



Technische Universität Berlin
Fakultät für Verkehrs- und Maschinensysteme
Institut für Strömungsmechanik und Technische Akustik (ISTA)
Fachgebiet Experimentelle Strömungsmechanik

Untersuchung des Eddy-Dissipation- und des Finite-Rate-Chemistry-Verbrennungsmodells in ANSYS CFX

Arbeit zur Erlangung des akademischen Grades
Bachelor of Science (B.Sc.)
im Studiengang Physikalische Ingenieurwissenschaft

Vorgelegt von: Tobias Mangold
Matrikelnummer 19 66 18

Betreuer: Prof. Dr.-Ing. Christian Oliver Paschereit (Technische Universität Berlin)
Prof. Dr.-Ing. Jonas Moeck (Technische Universität Berlin)
Dr. rer. nat. Andreas Spille-Kohoff (CFX Berlin Software GmbH)

Berlin, 16. Januar 2014

Inhaltsverzeichnis

Tabellenverzeichnis	V
Abbildungsverzeichnis	VII
Nomenklatur	IX
1. Einleitung	1
1.1. Zielsetzung	2
1.2. Gliederung	2
2. Einführung: Brandschutz und Beschreibung von Brandphänomenen	3
2.1. Gefahren durch Brände und Brandschutzziele	3
2.2. Brandschutzwesen	4
2.3. Phänomene, Eingangsgrößen und Phasen eines Brandes	5
2.4. Die Brandsimulationssoftware FIRE DYNAMICS SIMULATOR (Version 6.0)	6
2.5. Ablauf einer CFD-Simulation mit ANSYS CFX (Version 15.0)	6
3. Grundlagen der numerischen Brandsimulation: Phänomene und deren Modellierung	9
3.1. Strömungsmechanik	9
3.2. Turbulenz	16
3.3. Verbrennung	22
3.4. Wärmestrahlung	35
3.5. Numerische Lösung der Differentialgleichungen und Fehlerbetrachtung	39
4. Testfall: Brandversuche von STECKLER (1982)	47
4.1. Geometrie	47
4.2. Brandherd	47
4.3. Ventilationsöffnung	49
4.4. Messdaten des Strömungsfeldes	49
5. Simulationen	51
5.1. Definition von Kenngrößen zur Auswertung einer Brandsimulation	51
5.2. Simulationen des Brandherdes mit dem Eddy-Dissipation-Modell	53
5.3. Gitterunabhängigkeitsstudie für das Eddy-Dissipation-Modell	66
5.4. Variation der Parameter des Eddy-Dissipation-Modells	69
5.5. Stationäre, dreidimensionale Simulation des Testfalles von Steckler	84
5.6. Simulation des Brandherdes mit dem Finite-Rate-Chemistry-Modell	92
6. Zusammenfassung und Ausblick	95
Literaturverzeichnis	99
Verzeichnis der Anhänge	101

6. Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurden das *Eddy-Dissipation*- und das *Finite-Rate-Chemistry-Verbrennungsmodell* in ANSYS CFX im Hinblick auf die Brandsimulation untersucht. Als übersichtlicher und dennoch ausreichend realistischer Testfall für die durchgeführten Brandsimulationen wurde die Testkonfiguration 18 aus den Zimmerbrandversuchen von STECKLER U. A. [1982] ausgewählt. Es wurden zunächst Auswertungskenngrößen definiert, die eine Bewertung der geometrischen Abmessungen und der Intensität des Flammenbereiches einer simulierten Verbrennungsreaktion ermöglichen und mit denen darüberhinaus die Ergebnisse unterschiedlicher Simulationskonfigurationen verglichen werden können. Dabei wurde vorgeschlagen, denjenigen Strömungsbereich als Flammenbereich zu bezeichnen, in dem 90% der Gesamtwärmefreisetzung erfolgt.

Anhand der rotationssymmetrischen und stationären Simulation des Methan-Brenners aus dem Testfall 18 von STECKLER wurden für das Eddy-Dissipation-Modell konvergente Vergleichsfälle geschaffen, wobei die Verbrennungsreaktion von Methan mit dem Luftsauerstoff durch drei unterschiedlich detaillierte Reaktionsmechanismen abgebildet wurde: den Einschritt-, Zweisritt- und WGS-Reaktionsmechanismus. Es zeigte sich, dass die gewählten Auswertungskenngrößen eine anschauliche Einschätzung des simulierten Brandes ermöglichen. In einer Gitterunabhängigkeitsstudie wurden daraufhin für die EDM-Zweisritt-Konfiguration Rechengitter mit unterschiedlicher Auflösungsgenauigkeit geprüft, wobei sich für die untersuchte Konfiguration mit einem Brenner-Durchmesser von 30.0cm eine ausreichende räumliche Diskretisierungsschrittweite $\Delta x \approx 1.0\text{mm}$ ergab.

Eine darauf folgende Variation der Parameter des Eddy-Dissipation-Verbrennungsmodelles zeigte, dass ausgewählte Auswertungskenngrößen des simulierten Brandes durch die Parameteränderungen in sinnvoller Weise beeinflusst werden können. Für die EDM-Parameter *Koeffizient A*, *Koeffizient B* und *Mixing Rate Limit* konnten jeweils Intervalle der Parameterwerte abgegrenzt werden, in denen eine Änderung mit einer starken, mittleren und geringen Änderung der Auswertungskenngrößen einhergeht. Bei Aktivierung des Parameters *Koeffizient B* ist es notwendig, dass im Verbrennungsbereich Reaktionsprodukte vorliegen, damit eine Reaktion stattfinden kann. Deshalb wird die Verbrennung durch die Definition der Rand- und Anfangsbedingungen für die Gemischzusammensetzung beeinflusst. Durch die Vorgabe einer *Maximum Flame Temperature* konnte die beim Brand entstehende maximale Temperatur begrenzt werden. Der Parameter *Extinction Temperature* beeinflusste für kleine Werte die Verbrennung nur wenig und führte ab einem bestimmten Wert zur vollständigen Unterdrückung der Verbrennung. Mit dem Parameter *Chemical Timescale* wird das Phänomen der Flammenlöschung modelliert. Dabei entstehen transiente Vorgänge, sodass die meisten Konfigurationen in der stationären Simulation nicht konvergierten.

In einem weiteren Untersuchungsschritt wurde die vollständige Geometrie aus dem Test 18 der Versuchsreihe von STECKLER in einer dreidimensionalen, stationären Simulation mit dem EDM und dem Zweisritt-Reaktionsmechanismus berechnet. Obwohl die Lösung oszillierte, stimmten die Ergebnisse für die Temperatur- und Geschwindigkeitswerte aus der Simulation gut mit den Messwerten überein. Es konnte gezeigt werden, dass die Übereinstimmung der simulierten Temperaturverteilung mit den Messdaten durch Veränderung eines EDM-Parameters und des Wärmeübergangskoeffizienten der Brandraumbooberflächen weiter verbessert werden kann.

Im letzten Arbeitsschritt gelang es nach der Einführung von Blendingfunktionen für das Äquivalenzverhältnis und die Temperatur, den Methan-Brenner mit dem Finite-Rate-Chemistry-Verbrennungsmodell für eine

6. Zusammenfassung und Ausblick

Einschritt-Globalreaktion mit Koeffizienten aus WESTBROOK U. DRYER [1981] in einer transienten Simulation zu berechnen. Die simulierte Verbrennung entsprach dem Ergebnis aus der Simulation mit dem EDM.

Allgemein lassen sich einige Erkenntnisse zur numerischen Brandsimulation mit dem EDM und dem FRC-Modell zusammenfassen. Von großem Nutzen war es, das EDM in stationären Simulationen untersuchen zu können. Dabei reagierten die stationären Simulationen so empfindlich auf Änderungen der Konfiguration, dass nicht in allen Fällen eine Konvergenz der Lösung erzielt wurde. Das EDM lieferte für einen realistischen Testfall mit den Messdaten übereinstimmende Ergebnisse und zeigte sich deshalb prinzipiell geeignet zur Darstellung von Bränden.

Bei Verwendung des FRC-Modells müssen für die zu modellierenden Reaktionen geeignete Messdaten vorliegen. Zwar lieferten WESTBROOK U. DRYER [1981] für die untersuchte Einschritt-Reaktion solche Messdaten, die aber ursprünglich für die Simulation vorgemischter Verbrennungssituationen entwickelt wurden. Deshalb war eine Simulation der in der vorliegenden Arbeit nachgebildeten nicht vorgemischten Verbrennung nur nach Anpassungen möglich. Die Simulation mit dem FRC-Modell konnte außerdem nur in einer transienten Berechnung durchgeführt werden. Die kurzen Zeitskalen der Reaktionsraten machen für das FRC-Modell sehr kleine räumliche und vor allem zeitliche Diskretisierungsschrittweiten notwendig. Daraus resultiert ein größerer Rechenaufwand als beim EDM, der die Simulation realistischer Brandszenarien erschwert.

Bei der Durchführung der Berechnungen wurde deutlich, dass sich Brandsituationen grundsätzlich von technischen Verbrennungssituationen unterscheiden und durch einige Merkmale auszeichnen, die mit besonderen Herausforderungen an die verwendeten Verbrennungsmodelle und die numerische Simulation verbunden sind:

- Die Größenordnungen der Geometrien realistischer Brandsituationen - bspw. von Zimmer-, Wohnungs-, Haus- oder gar Hochhaus- und Industriebränden - sind sehr groß im Vergleich zu den Größenskalen der simulierten Verbrennungsreaktionen und auch im Vergleich zu technischen Geometrien (z. B. der Brennkammer einer Gasturbine). Das für die Simulation verwendete Rechengitter muss einerseits ein großes Gesamtströmungsgebiet und andererseits den Bereich der eigentlichen Verbrennungsreaktion jeweils in geeigneten Auflösungen darstellen.
- Das Strömungsfeld ist stark durch den Einfluss der aus temperaturbedingten Dichteunterschieden resultierenden Auftriebskraft geprägt, wobei die erreichten Strömungsgeschwindigkeiten klein sind im Vergleich zu technischen Verbrennungsvorgängen ($|\vec{u}| < 10 \text{ m/s}$). Für den untersuchten Testfall ergab sich außerdem eine sehr langsame Einströmgeschwindigkeit des Brennstoffes mit $|\vec{u}| \approx 5 \text{ cm/s}$. Strömungen mit so niedrigen Geschwindigkeiten sind oft instabil und zeigen transientes Verhalten.
- Im Gegensatz zu technischen Verbrennungsvorgängen liegen keine expliziten Ein- und Auslässe für die Reaktanden und Produkte vor. Während der Einstrom von Brennstoff für einen beispielhaften Brandfall modelliert werden kann, ist das Oxidationsmittel Sauerstoff als Luftbestandteil bei Brandbeginn schon im Brandraum vorhanden und strömt gegebenenfalls während des Brandes aus der Atmosphäre durch Ventilationsöffnungen wie Fenster und Türen in den Brandraum nach.
- Ein für die numerische Brandsimulation geeignetes Verbrennungsmodell muss numerisch möglichst anspruchslos sein und gleichzeitig die globale, wenn möglich auch die lokale Wärmefreisetzung und das Entstehen von Rauchgasen hinreichend genau wiedergeben. Es zeigte sich, dass die in der numerischen Brandsimulation verwendeten Verbrennungsmodelle mit den zugehörigen Parametern ursprünglich für die Simulation von technischen Verbrennungsprozessen entwickelt wurden und an die beschriebenen geometrischen und physikalischen Bedingungen von Bränden angepasst werden müssen.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde nicht geprüft, wie sich unterschiedliche Turbulenzmodelle und -randbedingungen auf die mit dem EDM simulierte Verbrennung auswirken. Außerdem bietet sich eine genauere Überprüfung der Modellierung des Abtransportes der freigesetzten Wärme aus dem Verbrennungsgebiet und aus dem Brandraum an. Auch konnten einige der bei Bränden auftretende Phänomene nicht untersucht werden, die jedoch für die Bewertung der Gefährlichkeit eines Brandes von Bedeutung sind. So wurde nicht betrachtet, wie in einer Brandsimulation das Entstehen von sichtbehinderndem Ruß modelliert und die Giftigkeit der entstehenden Rauchgase eingeschätzt werden kann. Für weitere Arbeiten bietet sich deshalb die Untersuchung von Ruß-Modellen und die Implementierung eines geeigneten Indikators zur Bewertung der lokalen Rauchgastoxizität an. Von Nutzen wäre sicherlich eine vergleichende Betrachtung der in der nicht-kommerziellen Brandsimulationssoftware FIRE DYNAMICS SIMULATOR (FDS) genutzten Strategien zur Turbulenz- und Verbrennungssimulation.

Der Brandherd des in der vorliegenden Arbeit untersuchten Brandszenarios wurde in Anlehnung an den Versuch von STECKLER modelliert, indem durch einen geometrisch unveränderlichen Brenner der Brennstoff mit konstantem Massenstrom einströmt. Zur Simulation der Schwelbrandphase muss jedoch auch die Zersetzung der brennbaren Materialien durch Pyrolysereaktionen modelliert werden. Die vorliegende Arbeit entstand vor dem Hintergrund eines Forschungsprojektes der BUNDESANSTALT FÜR MATERIALFORSCHUNG UND -PRÜFUNG und der CFX BERLIN SOFTWARE GMBH, bei dem ein solches Schwelbrandmodell entwickelt und implementiert werden soll. Bei Pyrolysevorgängen mit einer anschließenden Verbrennung der entstehenden brennbaren Gase bilden sich zeitlich veränderliche Strömungsfelder, die nur in transienten Simulationen abgebildet werden können.