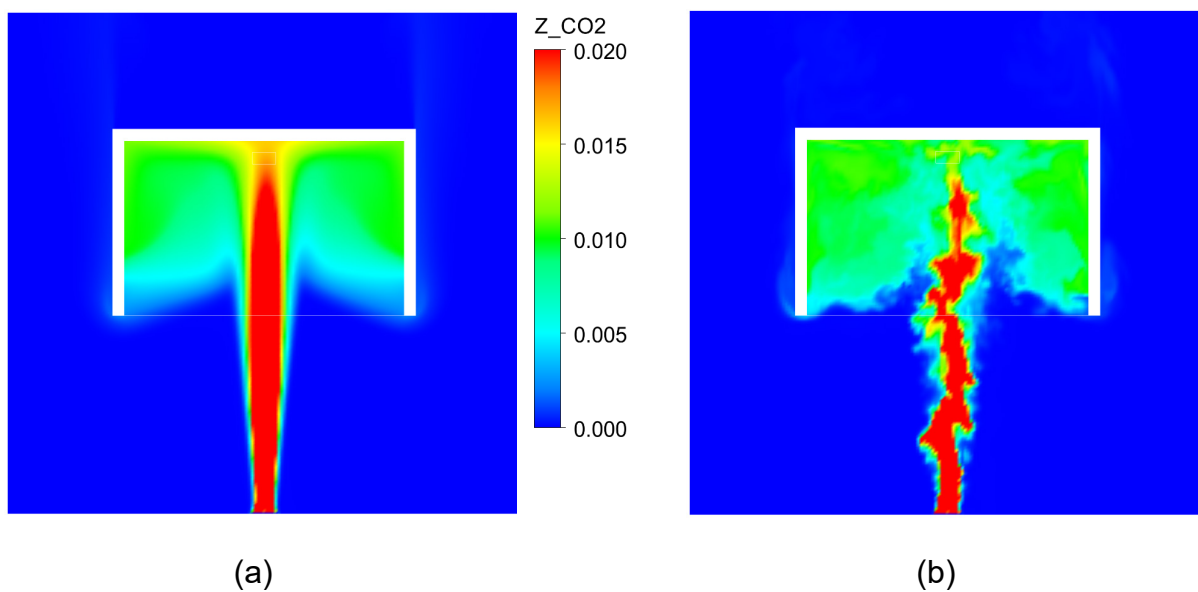


Abbildung 17: CO_2 Konzentration in Flamme und Rauchsicht bei RANS-Simulation (a) und DES (b)

Die Rauchschichttemperaturen betragen zwischen 390 K und 480 K. Auch hier ist eine qualitative Übereinstimmung zwischen RANS (Abbildung 18a) und DES (Abbildung 18b) zu erkennen, wobei Mischungsprozesse in der RANS durch die Mittelung nicht dargestellt werden. Trotz der Einmischung von Luft, die zu verringerten Temperaturen in der Rauchschicht im Nahbereich des Plumes führt, ist die Rauchschichttemperatur in weiten Teilen der Haube, wie auch die CO_2 Konzentration, annähernd konstant. Es kann daher von einer stationären Rauchschicht gesprochen werden.

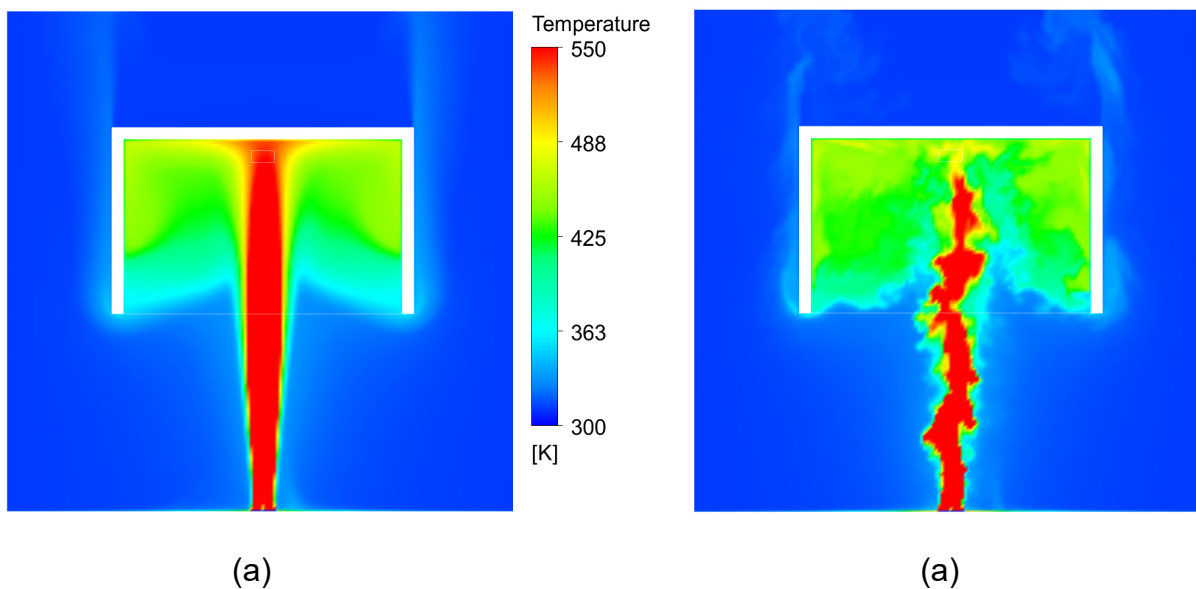


Abbildung 18: Rauchschichttemperaturen bei RANS-Simulation (a) und DES (b)

4.2.3 Referenzkombination

Im Folgenden soll die Anwendung verschiedener Reaktions- und Strahlungsmodelle untersucht werden. Die Modellkombinationen und die für die Definition des gewählten Setups in den gezeigten Diagrammen verwendeten Kurznamen sind in Tabelle 7 aufgelistet. Bei der Modellierung der chemischen Reaktion werden ein Einschritt-Mechanismus und ein Zweisritt-Mechanismus aus Gl. 3 nach [3] jeweils mit Eddy Dissipation sowie ein Flamelet-Modell verglichen.

Zur Modellierung der Strahlung werden das $P1$ -Strahlungsmodell und das Discrete-Transfer-Modell verglichen. Außerdem wird untersucht, wie sich die Annahme eines grauen Gases im Vergleich zum Modell der gewichteten Summe grauer Gase auswirkt. Das Ergebnis der Referenzkombination ist in Abbildung 19 gezeigt.

Tabelle 7: Überblick über die verwendeten Modellkombinationen

Kurzname	Turbulenzmodell	Reaktionsmodell	Strahlungsmodell	Spektalmodell (Kap. 3.3.3)
WD1_none	$k-\varepsilon$ (Kap. 3.1)	1-Schritt-Mech., EDM (Gl. 2)	keine Berücksichtigung der Strahlung	-
WD1_P1_gg	$k-\varepsilon$ (Kap. 3.1)	1-Schritt-Mech., EDM (Gl. 2)	P1-Modell (Kap. 3.3.1)	grey gas
WD1_P1_wsgg	$k-\varepsilon$ (Kap. 3.1)	1-Schritt-Mech., EDM (Gl. 2)	P1-Modell (Kap. 3.3.1)	weighted sum of grey gases
WD2_none	$k-\varepsilon$ (Kap. 3.1)	2-Schritt-Mech., EDM (Gl. 3)	keine Berücksichtigung der Strahlung	-
WD2_P1_gg	$k-\varepsilon$ (Kap. 3.1)	2-Schritt-Mech., EDM (Gl. 3)	P1-Modell (Kap. 3.3.1)	grey gas
WD2_DT_gg	$k-\varepsilon$ (Kap. 3.1)	2-Schritt-Mech., EDM (Gl. 3)	Discrete Transfer (Kap. 3.3.2)	grey gas
WD2_DT_wsgg	$k-\varepsilon$ (Kap. 3.1)	2-Schritt-Mech., EDM (Gl. 3)	Discrete Transfer (Kap. 3.3.2)	weighted sum of grey gases
FLL_none	$k-\varepsilon$ (Kap. 3.1)	Flamelet-Ansatz (Kap. 3.2.2)	keine Berücksichtigung der Strahlung	-
FLL_P1_gg	$k-\varepsilon$ (Kap. 3.1)	Flamelet-Ansatz (Kap. 3.2.2)	P1-Modell (Kap. 3.3.1)	grey gas
FLL_P1_wsgg	$k-\varepsilon$ (Kap. 3.1)	Flamelet-Ansatz (Kap. 3.2.2)	P1-Modell (Kap. 3.3.1)	weighted sum of grey gases

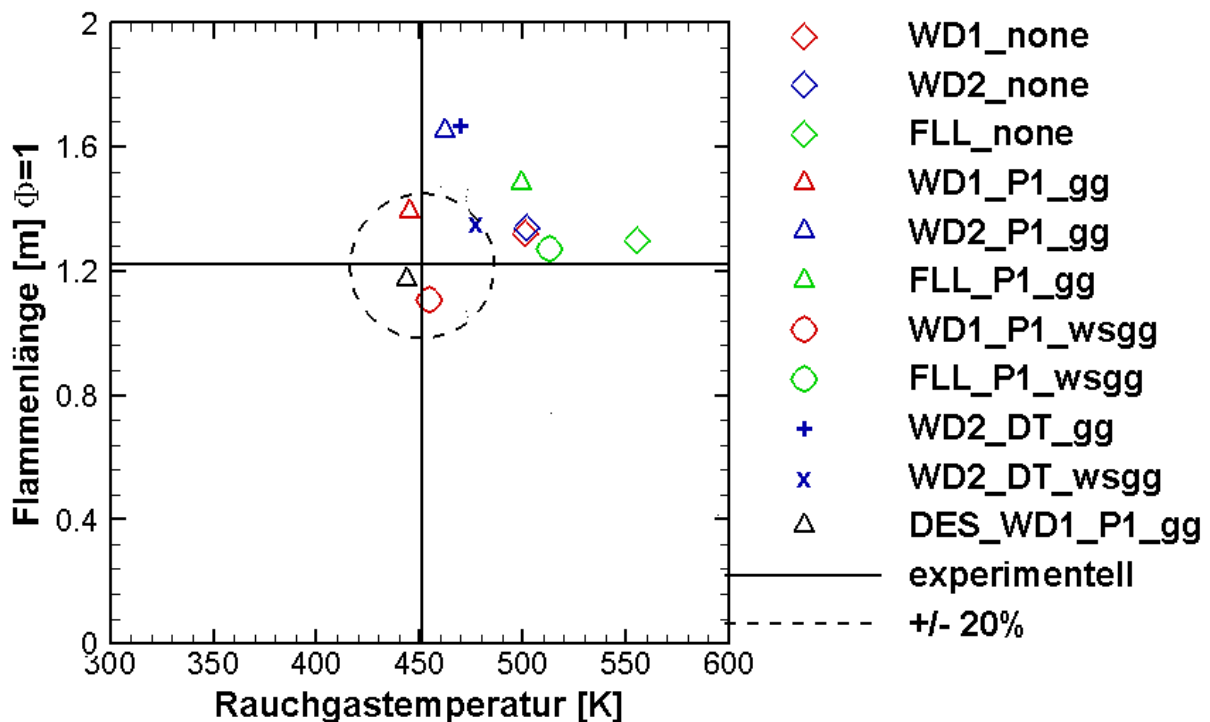


Abbildung 19: Vergleich verschiedener Simulationssetups

Unterschiede bestehen vor allem in den Rauchschichttemperaturen. Hier ist besonders die Verwendung des Strahlungsmodells relevant. Bei Verwendung eines Strahlungsmodells ergibt sich eine um ca. 100 K geringere Rauchschichttemperatur als unter Vernachlässigung von Strahlung. Dies lässt sich dadurch erklären, dass in der Energiebilanz in Gl. 20 der Term für den Wärmetransport durch Strahlung berücksichtigt wird und somit bei gleicher freiwerdender Reaktionsenthalpie der Konvektionsterm in Gl. 20 sinkt.

Weiterhin führt die Verwendung des Flameletmodells zu einer signifikant erhöhten Rauchschichttemperatur. Da bei allen Reaktionsmechanismen die Reaktion zu CO_2 und H_2O vollständig abläuft, wird in allen Simulationen dieselbe Reaktionsenthalpie freigesetzt. Der Unterschied in der Rauchgastemperatur erklärt sich durch eine höhere Eintrittstemperatur des Brennstoffes. Da das Flameletmodell Zwischenreaktionen mit geringerem Sauerstoffbedarf berücksichtigt, liegen bereits im näheren Umfeld der Flamme erhöhte Reaktionsraten und Maximaltemperaturen im Vergleich zum globalen WD1-Mechanismus vor [3].

Gute Übereinstimmungen ergeben sich für die Ergebnisse der Flammenlängen. Die meisten Modelle führen auf eine Flammenlänge von ca. 1,4 m, wobei kein Modell hiervon um mehr als 15 % abweicht. Das Reaktionsmodell hat dabei einen geringen Einfluss auf die Flammenlänge.

Während die Verwendung von P_1 beziehungsweise Discrete Transfer kaum einen Unterschied in Flammenlänge und Rauchsichttemperatur bewirkt, führt die Berücksichtigung der unterschiedlichen Strahlungseigenschaften der Gase im WSGG-Modell zu geringeren Flammenlängen bei ähnlichen Rauchsichttemperaturen. Während unter Annahme eines grauen Gases überall wo eine erhöhte Temperatur vorliegt eine erhöhte Strahlungsintensität zu beobachten ist, führt das wsgg-Modell auf einen eng begrenzten Bereich in der Flamme, in der signifikante Wärmestrahlung vorliegt. Die maximale Strahlungsintensität ist im wsgg-Modell jedoch höher, was zu einem kleineren Temperaturgradienten und damit zu geringeren Strömungsgeschwindigkeiten führt. Daher führt wsgg-Modell zu einer kürzeren Flamme.

Ein Vergleich der Flammenlängendefinitionen aus Kapitel 2.1.6 in Abbildung 20 ergibt, dass die Annahme des vollständig verbrannten Brennstoffs die Flammenlänge gegenüber den anderen Modellen überschätzt, während die Definitionen über Φ (siehe Gl. 7, Φ_t (siehe Gl. 10) und die Maximaltemperatur T_{max} nahezu identische Werte liefern.

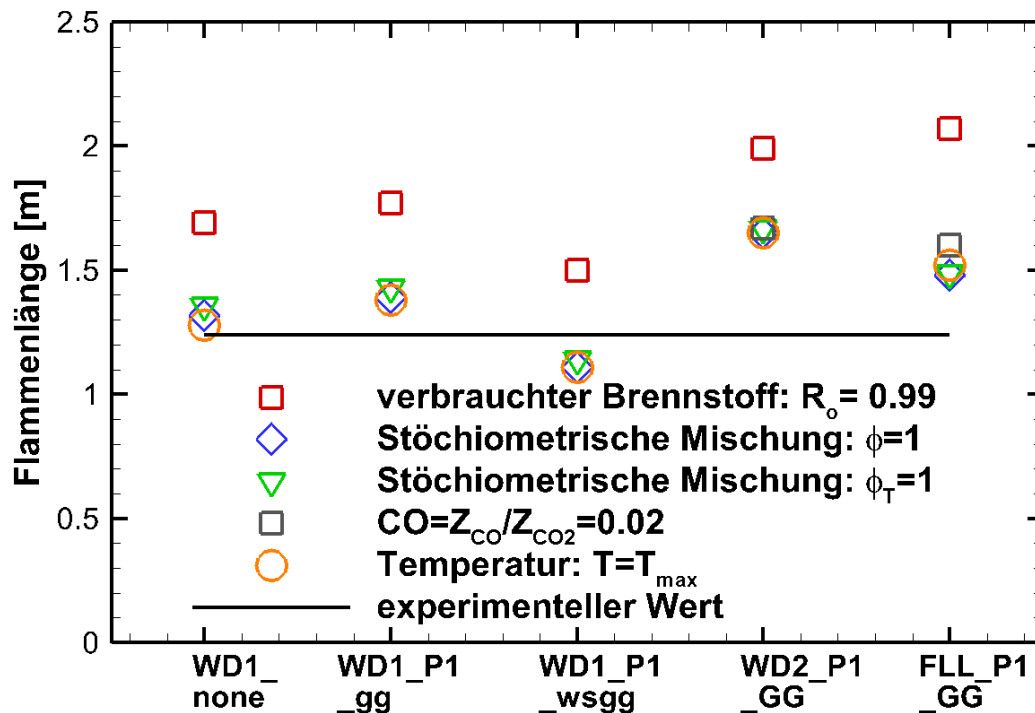


Abbildung 20: Vergleich der Flammenlängen nach verschiedenen Definitionen bei den verschiedenen Modellen

Die experimentellen Ergebnisse sind ebenfalls in Abbildung 19 dargestellt. Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung der Flammenlänge mit Abweichungen <20 % für die meisten Modelle. Auch die Temperatur stimmt für die Simulationen mit Eddy-Dissipation-Modell und unter Berücksichtigung von Strahlung gut überein.

Zusätzlich werden die Werte mit Ergebnissen für die Korrelation nach Hekestad (Gl. 12) verglichen. Für die gewählte Konfiguration ergibt sich eine Froude-Zahl von $Q^* = 5,156$ und damit eine Flammenlänge von $L = 1,22 \text{ m}$, was eine gute Näherung zum experimentellen Wert und den Simulationsergebnissen darstellt.

4.2.4 Untersuchungen der instationären Flamme

Nach Ausbildung der Flamme schwankt die Flammenlänge zwischen 0,84 m und 1,65 m. Der Median der Flammenlänge und die Haubentemperatur am Ende des Beobachtungszeitraums sind in Abbildung 19 eingetragen und zeigen eine gute Übereinstimmung mit den Messdaten.

Zur Beschreibung des Flackerns wird auf eine relative Flammenlänge zurückgegriffen, wobei die tatsächliche Flammenlänge zu einem gegebenen Zeitpunkt auf die Medianflammenlänge bezogen wird. Für verschiedene Brandleistungen und Flammendurchmesser hat Cetegen die Häufigkeit verschiedener relativer Flammenlängen bestimmt [32]. Diese werden in Abbildung 21 mit den Ergebnissen der DES verglichen.

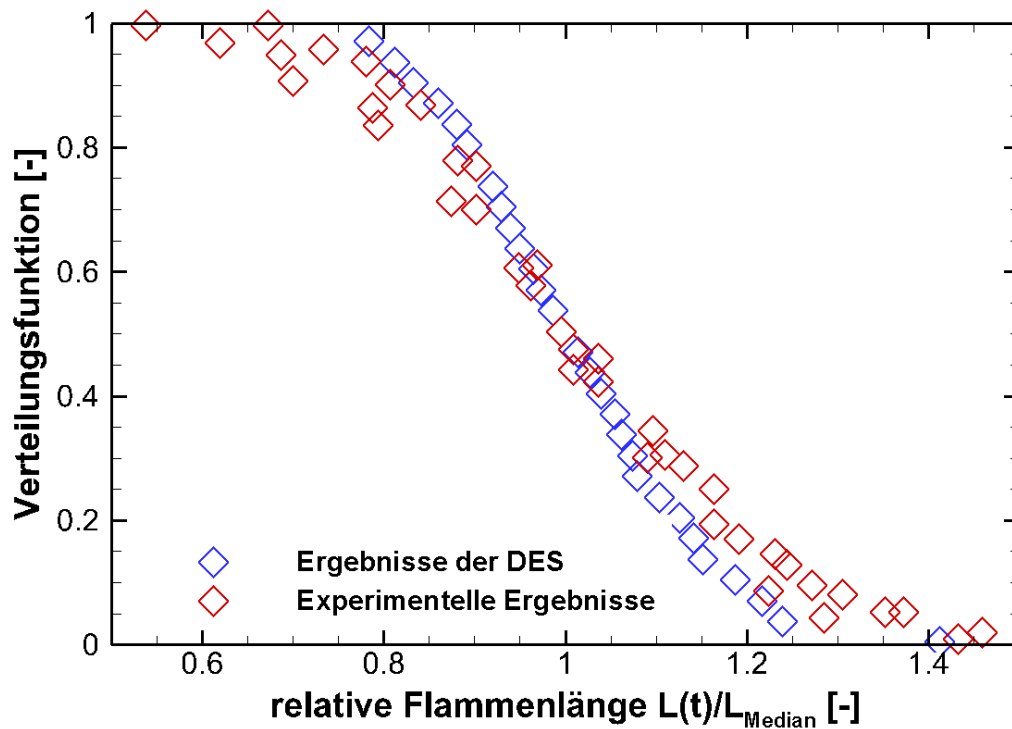


Abbildung 21: Verteilungsfunktion der relativen Flammenlänge

An den Ergebnissen wird deutlich, dass verschiedene Brände eine quantitativ ähnliche Häufigkeitsverteilung aufweisen. Es zeigt sich, dass die Flammen zu $\approx 80\%$ der Zeit eine relative Flammenlänge $>0,8$ und ebenfalls in $\approx 80\%$ den ausgewerteten Zeitschritten eine relative Flammenlänge $<1,2$ aufweist. Ein Vergleich mit den Simulationsergebnissen zeigt vor allem im Bereich zwischen diesen Werten eine hohe Übereinstimmung, während die Extremwerte für besonders große bzw. kleine Flammenlängen im Experiment weiter vom Median entfernt sind.

Dies lässt sich zum einen mit der geringen Anzahl an ausgewerteten Zeitschritten erklären. Es wurden 270 Zeitschritte in einem Zeitraum von $t_1 = 15\text{ s}$ bis $t_2 = 32\text{ s}$

herangezogen. Der einzelne Wert von $L(t)/L_{Median} = 1,4$ legt nahe, dass die experimentell beobachteten Extremwerte auch in der Simulation erreicht werde. Da diese jedoch selten vorkommen ist eine ausreichende Beobachtungsdauer nötig, um diese Randbereiche darstellen zu können. Weiterhin handelt es sich bei den äußersten Extremwerten um Werte aus Versuchen mit kleinerer Brandleistung, während größere Brandleistungen engere Verteilungen liefern. Zu Bedenken ist dabei auch die in Kap. 2.1.6 erläuterte Unsicherheit der Messungen, wobei bei kleineren Flammen der Einfluss eines Messfehlers auf die relative Länge größer ist.

Darüber hinaus hat Cetegen auch eine Periodizität des Flackerns beobachtet. Diese beträgt im gewählten Fall in Abhängigkeit des Durchmessers von 0,2 m ca. $1,9 \text{ s}^{-1}$ [32].

$$f = (0,27 \pm 0,03) \sqrt{\frac{g}{D}} \quad (75)$$

Ein Ausschnitt aus dem Zeitverlauf der Flammenlänge ist in Abbildung 22 gezeigt.

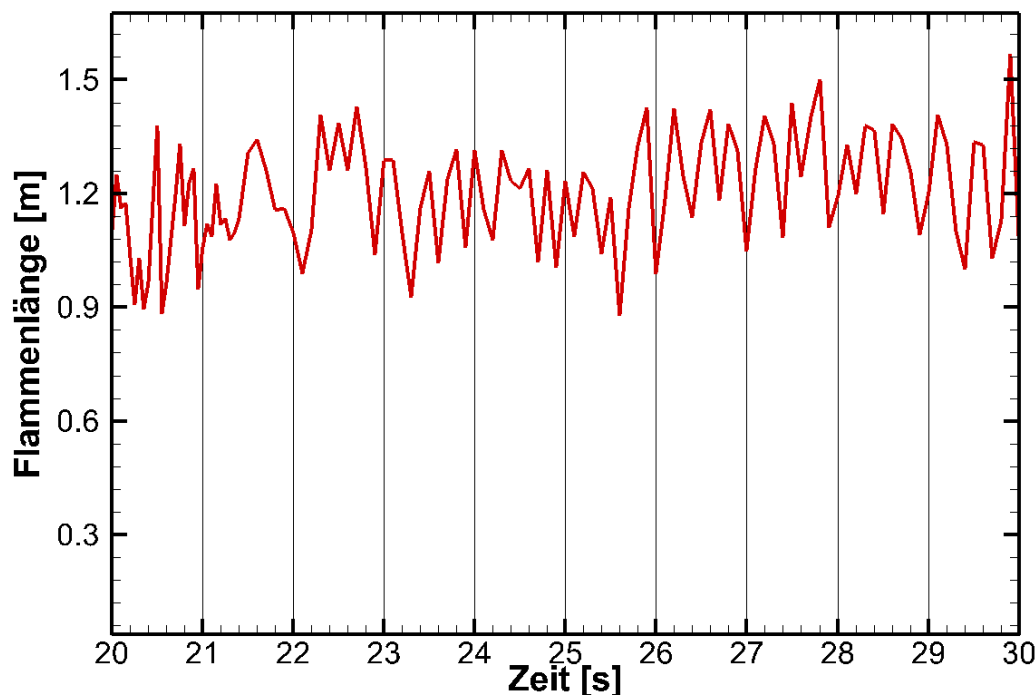


Abbildung 22: Flammenlänge im Bereich von 20-30 s.

Die DES hat mit 20 s^{-1} eine deutlich geringere Auflösung als die Frequenz der Flammenlängenschwankung. Zu erkennen ist eine Frequenz von $\approx 3 \text{ s}^{-1}$.

Insgesamt weist die DES eine gute Übereinstimmung der Medianflammenlänge mit der Flammenlänge aus der RANS-Simulation mit gleichen Modellen auf, wobei die Flammenlänge in der RANS gegenüber der DES leicht überschätzt wird. Die Temperatur am Rauchgasabzug ist über der Zeit annähernd konstant und stimmt mit der der RANS-Simulation nahezu überein.

4.2.5 Schlussfolgerungen

In diesem Kapitel wurden Einflüsse der in Abbildung 1 gezeigten numerischen Randbedingungen untersucht. Tabelle 8 zeigt, welche dieser Randbedingungen signifikanten Einfluss haben und stellt die für die folgende Untersuchung der Brandszenarien gewählten Modelle dar.

Tabelle 8: Überblick über die für weitere Untersuchungen gewählten Modelle und deren Einfluss

	Gitter	Turbulenzmodell	Reaktion	Strahlung	Instationarität
Einfluss	++	nicht untersucht	-	+	±
gewählt	$R^* = 0,06$	$k-\varepsilon$	Einschritt	P1, grey gas	URANS

Die Analyse zeigt, dass stationäre Berechnungen mit relativ groben Gittern und einfachen Modellen den gewählten Fall gut beschreiben können.

Eine Gittergröße von max. 100 mm, die einer Auflösung der Brandfläche mit vier Zellen entspricht ist ausreichend, um die hier gewählten Größen zu approximieren. Ab einer Größe von 25 mm liegt nahezu Gitterunabhängigkeit vor. Eine zu grobe Auflösung führt jedoch zu nicht verwertbaren Ergebnissen.

Durch die Wahl des Reaktionsmodells werden Flammenlänge und Haubentemperatur beeinflusst. In Anbetracht der großen Zellen und der guten Übereinstimmung der

Werte mit den experimentellen Ergebnissen wird ein EDM Einschritt-Mechanismus gewählt.

Die Verwendung eines Strahlungsmodells ist notwendig, um den Brand zu beschreiben. Die Wahl des Modells dagegen hat einen untergeordneten Einfluss auf die gewählten Zielgrößen. Lediglich die Wahl des Spektralmodells führt zu sichtbaren Unterschieden bei der Flammenlänge.

Durch eine instationäre Simulation können die Schwankungen der Flammenlänge und die Ansaugung der Frischluft dargestellt werden. Die mittlere Flammenlänge sowie Temperatur und CO_2 Konzentrationen in der Rauchsicht nach Ausbildung der stationären Rauchsicht stimmen jedoch mit denen der RANS-Simulationen überein. Mit dieser in den Abbildungen Abbildung 15 bis Abbildung 18 visualisierten Tatsache wird die Verwendung von weniger rechenintensiven RANS-Simulationen bei der Simulation stationärer Bränden für die Abschätzung globaler Größen gerechtfertigt, während für die Betrachtung von Maximalwerten in der Flamme eine instationäre Auflösung nötig ist.

Das Setup mit WD1-Reaktionsmechanismus und P1-Strahlungsmodell führt zu guten Übereinstimmungen mit den experimentellen Werten bei gleichzeitig geringem Daten- und Rechenaufwand und wird daher für die folgenden Brandszenarien verwendet.

Zu beachten ist dabei jedoch immer, dass das hier gewählte Experiment unter guten Ventilationsbedingungen, bei stationären Randbedingungen und unter kontrollierten Umgebungsbedingungen stattfindet. Bei realitätsnahen Betrachtungen sind diese idealen Voraussetzungen nicht gegeben. Die Übertragbarkeit der Annahmen auf andere Fälle ist daher immer kritisch zu hinterfragen.

5 Simulation einer frei-brennenden Gasflamme

Die experimentellen und numerischen Untersuchungen zu einer frei brennenden Gasflamme wurden hinsichtlich Instationarität bzw. Auswertung der experimentellen Ergebnisse im Rahmen dieses Arbeitspakets deutlich erweitert. Um wichtige Brandeigenschaften wie die Flammenlänge zu vergleichen, wurde eine neuartige bildgebende Methode für die Auswertung von Foto- und Videoaufnahmen entwickelt und eingesetzt. Aus diesem Grund erfolgt die Darstellung und Diskussion der Ergebnisse in einem Folgebericht.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Im Rahmen dieser Bericht wurde eine Referenzkombination an numerischen Schaltern und Modellen für die Durchführung einer Brandsimulation erstellt und mit experimentellen Daten aus der Literatur validiert. Ein Fokus bei der Bewertung der Modelle liegt dabei, neben der Genauigkeit, auch auf einem geringen Zeit- und Ressourcenbedarf für die Simulation.

An erster Stelle wurden verschiedene numerische Modelle anhand eines stationären Brandes untersucht. Ausgangspunkt für die numerischen Untersuchungen war eine Gitterunabhängigkeitsstudie. Die Ergebnisse dieser Studie zeigen, dass auch mit relativ groben Gittern (Zellgröße unter 100 (50) mm) die Auflösung der Berechnung ausreichend ist um relevanten Brandgrößen wie Flammenlänge, Rauchschichthöhe und –temperatur zu approximieren. Eine zu grobe Auflösung führt jedoch zu nicht verwertbaren Ergebnissen. Die Variation unterschiedlichen numerischer Schalter hat gezeigt, dass stationäre Flammen gut durch RANS-Simulationen mit den stark vereinfachenden Annahmen der unendlich schnellen Einschritt-Reaktion und eines diffusen grauen Strahlungsmodells beschrieben werden können.

Anschließend wurde die Referenzkombination numerischer Modelle für die instationäre Berechnungsweise eingesetzt. Durch diese können die Schwankungen der Flammenlänge und die Ansaugung der Frischluft dargestellt werden. Die mittlere Flammenlänge sowie Temperatur und CO_2 Konzentrationen in der Rauchschicht nach Ausbildung der stationären Rauchschicht stimmen jedoch mit denen der RANS-Simulationen überein. Dadurch wird die Verwendung von weniger rechenintensiven RANS-Simulationen bei der Simulation stationärer Bränden für die Abschätzung globaler Größen gerechtfertigt, während für die Betrachtung von Maximalwerten in der Flamme eine instationäre Auflösung nötig ist.

Insgesamt lässt sich festhalten, dass Brandsimulationen einen potentiell sinnvollen Beitrag zum vorbeugenden Brandschutz liefern können. Zu beachten ist dabei jedoch immer, ob die gewählte Auflösung ausreichend ist. Dies gilt insbesondere bei der Simulation instationärer Brände. Ob sehr große Geometrien bei heutigen Rechenleistungen abgebildet werden können, steht insofern in Frage.

Bei der Übertragung der Ergebnisse dieser Arbeit auf andere Fälle müssen die getroffenen Modellannahmen berücksichtigt werden, die unter Umständen die Anwendbarkeit beeinträchtigen. Gemäß den im jeweiligen Fall vorliegenden

physikalischen Effekten müssen dann ggf. zusätzliche Modellerweiterungen implementiert werden.

In einem geplanten zweiten Arbeitsschritt im Jahr 2022 soll die im Teil I erstellte Referenzkombination an Modellen und numerischen Einstellungen für die dreidimensionale numerische Berechnung von brandlast- sowie ventilationsgesteuerten Brandszenarien optimiert und untersucht werden. Wichtige Brandeigenschaft ist die stochastische, meistens instationäre Änderung der Brandfläche (Brandausbreitung) und Brandleistung. Während sich bei geringen thermischen Leistungen ein stationärer Brand ausbilden kann, verlischt der Brand ventilationskontrolliert bei gleicher Öffnungsgröße und größerer Brandleistung. Relevant für die Überprüfung der Brandsicherheit von Gebäuden ist die Simulation eines parametrisierten Brandverlaufs. Um dies mit dem kommerziellen CFD Tool Ansys CFX berechnen zu können, wird in einem ersten Schritt eine Brandleistungskurve bei einer gegebenen konstanten Eintrittsfläche in den Solver implementiert und berechnet. In einem zweiten Schritt wird auch die Änderung der Grundfläche (in alle Raumrichtungen) des Brandes implementiert.

Abschließend wird die realitätstreue Simulation eines ventilationsgesteuerten Brandes angestrebt. Um dies zu ermöglichen sollen vereinfachte Modelle zur Flammenlöschung (bei Sauerstoffmangel) entwickelt implementiert und angewandt werden. Wichtig zu erwähnen ist, dass kommerzielle Programme wie Ansys CFX aber auch freizugängliche, open-source Tools wie FDS keine Möglichkeit bieten eine Flammenlöschung aufgrund Sauerstoffmangel numerisch wiederzugeben.

Literaturverzeichnis

- [1] I. Dinkov und D. Max, „Anwendungsbereiche und –grenzen von Ingenieurverfahren bei Nachweisen für die Einhaltung der Anforderungen für die Sicherstellung des abwehrenden Brandschutzes,“ 2017.
- [2] J. Warnatz, U. Maas und R. W. Dibble, Verbrennung – Physikalisch – Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung, Springer Verlag, 1996.
- [3] C. Westbrook und F. Dryer, „Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of hydrocarbon fuels in flames.,“ *Combustion Science and Technology*, Bd. 27, pp. 31-43, Juli 1981.
- [4] D. Max, I. Dinkov, D. Schelb und D. Trimis, „Überprüfung und Erweiterung des Anwendungsbereichs von Plume-Formeln mit CFD-Methoden.,“ in *Deutscher Flammentag*, 2019.
- [5] R. K. Cheng, B. Bédard und L. W. Kostiuik, „Effects of buoyancy on lean premixed V-flames Part I: laminar and turbulent flame structures.,“ *Combustion and flame*, Bd. 116, Nr. 3, pp. 360-375, 1999.
- [6] U. Schneider, Ingenieurmethoden im Baulichen Brandschutz., Expert Verlag, 2007.
- [7] D. Augustin, „Untersuchung des Brandverhaltens unterschiedlichen Mobiliars bei reproduzierbarem Entstehungsbrand im Labormaßstab.,“ 2019.
- [8] A. Bwalya, „An overview of design fires for building compartments.,“ *Fire Technology*, Bd. 44, Nr. 2, pp. 167-184, 2008.
- [9] S. Turns, An introduction to combustion, concepts and applications., McGraw Hill, 1996.
- [10] W. M. Pitts, „The global equivalence ratio concept and the formation mechanisms of carbon monoxide in enclosure fires.,“ *Progress in energy and combustion science*, Bd. 21, Nr. 3, pp. 197-237, 1995.

- [11] D. Madrzykowski und C. Fleischmann, „Fire pattern repeatability: a study in uncertainty.“ in *Uncertainty in Fire Standards and What to Do About It.*, ASTM International, 2012, pp. 1-11.
- [12] Z. Mei, J. Mi, F. Wang und J. Zhang, „Chemical Flame Length of a Methane Jet into Oxidant Stream.“ *Flow Turbulence Combustion*, Bd. 94, pp. 767-794, 2015.
- [13] P. S. Cumber und M. Spearpoint, „A computational flame length methodology for propane jet fires.“ *Fire safety journal*, Bd. 41, Nr. 3, pp. 215-228, 2006.
- [14] W. Hawthorne, D. Weddell und H. Hottel, „Mixing and combustion in turbulent gas jets.“ *Symposium on Combustion and Flame, and Explosion Phenomena*, Bd. 3, p. 266–288, 1948.
- [15] J. S. Newman und C. J. Wieczorek, „Chemical flame heights.“ *Fire safety journal*, Bd. 39, pp. 375-382, 2004.
- [16] B. M. Cetegen, *Entrainment and flame geometry of fire plumes*, Pasadena: California Institute of Technology, 1982.
- [17] M. J. Hurley, D. T. Gottuk, J. R. Hall Jr, K. Harada, E. D. Kuligowski, M. Puchovsky, J. M. Watts Jr und C. J. u. a. Wieczorek, *SFPE handbook of fire protection engineering*, Springer, 2015.
- [18] V. Lecoustre, P. Narayanan, H. R. Baum und A. Trouve, „Local extinction of diffusion flames in fires.“ Bd. 10, pp. 583-595, 2011.
- [19] C. Beyler, „Flammability limits of premixed and diffusion flames.“ in *SFPE handbook of fire protection engineering.*, Springer, 2016, pp. 529-553.
- [20] K. O. u. K. W. L. Prandtl, *Führer durch die Strömungslehre*, Braunschweig: Vieweg, 1969.
- [21] T. Poinso und D. Veyante, *Theoretical and numerical combustion.*, R. T. Edwards, 2001.
- [22] S. Lecheler, *Numerische Strömungsberechnung.*, Vieweg + Teubner, 2009.

- [23] K. Ghaib, Einführung in die numerische Strömungsmechanik., Springer Vieweg, 2019.
- [24] R. Schwarze, CFD-Modellierung : Grundlagen und Anwendungen bei Strömungsprozessen., Berlin: Springer, 2013.
- [25] P. Gerlinger, Numerische Verbrennungssimulation : effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung., Berlin: Springer, 2005.
- [26] A. Inc, *ANSYS CFX-Solver Theory Guide (Release 19)*, ANSYS Inc, 2019.
- [27] F. Herbst, Modellierung des Einflusses von Ausblasungen auf die Grenzschichttransition in hochbelasteten Niederdruckturbinen, Gottfried Wilhelm Leibniz Universität Hannover, 2013.
- [28] H. Xue, J. C. Ho und Y. M. Cheng, „Comparison of different combustion models in enclosure fire simulation.,“ *Fire Safety Journal*, 2001.
- [29] G. Cox und S. Kumar, „Modelling enclosure fires using CFD.,“ in *SFPE Handbook of Fire Protection Engineering*, Quincy, MA, USA, National Fire Protection Association, 2006, pp. 194-218.
- [30] S. De, A. K. Agarwal, S. Chaudhuri und S. Sen, Modeling and simulation of turbulent combustion., Springer, 2018.
- [31] P. Stephan, S. Kabelac, M. Kind, D. Mewes, K. Schaber und T. Wetzel, VDI-Wärmeatlas : fachlicher Träger VDI-Gesellschaft Verfahrenstechnik und Chemieingenieurwesen., Berlin: VDI Springer, 2019.
- [32] M. F. Modest, Radiative Heat Transfer, Academic Press, 2003.
- [33] J. Beer, P. Foster und R. Siddall, *Calculation methods of radiative heat transfer.*, HTFS Design Report, 1971.
- [34] T. Ma und J. Quintiere, „Numerical simulation of axi-symmetric fire plumes: accuracy and limitations,“ *Fire Safety Journal*, Bd. 38, Nr. 5, pp. 467-492, 2003.