

Masterarbeit

Numerische Untersuchung der Mindestzündenergie sowie der Flammenfortpflanzung in Staub/Luft – Gemischen mittels eines Euler – Lagrange – Modells in OpenFOAM

erstellt am

Lehrstuhl für Thermoprozesstechnik

Vorgelegt von:

Werner Rudolf Pollhammer, BSc
1035034

Betreuer:

Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Harald Raupenstrauch
Dipl.-Ing. Dr.mont. Hannes Kern
Dipl.-Ing. Christoph Johannes Spijker

Leoben, Dezember 2014

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

Ich erkläre an Eides statt, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel nicht benutzt und mich auch sonst keiner unerlaubten Hilfsmittel bedient habe.

AFFIDAVIT

I declare in lieu of oath, that I wrote this thesis and performed the associated research myself, using only literature cited in this volume.

Stolzen / 24.11.2014

Ort/Datum

Werner Rudolf Pallhammer

Unterschrift

Danksagung

Das Verfassen einer Masterarbeit erfordert nicht nur eine Reihe von fachlichen Voraussetzungen, sondern auch ein gewisses Maß an Zielstrebigkeit. Um dieses Ziel zu erreichen und nicht aus den Augen zu verlieren, gibt es mehrere Personen die mich dabei unterstützt haben und denen ich hiermit danken möchte.

Zu allererst möchte ich Herrn Univ.Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Harald Raupenstrauch danken, dass ich meine Masterarbeit auf seinem Lehrstuhl verfassen durfte.

Herrn Dipl.-Ing. Dr.mont. Hannes Kern und Dipl.-Ing. Christoph Spijker gilt mein besonderer Dank für die tatkräftige fachliche Unterstützung, im Bereich der Anlagensicherheit und der Simulation, sowie für die gute Betreuung. Vor allem für das richtige Maß an Freiraum möchte ich mich bedanken, so konnte ich viele eigene Ideen einbringen und die Arbeit nach meinen eigenen Interessen und Ideen gestalten.

Ich danke all meinen Studienkollegen und Freunden, die mich in so manch aussichtsloser Situation unterstütz und mich auf andere Gedanken gebracht haben.

Bei allen Mitarbeitern am Lehrstuhl für Thermoprozesstechnik möchte ich mich für die Unterstützung und den Zusammenhalt sowie für die schöne gemeinsame Zeit bedanken.

Ein besonderer Dank gilt jedoch meinen Eltern und meiner Familie. Sie haben mir mein Studium erst ermöglicht und die Voraussetzungen geschaffen das machen zu können was mir Freude bereitet. Vor allem der Rückhalt meiner Familie in so manch schwerer Zeit hat mich in meiner Tätigkeit wieder bekräftigt und gestärkt.

Danke und Glück Auf!

Kurzfassung:

Staubexplosionen stellen in der Industrie nach wie vor ein oft unterschätztes Problem dar. Meist handelt es sich bei derartigen Explosionen im Industriebereich um große Zwischenfälle mit großer Zerstörung und enormen Schäden. Es gibt in diesem Fachbereich ein breites Versuchsspektrum, jedoch fehlt es zum Teil noch an der Grundlagenforschung, welche die Zündung von Staubexplosionen unter nichtatmosphärischen Bedingungen behandelt. Mithilfe moderner Simulationswerkzeuge wurden diese Zündvorgänge modelliert und Parameterstudien durchgeführt. Es wurde ein Euler – Lagrange – Modell für eine Staubexplosion adaptiert. Die mit diesem Modell durchgeführten Simulationen wurden stets auf Versuche im Labormaßstab umgelegt, um anschließend die Ergebnisse der Simulation und der Laborversuche evaluieren zu können. So wurden beispielsweise die Mindestzündenergie und die Flammengeschwindigkeit einer Staub/Luft – Mischung simuliert. Der Vorteil der Simulation liegt darin Versuche bei Bedingungen durchzuführen, welche im Labor nicht eingestellt werden können. Hier sind vor allem hohe Umgebungstemperaturen sowie hohe Überdrücke zu nennen. Viele Parameter werden erst in der Simulation zugänglich, so können beispielsweise auch Partikelgeschwindigkeiten und Partikelverhalten gut analysiert werden.

Abstract:

Dust explosions are still a hidden problem in the industry. Such explosions have big impacts due to massive demolition. There are many laboratory tests to investigate substances, which are potentially explosive. But in basic research there are many facts unknown related to the ignition process under non – atmospheric conditions. By using modern simulation techniques it is possible to investigate these facts and to do a parameter analysis. The simulation, in which a particle model was adapted, was set up in a case of a real laboratory test to compare the results of the simulation and the laboratory test. By using the simulation it was possible to determine the minimum ignition energy or the flame speed of a dust – air mixture. The benefit of the simulation tool is that it is also possible to simulate cases, which are not possible to investigate in laboratory tests. Due to the testing method, it is difficult to carry out experiments at high temperatures and pressures. Many parameters are only available in simulation, like particle velocities or particle effects.

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis	II
Allgemeine Formelzeichen	VI
Akronyme.....	VIII
Abbildungsverzeichnis.....	IX
Tabellenverzeichnis	XII
1 Einführung.....	1
1.1 Problemstellung.....	1
1.2 Zielsetzung	1
1.3 Vorgehensweise.....	2
2 Grundlagen.....	3
2.1 Allgemeines zum Explosionsschutz	3
2.2 Bestimmung der Mindestzündenergie im Versuch [1].....	4
2.3 Bestimmung des maximalen Explosionsdrucks sowie des K_{St} -Wert [1].....	6
2.4 Ermittlung der Flammengeschwindigkeit [1].....	7
2.5 Ablauf einer Staubexplosion.....	8
2.6 Simulationssoftware OpenFOAM [6].....	10
3 Anpassung des Modells.....	12
3.1 Anpassung thermodynamischer Funktionen	12
3.1.1 Bestimmung der c_p - Funktion	13
3.1.2 Bestimmung des Enthalpiewertes	16

3.1.3	Bestimmung der Entropiekonstante	18
3.1.4	Zusammenfassung der Ergebnisse der Thermodynamikdaten Anpassung	19
3.2	Anpassung kinetischer Parameter	20
3.2.1	Modellierung der Ölsäureverbrennung	20
3.2.2	Lösen des Reaktions – Mechanismus	20
3.2.3	Modellvorstellung der Verbrennung in der Flammenfront	22
3.2.4	Extrapolation der kinetischen Parameter	23
3.2.5	Ermittlung der Einstellparameter der Arrheniusgleichung	26
3.2.6	Anpassung durch Multireaktionssystem und Ergebnisse	28
3.2.7	Modellabweichungen und Einschränkungen	30
3.3	Dampfdruck der Ölsäure	30
3.4	Anpassung der Ölsäuredaten	32
3.5	Abbildung des Zündfunkens	33
3.6	Erzeugung der Partikelwolken	35
4	Aufbau des Berechnungsmodells	36
4.1	coalCombustion Case [6]	36
4.2	Solverprogrammierung	37
4.3	Charakterisierung der Partikel	38
4.3.1	Thermogravimetrische Analyse von Lykpodium und Einstellung der Partikelzusammensetzung	39
4.3.2	Submodelle der Partikel	40
4.4	P1- und DO– Strahlungsmodell [22]	42
4.4.1	Das NoRadiation Modell [22]	42
4.4.2	Das P1 Modell [22] [23]	42
4.4.3	Das finite volume discrete ordinates model [22] [23] [25]	44
4.5	k-ε-Turbulenzmodell [8] [25]	45
4.6	Einstellung numerischer Parameter	46
4.7	Überprüfung der Partikelbiotzahl	46
5	Ergebnisse der Berechnungen	48
5.1	Mindestzündenergie	49
5.1.1	Berechnungsgitter des Zündversuchs	50
5.1.2	Problem der Zeitschrittabhängigkeit	52
5.1.3	Der Zündmechanismus	53
5.1.4	Konzept der Durchführung	55
5.1.5	Einfluss der Staubkonzentration auf die Mindestzündenergie	56

5.1.6	Abhängigkeit der Mindestzündenergie vom Umgebungsdruck.....	59
5.1.7	Analyse der Partikelbewegung und Aufheizung.....	61
5.1.8	Flammengeschwindigkeit bei der Zündung.....	63
5.2	Flammengeschwindigkeit.....	64
5.2.1	Verwendetes Rechengitter.....	65
5.2.2	Bestimmung und Auswertung der Flammengeschwindigkeit.....	66
5.2.3	Ergebnisse der Auswertung.....	69
5.2.3.1	Einfluss des Druckes.....	69
5.2.3.2	Einfluss der Anfangstemperatur.....	71
5.2.3.3	Einfluss der Rohrlänge.....	71
5.2.3.4	Einfluss der Staubkonzentration.....	74
5.2.4	Problem der Zündung des Staub/Luft – Gemisches in der Rohrgeometrie.....	75
5.2.5	Phänomenologische Untersuchung der Verbrennungseffekte.....	76
5.2.5.1	3- Phasenmodell der Verbrennung.....	76
5.2.5.2	Geschwindigkeits- und Restbrennstoffverteilung.....	79
5.2.5.3	Temperaturverteilung in der Flammebene.....	85
5.2.6	Vergleich zum großen Flammenrohr (2 Meter).....	86
5.2.7	Darstellung der Flammenfront im 2 Meter Rohr.....	88
5.2.8	Einschränkungen des Modells.....	88
5.2.8.1	Abbildung in 2D.....	88
5.2.8.2	Vollständige Gleichverteilung der Partikel.....	89
5.2.8.3	Ausbrandverhalten und innere Temperaturverteilung.....	89
5.3	Berechnung des Explosionskugelversuchs.....	90
5.4	Netzstudie.....	95
6	Schlussfolgerungen.....	96
6.1	Beurteilung der Berechnungsergebnisse.....	96
6.2	Berechnungsdauer.....	96
6.3	Limitierende Faktoren der Umsetzungsgeschwindigkeit.....	97
6.4	Anpassung der c_p - Funktionen.....	97
6.5	Abbildung des Zündfunken.....	98
6.6	Programmtechnische Probleme.....	98
7	Ausblick.....	99
7.1	Mögliche weitere Fallstudien.....	99
7.2	Analyse und Beschreibung des Zündfunken.....	100

7.3	Analyse der Startwerte für k und ϵ	100
7.4	Zündmodell für heiße Oberflächen.....	101
7.5	Simulation einer Flammensperre durch Löschmittelinjektion in Rohrleitungen..	101
7.6	Modellumstellung auf Metallstäube	102
7.7	Verbrennungssimulation für andere Simulationsansätze	102
8	Literaturverzeichnis.....	103
9	Anhang	106
9.1	Solvercode [6]	106
9.2	Zusammensetzung der Partikel.....	107
9.3	Einstellungen des Verdampfungsmodells	108
9.4	Einstellungen der Oberflächenreaktion [6]	108

Allgemeine Formelzeichen

R	Gaskonstante	[J/mol*K]
c_p	spezifische Wärmekapazität	[J/kg*K]
H	Enthalpie	[J/kg]
S	Entropie	[J/kg*K]
k	spezifische Reaktionsrate	[mol/cm ³ *s]
A	Stoßfaktor	[cm ³ /mol*s]
E_A	Aktivierungsenergie	[J/mol]
T	Temperatur	[K]
T_A	Aktivierungstemperatur	[K]
c_A	Konzentration	[mol/cm ³]
P	Leistung	[W]
t	Zeit	[s]
Nu	Nusseltzahl	[]
Re	Reynoldszahl	[]
Pr	Prandtlzahl	[]
a	Beschleunigung	[m/s ²]
d	Durchmesser	[m]
l	Länge	[m]

F	Kraft	[N]
m	Masse	[kg]
p	Druck	[Pa]
ρ	Dichte	[kg/m ³]
V	Volumen	[m ³]
v	Geschwindigkeit	[m/s]

Akronyme

TPT	Lehrstuhl für Thermoprozesstechnik
K _{St}	stoffspezifische sicherheitstechnische Kenngröße
TGA	Thermogravimetrische Analyse
FTIR	Fourier – Transform – Infrarotspektrometer

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Branddreieck	3
Abbildung 2: Modifiziertes Hartmannrohr [2]	5
Abbildung 3: Aufbau des Kugelversuchs [3].....	6
Abbildung 4: Messwerte des Kugelversuchs [2].....	7
Abbildung 5: Versuchsaufbau zur Flammengeschwindigkeitsbestimmung [4].....	8
Abbildung 6: Schematische Darstellung der Temperaturabhängigkeit von Wärmeproduktion und Wärmeverlust [5].....	9
Abbildung 7: Ordnerstruktur von OpenFOAM [6].....	10
Abbildung 8: HSC – Datenauszug Version 7.1.....	14
Abbildung 9: Anpassung der c_p – Funktion für Sauerstoff.....	15
Abbildung 10: c_p - Wert Verlauf für Sauerstoff bis 200 000 Kelvin	16
Abbildung 11: Verlauf der Enthalpiefunktion für O_2	18
Abbildung 12: Lösung des Reaktionsmechanismus bei unterschiedlicher Temperatur	21
Abbildung 13: Unterschiede der Struktur von Aldehyden und Carbonsäuren	23
Abbildung 14: Darstellung des linearen Verhaltens zwischen Abbaurate und Anzahl der C- Atome	23
Abbildung 15: Extrapolation der Berechnungswerte für das Kinetikmodell	24
Abbildung 16: Ergebnis der Extrapolation	25

Abbildung 17: Übereinstimmung der Berechnungswerte und der beiden Modellreaktionen	29
Abbildung 18: Anpassung des Dampfdrucks der Ölsäure	31
Abbildung 19: Modellbildung des Funkenüberschlags [18]	33
Abbildung 20: Mikroskopaufnahme eines Lycopodiumpartikels [20]	38
Abbildung 21: TGA von Lycopodium	39
Abbildung 22: Darstellung der Strahlen am DO – Modell [23]	44
Abbildung 23: Geometrie des Zündversuchs	50
Abbildung 24: Zündfunkengeometrie mit Staubpartikel	51
Abbildung 25: Grafischer Vergleich der Zündung bei geringer und hoher Zündenergie	54
Abbildung 26: Darstellung der Mindestzündenergie bei verschiedenen Staubkonzentrationen	57
Abbildung 27: Literaturwerte der Mindestzündenergie von Lycopodium bei verschiedenen Staubkonzentrationen [28]	58
Abbildung 28: Abhängigkeit der Mindestzündenergie vom Umgebungsdruck bei einer Staubkonzentration von 200 g/m ³	59
Abbildung 29: Darstellung der Zündfunken bei unterschiedlichen Umgebungsdrücken [29]	60
Abbildung 30: Partikeltemperatur 1.2 ms nach der Zündung	61
Abbildung 31: Partikelbewegung aufgrund der Gasausdehnung eines 1.5 J Funkens [30]	62
Abbildung 32: Flammengeschwindigkeit am Zündpunkt	63
Abbildung 33: Geometrie der Flammengeschwindigkeitssimulation	65
Abbildung 34: Darstellung der Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit der Zeit	68
Abbildung 35: Darstellung der Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit des zurückgelegten Weges	68
Abbildung 36: Abhängigkeit der Flammengeschwindigkeit vom Druck	69
Abbildung 37: Einfluss der Anfangstemperatur auf die Flammengeschwindigkeit	71
Abbildung 38: Vergleich der Flammengeschwindigkeit bei unterschiedlicher Rohrlänge...	72
Abbildung 39: Beschleunigung der Flammenfront bei unterschiedlicher Rohrlänge	73

Abbildung 40: Einfluss der Staubkonzentration auf die Flammengeschwindigkeit.....	74
Abbildung 41: Darstellung des Ablaufs der Flammengeschwindigkeitsbestimmung.....	77
Abbildung 42: Brennstoffkonzentrationsverlauf bei 32 ms	79
Abbildung 43: Verlauf der Gaskonzentrationen bei 35 ms und einem Zentimeter hinter der Flammenfront	80
Abbildung 44: Vektorielle Strömungsgeschwindigkeit und Temperatur.....	81
Abbildung 45: Analyse der Partikelbewegung während der Flammenfortpflanzung im Rohr 32 ms nach der Zündung	83
Abbildung 46: Axiale Strömungsgeschwindigkeit hinter der Flammenfront.....	84
Abbildung 47: Radiale Strömungsgeschwindigkeit hinter der Flammenfront	84
Abbildung 48: Radiale Temperaturverteilung während der Flammenfortpflanzung im Rohr	85
Abbildung 49: Vergleich der Flammengeschwindigkeit von Simulation und Messung am 2 Meter Rohr	86
Abbildung 50: Flammengeschwindigkeit am Beginn (Detailansicht).....	87
Abbildung 51: Darstellung der Flammenposition über die Zeit am 2 Meter Rohr mit dem Wedge - Gitter	87
Abbildung 52: Darstellung der Flammenfront im 2 Meter Rohr	88
Abbildung 53: Geometrie des Kugelversuchs	90
Abbildung 54: Druckverlauf des Kugelversuchs	91
Abbildung 55: Zeitlicher Druckanstieg beim Kugelversuch.....	91
Abbildung 56: Ablauf der Verbrennung in der Kugel	93
Abbildung 57: Partikelverdichtung vor der Flammenfront nach 16 ms	94
Abbildung 58: Ergebnisse der Netzstudie	95

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Ergebnisse der c_p -Funktion.....	16
Tabelle 2: Übereinstimmung der H-Funktionen aus dem JANAF – Modell und der Regression	17
Tabelle 3: Ergebnisse der Thermodynamikanpassung bis 11120 Kelvin.....	19
Tabelle 4: Ergebnisse der Thermodynamikanpassung ab 11120 Kelvin.....	19
Tabelle 5: Berechnung des Stoßfaktors A aus den Abbauraten der Matlab - Kalkulation..	28
Tabelle 6: Einstellparameter für die beiden Arrheniusreaktionen	29
Tabelle 7: Antoineparameter der Ölsäure [12]	31
Tabelle 8: Parameter der Ölsäure	32
Tabelle 9: Einstellparameter des Funkenmodells.....	34
Tabelle 10: Darstellung der Biotzahl in Abhängigkeit von Relativgeschwindigkeit und Lufttemperatur.....	47
Tabelle 11: Versuchsmatrix Mindestzündenergie bei verschiedenen Staubkonzentrationen	56
Tabelle 12: Siedepunkte der Ölsäure bei verschiedenen Drücken.....	59
Tabelle 13: Darstellung der Flammengeschwindigkeit in Tabellenform	67
Tabelle 14: Staubexplosionsklassen und Wertebereiche [28].....	92

1 Einführung

1.1 Problemstellung

Staubexplosionen stellen in der Industrie nach wie vor ein großes Problem dar. Zum einen handelt es sich bei diesen Explosionen meist um große Zwischenfälle mit enormen Schäden und zum anderen ist deren Verhalten noch nicht vollständig erforscht. Derartige Staub/Luft – Gemische können beispielsweise durch heiße Oberflächen, Flammen oder durch statische Entladungen gezündet werden. Der Zündmechanismus der Funkenzündung ist besonders schwer zu erforschen, da sich dieser Mechanismus in einem Plasmakanal mit mehreren 10000 Kelvin ereignet und diese Vermessung experimentell nur schwer möglich ist. Die Versuche, welche zur Bestimmung von sicherheitstechnischen Kenngrößen verwendet werden, beinhalten teilweise große Schwankungen und Abweichungen zu realen Bedingungen. Vorhandene Simulationsmodelle stützen sich meist auf derartige Versuche, welche teilweise mit großen Fehlern behaftet sind. Teilweise sind viele Versuche nötig um die erforderlichen Messwerte zu erhalten.

1.2 Zielsetzung

Das Ziel dieser Arbeit war es ein CFD – Modell zu erstellen, welches die Zündvorgänge von Staub/Luft – Gemischen über ein Partikelmodell modelliert. Dabei sollen die Schritte der Partikelverbrennung (Aufheizung, Pyrolyse, Verbrennung und Strömung) möglichst als Einzelschritte abgebildet werden. Mithilfe der Simulation sollen anschließend Aussagen über die Zündwilligkeit und Mechanismen der Staub/Luft – Gemische getroffen werden. Durch

diverse Fallstudien werden dann verschiedene Einflüsse, wie beispielsweise Staubkonzentration oder Druck, auf die Mindestzündenergie ermittelt.

1.3 Vorgehensweise

Zuerst mussten diverse thermodynamische Daten und kinetische Parameter ermittelt werden um einerseits den Zündfunken zu modellieren und um andererseits die Verbrennung der Pyrolysegase beschreiben zu können. Nach dem Erstellen einer geeigneten Geometrie mussten entsprechende Partikelmodelle, Turbulenzmodelle und Randbedingungen gesetzt werden. Anschließend wurden die Ergebnisse der Simulation mit Versuchen verglichen. Das Simulationsmodell wird dabei nicht an die Versuchsergebnisse angeglichen, sondern diese werden nur verglichen. In den Ergebnissen wurden vor allem jene Aspekte diskutiert, welche in den Versuchen nur schwer gezeigt oder abgebildet werden können.

2 Grundlagen

2.1 Allgemeines zum Explosionsschutz

Der Explosionsschutz stellt eine wichtige Grundlage für die Errichtung und den Betrieb einer industriellen Anlage dar. Es gibt viele Gesetze, die die Betriebssicherheit von Anlagen regeln. Aus ihnen geht hervor, dass jede mögliche und sinnvolle Maßnahme zu treffen ist, um Industrieunfälle zu vermeiden. Damit sich nun eine Explosion ereignen kann, müssen bestimmte Parameter vorliegen. Dazu muss ein Brenngas sowie Sauerstoff vorhanden sein und ein wirksame Zündquelle vorliegen.



Abbildung 1: Branddreieck

Um Aussagen über die sicherheitstechnischen Kenngrößen treffen zu können, müssen Versuche durchgeführt und Parameter bestimmt werden.

Die wichtigsten Kenngrößen sind: [1]

- **Mindestzündenergie**
- **Maximaler zeitlicher Druckerhöhung**
- **Maximaler Explosionsdruck**
- Flammpunkt (nur für Flüssigkeiten)
- Explosionsgrenzen
- Zündtemperatur
- Grenzspaltweite

Die fett markierten Parameter wurden in der vorliegenden Arbeit anhand des Simulationsmodells bestimmt. Außerdem wurde die Geschwindigkeit der Fortpflanzung der Flammenfront bestimmt. Diese ist, da sie stark von der Turbulenz abhängig ist, nicht direkt als Kenngröße zu bezeichnen.

2.2 Bestimmung der Mindestzündenergie im Versuch [1]

Die Mindestzündenergie eines Staub/Luft – Gemisches wird mittels MIKE 3 Apparatur bestimmt. Das Herz der Apparatur ist das modifizierte Hartmannrohr mit einem Volumen von 1.2 Liter. Im Versuch wird der Staub mittels Pressluft in das Hartmannrohr eingeblasen. Nach einer kurzen Zündverzugszeit wird durch einen Hochspannungsgenerator ein Funke erzeugt, welcher das Gemisch zu zünden versucht. Reicht die Energie des Zündfunkens aus, um das Gemisch zu entzünden, setzt sich die Flamme im Rohr fort und öffnet durch den Explosionsdruck den Klappdeckel. Um die Mindestzündenergie zu bestimmen, wird jene Zündenergie gesucht, welche das Staub/Luft – Gemisch bei den vorliegenden Bedingungen gerade noch entzünden kann.

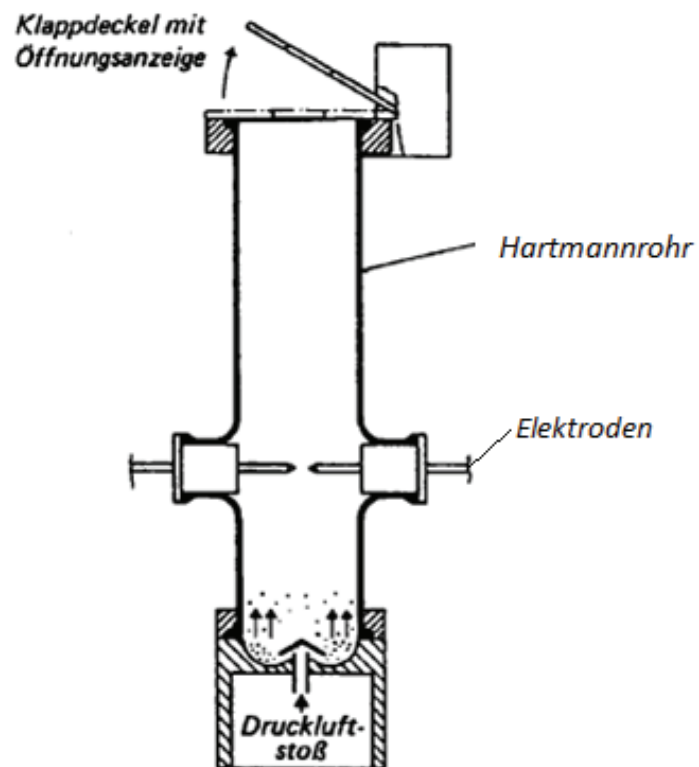


Abbildung 2: Modifiziertes Hartmannrohr [2]

Die Mindestzündenergie beschreibt jene Energiemenge, welche in Form einer Funkenentladung zugeführt werden muss, um ein vorliegendes Staub/Luft – Gemisch zu entzünden.

2.3 Bestimmung des maximalen Explosionsdrucks sowie des K_{St} -Wert [1]

Der maximale Explosionsdruck und der K_{St} – Wert werden in einem Versuch bestimmt. Dazu wird der Staub im Staubvorratsbehälter vorgelegt und mittels Druckluft in eine Kugel eingblasen. Dabei gibt es verschiedenste Verteilersysteme in der Kugel. Das Kugelvolumen beträgt dabei meist 20 Liter oder 1 m³. Um den Versuch bei atmosphärischen Bedingungen durchführen zu können, muss die Kugel zuerst evakuiert werden. Nach dem Einblasen wird das Staub/Luft – Gemisch nach einer kurzen Zündverzugszeit mit einem chemischen Zünder gezündet. Die Zündenergie beträgt dabei 2 kJ oder 10 kJ, damit es sicher zur Zündung kommt. Um die Versuchstemperatur einzustellen wird die Kugel durch einen Thermostat auf einer konstanten Temperatur gehalten. Der zeitliche Druckverlauf wird über den Quarzkristalldruckaufnehmer gemessen.

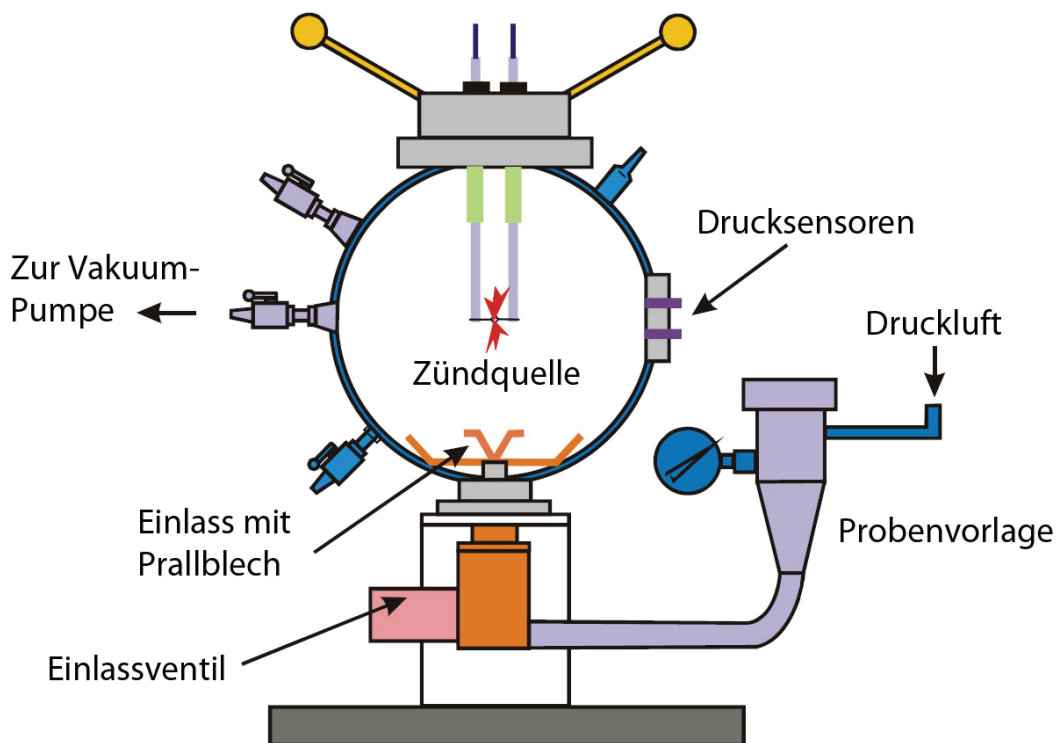


Abbildung 3: Aufbau des Kugelversuchs [3]

Die folgende Abbildung 4 zeigt den Ablauf des Kugelversuchs. Der K_{St} – Wert wird anschließend aus den geometrischen Abmessungen der Kugel sowie aus dem maximalen zeitlichen Druckanstieg durch folgende Formel ermittelt.

$$\left(\frac{dp}{dt}\right)_{max} * V^{\frac{1}{3}} = konst = K_{St} \quad (2-1)$$

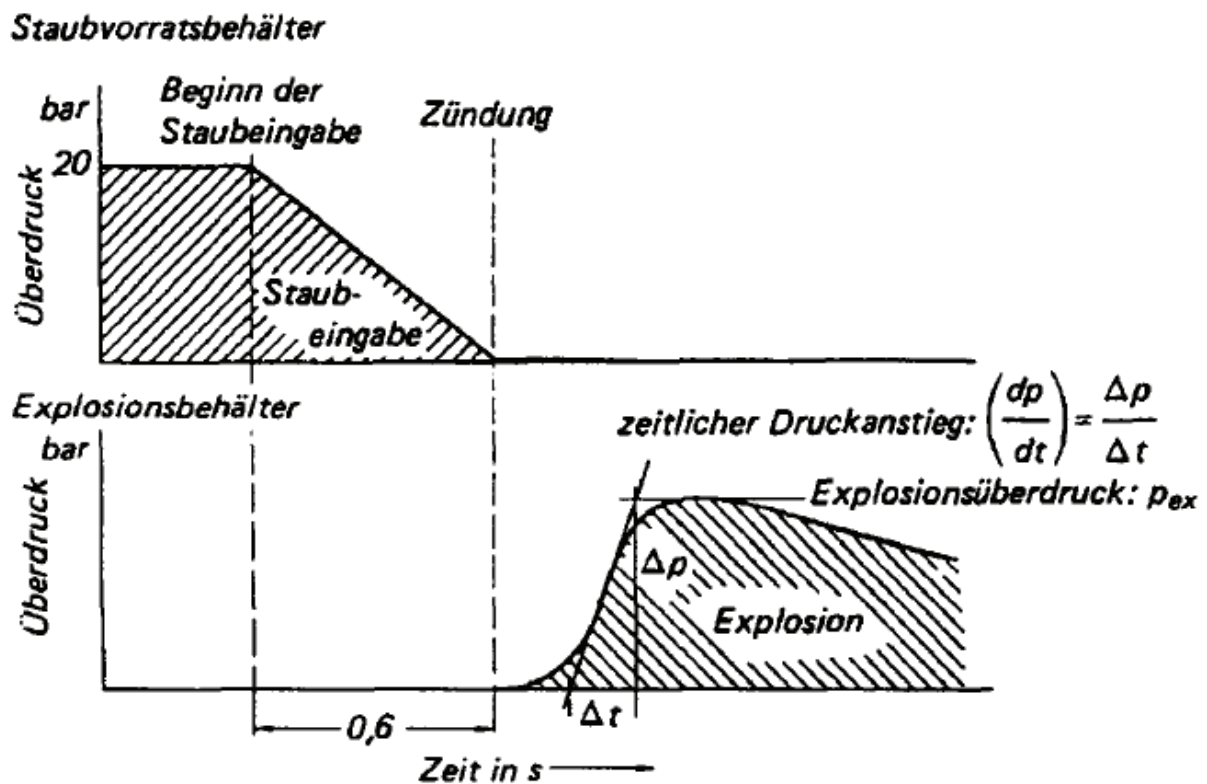


Abbildung 4: Messwerte des Kugelversuchs [2]

2.4 Ermittlung der Flammengeschwindigkeit [1]

Zur Bestimmung der Flammengeschwindigkeit wird in einem Rohr der zu untersuchende Staub eingebracht und verteilt. Dabei gibt es verschiedene Verteilungssysteme, beispielsweise wird die Versuchsanlage am Lehrstuhl für Thermoprozesstechnik an der Montanuniversität Leoben mit einer Förderschnecke beschickt. Es gibt aber auch Systeme wie in Abbildung 5 gezeigt, welche durch Aufblasen einer abgelagerten Staubschicht den Staub im Rohr verteilen. Das Ziel ist es eine möglichst homogene Staubverteilung einer bekannten Konzentration im Rohr vorzulegen. Anschließend erfolgt die Zündung in einer bestimmten Höhe über dem Bodenpunkt des Rohres. Es kommt zur Flammenfortpflanzung im Rohr, wobei die Position der Flammenfront über verschiedenste Messverfahren detektiert werden kann. Die gängigsten Systeme sind dabei optische Verfahren mittels Photodiode oder Kamera. Das Problem der thermischen Messung mittels Thermoelementen ist die vergleichsweise hohe Trägheit des Messfühlers im Vergleich zu den optischen Systemen.

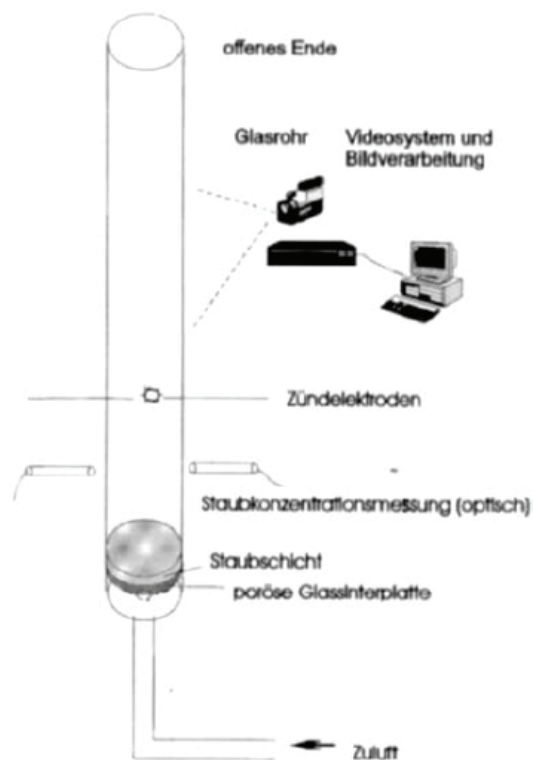


Abbildung 5: Versuchsaufbau zur Flammgeschwindigkeitsbestimmung [4]

2.5 Ablauf einer Staubexplosion

Bei einer Staubexplosion muss das Gemisch zuerst erhitzt werden. Der Staub setzt ab einer gewissen Temperatur Pyrolysegase frei, welche sich mit Sauerstoff vermischen. Durch die hohe Temperatur kommt es zu einer chemischen Reaktion. Liegt die Wärmefreisetzungsrate der chemischen Reaktion über jener der Abkühlrate des Bilanzraumes, so erhitzt sich das Gemisch weiter und die Reaktion pflanzt sich fort, es kommt zur Staubexplosion. Dieser Vorgang kann anhand von Abbildung 6 sehr gut grafisch veranschaulicht werden. Die drei Kurven von P_1 bis P_3 zeigen die Wärmeproduktionsraten verschiedener Reaktionen, V zeigt die Kurve der Abkühlung. Bei der Kurve P_1 und P_2 kommt es unabhängig von der Temperatur zur Selbstentzündung, da die Wärmeproduktion stets größer ist als die Abkühlung. Bei der Kurve P_3 herrscht bei der Temperatur $T_{S,1}$ ein thermisches Gleichgewicht zwischen Wärmeproduktion und Wärmeabfuhr. Wird der Bilanzraum weiter erhitzt, so liegt die Wärmeabfuhr bis zur Temperatur $T_{S,2}$ über der Wärmeproduktion. Das heißt die Reaktion fällt wieder in den stabilen Punkt $T_{S,1}$ zurück. Wird aber der Bilanzraum über $T_{S,2}$ erhitzt, so liegt die Wärmeproduktionsrate wieder über der Abkühlrate und es kommt zu einer weiteren Erhitzung und zum Brand.

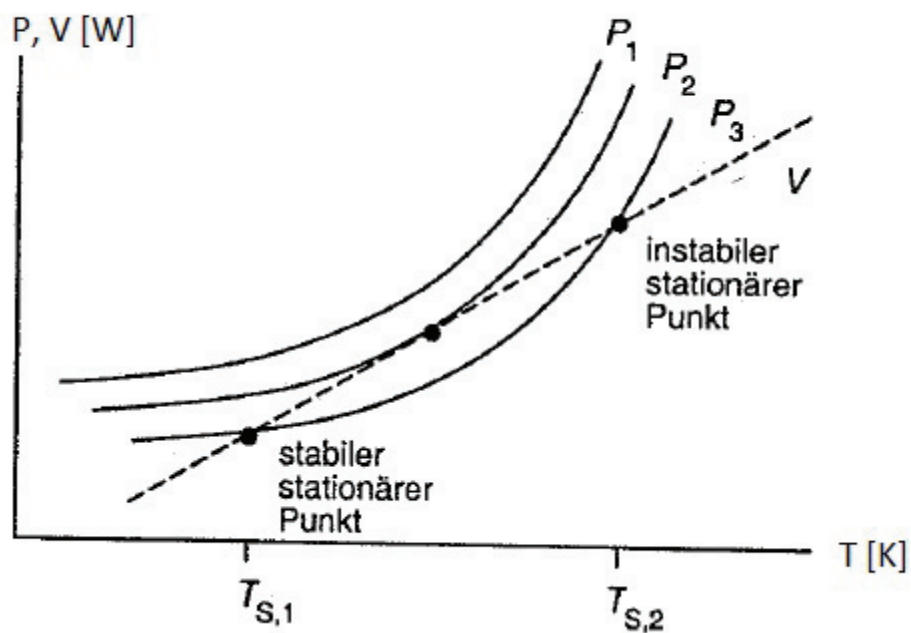


Abbildung 6: Schematische Darstellung der Temperaturabhängigkeit von Wärmeproduktion und Wärmeverlust [5]

Genau dieser Mechanismus soll im Zuge der Arbeit mittels OpenFOAM simuliert werden. Der Ablauf einer Metallstaubexplosion besitzt einen anderen Mechanismus. In diesem Falle wird kein Pyrolysegas freigesetzt, sondern es kommt zu einer Oxidation der Oberfläche, welche dann Wärme freisetzt.

2.6 Simulationssoftware OpenFOAM [6]

Bei OpenFOAM (**O**pen **S**ource **F**ield **O**peration **A**nd **M**anipulation) handelt es sich um ein freies Softwarepaket, welches vor allem im Bereich der Strömungsmechanik breite Anwendung findet. Das Preprocessing, also das Vorbereiten der Simulation, erfolgt durch Einstellen der Parameter in vorgefertigte Eingabemasken, welche als einfache Textfiles ausgelesen werden. Die Simulation selbst wird in der Kommandozeile gestartet und gesteuert. Dabei besitzt jede Simulation eine bestimmte Ordnerstruktur.

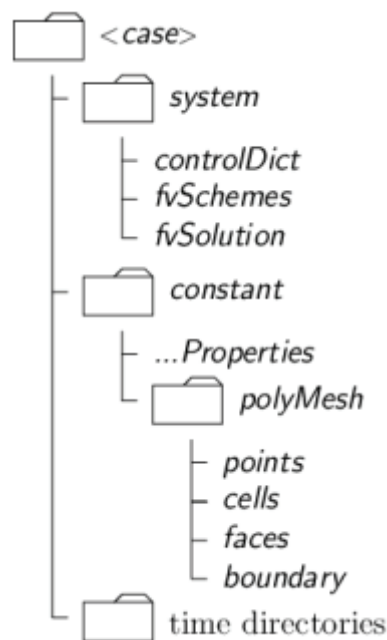


Abbildung 7: Ordnerstruktur von OpenFOAM [6]

Im `system` – Ordner werden die numerischen Parameter sowie Systemparameter gesetzt. Hier werden die Zeitschritte, Speicherintervalle sowie Voreinstellungen eingegeben. In diesem Ordner werden auch die Einstellungen der numerischen Lösungsverfahren festgelegt. Der Inhalt der Ordner variiert von Fall zu Fall. Wird beispielsweise eine Zone der Geometrie zu Beginn mit einer höheren Temperatur belegt, so wird dieser Ordner um ein „setFields“ – Dict erweitert. Dieser Ordner steuert sozusagen den Ablauf der Simulation.

Im `constant` – Ordner gibt es einen `polyMesh` – Ordner. Dieser beinhaltet alle nötigen Speicherdateien der Geometrie. Diese wird entweder von externen Programmen wie „Salome, etc.“ oder durch den OpenFOAM eigenen Meshgenerator „blockMesh“ erstellt. blockMesh ist ein sehr einfaches Programm zum Erstellen des Gitters aber nur für einfache Geometrien geeignet, da das Erstellen einer komplexen Geometrie bald sehr aufwändig

wird. Die anderen Dateien im polyMesh – Ordner müssen eigentlich nie verändert werden und stellen nur für OpenFOAM die Speichergrundlage dar.

Die Dateien, welche direkt im constant – Ordner liegen sind zur eigentlichen Einstellung der Modelle vorhanden. In diesen Ordnern werden die Modelle und Einstellungen für Strahlung, chemische Reaktionen, Partikelverhalten und Turbulenz gesetzt. In diesem Ordner werden auch Partikelpositionen sowie die Reaktionsgleichungen für chemische Reaktionen und modifizierte thermodynamische Daten gespeichert.

Für jeden Zeitschritt wird nun ein timeDirectory erstellt, in diesem Ordner werden die Simulationsergebnisse für den Zeitschritt abgespeichert. Zu Beginn gibt es nur den „0“ – Ordner, dieser unterscheidet sich von allen anderen Ordnern, da in ihm die Randbedingungen für jedes zu lösende Feld gespeichert werden. Diese Ordner werden anschließend von der Postprocessing – Software ausgelesen und visualisiert.

In der folgenden Arbeit wurde im Konkreten die Version OpenFOAM 2.2.2 verwendet [6].

3 Anpassung des Modells

Dieses Kapitel behandelt die Anpassung des Modells an die Eigenschaften und Verbrennung von Lykopodium sowie die Anpassung des Zündfunken an die Simulation. Dazu mussten Stoffdaten sowie kinetische Parameter zuerst bestimmt und anschließend in das Modell implementiert werden.

3.1 Anpassung thermodynamischer Funktionen

Da der Zündfunke Temperaturen von bis zu 50000 K erreicht, mussten die thermodynamischen Stoffdaten der beteiligten Gase angepasst werden [7]. Das JANAF-Modell, welches als Standardmodell verwendet wird, ermöglicht nur eine Kalkulation bis 5000 Kelvin über folgende Formel für den c_p – Wert.

$$c_p(T) = R * (a\{1\} + a\{2\} * T + a\{3\} * T^2 + a\{4\} * T^3 + a\{5\} * T^4) \quad (3-1)$$

Über einer Temperatur von 5000 Kelvin ist das Regressionspolynom nicht mehr gültig [8]. Dieses Modell berechnet ausgehend von sieben Einstellparametern die thermodynamischen Daten der c_p – Funktion, Enthalpie und Entropie. Um nun den Funken bestmöglich beschreiben zu können, wurden aus dem Programm „HSC 7.1“ die thermodynamischen Daten ausgelesen und die Einstellparameter des JANAF – Modells bestimmt. Da aber HSC eine andere Regressionsformel verwendet, mussten die Einstellparameter transformiert werden. Dazu wurde ausgehend von den HSC-Daten ein Excel-Plot erstellt. Dieser Plot wurde dann mit einer Regressionsformel, welche die Parameter des JANAF-Modells verwendet, angenähert. Anschließend mussten noch die Integrationskonstanten für H und S,

spricht Enthalpie und Entropie bestimmt werden. Als problematische Tatsache erwies sich, dass zwar für jedes einzelne Gas eine Umschalttemperatur zwischen Tieftemperaturregression und Hochtemperaturregression bestimmt werden kann, aber letztendlich nur eine Umschalttemperatur für alle Regressionsformeln existieren darf. Dies führe zu Beginn der Modellanpassung zu massiven Problemen. Es musste eine gemeinsame Umschalttemperatur für alle Gase gefunden werden. Diese wurde mit 11120 Kelvin festgelegt. So wurde es möglich die tiefen Temperaturen exakt darzustellen. Dies ist für den Zündvorgang extrem wichtig, da sich die Zündung bei Temperaturen von unter 11120 Kelvin abspielt. Über 11120 Kelvin muss darauf geachtet werden, dass ein Regressionspolynom verwendet wird, welches keinesfalls negative Werte erreichen kann. Würden in der Berechnung negative c_p – Werte auftreten, würde die Berechnung sofort abbrechen, da die Energieerhaltungsgleichung nicht mehr gelöst werden kann.

Im Folgenden wird die Anpassung der Thermodynamikdaten exemplarisch für Sauerstoff gezeigt. Es wurden diese Anpassungen für Sauerstoff, Stickstoff, Wasserdampf, Kohlendioxid und Ölsäuredampf durchgeführt. Eine Zusammenfassung der Werte aller Stoffe befindet sich in Kapitel 3.1.4.

3.1.1 Bestimmung der c_p - Funktion

Ausgehend vom HSC-Datenauszug der Version 7.1 wurde zuerst der Plot in Excel dargestellt. Anschließend wurde mittels Excel ein Regressionspolynom 4. Ordnung erstellt und die Einstellparameter bestimmt. Abbildung 8 veranschaulicht die zur Verfügung stehenden Daten für die c_p – Wertbestimmung.

HSC

O2(g) All

Find What:

Formula All Fields

Structural Formula

Chemical Name

Common Name

Chem. Abs. Number

Search From:

Main Database Own Database

Criss-Cobble

Units:

Calories Joules

Heat Capacity Formula: $C_p = A + B \cdot 10^{-3} T + C \cdot 10^{-5} T^2 + D \cdot 10^{-6} T^3$

		Oxygen					7782-44-7		
		H	S	A	B	C	D	31,999 g/mol	
		kJ/mol	J/(mol*K)	J/(mol*K)				T1	
								K	
								T2	
								K	
g		0,000	205,149	29,780	-6,177	-0,021	15,997	100,000	298,150
g		0,000	0,000	22,060	20,887	1,621	-8,207	298,150	700,000
g		0,000	0,000	29,793	7,910	-6,194	-2,204	700,000	1200,000
g		0,000	0,000	34,859	1,312	-14,140	0,163	1200,000	2500,000
g		0,000	0,000	32,693	3,137	-17,302	-0,214	2500,000	4500,000
g		0,000	0,000	18,490	6,567	654,060	-0,438	4500,000	8400,000
g		0,000	0,000	103,186	-6,871	-9464,191	0,165	8400,000	15000,000
g		0,000	0,000	47,499	-1,783	10570,355	0,033	15000,000	20000,000
	Density	Color	Solubility	Reference				Melting P. K	Boiling P. K
g	1,404	16,000	0,000	Barin 93, Frenkel 94, Nasa 93				54,360	90,200
g	0,000	0,000	0,000	Nasa 93, Landolt 99					
g	0,000	0,000	0,000	Nasa 93					
g	0,000	0,000	0,000	Nasa 93					
g	0,000	0,000	0,000	Nasa 93					
g	0,000	0,000	0,000	Nasa 93					
g	0,000	0,000	0,000	Nasa 93					
g	0,000	0,000	0,000	Nasa 93					

Abbildung 8: HSC – Datenauszug Version 7.1

Der Wertebereich der HSC – Daten ist von Gas zu Gas unterschiedlich. Für Stickstoff liegen beispielsweise Daten bis zu Temperaturen von 20000 Kelvin vor, für die gasförmige Ölsäure jedoch nur bis 1500 Kelvin. Es mussten aber die Polynome noch weiter gültig sein, um den Funken simulieren zu können. Es wurde daher folgendes Vorgehen gewählt. Sind ab einer Temperatur keine Daten mehr vorhanden, wurde der letzte bekannte Wert für die weitere Kalkulation verwendet. Wie in Abbildung 9 zu sehen ist, führt dies zu einem Knick in der c_p – Funktion, welcher in der Realität sicher nicht auftreten wird. Da aber keine Aussage über den weiteren Verlauf möglich war, war dies die vertrauenswürdigste und vor allem auch simulationstechnisch einfachste Lösung des Problems. Im Bereich sehr hoher Temperaturen ist es ausreichend die c_p – Funktion nur grob darzustellen, da diese Temperaturen einerseits nur kurz erreicht werden und andererseits diese nur einen Einfluss auf den Beginn der Partikelerhitzung haben. Durch die geeignete Umschalttemperatur von 11120 Kelvin wurde

es auch ermöglicht, dass dafür die c_p – Funktion im Bereich von 200 bis 11120 Kelvin sehr gut angenähert wird. Somit kann der Erwärmungsvorgang in der Verbrennung sowie die Selbsterwärmung des heißen Ölsäure/Luft – Gemisches besser beschrieben werden, da das Polynom nur Werte im Bereich von etwa 11000 Kelvin abdecken muss. Das Polynom für die Werte ab der Umschalttemperatur muss zumindest für 90 000 Kelvin Temperaturdifferenz bestimmt werden. Abbildung 9 zeigt das Resultat der Anpassung, der Knick zeigt die Umschalttemperatur von 11120 Kelvin.

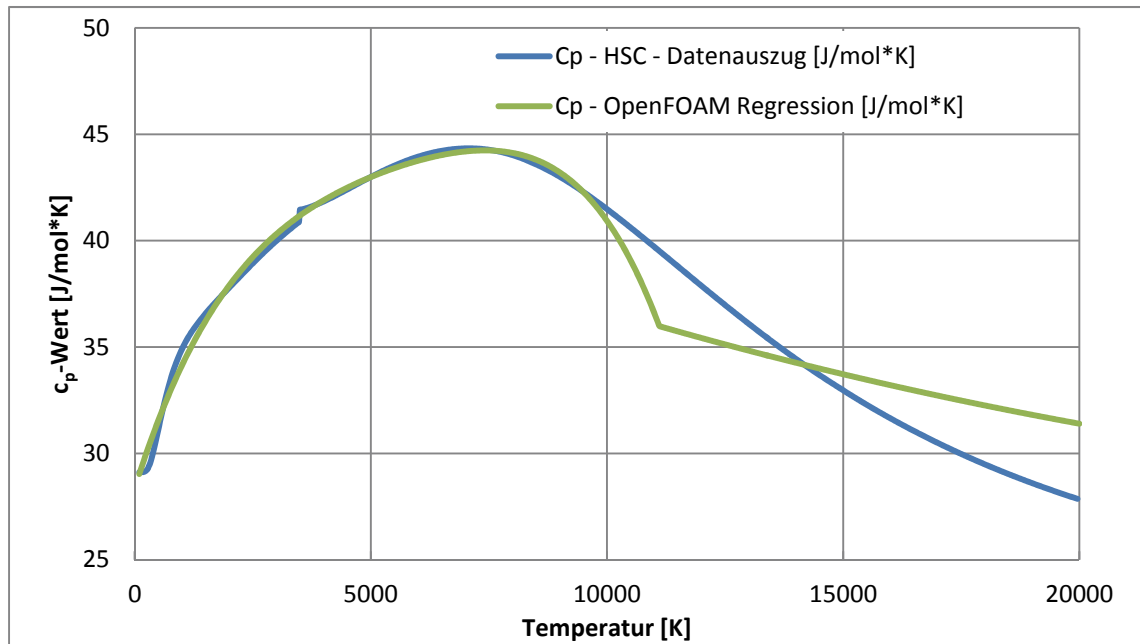
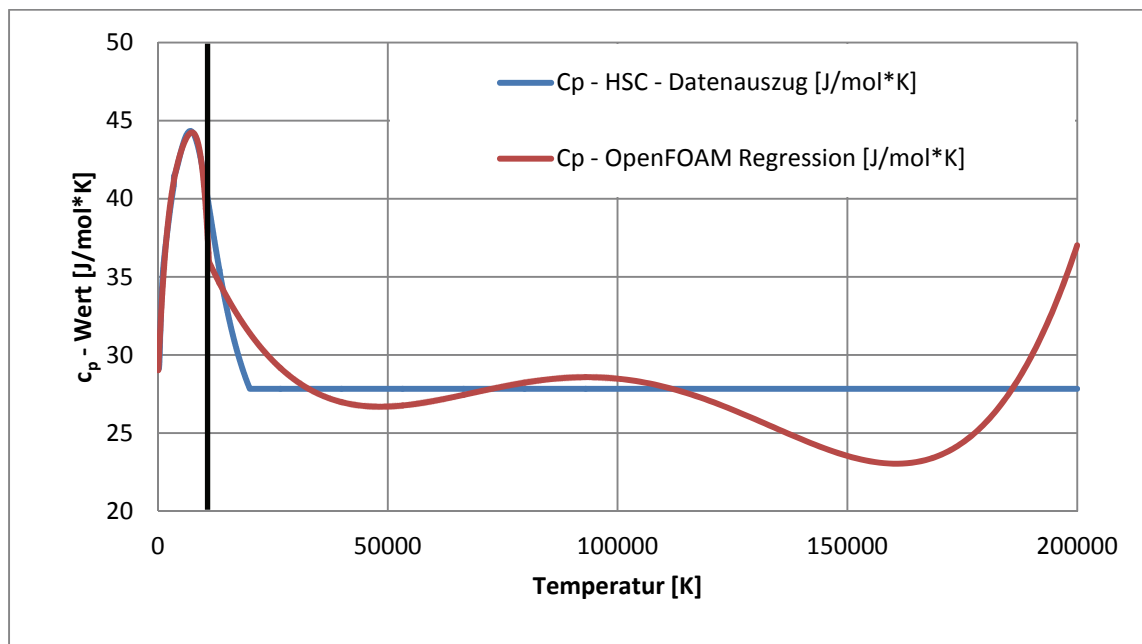


Abbildung 9: Anpassung der c_p – Funktion für Sauerstoff

Gut zu erkennen ist, dass die Anpassung bei tiefen Temperaturen sehr gut ist. Bei hohen Temperaturen kommt es aber zu beträchtlichen Abweichungen. Es kann aber keine bessere Angleichung vorgenommen werden, da das Regressionspolynom einen sehr großen Temperaturbereich abdecken muss. In Abbildung 10 wird dies veranschaulicht. Die vertikale Linie trennt den Bereich der Gültigkeiten der beiden Regressionspolynome. Außerdem ist zu beachten, dass das Polynom bei Temperaturen von über 180 000 Kelvin weiterhin positive Werte besitzt. Somit kann verhindert werden, dass das Polynom negativ wird und wie bereits beschrieben die Simulation abbricht.

Abbildung 10: c_p - Wert Verlauf für Sauerstoff bis 200 000 Kelvin

Das Regressionspolynom, welches für die Kalkulation in OpenFOAM Verwendung findet, sieht wie folgt aus.

$$c_p(T) = R * (a\{1\} + a\{2\} * T + a\{3\} * T^2 + a\{4\} * T^3 + a\{5\} * T^4) \quad (3-2)$$

Die Auswertung ergibt mittel Excel – Ausgleichsfunktion 4. Ordnung folgende Werte für $a\{1\}$ bis $a\{5\}$.

Tabelle 1: Ergebnisse der c_p -Funktion

Variablenname	Wert der Variable
$a\{1\}$	3,2550E+00
$a\{2\}$	8,7348E-04
$a\{3\}$	-2,1513E-07
$a\{4\}$	2,1785E-11
$a\{5\}$	-6,6265E-16

3.1.2 Bestimmung des Enthalpiewertes

OpenFOAM ermittelt die Enthalpie des Gases über die c_p – Funktion. Dabei wird die c_p – Funktion integriert und durch eine summative Integrationskonstante ergänzt. Diese Integrationskonstante musste ermittelt werden. Dazu wurde, ausgehend von den bereits vorhandenen thermodynamischen Daten, aus dem zur Verfügung stehenden JANAF-Modell die Enthalpie bestimmt. Es wurde die neue, durch Regression an die HSC-Daten

angepasste, c_p – Funktion integriert. Somit erhielt man die Enthalpiefunktion, im Folgenden H-Funktion genannt. Diese wurde dann im Temperaturbereich bis 5000 K um die Integrationskonstante ergänzt. Bis zu 5000 K war die H-Funktion aus dem JANAF – Modell bekannt. Somit wurde die Integrationskonstante für die Werte im tieftemperatur Regressionspolynom bestimmt. Es wurde darauf geachtet, dass der Enthalpiewert bei 100 K genau übereinstimmt. Es hätte aber auch jede andere Temperatur als Vergleichstemperatur gewählt werden können. Da aber vor allem im niedrigen Temperaturbereich die Übereinstimmung zwischen der Funktion aus dem JANAF-Modell und der eigenen Regression sehr gut ist, liefert auch die Integration sehr idente Werte.

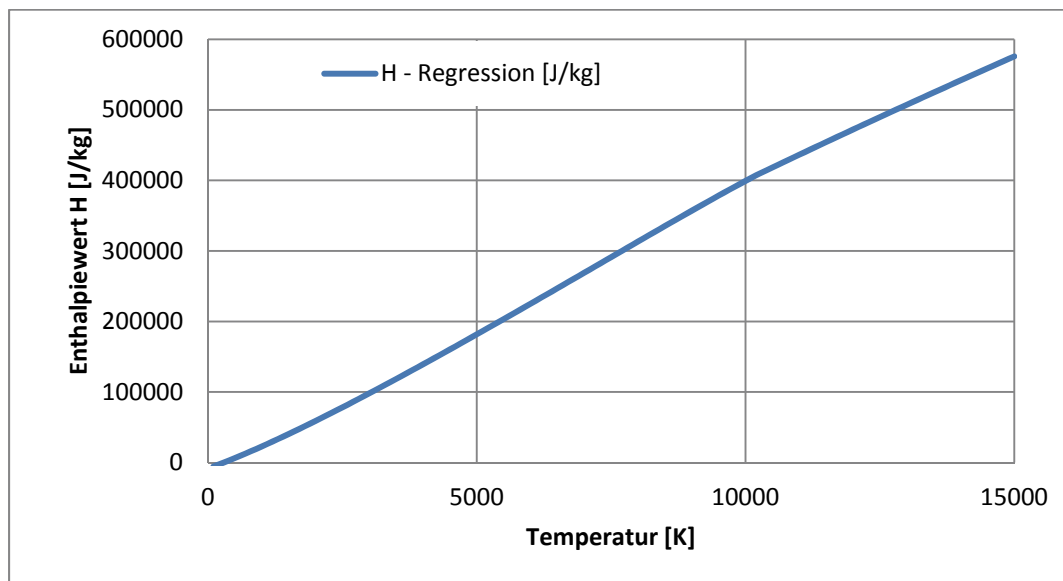
Die Funktion, welche für die Berechnung von $H(T)$ herangezogen wird, wird im Folgenden gezeigt. Wobei $a\{1\}$ bis $a\{5\}$ die gleichen Werte wie die c_p – Funktion sind und $a\{6\}$ die Integrationskonstante darstellt, welche bestimmt werden soll.

$$H(T) = R * \left(a\{1\} * T + a\{2\} * \frac{T^2}{2} + a\{3\} * \frac{T^3}{3} + a\{4\} * \frac{T^4}{4} + a\{5\} * \frac{T^5}{5} + a\{6\} \right) \quad (3-3)$$

Das Polynom für höhere Temperaturen, also jene Temperaturen ab der Umschalttemperatur von 11120 K, wurde durch Angleichen an den Endwert des Tieftemperaturpolynoms bestimmt. Da es zu keiner Phasenumwandlung im Gas kommt muss die H-Funktion in Abhängigkeit der Temperatur eine Funktion sein, welche keine Sprungstellen besitzt. Daher kann der Anfangswert des Hochtemperaturpolynoms als Endwert des Tieftemperaturpolynoms, beide ausgewertet bei 11120 K, genommen werden. Dadurch lässt sich die Integrationskonstante für die H-Funktion bei Temperaturen oberhalb der Umschalttemperatur bestimmen. Eine Anpassung an die Daten des JANAF – Modells ist nicht möglich, da dieses bei 5000 K endet. Theoretisch wäre auch eine Anpassung an die Werte aus dem HSC-Datenauszug möglich. Somit wäre eine exaktere Bestimmung der Integrationskonstante möglich. Es würde dann aber eine Sprungstelle in der H-Funktion auftreten, was zu erheblichen Problemen in der Simulation führen würde. Es würde dadurch die Berechnung instabil werden, da entweder hohe Gradienten auftreten oder einem Enthalpiewert zwei verschiedene Temperaturen zugeordnet werden könnten.

Tabelle 2: Übereinstimmung der H-Funktionen aus dem JANAF – Modell und der Regression

Temperatur [K]	H - JANAF [J/kg]	H - Regression [J/kg]
100	-5800	-5800
500	6086	6326
1000	22706	22762
2000	59202	58903
5000	178467	181717

Abbildung 11: Verlauf der Enthalpiefunktion für O₂

Wie in Abbildung 11 gut zu erkennen ist, kommt es im Bereich von 11120 K zu keinem Knick oder Sprung in der Kurve. Dies wirkt sich günstig auf die Stabilität der Berechnung aus.

Durch die Auswertung ergibt sich für die Integrationskonstante $a\{6\}$ von Sauerstoff ein Wert von -1043,63 J/kg.

3.1.3 Bestimmung der Entropiekonstante

Die Bestimmung des letzten Einstellparameters $a\{7\}$, welcher die Integrationskonstante der Entropiefunktion darstellt wurde exakt gleich vorgenommen wie die Bestimmung der Enthalpiefunktion. Es wurden wieder die neuen Werte der Regression mit den zur Verfügung stehenden Werten aus dem JANAF-Modell verglichen und die Anpassung unter den bereits beschriebenen Gesichtspunkten vorgenommen. Die Entropiefunktion erhält man durch die Auswertung folgende Gleichung:

$$S(T) = R * \left(a\{1\} * \ln(T) + a\{2\} * T + \frac{a\{3\} * T^2}{2} + \frac{a\{4\} * T^3}{3} + \frac{a\{5\} * T^4}{4} + a\{7\} \right) \quad (3-4)$$

Für den Einstellparameter $a\{7\}$ ergibt sich dadurch ein Wert von: 5,04 J/(kg*K)

3.1.4 Zusammenfassung der Ergebnisse der Thermodynamikdatenanpassung

Tabelle 3: Ergebnisse der Thermodynamikanpassung bis 11120 Kelvin

Einstellparameter	Sauerstoff	Stickstoff	Kohlendioxid	Wasserdampf	Ölsäuredampf
a{1}	3.408E+00	3.255E+00	4.048E+00	3.672E+00	4.807E+01
a{2}	8.499E-04	8.735E-04	2.885E-03	1.557E-03	7.090E-02
a{3}	-1.719E-07	-2.151E-07	-8.267E-07	-1.976E-07	-2.013E-05
a{4}	1.877E-11	2.178E-11	9.946E-11	9.914E-12	2.264E-09
a{5}	-8.559E-16	-6.626E-16	-3.958E-15	-1.776E-16	-8.775E-14
a{6}	-1.043E+03	-1.015E+03	-4.851E+04	-3.026E+04	-3.255E+04
a{7}	5.043E+00	4.188E+00	2.690E+00	1.251E+00	-8.044E+01

Tabelle 4: Ergebnisse der Thermodynamikanpassung ab 11120 Kelvin

Einstellparameter	Sauerstoff	Stickstoff	Kohlendioxid	Wasserdampf	Ölsäuredampf
a{1}	5.413E+00	6.856E+00	1.014E+01	7.505E+00	1.194E+02
a{2}	-1.209E-04	-6.580E-05	0.000E+00	-4.288E-05	0.000E+00
a{3}	2.274E-09	5.681E-10	0.000E+00	7.886E-10	0.000E+00
a{4}	-1.680E-14	-1.479E-15	0.000E+00	-5.729E-15	0.000E+00
a{5}	4.166E-20	0.000E+00	0.000E+00	1.404E-20	0.000E+00
a{6}	-6.722E+02	-2.110E+04	-7.125E+04	-3.301E+04	-3.255E+04
a{7}	-8.288E+00	-2.480E+01	-4.266E+01	-2.507E+01	-8.044E+01

3.2 Anpassung kinetischer Parameter

3.2.1 Modellierung der Ölsäureverbrennung

Um nun die Verbrennung der Ölsäuredämpfe modellieren zu können, musste ein geeignetes Kinetikmodell gefunden werden. In diesem Fall war das irreversible Arrheniusreaktionsmodell bestens geeignet. Es kommt bei der Verbrennung zu einer Reaktion bei welcher die Edukte vollständig in Produkte übergeführt werden. Der Gleichgewichtszustand liegt dabei vollständig auf Seiten der Verbrennungsprodukte. Dem Modell wird die Verbrennung nach der Arrheniusgleichung zugrundegelegt [9].

$$k = A * e^{-\frac{E_A}{R*T}} \quad (3-5)$$

Das Hauptproblem bei der Beschreibung der Reaktion ist es, dass in der Literatur keine geeigneten Werte für die Kinetik zu finden sind. Es wurden bereits viele Veröffentlichungen zur Kinetik des mikrobiologischen Abbaus von Ölsäure gemacht, welche aber alle im Temperaturbereich bis ca. 100 °C liegen. Für die direkte Verbrennung bei Temperaturen von 500 °C bis 2000 °C konnten aber keine geeigneten Werte gefunden werden. Den Reaktionsmechanismus der Biodieselvebrennung, welcher in der Literatur zu finden war, zu verwenden, war nicht möglich. Da es sich bei Biodiesel trotz ähnlicher Molekülstrukturen, um ein Stoffgemisch von tausenden Spezies handelt, kann der Reaktionsmechanismus nicht verwendet werden. Es wäre die Wahrscheinlichkeit sehr groß, dass Moleküle enthalten sind, welche sehr schnell reagieren und dadurch die Beschreibung der Kinetik verfälschen.

3.2.2 Lösen des Reaktions – Mechanismus

Um nun die Verbrennung beschreiben zu können, wurde ein anderer Weg gewählt. Es konnte ein Mechanismus gefunden werden, welcher die Verbrennung verschiedenster Spezies beschreibt [10]. Dabei wird aber nicht nur die Verbrennung als Einschrittmechanismus beschrieben, sondern auch alle Gleichgewichte der Zwischenprodukte. In Summe beinhaltet der Mechanismus die Verbrennungsreaktionen der wichtigsten organischen Stoffe mit einer Kettenlänge zwischen sieben und 14 Kohlenstoffatomen. Kohlenstoffatome, welche sich in den funktionellen Gruppen befinden, kommen noch zusätzlich zu der bereits genannten Anzahl hinzu. Zur besseren Darstellung werden im Folgenden die Spezies nur anhand der Kohlenstoffanzahl im Molekül benannt. Besteht das Molekül aus beispielsweise 14 Kohlenstoffatomen so wird die Spezies als C₁₄

benannt. Der Mechanismus beinhaltet dabei die relevanten thermodynamischen Parametern und die Daten der Reaktionskinetik. Ausgehend von diesen Daten wurde ein Matlab – Programm erstellt, welches unter Zuhilfenahme des chemischen Rechenprogramms „Cantera“, jeweils die Verbrennung einer bestimmten Spezies berechnet. Theoretisch wäre es möglich, diesen Reaktionsmechanismus im Chemkin – Format direkt in OpenFOAM zu lösen. Jedoch würde die Berechnung jeder einzelnen Spezies des Mechanismus einen unnötigen bzw. nicht umsetzbaren Rechenaufwand bedeuten. Deshalb wurde ein Reaktionsmechanismus entwickelt, welcher die Kinetik des Stoffabbaus der Brennstoffe in gleicher Weise beschreibt, jedoch nur eine einzelne Reaktion zu lösen bedeutet. Dazu wurden die Konzentrationen aller Spezies auf null gesetzt und die zu verbrennende Spezies mit dem Startkonzentrationswert der Verbrennung belegt. Neben den Konzentrationen von Brennstoff, Sauerstoff und Stickstoff mussten auch Parameter wie Druck, Temperatur und Volumen gesetzt werden. Nach der Initialisierung der Parameter wurde die Berechnung zeitdiskret durchgeführt. Es wurde versucht den Verbrennungsvorgang, also das abreagieren der Startbrennstoffkonzentration auf unter fünf Prozent des Startwerts in 200 Zeitschritten zu lösen. Als Ausgabewerte der Matlabkalkulation dienten die Stoffabbauwerte und die Zeitwerte jedes einzelnen Testfalls. Um nun die Verbrennung der Ölsäure zu berechnen, musste eine Extrapolation vorgenommen werden. Im vorliegenden Reaktionsmechanismus waren nur Spezies bis zu C_{15} bekannt. Bei Ölsäure handelt es sich aber um ein C_{18} Molekül. Deshalb wurden die Werte von C_{12} bis C_{15} berechnet und anschließend eine Extrapolation auf C_{18} durchgeführt.

Die Berechnung des Reaktionsmechanismus lieferte folgende exemplarische Lösung

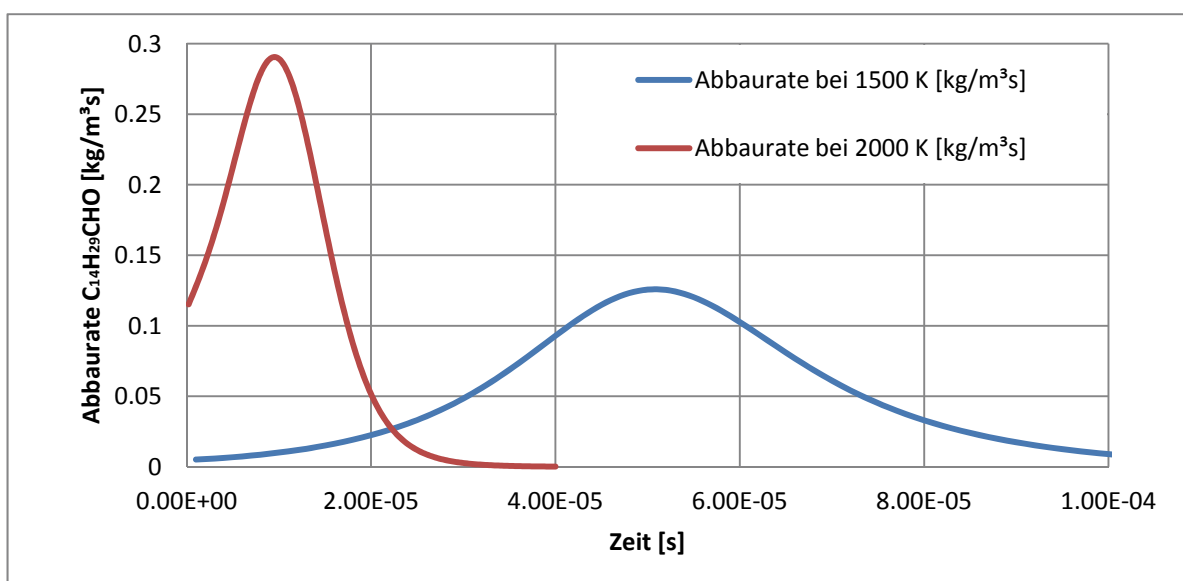


Abbildung 12: Lösung des Reaktionsmechanismus bei unterschiedlicher Temperatur

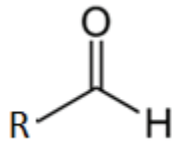
Es ist gut zu erkennen, dass die Reaktion durch Radikalbildung, welche durch den Abbau der langen Molekülketten entstehen, beschleunigt wird. Dies ist dadurch erkennbar, dass nicht bei Beginn der Kalkulation die höchste Reaktionsrate auftritt, sondern erst im späteren Verlauf der Reaktion. Es beschleunigen also die Verbrennungsprodukte bzw. Zwischenprodukte die Verbrennung. Es stellte sich dann die Frage wie die Reaktionsrate von diesem Batchprozess auf den kontinuierlichen Verbrennungsprozess der Staubexplosion übergeführt werden soll. Zuerst wurde der Weg des Mittelwertes gewählt. Es wurde der Mittelwert der Abbaurate zwischen Beginn der Berechnung und dem Vorliegen von fünf Prozent der Anfangskonzentration berechnet. Dies führe aber zu sehr geringen Umsetzungsraten in der Simulation sowie zu der Tatsache, dass der Staub nur mehr mit extrem hohen Zündenergien entzündet werden kann. Dies kann keinesfalls der richtige Weg gewesen sein, da die Werte aus der Simulation und dem Versuch zu weit abweichen.

3.2.3 Modellvorstellung der Verbrennung in der Flammenfront

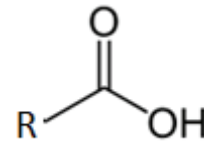
Anschließend wurde die Kalkulation der Kinetik mit der maximalen Reaktionsrate durchgeführt und neu erprobt. Nun zeigte sich ein reales Verhalten. Die Modellvorstellung, welche die maximale Reaktionsrate bekräftigt, ist Folgende. Es wird davon ausgegangen, dass in der Reaktionsfront durch die vorliegenden Partikel, die hohen Temperaturen und der Strömungen eine sehr gute Durchmischung auftritt. In der Berechnung des Reaktionsmechanismus zeigte sich, dass nicht sofort CO_2 entsteht. Dieses wird erst nach einer gewissen Zeit gebildet. Bei den relevanten Temperaturen waren dies Zeitwerte von etwa $1 \mu\text{s}$ bei 1500 K . Der zeitliche Versatz entsteht dadurch, dass die Reaktion aus vielen Folgereaktionen mit einer Vielzahl an Zwischenprodukten besteht. Da aber die Umsetzung im Vergleich zur Flammenfortsetzung sehr schnell ist, kann davon ausgegangen werden, dass die Reaktionszone sehr dünn ist. Durch die hohe Turbulenz in der Flammenfront kommt es zu einer guten Durchmischung. Daher liegen die Zwischenprodukte, welche die Reaktion beschleunigen, gemeinsam mit den Edukten vor. Es kommt dann also zu der besagten Reaktionsbeschleunigung durch Radikale und es ist legitim, die maximale Reaktionsrate für die Berechnung zu verwenden. Die Modellvorstellung der Flammenfront ist also eine sehr gut durchmischte Reaktionszone in der die Zwischenprodukte gemeinsam mit den Edukten und Produkten vorliegen.

3.2.4 Extrapolation der kinetischen Parameter

Es ist bekannt, dass ähnliche Moleküle mit ähnlichen Molekülstrukturen auch vergleichbare chemische Eigenschaften haben. So kann beispielsweise das Ansteigen der Schmelzpunkte länger werdender Molekülketten beobachtet werden. Ähnliche Phänomene gibt es auch bei Dampfdruck, Wärmekapazität und bei kinetischen Parametern. Es wurde also davon ausgegangen, dass der Trend der Reaktionskinetik ebenfalls besteht. Dies wurde anhand einer Auswertung von bekannten Daten in Abbildung 14 bewiesen. Zuerst wurde eine Spezies ausgewählt, welche der Fettsäuren am ähnlichsten ist. Dies musste gemacht werden, da die Carbonsäuren nicht im Reaktionsmechanismus enthalten waren. Es wurde dann die Entscheidung getroffen, die Stoffgruppe der Aldehyde zu wählen. Diese kommen dem Strukturaufbau am nächsten.



Aldehydrest



Carbonsäurerest

Abbildung 13: Unterschiede der Struktur von Aldehyden und Carbonsäuren

Nun wurde der Mechanismus für eine Stoffgruppe für unterschiedlichste Temperaturen von $\text{C}_{11}\text{H}_{23}\text{COH}$ bis $\text{C}_{14}\text{H}_{29}\text{COH}$ gelöst. Anschließend wurde analysiert wie sich die Abbauraten der verschiedenen Spezies mit aufsteigender Anzahl der Kohlenstoffatome bei konstanter Temperatur verhalten.

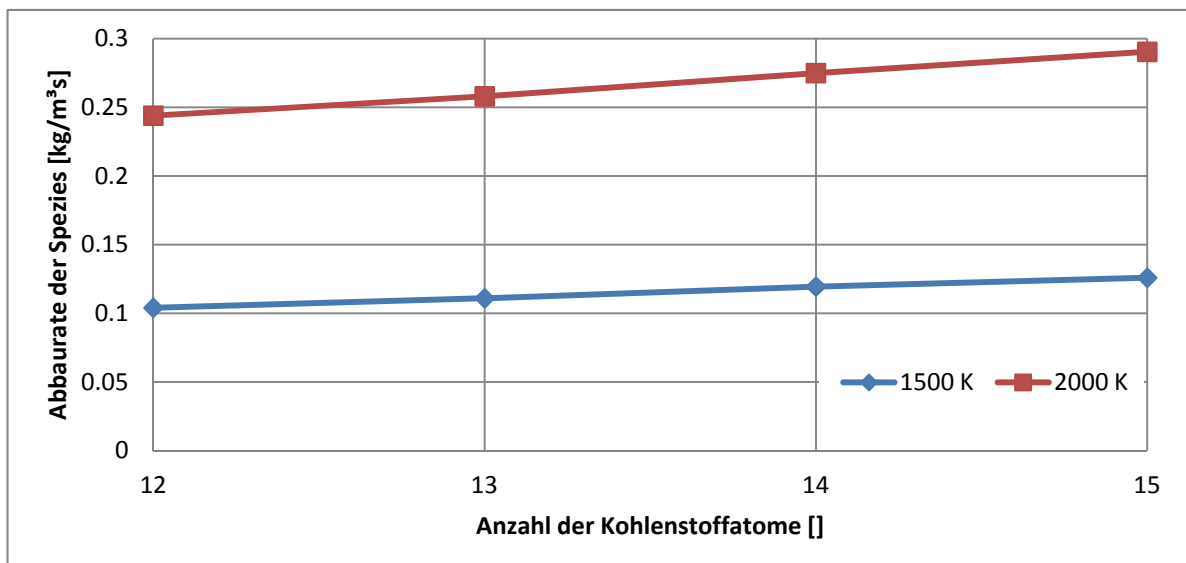


Abbildung 14: Darstellung des linearen Verhaltens zwischen Abbauraten und Anzahl der C-Atome

Es zeigt sich also, dass eine lineare Abhängigkeit zwischen der Stoffabbaurate in $[\text{kg}/\text{m}^3\text{s}]$ und der Anzahl der Kohlenstoffatome vorliegt. Es muss dann natürlich noch eine entsprechende Umrechnung der Werte erfolgen, da die Moleküle unterschiedliche Molmassen besitzen. Da auch in allen anderen Temperaturbereichen eine lineare Abhängigkeit vorliegt, wurde die lineare Extrapolation gewählt. Die Verläufe der anderen Temperaturen werden hier aufgrund des hohen Platzbedarfs nicht dargestellt. Die Linearität wurde aber nachgewiesen.

Nun erfolgte die Extrapolation der Werte. Für jede Temperatur wurden anhand der Messwerte von C_{12} bis C_{15} die Werte linear so extrapoliert, dass man die Abbaurate der C_{18} Spezies erhält.

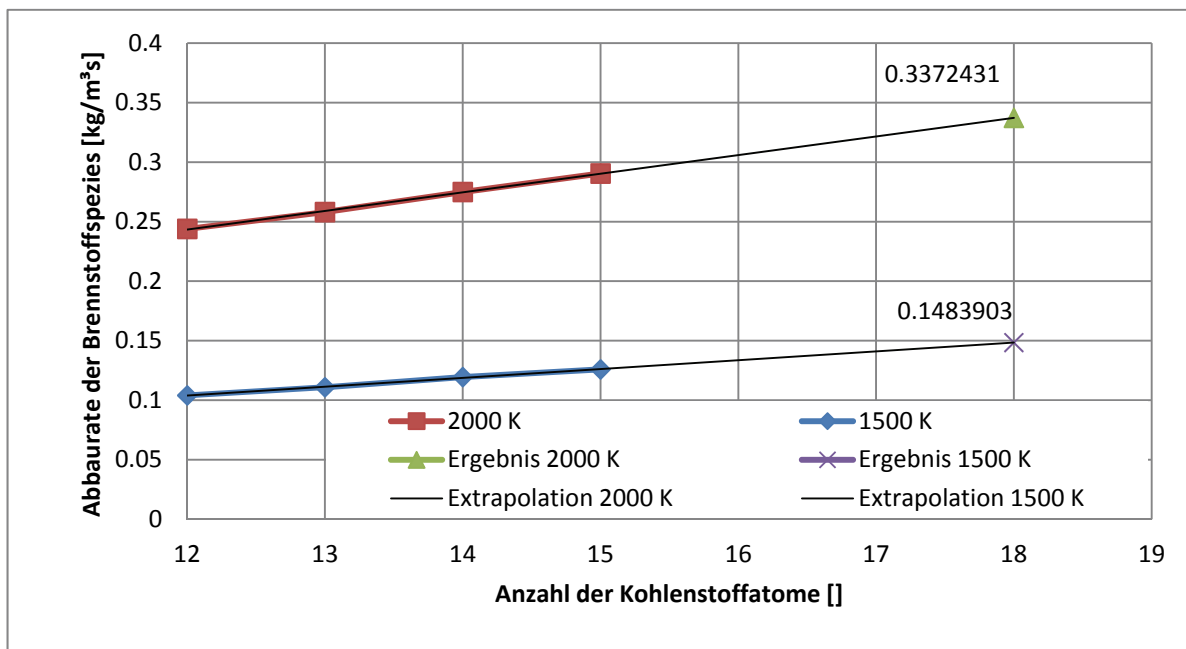


Abbildung 15: Extrapolation der Berechnungswerte für das Kinetikmodell

In Abbildung 15 ist die Berechnung der Kinetik beim C_{18} Molekül dargestellt. Im Diagramm wurden aufgrund der besseren Darstellbarkeit nur zwei Temperaturen abgebildet. Die Extrapolation erfolgte durch insgesamt neun verschiedene Temperaturen im Temperaturbereich zwischen 1000 Kelvin und 3750 Kelvin. Als zehnten bekannten Punkt wurde bei der Temperatur $T=0$ Kelvin die Reaktionsrate auf null gesetzt. Da beim absoluten Nullpunkt keine atomare Bewegung mehr stattfindet, kann auch keine Reaktion mehr stattfinden, da es zu keinen Zusammenstößen der Atome bzw. Moleküle mehr kommt. Unter 800 Kelvin konnte der Mechanismus nicht mehr sinnvoll gelöst werden. Die Reaktionszeit verlängerte sich sehr stark und der zeitliche Versatz zwischen dem Abbau der Edukte und dem Entstehen der Produkte war zu groß. Deshalb war es sinnvoller diesen

Temperaturbereich durch Interpolation des bekannten Punktes bei 0 Kelvin und bei 800 Kelvin abzubilden. Abbildung 15 zeigt das Ergebnis der vorgenommenen Extrapolation. Im Allgemeinen erhält man jene Kurve wie sie die Theorie vorhersagt, nur dass es bei 2500 Kelvin zu größeren Abweichungen kommt. Dies kann auf den Effekte der Reaktionsbeschleunigung durch Radikalbildung zurückzuführen sein. Es handelt sich bei diesem Reaktionssystem um eine sehr komplexe Reaktion mit hunderten Zwischenspezies mit vielen Parallel- und Folgereaktionen. Eine weitere Ursache könnte die Extrapolation selbst sein. Die Extrapolation wurde aus einem Datensatz von vier Messwerten durchgeführt und überstreckt vom letzten bekannten Messwert ein Intervall, welches genau so groß ist, wie der Bereich der bekannten Punkte. Es wird also eine Extrapolation über einen großen Bereich durchgeführt und die Daten dafür entstammen aus nur 4 Messwerten. Hier kann es durch eine Ungenauigkeit von einem Messwert dann zu größeren Abweichungen kommen.

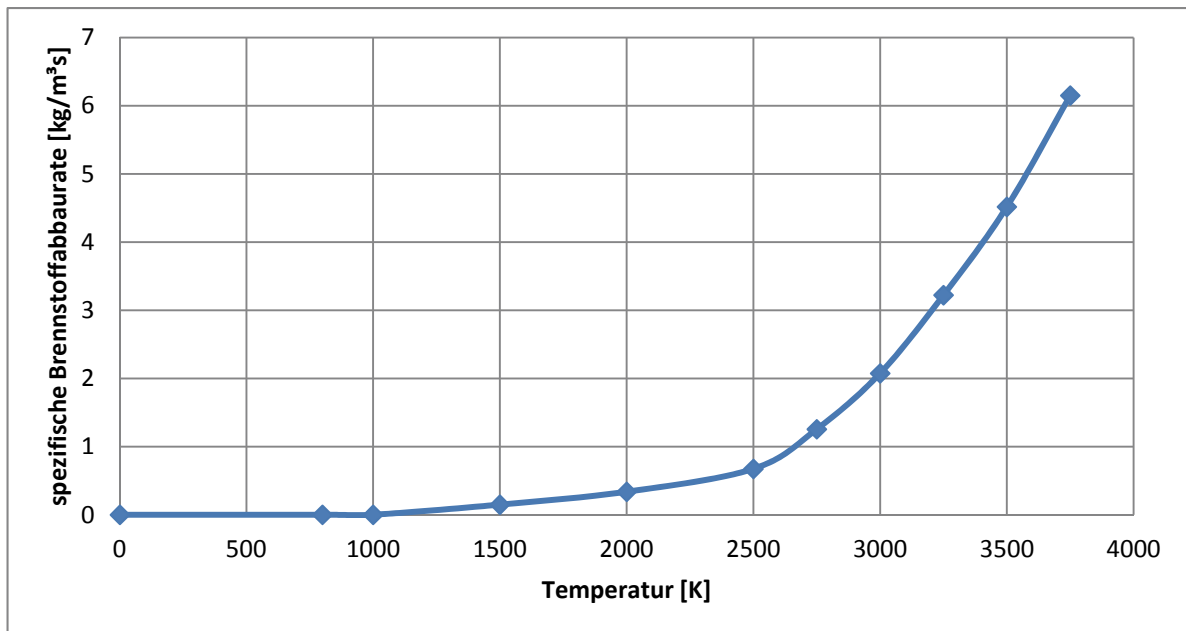


Abbildung 16: Ergebnis der Extrapolation

3.2.5 Ermittlung der Einstellparameter der Arrheniusgleichung

Aus den Stoffabbauraten wurden anschließend über mehrere Zwischenschritte die beiden charakteristischen Konstanten T_A und A berechnet. Im Allgemeinen besitzt die Arrheniusgleichung drei Einstellparameter. Dies sind der präexponentielle Faktor A , der Exponentenkoeffizient T_A und die Temperatur bei welcher die Reaktion stattfindet. Wobei die beiden Faktoren A und T_A , Konstanten der Reaktion darstellen [9]. Die Reaktion ist also dann nur mehr von der Temperatur T abhängig.

$$k = A * e^{-\frac{E_A}{R*T}} \quad (3-6)$$

In OpenFOAM wird diese Gleichung etwas anders modelliert. Die Aktivierungsenergie E_A und die Gaskonstante R werden zusammengefasst und als T_A bezeichnet.

$$k = c_A * c_B * A * e^{-\frac{T_A}{T}} \quad (3-7)$$

Die allgemeine Vorgehensweise gliedert sich wie folgt. Aus dem Kurvenverlauf von Abbildung 16 kann direkt die Aktivierungsenergie T_A bestimmt werden. Dazu wird die Gleichung an die Berechnungswerte der Matlab – Simulation angepasst.

$$A * e^{-\frac{T_A}{T}} = \frac{k}{c_A * c_B} \quad (3-8)$$

Der Faktor $c_A * c_B * A$ wird zusammengefasst auf einen Faktor A_1 , dieser ist für die Anpassung erforderlich aber im weiteren Verlauf irrelevant. Es wird dann die Summe der Abstandskvadrat bei den Versuchstemperaturen gebildet. Anschließend werden die Werte T_A und A_1 so variiert, dass die Summe der Abstandskvadrat der Funktion und der Berechnungswerte der Matlab – Simulation minimal werden. Dadurch ist die Aktivierungstemperatur T_A bestimmt.

Aus den Stoffabbauraten der C_{18} Spezies bei der jeweiligen Temperatur wurden durch Umrechnung zuerst die Konzentrationen berechnet. Aus den Konzentrationsänderungen konnten anschließend durch Umformung der Arrheniusgleichung die Konstanten A und T_A berechnet werden. Diese sollten theoretisch für jede Temperatur den gleichen Wert liefern, da sie Konstanten für die jeweilige Reaktion sind. Für den Faktor T_A trifft dies zu; dieser wird durch Regression an die gesamte Kurve bestimmt. Aus dem nun bekannten T_A , kann die Konstante A für jede Versuchstemperatur bestimmt werden. Diese leicht variierenden Werte werden anschließend gemittelt. Tabelle 5 zeigt die Berechnung des Stoßfaktor A anhand der Werte aus der Matlabberechnung. Die Abbauraten waren jene Größe, welche zuvor per

Extrapolation ermittelt wurde. Dies wurde über die Molmasse der Ölsäure auf die Abbaurrate in $[\text{mol}/\text{cm}^3\text{s}]$ umgerechnet.

Die Sauerstoffkonzentration wurde mit 21 %_{Vol} festgesetzt. Daraus ergibt sich dann eine Stickstoffkonzentration von 79 %_{Vol} so wie dies in der Luft tatsächlich vorliegt. Auf die Berücksichtigung von Argon, CO₂ und diverser Spuren von Edelgasen wurde aufgrund der geringen Mengen verzichtet. Die Brennstoffmenge wurde so gering gewählt, dass nur wenige Prozente des vorliegenden Sauerstoffs reagieren. Die Zusammensetzung bestand aus einem Mol Brennstoff, 320 Mol O₂ und 1200 Mol N₂. Durch den hohen Sauerstoffüberschuss ergibt sich der Vorteil, dass dessen Konzentration während der Reaktion als konstant angesehen werden kann. Da sich aber die Temperatur von Versuchsfall zu Versuchsfall erhöht und die Berechnung bei einem Absolutdruck von einem Bar durchgeführt wurde, erniedrigt sich die Sauerstoffkonzentration bei steigender Temperatur aufgrund der Gasausdehnung. Die anfängliche Brennstoffkonzentration wurde durch zwei dividiert. Da der Brennstoff aufgrund des Sauerstoffüberschusses vollständig reagiert, ist dessen mittlere Konzentration genau die Hälfte der Anfangskonzentration. Durch Umformung von der oben genannten Formel kann nun die konzentrationsunabhängige Reaktionsgeschwindigkeit berechnet werden. Dies ist ein Zwischenwert der Berechnung.

$$A * e^{-\frac{T_A}{T}} = \frac{k}{c_A * c_B} \quad (3-9)$$

Der Verlauf der Exponentialfunktion ist bereits bekannt. In einem früheren Schritt wurde bereits die Aktivierungstemperatur T_A bestimmt. Um den Stoßfaktor A zu erhalten, muss die konzentrationsunabhängige Reaktionsgeschwindigkeit noch durch den Wert der e-Funktion dividiert werden. Somit erhält man den Stoßfaktor A, welcher neben der Aktivierungstemperatur T_A einer der beiden Einstellfaktoren für die Arrheniusgleichung in OpenFOAM ist. Den endgültigen Wert für A erhält man indem man die Einzelwerte mittelt.

Tabelle 5: Berechnung des Stoßfaktors A aus den Abbauraten der Matlab - Kalkulation

Temperatur [K]	Abbaurate [kg/m ³ s]	Abbaurate [mol/m ³ s]	Abbaurate k [mol/cm ³ s]	Sauerstoff-Konzentration [mol/cm ³]	Brennstoff-Konzentration [mol/cm ³]	konzentrationsunabhängige Reaktionsgeschw. $A \cdot e^{T_A/T}$ [cm ³ /mol*s]	e-Funktionswert []	Stoßfaktor A [cm ³ /mol*s]
800	0.0054	0.0239	2.391E-08	3.163E-06	5.272E-09	1.434E+06	0.0010	1.455E+09
1000	0.0214	0.0955	9.546E-08	2.531E-06	5.272E-09	7.156E+06	0.0039	1.819E+09
1500	0.1355	0.6048	6.048E-07	1.687E-06	5.272E-09	6.800E+07	0.0249	2.729E+09
2000	0.3410	1.5222	1.522E-06	1.265E-06	5.272E-09	2.282E+08	0.0627	3.639E+09
2500	0.5933	2.6485	2.648E-06	1.012E-06	5.272E-09	4.963E+08	0.1091	4.548E+09
2750	0.7256	3.2393	3.239E-06	9.202E-07	5.272E-09	6.677E+08	0.1335	5.003E+09
3000	0.8582	3.8313	3.831E-06	8.435E-07	5.272E-09	8.616E+08	0.1579	5.458E+09
3250	0.9892	4.4159	4.416E-06	7.786E-07	5.272E-09	1.076E+09	0.1819	5.913E+09
3500	1.1172	4.9875	4.987E-06	7.230E-07	5.272E-09	1.308E+09	0.2055	6.368E+09
3750	1.2415	5.5424	5.542E-06	6.748E-07	5.272E-09	1.558E+09	0.2283	6.823E+09
Mittelwert:								4.376E+09

3.2.6 Anpassung durch Multireaktionssystem und Ergebnisse

Bei der Berechnung dieser Werte trat folgendes Problem auf. Es gab zwei Möglichkeiten die Kurve anzugleichen. Entweder bei sehr niedrigen Temperaturen oder bei sehr hohen. Das Problem war Folgendes: Wurde die Kurve bei tiefen Temperaturen angeglichen, so konnte der Zündvorgang relativ gut abgebildet werden. Jedoch nur bei einer Zündung bei tiefen Temperaturen. Die Regression lieferte bei hohen Temperaturen sehr große Abweichungen, da die Regression nur einen Bruchteil der Reaktionsrate ergab als die Kalkulation. Die Berechnung lieferte also eine viel zu geringe Reaktionsrate bei hohen Temperaturen und daher eine schlechte Abbildung des Brennvorgangs. Würde die Kurve aber bei hohen Temperaturen optimiert werden, so kann zwar eine bestehende Verbrennung gut abgebildet werden, der Zündvorgang jedoch nicht mehr, da für tiefe Temperaturen eine viel zu geringe Reaktionsrate berechnet werden würde. Die Lösung des Problems war es die Reaktion mit mehr als nur einer Reaktionsgleichung abzubilden. Es reichten zwei Reaktionen um eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den Reaktionsdaten und der Reaktionsgleichung zu erreichen. Es wurde zuerst die Regression durch Minimieren der

Abstandsquadrate zwischen der anzuleichenden Funktion und der Regression im Temperaturbereich bis 2000 K durchgeführt. Anschließend wurde die Summe aus Reaktion 1 und Reaktion 2 gebildet. Anschließend wurde die Regression 2 im Temperaturbereich ab 2500 K so angeglichen, dass das Abstandsquadrat der anzuleichenden Funktion und der Summe aus Reaktion 1 und Reaktion 2 minimiert wird.

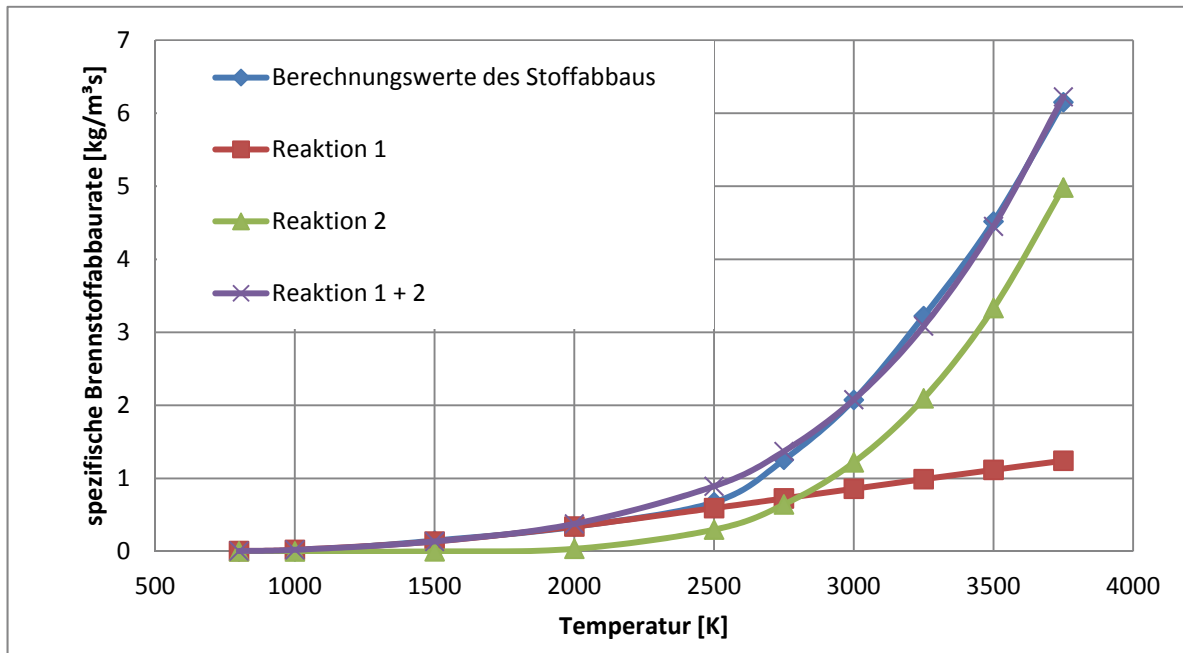


Abbildung 17: Übereinstimmung der Berechnungswerte und der beiden Modellreaktionen

Wie in Abbildung 17 erkennbar ist, lässt sich die Kurve der berechneten Reaktionsrate (blau) sehr gut über die beiden Reaktionen 1 + 2 annähern. Lediglich im Temperaturbereich von 2200 bis 2700 Kelvin kommt es zu sichtbaren Abweichungen. Prinzipiell könnte die Kurve durch sehr viele Einzelreaktionen noch besser angenähert werden. In diesem Falle wurde aber darauf verzichtet, da dies eine weitere Verlängerung der Simulationszeit bedeutet hätte.

Tabelle 6: Einstellparameter für die beiden Arrheniusreaktionen

	Reaktion 1	Reaktion 2
Aktivierungstemperatur T_A [K]	5538.32	21108.87
Stoßfaktor A [$\text{cm}^3/\text{mol}\cdot\text{s}$]	4.3755E+09	7.3807E+09

3.2.7 Modellabweichungen und Einschränkungen

Das gewählte Reaktionsmodell ermöglicht es auf einfache Art und Weise die komplexe Reaktion zu beschreiben. Durch die Zusammenfassung aller Reaktionen auf einen „Single – Step – Mechanismus“, also auf eine Reaktion, welche nicht die tatsächliche Abfolge von Reaktionen betrachtet, sondern nur die Umsetzung der Ausgangsstoffe in die Produkte, ergeben sich verschiedene Vor- und Nachteile. Dies hat den Vorteil, dass das Lösen des Reaktionsmechanismus sehr wenig Zeit in Anspruch nimmt, da nur eine Reaktionsgleichung gelöst werden muss. Abgesehen davon wäre es mit dem zur Verfügung stehenden Mechanismus gar nicht möglich gewesen, die Reaktion exakt zu beschreiben, da die Daten bei C_{15} endeten und den Bereich der Ölsäure nicht mehr abgedeckt hätten. Bei sehr tiefen Temperaturen unter 800 Kelvin ist der Effekt der zeitlichen Verzögerung zwischen dem Abbau des Brennstoffs und der Bildung der Produkte zunehmend ausgeprägt. Dieser Effekt kann im Single – Step – Mechanismus nicht abgebildet werden. Daher kommt es bei tieferen Temperaturen zunehmend zu Abweichungen. Oberhalb von 3750 Kelvin wurde der Mechanismus nicht mehr gelöst. In diesem Bereich ist die Verbrennung ohnehin mischungslimitiert, da die Umsetzung in diesem Temperaturbereich sehr schnell abläuft.

Das Modell betrachtet nicht nur die Umsetzung der Edukte als Einschrittmechanismus sondern natürlich auch die Wärmefreisetzung. Wärmefreisetzung und Stoffumsatz sind durch die Berechnung gekoppelt. Das heißt, dass auch hier eine Verzerrung auftritt, welche aber gering ist, wenn die Reaktionsgeschwindigkeit im Vergleich zur Flammenfortpflanzung hoch ist.

3.3 Dampfdruck der Ölsäure

Wie noch später gezeigt wird, wird das Verdampfungsverhalten und somit die Pyrolyse der Ölsäure in der Modellvorstellung über den Dampfdruck und den Enthalpietransfer auf das Partikel berechnet. Dazu war es wichtig, den Dampfdruck der Ölsäure möglichst genau abzubilden, um das Verdampfungsverhalten exakt beschreiben zu können. Neben der Verbrennung ist dies der zentrale Schritt, welcher einen großen Einfluss auf die Berechnungsgenauigkeit hat. Dazu konnte in der Literatur die Antoine Gleichung sowie deren Werte für die Ölsäure gefunden werden [11] [12].

$$\log_{10}(p) = A - \left(\frac{B}{T+C} \right) \quad (3-10)$$

Zu beachten ist, dass der Druck p in diesem Falle in bar eingesetzt werden muss. Die Parameter A bis C stellen die Stoffkonstanten dar und T die Temperatur in Kelvin.

Tabelle 7: Antoineparameter der Ölsäure [12]

Temperatur [K]	A	B	C
449.7 – 633	5.04842	2555.604	-127.258

Da auch in diesem Fall, wie bei den c_p – Funktionen, ein anderes Einstellpolynom in OpenFOAM verwendet wird, mussten auch diese Parameter transformiert werden. Dies wurde analog, wie bei den c_p – Funktionen durchgeführt. Es wurden die neuen Einstellparameter mittels geringstem Fehlerquadrats ermittelt. Die Gültigkeit der Formel ist nicht über den gesamten Temperaturbereich gegeben, außerhalb des Temperaturbereichs ist mit größeren Abweichungen zu rechnen. Da aber genauere Daten fehlten, wurde die Formel trotzdem für den gesamten Temperaturbereich verwendet. Wobei auch erwähnt werden muss, dass im Temperaturbereich unter 450 Kelvin ohnehin wenig Verdampfung auftritt und die Partikeltemperatur aufgrund des Berechnungsmodells bei 1 bar auch nicht über 633 Kelvin steigen kann, solange noch Ölsäure zum Verdampfen vorhanden ist. Mittels der Regressionsformel, welche OpenFOAM verwendet, konnte die Kurve sehr genau nachgebildet werden.

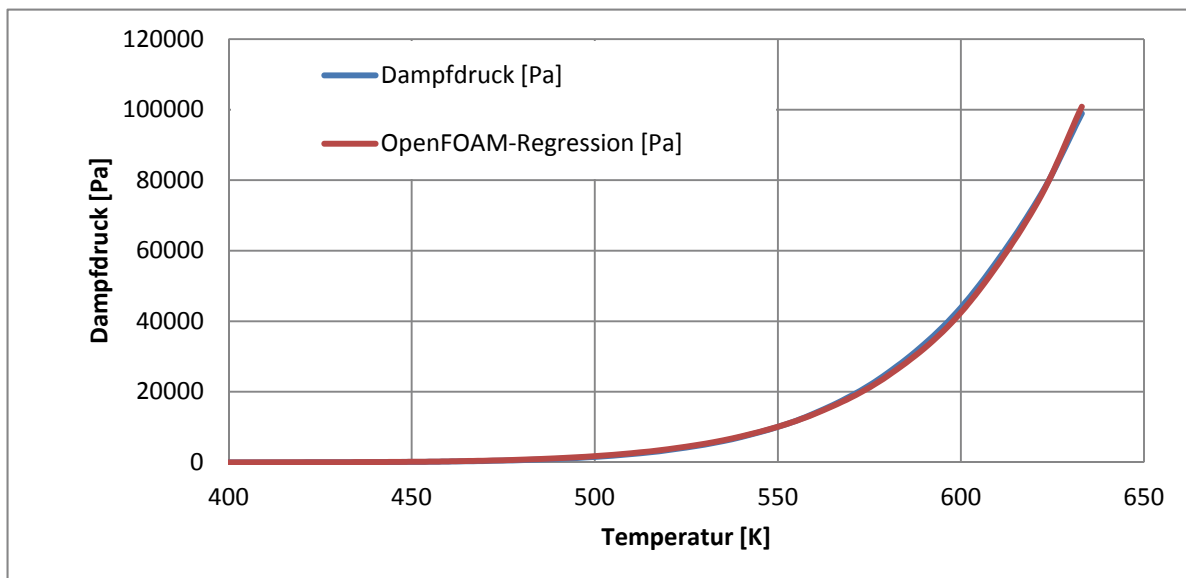


Abbildung 18: Anpassung des Dampfdrucks der Ölsäure

3.4 Anpassung der Ölsäuredaten

Neben der Anpassung der thermodynamischen Daten und der kinetischen Parameter der Verbrennung musste noch eine neue Spezies in OpenFOAM eingeführt werden, und zwar die der Ölsäure. Diese Datei beschreibt die physikalischen Eigenschaften des Stoffes im flüssigen und gasförmigen Zustand. Es werden darin Parameter wie: Schmelzpunkt, Dampfdruck, Verdampfungswärme, etc. festgelegt. Um sich das Eintragen einer neuen Spezies in die Datenbank von OpenFOAM zu ersparen, wurde eine bestehende Spezies durch die neuen Parameter ersetzt. Es wurde zuerst davon ausgegangen, dass nicht alle Einstellparameter in der Literatur gefunden werden können. Daher wurde die der Ölsäure am nächsten kommende Flüssigkeit als Grundlage verwendet. Dies war in dem Fall $C_{16}H_{34}$. Jene Parameter welche gefunden werden konnten, wurden ersetzt und jene, die nicht gefunden werden konnten, wurden aus den Daten von $C_{16}H_{34}$ verwendet. Abschließend lässt sich aber sagen, dass fast alle Parameter, welche zur Beschreibung notwendig waren, gefunden werden konnten. Die Spezies wird in OpenFOAM dann natürlich noch immer als $C_{16}H_{34}$ in den Darstellungen angezeigt, es handelt sich aber bei dieser Anzeige in der gesamten Arbeit um die Spezies der Ölsäure.

Folgende Parameter wurden für die Ölsäure eingesetzt:

Tabelle 8: Parameter der Ölsäure

Einstellparameter	Einheit	Wert	Quelle
Molmasse	[g/mol]	282.45	[13]
Kritische Temperatur	[K]	795.17	[14]
Kritischer Druck	[Pa]	1.216E+6	[14]
Kritisches Volumen	[cm ³ /mol]	1.0542	[14]
Kompressionsfaktor	[]	0.19	[14]
Schmelzpunkt	[K]	289.45	[13]
Siedetemperatur bei 1 bar (berechnet aus Antoine – Gleichung)	[K]	633	[12]
Azentrischer Faktor	[]	1.201	[15]
Verdampfungswärme am Normalsiedepunkt	[kcal/mol]	16.1	[16]
Wärmekapazität (Leinöl)	[J/kgK]	1880	[17]
Enthalpie	[J/kg]	-2707626	[11]

3.5 Abbildung des Zündfunken

Um den Zündfunken im Modell abbilden zu können, musste eine Gleichung gefunden werden, welche den Energieeintrag des Funkens in das System beschreibt. Dazu gab es mehrere Möglichkeiten. Man hätte beispielsweise die Funkenenergie über ein R – C – L – Schwingkreissystem beschreiben können. Somit könnte man die Induktivität im Schwingkreis direkt in das Gleichungssystem einsetzen. Dies hätte den Vorteil, dass die Vergleichbarkeit zwischen dem Funken in der Simulation und dem im Versuch besser ist. Im Versuch wird die Serieninduktivität direkt eingestellt. Jedoch entsteht das Problem, dass der Widerstand der Funkenstrecke nur schwer berechnet werden kann. Dies mathematisch zu beschreiben hätte den Umfang der Arbeit bereits beim Abbilden des Funkens gesprengt. Es wurde dann dazu übergegangen, dass der Energieeintrag durch den Funkenüberschlag aus einem experimentellen Versuch berechnet wurde. Dazu wurden in Zusammenarbeit des Institut für Elektrotechnik und des Lehrstuhl für Thermoprozesstechnik, beide an der Montanuniversität Leoben ein Versuch durchgeführt bei dem der zeitliche Strom- und Spannungsverlauf des Funkenüberschlags gemessen wurde. Daraus kann der zeitliche Energieeintrag gemessen werden.

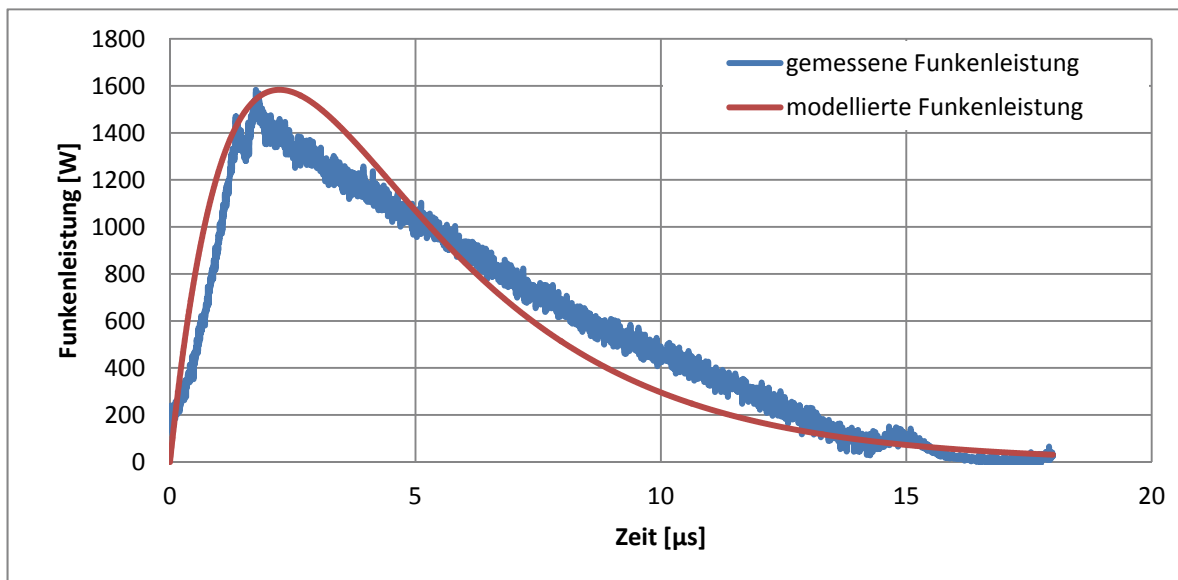


Abbildung 19: Modellbildung des Funkenüberschlags [18]

Die gegebene Kurve ließ sich am besten mittels zwei Exponentialfunktionen angleichen [19]. Die Funktion wurde dabei nicht mittels kleinster Summe der Abstandsquadrate gebildet. Sondern es wurde ein Vorgehen gewählt, bei dem das Integral der gemessenen Funkenleistung und das Integral der modellierten Funkenleistung gleich groß sind. Dadurch

ist gewährleistet, dass die Zündenergie die Gleiche ist, da das zeitliche Integral des Leistungsverlaufs die in Summe übertragene Energiemenge darstellt.

$$P_{\text{Funke}}(t) = A_{\text{Funke}} * \left(e^{-\frac{t}{t_1}} - e^{-\frac{t}{t_2}} \right) \quad (3-11)$$

Die Formel besitzt also drei Einstellparameter. Wobei die Parameter T_1 und T_2 für alle Fälle gleich sind. Es wird also davon ausgegangen, dass der zeitliche Verlauf qualitativ immer gleich aussieht und der Unterschied verschiedener Zündenergien nur in der Amplitude der Leistung, nicht aber am zeitlichen Verlauf liegt. Dies ist eine sehr einfache Abbildung des Zündfunken, welche sicher mit einigen Abweichungen zur realen Situation behaftet ist. Da aber der Schwerpunkt der Arbeit am Abbilden der Explosion selbst lag, wurde nicht tiefer in das Verständnis des Funkens selbst eingegangen. Wie in der Fehlerdiskussion noch gezeigt wird, wäre vor allem in diesem Bereich noch ein näheres Verständnis nötig. Der präexponentielle Faktor A_{Funke} berücksichtigt die unterschiedlichen Zündenergien und ermöglicht das Einstellen unterschiedlicher Zündenergien am OpenFOAM – Solver. Dies wurde nur anfänglich genutzt. Später wurde dann die Zündenergie durch die Variable „QSet“ eingestellt, da dies für die Fallstudien leichter umzusetzen war.

Tabelle 9: Einstellparameter des Funkenmodells

Variable	Wert
t_1 [μs]	3.51586227
t_2 [μs]	1.5
A_{Funke} [W] (erst in den Fallstudien konstant)	5204

Um die Funkenenergie dann in OpenFOAM zu berücksichtigen, musste diese noch auf die volumenspezifische Leistung umgerechnet werden. Dies erfolgte durch Division des Faktors A_{Funke} durch das Volumen des Zündfunken.

3.6 Erzeugung der Partikelwolken

Im verwendeten Modell mussten die Partikelpositionen für jedes einzelne Partikel der Berechnung in Form einer Koordinatentabelle übergeben werden. Die Entscheidung fiel auf eine zufällige Anordnung. Man hätte die Partikel auch regelmäßig in Form eines Clusters anordnen können, da es aber auch in der Realität immer zu unterschiedlichen Partikelverteilungen kommt, ist es besser auch hier eine zufällige Verteilung vorzulegen. Diese Verteilungen wurden mittels einer Excel – Tabelle generiert. Als Einstellparameter wurden die gewünschte Staubkonzentration, das Volumen sowie die Abmessungen des Rechengitters und die physikalischen Eigenschaften wie Dichte, Korngröße, etc. eingegeben. Die Tabelle berechnete dann die Anzahl der Partikel und generierte daraus eine Tabelle mit der zufälligen Verteilung in Form der kartesischen Koordinaten. Die Positionen wurden dann in einer Textdatei gespeichert und der Berechnung übergeben.

Nachdem für die Berechnung der großen Rohrstrukturen Partikelanzahlen von bis zu 4 Mio. nötig waren, wurde ein LabView – Programm erstellt, welches die Partikelwolken erzeugt. Dieses war in der Handhabung viel einfacher und schneller als das Excel – Programm.

4 Aufbau des Berechnungsmodells

Nachdem sich Kapitel 3 mit der Bereitstellung der nötigen Daten für die Berechnung befasste, handelt dieses Kapitel von der konkreten Einstellung des Modells und der Verarbeitung dieser Daten, hin zum fertigen Berechnungsmodell. Um die Simulation aufzusetzen, musste die Geometrie erzeugt und die Randbedingungen gesetzt werden. Die passenden Parameter für die Staubpartikel mussten gesetzt werden und mehrere Modelle (Strahlungsmodell, Turbulenzmodell, Verdampfungsmodell) mussten implementiert und getestet werden. Zur Durchführung der Berechnung mussten auch einige numerische Parameter eingestellt werden und ein eigener Solver für den konkreten Fall erstellt werden.

4.1 coalCombustion Case [6]

Zu Beginn der Arbeit wurde versucht ein Tutorial zu finden, welches bereits einige der geforderten Aufgaben erfüllt. Es ist sehr schwer in OpenFOAM einen konkreten Fall eigenständig und vollständig aufzusetzen. Teilweise sind sehr viele Einstellparameter zu wählen, welche vorab nicht bekannt sind. Daher ist es zielführend, die bestehenden Fälle zu verändern.

Als Vorlage für die Arbeit wurde dabei der coalCombustion Case mit dem zugehörigen coalChemistryFoam – Solver aus OpenFOAM 2.2.2 verwendet [6]. Dieser Fall behandelt die Verbrennung von Kohlepartikeln in einer 2D – Geometrie. Die Verbrennung wird durch Setzen einer bestimmten Zone auf eine hohe Temperatur gestartet. Dabei setzen die Partikel CH_4 frei, welches verbrennt. Im Allgemeinen ist der Fall sehr einfach gehalten, die Partikel setzen oberhalb einer Temperatur von 400 Kelvin mit einer konstanten Rate das Gas frei.

Nicht nur die konstante Freisetzungsrates, sondern auch die Art der Verbrennung und der Spezies waren für die Berechnung unbrauchbar und mussten neu modelliert werden. Letztendlich blieb bis auf die Oberflächenoxidation des Kohlenstoffs nichts mehr unbearbeitet, sodass nahezu jeder Parameter verändert werden musste. Der große Vorteil dieses Vorgehens war es jedoch, dass die Einstellparameter wie eine Checkliste waren und genau bekannt war, welche Parameter zur Kalkulation nötig sind.

In Summe war dieser Fall aber sehr gut für die vorliegenden Anforderungen geeignet, nicht zuletzt da die Partikelmodellierung bereits im Case als auch im Solver vorhanden war und nur mehr angepasst werden musste.

4.2 Solverprogrammierung

Im bestehenden Solver musste die Energieerhaltungsgleichung erweitert werden. Zum bestehenden Code wurde der Quellterm der Funkenzündung hinzugefügt. Dazu mussten zwei Scalar – Volume – Fields neu erstellt werden. Diese wurden „SetQ“ und „QIN“ genannt. In SetQ werden jene Zellen markiert, welche ein Teil des Zündfunkens sind. In QIN wird die momentane Funkenenergie berechnet. Dabei wird in QIN jede Zelle mit der aktuellen Funkenenergie, welche nur eine Funktion der Zeit ist, belegt. Durch die Multiplikation zwischen SetQ und QIN werden dann nur jene Zellen mit dem Quellterm belegt, welche ein Teil des Funkens sind. Zu Beginn wurde SetQ gleich eins für alle Funkenzellen gesetzt. Alle anderen Zellen wurden mit dem Wert null belegt. Dadurch musste für jede Zündenergie ein neuer Solver programmiert werden. In den Fallstudien wurde dann SetQ genau mit jenem Wert belegt, welcher dann in der richtigen Zündenergie resultiert. Dieser durch die Summe der beiden Felder entstandene Quellterm wurde zur Energieerhaltungsgleichung summiert und die beiden Felder neu erzeugt. Um die Fehlersuche zu erleichtern, wurde jeweils die maximale und minimale Gastemperatur, vor und nach der Neuberechnung auf die Konsole ausgeschrieben. Des Weiteren wurde der maximale und minimale c_p Wert ausgegeben. Der neue Solver wurde mit dem Namen „MycoalChemistryFoam8“ bezeichnet und kompiliert. Dazu wurden der in Kapitel 9.1 farblich markierte Programmcodes ergänzt.

4.3 Charakterisierung der Partikel

Um die Partikel richtig beschreiben zu können, mussten diese zuerst analysiert werden. Parameter, welche nicht bestimmt werden konnten, wurden der Literatur entnommen oder geeignete Vergleichswerte verwendet. Als Modellstaub wurde in allen Versuchen und Simulationen, welche in dieser Arbeit beschrieben werden „Lycopodium“ verwendet.

Die zentrale Frage zu Beginn der Charakterisierung war die Zusammensetzung der Partikel. Dazu wurde eine TGA (Thermo Gravimetrische Analyse) beim „Institut für Verfahrenstechnik des Industriellen Umweltschutz“ in Auftrag gegeben. In einer TGA wird die Probe langsam erhitzt und dessen Massenänderung gemessen. Der Abgasstrom wird dabei mit einem FTIR analysiert. Anhand einer TGA kann somit Wassergehalt, Ölgehalt sowie Aschegehalt der Probe bestimmt werden. Weiters kann ein grober Überblick über die Zusammensetzung gegeben werden.

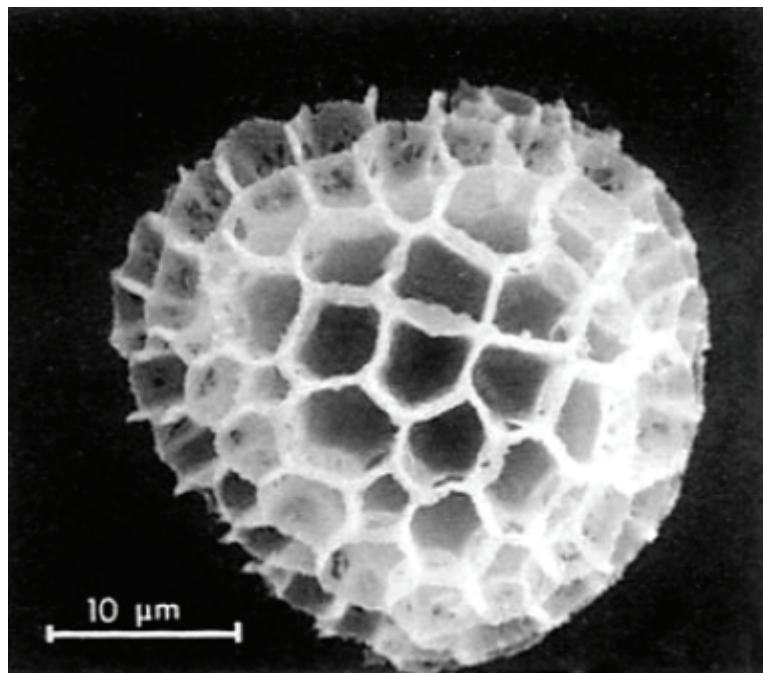


Abbildung 20: Mikroskopaufnahme eines Lycopodiumpartikels [20]

In Abbildung 20 ist ein einzelnes Lycopodiumpartikel dargestellt. Man kann anhand des gezeigten Maßstabs den Durchmesser von 30 µm erkennen. Die Wabenstruktur ist das Ligningerüst, welches aus einer holzartigen Substanz besteht. In den Waben liegt die enthaltene Ölsäure vor.

4.3.1 Thermogravimetrische Analyse von Lycopodium und Einstellung der Partikelzusammensetzung

Die durchgeführte TGA von Lycopodium zeigt die Veränderung der Masse über die Temperatur an der grünen Kurve. Es zeigt sich, dass bis etwa 180 °C (453 Kelvin), lediglich eine geringe Menge Wasser verdampft. Ab dieser Temperatur tritt ein sehr massiver Masseabbau auf, welcher bei etwa 420 °C (693 Kelvin) abzufachen beginnt. Zwischen 180 °C und 420 °C kann ein steiler werden der Kurve beobachtet werden. In grober Näherung kann man darin den Verlauf des Dampfdrucks erkennen. In diesem Bereich verdampft die Ölsäure aus den Partikeln, bei 70 % verlorener Masse wird die Kurve wieder flacher, es wird daher davon ausgegangen, dass zu dieser Zeit die gesamte Ölsäure verdampft ist. Im Modell wird daher der Ölsäureanteil mit 70 Massenprozenten festgelegt. Die Kurve besitzt ab 500 °C (773) Kelvin nur mehr ein geringes Gefälle, welches aber auch am Ende der Messung noch besteht. Es kann also davon ausgegangen werden, dass es noch zu einem weiteren Massenabbau kommt. In diesem Temperaturbereich oxidiert der Kohlenstoff und sobald die Kurve vollständig flach wird, liegt nur mehr die Asche vor. Es wird also angenommen, dass von den übrigen 30 Prozent, welche nicht in Form der Ölsäure vorliegt, 80 Prozent Kohlenstoff und 20 Prozent Asche sind. Wie in der Diskussion noch erklärt wird, ist die genaue Zusammensetzung nicht entscheidend, da ohnehin das Ausbrandverhalten der Partikel nicht genau bekannt ist.

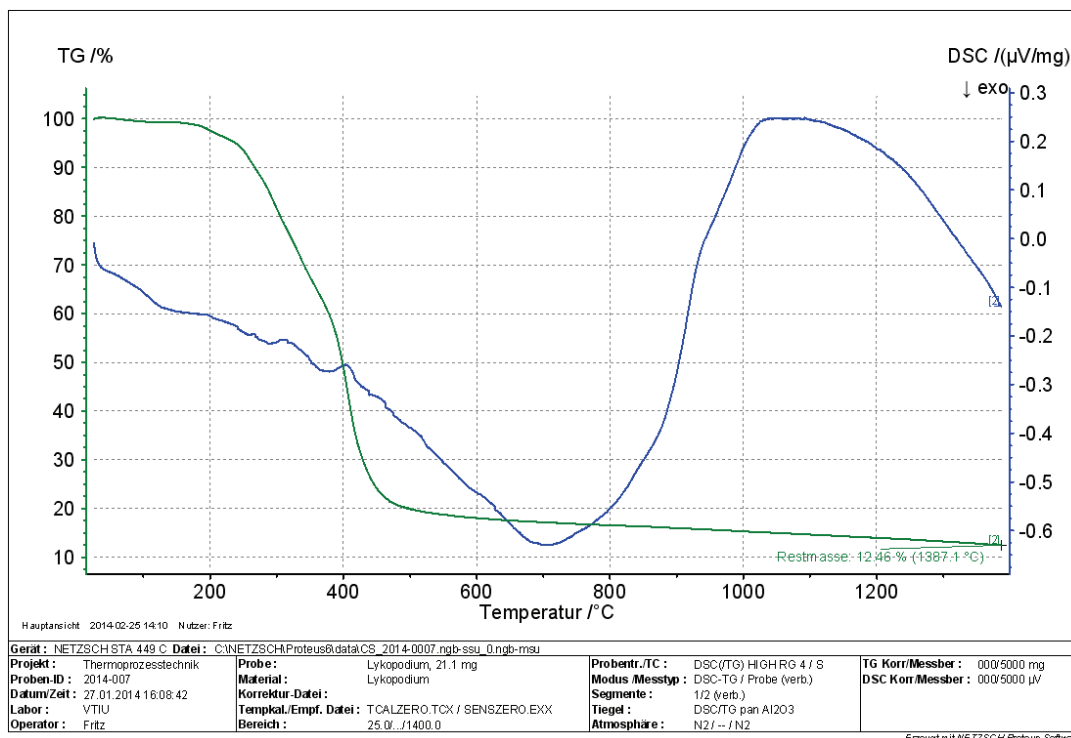


Abbildung 21: TGA von Lycopodium

4.3.2 Submodelle der Partikel

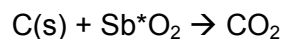
In der Zusammensetzungscharakterisierung wurde dies wie folgt umgesetzt. Es wurden die Massenbrüche der einzelnen Phasen gesetzt. Es sei hier nochmal darauf verwiesen, dass es sich bei der Verbrennung nicht um $C_{16}H_{34}$ handelt, es wurden nur die Eigenschaften dieser Flüssigkeit so verändert, dass es sich dabei um die Ölsäure handelt. Die Bezeichnung $C_{16}H_{34}$ stellt also nur den Variablennamen der veränderten Flüssigkeit dar. Die genauen Einstellungen sind im Kapitel 9.2 angeführt.

Als zu verdampfende Flüssigkeit wurde wie bereits erwähnt die modifizierte $C_{16}H_{34}$ verwendet. Als feste Bestandteile des Partikels haben der Kohlenstoff und die Asche Platz gefunden. Beide Spezies waren in der OpenFOAM – Datenbank vorhanden und wurden nicht verändert.

Um die Pyrolyse der Partikel zu beschreiben, musste ein geeignetes Verdampfungsmodell gefunden werden. Da die Ölsäure als Flüssigkeit betrachtet wird, wird die Pyrolyse als ein Verdampfungsprozess modelliert. Als Modelle standen „latentHeat“ und „enthalpyDifference“ zur Verfügung, welche aber beide das gleiche Ergebnis lieferten. Die Einstellungen sind in Kapitel 9.3 gezeigt.

Da aber nicht nur die verdampfende Ölsäure verbrennt, sondern auch das Kohlenstoffgerüst der Partikel, musste auch dies modelliert werden. Dazu wurden die Standards des coalCombustionCase übernommen, wobei über eine Oberflächenreaktion die Verbrennung des Kohlenstoffs berechnet wird. Die Zahlenwerte und die Implementierung in OpenFOAM sind in Kapitel 9.4 zu finden. Dabei stellt der Parameter C_1 eine Konstante für die Diffusionslimitierung dar und der Parameter C_2 einen präexponentellen Faktor für die Reaktionsrate. E beschreibt die Aktivierungsenergie für die Reaktionsrate und der Faktor S_b dient als stöchiometrische Konstante, welche in diesem Falle 1 ist.

Es wird die folgende Reaktionsgleichung ausgewertet:



Damit dieses Modell funktioniert, muss das „devolatilisationModel constantRateDevolatilisation;“ aktiviert sein. Dieses dient dazu, um konstante Freisetzungsraten zu realisieren. Im coalCombustion – Case wird dieses beispielsweise für die Freisetzung von Methan aus dem Partikel verwendet. Was natürlich keine gute Abbildung des realen Verhaltens darstellt. Ein Partikel, welches sich in heißen Zonen befindet, wird mit Sicherheit schneller Pyrolysegase freisetzen als eines, welches sich in kalten Bereichen der Geometrie befindet. Im Staubexplosionsfall muss das devolatilisationModel nur aktiviert sein.

Man muss diesem Modell noch die freizusetzenden Gase nennen, diese bleiben in diesem Falle aber leer, da die Ölsäurefreisetzung über das phaseChangeModel beschrieben wird.

Der Wärmeübergang auf die Partikel wurde über die RanzMarshall Beziehung berechnet [21].

$$Nu = 2 + 0.6 * Re^{0.5} * Pr^{0.33} \quad (4-1)$$

Diese Gleichung berechnet ausgehend von der Reynoldszahl und der Prandtlzahl den Wärmeübergang auf das Partikel. Da die Partikel sehr klein sind, haben die Strömungsbedingungen nur wenig Einfluss auf den Wärmeübergang, da die Reynoldszahl stets sehr klein ist.

Die Partikel können im verwendeten Modell nicht miteinander kollidieren, jedoch ist eine Kollision mit den Wänden möglich. Da die meisten Geometrien auf ein 2D Modell beschränkt werden, wurden öfter als Grenzen adiabate Wände eingesetzt. Dabei ist es wichtig, dass ein Partikel durch einen vollständigen elastischen Stoß an der Wand reflektiert wird. Somit wird der Effekt abgebildet, dass ein Partikel, welches das Rechengitter verlassen würde an der gleichen Position mit der gleichen Geschwindigkeit wieder eintritt. So wäre es auch der Fall, wenn ein Nachbarpartikel in die Zellgeometrie eintritt.

Das Einsetzen der Partikel zu Beginn der Berechnung erfolgt mittels einer Koordinatentabelle. In dieser Tabelle sind die Koordinaten für jedes Partikel gespeichert. Die Erzeugung dieser Koordinatentabellen wurde bereits in Kapitel 3.6 erläutert. Es konnten auch noch Faktoren wie die Anfangsbewegung der Partikel oder Größenverteilungen wie beispielsweise eine RosinRammler – Verteilung festgelegt werden. Da aber Lycopodium eine sehr einheitliche Korngröße besitzt, wurde eine Gleichverteilung mit einem Durchmesser von 30 µm verwendet. Die Anfangsgeschwindigkeit der Partikel wurde auf null gesetzt.

Über die Variable „nParticle“ wurde das sogenannte „Particle – Clustering“ realisiert. Dies ermöglicht es, die Berechnung durch Zusammenfassen von ähnlichen Teilen zu beschleunigen. Es wird dabei nicht jedes Partikel berechnet sondern nur ein bestimmter Teil. Wird die Variable beispielsweise auf zehn gesetzt, so wird ein Partikel berechnet und neun weitere verhalten sich gleich. Dies wurde bei den Zündversuchen aufgrund der geringen Partikelanzahl nicht verwendet. Bei den Flammgeschwindigkeitssimulationen mit bis zu 850 Millionen Partikeln ermöglichte dieses Verfahren überhaupt erst die Berechnung. Die Anfangstemperatur der Partikel wurde mit 300 Kelvin festgesetzt.

In der Datei „coalCloud1Properties“ werden noch viele weitere Faktoren eingegeben, welche aber oft in der Berechnung selbst nicht verwendet werden. So kann beispielsweise auch der Siedepunkt oder der c_p – Wert der Partikel eingegeben werden. Da aber der Siedepunkt über die Dampfdruckkurve und der c_p – Wert über die Zusammensetzung der Partikel berechnet wird, haben diese Einstellungen keinen Einfluss auf die Berechnung.

4.4 P1- und DO– Strahlungsmodell [22]

In OpenFOAM stehen grundsätzlich 3 verschiedene Strahlungsmodelle zur Verfügung. Einerseits das „NoRadiation Model“, welche die Strahlung ausschaltet, andererseits das „Discret Ordinate Model“ und das „P1 Model“.

4.4.1 Das NoRadiation Modell [22]

Dieses Modell setzt den Quellterm der Strahlungskalkulation in der Energieerhaltungsgleichung einfach auf null. Somit wird die Strahlung nicht berücksichtigt, aber es stellt eine einfache Möglichkeit dar, die Strahlung nicht zu berechnen ohne den Solver ändern zu müssen.

4.4.2 Das P1 Modell [22] [23]

Der Vorteil des P1 Modells ist, dass die Berechnung sehr wenig Rechenleistung in Anspruch nimmt, und es können Effekte wie Streuungs- und Partikeleffekte berücksichtigt werden. Da das Modell aber keine Strahlen berechnet sondern nur den diffusen Anteil der Strahlung löst, ist dieses Modell beispielsweise nur für Atmosphären mit hoher Staubbelastung anwendbar [24].

Für die Berechnung wird folgende Gleichung gelöst [23]:

$$\nabla \cdot (\Gamma \nabla G) - \alpha G + 4\alpha\sigma T^4 = S_G \quad (4-2)$$

Wobei Γ wie folgt definiert ist [23]:

$$\Gamma = \frac{1}{(3(\alpha + \sigma_s) - c\sigma_s)} \quad (4-3)$$

Die Größen sind dabei wie folgt definiert [25]:

α	Absorptionskoeffizient
σ_s	Streuungskoeffizient
σ	Stefan – Boltzmann – Konstante $\sigma_B = 5.67E+8 \text{ [W/m}^2\text{K}^4]$
T	Lokale Temperatur
C	Linearer anisotropischer Phasenfunktionskoeffizient
G	Strahlungsvariable
S_G	Strahlungsquellterm der Energieerhaltungsgleichung

Vor allem für Fälle bei denen die optische Dicke groß ist, funktioniert dieses Modell sehr gut. Dieses Modell wurde für die Berechnungen letztendlich auch verwendet.

4.4.3 Das finite volume discrete ordinates model [22] [23] [25]

Dieses Modell bildet die Strahlung als diskrete Einzelstrahlen in die verschiedenen Raumrichtungen ab. Dazu wird in OpenFOAM die Anzahl der Strahlen in der θ und ϕ – Ebene eingestellt.

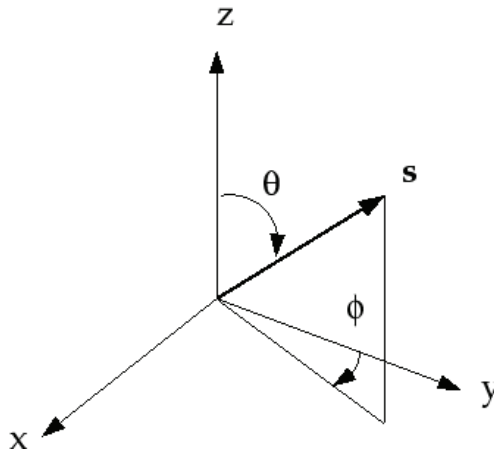


Abbildung 22: Darstellung der Strahlen am DO – Modell [23]

Die Strahlungsintensität wird anhand folgender Gleichung gelöst [25]:

$$\frac{dI(\vec{r}, \vec{s})}{ds} + (a + \sigma_s)I(\vec{r}, \vec{s}) = an^2 \frac{\sigma_B T^4}{\pi} + \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_0^{4\pi} I(\vec{r}, \vec{s}') \Phi(\vec{s}, \vec{s}') d\Omega' \quad (4-4)$$

Die Größen sind dabei wie folgt definiert [25]:

\vec{r}	Positionsvektor
\vec{s}	Normierter Richtungsvektor des Strahls
\vec{s}'	Normierter Richtungsvektor der Streustrahlung
a	Absorptionskoeffizient
n	Brechungsindex
σ_s	Streuungskoeffizient
σ_B	Stefan – Boltzmann – Konstante $\sigma_B = 5.67E+8$ [W/m ² K ⁴]
I	Strahlungsintensität
T	Lokale Temperatur
Φ	Phasenfunktion zur Beschreibung der Streuung
Ω'	Winkel zum Festkörper

Das DO – Modell besitzt einen erhöhten Bedarf an Rechenleistung gegenüber dem P1 – Modell, daher wird meist die Strahlung nur alle zehn Strömungsiterationen berechnet. Die Anzahl der Strahlen wird durch zwei Einstellparameter festgelegt. Dieses Modell stellt das wohl beste verfügbare Strahlungsmodell dar. Es können damit ebenfalls Effekte der Partikel, Absorption oder wellenlängenabhängige Effekte berücksichtigt werden. Durch ein Erhöhen der Strahlenanzahl kann dabei die Genauigkeit erhöht werden. Wie OpenFOAM letztlich die Strahlen in die Geometrie legt, kann nicht beeinflusst werden. Diese Tatsache führte letztendlich zu erheblichen Problemen, da die Strahlen sehr inhomogen verteilt wurden. Aufgrund der langen Berechnungsdauer wurde dieses Modell nicht verwendet.

4.5 k-ε-Turbulenzmodell [8] [25]

Dieses Zweigleichungssystem der beiden Gleichungen k und ε ist in der Simulation sehr weit verbreitet. Wobei die k – Gleichung den Transport der turbulenten kinetischen Energie beschreibt und die ε – Gleichung die Dissipation von turbulenter kinetischer Energie in Wärme.

$$\frac{\partial k}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + \nu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - \varepsilon \quad (4-5)$$

Es handelt sich bei der k – Gleichung um eine typische Transportgleichung. Auf der linken Seite steht die Zeit und Ortsabhängigkeit. Auf der rechten Seite beschreibt der Term $\frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\nu + \frac{\nu_T}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right]$ die Diffusion der turbulenten kinetischen Energie.

Der Term $\nu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$ beschreibt die Produktion der turbulenten kinetischen Energie aus Strömungsenergie und ε dessen Dissipation.

Die ε – Gleichung kann wie folgt angegeben werden:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \bar{u}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\frac{\nu_T}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \nu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} - C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k} \quad (4-6)$$

Auch diese Gleichung besteht aus Diffusionsteil, Produktionsteil und Dissipationsteil. $C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} \nu_T \left(\frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j}$ beschreibt die Produktion und $C_{\varepsilon 2} \frac{\varepsilon^2}{k}$ den Abbau von ε.

Die beiden Werte für $C_{\varepsilon 1}=1.44$ und $C_{\varepsilon 2}=1.92$ sind zwei empirisch ermittelte Konstanten.

Der Parameter ν_T beschreibt die turbulente Viskosität und wird über folgende Formel berechnet:

$$\nu_T = C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4-7)$$

Wobei der Vorfaktor $C_\mu=0.09$ beträgt. Die beiden noch fehlenden Faktoren sind $\sigma_k=1.0$ und $\sigma_\varepsilon=1.3$

4.6 Einstellung numerischer Parameter

Zu Beginn der Arbeit gab es das Problem, dass um den Zündpunkt sehr starke Gradienten auftraten. Dies führte zu dem Problem, dass aufgrund von numerischen Fehlern die Temperatur mancher Zellen unter die Umgebungstemperatur abkühlte. Das kann aber keinesfalls in der Realität der Fall sein. Deshalb mussten die Gleichungen exakter gelöst werden. Dazu wurde die Energieerhaltungsgleichung auf eine relative Toleranz von 10^{-25} gelöst. Auch alle anderen Lösungsparameter wurden um einige Zehnerpotenzen genauer gelöst. Dies führte auf eine teilweise sehr hohe Anzahl von nötigen Iterationen. Vor allem die Strahlungsgleichung G des P1 Modells benötigte eine erhöhte Anzahl von Iterationen. OpenFOAM begrenzt dies aber standardmäßig auf 100 Iterationen. Um die Gleichung aber trotzdem auf die benötigte Genauigkeit zu lösen, wurde diese Anzahl auf maximal 1000 Iterationen erhöht. Nach dem Aktivieren der Strahlung wurde die Berechnung oft instabil, deshalb wurden die Relaxationsfaktoren für die Felder und Gleichungen von 1 auf 0.85 minimiert. So konvergiert die Lösung etwas langsamer aber es besteht weniger Gefahr des Überschwingens und von Instabilitäten.

4.7 Überprüfung der Partikelbiotzahl

Es stellte sich die Frage ob die Partikel eine ausgeprägte innere Temperaturverteilung besitzen oder nicht. Da die Partikel von außen beheizt werden, und die Wärme erst durch den Stoff bis in den Kern geleitet werden muss, stellt sich eine innere Temperaturverteilung ein. Diese innere Temperaturverteilung wird im Berechnungsmodell aber ignoriert, das Partikel besitzt also eine einheitliche Temperatur. Ist nun die tatsächliche Temperaturverteilung stark ausgeprägt, und dies wird aber nicht berücksichtigt, so ergibt sich ein Fehler in der Berechnung. Tabelle 10 zeigt den Einfluss der Relativgeschwindigkeit

zwischen dem Partikel und der umströmenden Luft sowie der Lufttemperatur. Der Wärmeübergang auf das Partikel wird mittels Ranz – Marshall – Beziehung berechnet [21] und anschließend daraus die Biotzahl ermittelt [26].

Tabelle 10: Darstellung der Biotzahl in Abhängigkeit von Relativgeschwindigkeit und Lufttemperatur

Relativgeschwindigkeit zwischen Partikel und Luft [m/s]	Lufttemperatur [°C]						
	50	100	200	500	1000	2000	10000
0.1	0.29	0.29	0.29	0.28	0.28	0.27	0.27
0.5	0.33	0.33	0.32	0.31	0.30	0.29	0.27
1	0.36	0.35	0.34	0.32	0.31	0.30	0.28
2	0.40	0.39	0.38	0.35	0.33	0.31	0.29
5	0.48	0.46	0.44	0.40	0.37	0.34	0.30
10	0.57	0.55	0.52	0.46	0.42	0.38	0.32
20	0.70	0.67	0.62	0.54	0.48	0.43	0.34
50	0.95	0.90	0.83	0.71	0.61	0.52	0.38
100	1.24	1.17	1.07	0.89	0.75	0.63	0.43

Die blau gekennzeichneten Bereiche stellen dabei die Bedingungen dar, welche in der Berechnung meist vorliegen. Die Berechnung gilt nur für konstante Stoffwerte sowie stationären Aufheizbedingungen. Das heißt, die Berechnung gilt nur so lange, bis die Ölsäure zu verdampfen beginnt. Wie aber noch gezeigt wird, bewirkt die Verdampfung einen Abbau der inneren Temperaturverteilung. Da die Temperatur bei der Verdampfung einen Haltepunkt aufweist, kommt es zu keiner Temperaturerhöhung mehr am Rand. Die innere Temperaturverteilung des Partikels wird deswegen geringer. Zusätzlich kommt es zum Effekt, dass die verdampfte Ölsäure nicht nur aus dem Partikel diffundiert sondern auch in das Partikelinnere. Dort kommt es zur Kondensation und die freiwerdende Kondensationswärme erhitzt das Partikel zusätzlich im Inneren. Detaillierte Analysen dazu können in der Literatur gefunden werden [27].

5 Ergebnisse der Berechnungen

Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse der Berechnungen dargestellt und deren Zusammenhänge erklärt. Es wurden mittels des entwickelten Modells die Zündenergie eines Lykopodiumstaubes der K_{St} – Wert sowie die Flammengeschwindigkeit in einem Rohr bestimmt. Diese Simulationsergebnisse werden anschließend mit den Vergleichsdaten aus Versuchen verglichen und mögliche Abweichungen analysiert. Es wurde gezielt darauf verzichtet, das Modell an die Ergebnisse des Versuchs anzugleichen. Zumal viele Parameter, welche in der Simulation bestimmt werden, versuchstechnisch nicht zugänglich gemacht werden können. Außerdem ist jede Messung mit Fehlern behaftet, welche im Bereich der Staubexplosionen sehr groß sein können. Es gibt sowohl im Versuch als auch in der Simulation Abweichungen, die Wirklichkeit wird sich irgendwo zwischen den Ergebnissen der Simulation und denen des Versuchs befinden. Vielmehr sollte das Modell den theoretischen Ablauf einer Staubexplosion bestehend aus Pyrolyse und Verbrennung der Pyrolysegase abbilden. Dazu wurde versucht auf experimentelle Einstellparameter zu verzichten. Das Modell wird also nur mit den Versuchsergebnissen verglichen und nicht daran angepasst.

5.1 Mindestzündenergie

Anhand der Simulation sollte die Mindestzündenergie einer Funkenentladung bestimmt werden. Dazu wurde eine geeignete Geometrie in Form eines Zylinders entworfen. Es sollen dabei, zur besseren Vergleichbarkeit, die Abmessungen der MIKE 3 – Apparatur verwendet werden. Dies entspricht einer Funkenstrecke von 6 mm. Der Energieeintrag in das System wurde dabei als Quellterm im OpenFOAM-Solver berücksichtigt. Als Grundlage für das Verhalten des Funkens wurden die Ergebnisse des Zweiparametermodells des Zündfunken verwendet. Anhand eines Einstellparameters kann die Zündenergie des Funkens eingestellt werden. Es wurde für verschiedene Staubkonzentrationen und verschiedene Drücke jene Energie bestimmt, welche der Zündfunken mindestens besitzen muss, um das Gemisch zu entzünden. Dazu wurden verschiedene Testfälle erstellt und simuliert. Anhand der Ergebnisse der Simulation wurde dann bestimmt, ob das Gemisch gezündet wurde oder nicht. Diese Testfälle stellen einen beträchtlichen Rechenaufwand dar. Die Simulation eines Testfalls dauerte ca. einen Tag, sodass die exakte Bestimmung der Zündenergie durch schrittweise Näherung einen nicht unbedeutenden Zeitaufwand darstellte. Dies verursachte das Problem, dass in den folgenden Darstellungen, in denen die Mindestzündenergie in Abhängigkeit der Staubkonzentration und des Druckes meist nur wenige Messpunkte besitzt. Vielmehr sollte das Modell aber nicht dazu verwendet werden, um die exakte Mindestzündenergie zu bestimmen, sondern um die Trends und deren Ursachen zu bestimmen. Der Funkendurchmesser wurde mit 0,6 mm festgelegt und ist in der Simulation unabhängig von der Zündenergie.

5.1.1 Berechnungsgitter des Zündversuchs

Das Berechnungsgitter besteht aus einem Zylinder mit einer Höhe von 6 mm und einem Durchmesser von 16 mm. In der Rotationsachse wurde über die Breite von einer Zellreihe die Variable „QSet“ gesetzt, um den Quellterm des Zündfunken zu berücksichtigen.

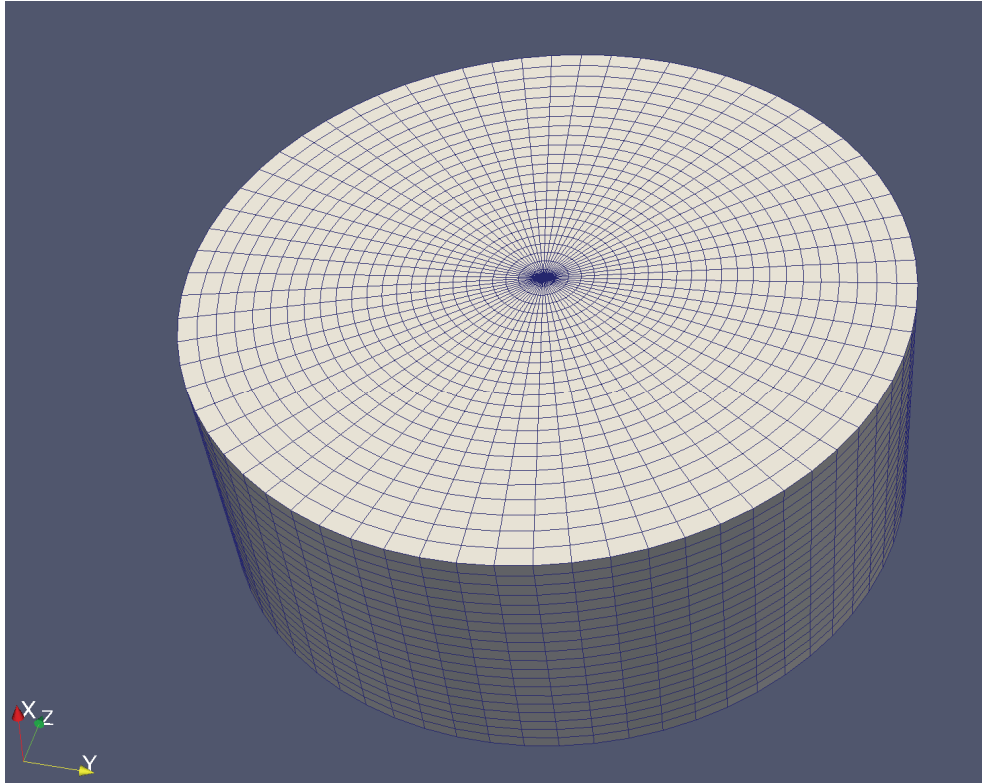


Abbildung 23: Geometrie des Zündversuchs

Die Staubpartikel wurden dabei nicht in der gesamten Geometrie gesetzt, sondern nur in Form eines Quaders mit der Höhe von 6 mm und einer Kantenlänge von 8 mm. Dies birgt den Vorteil, dass die Berechnung beschleunigt wird. Die Partikel, welche sich am Rand des Rechengitters befinden, werden durch die Druckwelle des Funkens ohnehin sofort aus dem Gitter geschossen, ohne sich zu erwärmen oder einen Beitrag zur Zündung zu leisten. Effektiv sind nur die Partikel innerhalb eines Radius von ca. 2 mm wichtig. So kann die Partikelanzahl minimiert und der Berechnungsfortschritt erhöht werden. In der folgenden Abbildung sind die Partikel in der Rechengometrie dargestellt, dabei sind zur besseren Sichtbarkeit die Partikel deutlich größer skaliert als diese tatsächlich sind.

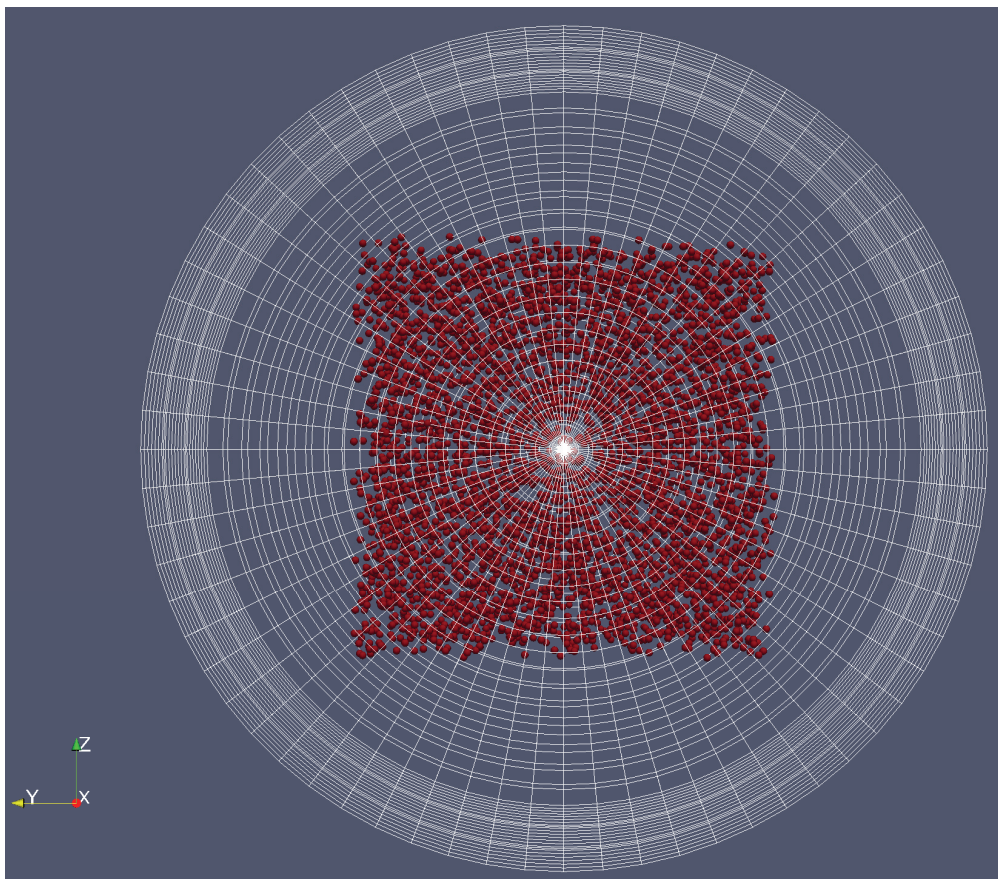


Abbildung 24: Zündfunkengeometrie mit Staubpartikel

Es wurden anfänglich Versuche durchgeführt, nur ein Viertel oder die Hälfte der Geometrie zu simulieren und die Randbedingung entsprechend passend zu setzen. Somit hätte durch Ausnutzung der Symmetrie Rechenzeit gespart werden können. Dies führte aber zu großen Problemen, deren Ursache nicht vollständig geklärt werden konnte. Es bildeten sich in der Geometrie, direkt an der Randbedingung, Hotspots mit mehreren 100 000 Kelvin sowie extreme Strömungsgeschwindigkeiten von ca. 800 m/s. Eine mögliche Ursache könnten numerische Instabilitäten sowie eine zu hohe Anzahl der Freiheitsgrade in den Randbedingungen sein. Nach dem Wechsel auf die gesamte Geometrie funktionierte die Berechnung besser. Anfänglich wurde ein Gitter verwendet, welches die dreifache Zellenanzahl besaß. Um die Berechnung aber zu beschleunigen, wurde auf ein größeres Gitter gewechselt. Die Ergebnisse der beiden Gitter sind aber dieselben, sodass mit einem Einfluss der Gittergröße nicht gerechnet werden muss.

5.1.2 Problem der Zeitschrittabhängigkeit

Es zeigte sich das Problem, dass die Wahl des Zeitschritts einen maßgeblichen Einfluss auf das Ergebnis der Berechnung hat. Dies darf in Simulationsaufgaben aber nie der Fall sein. Eine Abhängigkeit der Ergebnisse vom gewählten Zeitschritt zeigt meist, dass dieser entweder zu groß ist oder es zu einer Kombination von zu kleinem Zeitschritt und zu ungenauer Lösung der Gleichungen kommt. In diesem Falle war der Zeitschritt zu grob gewählt. Obwohl die Courant – Zahl im Bereich von $1E-4$ lag war der Zeitschritt trotzdem zu groß. Nach genaueren Analysen zeigte sich, dass dieses Problem nur in jenem Teil der Berechnung einen Einfluss hatte, in welchem der Funkenüberschlag stattfand. Dieses Phänomen war zu Beginn etwas paradox, es wurde der Funken bei einem Zeitschritt von 100 ns in 200 Zeitschritten aufgelöst, was eine sehr gute Approximation der Kurve bedeutete. Auch eine Auflösung in 10 ns Zeitschritten und 2000 Punkten zeigte noch eine bedeutende Abhängigkeit. Erst im Bereich von 1 bis 3 ns wurde eine weitgehende Unabhängigkeit von Zeitschritt und Berechnungsergebnis erreicht. Für die Berechnungen wurde dann im Zeitintervall vom Beginn bis $20\ \mu\text{s}$ ein 1 ns Zeitschritt gewählt. Eine mögliche Ursache, für diese Abhängigkeit trotz der hohen Auflösung und der geringen Courant – Zahl, ist folgende. Durch die extrem hohen Temperaturen im Funken kommt es zu einer sehr starken Gasausdehnung. Da der Energieeintrag volumenspezifisch erfolgt, bedeutet das, dass je höher die Temperatur ist, die Dichte sinkt. Bei gleichbleibendem volumenspezifischem Energieeintrag führt dies bei geringerer Dichte zu einer noch höheren Aufheizung. Dieser Effekt schaukelt sich immer weiter auf. Wird nun ein grober Zeitschritt gewählt, kommt es durch die gröbere Auflösung zu einer geringeren Ausdehnung und somit zu weniger Aufheizung. Da sich diese Effekte aber in der Berechnung aufschaukeln, führt dies schnell zu einer beträchtlichen Abweichung. Dieser geringe Zeitschritt verlängerte die Berechnung enorm. Wurden die ersten $20\ \mu\text{s}$ mit dem 1 ns Zeitschritt berechnet, konnte dieser anschließend auf 200 bis 500 ns erhöht werden. Ungefähr 80 % der Berechnungsdauer wurden für diesen Funkenüberschlag aufgewendet und nur etwa 20 % für die eigentliche Zündung des Gemisches.

5.1.3 Der Zündmechanismus

Im Allgemeinen können zwei verschiedene Mechanismen der Zündung unterschieden werden. Diese unterschiedlichen Mechanismen sind weitgehend davon abhängig, ob die eingestellte Zündenergie nur knapp über der Mindestzündenergie liegt oder ob diese viel größer ist. Ist die eingestellte Zündenergie deutlich größer als die Mindestzündenergie bei den gegebenen Bedingungen, kommt es zu einer spontanen Zündung. Der Funke kühlt auf seiner gesamten Länge ab, und die Verbrennung setzt auch auf der gesamten Länge ein. Meist kann beobachtet werden, dass die Temperatur des Funkenkerns direkt gegen die Verbrennungstemperatur strebt ohne davor darunter abzukühlen. Wird jedoch mit einer Zündenergie gezündet, welche nur wenig höher ist als die Mindestzündenergie, so kühlt der Funke unter die stationäre Verbrennungstemperatur ab. Es bilden sich im Funkenweg zwischen Anode und Kathode heißere Stellen aus, welche nicht so weit abkühlen. Ausgehend von einem oder mehreren Punkten erfolgt dann wieder eine langsame Erhitzung und es kommt mit einer deutlichen Verzögerung zum Zünden des Gemisches. Die Temperatur durchläuft dabei einen Verlauf bei welchem die Gastemperatur vom heißen Funkenüberschlag auf Temperaturen von etwa 1200 Kelvin abkühlt und anschließend, beim Start der Verbrennung, wieder auf Temperaturen von ca. 1800 Kelvin ansteigt. Da die Zündenergie durch schrittweise Näherung bestimmt wurde, konnte somit teilweise über den Verbrennungsverlauf eine Aussage getroffen werden, wie viel Zündenergie im nächsten Versuch gewählt werden soll.

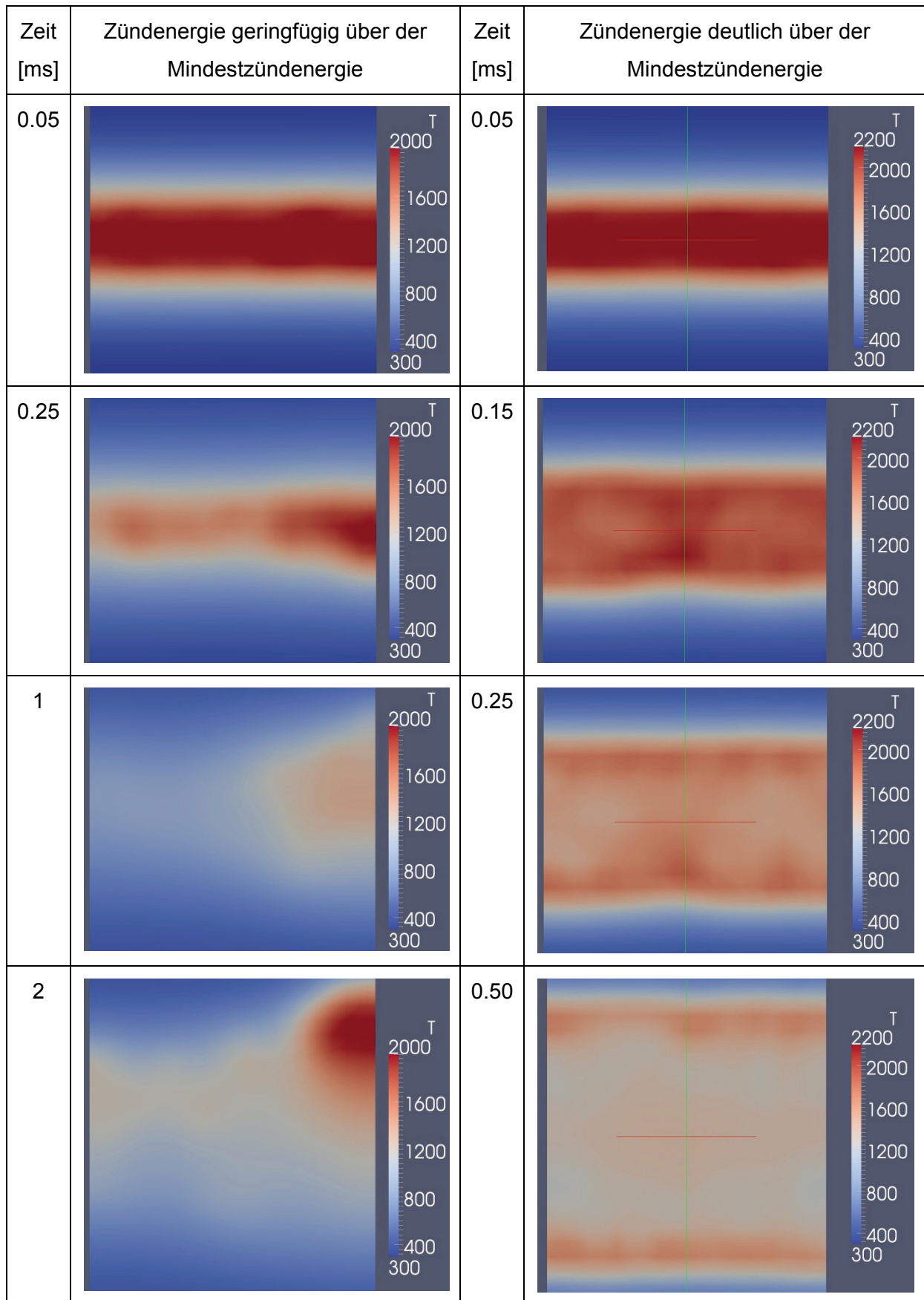


Abbildung 25: Grafischer Vergleich der Zündung bei geringer und hoher Zündenergie

5.1.4 Konzept der Durchführung

Um nun die Zündwilligkeit des Staub/Luft – Gemisches zu untersuchen, wurden verschiedenste Testfälle analysiert. Das Ziel ist es, die minimale Zündenergie zu bestimmen und eine Aussage über die Zusammensetzung des Gemisches bei der zündwilligsten Zusammensetzung zu treffen. Dazu wurden verschiedene Konzentrationen sowie Umgebungsdrücke untersucht, und deren Einfluss auf die Zündwilligkeit analysiert. Zusammenfassend könnten noch viel mehr Parameter mit dem Simulationsmodell untersucht werden. So könnten Anfangsturbulenzen, Anfangstemperaturen, Einflüsse von Strömungen sowie unterschiedliche Sauerstoffkonzentrationen und viele weitere Parameter untersucht werden. Im Folgenden werden nur der Einfluss der Staubkonzentration sowie des Umgebungsdrucks gezeigt. Der große Vorteil des Modells ist es, dass die Abbildung sehr originalgetreu ist. Durch den Ablauf von Pyrolyse, Verbrennung und Gasausdehnungen können sehr viele Einstellparameter untersucht werden. Man könnte sich wahrscheinlich mehrere Monate damit befassen, unterschiedliche Einflüsse zu analysieren. In dieser Arbeit ging es aber vorwiegend um das Aufsetzen des Modells und nicht um die Durchführung vieler Parameterstudien. Daher wird der Teil der Parameterstudien kurz gehalten.

5.1.5 Einfluss der Staubkonzentration auf die Mindestzündenergie

Für die Parameterstudie wurde eine Versuchsmatrix erstellt. Dabei wurden die Versuche in folgender farblichen Reihenfolge durchgeführt: gelb, grün, blau, farblos, türkis, rot und grau.

Tabelle 11: Versuchsmatrix Mindestzündenergie bei verschiedenen Staubkonzentrationen

Zündenergie [mJ]	100 [g/m ³]	150 [g/m ³]	200 [g/m ³]	300 [g/m ³]	500 [g/m ³]	1000 [g/m ³]	1500 [g/m ³]	3000 [g/m ³]	5000 [g/m ³]
	Erfolgreiche Zündung?								
16									
18							nein		
20					nein	nein	nein		
22						nein	nein	nein	nein
24					nein	ja	ja	nein	nein
26				nein	ja			ja	nein
28				ja	ja	ja			nein
30									ja
32				ja				ja	ja
34		nein	nein						
36		ja	ja	ja	ja				
38	nein	ja	ja						
40	nein	ja							
42	ja								
44					ja				

Es wurde eine Auflösung von 2 mJ gewählt, da diese einerseits für die Beschreibung völlig ausreicht und andererseits einen durchführbaren Rechenaufwand darstellt. Es wurde immer die Grenze zwischen Zündung und Nichtzündung gesucht. Die Mindestzündenergie wurde dann als der Mittelwert dieser beiden Zellen definiert und das Ergebnis mit einer Toleranz von +/- 1 mJ angegeben.

Es zeigt sich, dass die Mindestzündenergie stark von der Staubkonzentration abhängig ist. Dabei kann ein interessantes Phänomen beobachtet werden. Nach einer Betrachtung der Energiebilanz würde man die geringste Mindestzündenergie nahe der stöchiometrischen Verbrennung vermuten, da bei dieser Zusammensetzung die bestmögliche Aufheizung stattfinden müsste. Die stöchiometrische Verbrennung befindet sich laut der Stoffbilanz für die Ölsäureverbrennung bei 116 g/m³ unter der Annahme einer Starttemperatur von

300 Kelvin. Wie in Kapitel 5.2.3.4 noch gezeigt wird, ist dies bei der Flammengeschwindigkeit auch der Fall. Die höchste Flammengeschwindigkeit wird nahe der stöchiometrischen Verbrennung erreicht. Im Zündversuch zeigt sich aber, dass die geringste Zündenergie zu deutlich höheren Staubkonzentrationen im stark überstöchiometrischen Bereich verschoben ist.

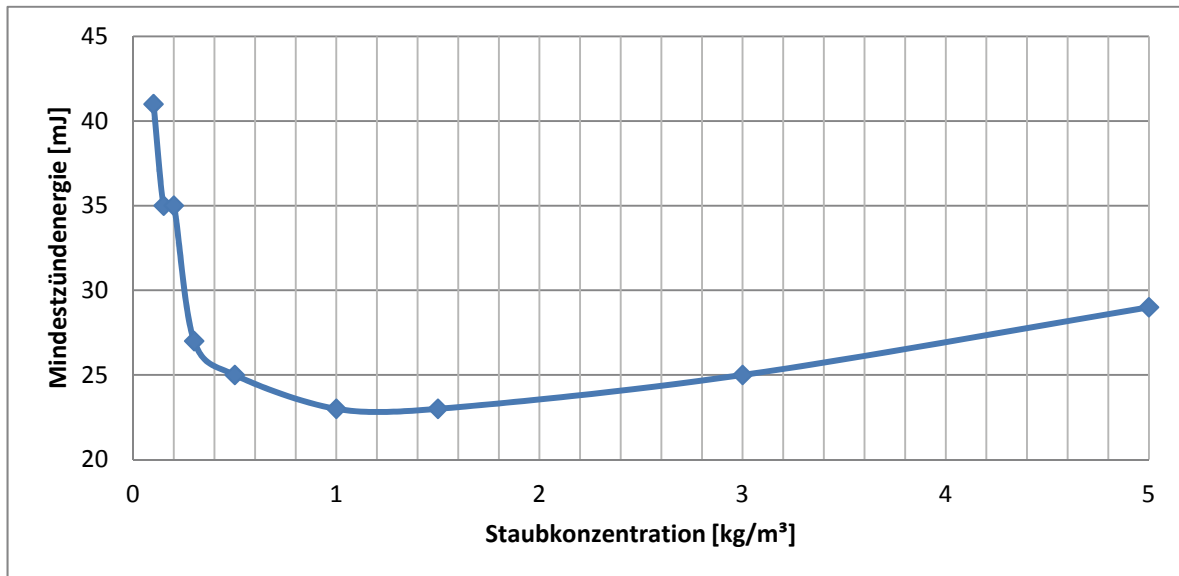


Abbildung 26: Darstellung der Mindestzündenergie bei verschiedenen Staubkonzentrationen

Dieser Effekt kann durch die Partikelbewegung erklärt werden. Durch die Hitze des Zündfunken kommt es zu einer starken Gasausdehnung. Dabei durchläuft eine Schockwelle, welche deutlich schneller ist als die Partikel selbst, den Raum um den Zündfunken. Durch diese Schockwelle, welche in Form einer kurzen aber hohen Gasgeschwindigkeit auftritt, werden die Partikel weggeschleudert. Dadurch sinkt die Partikelkonzentration stark ab.

Ein weiterer Effekt ist die Partikelauflheizung. Im Funken ist die Turbulenz extrem hoch, sodass eine Mischungslimitierung fast ausgeschlossen werden kann. Die Reaktion hängt also vor allem von der vorhandenen Konzentration des Brenngases sowie von der Temperatur ab. Sauerstoff ist zu Beginn jedenfalls genügend vorhanden. Anfänglich limitiert nur die vorhandene Gasmenge die Reaktion. Weiter betrachtet ist es also die Partikelauflheizung am Beginn, welche von der größten Wichtigkeit ist. Dabei limitiert der Effekt des Wärmeübergangs vom Gas auf das Partikel die Auflheizung. Sind nun mehr Partikel vorhanden, so kann mehr Energie auf die Partikel übertragen werden und in Summe steigt die Gasfreisetzung. Bei höheren Konzentrationen kommt der Effekt hinzu, dass die größere Partikelanzahl eine zusätzliche Abkühlung des Gases verursacht. Dieser Effekt tritt dann auf, wenn die volumenspezifische Masse der Partikel groß, im Vergleich zum Gas wird.

Genau bei diesem Optimum, bei guter Wärmeübertragung durch viele Einzelpartikel und geringer Abkühlung, kommt es zur bestmöglichen Freisetzung und zu einer sehr geringen Zündenergie. Wobei aber auch erwähnt werden muss, dass viele weitere Parameter einen Einfluss haben. Aber als grobe Näherung könnten die Bedingungen der Simulation, also Temperatur, Gasgeschwindigkeit, etc. in einer kleinen Geometrie nachgebildet werden und so mittels einer sehr schnellen Simulation mit wenig Zellen das Minimum der Mindestzündenergiefunktion grob ermittelt werden. Anschließend könnten die genauen Werte anhand der vollständigen Simulation ermittelt werden.

Vergleicht man die Ergebnisse der Simulation mit jenen der Literatur, so stellt man eine bemerkenswerte Übereinstimmung fest [28].

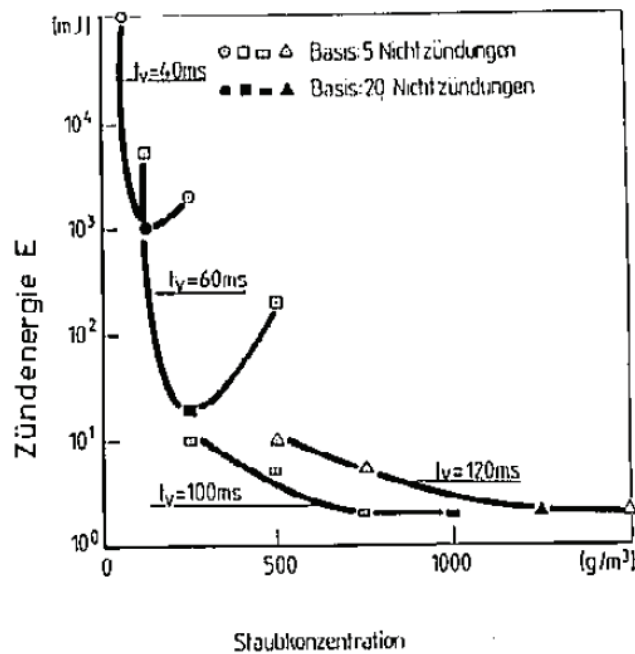


Abbildung 27: Literaturwerte der Mindestzündenergie von Lycopodium bei verschiedenen Staubkonzentrationen [28]

5.1.6 Abhängigkeit der Mindestzündenergie vom Umgebungsdruck

Der zweite Einflussparameter, welcher in dieser Arbeit untersucht wurde, ist die Abhängigkeit der Mindestzündenergie vom Umgebungsdruck. Es zeigt sich, dass die Mindestzündenergie bei fallendem Druck stark abnimmt.

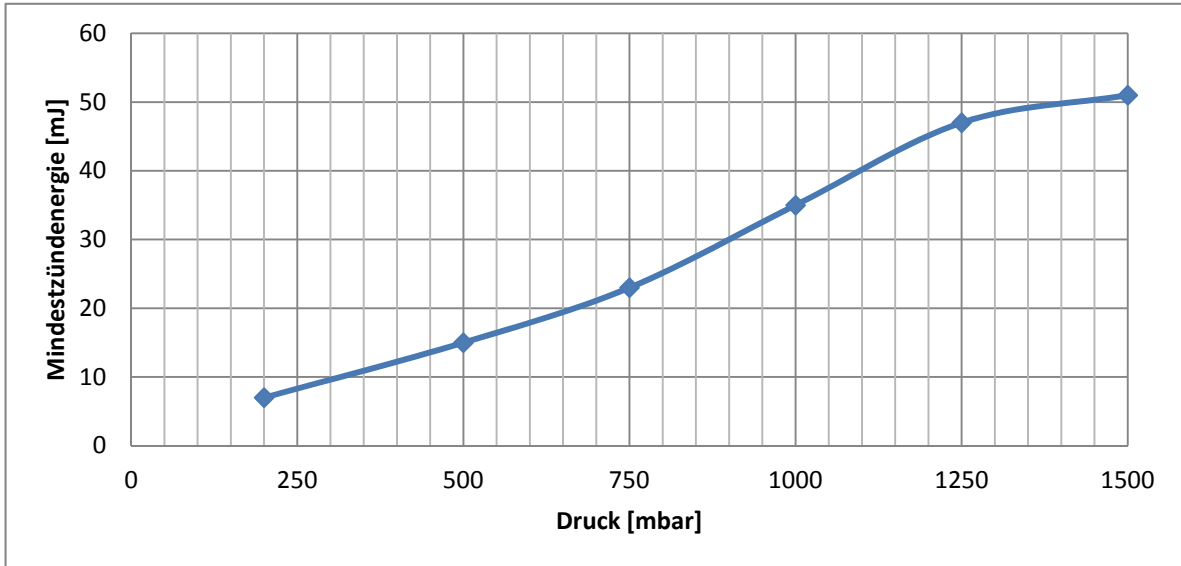


Abbildung 28: Abhängigkeit der Mindestzündenergie vom Umgebungsdruck bei einer Staubkonzentration von 200 g/m³

Der Effekt ist im Prinzip der gleiche wie bei der Staubkonzentration. Bei niedrigerem Druck fällt der Siedepunkt. Der Siedepunkt der Ölsäure kann dabei ganz einfach über die Antoine Gleichung ermittelt werden. Die Gleichung muss auf den Druck umgeformt werden. Entspricht der Dampfdruck der Flüssigkeit dem angelegten Umgebungsdruck, so ist der Siedepunkt erreicht.

Tabelle 12: Siedepunkte der Ölsäure bei verschiedenen Drücken

Umgebungsdruck [bar]	Siedetemperatur [K]
0.1	550
0.2	572
0.3	586
0.4	596
0.5	605
0.6	612
0.7	618
0.8	624
0.9	629
1	633

Es zeigt sich, dass der Siedepunkt bei fallender Temperatur sinkt. Jedoch erklärt dies alleine noch nicht die starke Abhängigkeit. Da die meiste Energie zur Verdampfung und nicht zur Aufheizung der Ölsäure nötig ist, kann der Effekt des geringeren Siedepunktes keine derart große Rolle spielen.

Ein weiterer Aspekt liegt im Funken selbst. Bei geringerem Druck liegt weniger Gas vor, welches durch den volumenspezifischen Quellterm der Energieerhaltungsgleichung aufgeheizt werden muss. Da aber in der Gleichung mit gleicher Leistung pro Volumeneinheit das Gas erhitzt wird, kommt es zu einer stärkeren Gasaufheizung. Die Abmessungen des Funkens wurden als konstant angenommen. Durch die stärkere Gasaufheizung kommt es auch zu einer besseren Wärmeübertragung, da der Temperaturgradient größer ist. Die Dichte des Gases hat ebenso einen Einfluss, jedoch überwiegt hier der Effekt der höheren Temperatur. Dadurch wird mehr Wärme auf die Partikel übertragen und diese schneller erhitzt.

Diese Betrachtung muss aber mit einem gewissen Fragezeichen versehen werden. Das Problem liegt dabei, dass die Funkengeometrie in dieser Modellbetrachtung als konstant angesehen wurde. In der Literatur wird gezeigt, dass der Funkendurchmesser mit steigendem Druck abnimmt, was dem hier beschriebenen Effekt genau entgegenwirken würde [29].

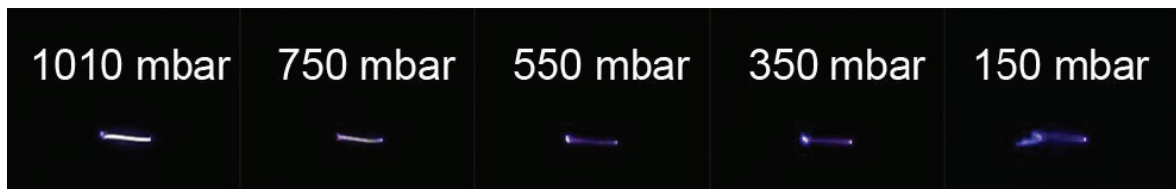


Abbildung 29: Darstellung der Zündfunken bei unterschiedlichen Umgebungsdrücken [29]

5.1.7 Analyse der Partikelbewegung und Aufheizung

Im Zeitraum der Verbrennung der Partikel können die einzelnen Schritte der Pyrolyse sehr gut erkannt werden. Abbildung 30 zeigt einen Schnitt durch die Partikelwolke. Im Kern sind die bereits ausgebrannten Partikel zu erkennen, diese sind aufgrund der hohen Temperatur rot. Da bereits die gesamte Ölsäure aus ihnen verdampft ist, kann die Temperatur über die Siedetemperatur der Partikel ansteigen. Um diese Partikel bildet sich die Zone der pyrolysierenden Partikel. Sie besitzen noch einen bestimmten Anteil von Ölsäure. Deswegen wird jene Energie, welche auf das Partikel übertragen wird, nicht zur Aufheizung, sondern zur Verdampfung der Ölsäure verwendet. Die Partikel haben eine einheitliche Temperatur, da diese durch die Siedetemperatur der Ölsäure festgelegt ist. Um diese isotherme Zone liegt die Aufheizzone. Anhand der Abbildung ist zu erkennen, dass ein annähernd linearer Temperaturverlauf zwischen den kalten Partikeln am Rand und den warmen am Übergang zur Pyrolysezone besteht. Bereits anhand der Dicken der Zonen der Aufheizung und der Pyrolyse ist zu erkennen, dass die Pyrolyse sehr viel Energie benötigt, da diese Zone auch derart ausgedehnt ist.

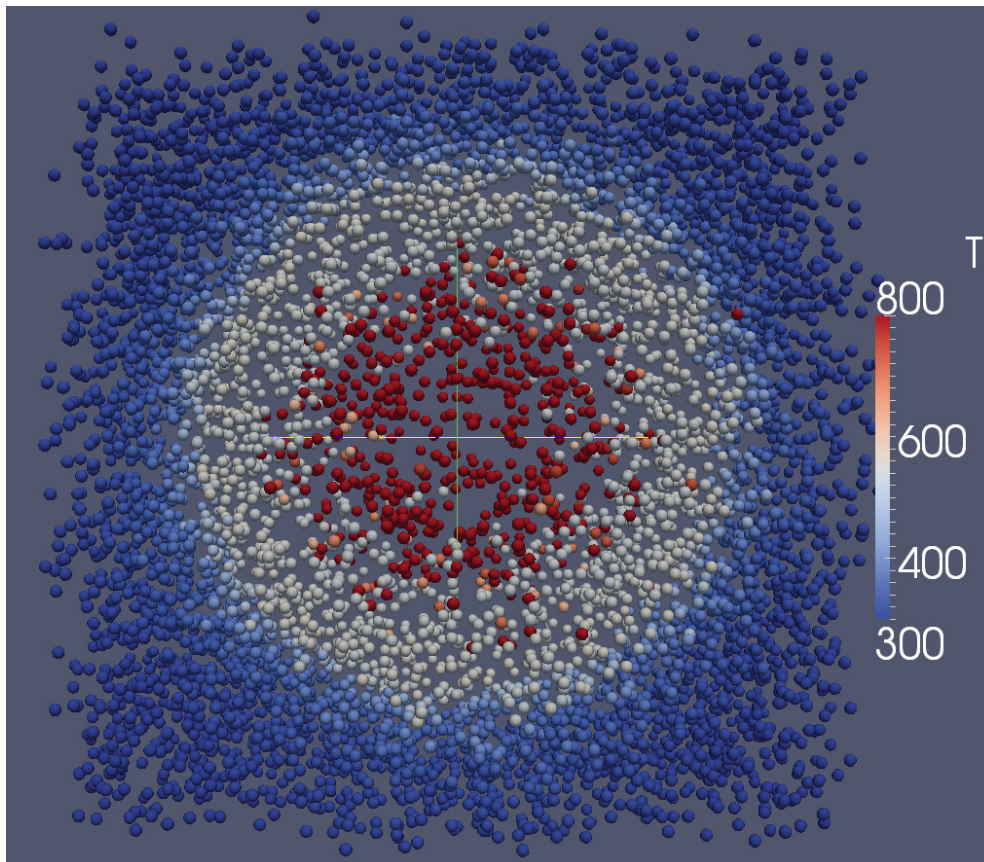


Abbildung 30: Partikeltemperatur 1.2 ms nach der Zündung

Anhand der Partikelverteilung in Abbildung 30 zeigt sich, dass aufgrund der Gasausdehnung im Zentrum der Zündung viel weniger Partikel vorliegen als am Rand. Abbildung 31 veranschaulicht dies sehr gut, wie aufgrund der Gasausdehnung durch den Funkenschlag die nahen Partikel weiter wegfliegen als die entfernten. Es sei aber auch erwähnt, dass die Effekte nur qualitativ übertragen werden können. Wird bei der Simulation eine Zündenergie von 10 mJ bis 70 mJ verwendet, so zeigt die Grafik die Effekte bei einem 1.5 J Funken.

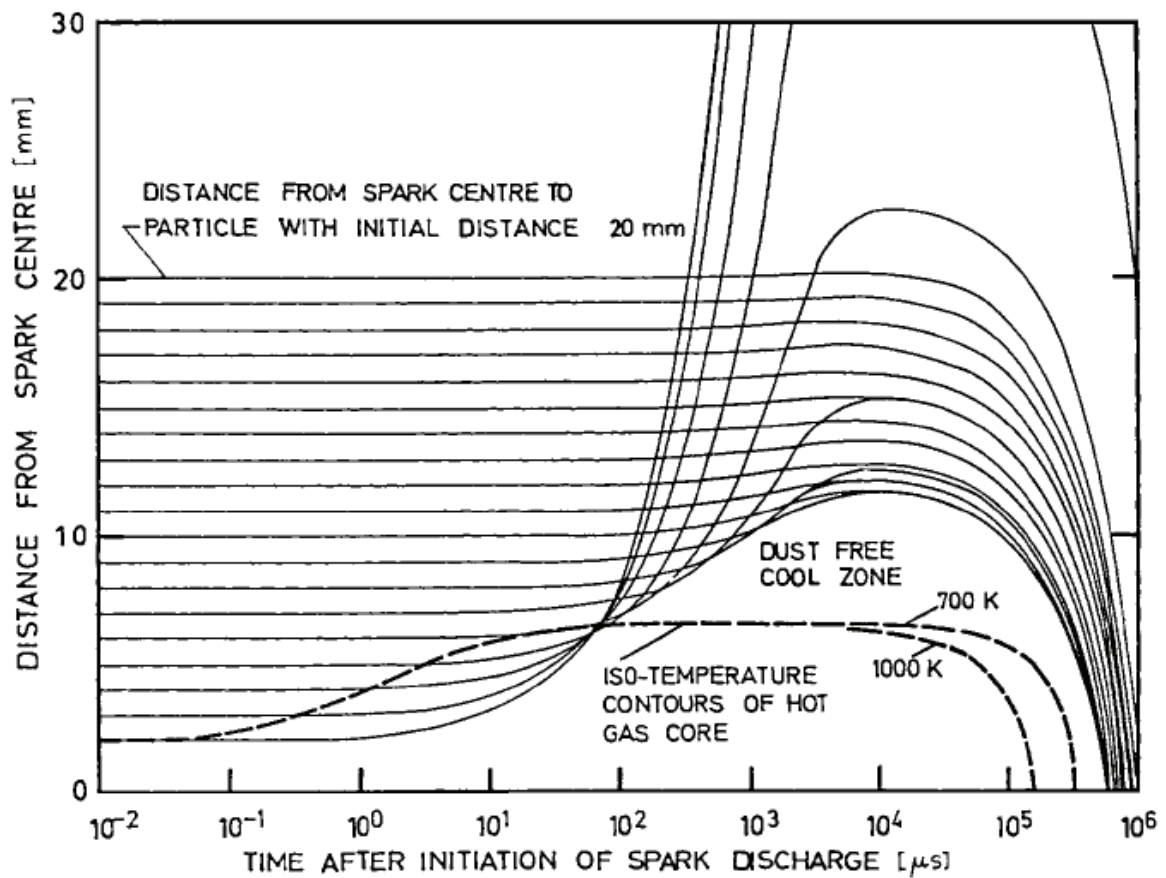


Abbildung 31: Partikelbewegung aufgrund der Gasausdehnung eines 1.5 J Funkens [30]

5.1.8 Flammengeschwindigkeit bei der Zündung

Die genaue Berechnung der Flammengeschwindigkeit wird an diesem Punkt nicht gezeigt, sondern auf das folgende Kapitel 5.2 verwiesen. Die genaue Vorgehensweise und die Bestimmung wird in diesem Kapitel später noch genau erklärt. Hier werden nur die Ergebnisse der Flammengeschwindigkeitsbestimmung am Zündpunkt gezeigt und diese diskutiert. Die in Abbildung 32 gezeigte Kurve wurde bei einer Staubkonzentration von 200 g/m^3 und einem Druck von 200 mbar bei einer Zündenergie von 10 mJ ermittelt. Bei diesen Bedingungen ließ sich das Gemisch mit den 10 mJ gerade noch entzünden.

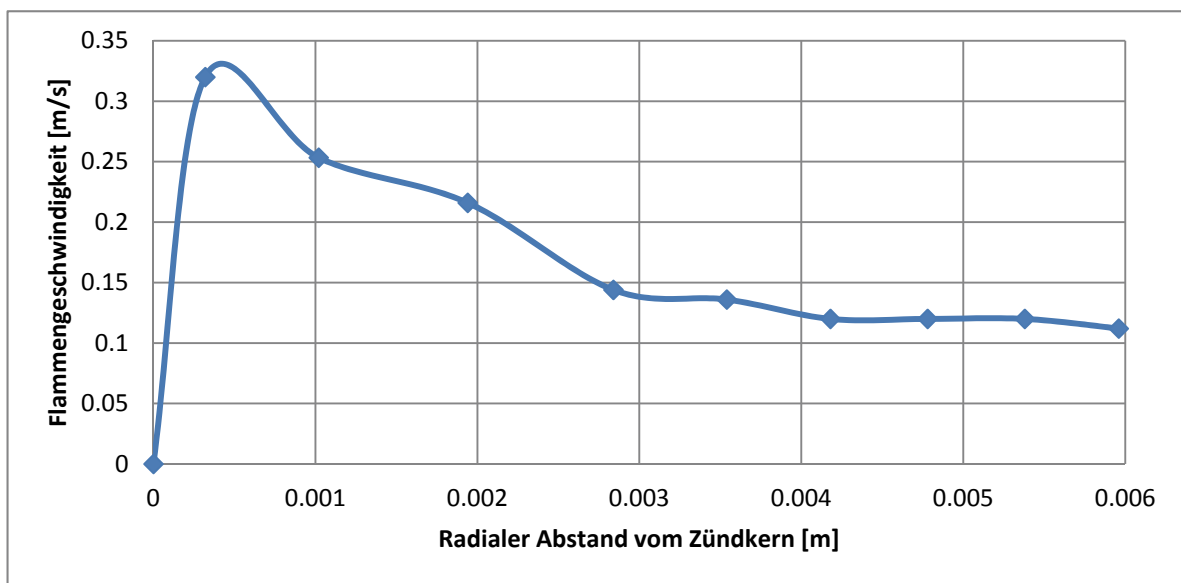


Abbildung 32: Flammengeschwindigkeit am Zündpunkt

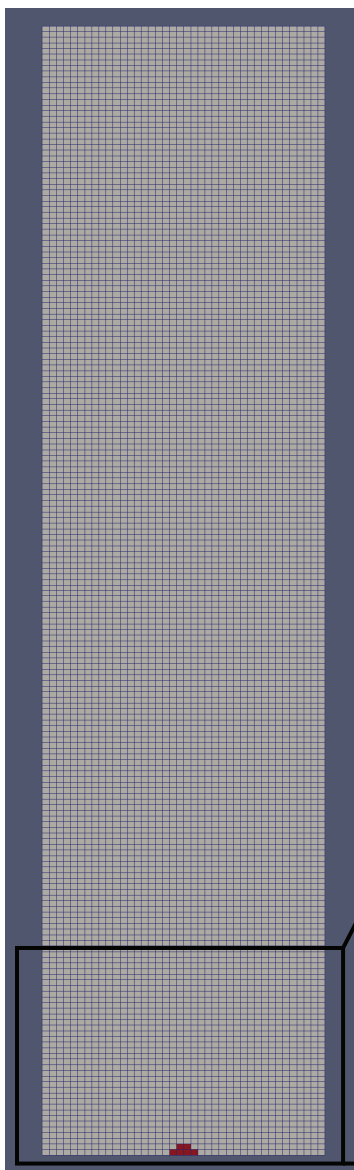
Es zeigt sich zu Beginn eine sehr hohe Flammengeschwindigkeit, dies ist durch die hohe Temperatur des Funkens sowie durch die hohe Turbulenz durch die starke Gasausdehnung gegeben. Je weiter sich die Flamme vom Zündpunkt entfernt, umso geringer wird die Turbulenz und somit auch die Umsetzung. Die Geschwindigkeit mündet bei 0.12 m/s in eine vorerst konstante Phase.

5.2 Flammengeschwindigkeit

Ein weiterer Testfall, welcher untersucht wurde, ist die Flammengeschwindigkeit. Hierfür wurde ein eigenes Gitter entwickelt, welches zur Berechnung der Flammengeschwindigkeit verwendet wurde. Um die Simulation durchführen zu können, wurde eine 2D – Berechnung durchgeführt. Es wurde eine gedachte Scheibe aus dem Flammenrohr verwendet. Die Geometrie besitzt eine Breite von 5 cm und eine Höhe von 20 cm. Die Dicke des 2D-Modells beträgt einen Millimeter. Das Lösen der Partikelwolke benötigt sehr viel Rechenleistung. Für jedes Partikel müssen Bewegungsgleichungen, Temperatur, Zusammensetzung und Position sowie viele weitere Parameter berechnet werden. Daher muss versucht werden, vor allem die Partikelanzahl gering zu halten, um die Simulation in einer akzeptablen Zeit durchführen zu können. Diese Größe der Geometrie ermöglichte es, einen Testfall innerhalb von 24 Stunden fertigzustellen. Das war ein guter Kompromiss zwischen Berechnungszeit und Genauigkeit. Am Lehrstuhl für Thermoprozesstechnik wurden Versuche an einem Flammenrohr mit einem Durchmesser von 14 cm und einer Höhe von 2 Meter durchgeführt. Um die Versuche mit der Simulation besser vergleichen zu können, wurde ein Teil dieser Geometrie ebenfalls in einer 2D – Simulation berechnet.

Die Fallstudien wurden jedoch an der kleineren, bereits beschriebenen Geometrie, durchgeführt. Um die Auswirkungen von Staubkonzentrationsänderungen, Temperaturänderungen und Druckänderungen feststellen zu können, wurde zuerst ein Standard definiert. Ausgehend von dieser Standardzusammensetzung wurde dann jeweils ein Wert (Staubkonzentration, Temperatur, Druck) verändert und die Änderung der Flammenfortpflanzung analysiert.

5.2.1 Verwendetes Rechengitter



Die Geometrie wurde in insgesamt 40 000 Zellen aufgeteilt, 40 in der Breite, 200 in der Höhe und 5 in der hier nicht sichtbaren Tiefe. Die Zündung wurde am Bodenpunkt vorgenommen und ist in Abbildung 33 rot dargestellt. Die Zellen besitzen in die z-Richtung, also der Flammenfortschrittsrichtung eine Länge von 1 mm.

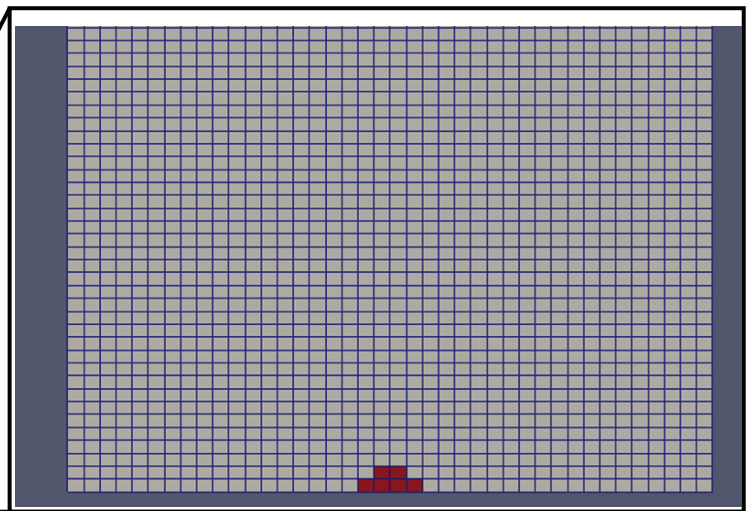


Abbildung 33: Geometrie der Flammengeschwindigkeitssimulation

5.2.2 Bestimmung und Auswertung der Flammengeschwindigkeit

Um nun die Position der Flammenfront zu bestimmen, wurden die Simulationenwerte der vertikalen Symmetrieachse exportiert. Als Indiz für die Flammenposition eigneten sich Temperatur oder Gaskonzentrationen. Zuerst wurde versucht über die Maximaltemperatur die Flammenfront zu lokalisieren. Dies funktionierte aber nicht, da sich während der Verbrennung Hot – Spots im Inneren der Flamme bildeten und diese in weiterer Folge die Temperatur der Flammenfront überstiegen. Somit wurden falsche Positionen bestimmt und die Auswertung wurde unmöglich. Als Alternative wurde jene Position bestimmt, bei der die Temperatur erstmals 400 Kelvin übersteigt. Dies führte zu einer sehr einfachen Auswertung mittels Excel. Als Speicherzeitschritt wurde in der Simulation eine Millisekunde verwendet. Wie sich in der Auswertung zeigte, war das aber zu klein. Die Flamme pflanzte sich pro Millisekunde nur etwa ein Volumenelement fort. In der Auswertung führte dies zu einer sehr sprunghaften Funktion. War die Ausbreitung von einem Zeitschritt zum anderen zwei Volumenelemente groß, so wurde die doppelte Geschwindigkeit bestimmt. Es musste also der Zeitschritt erhöht werden. Dazu wurde nur mehr jede fünfte Millisekunde die Position bestimmt. Mittels dieser Auswertung waren einerseits noch genügend Messpunkte vorhanden, um den Geschwindigkeitsverlauf gut darstellen zu können und andererseits aber auch die Abstände zwischen zwei Messpunkten groß genug, um das Diskretisierungsintervall der Geschwindigkeit gering zu halten. Aus dem Positionsunterschied und dem Zeitintervall konnte anschließend die Geschwindigkeit ermittelt werden. Da es sich um ein zeitdiskretes System handelt, gab es verschiedene Möglichkeiten die Flammengeschwindigkeit zu bestimmen. Berechnet man die Flammengeschwindigkeit, so werden dazu die Zeitwerte von beispielsweise t_1 und t_0 sowie die Positionswerte von x_1 und x_0 verwendet. Die Geschwindigkeit, welche durch die Division des Positionsunterschiedes durch das Zeitintervall ermittelt wird, entspricht der Durchschnittsgeschwindigkeit der Flamme zwischen den beiden Zeiten. Das heißt, man muss die Geschwindigkeit auf den Zeitpunkt, welcher genau zwischen t_1 und t_0 liegt, beziehen und nicht auf einen der beiden. Es wird also hier eine zentrale Differenzierung gebildet. Dies ist in der Berechnung zwar etwas aufwändiger als eine Vorwärts- oder Rückwärtsdifferenzierung, spiegelt die Realität aber besser wieder.

Tabelle 13: Darstellung der Flammengeschwindigkeit in Tabellenform

Zeit [ms]	Index der Flammenfront []	Position der Flammenfront [m]	Geschw. der Flammenfront [m/s]	Zentraler Zeitschritt [ms]	Zentrale Position [m]
0	0	0	0	0	0
5	11	0.011	2.2	2.5	0.0055
10	22	0.022	2.2	7.5	0.0165
15	36	0.036	2.8	12.5	0.0290
20	55	0.055	3.8	17.5	0.0455
25	82	0.082	5.4	22.5	0.0685
30	114	0.114	6.4	27.5	0.0980
35	155	0.155	8.2	32.5	0.1345
40	201	0.201	9.2	37.5	0.1780

Die Tabelle zeigt die Darstellung der Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Zeit und der Position der Flammenfront. Wie bereits erwähnt, stellen die Zeit- und Positionswerte jene Durchschnittswerte zwischen zwei Messpunkten dar. Aufgrund der Diskretisierung der Zeitachse kann nur ein Durchschnittswert zwischen zwei Messpunkten berechnet werden. Die mittlere Zeit, auf die sich diese Durchschnittsgeschwindigkeit bezieht, berechnet sich aus dem arithmetischen Mittel zwischen den beiden Zeitpunkten. Bei der Auswertung muss noch auf Folgendes geachtet werden. Die Temperatur der Symmetrieachse, welche für die Auswertung der Flammengeschwindigkeit herangezogen wird, wird in 200 Zellen unterteilt. Deswegen ergeben sich 200 Messpunkte und 201 Messwerte. Jeder Messwert wird zwischen zwei Zellen interpoliert. Das heißt die Flamme erreicht beim Verlassen der Kontur die Position 201. Es darf also der Messwert mit der Position 201 nicht mehr für die Auswertung herangezogen werden. Die Flammenfront hat zu diesem Zeitpunkt die Geometrie bereits verlassen und die genaue Position wird nicht mehr erfasst. Aus diesem Grund darf die exemplarisch dargestellte Auswertung den Wert bei 37,5 ms bzw. 40 ms nicht mehr erfassen. Abbildung 34 und Abbildung 35 zeigten die Flammengeschwindigkeit einer Berechnung bei 1 bar, einer Staubkonzentration von 200 g/m³ und einer Anfangstemperatur von 300 Kelvin.

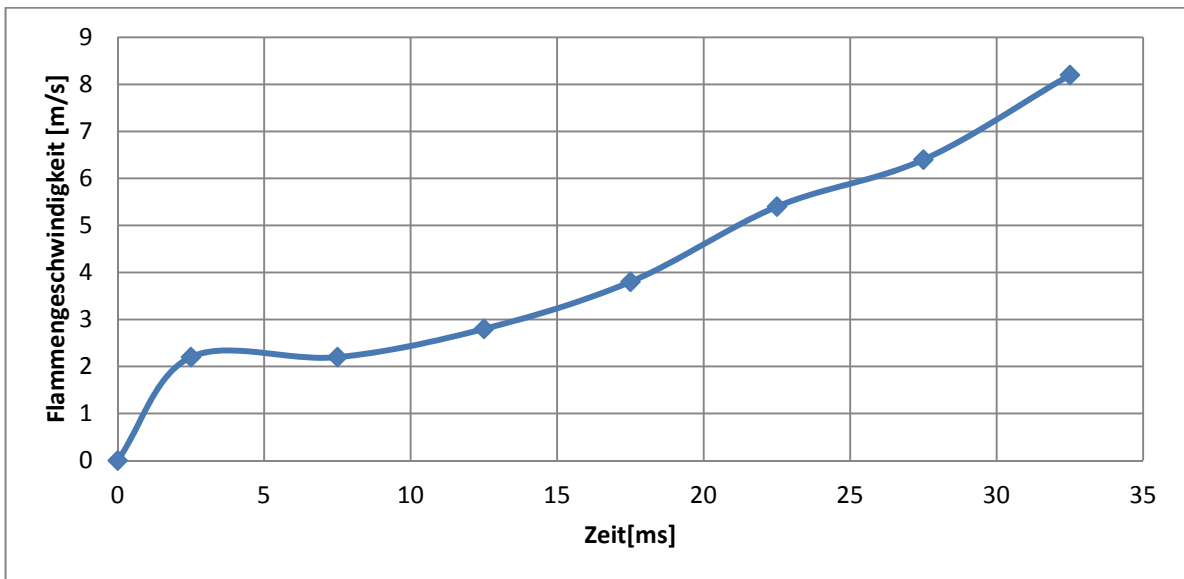


Abbildung 34: Darstellung der Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit der Zeit

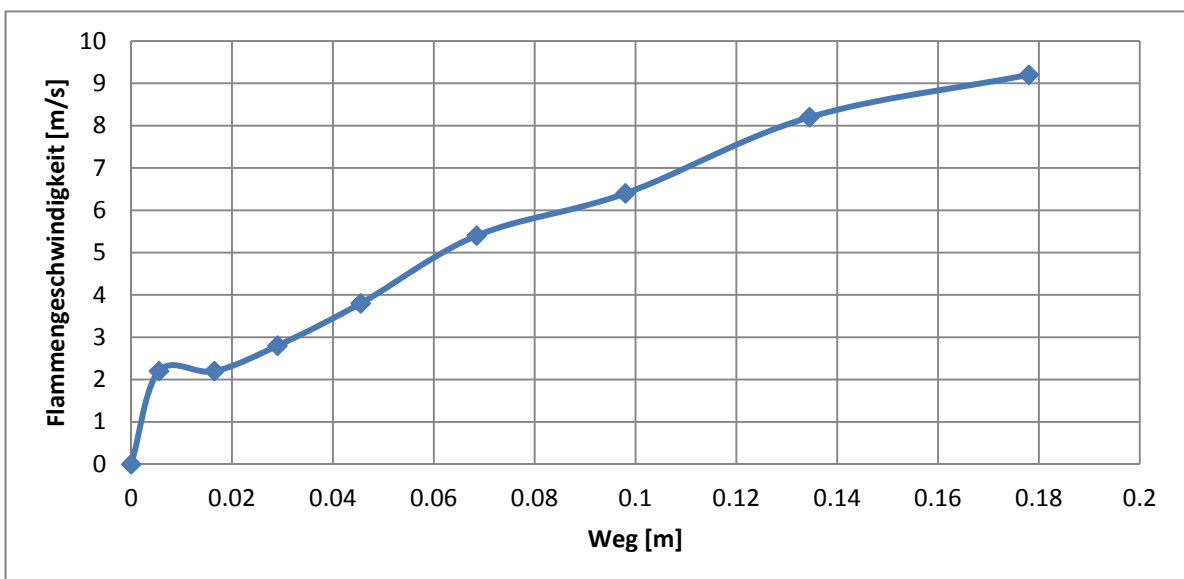


Abbildung 35: Darstellung der Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit des zurückgelegten Weges

Es ist gut zu erkennen, dass die Flammengeschwindigkeit mit der Zeit ansteigt. Je nach Versuchsbedingungen ergeben sich unterschiedliche Verläufe, welche noch genauer erklärt werden. Der starke Anstieg zu Beginn ist auf die Zündung zurückzuführen. Es war anfänglich ein Problem, das Stoffgemisch zu entzünden.

5.2.3 Ergebnisse der Auswertung

Um die verschiedenen Einflüsse von Staubkonzentration, Anfangstemperatur sowie verschiedenen Drücken bestimmen zu können, wurde ein Standard festgelegt und jeweils ein Parameter variiert. Ausgehend von einem Druck von 1 bar, einer Staubkonzentration von 200 g/m³ und einer Temperatur von 300 Kelvin wurde stets ein Parameter verändert und die Flammengeschwindigkeit berechnet. Der große Vorteil der Simulation ist es, dass auch Bedingungen simuliert werden können, welche in Form eines Versuchs nicht untersucht werden können. So kann die Flammengeschwindigkeit beispielsweise auch bei niedrigen Drücken und hohen Anfangstemperaturen sowie hohen Überdrücken simuliert werden. All diese Einstellungen sind am Versuchsaufbau nur schwer realisierbar.

5.2.3.1 Einfluss des Druckes

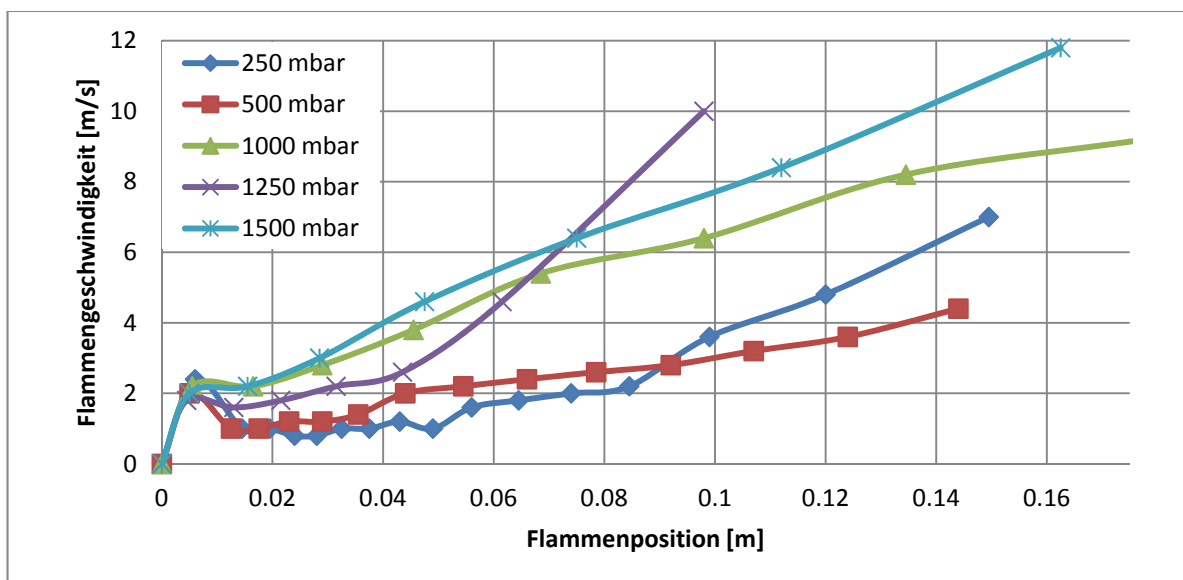


Abbildung 36: Abhängigkeit der Flammengeschwindigkeit vom Druck

Der allgemeine Trend in Abbildung 36 zeigt eine Zunahme der Flammengeschwindigkeit mit steigendem Druck. Vor allem in der Konstantphase stimmt diese Aussage sehr gut überein. Die Flammengeschwindigkeit bei 1250 mbar zeigt einen etwas abweichenden Verlauf. Es gibt zwei gegensätzliche Mechanismen, welche mit hoher Wahrscheinlichkeit die Veränderung der Flammengeschwindigkeit bewirken. Dies ist einerseits die Pyrolyse der Partikel, welche bei geringerem Druck schneller geht. Durch das Absenken des Drucks erfolgt eine schnellere Verdampfung der Ölsäure, da diese bereits bei geringerer Aufheizung den Siedepunkt erreicht. Dieser Mechanismus würde eine Erhöhung der Flammengeschwindigkeit bei geringerem Druck bewirken, was im vorliegenden Fall aber

nicht zutrifft. Vergleicht man die benötigte Energie für die Aufheizung der Ölsäure und jene der Verdampfung, so kann man leicht feststellen, dass der geringere Druck nur wenig Einfluss hat. Die Wärmekapazität der Ölsäure beträgt 1880 J/kgK [17] und die Verdampfungswärme 238825 J/kg [31]. Die benötigte Energie zur Aufheizung ist also im Vergleich zur Verdampfungswärme gering. Daher ist der geschwindigkeitsbestimmende Schritt jener der Verdampfung und nicht der Aufheizung. Der gegensätzliche Effekt, welcher offensichtlich in diesem Falle überwiegt ist, dass mit einer Druckerhöhung auch eine Erhöhung der für die Reaktion notwendigen Sauerstoffkonzentration bewirkt. Wie in Kapitel 5.2.5.2 später noch dargestellt wird, ist die Verbrennung bei einer Staubkonzentration von 200 g/m³ bei einem Druck von 1 bar noch überstöchiometrisch. Das heißt, es muss neben dem Stickstoff auch noch der nichtverbrannte Brennstoff sowie die Asche der Partikel aufgeheizt werden. Dieser Ballast entzieht der Verbrennung bei geringem Druck und geringer Sauerstoffkonzentration Energie. Bei höher werdendem Druck wird immer mehr Brennstoff umgesetzt, dadurch steigt die Energiefreisetzung und die Temperatur in der Flamme. Durch die erhöhte Energiefreisetzung kommt es aufgrund der Gasausdehnung zu höheren Strömungsgeschwindigkeiten und höheren Reaktionsgeschwindigkeiten. In Summe resultiert daraus eine höhere Flammengeschwindigkeit. Theoretisch muss es auch einen Umkehrpunkt geben. Zum Zeitpunkt wenn die Verbrennung unterstöchiometrisch wird, sollte die Flammengeschwindigkeit wieder abnehmen.

An diesem Punkt soll nicht mehr konkreter auf die Phänomene des Druckes eingegangen werden. Man könnte in diesem Bereich noch viele Fallstudien durchführen. Hier wird auf den Projektausblick verwiesen, indem verschiedene Vorschläge für weitere Fallstudien gemacht werden.

Im Bereich der Flammengeschwindigkeit im Unterdruckbereich wurden am Lehrstuhl für Thermoprozesstechnik umfangreiche Versuche durchgeführt. Kurz zusammengefasst zeigt sich auch in diesen Auswertungen eine Abnahme der Flammengeschwindigkeit bei verringerten Druckbedingungen [18]. Der große Unterschied besteht aber darin, dass diese Kurven einen Umkehrpunkt bei knapp unter einem bar zeigen, das heißt ein Maximum der Flammengeschwindigkeit tritt im leichten Unterdruckbereich auf. Bei der Auswertung der Simulationsergebnisse zeigt sich die maximale Flammengeschwindigkeit bei 1250 mbar, also im leichten Überdruckbereich. Dieser Unterschied ist wahrscheinlich auf die unterschiedlichen Berechnungsgeometrien zurückzuführen.

5.2.3.2 Einfluss der Anfangstemperatur

Um den Einfluss der Anfangstemperatur zu bestimmen, wurden das Temperaturfeld sowie die Partikel einheitlich auf die zu untersuchende Temperatur gesetzt.

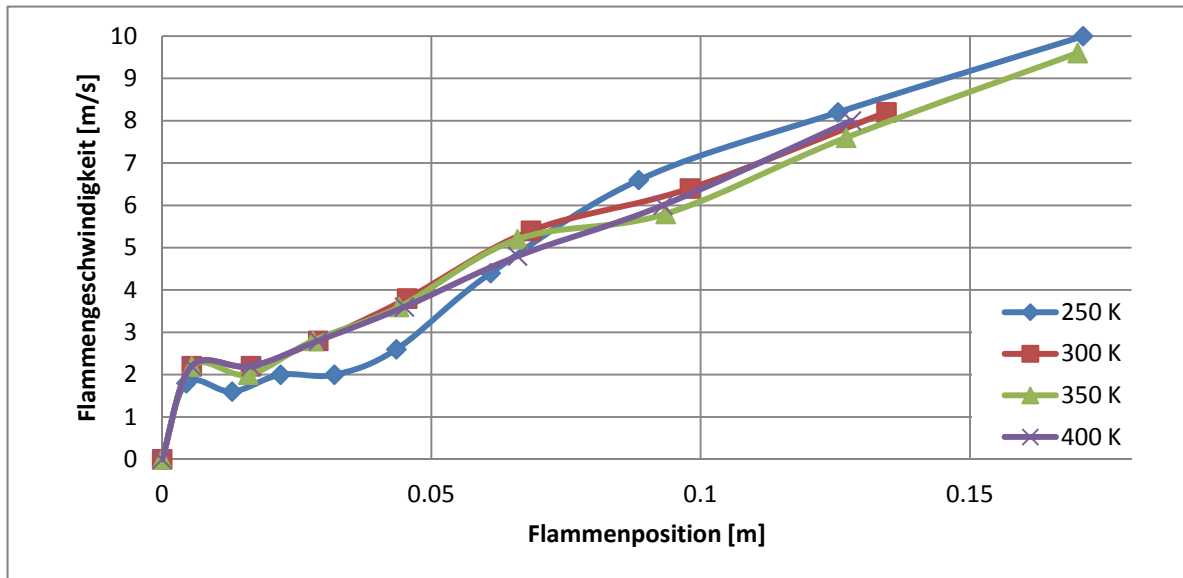


Abbildung 37: Einfluss der Anfangstemperatur auf die Flammengeschwindigkeit

Wie sich anhand der Auswertung zeigt, hat die Anfangstemperatur nur sehr wenig Einfluss auf die Flammengeschwindigkeit. Der Effekt ist der Gleiche wie bereits in Kapitel 5.2.3.1 erklärt wurde. Die Aufheizung benötigt wenig Energie im Vergleich zur Verdampfung. Deshalb spielt die Anfangstemperatur für die Geschwindigkeit der Flammenfortpflanzung nur eine untergeordnete Rolle. Interessant ist aber, dass es bei 250 Kelvin doch zu einer Abweichung kommt. Durch die etwas längere Partikelauflheizung kommt es im Bereich der Konstantphase zu einer geringeren Flammenfortpflanzung.

5.2.3.3 Einfluss der Rohrlänge

Es zeigt sich, dass die Rohrlänge in der der Versuch stattfindet, einen maßgeblichen Einfluss auf den Verlauf der Flammengeschwindigkeit hat. Vergleicht man die Ergebnisse von den beiden Rohrlängen bei 0.2 Meter und 1 Meter Länge, so erkennt man, dass die Flammengeschwindigkeit im kurzen Rohr höher ist als im längeren Rohr. Dieses Phänomen stellt ein Problem bei der Vergleichbarkeit der Simulationsergebnisse mit den Versuchsergebnissen, welche am Lehrstuhl für Thermoprozesstechnik durchgeführt wurden dar. Aufgrund des enormen Rechenleistungsbedarfs konnten die Parameterstudien nicht in der 2 Meter langen Geometrie durchgeführt werden. Die Berechnung für diese Geometrie

dauert für einen Versuchsfall über 3 Wochen. Es wurde aber eine Berechnung an dieser Geometrie durchgeführt, um einen Vergleich zu ermöglichen.

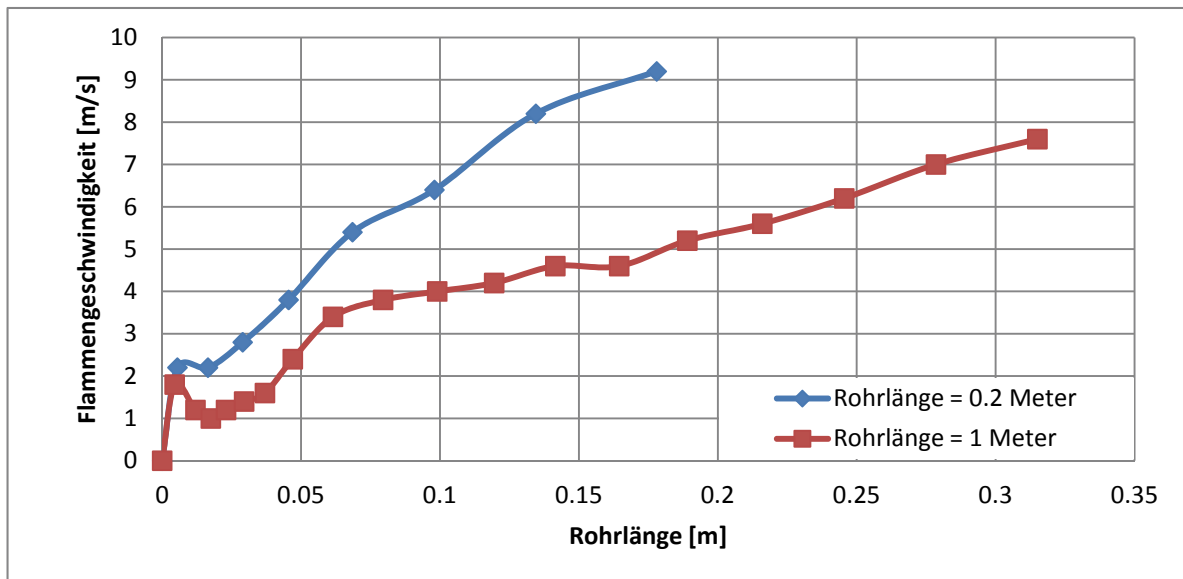


Abbildung 38: Vergleich der Flammengeschwindigkeit bei unterschiedlicher Rohrlänge

Die Beeinflussung der Flammengeschwindigkeit durch die verwendete Rohrlänge kann wie folgt erklärt werden. Bei der Verbrennung kommt es zu einer Gasausdehnung. Da die Masse im Bilanzraum der Verbrennung erhalten bleibt, sich jedoch die Temperatur ändert, so ändert sich auch der Druck. Da aber am Rohrende, also an der Öffnung, Umgebungsdruck vorliegt, so kommt es zu einer Druckdifferenz zwischen Verbrennungsort und Rohröffnung. Dieser Druckunterschied hängt von der Verbrennungstemperatur ab, welche aber in beiden Fällen annähernd gleich groß ist. Nun muss aber im längeren Rohr eine größere Luftmasse beschleunigt werden als im kürzeren. Die zu beschleunigende Luftmasse ist im Zündpunkt proportional zur Rohrlänge zwischen Zündpunkt und Rohröffnung. Dabei kann die Luftmasse wie folgt berechnet werden:

$$m_{\text{Staub/Luft}} = \frac{d_{\text{Rohr}}^2 \cdot \pi \cdot l_{\text{Zündpunkt-Öffnung}}}{4} \cdot \rho_{\text{Staub/Luft}} \quad (5-1)$$

Der Druck, welcher die Luft und Staubsäule beschleunigt, ist der Differenzdruck zwischen dem Verbrennungspunkt und der Öffnung und kann wie folgt berechnet werden:

$$\Delta p = p_{\text{Verbrennung}} - p_{\text{Umgebung}} \quad (5-2)$$

Aus dem Druckunterschied und der Luftmasse kann anschließend die Beschleunigung zum Zeitpunkt t bestimmt werden. Der Druckunterschied bewirkt eine Kraft, welche die Säule beschleunigt.

$$a(t) = \frac{F(t)}{m_{\text{Staub/Luft}}(t)} = \frac{\frac{\Delta p(t) \cdot d_{\text{Rohr}}^2 \cdot \pi}{4}}{\frac{d_{\text{Rohr}}^2 \cdot \pi \cdot l_{\text{Zündpunkt-Öffnung}}(t)}{4} \cdot \rho_{\text{Staub/Luft}}} = \frac{\Delta p(t)}{l_{\text{Zündpunkt-Öffnung}}(t) \cdot \rho_{\text{Staub/Luft}}} \quad (5-3)$$

Wie man anhand der gezeigten Formel erkennen kann, ist die Beschleunigung umgekehrt proportional zur Länge des Rohres. Dazu wurde ein Berechnungsversuch durchgeführt. Aus der Darstellung der Flammengeschwindigkeit aus Abbildung 38 wurde durch Ableitung nach der Zeit die Beschleunigung bestimmt. Abbildung 39 zeigt das Ergebnis dieser Berechnung. Man erkennt bis etwa 0.08 Meter den Einfluss der Zündung, welcher durch die erhöhte Turbulenz den Einfluss der Rohrlänge ausblendet. Zwischen 0.08 und 0.17 Meter erkennt man einen vom Kurvenverlauf her identischen Verlauf. Betrachtet man die Amplitude, so stellt die kürzere Rohrlänge eine etwa 3 bis 4 Mal so große Beschleunigung dar als der Versuch bei 1 Meter. Theoretisch sollte die Beschleunigung bei der 5 – fachen Rohrlänge, nur 20 % jener des 0.2 Meter Rohres sein. Da sehr wenige Messpunkte zur Verfügung standen, kann das Diagramm nur grob abgebildet werden. Die Trends werden jedoch qualitativ richtig abgebildet.

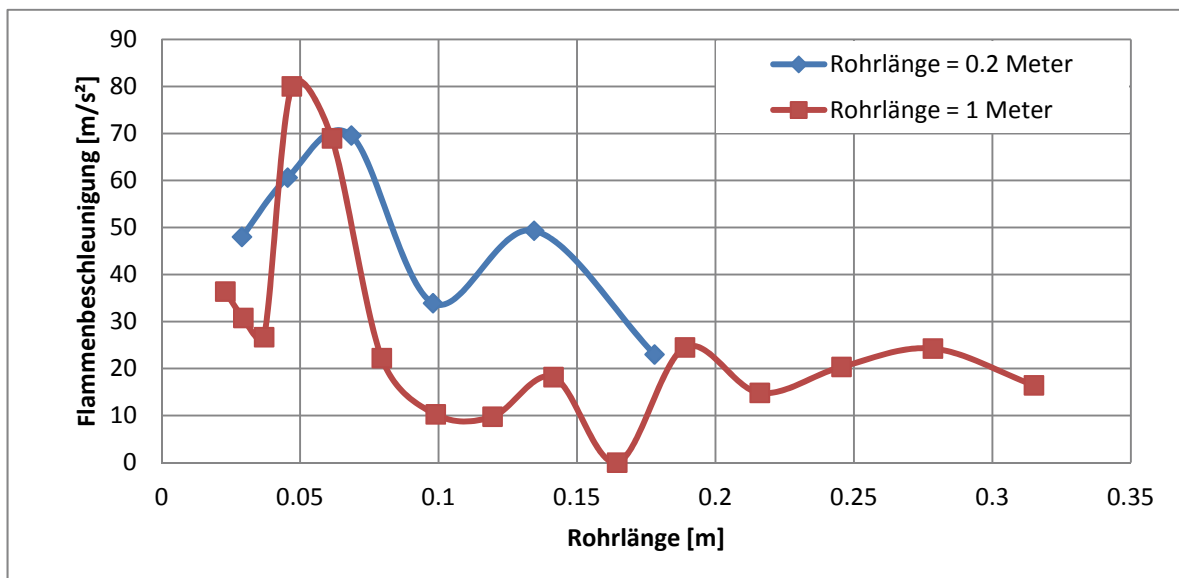


Abbildung 39: Beschleunigung der Flammenfront bei unterschiedlicher Rohrlänge

5.2.3.4 Einfluss der Staubkonzentration

Im Bereich der stöchiometrischen Verbrennung (116 g/m^3) ist die Flammengeschwindigkeit am höchsten. Verlässt man aber das Gebiet der stöchiometrischen Verbrennung, so sinkt die Flammentemperatur. Bei einer zu hohen Brennstoffmenge muss der nichtverbrannte Brennstoff zusätzlich aufgeheizt werden, bei einer zu geringen muss der Restsauerstoff aufgeheizt werden. Aus den beiden Gegebenheiten resultieren eine geringere Temperatur und daher eine geringere Ausdehnung. Die geringere Temperatur bewirkt einen kleineren Druckunterschied was sich wiederum in Form einer geringeren Beschleunigung zeigt.

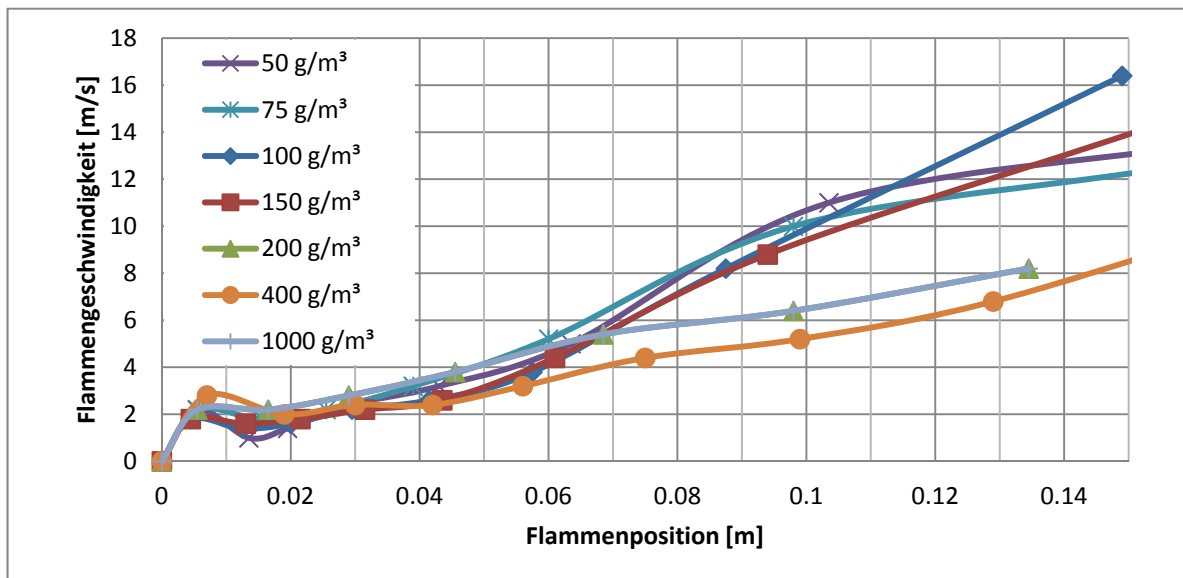


Abbildung 40: Einfluss der Staubkonzentration auf die Flammengeschwindigkeit

Aus der Abbildung 40 ist aber erkennbar, dass dieser Trend nicht völlig konsistent ist. Das heißt, es ist auch die Simulation mit einer bestimmten zufälligen Schwankung beaufschlagt. Die Trends können am besten bei sehr fortgeschrittenen Flammenpositionen abgelesen werden. Zu Beginn überwiegen offensichtlich die Effekte der Zündturbulenzen, sodass der Effekt der verschiedenen Staubkonzentrationen wenig Einfluss hat. Bei hohen Staubkonzentrationen kommt noch der Effekt hinzu, dass zusätzlich zur Luft auch der Staub aus dem Rohr ausgeschoben werden muss und daher die Expansion der Gase langsamer vor sich geht. Vergleicht man die Ergebnisse der Simulation mit Laborversuchen so zeigt sich jedoch ein abweichendes Verhalten. In der Literatur wird berichtet, dass die maximale Flammengeschwindigkeit bei deutlich überstöchiometrischen Bedingungen auftritt [18].

5.2.4 Problem der Zündung des Staub/Luft – Gemisches in der Rohrgeometrie

Zuerst wurde die Zündungsposition 5 cm über dem Boden gewählt. Da auch im Versuch ein geringer Abstand zwischen Boden und Zündung vorliegt. Da aber dies zu erheblichen Problemen führte, wurde dann die Position direkt am Boden gewählt. Zuerst wurde versucht das Gemisch mittels Funkenquellterm zu entzünden. Das Problem war dabei aber, dass durch die schnelle Gasausdehnung die Partikel vom Zündfunken wegflogen und nicht zünden wollten. Außerdem wurde eine starke Turbulenz hervorgerufen. Durch die schlagartige Gasausdehnung wurde das gesamte Staub/Luft – Gemisch in Bewegung versetzt. Dieses schwang im Rohr vor und zurück und verursachte eine erhebliche Partikelbewegung durch den Funken. Dadurch wurde die Flamme jeweils durch die rücklaufende Druckwelle komprimiert und expandiert. Das Resultat war eine Flammenfront, welche sich abwechselnd vorwärts und rückwärts bewegte. Eine Auswertung unter diesen Umständen wäre unmöglich gewesen. Das Hauptproblem war Folgendes. Durch die große Gittergröße von einer Kantenlänge von 1 mm war es nicht möglich den Zündfunken gut abzubilden. Auch die Strömungseffekte um den Funken gleichen nicht denen des Zündversuchs, da das Gitter zu grob war. Eine Verfeinerung des Gitters war aufgrund der Rechendauer nicht möglich. Zum Einstellen der passenden Bedingungen, um das Gemisch doch zu entzünden, war eine derart hohe Zündenergie nötig, dass dieser hohe Energieeintrag extreme Turbulenzen und Strömungen in der Geometrie hervorgerufen hatte. Das Gemisch mit einem Funken zu zünden, wurde dann verworfen. OpenFOAM bietet aber auch die Möglichkeit eine Zellanordnung für eine bestimmte Zeit mit einer konstanten Temperatur zu belegen. Die Überlegung war Folgende: die Zündung mit dem Funken erreicht eine Temperatur von ca. 30 000 Kelvin. Dadurch entsteht die extrem hohe Gasausdehnung. Selbst durch die extrem hohe Temperatur wird keine sehr gute Wärmeübertragung auf das Partikel erreicht, da die Dichte des Gases auf einen Bruchteil sinkt. Durch das Belegen der Zellen mit einer Temperatur von 3000 Kelvin sollte dieses Problem gelöst werden können. Das Gas kühlte aber so schnell durch das umgebende kalte Gas ab, dass die Temperatur nicht ausreichte, um die Partikel auf die notwendige Temperatur aufzuheizen. So wurde auch diese Zündungsmethode verworfen. Es musste also versucht werden, die Temperatur länger zu halten. Dazu können die ausgewählten Zellen über eine bestimmte Zeit auf eine definierte Temperatur gesetzt werden. Dies wurde wieder mit verschiedenen Größen und Temperaturen durchgeführt. Auch das funktionierte nicht, da wiederum die Partikel zu stark vom Zündpunkt wegflogen und kein geeignetes Brenngas/Luft – Gemisch bildeten. Auch der Versuch in die Zelle eine sehr hohe Partikelanzahl zu setzen, führte nicht zum Erfolg. Als zuverlässige Lösung zeigte sich dann

das Vorlegen eines kleinen aber sehr zündwilligen Gemisches. Dies wurde erreicht indem die Zündzelle mit einer Temperatur von 3000 Kelvin einem Sauerstoffgehalt von 90 Molprozenten und einem Brennstoffgehalt von 10 Molprozenten initialisiert wurde. In diesem Falle konnte die Zündung sehr klein dimensioniert werden, dadurch blieben auch die Strömungen, welche aufgrund der Zündung entstehen, sehr gering. Der hohe Gehalt von Sauerstoff ermöglichte eine längere Verbrennung da der limitierende Faktor stets der Sauerstoff war. Aufgrund des hohen Sauerstoffgehalts konnte sich die Flamme am Beginn besser ausbreiten. Der vorliegende Brennstoff ermöglichte es, dass die Verbrennung sofort startet und nicht erst die Partikel Brenngas freisetzen müssen. Die Temperatur von 3000 Kelvin wurde gewählt, da dies einerseits noch geringe Strömungen verursacht und andererseits aber eine genügend hohe Temperatur darstellt, um das Gemisch spontan zu entzünden. Der Nachteil dieses Verfahrens ist aber, dass die Flammengeschwindigkeit im Zündpunkt sehr schlecht aufgelöst werden kann, da es sich um stark modifizierte Bedingungen handelt. Die Geschwindigkeit kurz nach der Zündung kann aber in der Zündenergiesimulation bestimmt werden.

5.2.5 Phänomenologische Untersuchung der Verbrennungseffekte

Analysiert man den Verbrennungsvorgang genauer, so stellt man einige interessante Effekte fest. So stellt sich beispielsweise die höchste Temperatur nicht im Kern der Verbrennung ein, sondern im äußeren Drittel der betrachteten Geometrie. Außerdem kommt es durch die Gasausdehnung zu einer Partikelverdichtung in der Flammenfront.

5.2.5.1 3-Phasenmodell der Verbrennung

Anhand des Temperaturverlaufs kann man das Simulationsexperiment in drei zeitliche Phasen unterteilen, welche wie folgt aussehen:

- Zündphase: Die nötige Temperatur- und Stoffzusammensetzung bildet sich um eine Verbrennung zu ermöglichen, dies ist praktisch jener Vorgang, welcher zur direkten Zündung nötig ist.
- Konstantphase: Die Flamme breitet sich mit konstanter Geschwindigkeit, ausgehend von der Zündstelle, in alle Richtungen gleichmäßig aus, bis sie auf eine Wand trifft.
- Beschleunigungsphase: Wandeffekte bewirken eine bessere Durchmischung von Brennstoff und Sauerstoff und erhöhen die Verbrennungsgeschwindigkeit. Die Flammenfortpflanzungsgeschwindigkeit steigt.

Diese drei postulierten Phasen können auch anhand der Datenauswertung gut gezeigt werden. Die folgenden Grafiken veranschaulichen diese Phasen.

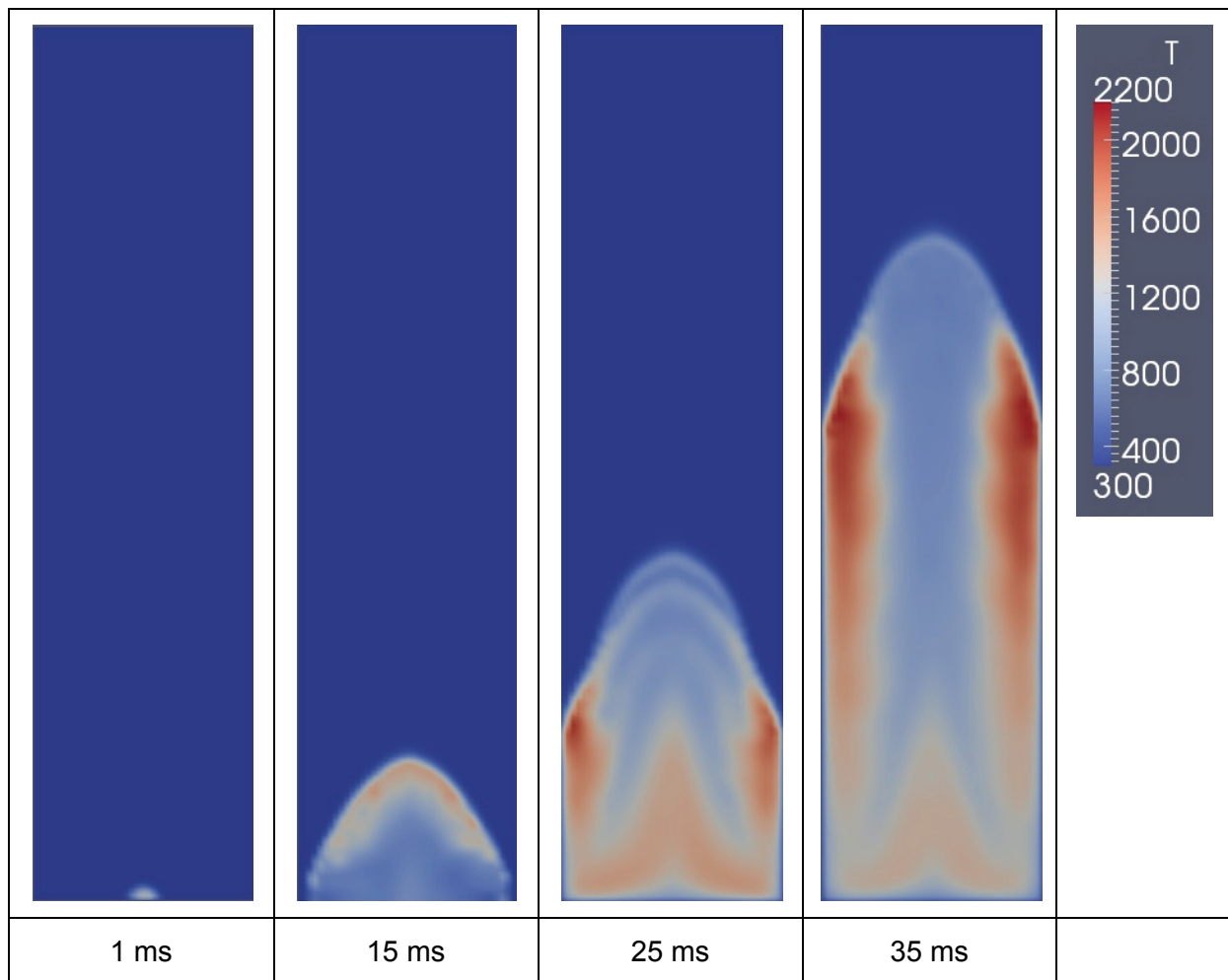


Abbildung 41: Darstellung des Ablaufs der Flammengeschwindigkeitsbestimmung

Die Bilder zeigen von links nach rechts den Ablauf der verschiedenen Phasen. Ganz links bei 1 ms erkennt man die Zündphase ganz zu Beginn der Verbrennung. Eine kleine Temperaturzelle bildet sich bis zum Erreichen der Wand (2. Bild von links bei 15 ms) zu einer leicht parabelförmigen Verbrennungsfront aus. Dazwischen erfolgt ein fließender Übergang zwischen der kugelförmigen Ausbreitung, hin zur parabelförmigen. All dies passiert bei annähernd gleicher Flammenfortschrittsgeschwindigkeit und stellt daher die Konstantphase dar. Ab 15 ms tritt die Beschleunigungsphase ein. Wie die Abbildung bei 25 ms zeigt, bilden sich an den Wänden heißere Stellen aus, sogenannte Hot – Spots. Durch den Wandeffekt mit Wandhaften, kommt es in diesem Bereich zu höheren Turbulenzen und einer besseren Durchmischung der Brennstoff – Sauerstoff – Spezies. Da die Verbrennung in der Flammenfront mischungslimitiert ist, beschleunigt die erhöhte Turbulenz die Verbrennung enorm. Durch die erhöhten Temperaturen kommt es zu einer stärkeren Gasausdehnung,

welche einen Beschleunigungseffekt hervorruft. Diese Beschleunigung erhöht weiterhin die Verbrennungsgeschwindigkeit im Wandbereich sowie die Temperatur. Die Temperatur erreicht im Wandbereich bei etwa 2200 Kelvin ihr Maximum. Diese Temperatur ist aber keineswegs als die Flammentemperatur zu sehen, sondern vielmehr als die Temperatur der lokalen Hot – Spots, welche auch nur für wenige Millisekunden vorliegt. Die Flammenfortschrittsgeschwindigkeit steigt weiter an bis sie die Geometrie an der Oberseite verlässt. Die Zeit nach dem Austritt der Verbrennung aus der Geometrie zeigt nur mehr Mischungseffekte von Konzentrationsunterschiede im Brenngas sowie leichte Abkühlungseffekte, auf welche in dieser Arbeit nicht näher eingegangen werden soll.

5.2.5.2 Geschwindigkeits- und Restbrennstoffverteilung

In diesem Unterpunkt wurden, wenn nicht anders angegeben, alle OpenFOAM – Visualisierungen bei den bereits erwähnten Standardbedingungen sowie bei 32 ms generiert.

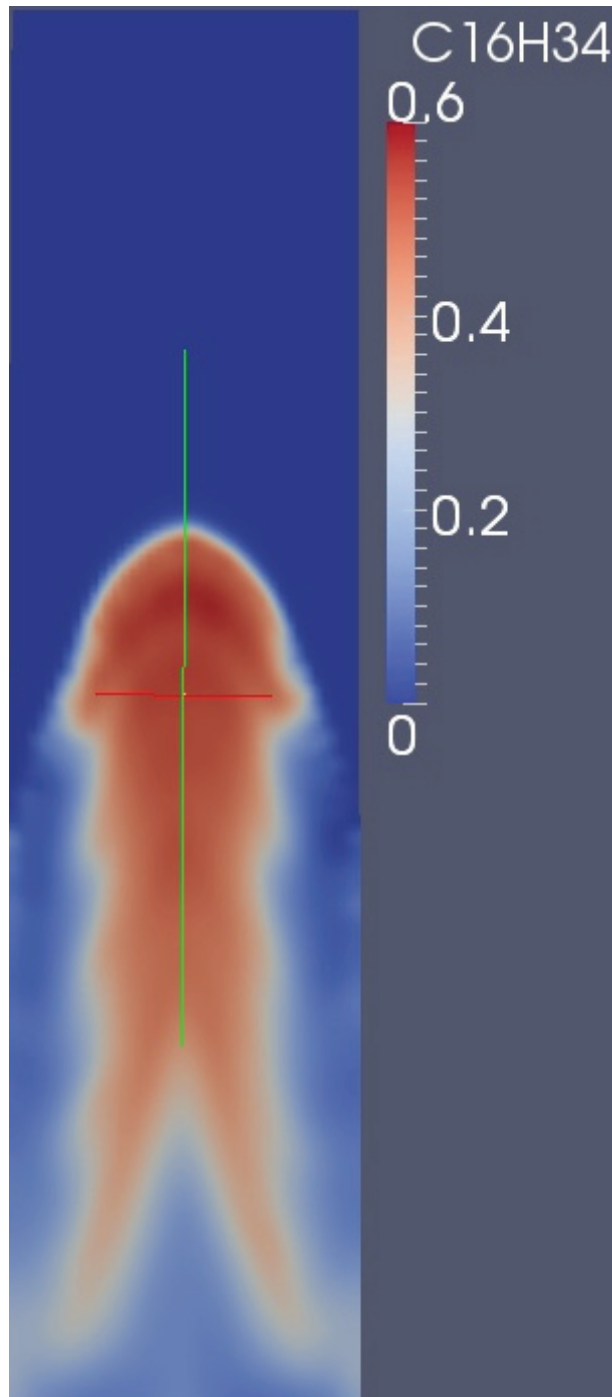


Abbildung 42: Brennstoffkonzentrationsverlauf bei 32 ms

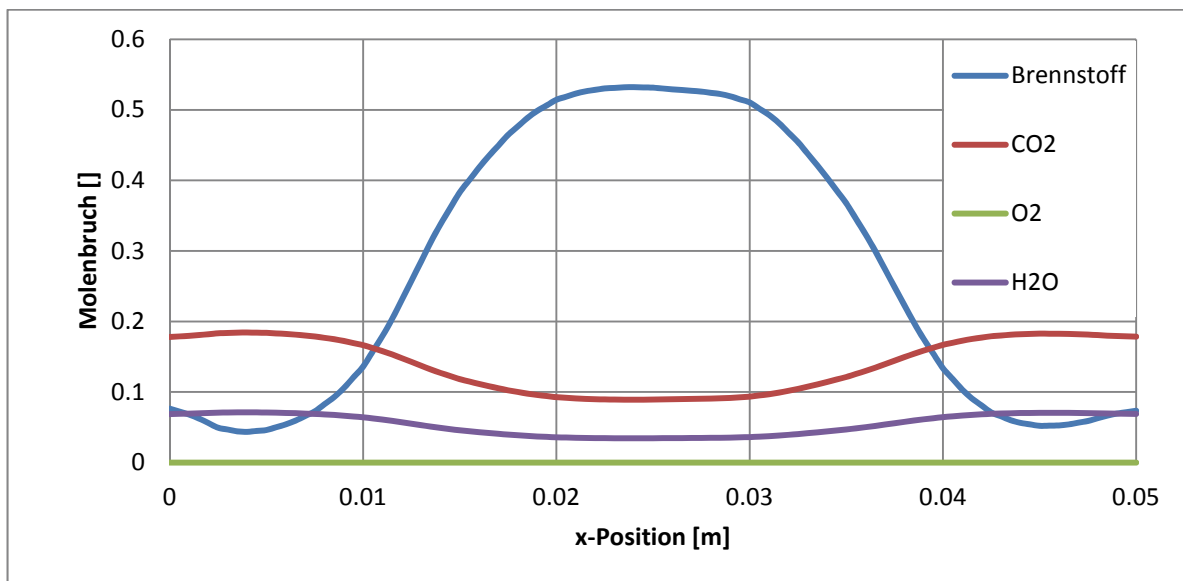


Abbildung 43: Verlauf der Gaskonzentrationen bei 35 ms und einem Zentimeter hinter der
Flammenfront

Es ist auffallend, dass obwohl eine gleichverteilte Ausgangslage vorliegt, es zu einer Konzentration der Brenngase im Zentrum der Verbrennung kommt. Vor allem die Tatsache, dass die Konzentrationsunterschiede derart groß sind, ist anfänglich eigenartig. Am Rand verbleibt kaum mehr Brennstoff und in der Mitte der Flamme ist die Verbrennung stark überstöchiometrisch. Auf Abbildung 42 ist gut zu erkennen, dass es zu einem wellenförmigen Konzentrationsverlauf kommt und in der Flammenfront ist eine Strahlenbildung zu erkennen. Auf diese wird später noch genauer eingegangen.

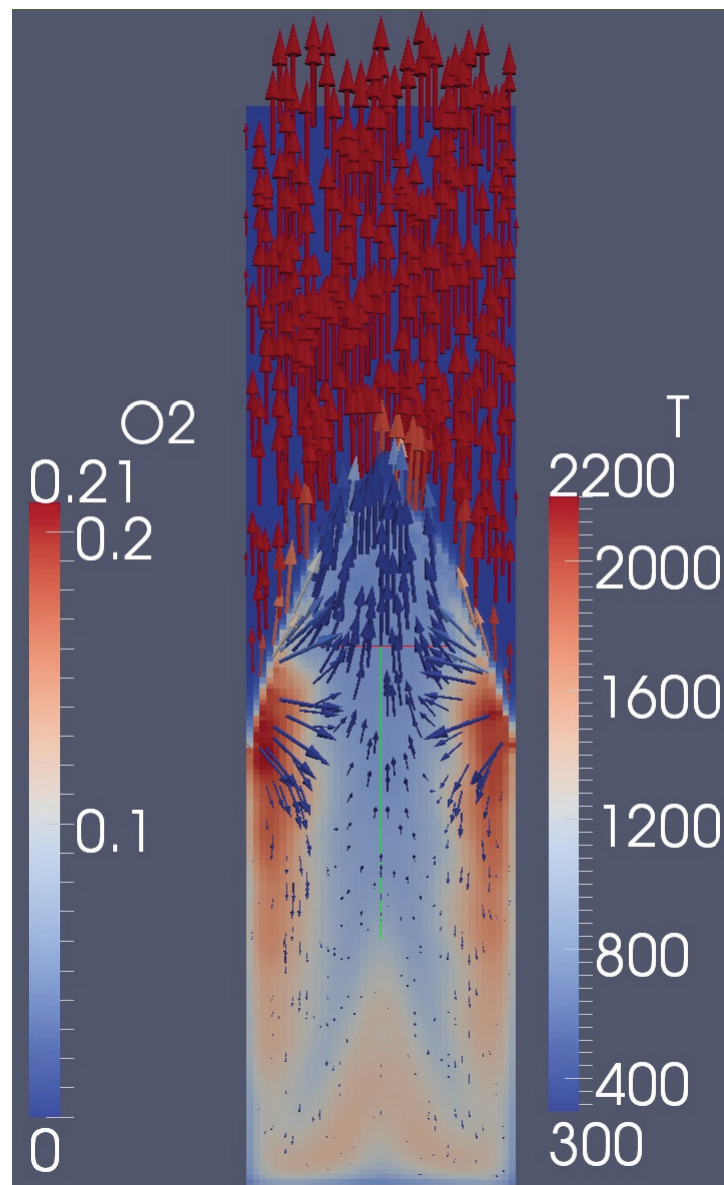


Abbildung 44: Vektorielle Strömungsgeschwindigkeit und Temperatur

Zieht man nun die vektorielle Geschwindigkeitsverteilung hinzu, und hinterlegt die Grafik mit der Temperatur, so können diese Effekte erklärt werden. Die Vektoren beschreiben das Geschwindigkeitsfeld und sind mit dem Sauerstoff eingefärbt. Die Einfärbung soll qualitativ an den Vektoren zeigen, wo die Flammenfront liegt. Alle blauen Pfeile liegen im verbrannten Teil und alle roten im unverbrannten Teil der Geometrie. Die Hinterlegung der Temperatur soll die Position der Hot – Spots quantitativ wiedergeben. Man erkennt, dass sich genau in der Reaktionszone an den Wänden die Hot – Spots bilden. Mit einer Temperatur von bis 2200 Kelvin stellen sie die höchste Temperatur im System dar. Die Kerntemperatur beträgt dabei lediglich etwa 900 Kelvin. Durch die hohe Temperatur in den Hot – Spots kommt es zu einer starken Gasausdehnung. Diese Ausdehnung wirkt in alle Richtungen und es entsteht

eine Strömung einerseits in die Fortschrittsrichtung aber auch hin zum Flammenkern sowie eine Rückströmung. Diese Volumszunahme an der Wand bewirkt einen Partikeltransport in Richtung Kern. Da die gesamte Verbrennung in Summe überstöchiometrisch ist und durch die Gasausdehnung ein Stofftransport in Richtung dem Zentrum stattfindet, kommt es zur Brenngasanreicherung im Kern. Auffallend ist im bereits verbrannten Teil, dass es sogar zu einer Rückströmung kommt. Das heißt, das verbrannte Gemisch strömt sogar gegen die Fortschrittsrichtung. Die beiden folgenden Bilder zeigen dies. Zur besseren Sichtbarkeit wurden die Partikel mit einem Skalierfaktor von 30 dargestellt. Im linken Bild ist die Partikelgeschwindigkeit in Richtung des Zentrums dargestellt. Wie bereits erwähnt und dargestellt, tritt die Strömung durch die Gasausdehnung in Richtung Zentrum auf und beschleunigt dadurch die Partikel auch in diese Richtung. Im mittleren Bild ist die Geschwindigkeit in die z-Richtung, also in Richtung der Ausströmöffnung dargestellt. Man erkennt, dass vor der Flammenfront die Partikelbewegung einheitlich in Richtung der Auslassöffnung gegeben ist. Die Geschwindigkeit der Partikel beträgt fast die Strömungsgeschwindigkeit des Gases. Nach der Verbrennungszone treten aber interessante Effekte auf. So werden die Partikel durch die Gasausdehnung nicht nur in Richtung Auslassöffnung beschleunigt, sondern auch gegen die Flammenfortschrittsöffnung. In Summe erfolgt also eine Beschleunigung gegen die Fortschrittsrichtung und in Richtung des Kerns. Dadurch kommt es in diesem Bereich einerseits zu einer Konzentration der Partikel und andererseits zum Anreichern des Brenngases im Kern. Das rechte Bild zeigt einerseits die Partikelkonzentration und andererseits die Strahlenbildung. Es ist gut zu erkennen, dass durch die bereits genannten Effekte die Partikelkonzentration am Rand geringer wird und sich im Kern erhöht. Außerdem kommt es zu einer Strahlenbildung. Diese Bildung ist auch die Ursache des wellenförmigen Konzentrationsverlaufs in Abbildung 42. Durch die Anreicherung der Partikel kommt es auch zur Anreicherung des Brennstoffs was im Anschluss den Verlauf bewirkt.

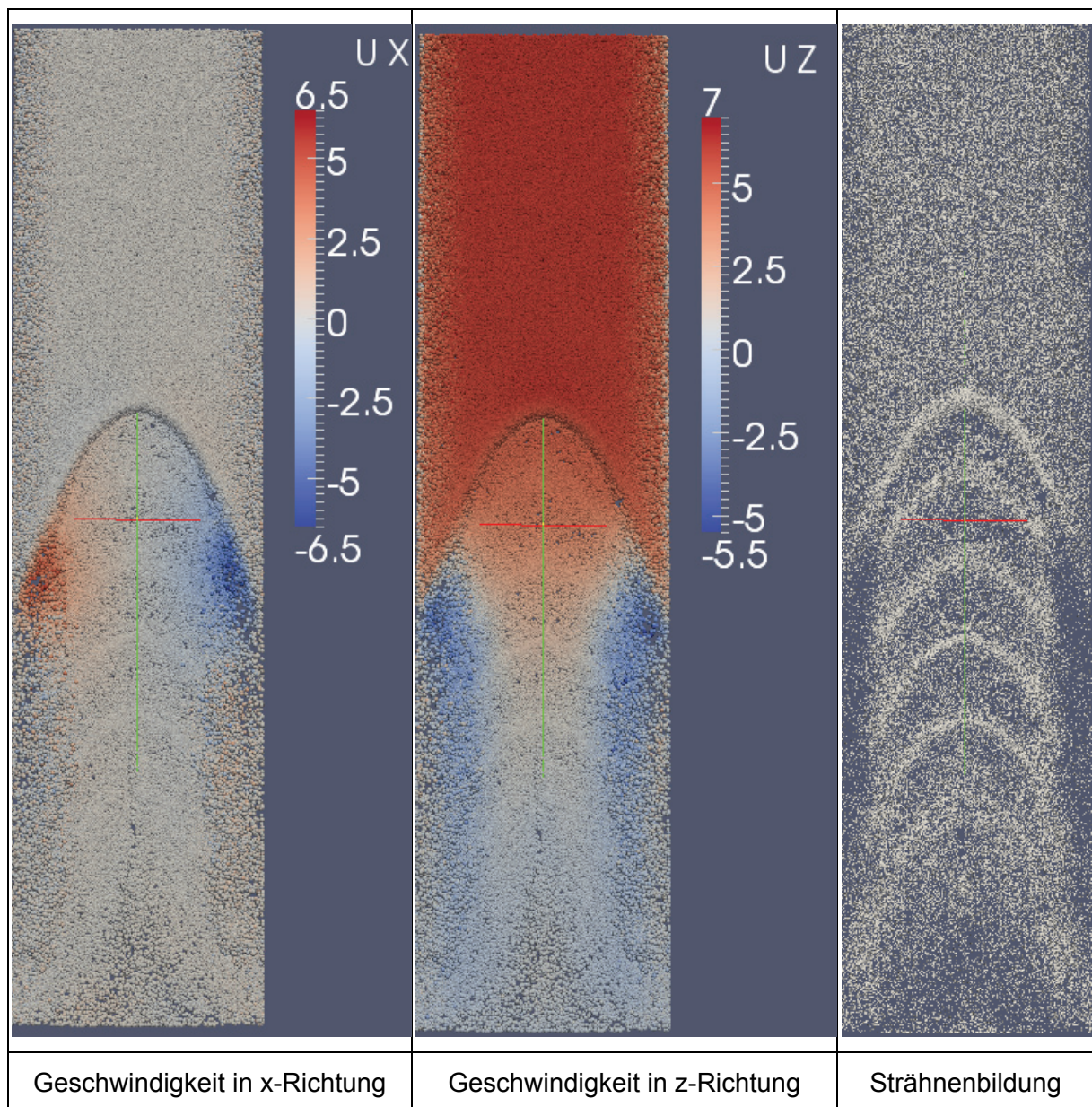


Abbildung 45: Analyse der Partikelbewegung während der Flammenfortpflanzung im Rohr 32 ms nach der Zündung

Diese Betrachtungen lassen sich anhand der beiden folgenden Diagramme veranschaulichen. Die Aufnahmen wurden bei 35 ms, bei einer Höhe von 10 cm, also genau in der vertikalen Rohrmittle, durchgeführt. Die Flamme war zu diesem Zeitpunkt 1 cm über dem Aufnahmeort.

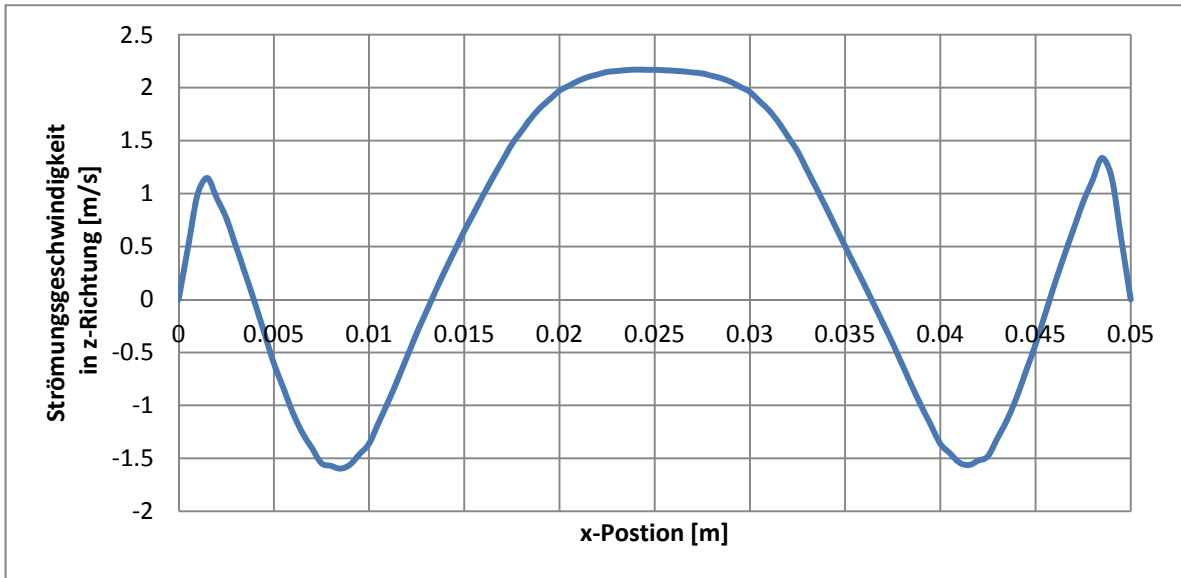


Abbildung 46: Axiale Strömungsgeschwindigkeit hinter der Flammenfront

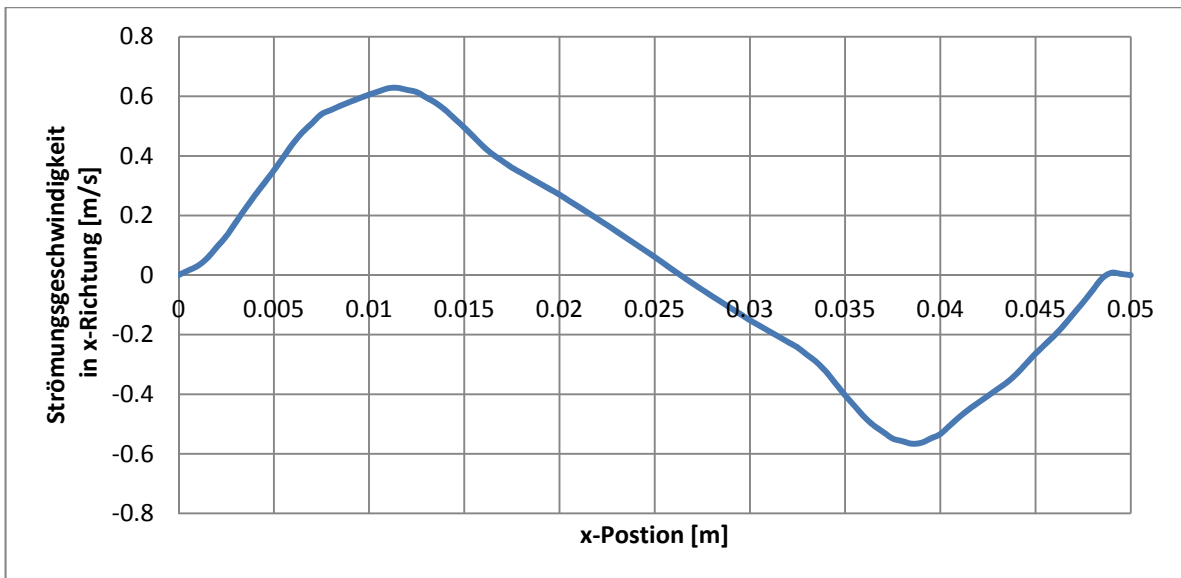


Abbildung 47: Radiale Strömungsgeschwindigkeit hinter der Flammenfront

5.2.5.3 Temperaturverteilung in der Flammenebene

Analysiert man die Temperatur der Flamme genauer, so bilden sich die bereits erwähnten Hot – Spots durch die Wandeffekte aus. Im Kern der Verbrennung kommt es zu viel geringeren Temperaturen als an den Wänden. Der folgende Plot zeigt den Temperaturverlauf in der Flamme. Auf der x-Achse des Diagramms ist die Entfernung vom linken Rand angegeben, der Verlauf zeigt also genau das Schnittbild der Geometrie auf halber Höhe, bei 35 ms. Die Flammenposition war zu dieser Zeit an der Wand einen Zentimeter über dem dargestellten Verlauf.

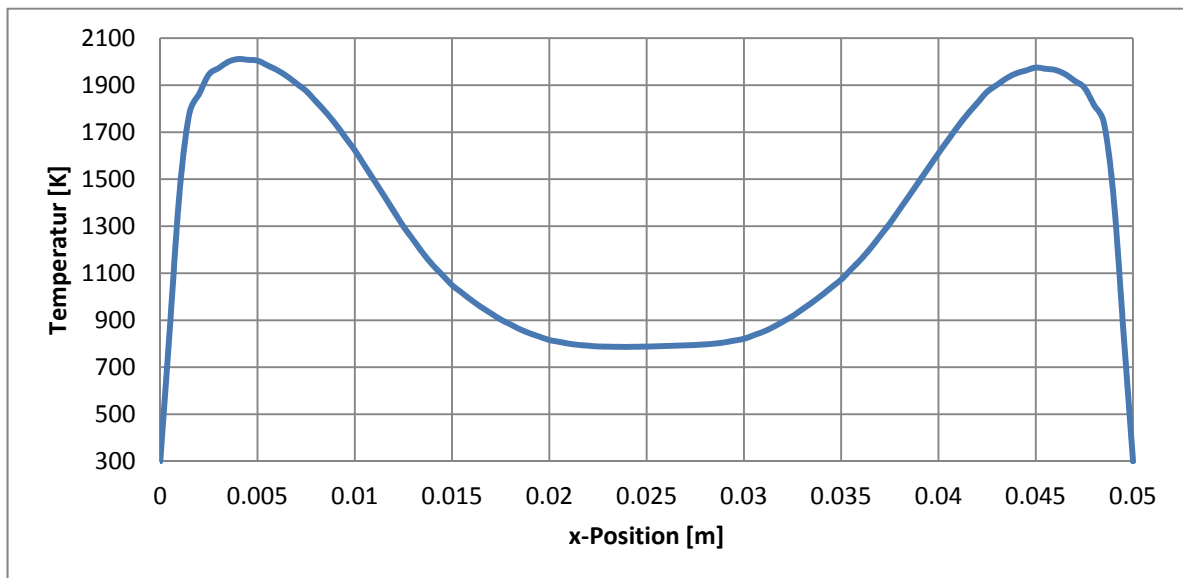


Abbildung 48: Radiale Temperaturverteilung während der Flammenfortpflanzung im Rohr

5.2.6 Vergleich zum großen Flammenrohr (2 Meter)

Um den Vergleich zu den Laborversuchen herzustellen, wurde die Geometrie des Laboraufbaus simuliert. Diese Simulation wurde einerseits in einer 2D und in einer 3D Simulation durchgeführt. Die Bedingungen waren 1 bar Umgebungsdruck bei 300 Kelvin und einer Staubkonzentration von 300 g/m^3 .

Es zeigt sich ein etwas abweichendes Verhalten zwischen den Messwerten und den drei Simulationsansätzen. Zu Beginn der Berechnung startet die Simulation sofort mit einer zu hohen Flammengeschwindigkeit. Dies kann ein Effekt der Zündung sein. Um das Gemisch in der Simulation zu zünden, muss ein Kugelvolumen von 5 mm auf eine Temperatur von 3000 Kelvin gesetzt werden. Diese Turbulenz, welche in diesem Augenblick auftritt, kann zu einer höheren Flammenfortpflanzung in der Simulation führen. Die Wandeffekte führen dann bei der Messung zu einem sehr rapiden Anstieg der Flammengeschwindigkeit. Dieser Anstieg ist in der Simulation eines Wedge – Gitters viel flacher und bei der Verwendung des 2D – Plattengitters viel steiler. Er tritt qualitativ gleich auf, jedoch zu einem anderen Zeitpunkt.

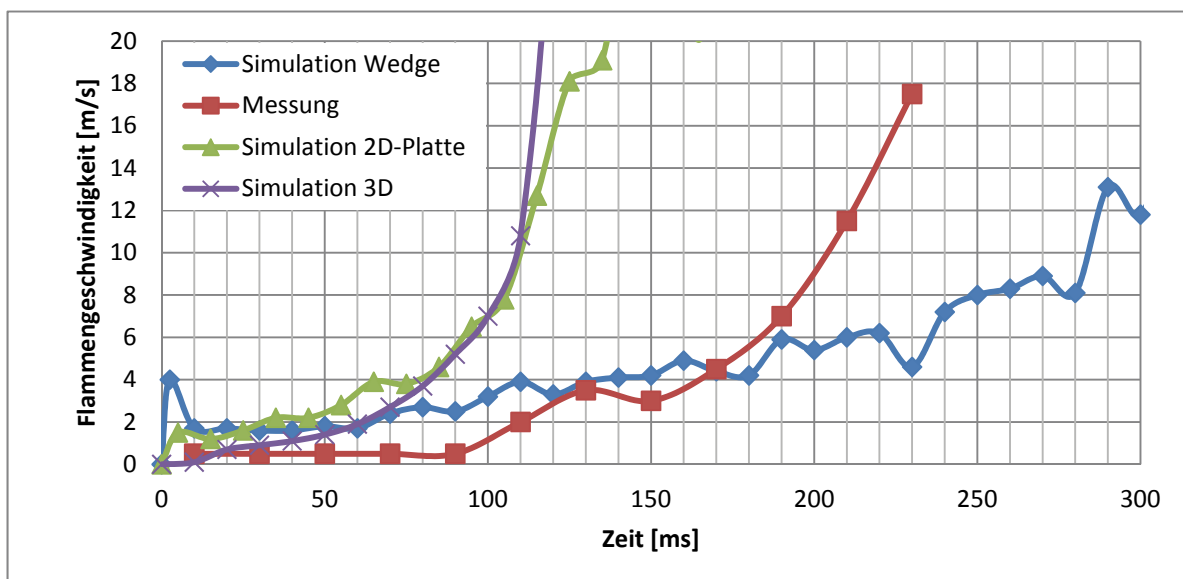


Abbildung 49: Vergleich der Flammengeschwindigkeit von Simulation und Messung am 2 Meter Rohr

Abbildung 50 zeigt die Flammengeschwindigkeit von Abbildung 49 detailliert zu Beginn des Versuchs. Es zeigt sich, dass zu Beginn der Berechnung das 3D – Netz jene Werte liefert die der Messung am nächsten kommen.

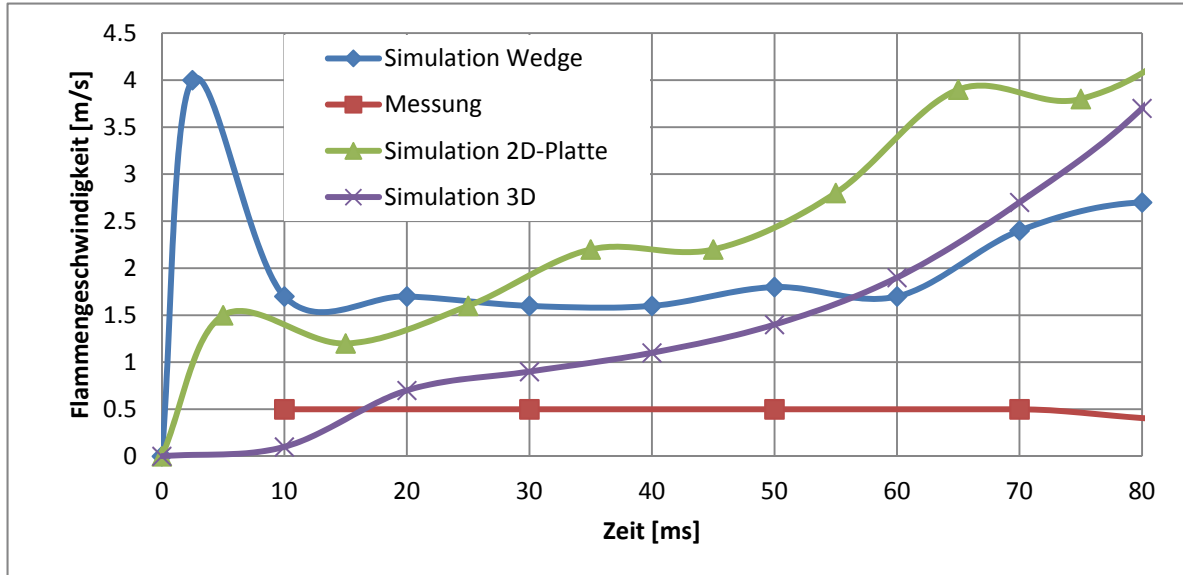


Abbildung 50: Flammengeschwindigkeit am Beginn (Detailansicht)

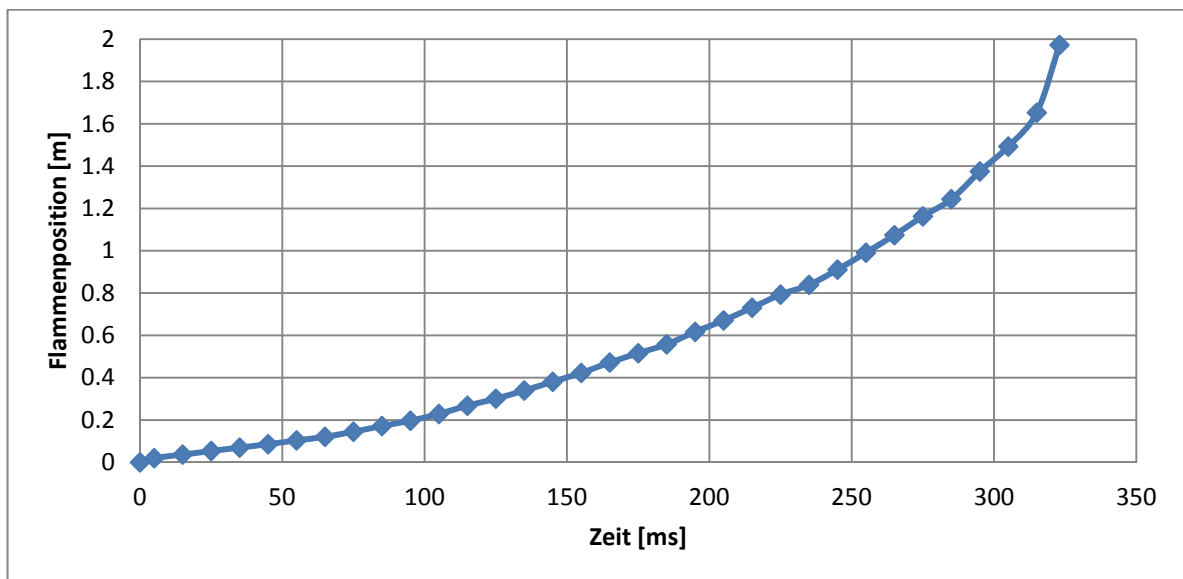


Abbildung 51: Darstellung der Flammenposition über die Zeit am 2 Meter Rohr mit dem Wedge - Gitter

5.2.7 Darstellung der Flammenfront im 2 Meter Rohr

Die folgende Abbildung 52 zeigt im unteren Bildteil die Flammenfront, welche sich in Richtung der Rohröffnung ausbreitet und im oberen Teil die Flammenfront in Richtung der geschlossenen Rohrseite. Anhand dieser Darstellung können die bereits erwähnten Effekte der Wandturbulenzen gut erkannt werden. Es zeigt sich, dass auf der dargestellten 1000 Kelvin Isotherme im Bereich der Wand eine Reaktionslimitierung und im Bereich der Rotationsachse eine Mischungslimitierung vorliegt.

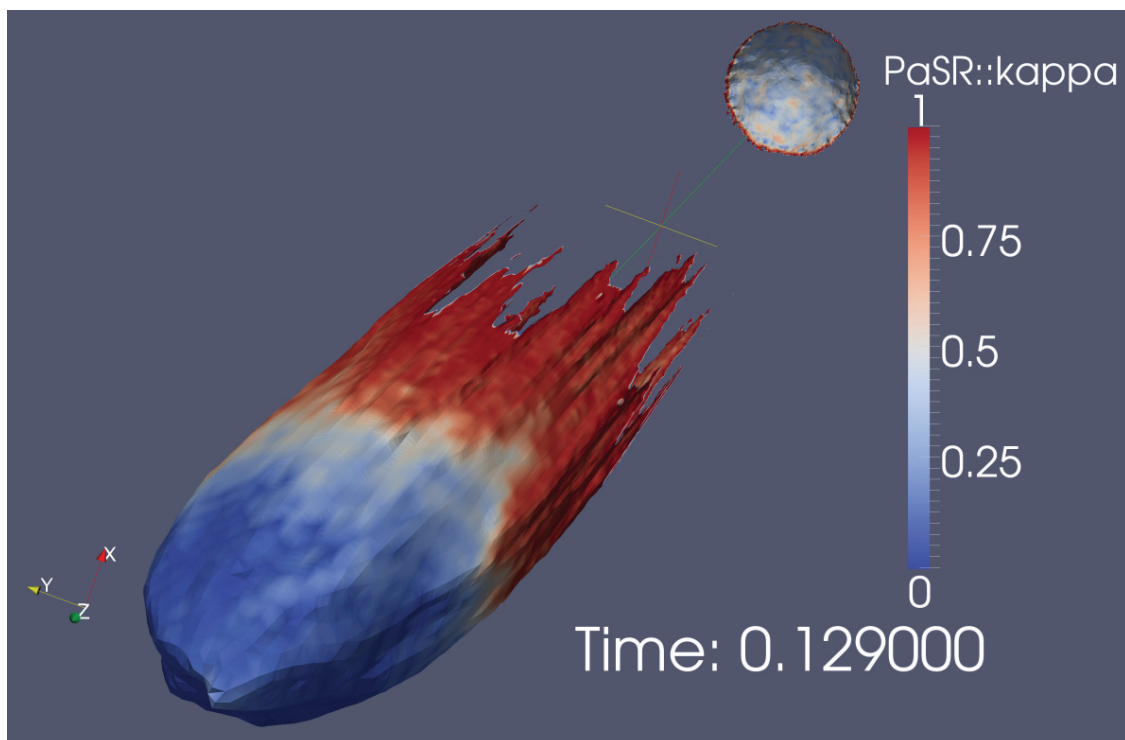


Abbildung 52: Darstellung der Flammenfront im 2 Meter Rohr

5.2.8 Einschränkungen des Modells

5.2.8.1 Abbildung in 2D

Die wohl größte Einschränkung des Modells ist, dass dieses nur in 2D abgebildet werden kann. Aufgrund der hohen Partikelanzahl sowie der großen Anzahl der Zellen ist es nicht möglich Parameterstudien in einer 3D – Geometrie durchzuführen. Eine einzige derartige Berechnung würde mehrere Wochen dauern. Dies birgt den Nachteil, dass der Effekt von Rückvermischungen oder lokalen höheren Flammgeschwindigkeiten in manchen Teilen der Geometrie keine Berücksichtigung findet.

Durch die Tatsache, dass das Netz ein dünner Quader ist und nicht als Keil ausgeführt wurde, besteht der Nachteil, dass der Effekt der Rundung des Rohres verloren geht. Bildet man aber mittels der Randbedingung „Wedge“ einen teilrotationssymmetrischen Körper ab, so entsteht das Problem, dass die innersten Zellen sehr klein, im Vergleich zu den äußersten sind. Setzt man die Zellgröße so groß, dass die kleinsten Zellen wenigstens zwei Partikel enthalten, so ist das Netz schon zu grob. Aufgrund dieser Tatsache fiel die Entscheidung auf das Quadernetz und nicht auf das Keilnetz. Durch die gleichmäßige Zellengröße konnten derartige Effekte verhindert werden.

5.2.8.2 Vollständige Gleichverteilung der Partikel

Im vorliegenden Berechnungsmodell wurde die Partikelwolke mittels eines Zufallsgenerators aus Excel erzeugt. Wie aber aus den Experimenten zu sehen ist, liegen die Partikel nie völlig gleichverteilt vor. Meist besitzen diese auch eine Fallgeschwindigkeit und verursachen Strömungen im Flammenrohr. All diese Effekte wurden bei der Simulation ausgeblendet. Es wäre zwar möglich gewesen, diese Effekte wie Anfangspartikelbewegung, Strömungen im Rohr, etc. zu berücksichtigen, um die Vergleichbarkeit mit den Experimenten zu verbessern. Darauf wurde aber ganz gezielt verzichtet, da das Hauptaugenmerk auf verschiedene Einflussfaktoren liegen soll. Deshalb wurde versucht, so viele Einflussfaktoren wie möglich auszublenden oder konstant zu halten. Es wäre aber möglich, im Bereich von Anfangsströmungen oder Partikelbewegungen noch weitere Fallstudien durchzuführen.

5.2.8.3 Ausbrandverhalten und innere Temperaturverteilung

Die Partikel werden im Modell als Kugeln dargestellt, welche aus drei Substanzen aufgebaut sind. Dies ist die flüssige Ölsäure, der Kohlenstoff und Asche. Die Kugeln besitzen eine einheitliche Temperatur, also keine innere Temperaturverteilung. Diese Einschränkung spielt bei sehr hohen Aufheizraten eine Rolle. Real wird das Partikel immer eine innere Temperaturverteilung besitzen. Die Energie, die dem Partikel zugeführt wird, wird zur Erwärmung aller Komponenten bzw. zur Verdampfung der Ölsäure verwendet. Das Ausdampfen der Ölsäure besitzt also in der Modellvorstellung keinen Widerstand. Real muss die Ölsäure durch die poröse Struktur nach außen gelangen, um sich dann mit dem Sauerstoff zu mischen. Dies besitzt einen gewissen Diffusionseffekt, welcher die Ausdampfung real verlangsamt. All dies konnte im Modell nicht abgebildet werden. Das Partikel besitzt eine einheitliche Temperatur und das Ausdampfen erfolgt ohne Transportwiderstand im Partikel.

5.3 Berechnung des Explosionskugelversuchs

Mithilfe des Partikelmodells kann auch der Versuch in der Explosionskugel berechnet werden. In diesem Bereich wurden keine Fallstudien mehr durchgeführt, es soll nur exemplarisch gezeigt werden, was man mit dem Partikelmodell noch alles berechnen könnte. Der Versuch wird in einer genormten Apparatur durchgeführt. In diese Kugel wird der Staub eingeblasen und anschließend zur Zündung gebracht. Über einen Drucksensor an der Kugelwand wird dann der Druckverlauf gemessen und die entsprechende sicherheitstechnische Kenngröße „Maximaler zeitlicher Druckanstieg“ sowie der „Maximale Explosionsdruck“ ermittelt. Dazu wurde ein kleiner Ausschnitt der 20 Liter Kugel mithilfe des Partikelmodells berechnet.

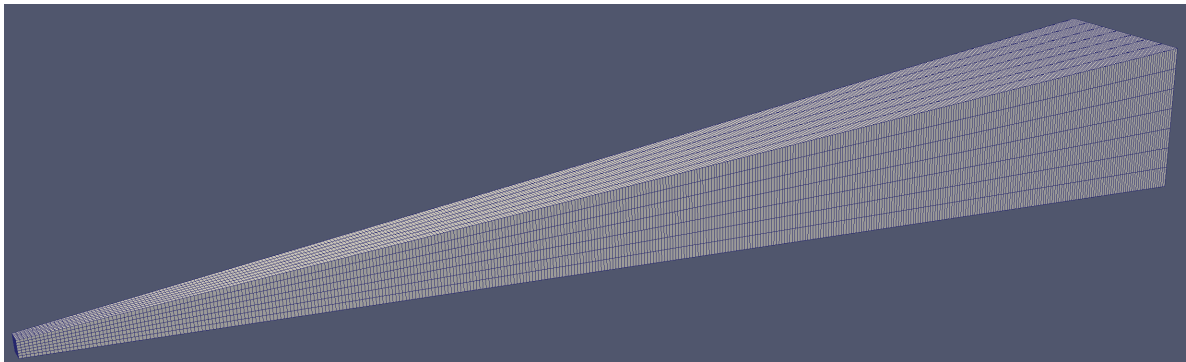


Abbildung 53: Geometrie des Kugelversuchs

Die Abbildung 53 zeigt die verwendete Geometrie, diese stellt einen Ausschnitt der Kugel dar. Die quadratische Fläche am Kern der Kugel besitzt eine Oberfläche von 4 mm^2 und die Kugeloberfläche rechts eine Fläche von 4 cm^2 . Die Zündung erfolgt links und der Druck wird an der rechten Seite der Geometrie ermittelt. Als Randbedingung wurde an der Kugelwand (rechts) eine „wall“ verwendet. Alle anderen Flächen sind eine „symmetryPlane“. Versuche die Berechnung in einer 1D – Geometrie, also nur Zellen in einer Richtung aneinanderzureihen, scheiterten aufgrund diverser Partikeleffekte, welche das Flugverhalten falsch abbildeten.

Der zeitliche Druckverlauf zeigt ähnliche Phänomene wie alle anderen Testfälle. Zu Beginn passiert sehr wenig, das zeigt den Zündvorgang. Sobald es zu erhöhten Turbulenzen kommt, steigt auch die Verbrennungsgeschwindigkeit stark an. Es kommt zu einem sehr raschen Anstieg des Drucks. Gegen Ende des Versuchs zeigt sich noch ein sehr geringer Druckanstieg, welcher auf das Verbrennen von Restsauerstoff zurückzuführen ist. Der

Versuch wurde bei einer Staubkonzentration von 600 g/m^3 , einem Anfangsdruck von 1 bar und einer Temperatur von 300 Kelvin durchgeführt.

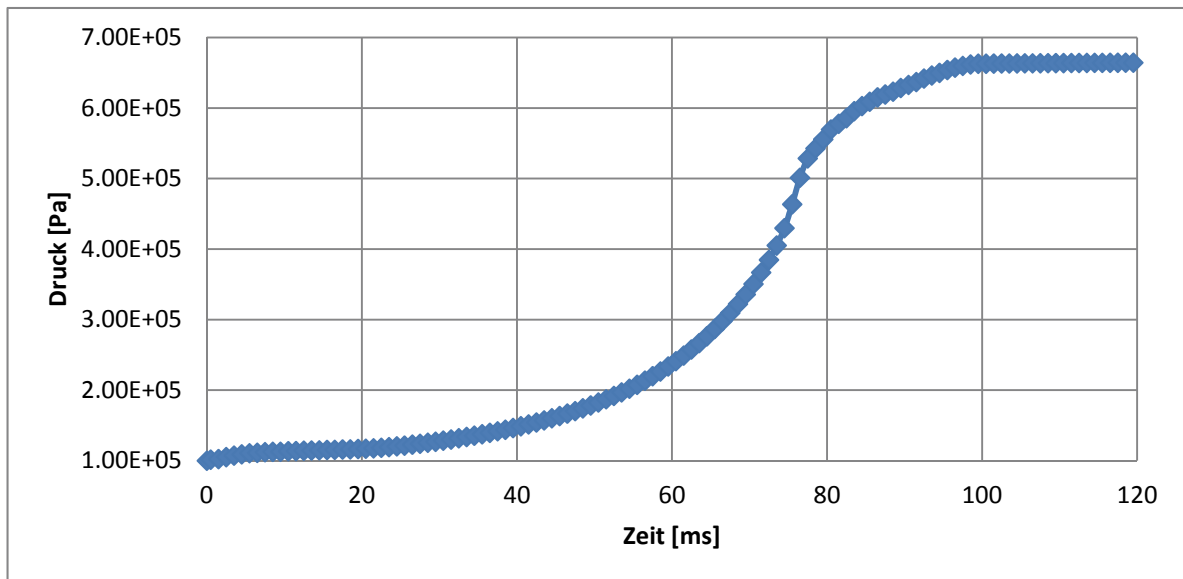


Abbildung 54: Druckverlauf des Kugelversuchs

Wird nun die zeitliche Ableitung gebildet, so erhält man den zeitlichen Druckanstieg. Also die Änderungsrate des Druckes gegen die Zeit.

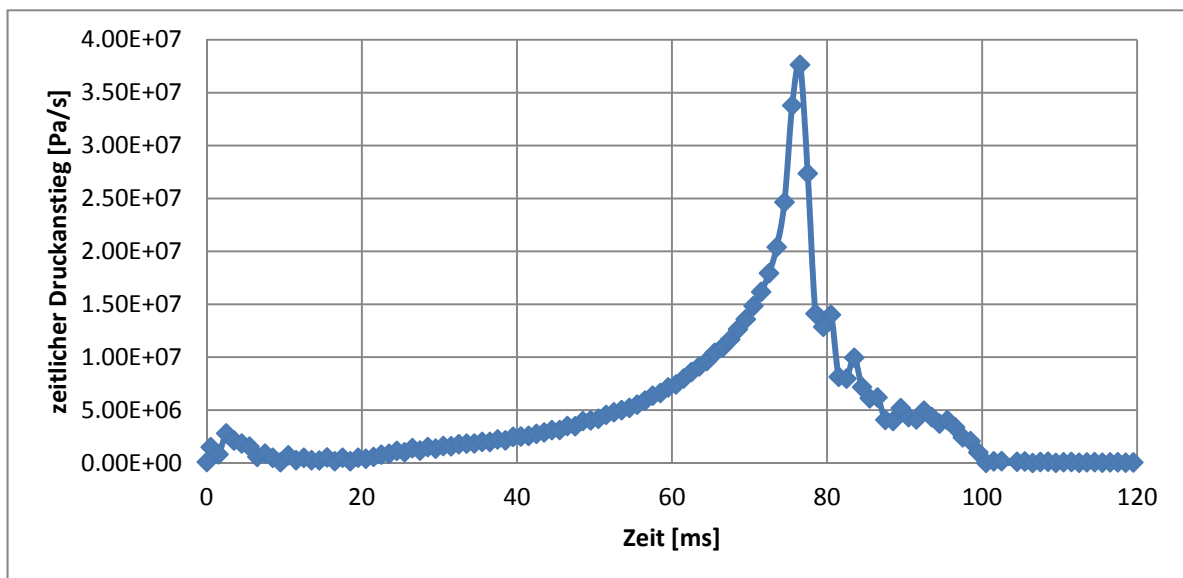


Abbildung 55: Zeitlicher Druckanstieg beim Kugelversuch

Die maximale Änderungsrate beträgt im vorliegenden Versuch $3.76 \times 10^7 \text{ Pa/s}$. Dieser Wert kann anschließend auf den K_{St} – Wert umgerechnet werden.

Der K_{St} – Wert ist eine konstante stoffspezifische Größe, welche wie folgt definiert ist [28]:

$$\left(\frac{dp}{dt}\right)_{max} * V^{\frac{1}{3}} = konst = K_{St} \quad (5-4)$$

Der maximale Druckerhöhung wird über die bereits gezeigte Auswertung ermittelt. Das Volumen der 20 Liter Apparatur ist bekannt. Wichtig zu beachten ist, dass der Druckerhöhung in bar/s eingesetzt werden muss. Daraus ergibt sich ein K_{St} – Wert von: 102.2 bar*m/s. Verglichen mit den Werten der Gestis – Staubexplosionsdatenbank [32], welche für Lycopodium mit einer Korngröße von 30 µm einen Wert von 119 bar*m/s angibt, stellt der in der Simulation ermittelte Wert eine sehr gute Annäherung dar. Der Absolutdruck der Explosion beträgt in der Simulation 6.66 bar. Dies entspricht einem Überdruck von 5.66 bar. In der Literatur kann dazu ein Wert von 8.5 bar gefunden werden [32]. Dieser maximale Explosionsdruck weicht etwas weiter vom Literaturwert ab als der K_{St} – Wert , liegt aber trotzdem in der richtigen Größenordnung.

Man unterscheidet anhand des K_{St} – Werts drei verschiedene Staubexplosionsklassen, wobei in diesem Fall das Lycopodium der Klasse 1 zuzuordnen ist.

Tabelle 14: Staubexplosionsklassen und Wertebereiche [28]

Staubexplosionsklasse	Wertebereich [bar*m/s]
1	0 – 200
2	200 – 300
3	> 300

In der folgenden Abbildung 56 wird der Ablauf der Verbrennung in der Kugel gezeigt. Zur besseren Sichtbarkeit der Position der Flammenfront wurde der Hintergrund mit der Sauerstoffkonzentration hinterlegt.

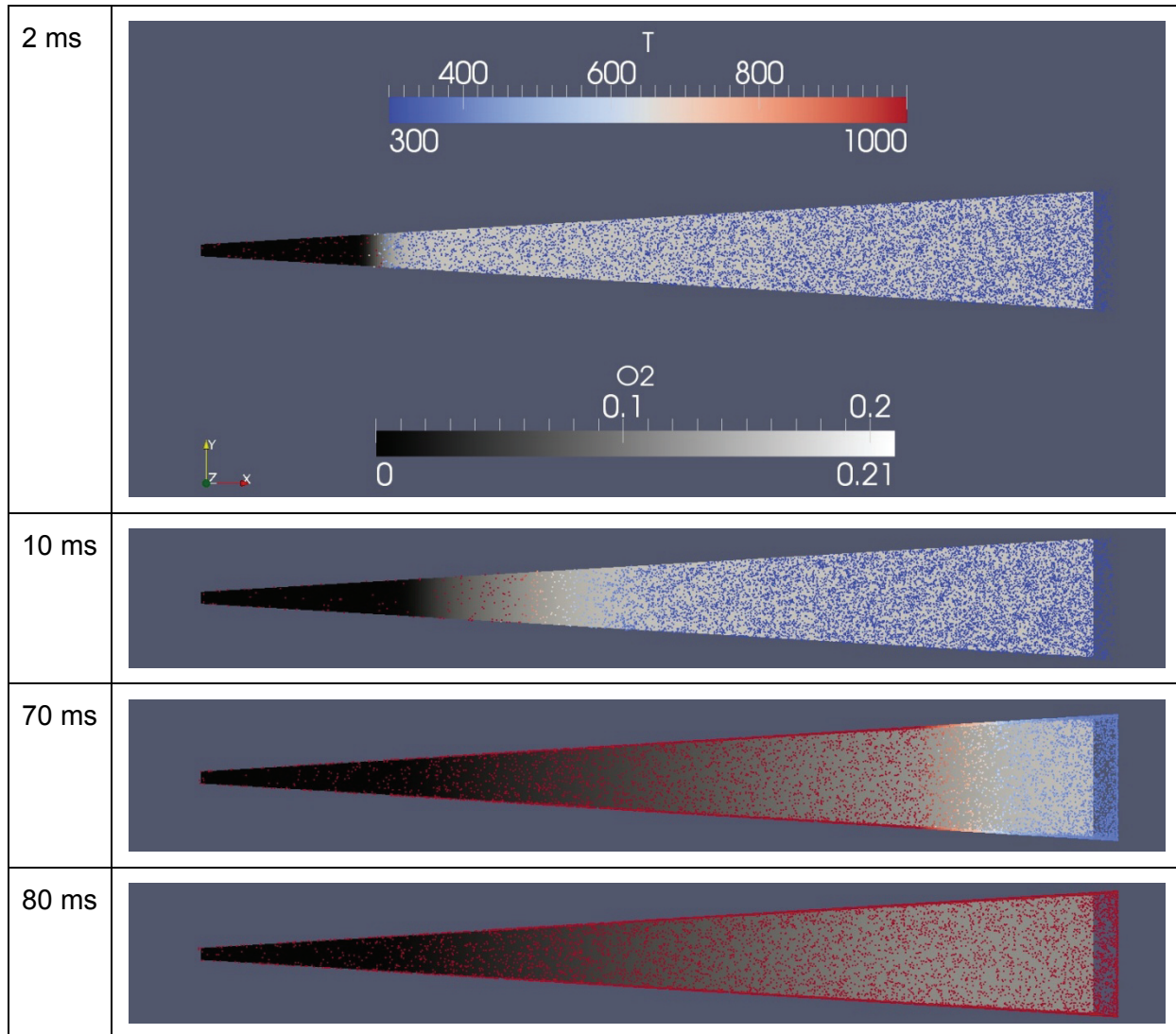


Abbildung 56: Ablauf der Verbrennung in der Kugel

Es ist gut zu erkennen, dass es zu einer Partikelansammlung vor der Flammenfront kommt. Die Partikeldichte nach der Flammenfront ist viel geringer als vor der Front. Dieser Effekt wird aber im Folgenden noch einmal besser veranschaulicht.

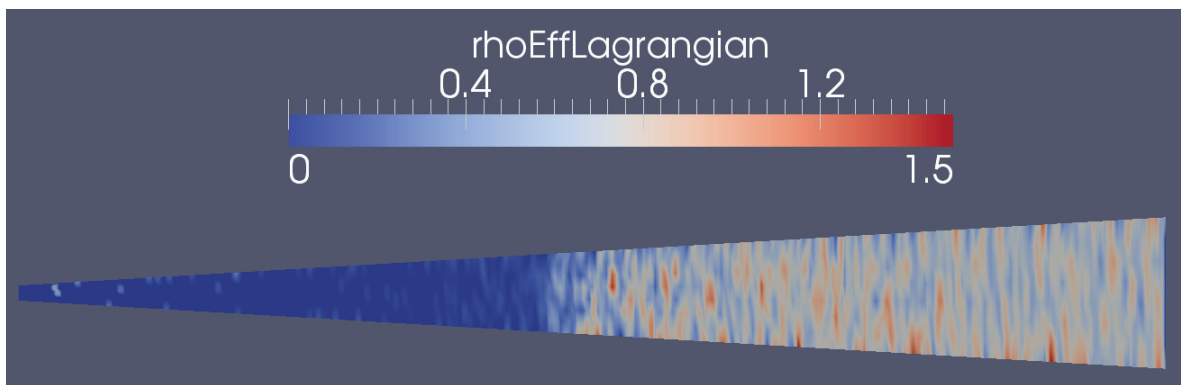


Abbildung 57: Partikelverdichtung vor der Flammenfront nach 16 ms

In Abbildung 57 wird die Partikelverdichtung visuell veranschaulicht. Ausgehend von einer Startkonzentration von 600 g/m^3 treten Konzentrationsspitzen von bis zu 1500 g/m^3 auf. Abschließend muss an dieser Stelle noch erwähnt werden, dass die Anfangswerte für k und ε von einer Simulation am Lehrstuhl für Thermoprozesstechnik übernommen wurden. Es wurde dabei die Turbulenz zu Beginn als räumlich konstant angenommen, welche aber in der Realität eine radiale Verteilung besitzt. Für k wurde ein Wert von $136 \text{ m}^2/\text{s}^2$ eingesetzt und für ε wurde $8200 \text{ m}^2/\text{s}^2$ verwendet. Aufgrund der Nichtbeachtung dieser radialen Verteilung, ergibt sich eine bestimmte Abweichung bzw. eine Ungenauigkeit. Dieses Beispiel sollte aber nur zeigen, was man mit dem Modell noch alles berechnen kann und deswegen wurde hier auf dieses Detail verzichtet.

5.4 Netzstudie

Die Berechnungen der Flammengeschwindigkeit in der 5x20 cm Geometrie sowie die Zündversuche wurden in geprüften Geometrien durchgeführt. Durch eine Variation der Zellgröße wurde jene Gittergröße gesucht, welche die Ergebnisse nicht mehr beeinflusst. Abbildung 58 zeigt die Flammenposition der Simulation in Abhängigkeit von der Zeit und der Zellengröße. Die Berechnungsergebnisse müssen unabhängig von der Zellgröße des verwendeten Rechengitters sein. Es wurden bei der Berechnung der unterschiedlichen Zellgrößen exakt die gleichen Bedingungen, also eine Staubkonzentration von 200 g/m^3 eine Temperatur von 300 Kelvin sowie ein Druck von 1 bar gewählt. In der Auswertung der Flammengeschwindigkeit zeigt sich, dass die Ergebnisse der Zellgröße von 1 mm und 0,5 mm fast ident sind. Bei allen anderen Kurvenverläufen ist dies nicht der Fall. Stützend auf diese Erkenntnis wurde die Zellengröße von 1 mm gewählt, da diese nahezu das gleiche Ergebnis wie eine noch feinere Auflösung ergibt.

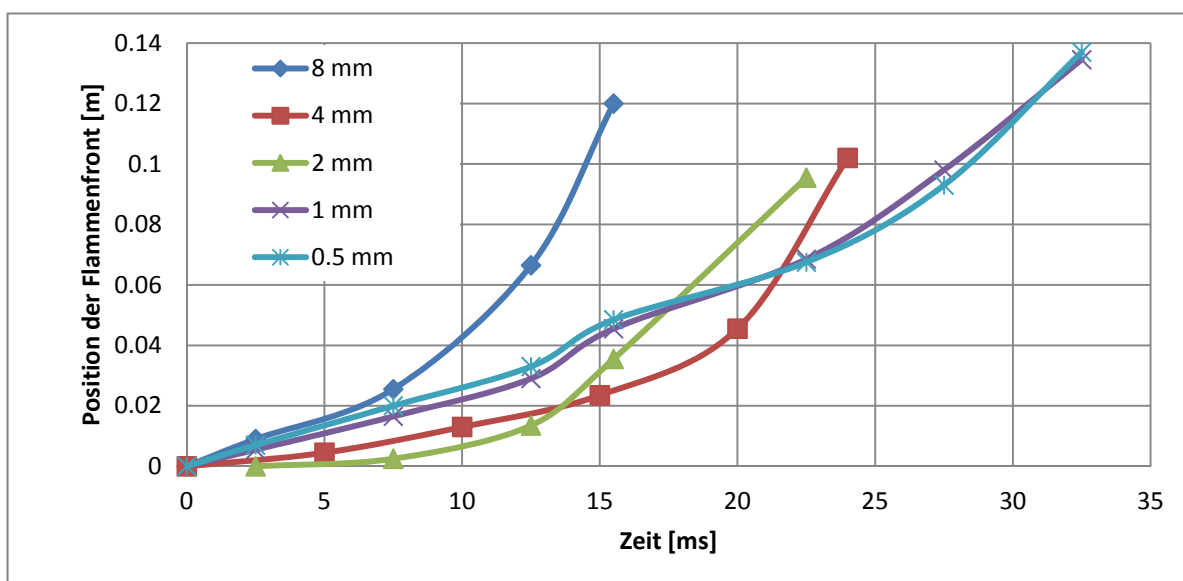


Abbildung 58: Ergebnisse der Netzstudie

Bei den Berechnungen in den großen Geometrien war dies nicht mehr möglich, da dazu mehrere Berechnungen bei unterschiedlichen Zellgrößen nötig wären. Dies wäre aus Zeitgründen nicht mehr möglich gewesen. In den großen Geometrien wurden aber ähnliche Zellgrößen verwendet wie bei den Berechnungen in der 5x20 cm Geometrie, deshalb ist eine Zellgrößenabhängigkeit beim Großrohrversuch eher unwahrscheinlich.

6 Schlussfolgerungen

6.1 Beurteilung der Berechnungsergebnisse

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass das Simulationsmodell durchaus geeignet ist, die Abläufe in einer Staubexplosion zu berechnen. Durch die sehr genaue Anpassung der Parameter ergibt sich die gute Übereinstimmung mit den Literatur- und Messwerten. Wichtig für diese gute Übereinstimmung war natürlich auch die Implementierung aller möglichen Modelle, um die Genauigkeit zu erhöhen. So wurden stets die Modelle auf ihre Eignung erprobt und dann erst implementiert.

6.2 Berechnungsdauer

Solange die Berechnung in kleinen Geometrien geschieht, funktioniert dies sehr gut. Verlässt man aber ein Volumen von maximal etwa 1 dm^3 , so führt dies aufgrund der hohen Zellenanzahl und Partikelanzahl rasch zu sehr langen Berechnungszeiten. Da man meist die Grenzschicht exakt lösen will, da diese, wie bereits detailliert beschrieben wurde, einen maßgeblichen Einfluss auf die Flammgeschwindigkeit besitzt, wird in dieser Grenzschicht die minimale Zellgröße vorliegen. Nun sollten sich aber in jeder Zelle zumindest zwei Partikel befinden um eine aussagekräftige und vor allem richtige Lösung zu erhalten. Löst man also die Grenzschicht genauer und bildet ein feineres Netz, so muss gleichzeitig die Anzahl der zu berechnenden Partikel erhöht werden und der „Particle – Clustering“ – Faktor minimiert werden. Dies führt wiederum zu einer Erhöhung der Rechendauer. Die meisten Modelle und

Geometrie lassen sich in 2D problemlos lösen. In allen 3D Berechnungen steigt das Berechnungsvolumen enorm und man bekommt rasch Probleme mit der Berechnungsdauer.

6.3 Limitierende Faktoren der Umsetzungsgeschwindigkeit

Bei der Analyse der Flammengeschwindigkeit konnte gezeigt werden, dass der geschwindigkeitsbestimmende Schritt in der Aufheizung der Partikel sowie in der Mischungsdauer liegt. Das heißt, die Aufheizung ist jener Schritt, welcher im Vergleich zur Verbrennung sehr langsam vor sich geht und deswegen die Geschwindigkeit bestimmt. In der Verbrennung selbst liegt meist ein sehr geringes „Kappa“ vor, das heißt, dass nicht das Arrheniusgesetz die Geschwindigkeit der Umsetzung beschränkt, sondern maßgeblich die Mischung zwischen Brenngas und Sauerstoff. In weiterer Folge lässt sich die Aussage treffen, dass die Umsetzung eigentlich nur durch die vorliegende Turbulenz bestimmt ist, da diese die makroskopische Mischung zwischen Brenngas und Sauerstoff bestimmt. Da die Reaktion aber nicht durch das Arrheniusgesetz begrenzt wird, spielt dieses auch nur eine untergeordnete Rolle für die Genauigkeit der Berechnung. Das heißt, dass sich die Auswirkungen durch die Annahme der Aldehydverbrennung anstatt der Ölsäureverbrennung und der Fehler der in der Extrapolation der Berechnungsergebnisse gemacht wurde, nur geringfügig auf die Genauigkeit der Berechnung auswirken. Anstatt des Arrheniusansatzes einen „Infinite Chemical Reaction“ Mechanismus zu verwenden, in dem die Reaktion unendlich schnell abläuft und nur durch die Mischung limitiert ist, wäre bei der Flammengeschwindigkeitssimulation denkbar. Jedoch in der Zündenergiesimulation wäre dieser Ansatz keinesfalls verwendbar, da in dieser die Turbulenz derart hoch ist, dass nie eine Mischungslimitierung auftritt. Man kann also sagen, dass die Einflüsse der Kinetikeinstellung wenig Einfluss auf die Flammengeschwindigkeit aber bedeutenden Einfluss auf die Zündenergie haben.

6.4 Anpassung der c_p - Funktionen

Die Anpassung der c_p – Funktionen ist mit großen Abweichungen behaftet. Da nur zwei Einstellpolynome zur Verfügung stehen, war die Anpassungsmöglichkeit begrenzt. Hier fehlten vor allem auch für die hohen Temperaturen die Grundwerte der Einstellung. Da die Werte auf die niedrigeren Temperaturen optimiert wurden, sollte es in der Flammenfortpflanzung zu keinen großen Abweichungen kommen.

6.5 Abbildung des Zündfunken

Die Abbildung des Zündfunken wurde sehr vereinfacht. Hier wäre es vorteilhaft noch genauere Analysen durchzuführen. Vor allem Fragen zum Funkendurchschlag, also ob dieser von Staubpartikel zu Staubpartikel oder durch die umgebende Luft durchschlägt sind Fragen, welche geklärt werden sollten. Dann könnte der Funken noch genauer abgebildet werden. Nun wird der Funken als ein volumenkonstanter Quellterm in der Berechnung berücksichtigt. Effekte wie Größe des Funkens in Abhängigkeit der Zündenergie oder Dauer des Funkenüberschlags und Formen wären hierbei interessante Aspekte. Es wären aber auch noch Untersuchungen im Bereich der unterschiedlichen Zündungsformen bei zeitlich gedehnten Funken sinnvoll. Bei der Untersuchung in der MIKE 3 Apparatur realisiert man dies mit einer Serieninduktivität. Derartige Versuche wurden in diesem Zusammenhang nicht durchgeführt, wären aber für eine weitere wissenschaftliche Arbeit von großem Interesse.

6.6 Programmtechnische Probleme

Im Laufe der gesamten Arbeit kam es immer wieder zu Simulationsabstürzen, deren Ursache nie ganz geklärt werden konnte. So war es beispielsweise nicht möglich, die Simulationen parallel laufen zu lassen. Dies funktionierte eine Weile, doch plötzlich blieb die Simulation stehen. Dieses Problem konnte erst sehr spät gefunden werden, sodass die Ursache der Abstürze, also in dem Fall das Parallelrechnen, erst spät erkannt wurde. Als die Simulationen dann nur noch auf einem Prozessor durchgeführt wurden, trat dieses Problem nicht mehr auf. In den eher kürzeren Berechnungen war die Tatsache einen Fall immer nur auf einem Prozessor zu berechnen nicht problematisch. Man konnte dafür viele Fälle gleichzeitig laufen lassen. Ein echtes Problem stellte dies aber bei der Simulation der großen Geometrien, wie dem 2 Meter Flammenrohr in 3D dar. Da die Simulation nur auf einem Kern betrieben werden konnte, dauerte diese sehr lange. Hätte man in diesem Falle die Simulation parallel laufen lassen können, so hätte die Berechnung anstatt von mehreren Wochen, nur etwa eine Woche gedauert.

7 Ausblick

Die Arbeit stellt eine sehr solide Grundlage für weitere Forschungen im Bereich der Staubexplosionen dar. Somit kann es noch weiter ausgebaut, verfeinert und optimiert werden. In diesem Kapitel sollen einige Vorschläge aufgezeigt werden, wie die Verwendung sowie Optimierung weiter aussehen könnte.

7.1 Mögliche weitere Fallstudien

Konkret wurden nur die Einflüsse von unterschiedlichen Umgebungsdrücken, Umgebungstemperaturen sowie Staubkonzentrationen bestimmt. Man könnte sich aber auch die Auswirkungen von unterschiedlichen Sauerstoffkonzentrationen, Turbulenzeffekten oder veränderten Geometrien ansehen. Diese Bereiche wurden aufgrund des Zeitaufwands nicht mehr betrachtet, würden aber sicher noch einen großen Erkenntnisgewinn bedeuten. Vor allem die Einflüsse unterschiedlicher Sauerstoffkonzentrationen würden von großem Interesse sein, zumal die Versuche dazu im Labor schwierig umzusetzen sind. Durch das Partikelmodell können aber auch die gesamten Partikeleffekte untersucht werden. So könnte beispielsweise auch eine Untersuchung hinsichtlich der Partikelgröße sowie des Ausbrandverhaltens unternommen werden.

7.2 Analyse und Beschreibung des Zündfunken

Um den Effekt der Druckabhängigkeit besser beschreiben zu können, muss der Funke selbst noch genauer beschrieben werden. Hier vor allem der Einfluss verschiedener Umgebungsdrücke und Zündenergien. Das Ziel sollte sein, über die Zündenergie und den Umgebungsdruck den Funkendurchmesser und dessen radiale Leistungsverteilung beschreiben zu können. Mit dieser Modellverfeinerung kann der Funke noch besser abgebildet werden. Es lässt sich zweifelsfrei sagen, dass die Pyrolyse sowie die Verbrennung sehr gut beschrieben wurden, jedoch im Bereich der Funkenabbildung viele Vereinfachungen getroffen werden mussten, welche die Genauigkeit der Berechnung beeinträchtigen.

7.3 Analyse der Startwerte für k und ε

In den Berechnungen der Flammengeschwindigkeit zeigte sich eine starke Abhängigkeit des Ergebnisses von den Startwerten von k und ε . Für eine exaktere Beschreibung der Flammengeschwindigkeit, vor allem zu Beginn der Berechnung, solange noch wenig Eigenturbulenz erzeugt wird, ist die Kenntnis der Werte von großer Bedeutung. In der vorliegenden Arbeit wurde nicht detailliert auf die Berechnung der Ausgangswerte für k und ε eingegangen. Die Werte wurden aus anderen Testfällen, welche am Lehrstuhl für Thermoprozesstechnik bereits durchgeführt wurden, übernommen.

In der Berechnung der Mindestzündenergie sind die Startwerte von untergeordneter Wichtigkeit. Da der Funkenüberschlag am Beginn der Berechnung eine derart hohe Turbulenz erzeugt, haben die Startwerte wenig Einfluss auf das Ergebnis. In der Flammengeschwindigkeitssimulation wird aber wenig Turbulenz bei der Zündung erzeugt und da die Verbrennung bis zum Erreichen einer Wand vollständig Mischungslimitiert ist, wird die Flammenfortpflanzung hauptsächlich von k und ε bestimmt. Daher sind bei der Flammengeschwindigkeit die Werte sehr wichtig.

7.4 Zündmodell für heiße Oberflächen

Durch Veränderung der Geometrie wäre es möglich, die Zündung an heißen Oberflächen genauer zu analysieren. Es müsste dazu nur die Geometrie geändert sowie die Randbedingungen angepasst werden. Es wäre also denkbar eine 2D – Geometrie zu erstellen, welche die Umströmung eines heißen Rohres darstellt. Da Trägheitseffekte sowie die Kollision mit einer Wand, im Modell sehr einfach eingestellt werden können, ist es möglich, damit den Zündvorgang einer heißen umströmten Oberfläche zu berechnen. Das Modell könnte aber nur auf aufgewirbelte und nicht auf abgelagerte Stäube angepasst werden.

7.5 Simulation einer Flammensperre durch Löschmittelinjektion in Rohrleitungen

Die Vorhersage des Löscherfolges, durch Einspritzen von Löschmittel in eine Rohrleitung, ist vor allem bei nichtatmosphärischen Bedingungen ein großes Problem. Anhand des bestehenden Modells könnte eine derartige Flammenauslöschung in einer Rohrleitung simuliert werden. Dazu müsste die aus dem coalCombustion – Case bestehende limestone – Cloud in eine Tröpfchenwolke umgewandelt werden. Es könnte dann ein Rohrabschnitt, in welchem die Flammenfront durch die Staubexplosion fortschreitet, simuliert werden. An der Position der Löschmittelsperre wird ein „Parcel Injection Point“ gesetzt, welcher den Eintrag der Tröpfchenwolke simuliert. Ist das Tropfenverteilungsverhalten der Düse bekannt, kann das Tropfenkollektiv sogar noch besser abgebildet werden. Das Modell würde dann, analog zum Staubpartikelmodell die Verdampfung des Löschmittels, beispielsweise Wasser, berechnen. Durch den Kühleffekt der Verdampfung sowie durch die Inertisierung durch Wasserdampf, kann der Auslöschvorgang der Flamme errechnet werden. So wäre es auch bei nichtatmosphärischen Bedingungen möglich, gute Aussagen über die Löschmittelsperre zu treffen. Es könnte dies aber nicht nur mit Wasser erfolgen, sondern natürlich auch durch Eindüsen eines Inertgases. Dieser Fall wäre noch einfacher zu berechnen, da keine weitere Partikelspezies betrachtet werden muss, sondern nur die bestehende Geometrie sowie die Randbedingungen geändert werden müssten.

7.6 Modellumstellung auf Metallstäube

Um mit dem Modell auch Metallstaubexplosionen berechnen zu können, müsste es etwas umgebaut und angepasst werden. So müsste die Partikelpyrolyse ausgeschaltet werden, und dafür die Oberflächenreaktion der Kohlenstoffverbrennung angepasst werden. Dazu müsste aber zuerst ein geeignetes Kinetikmodell für die Oberflächenoxidation gefunden werden.

7.7 Verbrennungssimulation für andere Simulationsansätze

Eine weitere Möglichkeit das Modell zu verwenden, wäre es dieses für die Vorhersage der Verbrennungsgeschwindigkeit zu benutzen. Man könnte durch gezielte Testfälle eine Versuchsmatrix erstellen, welche aus den Einflüssen von Temperatur, Partikelbewegung und Turbulenz die Verbrennungsrate der Partikel berechnet. Diese Erkenntnisse könnte man anschließend in bereits bestehende Simulationen, welche die Flammenfortpflanzung über eine Fortschrittsvariable beschreiben, implementieren. Der Vorteil bestünde darin, dass einerseits das Partikelverhalten über das Partikelmodell sehr gut beschrieben werden kann und andererseits, dass das Problem der langen Berechnungsdauer dadurch gelöst werden könnte.

8 Literaturverzeichnis

- [1] Steen, H., Handbuch des Explosionsschutzes, Wiley-VCH, Weinheim, 2000.
- [2] Verein Deutscher Ingenieure, VDI-2263 Staubbrände und Staubexplosionen, Blatt1 1990.
- [3] Denkevits, A., Dust Explosion Experiments Measurements of Explosion Indices of Graphite Dust in Hydrogen-Containing Atmospheres, Wissenschaftlicher Bericht, Karlsruhe, Forschungszentrum Karlsruhe, 2005.
- [4] Krause, U. and T. Katsch, Transport Phenomena in Combustion, Transport Phenomena in Combustion (1996), 389–391.
- [5] Warnatz, J., Maas, U. and Dibble, R. W., Verbrennung, Springer, Berlin [u.a.], 2001.
- [6] OpenCFD, OpenFOAM® - The Open Source Computational Fluid Dynamics (CFD) Toolbox, <http://www.openfoam.com/>, abgerufen am 28. Juli 2014.
- [7] Chupin, P., Optische Temperaturmessung an Entladungsfunken im Hinblick auf deren Zündwirksamkeit bei Staubexplosionen, Projektarbeit, Hochschule Mannheim, Mannheim, 2009.
- [8] Furbo, E., Evaluation of RANS turbulence models for flow problems with significant impact of boundary layers, Masterarbeit, Uppsala Universitet, 2010.
- [9] Arrhenius Svante, Z. Phys. Chem., Z. Phys. Chem. 1889, 4, 226–248.
- [10] C. K. Westbrook, W. J. Pitz, O. Herbinet, H. J. Curran and E. J. Silke, A Detailed Chemical Kinetic Reaction Mechanism for n-Alkane Hydrocarbons from n-Octane to n-Hexadecane, <https://www->

- pls.llnl.gov/data/docs/science_and_technology/chemistry/combustion/c8-c16_n-alkanes_mech.txt, abgerufen am 25. Juli 2014.
- [11] National Institute of Standards and Technology, Oleic Acid, <http://webbook.nist.gov/cgi/cbook.cgi?ID=C112-80-1>, abgerufen am 23. Juli 2014.
- [12] Stull, D. R., Vapor Pressure of Pure Substances Organic Compounds, Ind. Eng. Chem. (1947), 39, 517–540.
- [13] Lide, D. R., CRC Handbook of Chemistry and Physics 86TH Edition 2005 - 2006, CRC Press (2005), 3–406.
- [14] Sales-Cruz, M., G. Aca-Aca, O. Sanchez-Daza and T. Lopez-Arenas, Predicting critical properties, density and viscosity of fatty acids, triacylglycerols and methyl esters by group contribution methods, 20th European Symposium on Computer Aided Process Engineering – ESCAPE20, Ischia (Italien), 2010.
- [15] Yaws, C. L., Thermophysical properties of chemicals and hydrocarbons, William Andrew, Norwich, NY, 2008.
- [16] Riddick, J. A., W.B. Bunger and Sakano T.K., Techniques of Chemistry 4th ed., Volume II. Organic Solvents, John Wiley and Sons, New York, 1985.
- [17] Schweizer, A., Spezifische Wärmekapazität von Flüssigkeiten, http://www.schweizer-fn.de/stoff/wkapazitaet/wkapazitaet_fluessigkeit.php, abgerufen am 29. Juli 2014.
- [18] Wieser, G., Untersuchung der Flammenfortpflanzung in Staub/Luft- Gemischen unter reduzierten Druckbedingungen, Diplomarbeit, Montanuniversität Leoben, Leoben, 2013.
- [19] Lutz Müller, Untersuchung und Modellierung elektrostatischer Entladungen (ESD) von elektrisch isolierenden Oberflächen, Dissertation, Universität Stuttgart, Stuttgart, 2004.
- [20] Eckhoff, R. K., Dust explosions in the process industries, Butterworth-Heinemann, Boston, Mass, 1997.
- [21] Ranz, W. E. and R. R. Marshall, Evaporation from drops, Chem. Eng. Prog. 48 (1952), 141–146.
- [22] Vdovin, A., Radiation heat transfer in OpenFOAM, Projektarbeit, Chalmers University of Technology, Göteborg, 2009.
- [23] Fluent Inc., FLUENT 6.3 User's Guide, http://aerojet.engr.ucdavis.edu/fluenthelp/html/ug/main_pre.htm, abgerufen am 26. August 2014.

- [24] Spijker, C. J., Modellierung in der Wärmetechnik 2014, Lehrveranstaltungsunterlagen, Montanuniversität Leoben, Leoben, 2014.
- [25] Spijker, C. J., Unsteady Laminar Flamelet Modellierung zur Beschreibung von Mündungsmischbrennern, Masterarbeit, Montanuniversität Leoben, Leoben, 2010.
- [26] Herwig, H. and Moschallski, A., Wärmeübertragung, Vieweg u.a, Wiesbaden, 2006.
- [27] Spijker, C. J., C. Pfeiler and H. Raupenstrauch, Trocknungsmodell für Partikel unter Berücksichtigung der Konvektion im Partikel, 25. Deutscher Flammentag, Karlsruhe, 2011.
- [28] Bartknecht, W. and Zwahlen, G., Explosionsschutz, Springer, Berlin [etc.], 1993.
- [29] Kern, H., Explosible Dust/Air Mixtures Investigations on flame propagation under non atmospheric conditions, Dissertation, Montanuniversität Leoben, Leoben, 2013.
- [30] Enstad, G. G., Effect of Shock Wave Emitted from Electric Spark Discharges on the Energy Required for Spark Ignition of Dust Clouds, Foreign Technology-Michelsens Institut Fantoff Bergen, Bergen, 1981.
- [31] National Center for Biotechnology Information, Oleic Acid - PubChem, <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/summary/summary.cgi?cid=445639#x27>, abgerufen am 29. Juli 2014.
- [32] Institut für Arbeitsschutz der Deutschen Gesetzlichen Unfallversicherung, GESTIS - STAUB-EX, <http://staubex.ifa.dguv.de/explokomp.aspx?nr=1282&lang=>, abgerufen am 24. Juli 2014.

9 Anhang

9.1 Solvercode [6]

```

{
volScalarField& he = thermo.he();
forAll(SetQ,i)
{
    Qin[i]=1.4365e+13*(Foam::pow(2.7182818,(-(he.time().value()*1000000)/3.51586))-
Foam::pow(2.7182818,(-(he.time().value()*1000000)/1.5)));
}
fvScalarMatrix EEqn
(
    fvm::ddt(rho, he) + mvConvection->fvmDiv(phi, he)
  + fvc::ddt(rho, K) + fvc::div(phi, K)
  + (
    he.name() == "e"
    ? fvc::div
      (
        fvc::absolute(phi/fvc::interpolate(rho), U),
        p,
        "div(phiv,p)"
      )
    : -dpdt
  )
  - fvm::laplacian(turbulence->alphaEff(), he)
  ==
    combustion->Sh()
  + coalParcels.Sh(he)
  + limestoneParcels.Sh(he)
  + radiation->Sh(thermo)
  + fvOptions(rho, he)
    + Qin*SetQ
);
EEqn.relax();

```

```
fvOptions.constrain(EEqn);
EEqn.solve();
fvOptions.correct(he);

Info<< "T gas min/max = " << min(T).value() << ", "
      << max(T).value() << endl;

Info<< "T gas min/max = " << min(thermo.Cp()).value() << ", "
      << max(thermo.Cp()).value() << endl;

thermo.correct();
radiation->correct();

Info<< "T gas min/max = " << min(T).value() << ", "
      << max(T).value() << endl;
}
```

9.2 Zusammensetzung der Partikel

```
compositionModel singleMixtureFraction
singleMixtureFractionCoeffs
{
    phases
    (
        gas
        {
        }
        liquid
        {
            C16H34      1;
        }
        solid
        {
            ash         0.2;
            C            0.8;
        }
    );
    YGasTot0           0;
    YLiquidTot0        0.7;
    YSolidTot0         0.3;
}
```

9.3 Einstellungen des Verdampfungsmodells

```
phaseChangeModel liquidEvaporation;
```

```
liquidEvaporationCoeffs
```

```
{  
  enthalpyTransfer latentHeat;  
  activeLiquids  
  (  
    C16H34  
  );  
}
```

9.4 Einstellungen der Oberflächenreaktion [6]

```
surfaceReactionModel COxidationKineticDiffusionLimitedRate;
```

```
COxidationKineticDiffusionLimitedRateCoeffs
```

```
{  
  Sb          1;  
  C1        5.0E-12;  
  C2        0.002;  
  E          7.9E+07;  
}
```