

Validierung von CFD-Modellen zur Vorhersage von reagierenden und nicht reagierenden Strömungen

Prof. Dr. Axel Schönbacher, Dr. Markus Gawlowski, M. Sc. Stefan Schälke
Lehrstuhl für Technische Chemie I
Universität Duisburg-Essen, Campus Essen

Zusammenfassung

Mit CFD werden unter Verwendung der Large-Eddy-Simulation und eines assumed-pdf-Ansatzes transiente und zeitlich-gemittelte Flammentemperaturen, Flammengasdichten und Spezieskonzentrationen in einer Hexanflamme vorhersagt. Mit den vorhergesagten Flammengasdichten und Spezieskonzentrationen lassen sich, unter Berücksichtigung der spezifischen Refraktion des Flammengasgemisches, Brechzahlfelder berechnen. Durch Integration von dicht aufeinander folgenden x,y-Schnittebenen der Brechzahldifferenz von Flamme und Umgebung lassen sich Interferogramme, sowohl reagierender (Flamme) als auch nicht reagierender Strömungen (Helium) vorhersagen.

Zur Validierung der CFD-Submodelle wurden die simulierten Dichte-, Konzentrations- und Temperaturprofile mit den experimentellen Profilen verglichen, wobei eine ziemlich gute Übereinstimmung erzielt wurde. Es zeigte sich, dass die verwendeten Submodelle zur Vorhersage von insbesondere reagierender als auch nicht reagierender Strömungen geeignet sind und als validiert betrachtet werden können.

1 Einleitung

Tank- und Poolfeuer, welche zu den nicht-vorgemischten, auftriebsbestimmten Feuern zählen, können sich durch unfallbedingte Freisetzung und Zündung während des Transports und der Lagerung von flüssigen Brennstoffen ereignen. Die sich dabei ausbildenden Feuer können zu großen Schäden an benachbarten verfahrenstechnischen Anlagen und Personen führen [1]. Ein erster Schritt in der Erforschung von großen Tankfeuern besteht in der experimentellen

Untersuchung im Labormaßstab. Unter Berücksichtigung der Spezieszusammensetzung der Flammengase eignet sich die holographische real-time Interferometrie als berührungslose und trägerfreie Messmethode zur Ermittlung von Flammentemperaturen T , welche direkt mit der spezifischen Ausstrahlung (*SEP*) der Flamme verknüpft sind [2]. In den Jahren hat die numerische Strömungssimulation (*Computational Fluid Dynamics*) zunehmende Bedeutung auf dem Gebiet der reagierenden und nicht reagierenden Strömungen erlangt [3,4]. Durch Lösung der Erhaltungsgleichungen für Speziesmassen, Impuls und Energie, können u.a. transiente und zeitlich-gemittelte Größen wie Flammentemperaturen T , Flammengasmassendichten ρ , Strömungsgeschwindigkeiten u und Spezieskonzentrationen c_i an jedem Ort in der Flamme vorhergesagt werden. Eine entscheidende Aufgabe stellt dabei die Validierung der verwendeten Submodelle dar, zur Vorhersage insbesondere von reagierenden Strömungen, aber auch nicht reagierender Strömungen.

2 CFD-Simulation

2.1 Geometrie und Gittergenerierung

Die Geometrie, die der anschließenden Strömungssimulation zugrunde liegt, wurde mit einem CFD-Präprozessor erstellt. Aufgrund des vollständig symmetrischen Modells, konnte mit numerisch günstigen, unstrukturierten Hexaeder-Gittern gearbeitet werden. Zu den Teilkomponenten des Modellaufbaus zählen [5]:

Zuströmbereich um die Tankwand

Wie sich im besonderen Fall der Strömungsberechnung zeigt, ist eine Klärung der Strömungsverhältnisse vor dem eigentlichen Lösungsgebiet von großer Bedeutung. Wirbel und vektorielle Größen der Strömungsgeschwindigkeit im Einlauf beeinträchtigen die eigentliche Berechnung stark und müssen berücksichtigt werden. Um Bereiche herauszufinden, in denen besonders große Geschwindigkeitsgradienten auftreten, sollte man den Strömungsverlauf für die spätere Vergitterung bereits kennen. Diese Strömungsbedingungen wurden aus vorherigen Simulationen annähernd ermittelt. Der Einlaufbereich wird dabei von einer 5 mm hohen und 2 mm dicken Tankwand bei einem Tankdurchmesser von $d = 50$ mm umgeben.

Strömungsgebiet

Das eigentliche Strömungsgebiet umfasst die Flamme bis zu ihrer maximalen Ausdehnung und den Zuströmbereich der Umgebungsluft. Er wurde so gewählt, dass die äußeren Umrandungen des Systems keinen Einfluss auf die Kernströmung im Inneren der Flamme haben. Er wurde daher ausreichend groß dimensioniert, wobei Teilbereiche der Kernströmung feiner und außen liegende Bereiche gröber vergittert wurden. Das Gesamtmodell hat dabei eine Ausdehnung von 200 mm in x,y,z-Richtung, wobei die x-Achse die Strömungsrichtung charakterisiert. In Abb. 1 lässt sich die Geometrie des Modells mit den oben genannten Abmessungen erkennen.

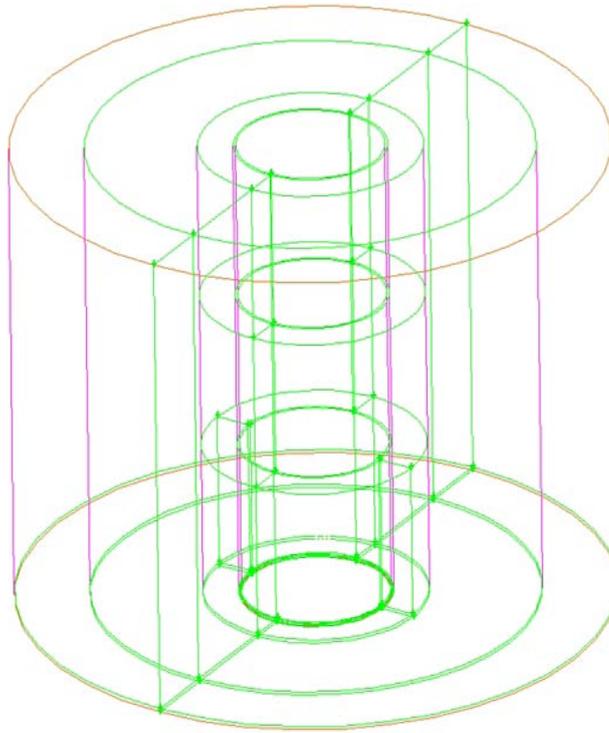


Abb. 1: Grundgeometrie des Simulationsmodells

Die einzelnen Volumina werden dabei mit unterschiedlichen Zellgrößen vergittert. Das feinste Gitter wurde um den Tankrand und den Einlaufbereich gelegt, da hier die größten Geschwindigkeits-, Konzentrations- und Temperaturgradienten auftreten. Es wurde daher eine so genannte Boundary Layer um die Tankwand gelegt, um hier die Strömungsgrenzschicht so gut wie möglich aufzulösen. Die Kernströmung der Flamme wurde mit einem Hexader-Gitter mit den Abmessungen von $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 1 \text{ mm}$ für eine Zelle vergittert. Der Zuströmungsbereich der Luft lässt sich aufgrund der weitaus geringeren, insbesondere Strömungsgradienten, durch ein gröberes Gitter von $\Delta x = \Delta y = \Delta z = 3 \text{ mm}$ auflösen. Dieser Zuströmungsbereich mit gröberem Gitterzellen beginnt in ca. 20 mm radialer Entfernung vom Tankrand und wird durch ein unstrukturiertes Pave-Gitter in ein gröberes Gitter überführt. Diese Vergitterungstechnik zielt daraufhin ab, dass Zellen bei der späteren Berechnung eingespart werden können. Trotz dieser Einsparungsmaßnahmen resultieren noch $2 \cdot 10^6$ Zellen für das vergitterte Gesamtmodell, welches in Abb. 2 dargestellt ist.

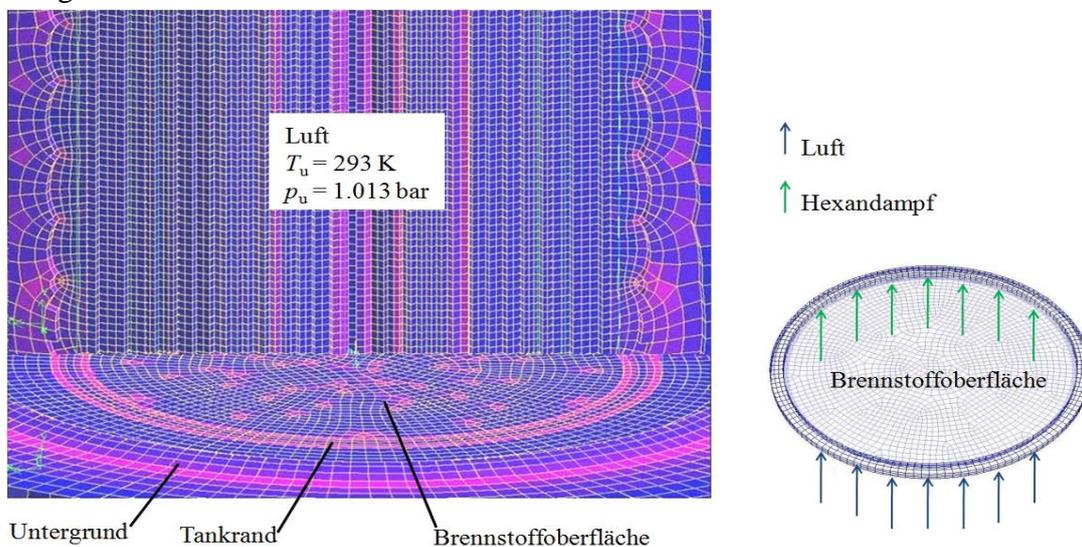


Abb. 2: Hexaeder Rechengitter zur Simulation einer Hexanflamme

2.2 Anfangs- und Randbedingungen

Als Randbedingungen, z.B. für die Massenabbrandrate des Brennstoffs, die Temperatur des Brennstoffdampfes und das Material der Tankwand, werden die in Tab. 1 aufgeführten Randbedingungen gewählt:

Tab. 1: Randbedingungen der Verbrennungssimulation

Brennstoffoberfläche	$\dot{m}_f = 0.024$ $T_{bp} = 342K$ $\xi_f = 1$
Tankrandoberfläche	$q_F = 0$
Mantelfläche Simulationsgebiet	$T_\alpha = 293K$ $p_\alpha = 101325 Pa$ $\xi_f = 0$

Die Randbedingungen der Simulation, wie z.B. der Massenabbrandrate, Umgebungstemperatur sowie Umgebungsdruck, wurden aus Experimenten von [5] entnommen. Die Temperatur, mit der der aufsteigende Brennstoffdampf in das Strömungsgebiet eintritt, wurde vereinfachend als konstante Siedetemperatur von n-Hexan ($T_{bp} = 342 K$) gewählt. Der Wärmeübergang von Flamme zu Tankwand wurde nicht berücksichtigt und die Tankwand als adiabatisch betrachtet. Die definierten Anfangsbedingungen zu Beginn der Simulation, wie z.B. Temperatur oder Druck, sind in Tab. 2 aufgelistet:

Tab. 2: Anfangsbedingungen der Verbrennungssimulation

Umgebungstemperatur	$T_\alpha = 293K$
Umgebungsdruck	$p_\alpha = 101325 Pa$
Strömungsgeschwindigkeiten	$u_x = u_y = u_z = 0$
Luftdichte	$\rho_{air} = 1.239 kg/m^3$
Stickstoffmassenanteil	$\gamma_{N_2} = 0.760$
Sauerstoffmassenanteil	$\gamma_{O_2} = 0.232$
Kohlenstoffdioxidmassenanteil	$\gamma_{CO_2} = 0.0035$
Wasserdampfmassenanteil	$\gamma_{H_2O} = 0.232$

2.3 Submodelle und Solver

2.3.1 Turbulenzmodell

Es wird darauf verwiesen, dass die vorhandenen Standard-Modelle nicht für eine auftriebsbestimmte, turbulente Naturkonvektionsströmung entwickelt wurden. Für eine möglichst realistische

Beschreibung der vorliegenden Hexanflamme hat sich die Large Eddy Simulation (LES) als sehr erfolgreich erwiesen, in der nur die kleinsten Skalen modelliert werden müssen [6]. Als implementiertes Feinstrukturmodell wurde das Smargorinsky-Lilly Turbulenzmodell mit den Standardeinstellungen gewählt [7].

2.3.2 Verbrennungsmodell

Als Verbrennungsmodell wurde ein assumed PDF-Ansatz verwendet [8]. Dieser zählt zur Gruppe der PDF-Modelle für nicht-vorgemischte Verbrennung. Die für das PDF-Modell erforderliche Look-up-Tabelle wurde zuvor mit Hilfe eines Präprozessors erstellt. Dem PDF-Modell liegen 20 Spezies mit 42 reversiblen Reaktionen für die Verbrennung von n-Hexan mit Luft zugrunde. Somit können auch Information über Zwischenprodukte (z.B. C_2H_4 , C_2H_2), Radikale (z.B. OH, CH_3) und unvollständig verbrannte Spezies (z.B. CO) erhalten werden.

Das PDF-Modell erfordert Anfangs- und Randbedingungen für den Mischungsbruch. Dem Mischungsbruch wird im gesamten Simulationsgebiet ein Startwert von $\xi_f = 0$ zugewiesen. Dies ist gleichbedeutend mit der Abwesenheit des Brennstoffs. Der gleiche Wert wird dem Mischungsbruch an den anderen Randbedingungen zugewiesen. Lediglich am Brennstoffeintritt wird ein Brennstoffstrom durch einen Wert von $\xi_f = 1$ gesetzt.

2.3.3 Solver

Nachdem die Anfangs- und Randbedingungen im Simulationsgebiet definiert und initialisiert wurden, kann nun der Solver ausgewählt werden. FLUENT bietet dabei einen gekoppelten (Druck- und Impulsgleichung miteinander gekoppelt) und drei segregierte Solver, bei dem die Erhaltungsgleichungen nacheinander gelöst werden. Als Solver wurde das Druckkorrekturverfahren SIMPLE (Semi Implicite Methode for Pressure Linked Equations) genutzt [9].

Die iterative Konvergenz der Berechnung kann anhand der Residuen überprüft werden. Die Toleranzen bei der Residuen-Rechnung wurde auf eine Genauigkeit von $1 \cdot 10^{-5}$ gesetzt. Bei dem hier verwendeten transienten Solver werden die Zeitschrittweite und die Anzahl der Iterationen pro Zeitschritt festgelegt. Als praktisch geeignet hat sich eine Anzahl von 20 Iterationen pro Zeitschritt erwiesen.

Aus der Zeitskala der chemischen Reaktion hat sich eine Zeitschrittweite von $\Delta t = 10^{-4}$ s für die Simulation ergeben. Die Simulation wurde zu Beginn jedoch mit größeren Zeitschrittweiten $\Delta t > \Delta t_{\min}$ angerechnet und wurde mit fortschreitender Rechenzeit auf $\Delta t_{\min} = 10^{-4}$ s reduziert.

3. Ergebnisse und Diskussion

3.1 Vorhergesagte und gemessene Dichteprofile einer Hexanflamme

Zur Validierung der Submodelle werden die in Abb. 3 ermittelten radialen Dichteprofile aus den experimentellen Interferogrammen für $x = 20$ mm, $x = 50$ mm und $x = 150$ mm über dem Tankrand vergleichend mit den CFD vorhergesagten Dichteprofilen herangezogen [6]. Zunächst ist zu erkennen, dass sich ein schwach ausgeprägtes bimodales (M-förmiges) Dichteprofil bei $x = 20$ mm ausbildet, dass mit zunehmender Höhe x über den Tankrand in ein unimodales Profil ($x = 150$ mm) übergeht. In der Verbrennungszone bei $x = 20$ mm ist ein steiler Dichteabfall im Bereich der thermischen Grenzschicht bis zu einem Dichteminimum bei $r \approx 13$ mm charakteristisch, während sich die Dichte innerhalb der sichtbaren Flamme $r < 13$ mm kaum ändert. Die Simulation zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten, woraus die Validierung der verwendeten Submodelle

resultiert.

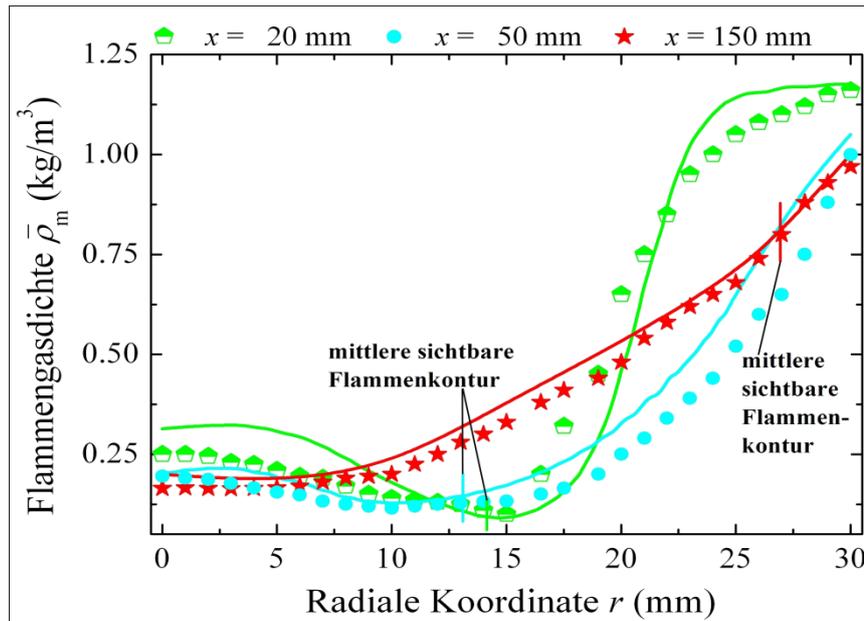


Abb. 3: CFD vorhergesagte (Kurven) und gemessene (Symbole) radiale Profile der Flammengasdichte in verschiedenen Abständen x über dem Tankrand.

3.2 Vorhergesagte und gemessene radiale Spezieskonzentrationsprofile einer Hexanflamme

In diesem Abschnitt werden die gemessenen und vorhergesagten Spezieskonzentrationsprofile zusammen mit der sichtbaren Flammenkontur diskutiert [7]. In den Abn. 4 - 6 sind die zeitlich-gemittelten radialen Volumenanteile $\Delta\gamma_i$ der stabilen Spezies in den Abständen $x = 20$ mm (Verbrennungszone) und $x = 50$ mm (Pulsationszone) über dem Tankrand dargestellt. Die Symbole kennzeichnen jeweils die Messpunkte und die Kurven die CFD vorhergesagten Spezieskonzentrationsprofile. Die GC-Messungen waren so gut optimiert und mit definierten Eichgaszusammensetzungen kalibriert (innerhalb des gesamten Konzentrationsbereichs), dass der Fehler in der Spezieskonzentrationsmessung im Größenbereich von $\Delta\gamma_i = 5 \text{ vol.}\%$ liegt. Wie aus Abb. 4 hervorgeht, finden in der Verbrennungszone die Hauptreaktionen statt. Dies bedeutet, dass ein Großteil an n-Hexan bereits in die Verbrennungsprodukte CO_2 und H_2O umgewandelt ist. Selbst auf der Flammenachse findet man nur noch 20 vol. % n-Hexan und bereits 57 vol. % Stickstoff, was auf eine recht starke Vermischung des aufsteigenden Brennstoffdampfes mit dem Luftstickstoff schließen lässt. Ebenfalls können an der Flammenachse bereits schon Crackgase, wie z.B. H_2 und C_2H_4 sowie 14 vol. % Abgase (5.5 vol. % CO_2 und 8.5 vol. % H_2O) analysiert werden. Die nur sehr geringen Sauerstoffkonzentrationen $\gamma_{\text{O}_2} = 0.3 \text{ vol.}\%$ im Bereich von $0 < r < 10$ mm können so erklärt werden, dass sich der mit dem Luftstickstoff zuströmende Sauerstoff vollständig in einer dünnen Flammenhaut im Bereich der sichtbaren Flammenkontur umsetzt. Bei $r = 14$ mm fallen die maximale radiale Ausdehnung der sichtbaren Flammenkontur und die Lage der stöchiometrischen Verbrennung $\Phi = 1$ zusammen. Die vorhergesagten Spezieskonzentrationsprofile geben die GC-Messungen recht gut wieder. Es ist jedoch zu erkennen, dass mit CFD eine deutlich höhere Stickstoffkonzentration im Bereich $0 < r < 15$ mm vorhergesagt wird, was auf ein geringeres Entrainment von Umgebungsluft sowie einen weniger fortgeschrittenen Verbrennungsverlauf hindeutet. Ebenfalls wird die Lage der Konzentrationsmaxima der verschiedenen Spezies in Abb. 4, welche im Bereich der maximalen radialen Ausdehnung der sichtbaren Flammenkontur ($r = 14$ mm) liegt, sehr gut mit CFD vorhergesagt.

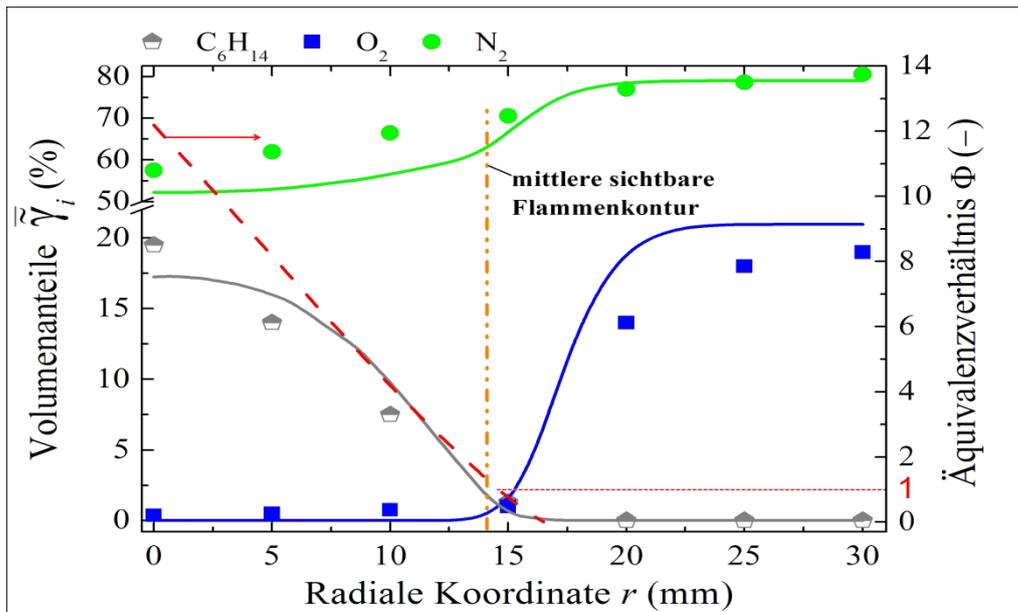


Abb. 4: CFD vorhergesagte (Kurven) und gemessene (Symbole) radiale Profile der Spezieskonzentrationen von Brennstoff sowie Umgebungsluft N_2/O_2 mit zugehörigem Äquivalenzverhältnis-Profil bei $x = 20$ mm.

Im Gebiet der Pulsationszone $x = 50$ mm setzt sich der Brennstoff bis auf eine Konzentration von $\gamma_f = 10$ vol. % an der Flammenachse um, wie aus Abb. 5 hervorgeht. Die brennstoffreiche Region ($\Phi < 1$) hat eine geringere radiale Ausdehnung ($\Delta r = 20$ mm) als die in der klaren Verbrennungszone und die Lage der stöchiometrischen Verbrennung bei $r = 10$ mm verschiebt sich in Richtung der Flammenachse. Aufgrund der Abnahme an Brennstoffkonzentration mit zunehmender Höhe über dem Tankrand wird mehr Luftsauerstoff in die Flamme eingesaugt und gelangt tiefer in die Flamme ($r = 10$ mm), wo dieser in einer dünnen Flammenhaut vollständig verbraucht wird. Die maximale radiale Ausdehnung der sichtbaren Flamme $\Delta r = 24$ mm geht über die Lage der stöchiometrischen Verbrennung bei $r = 10$ mm hinaus. Die Flamme enthält bereits einen Großteil an Stickstoff 60 vol. % an der Flammenachse, wobei mit zunehmendem radialen Abstand das N_2/O_2 -Verhältnis immer mehr die Zusammensetzung der Umgebungsluft annimmt. Ab $r > 20$ mm besteht die Zusammensetzung der Flammengase nahezu aus heißer Luft. Die gemessenen und vorhergesagten Profile der Spezieskonzentrationen sind in guter Übereinstimmung, lediglich in Nähe der Flammenachse treten kleinere Abweichungen auf. Die radialen Konzentrationen der Abgase H_2O , CO_2 , CO und der Crackprodukte H_2 und C_2H_4 nehmen in radialer Richtung zu und erreichen ihr Maximum zwischen $5 \text{ mm} < r < 10 \text{ mm}$, wie aus Abb. 6 deutlich wird. Der größte Teil an Hexan reagiert zwar im Bereich der Flammenhaut bei $r \approx 10$ mm mit Sauerstoff, ein geringer Teil unterliegt jedoch einer Pyrolyse im achsnahen Bereichen, was die hohen Konzentrationen an H_2 und C_2H_4 von 9 vol. % erklärt. Das Vorliegen von CO in diesem Bereich lässt desweiteren auf eine unvollständige Verbrennung schließen.

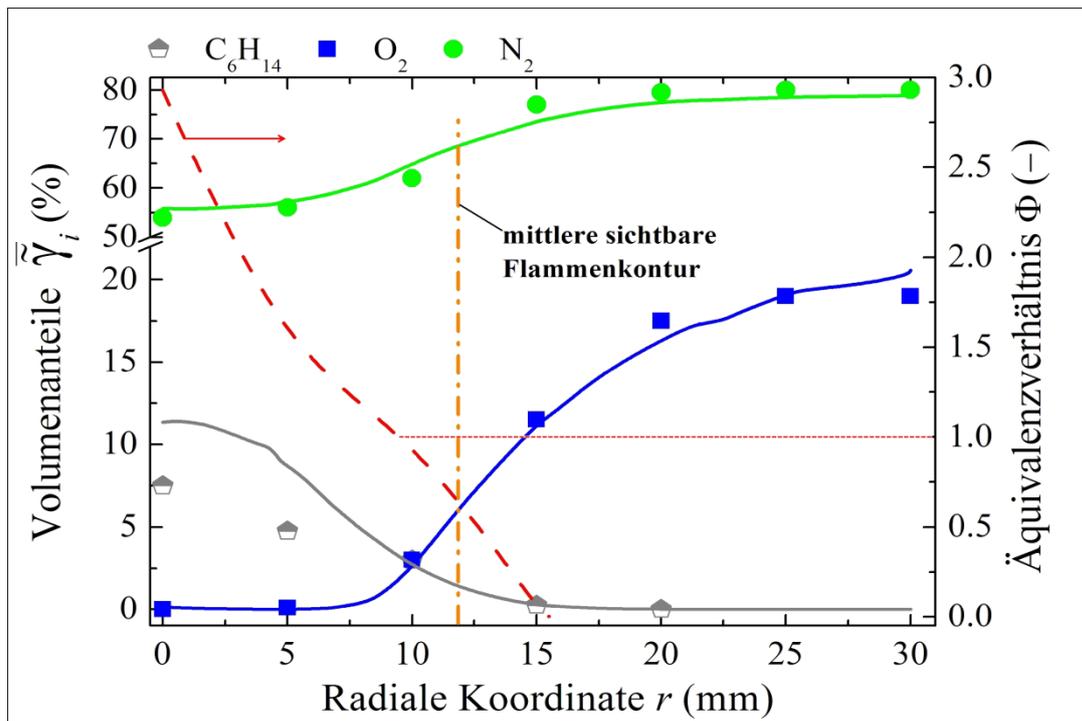


Abb. 5: CFD vorhergesagte (Kurven) und gemessene (Symbole) radiale Profile der Spezieskonzentrationen von Brennstoff sowie Umgebungsluft N_2/O_2 mit zugehörigem Äquivalenzverhältnis-Profil bei $x = 50$ mm.

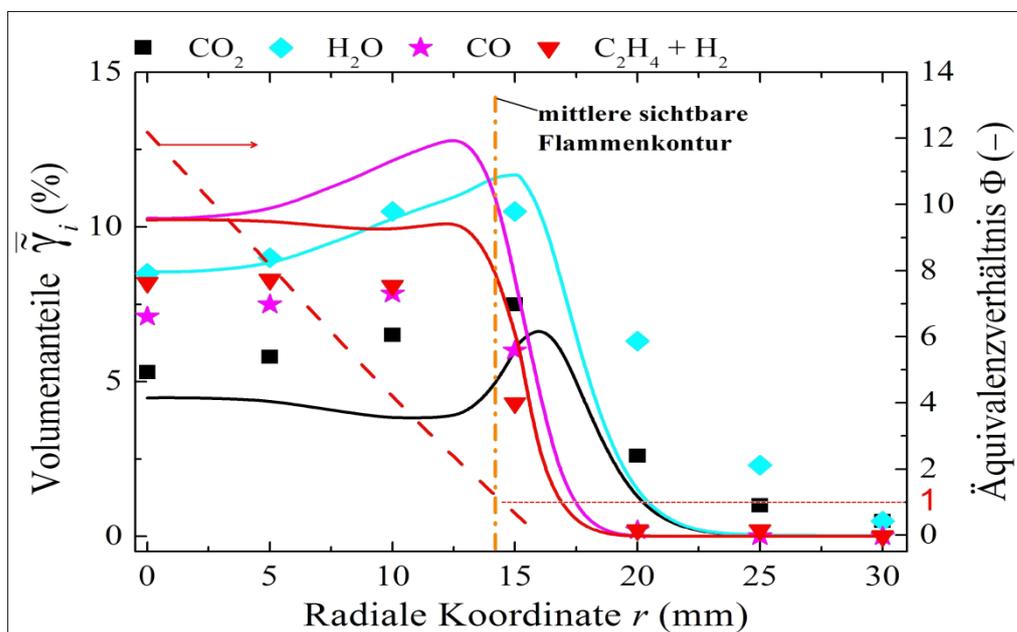


Abb. 6: CFD vorhergesagte (Kurven) und gemessene (Symbole) radiale Profile der Spezieskonzentrationen der Abgase CO , CO_2 und H_2O sowie der gasförmigen Pyrolyseprodukte H_2 und C_2H_4 mit zugehörigem Äquivalenzverhältnis-Profil bei $x = 50$ mm.

Aus der bemerkenswert guten Übereinstimmung zwischen den CFD vorhergesagten Spezieskonzentrationsprofilen mit den gemessenen Konzentrationsprofilen folgt auch hier die Validierung der verwendeten Submodelle.

3.3 Vorhergesagte und gemessene radiale Temperaturprofile einer Hexanflamme

Zur weiteren Validierung der verwendeten Submodelle sind in Abb. 7 radiale Temperaturprofile $T_m(r)$ bei $x = 20$ mm von interferometrisch und mit Thermoelementen gemessenen Flammentemperaturen sowie die mit CFD vorhergesagten Flammentemperaturen dargestellt. Es ist anzumerken, dass die Thermoelement Messungen bereits durch die auftretenden Wärmeverluste am Thermoelement korrigiert wurden. Die Profile zeigen über einen weiten Bereich der radialen Flammenausdehnung jeweils eine gute Übereinstimmung, jedoch unterscheiden sich die mittleren maximalen Flammentemperaturen $T_{m,max}$ im Bereich der sichtbaren Flammenkontur (Abb. 7). Das Maximum der mittleren Flammentemperatur erreicht bei den mit der Interferometrie gemessenen Flammentemperaturen $T_{max,Int} = 2025$ K bei $r = 15$ mm. Die Thermoelementmessungen und die CFD Simulation zeigen hingegen geringere maximale Flammentemperaturen von $T_{max,Th} = 1605$ K bzw. $T_{max,CFD} = 1933$ K bei der gleichen radialen Koordinate $r = 15$ mm. Die Abweichung lässt sich, mit der zu geringen zeitlichen Auflösung der Thermoelementmessungen und des im Bereich der Flammenkontur ein immer zu groben Rechengitter der CFD-Simulation begründen.

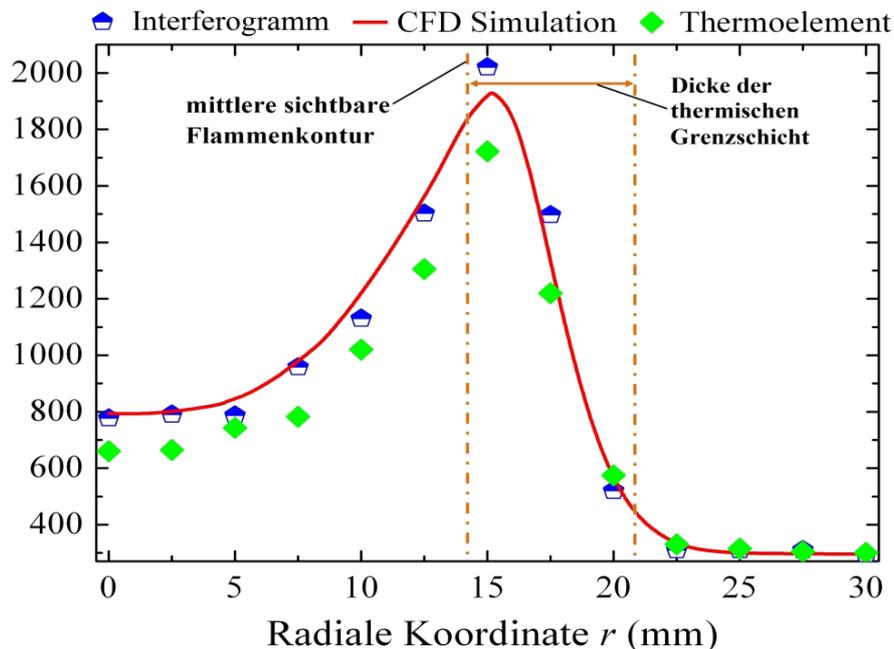


Abb. 7: CFD vorhergesagte (Kurve) und mit Thermoelementen (Symbole) sowie aus Interferogrammen (Symbole) gemessenen radialen Profile der Flammentemperatur bei $x = 20$ mm.

Mit zunehmender Höhe x über dem Tankrand ist eine Verschiebung der mittleren Maximaltemperatur hin zur Flammenachse zu beobachten. Dies ist an den radialen Temperaturprofilen in der Pulsationszone bei $x = 50$ mm zu erkennen (Abb. 8). Die maximalen mittleren Flammentemperaturen betragen $T_{max,Int} = 1689$ K, $T_{max,Th} = 1350$ K und $T_{max,CFD} = 1598$ K, wobei die Temperaturmaxima gegenüber $x = 20$ mm zur Flammenachse ($r = 10$ mm) hin verschoben sind.

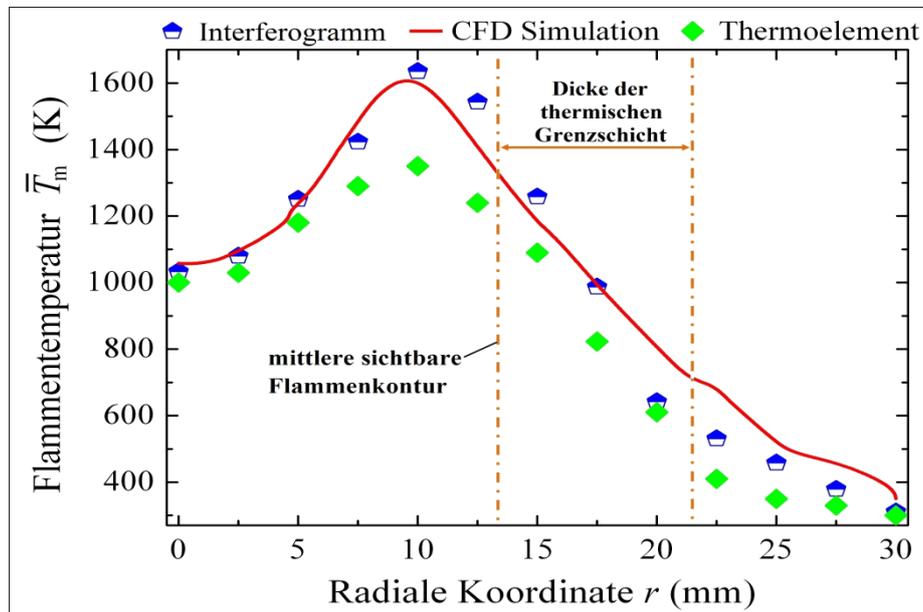


Abb. 8: CFD vorhergesagte (Kurve) und mit Thermoelementen (Symbole) sowie aus Interferogrammen (Symbole) gemessenen radialen Profile der Flammentemperatur bei $x = 50$ mm.

In der Plumezone bei $x = 150$ mm sind unimodale Temperaturprofile mit einer maximalen mittleren Flammentemperatur von $T_{\max, \text{Int}} = 1365$ K, $T_{\max, \text{Th}} = 1340$ K und $T_{\max, \text{CFD}} = 1395$ K zu beobachten, welche über einen Bereich von $0 < r < 5$ mm ausgedehnt sind (Abb. 9).

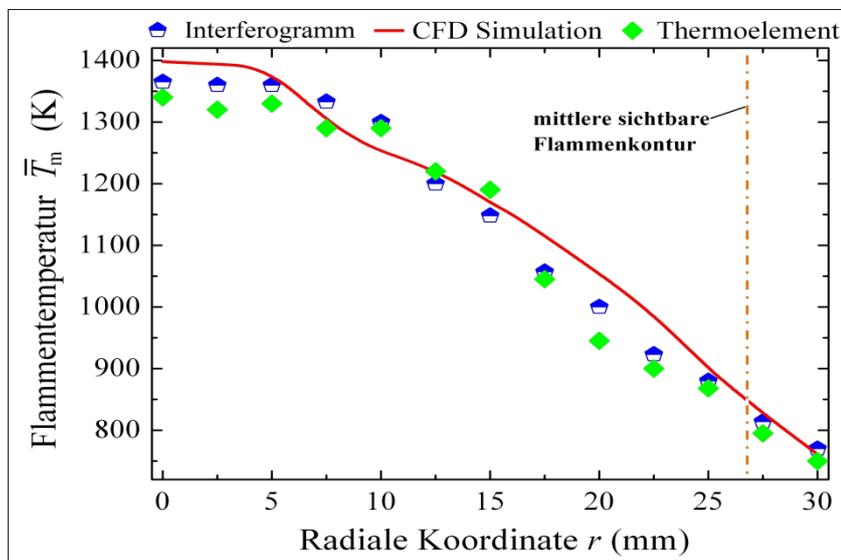


Abb. 9: CFD vorhergesagte (Kurve) und mit Thermoelementen (Symbole) sowie aus Interferogrammen (Symbole) gemessenen radialen Profile der Flammentemperatur bei $x = 150$ mm.

Alle Temperaturprofile zeigen eine ziemlich gute Übereinstimmung zwischen der Simulation und den experimentellen Ergebnissen, woraus erneut die Validierung der verwendeten Submodelle folgt.

3.4 Vorhergesagte und gemessene Interferogramme einer Heliumausströmung

Mit den hier beschriebenen Submodellen wurden auch CFD-Simulationen nicht reagierender Strömungen durchgeführt. In Abb. 10 sind die gemessenen und simulierten Interferogramme am Beispiel einer Heliumausströmung ($d = 55 \text{ mm}$) dargestellt.

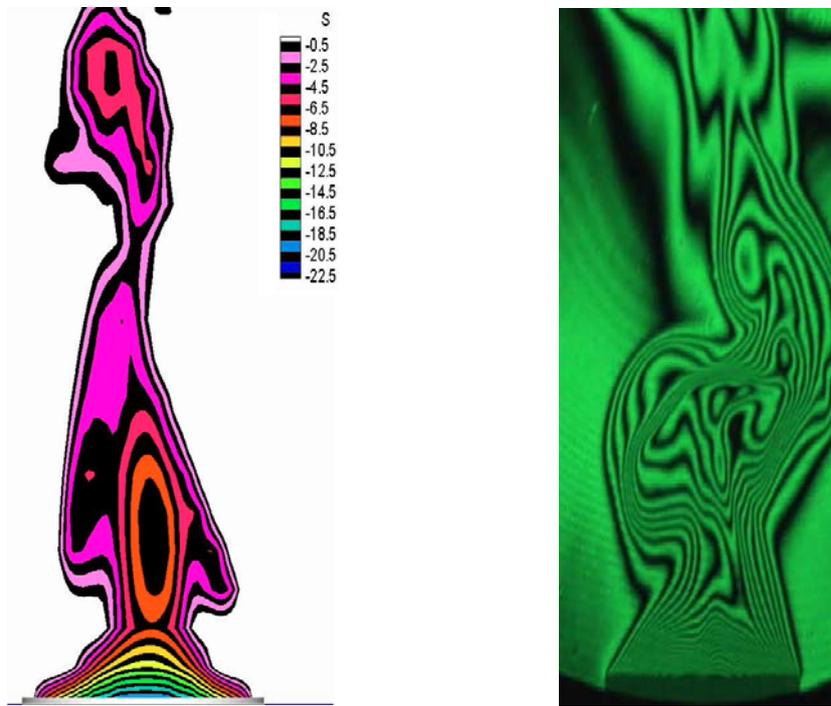


Abb. 10: CFD vorhergesagte (links) und mit Interferometrie (rechts) gemessene Interferogramme bei einer Heliumausströmung

Die Abb. 11 zeigt die recht gute Übereinstimmung zwischen den CFD vorhergesagten und den aus Interferogrammen ermittelten Profilen der Interferenzstreifenordnung. Hieraus folgt die Validierung der verwendeten Submodelle auch für eine Heliumausströmung (nicht reagierende Strömung).

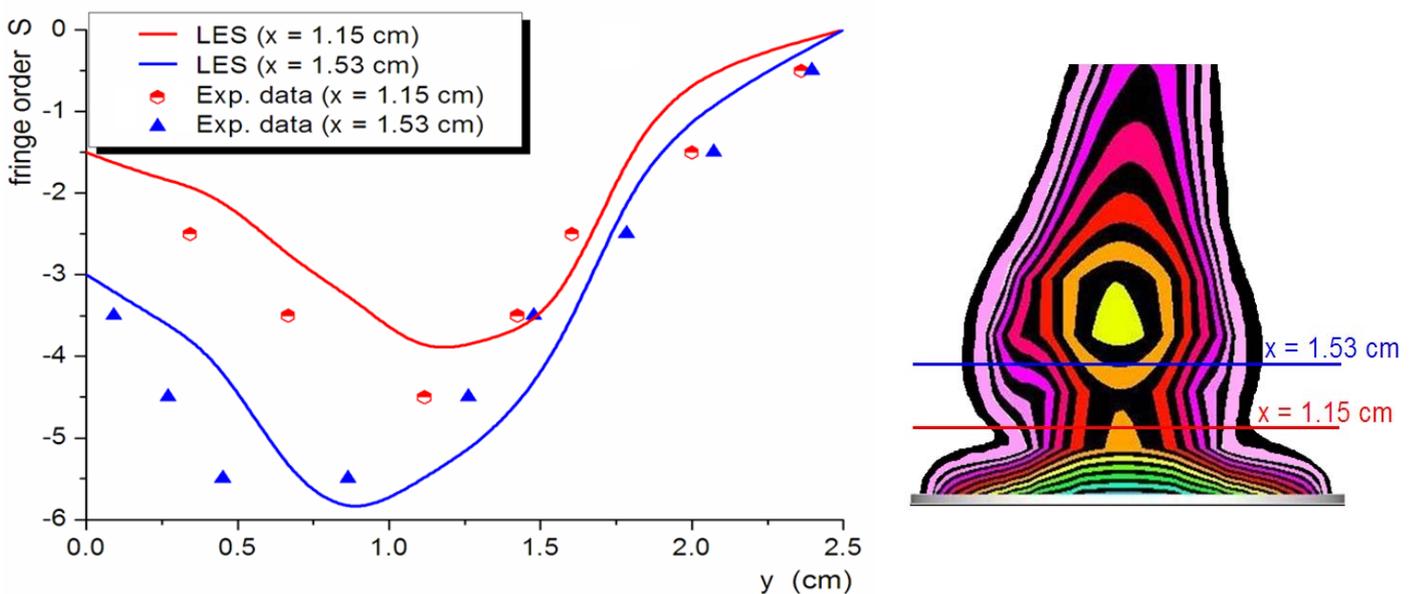


Abb. 11: Radiale Profile der CFD vorhergesagten und experimentell bestimmten Interferenzstreifenordnung bei einer Heliumausströmung (nicht reagierende Strömung)

4 Folgerungen und Ausblick

Mit der CFD Simulation unter Verwendung der Large-Eddy-Simulation zur Turbulenzmodellierung und eines assumed-pdf-Ansatz als Verbrennungsmodell lassen sich transiente und zeitlich-gemittelte Flammentemperaturen, Flammengasdichten und Spezieskonzentrationen in einer Hexanflamme vorhersagen. Mit den vorhergesagten Flammengasdichten und Spezieskonzentrationen lassen sich, unter Berücksichtigung der spezifischen Refraktion des Flammengasgemisches, Brechzahlfelder berechnen. Durch Integration von sehr dicht aufeinander folgenden x,y-Schnittebenen der Brechzahldifferenz von Flamme und Umgebung lassen sich Interferogramme, sowohl reagierend (Flamme) als auch nicht reagierend Strömungen (Helium) vorhersagen.

Zur Validierung der CFD-Submodelle wurden die simulierten Dichte-, Konzentrations- und Temperaturprofile mit den experimentellen Profilen verglichen, wobei eine ziemlich gute Übereinstimmung erzielt wurde. Es zeigte sich, dass die verwendeten Submodelle sehr gut zur Vorhersage von insbesondere reagierenden als auch nicht reagierenden Strömungen geeignet sind und als validiert betrachtet werden können.

Zukünftig lassen sich aufgrund der hier erfolgten Untersuchungen die validierten Submodelle zu einer deutlich verbesserten Vorhersage von Pool-, Tank- und Lachenfeuern heranziehen.

Literatur

- [1] A. Schönbacher, W. Brötz, C. Balluff, D. Göck, N. Schiess, Erforschung von Schadenfeuern flüssiger Kohlenwasserstoffe als Beitrag zur Sicherheit von Chemieanlagen, *Chem. Ing. Tech.*, **57**, 1985, 823-834.
- [2] A. Schönbacher, B. Arnold, V. Banhardt, V. Bieller, H. Kasper, M. Kaufmann, R. Lucas, N. Schiess, Simultaneous observation of organized density structures and the visible field in pool fires, *Proc. Combust. Inst.*, **21**, 1986, 83-92.
- [3] I. Vela, H. Chun, K. B. Mishra, M. Gawłowski, P. Sudhoff, M. Rudolph, K.-D. Wehrstedt, A. Schönbacher, Vorhersage der thermischen Strahlung großer Kohlenwasserstoff und Peroxid-Poolfeuer mit CFD-Simulation, *Forsch. Ingenieurwes.*, **73**, 2009, 87-97.
- [4] I. Vela, CFD prediction of thermal radiation of large, sooty, hydrocarbon pool fires, Dissertation, 2009, Universität Duisburg-Essen, Essen.
- [5] V. Bieler, Dichtequellen und Dichtesenken als dissipative Strukturen in Diffusionsflammen organischer Flüssigkeiten, Dissertation, 1988, Universität Stuttgart, Stuttgart.
- [6] P. Sagaut, Large Eddy Simulation for Incompressible Flows, Springer Verlag, 2004.
- [7] S. B. Pope, Turbulent Flows, Cambridge Press, DCW Industries, 1993.
- [8] P. Gerlinger, Numerische Verbrennungssimulation, Springer-Verlag, 2005.
- [9] M. Schäfer, Numerik im Maschinenbau, Springer-Verlag, 1999.
- [10] M. Gawłowski, CFD Simulation zur Vorhersage von Interferogrammen, Temperaturen und Spezieskonzentrationen in einer Hexanflamme, Dissertation, 2010, Universität Duisburg-Essen, Essen.

- [11] A. Schönbacher, W. Brötz, C. Balluff, G. Riedel, A. Kettler, N. Schiess, Visualization of Organized Structures in Buoyant Diffusion Flames, *Ber. Bunsenges. Phys. Chem.*, **89**, 1985, 595-603.
- [12] A. Schönbacher, W. Brötz, A. Walcher, Gaschromatographische Analyse der Flammgase einer n-Hexan Flamme, *Erdöl-Kohle-Erdgas-Petrolchem.*, **31**, 1978, 347-353.