

Dipl.-Wirtsch.-Ing.
Florian Kempel

**Komplementäre Nutzung von
Polymerwissenschaft und
Brandsimulation:
Vier Beispiele in den Dimensionen
Kubikdekameter bis Kubikzentimeter**

Die vorliegende Arbeit entstand an der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung.

Impressum

**Komplementäre Nutzung von
Polymerwissenschaft und Brandsimulation:**

**Vier Beispiele in den Dimensionen
Kubikdekameter bis Kubikzentimeter**

2013

Herausgeber:

BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung
Unter den Eichen 87

12205 Berlin

Telefon: +49 30 8104-0

Telefax: +49 30 8112029

E-Mail: info@bam.de

Internet: www.bam.de

Copyright © 2013 by

BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung

Layout: BAM-Referat Z.8

ISSN 1613-4249

ISBN 978-3-9815748-5-2

**Komplementäre Nutzung von
Polymerwissenschaft und
Brandsimulation:
Vier Beispiele in den Dimensionen
Kubikdekameter bis Kubikzentimeter**

vorgelegt von
Dipl.-Wirtsch.-Ing.
Florian Kempel

von der Fakultät III – Prozesswissenschaften
der Technischen Universität Berlin
zur Erlangung des akademischen Grades

Doktor der Ingenieurwissenschaften
– Dr.-Ing. –

genehmigte Dissertation

Promotionsausschuss:

Vorsitzender: Prof. Dr. rer. nat. J. Banhart
Gutachter: Prof. Dr.-Ing. M. Wagner
Gutachter: Dr.-Ing. A. Hofmann-Böllinghaus
Gutachter: PD Dr. rer. nat. habil. B. Schartel

Tag der wissenschaftlichen Aussprache: 11. März 2013

Berlin 2013
D 83

Kurzfassung

Vereint unter dem Begriff Ingenieurmethoden haben Brandsimulationen Eingang in die Fortentwicklung des Baurechts gefunden und werden vermehrt zur Unterstützung von Brandschutzkonzepten und -nachweisen eingesetzt. Aktuelle Software verbindet Verbrennungsmodelle mit numerischer Strömungsmechanik und eignet sich so für die flexible Bearbeitung unterschiedlichster Fragestellungen. Darüber hinaus bieten erste Programme die Möglichkeit, Untermodelle zur Beschreibung des Feststoffabbrands bzw. der Pyrolyse von Brandlasten einzufügen. In der Polymerwissenschaft stellt die Untersuchung und Optimierung des Brandverhaltens einschließlich der Pyrolyse eine wichtige Aufgabe dar. Aufgrund des Brandrisikos ist die Verwendung polymerer Werkstoffe häufig eingeschränkt. Die Entwicklung flammgeschützter Materialien hat daher eine besondere Bedeutung und es existieren detaillierte Methoden zur Charakterisierung brandrelevanter Materialeigenschaften.

Vor diesem Hintergrund zielt die vorliegende Arbeit darauf ab, die Potentiale und Herausforderungen der komplementären Nutzung von Brandsimulation und polymerwissenschaftlichen Methoden zu untersuchen. Hierfür wurden vier Brandszenarien ausgewählt: Der Brand in einem Einfamilienhaus in der Dimension Kubikdekameter (dam^3), der Single Burning Item SBI Test in der Dimension Kubikmeter (m^3), der Cone Kalorimeter Test in der Dimension Kubikdezimeter (dm^3) und der UL 94 Test in der Dimension Kubikzentimeter (cm^3). Die Brandszenarien werden zunächst ausführlich charakterisiert. Anschließend wird ein jeweils passendes Simulationsmodell erstellt und berechnet und die Berechnungsergebnisse werden mit den realen Ausprägungen verglichen. Schließlich werden die Simulationen, unterstützt durch eine Parameterstudie, bewertet.

In den Untersuchungen zu den vier Brandszenarien werden durch die komplementäre Nutzung von Brandsimulation und Polymerwissenschaft belastbare numerische Berechnungen erarbeitet. Grundlage für die Ergebnisse sind die detaillierte Charakterisierung der brandrelevanten physikalischen und chemischen Eigenschaften der Werkstoffe und die damit verbundene Qualität der Eingabeparameter. Für das Brandszenario Einfamilienhaus wird der Brandverlauf in einer komplexen Geometrie mit unterschiedlichen Brandlasten realistisch berechnet. Für den SBI Test und den Cone Kalorimeter Test stehen die Wärmefreisetzungsrates bzw. die Massenverlustrate im Mittelpunkt der Simulation und zeigen eine hohe Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen. Für den vertikalen UL 94 Test werden darüber hinaus erstmals das komplexe Zusammenspiel von Pyrolyse, Verbrennung und Tropfverhalten simuliert und die unterschiedlichen Klassifizierungen und Zeitmaßstäbe übereinstimmend mit den Experimenten aus den Berechnungen abgeleitet.

Anhand der Beispiele werden erweiterte Anwendungsbereiche von Brandsimulationen durch gezielte Nutzung der polymerwissenschaftlichen Kenntnisse aufgezeigt. Gleichzeitig weisen insbesondere die Untersuchungen zu den Brandszenarien Cone Kalorimeter Test und UL 94 Test auf den wertvollen Beitrag von Brandsimulationen für die Polymerwissenschaft hin. Durch Parametervariationen können aufbauend auf einem validierten Simulationsmodell zusätzliche Erkenntnisse über die Struktur-Eigenschaftsbeziehungen von Polymeren hinsichtlich des Brandverhaltens gewonnen werden, um die Entwicklung flammgeschützter Materialien zielführend zu unterstützen.

Abstract

Termed as engineering methods, fire simulations have found their way into building legislation and are frequently used to support concepts and verifications of structural fire protection plans. Recent software developments combine combustion models and computational fluid dynamics and therefore qualify for the processing of a wide variation of tasks and questions. Above all, latest programs provide the opportunity of adding further sub-models in order to describe the fire behaviour of solid fuels, i.e. the thermal decomposition or pyrolysis of the materials can be calculated. In polymer science, the research and development of the fire behavior of materials is a scientific task of its own. Due to the fire risk, the application of polymers is often restricted. Hence, the development of fire retarded materials is of particular importance and existing methods are being used to characterize in detail all aspects of material properties according to its reaction to fire.

According to this, the aims of this thesis were to investigate the capabilities and challenges of the complementary use of fire simulation and polymer science. Four different fire scenarios were chosen for the analysis: a fire case in a family home in the dimension of cubic decameter (dam^3), the Single Burning Item SBI test in the dimension of cubic meter (m^3), the Cone Calorimeter test in the dimension of cubic decimeter (dm^3) and the UL 94 test in the dimension of cubic centimeter (cm^3). The investigation involved a thorough characterization of those scenarios as well as the creation and calculation of a simulation model for each scenario. Subsequently simulation was compared to the real characteristics and an evaluation, supported by parameter analysis, provided.

By analyzing the four fire scenarios and due to the complementary use of fire simulation and polymer science, numeric calculations have lead to significant results. Those are based upon the detailed characterization of the fire related physical and chemical properties of materials and the associated quality of the input parameters. For the family-home-scenario the fire spread is calculated realistically within a complex geometry with different fire loads. For the fire scenarios SBI and Cone Calorimeter test, which focus on the calculated heat release rate and the mass loss rate, respectively, a very close agreement with the experimental results was achieved. For the fire scenario UL 94 test the interaction of gasification, combustion and melt dripping is being simulated for the first time and the UL 94 classifications of the materials as well as the time scales are derived in accordance with the experimental results.

On the basis of the four examples as shown above, and by the systematic use of polymer science, this thesis demonstrates extended ranges of applications of fire simulations. At the same time the considerable contribution of fire simulations to polymer science is highlighted in particular during the analysis of the fire scenarios Cone Calorimeter and the UL 94 test. Based on the validated model, parameter variations reveal additional insight into the structure-property-relationship of polymers regarding their fire behavior, which may guide the development of fire retarded materials.

Inhaltsverzeichnis

Kurzfassung	v
Abstract	vii
Inhaltsverzeichnis	ix
1 Einleitung	1
1.1 Hintergrund	1
1.2 Zielstellung und Aufbau der Arbeit.....	3
2 Grundlagen und Stand der Forschung	5
2.1 Verbrennung, Brand und Brandschutz	5
2.2 Verbrennung und Brandverhalten von Polymeren	7
2.3 Brandsimulation	10
2.3.1 Feldmodelle.....	11
2.3.2 Pyrolysemodelle	19
3 Methoden und Simulationsprogramme	23
3.1 Methoden	23
3.1.1 Thermogravimetrische Analyse.....	23
3.1.2 Dynamische Differenzkalorimetrie	23
3.1.3 Rheologische Untersuchungen	24
3.1.4 Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit	24
3.1.5 Bestimmung der optischen Eigenschaften.....	25
3.1.6 Single Burning Item Test.....	25
3.1.7 Cone Kalorimeter Test	27
3.1.8 Gasification Apparatus	28
3.1.9 UL 94 Test.....	29
3.2 Simulationsprogramme	30
3.2.1 FDS	30

3.2.2	ThermaKin.....	32
3.2.3	Particle Finite Element Method	33
4	Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus	35
4.1	Charakteristika des Brandszenarios	35
4.2	Aufbau des Simulationsmodells.....	38
4.2.1	Geometrie und Diskretisierung.....	38
4.2.2	Eingabeparameter und Randbedingungen	39
4.3	Vergleich von Simulation und Brand.....	45
4.4	Parameterstudie.....	52
4.5	Zwischenfazit	58
5	Wärmefreisetzungsrate im Single Burning Item Test.....	60
5.1	Charakteristika des Brandszenarios	60
5.2	Aufbau des Simulationsmodells.....	66
5.2.1	Geometrie und Diskretisierung.....	66
5.2.2	Eingabeparameter und Randbedingungen	67
5.3	Vergleich von Simulation und Experiment.....	73
5.4	Parameterstudie.....	80
5.5	Zwischenfazit	84
6	Massenverlustrate im Cone Kalorimeter Test.....	86
6.1	Charakteristika des Brandszenarios	86
6.2	Aufbau des Simulationsmodells.....	92
6.2.1	Geometrie und Diskretisierung.....	92
6.2.2	Eingabeparameter und Randbedingungen	92
6.3	Vergleich von Simulation und Experiment.....	103
6.4	Parameterstudie.....	106
6.5	Zwischenfazit	111
7	Komplexes Brandverhalten im UL 94 Test	113
7.1	Charakteristika des Brandszenarios	113
7.2	Aufbau des Simulationsmodells.....	117

7.2.1 Geometrie und Diskretisierung.....	117
7.2.2 Eingabeparameter und Randbedingungen	118
7.3 Vergleich von Simulation und Experiment.....	123
7.4 Parameterstudie.....	130
7.5 Zwischenfazit	134
8 Zusammenfassung.....	135
Literaturverzeichnis.....	139
Abbildungsverzeichnis	149
Tabellenverzeichnis.....	156
Symbol- und Abkürzungsverzeichnis	157
Danksagung	161

1 Einleitung

1.1 Hintergrund

Die Bedeutung von Simulationsprogrammen zur Berechnung von Brandszenarien nimmt zuletzt dank immer leistungstärkerer Computer stetig zu. Anwendungsgebiete liegen vor allem im Brand- und Bauingenieurwesen. Hier werden unterschiedlichste Methoden und Modelle sowohl zur Berechnung thermischer Belastungen, Rauchentwicklung und -ausbreitung, als auch zur Auslegung komplexer Brandschutzsysteme und zur nachträglichen Brandanalyse herangezogen. Aktuelle Programme verbinden einzelne Brandmodelle mit numerischer Strömungsmechanik (engl.: computational fluid dynamics, CFD) und bieten so vielseitige Anwendungsmöglichkeiten.

Die Herausforderungen Brandszenarien modellhaft zu erfassen ergeben sich zum einen durch die Kombination der in einem Brand ablaufenden physikalischen und chemischen Prozesse. Zu diesen zählen in erster Linie Strömungs-, Wärmeübertragungs- und Verbrennungsvorgänge. Zum anderen spiegelt sich die Komplexität eines Brandszenarios in den relevanten räumlichen und zeitlichen Größenordnungen wider. Während sich beispielsweise turbulente Verbrennungsreaktionen, im (Sub-) Millimeter und Millisekunden Maßstab abspielen, können Geometrie und Branddauer im Bereich von mehreren Metern und Minuten liegen. Um diese Dimensionen mit heutigen Computersystemen numerisch berechnen zu können, müssen Vereinfachungen und Approximationen eingeführt werden. Neben der Umsetzung und Anpassung vorhandener Modelle an gegenwärtige Rechenkapazitäten umfasst die technische Weiterentwicklung der Brandsimulation die Erarbeitung und Validierung neuer oder erweiterter Ansätze. Hierzu zählen beispielsweise Untermodelle zur Beschreibung der thermischen Zersetzung von Feststoffen.

Das Potential von numerischen Brandsimulationen ist allgemein anerkannt und hat bereits Einzug in die baurechtlichen Entwicklungen erhalten. Auf nationaler Ebene sei hier auf [1-4] und Arbeiten zum Normentwurf DIN 18230-4 [5] verwiesen, die sich explizit mit CFD-Modellen als Ingenieurmethode für die Erstellung von Brandschutzkonzepten und -nachweisen befassen. Auch im Rahmen der europäischen Harmonisierung und der Erarbeitung gemeinsamer Bemessungsnormen, den EUROCODES [6], sind CFD-Simulationen für die brandschutztechnische Nachweisführung ausdrücklich zugelassen. Während die grundsätzlichen Möglichkeiten von CFD-Simulationen im Brandschutz unumstritten und baurechtlich verankert sind, steht die Ausgestaltung von Anforderungsprofilen zwecks Vergleichbarkeit und Qualitätssicherung noch in den Anfängen.

In der Brandschutz-Praxis unterstützen numerische Brandsimulationen u.a. den Nachweis der Einhaltung brandschutztechnischer Anforderungen. Insbesondere werden sie bei der Berechnung lokaler und globaler Temperaturen sowie der Rauchausbreitung in Folge eines Bemessungsbrands, der einen potentiellen Brandverlauf vorgibt, eingesetzt. Der Bemessungsbrand wird in der Regel durch eine vorgegebene Wärmefreisetzungsrate definiert. Dabei basieren Abschätzungen der Brandbelastung meist auf Kennwerten für verschiedene Brandobjekte (Papierkorb, Computer, Matratze, etc.) bzw. auf Erfahrungswerten für die Wärme- und Rauchentwicklung in unterschiedlichen Nutzräumen (Wohnung, Büro, Theater, etc.). Die zeitliche Komponente wird in der Praxis, wie in normativen Verfahren, meist anhand einer typisierten Brandentwicklung zugeordnet. Eine gängige, wenn

1 Einleitung

auch verallgemeinernde, Unterteilung erfolgt dabei in die 4 Klassen langsam, mittel, schnell und sehr schnell, die einen quadratischen Anstieg der Wärmefreisetzung mit der Zeit prognostizieren und sich nur in einem Vorfaktor unterscheiden. [1] Derartige Vorgaben erschweren eine zielorientierte, individuelle Gestaltung von Brandschutzkonzepten.

Mit zunehmendem Detaillierungsgrad der numerischen Methoden ist es möglich, einen potentiellen Brandverlauf (räumlich wie zeitlich) in Abhängigkeit der Randbedingungen zu berechnen. Das bedeutet beispielsweise, dass ausgehend von einer Zündquelle Temperaturfelder und Rauchentwicklung in Abhängigkeit der baulichen Begebenheiten und Brandlasten selbst errechnet werden können. Dieser Entwicklungsschritt ist im Sinne individueller, schutzzielorientierter Brandschutznachweise wünschenswert. Ergänzend zu rein normativen Richtlinien und Vorgaben von Bemessungsbränden können mit CFD-Modellen, die hinsichtlich Geometrie und Randbedingungen hochflexibel sind, Brandschutzkonzepte für den Einzel- und Sonderfall angepasst und optimiert werden. Darüber hinaus ergeben sich durch die Möglichkeit, die Wechselwirkungen von Brandverlauf und Randbedingungen zu untersuchen, neue Anwendungsbereiche bei der nachträglichen Analyse von Bränden.

Der Brandverlauf bei Gebäudebränden ist, neben den Ventilationsbedingungen, in erster Linie abhängig von der Art und Verteilung der Brandlast. Brandszenarien im zivilen Bereich (Zimmer-, Wohnungs-, Hausbrände etc.) zeichnen sich u.a. dadurch aus, dass der Großteil der Brandlast aus Feststoffen besteht und hier im „Kunststoffzeitalter“ insbesondere aus polymeren Werkstoffen. Einer der wesentlichen Bestandteile einer Brandsimulation, die auf eine Berechnung und Vorhersage des Brandverlaufs abzielt, ist ein entsprechendes Untermodell zur Beschreibung des Feststoffabbrands. Unter Feststoffabbrand ist hier die thermische Zersetzung von festförmigen Brandlasten zu gasförmigen Brennstoffen, die anschließend in der Gasphase exotherm mit dem Luftsauerstoff reagieren, zu verstehen. Für die Berechnung und Vorhersage des potentiellen Verlaufs eines Brands sind umfassende Kenntnisse über das Brandverhalten der involvierten Brandlasten notwendig.

In der Polymerwissenschaft kommt der Untersuchung des Brandverhaltens eine besondere Bedeutung zu. In vielen Bereichen (Bauwesen, Transportwesen, Elektrotechnik, etc.) stellt das Brandrisiko eine wesentliche Beeinträchtigung der Verwendung polymerer Materialien dar. Die Komplexität des Brandverhaltens von Kunststoffen verlangt nach individuellen Flammenschutzstrategien, die herkömmlicherweise durch die Verwendung unterschiedlicher Additive verfolgt werden. Grundlegend für die Entwicklung neuer flammgeschützter Materialien ist die Charakterisierung des Brandverhaltens. Neben anwendungsbezogenen, normativ vorgeschriebenen Experimenten zur Beurteilung des Brandrisikos sind eine Vielzahl von Methoden zur detaillierten Untersuchung einzelner Aspekte des Brandverhaltens im Einsatz. Die Aufstellung von numerischen Modellen ist von geringerer Bedeutung. Sie werden vereinzelt genutzt, um beispielsweise die Erkenntnisse und Schlussfolgerungen zu einzelnen Mechanismen überprüfen und vergleichen zu können. Beispiele hierfür sind die mathematische Beschreibung der Reaktionskinetik oder Ansätze zur computerunterstützten molekularen Modellierung.

Die thermische Zersetzung von Polymeren, auch Pyrolyse genannt, nimmt eine zentrale Rolle hinsichtlich des Flammenschutzes von Polymeren ein. Die Untersuchung der Pyrolyse umfasst sowohl die physikalisch-thermischen Kennwerte (Zersetzungstemperatur, Zersetzungsrate, etc.) als auch die chemischen Prozesse und Produkte (Zersetzungsreak-

tionen, Rückstand, Pyrolysegase, etc.). Die Ergebnisse werden u.a. zur Beschreibung der Struktur-Eigenschaftsbeziehungen genutzt, die wiederum als Grundlage für die Entwicklung flammgeschützter Werkstoffe dient. Modelle zur Beschreibung der Pyrolyse einzelner Werkstoffe, insbesondere des zeitlichen Massenverlustes, werden seit einigen Jahrzehnten aufgestellt [7]. Ihre Bedeutung im Rahmen des Flammschutzes und der Materialentwicklung ist bisher als gering anzusehen. Kommerzielle Berechnungsprogramme sind nicht erhältlich.

Als Ausgangssituation für die vorliegende Arbeit bleibt festzuhalten, dass Brandsimulationen im Brandingenieurwesen steigende Verwendung finden und ein Bedarf besteht, den Anwendungsbereich auf die Untersuchung von Brandverläufen auszuweiten. Kritisch für die Berechnung des Brandverlaufs ist u.a. die Beschreibung des Feststoffabbrands. In der Polymerwissenschaft dagegen sind detaillierte Kenntnisse und Methoden zur Untersuchung des Feststoffabbrands von polymeren Materialien vorhanden. Hier wiederum ist hinsichtlich der Entwicklung flammgeschützter Materialien die modellhafte, numerische Beschreibung des Brandverhaltens bisher nur von geringer Bedeutung.

1.2 Zielstellung und Aufbau der Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist es, mittels komplementärer Nutzung von Brandsimulation und Polymerwissenschaft neue Anwendungsmöglichkeiten numerischer Simulationsmethoden aufzuzeigen und zu erschließen. Dabei lassen sich zwei inhaltliche Ausrichtungen unterscheiden: Im Fokus stehen einerseits die Weiterentwicklung bestehender Simulationsanwendungen aus dem Brandingenieurwesen und andererseits die Nutzung aktueller Entwicklungen der Brandsimulation für polymerwissenschaftliche Aufgabenstellungen. Darüber hinaus werden Ansätze untersucht und erarbeitet, um das Phänomen des Fließens und Tropfens polymerer Schmelzen im Rahmen eines Brandszenarios numerisch zu erfassen und zu bewerten. Im Mittelpunkt der Arbeit stehen daher die folgenden Fragestellungen:

- Inwieweit können Erkenntnisse aus der Polymerwissenschaft zur Optimierung von Simulationen im Bereich Brandingenieurwesen dienen?
- Inwieweit lassen sich die bestehenden Simulationsmodelle für polymerwissenschaftliche Fragestellungen nutzen?

Die Untersuchungen finden im Rahmen von vier ausgewählten Brandszenarien statt. Die Szenarien unterscheiden sich in erster Linie hinsichtlich ihrer räumlichen Größenordnung. Ausgewählt wurden ein Realbrandszenario und drei Prüfverfahren: der Brand in einem Einfamilienhaus in der Dimension Kubikdekameter (dam^3), der Single Burning Item Test in der Dimension Kubikmeter (m^3), der Cone Kalorimeter Test in der Dimension Kubikdezimeter (dm^3) und der UL 94 Test in der Dimension Kubikzentimeter (cm^3). Damit umfassen die ausgewählten Beispiele sowohl die im Brandingenieurwesen (dm^3 , m^3 , dam^3 und größer) als auch in der Polymerwissenschaft (dm^3 , cm^3 und kleiner) betrachteten Größenskalen.

Anhand der Charakteristika der unterschiedlichen Brandszenarien werden jeweils geeignete Simulationsprogramme bestimmt, mit denen die Szenarien numerisch abgebildet werden. Zur Erstellung der Modelle gehört die detaillierte Charakterisierung der Brandszenarien sowie die Erarbeitung der Eingabeparameter und Randbedingungen. Hierbei gilt es,

1 Einleitung

die Methoden und Erkenntnisse aus der Polymerwissenschaft im Hinblick auf Detaillierungsgrad und Qualität der Berechnungen gezielt einzusetzen. Die Validierung der numerischen Berechnungen findet durch Abgleich mit den Resultaten der Brandszenarien statt. Die Auswertung der Simulationsergebnisse wird durch zusätzliche Parameterstudien unterstützt.

Die Arbeit gliedert sich in acht Kapitel. In Kapitel 2 "Grundlagen und Stand der Forschung" werden die Grundlagen vorgestellt und der Stand der Forschung besprochen. Dazu gehören die allgemeinen Begrifflichkeiten und Kenntnisse zum Thema Verbrennung und Brand sowie die Entwicklungen in den Bereichen Brandverhalten von Polymeren und Brandsimulation.

In Kapitel 3 "Methoden und Simulationsprogramme" werden zunächst die zur Bestimmung von Eingabeparametern und Randbedingungen angewandten Methoden definiert und anschließend die verwendeten Simulationsprogramme erläutert.

Kapitel 4 "Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus" beinhaltet die Untersuchungen zum Brandszenario Einfamilienhaus in der Dimension Kubikdekameter. Bei diesem Szenario handelt es sich um ein Beispiel der forensischen Brandanalyse. Die Informationen zu Randbedingungen und Eingabeparametern stammen teilweise aus Gutachten, die im Nachgang eines Realbrands erstellt worden waren. Zielgröße für den Vergleich von Simulation und Experiment ist der zeitliche und örtliche Brandverlauf ausgehend von einer Zündquelle.

In Kapitel 5 "Wärmefreisetzungsrates im Single Burning Item Test" werden die Arbeiten zum Brandszenario Single Burning Item (SBI) Test in der Dimension Kubikmeter vorgestellt. Der SBI Test ist ein europäisches Prüfverfahren zur Klassifizierung von Baustoffen. Zielgröße ist die zeitliche Wärmefreisetzung zweier in einer Raumecke aufgestellter Probekörper.

Die Untersuchungen zum Brandszenario Cone Kalorimeter in der Dimension Kubikdezimeter sind Gegenstand von Kapitel 6 "Massenverlustrate im Cone Kalorimeter Test". Das Cone Kalorimeter ist eines der wichtigsten polymerwissenschaftlichen Geräte zur Untersuchung des Brandverhaltens von Werkstoffen im Labormaßstab. Zielgröße ist die Massenverlustrate einer flächigen Probe.

Kapitel 7 "Komplexes Brandverhalten im UL 94 Test" umfasst die Ergebnisse zum Brandszenario UL 94 Test in der Dimension Kubikzentimeter. Das kleinste untersuchte Brandszenario ist ein Prüfverfahren zur Klassifizierung von Werkstoffen, die beispielsweise in elektronischen und elektrotechnischen Anwendungen verwendet werden. Zielgrößen für den Vergleich von Simulation und Experiment sind das komplexe Zusammenspiel von Pyrolyse, Verbrennung und Tropfverhalten sowie der Einfluss auf die UL 94 Klassifizierung.

Die Arbeit endet mit einer Zusammenfassung in Kapitel 8.

2 Grundlagen und Stand der Forschung

Im Folgenden werden die Grundlagen zum Thema der Arbeit erläutert. Neben den allgemeinen Begrifflichkeiten und Charakteristika zu Verbrennung, Brand und Brandschutz gehören dazu insbesondere der Stand der Forschung hinsichtlich Verbrennung und Brandverhalten von Polymeren und der Brandsimulation.

2.1 Verbrennung, Brand und Brandschutz

Die Verbrennung ist als eine exotherme Redoxreaktion eines Materials mit Luftsauerstoff definiert. Dabei werden Rauch und Brandgase freigesetzt und im Allgemeinen treten Flammen und/oder Glühen auf. [8] Die Reduktionsmittel oder brennbaren Materialien liegen im festförmigen, flüssigen und/oder gasförmigen Zustand vor. Die Verbrennung selbst ist im Wesentlichen homogen, d.h. sie findet nur in der Gasphase statt. Bei der Verbrennung von festen und flüssigen Materialien ist dem Verbrennungsprozess ein thermischer Zersetzungsprozess vorgeschaltet, der die Phasenübergänge der brennbaren Stoffe in den gasförmigen Zustand beinhaltet. Die Phasenübergänge können durch Pyrolyse, Vergasung oder Verdampfung stattfinden. Unter Pyrolyse ist hierbei strenggenommen die rein thermische Zersetzung ohne Sauerstoffzufuhr zu verstehen. Der Begriff Pyrolyse wird jedoch gerade im Bereich der Brandsimulation regelmäßig zur Beschreibung der thermischen Zersetzung unabhängig vom Einfluss des Sauerstoffs verwendet.

Der Brand bezeichnet eine unkontrollierte selbständige Verbrennung wird. [8] Als Voraussetzung für einen Brand (bzw. die Verbrennung) müssen die drei folgenden Komponenten zusammentreffen: Brennbares Material, Energie und Sauerstoff. Fehlt eine Komponente kann ein Brand nicht bestehen. [9] Die Gefahren, die von einem Brand ausgehen, sind zum einen die hohen Temperaturen und zum anderen die giftigen Brandgase. Der Verlauf eines Brands selbst wird anhand des Temperaturverlaufs charakterisiert. Abbildung 2.1 zeigt den für einen Brand (in einem Raum) typischen Temperaturverlauf über der Zeit.

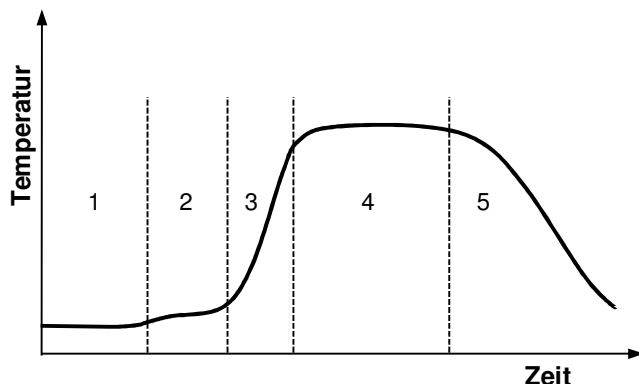


Abbildung 2.1: Zeitlicher Temperaturverlauf und Phaseneinteilung eines Brands in einem Raum: Phase 1 Entzündung, Phase 2 Brandentstehung, Phase 3 Flash-over, Phase 4 Vollbrand, Phase 5 Abklingender Brand. [10, 11]

Phase 1 Entzündung: Liegen brennbares Material, Sauerstoff und eine ausreichende Zündenergie vor, kann es zu einer Verbrennung und dem Beginn eines Brands kommen. Die Zeit bis zum Brandbeginn ist abhängig von Zündquelle und Art des Brennstoffs und variiert stark. Bei der Untersuchung eines Kinderzimmerbrands im Rahmen eines Großversuchs dauerte die Zündung eines textilen Werkstoffs mit einer kleinen Flamme nur wenige Sekunden. [12, 13]

Phase 2 Brandentstehung: In Folge der Primärzündung wird weiteres brennbares Material in unmittelbarer Umgebung der Zündquelle erhitzt und entzündet. Der Brand beginnt sich auszubreiten, die Temperaturen im Raum steigen nur langsam an. Im genannten Großversuch war die Dauer der Phase 2 etwa drei Minuten.

Phase 3 Flash-over (auch Flammenübersprung): Während des Flammenübersprungs steigt die Temperatur im Raum rasant an. Der Aufbereitungsprozess wird stark beschleunigt und der Brand breitet sich sehr schnell aus. Im Großversuch Kinderzimmerbrand begann der Flammenübersprung nach etwa drei Minuten und innerhalb einer Minute entwickelte sich ein Vollbrand.

Phase 4 Vollbrand: Solange alle Voraussetzungen für den Brand erfüllt sind, bleiben die Temperaturen auf einem hohen Niveau. Die Temperaturen unter der Raumdecke erreichen typischerweise mehr als 600°C. In weiten Teilen des Raums liegen die Temperaturen über den Zersetzungstemperaturen der Hauptbrandlasten und der Brand entfaltet vollends seine zerstörerische Wirkung.

Phase 5 Abklingender Brand: Der Brand klingt ab, wenn die Sauerstoffzufuhr unterbrochen wird oder alles brennbare Material verbraucht ist. Die Temperaturen kühlen in Abhängigkeit von den inneren und äußeren Bedingungen (Wärmespeichervermögen, Wärmeaustausch, etc.) auf Umgebungstemperatur ab. [11, 14, 15]

Der Brandschutz zielt auf die Verhinderung und Begrenzung von Bränden, auch Schadenfeuer genannt, ab, um Menschen, Sachwerte und Umwelt vor Brandschäden zu schützen. Gesellschaftshistorisch bedingt liegt der Schwerpunkt im Schutz von Gebäuden und Infrastruktureinrichtungen. Weitere wichtige Bereiche sind das Verkehrswesen, Elektronik und Elektrotechnik, Textilien und Möbel. Ziel brandschutztechnischer Anforderungen ist es, die Brandsicherheit zu erhöhen. Bezogen auf den typischen Verlauf eines Brands (siehe Abbildung 2.1) wird dies in erster Linie dadurch erreicht, dass man versucht, die Entzündung (Phase 1) zu verhindern bzw. die Brandentstehung und -ausbreitung (Phase 2) zu unterbrechen oder zu verzögern. Hat sich ein Brand voll entwickelt (Phase 4 + 5) wird die Eindämmung des Brands und der Folgeschäden, z.B. durch Gewährleistung des Raumabschlusses, Vermeidung von Bauteilversagen und Erhalt der strukturellen Tragfähigkeit, verfolgt. Zielgrößen des allgemeinen Brandschutzes sind u.a. die Entzündbarkeit/Entzündungszeit, die Brandausbreitungsgeschwindigkeit, die Wärmefreisetzungsrate, die Brandlast und die Brandwiderstandsdauer. Aufgrund der wachsenden Verwendung und der teils kritischen Brennbarkeit von Kunststoffen kommt in der Polymerwissenschaft der Untersuchung des Brandverhaltens eine besondere Bedeutung zu. Der Stand der Technik zur Verbrennung und Brandverhalten von Polymeren wird im nächsten Abschnitt erläutert.

2.2 Verbrennung und Brandverhalten von Polymeren

Die Verbrennung von Polymeren folgt regelmäßig folgendem Ablauf: Ausgehend von einer externen Wärmequelle wird Wärme auf das Polymer übertragen (Strahlung/ Konvektion/ Konduktion) und es erhitzt sich. Die thermische Zersetzung findet je nach Polymer bei Temperaturen von etwa 600 K bis 800 K statt. Freigesetzte, brennbare Gase können unter gegebenen Voraussetzungen (hohe Energiedichte z.B. durch Zündfunke) mit Sauerstoff reagieren. Die exotherme Verbrennungsreaktion produziert u.a. Wärme, die wiederum das Polymer weiter erhitzt. Die im Folgenden dargestellten Grundlagen zur Verbrennung orientieren sich im Wesentlichen an [11, 15, 17-21].

Einen Überblick über die Prozesse bei der Verbrennung von Polymeren zeigt Abbildung 2.2. Auf der rechten Seite sind chemische, auf der linken Seite hauptsächlich physikalische Charakteristika dargestellt und den möglichen Phasenzuständen eines Polymers (Gas-, Meso-, Flüssig- und Festphase) zugeordnet. Die thermische Zersetzung unter der Flamme findet in der Regel anaerob statt und wird Pyrolyse genannt. Der Aggregatzustand des Polymers befindet sich während der Pyrolyse in einem Übergangszustand zwischen Gasphase und Flüssig- oder Festphase, der Übergangs- oder Mesophase. Die Makromoleküle werden u.a. durch Randgruppenabspaltung, Kettenspaltung und Depolymerisation zersetzt. Daneben treten regelmäßig unterschiedlichste Vernetzungsreaktionen auf. Neben den gasförmigen Pyrolyseprodukten kann Rückstand gebildet werden, der sich wiederum bei höheren Temperaturen weiter zersetzt oder stabil bleibt. Die Verbrennungsreaktionen der brennbaren Gase mit dem Luftsauerstoff laufen zwischen unterer und oberer Zündgrenze ab und werden begrenzt von der brennstoffreichen und brennstoffarmen Zone. Die aus der Reaktionszone emittierte Strahlung ist teilweise sichtbar, blau bis orange leuchtend und wird als Flamme bezeichnet. Die Haupt-Verbrennungsprodukte sind Kohlendioxid (CO_2), Wasser (H_2O), Kohlenmonoxid (CO) und Rauch.

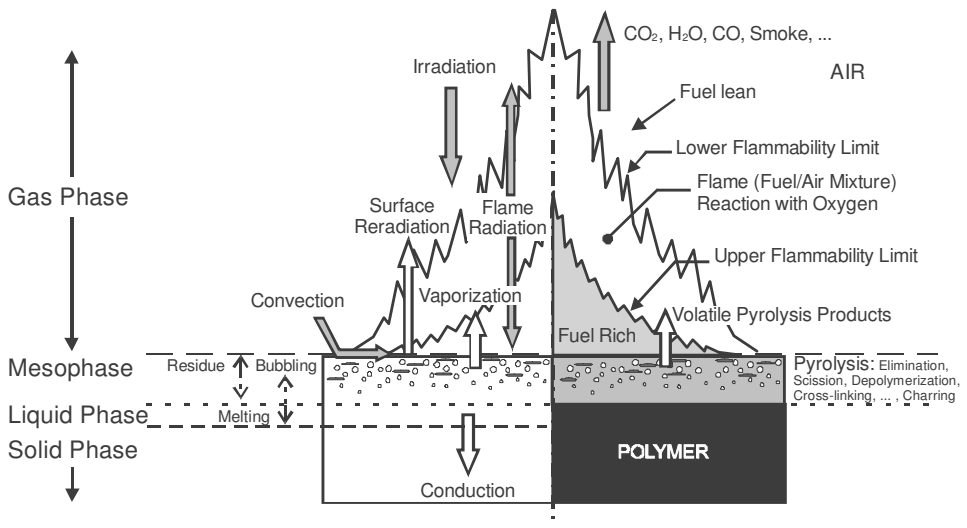


Abbildung 2.2: Schematische Übersicht der Hauptprozesse bei der Verbrennung von Polymeren [19, 20].

Die in Abbildung 2.2 auf der linken Seite dargestellten Charakteristika umfassen in erster Linie relevante Prozesse der Wärmeübertragung. In der Darstellung wird durch die externe Wärmequelle und die Wärmestrahlung und Konvektion infolge der Flamme Wärmeenergie auf das Polymer übertragen. Durch Rückstrahlung an der Polymeroberfläche wird Wärme vom Polymer an die Umgebung abgeführt. Weitere Wärmeverluste in der Pyrolysezone oder Mesophase entstehen durch Stofftransport im Rahmen der Zersetzung und durch Konduktion von Wärme in Richtung Festphase des Polymers. Einfluss auf die Wärmeübertragungsprozesse nehmen ferner Effekte wie Blasenbildung, Rückstandsbildung oder das Schmelzen semikristalliner Polymere.

Im Folgenden werden ausgewählte analytische Betrachtungen zur Verbrennung von polymeren Feststoffen wiedergegeben: Die Wärmefreisetzungsrate HRR eines brennenden Polymers bestimmt sich aus der Massenverlustrate \dot{m}_g , der Verbrennungswärme bei vollständiger Verbrennung der Pyrolysegase h_c^0 und der Verbrennungseffizienz in der Flamme χ (siehe Gleichung (2-1)).

$$HRR = \chi \cdot h_c^0 \cdot \dot{m}_g \quad (2-1)$$

Die Verbrennungseffizienz χ nimmt Werte zwischen 0 und 1 ein. Eine Verbrennungseffizienz von $\chi = 1$ bedeutet, dass eine totale Oxidation der Pyrolysegase stattgefunden hat. Für herkömmliche Polymere in gut ventilierten Brandszenarien liegt χ zwischen 0,5 (PVC) und 0,99 (PMMA). Die Verbrennungswärme h_c^0 von Polymeren erreicht Werte zwischen 8 kJ/g (PTFE) und 43 kJ/g (PP). [19] Unter gleichbleibenden Bedingungen sind Verbrennungswärme und Verbrennungseffizienz konstant und die Wärmefreisetzungsrate hängt proportional von der Massenverlustrate ab.

Die Enthalpie L_g , die benötigt wird um einen Massenanteil eines Polymers zu vergasen, setzt sich aus dem Entropieanteil an der Erwärmung h_s , der Schmelzenthalpie h_f , der Bindungsdissoziationsenthalpie h_d und der Verdampfungsenthalpie h_v der Pyrolysegase zusammen (siehe Gleichung (2-2)). Es gilt im Folgenden, dass h_d und h_v zur isothermen Zersetzung eines Werkstoffs bei der Zersetzungstemperatur aufgewendet werden müssen. Die Summe aus Bindungsdissoziationsenthalpie h_d und Verdampfungsenthalpie h_v wird als Zersetzungsenthalpie h_{dec} bezeichnet. Unter der Prämisse der Massenerhaltung wird die Energie zur Vergasung der Pyrolysegase, bezogen auf die entsprechende Masse des Polymers, als Vergasungsenthalpie h_g definiert (siehe Gleichung (2-2)). Der Anteil des Rückstands an der Ausgangsmasse des Polymers wird mit μ bezeichnet.

$$L_g = \Delta h_s + \Delta h_f + \Delta h_d + \Delta h_v = h_g + \mu \cdot L_g \quad (2-2)$$

Gleichung (2-3) steht für die Energiebilanz der Pyrolysezone eines brennenden Polymers. Der zur Erwärmung und thermischen Zersetzung effektiv zur Verfügung stehende Wärmeeintrag \dot{q}_{net} setzt sich in Anlehnung an Abbildung 2.2 aus dem Wärmeeintrag externer Wärmequellen \dot{q}_{ext} , der Strahlungsenergie der Flamme \dot{q}_{flame} , der Strahlungsreflektion

an der Oberfläche \dot{q}_{rerad} und dem Wärmestrom infolge Konvektion \dot{q}_{conv} zusammen. Der konvektive Wärmestrom nimmt je nach Temperatur von Oberfläche und Umgebung positive oder negative Werte an. Dem effektiven Wärmeeintrag stehen der Wärmestrom zur Vergasung und/oder Rückstandbildung des Polymers \dot{q}_g und die abgeleitete Wärme \dot{q}_{cond} gegenüber.

$$\dot{q}_{net} = \dot{q}_{ext} + \dot{q}_{flame} + \dot{q}_{conv} - \dot{q}_{rerad} = \dot{q}_g + \dot{q}_{cond} \quad (2-3)$$

Unter folgenden Annahmen kann die Verbrennung eines Polymers als stationäres Problem (d.h. das Temperaturprofil ist zeitunabhängig) behandelt werden:

- stetiges eindimensionales Verbrennen; $\dot{m}_g = const$; $\dot{q}_{net} = const$
- eindimensionale Wärmeleitung
- temperaturunabhängige thermische Diffusivität α
- unendliche Dicke des Polymers
- Vernachlässigung interner Wärmequellen oder -senken (z.B. Absorption)
- keine Akkumulation von Rückstand an der Oberfläche (keine Beeinflussung von \dot{q}_{net} oder \dot{m}_g)
- Betrachtung aus Sicht eines an der Oberfläche der Pyrolysezone fixierten Koordinatensystems

Im stationären Zustand sind Dicke und Geschwindigkeit der Pyrolysezone sowie der Temperaturgradient des Polymers konstant. Die Energiebilanz der Pyrolysezone vereinfacht sich, da der Term der abgeleiteten Wärme \dot{q}_{cond} entfällt. Der Vergasungswärmestrom \dot{q}_g entspricht dem Produkt aus Massenverlustrate \dot{m}_g und Vergasungsenthalpie L_g . Aus Gleichungen (2-2) und (2-3) ergibt sich:

$$\dot{q}_{net} = \dot{q}_g = \dot{m}_g \cdot L_g = \dot{m}_g \cdot \frac{h_g}{1 - \mu} \quad (2-4)$$

Die Vergasungsenergie h_g berechnet sich aus Gleichung (2-5) mit der spezifischen Wärmekapazität c , den Temperaturen der Oberfläche (Pyrolysetemperatur) T_s , der Ausgangstemperatur T_0 (z.B. Raumtemperatur) und der Zersetzungsenthalpie h_{dec} .

$$h_g = c \cdot (T_s - T_0) + \Delta h_{dec} \quad (2-5)$$

Die Wärmefreisetzungsrate eines stationär brennenden Polymers lässt sich aus Gleichungen (2-1) und (2-4) wie folgt darstellen:

$$HRR = \chi \cdot h_c^0 \cdot \frac{\dot{q}_{net}}{L_g} = \chi \cdot h_c^0 \cdot \frac{1 - \mu}{h_g} \cdot \dot{q}_{net} \quad (2-6)$$

Für Polymere nimmt h_g Werte zwischen 1 kJ/g und 3 kJ/g an. Wie oben erwähnt verändert sich auch χ nur in einem begrenzten Bereich. Die Verbrennung eines Polymers wird demnach neben dem effektiven Wärmeeintrag \dot{q}_{net} hauptsächlich durch die Verbrennungswärme der Pyrolysegase h_c^0 und den Anteil des Rückstands μ beeinflusst. Der Anteil des Rückstands liegt typischerweise zwischen 0 und 0,8. Der Term h_c^0/L_g wird auch Wärmefreisetzungsparameter HRP genannt und variiert für Polymere zwischen 1 und 25.

Das Brandverhalten von Polymeren hängt von vielen Einflussgrößen ab, beispielsweise Einwirkungsdauer und Intensität der Zündquelle, Entzündbarkeit und Wärmefreisetzung des Kunststoffes, Form und Größe der Brandlast sowie Randbedingungen, wie Temperatur, Sauerstoffgehalt und Ventilation. Die Bestimmung des Brandverhaltens findet dementsprechend zunächst nur für das jeweils betrachtete Szenario statt. Die Übertragung von Ergebnissen auf andere Prüfzenarien oder reale Szenarien ist mit erheblichen Schwierigkeiten u.a. durch veränderte Randbedingungen verbunden.

Materialwissenschaftliche Erkenntnisse hinsichtlich Verbrennung und Brandverhalten von Polymeren dienen in erster Linie der Auswahl und Entwicklung von Materialien, die die jeweiligen brandschutztechnischen Ziele und Vorgaben erfüllen. Flammenschutzmitteln kommt dabei eine wesentliche Funktion zu. Sie werden als Additive eingesetzt um maßgeschneiderte flammgeschützte polymere Werkstoffe herzustellen.

Die Wirkungsweise von Flammenschutzmitteln umfasst physikalische und chemische Mechanismen. Zu den chemischen Mechanismen zählt zum einen die Flammenvergiftung in der Gasphase. Das Flammenschutzmittel unterbricht den Radikalmechanismus durch Abfangen von Radikalen (z.B. H- und OH-Radikale) und hemmt dadurch die Verbrennungsreaktion. Als Folge sinkt die effektive Verbrennungsenthalpie h_c^0 . Insbesondere Halogen- und Phosphorverbindungen nutzen den Mechanismus der Flammenvergiftung. Zum anderen gehört zur chemischen Wirkungsweise die Reaktion zu thermisch stabileren Rückständen, die ebenfalls bei phosphorhaltigen Flammenschutzmitteln beobachtet werden kann. Einerseits wird so der Anteil des verfügbaren Brennstoffs reduziert. Andererseits kann der vermehrte Rückstand als physikalische Barriere Wärmeübertragung und Brennstoffdiffusion verringern.

Die physikalischen Mechanismen umfassen die Brennstoffreduzierung in der Festphase, die durch den Einsatz inerter Füllstoffe erreicht wird. Die Bildung einer Schutzschicht führt zur Reduzierung des effektiven Wärmeeintrags. Beispiele dafür sind intumescierende Materialien oder auch Füllstoffe, die die Oberflächen- und Rückstandsstrukturen ändern (niedrigschmelzende Gläser, Nanopartikel, etc.). Daneben können Flammenschutzmittel den Brennstoff in der Gasphase verdünnen, indem nicht brennbare Gase abgespalten werden. Derartige, meist endotherme Abspaltungen von beispielsweise H_2O , CO_2 oder NH_3 führen zusätzlich zur Flammenkühlung und Rückstandbildung und werden bei Melamincyanurat, Aluminiumtrihydroxid oder Magnesiumhydroxid beobachtet.

2.3 Brandsimulation

Die Brandsimulation gehört zu den Ingenieurmethoden des Brandschutzes und basiert auf mathematischen Modellen zur Beschreibung von Brandphänomenen. Brandsimulationen

werden hauptsächlich eingesetzt, um Wärme- und/oder Rauchausbreitung eines Brandszenarios zu berechnen und um die Gefährdung von Personen und das Verhalten von Bauteilen und -stoffen zu beurteilen. Hinsichtlich ihrer Struktur und Komplexität lassen sich Brandsimulationsmodelle in analytische Modelle, Zonenmodelle und Feldmodelle unterteilen.

Grundlage der analytischen Modelle sind experimentelle Daten und daraus abgeleitete empirische Korrelationen. Der Gültigkeitsbereich ist auf spezielle Randbedingungen und Fragestellungen, beispielsweise zu Flammenhöhe, Wärmestrahlung oder Rauchgasstrom, beschränkt. Der stationäre Zusammenhang von Zielgröße und ausgewählten Einflussparametern wird durch vereinfachte Gleichungen beschrieben. Beispiele analytischer Modelle sind die Formeln zur Beschreibung einer Plume (Rauchgassäule über der Brandfläche) von Zukoski [22], Heskestad [23] oder McCaffrey [24].

Zonenmodelle ermöglichen die zeitliche Auflösung von Temperatur, Rauchschichthöhe, Sichtweite etc. in Folge eines Brands. Der Brandraum wird in Zonen, auch Kontrollvolumen genannt, eingeteilt und die Differentialgleichungen der Masse- und Energieerhaltung werden aufgestellt und numerisch gelöst. Mitunter wird ein Erhaltungssatz der Spezies zur Bilanzierung von Verbrennungsprodukten ergänzt. Auch der Austausch von Masse und Energie mit der Umgebung kann berücksichtigt werden. Innerhalb einer Zone werden homogene Bedingungen (Temperatur, Gaszusammensetzung etc.) angenommen. Das Einzonenmodell, auch Vollbrandmodell genannt, setzt folglich voraus, dass die Temperatur im gesamten Brandraum (abgebildet durch eine Zone) einheitlich ist. Diese Annahme trifft näherungsweise nur auf einen vollentwickelten Brand zu. Zweizonenmodelle berücksichtigen die Bildung einer Rauchgasschicht und weisen einen erweiterten Gültigkeitsbereich auf. Modelle mit mehr als zwei Kontrollvolumen werden Mehrzonenmodelle genannt, mit deren Hilfe auch Aspekte des Brandverlaufs über mehrere Räume dargestellt werden können (Mehrraum-Mehrzonenmodelle). Beispiele computerbasierter Zonenmodelle sind MRFC und CFAST [25, 26].

In der Brandsimulation mit Feldmodellen, auch CFD-Modelle genannt, werden die Methoden der numerischen Strömungsmechanik (engl.: computational fluid dynamics, CFD) mit Untermodellen u.a. für Wärmeübertragung, Verbrennungsreaktionen oder Feststoffpyrolyse verbunden. Dadurch ist es möglich neben den Basisgrößen der Strömungsmechanik (Druck, Dichte, Strömungsgeschwindigkeit und Temperatur) weitere brandrelevante Parameter (bspw. Wärmestrahlung, chemische Zusammensetzung der Gase, Pyrolyserate, etc.) zeit- und ortsaufgelöst zu berechnen.

In den folgenden Unterkapiteln werden zunächst die Grundlagen und Charakteristika von Feldmodellen zur Brandsimulation vorgestellt, bevor, gemäß den Schwerpunkten der vorliegenden Arbeit, der Stand der Forschung hinsichtlich Pyrolysemodelle erläutert wird.

2.3.1 Feldmodelle

In diesem Abschnitt wird ein Überblick über die einzelnen Bestandteile von Feldmodellen (CFD-Modelle) zur Brandsimulation wiedergegeben. Die Erläuterungen beginnen mit den Grundgleichungen zur Aufstellung des Gleichungssystems sowie der Diskretisierungsverfahren. Im Anschluss werden die Charakteristika der Untermodelle für Turbulenz, Verbrennung und Wärmestrahlung diskutiert sowie mögliche Randbedingungen vorgestellt.

2.3.1.1 Grundgleichungen

Die Grundlage der numerischen Strömungsmechanik bildet ein System nichtlinearer partieller Differentialgleichungen zweiter Ordnung, auch bekannt als Navier-Stokes-Gleichungen. Das System besteht aus den Erhaltungssätzen für Masse, Impuls und Energie. Die Herleitung der Grundgleichungen ist ausführlich beschrieben in [27, 28]. Im Folgenden wird eine kompakte Differentialform in koordinatenfreier Vektorschreibweise für die Strömung Newton'scher Fluide durch ein infinitesimales Kontrollvolumen, entsprechend des Ansatzes nach Euler, wiedergegeben, um die wesentlichen Bestandteile zu erläutern.

Die zeitliche Änderung der Masse im Kontrollvolumen ergibt sich aus den ein- und ausströmenden Massenströmen. Mit der Dichte ρ , der Zeit t , dem Nabla-Operator ∇ (Divergenz des jeweiligen Vektors) und dem Geschwindigkeitsvektor v erhält man die Masseerhaltungsgleichung, auch Kontinuitätsgleichung genannt, für kompressible Strömungen. Der erste Term beschreibt die Dichteänderung, der zweite Term den Massenstrom durch die Oberflächen des Kontrollvolumens.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho v) = 0 \quad (2-7)$$

Die zeitliche Änderung des Impulses im Kontrollvolumen setzt sich zusammen aus den ein- und austretenden Impulsströmen, den auf das Kontrollvolumen wirkenden Normal- und Scherkräften und der auf die Masse des Kontrollvolumens wirkenden Kraft. Für die Impulserhaltungsgleichung mit dem Gewichtskraftvektor g , dem Druck p und dem Spannungstensor τ_{ij} gilt:

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \nabla \cdot \rho v v + \nabla p = \rho g + \nabla \cdot \tau_{ij} \quad (2-8)$$

Die Terme beschreiben in dieser Reihenfolge die zeitliche Impulsänderung und die Impulsänderung infolge Konvektion, Druckänderung, Gravitationskraft und der von außen wirkenden Oberflächenkräfte (Normal- und Scherkräfte).

Die zeitliche Änderung der Gesamtenergie im Kontrollvolumen umfasst die ein- und ausfließenden Energieströme (Strömung, Wärmeleitung und -strahlung), die am Kontrollvolumen geleistete Arbeit pro Zeit (infolge Druck-, Normalspannungs- und Schubspannungskräften sowie der Volumenkräfte und der Energiezufuhr von außen) und gegebenenfalls zusätzliche Wärmequellen (z.B. durch chemische Reaktionen). Mit der Enthalpie pro Volumeneinheit h , der auf das Kontrollvolumen bezogenen Wärmequelle \dot{q}''' und dem auf die Oberfläche des Kontrollvolumens bezogenen Wärmestrom \dot{q}'' lautet die Energieerhaltungsgleichung:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot \rho h v = \left(\frac{\partial p}{\partial t} + v \cdot \nabla p \right) + \dot{q}''' - \nabla \cdot \dot{q}'' + \nabla \cdot (\tau_{ij} \cdot v) \quad (2-9)$$

Die Terme auf der linken Seite stehen für die zeitliche Änderung der Gesamtenergie des Kontrollvolumens und die Energieänderung infolge Konvektion durch die Oberflächen des Kontrollvolumens. Die Terme auf der rechten Seite bilden die Energieänderungen infolge der lokalen und konvektiven Druckänderung, der volumenbezogenen Wärmequellen, der oberflächenbezogenen Wärmeströme durch Konduktion und Strahlung und der Dissipation mathematisch ab. Dissipation bezeichnet die Umwandlung kinetischer Energie in thermische Energie als Folge der inneren Reibung des Fluids.

Die Gleichungen (2-10) und (2-11) geben die Zusammenhänge für die Enthalpie h und den konduktiven Anteil des Wärmestroms \dot{q}_c'' wieder, mit der inneren Energie e , dem Wärmeleitfähigkeitskoeffizient k und der Temperatur T .

$$h = e + \frac{P}{\rho} \quad (2-10)$$

$$\dot{q}_c'' = -k \nabla T \quad (2-11)$$

Für das kartesische Koordinatensystem besteht das Differentialgleichungssystem der numerischen Strömungsmechanik aus fünf Erhaltungsgleichungen (für Masse, Energie und Impuls in x-, y- und z-Richtung) mit insgesamt 17 Unbekannten, nämlich Dichte, Geschwindigkeit (in x-, y- und z-Richtung), Druck, innere Energie, Enthalpie, Temperatur und dem Spannungstensor ($3 \times 3 = 9$ Unbekannte). Die zur Lösung notwendigen zusätzlichen Gleichungen sind die thermische Zustandsgleichung für das Fluid, die kalorischen Zustandsgleichungen für konstanten Druck bzw. Volumen sowie die neun Stokes'schen Beziehungen für die Normal- und Schubspannungen. Je nach Art des Rands des zu berechnenden Strömungsfeldes kommen weitere physikalische und/oder numerische Randbedingungen hinzu. [29]

Für die Brandsimulation mit CFD-Modellen werden regelmäßig folgende Vereinfachungen bezogen auf die vollständigen Navier-Stokes-Gleichungen verwendet:

- Perfektes Gas: konstante Wärmekapazität
- Newton'sches Fluid: linearer Zusammenhang zwischen Normal- und Schubspannungen
- Inkompressible Strömung im Unterschallbereich: konstante Dichte
- Stoffdiffusion folgt Fick'schen Gesetzen: Stoffübergang \sim Konzentrationsgradient
- Wärmeleitung folgt Fourier'schen Gesetzen: Wärmeübergang \sim Temperaturgradient

2.3.1.2 Diskretisierung

Die numerische, näherungsweise Lösung der partiellen Differentialgleichungen erfolgt durch Herleitung algebraischer Gleichungen an diskreten Gitterpunkten. Je dichter die Gitterpunkte liegen umso genauer ist die Lösung der Diskretisierungsgleichung, bis hin zur exakten Lösung der Differentialgleichung. Zwischen den Gitterpunkten wird der Lösungsverlauf durch Polynome abgebildet, deren freie Koeffizienten so bestimmt werden, dass die Differentialgleichung an den Gitterpunkten erfüllt ist (Kollokation). Hinsichtlich der Art der Kollokation wird u.a. zwischen der Finite-Differenzen-Methode (Punktkollokation) und der Finite-Volumen-Methode (Gebietskollokation) unterschieden.

2.3.1.3 Turbulenz

Die Abbildung aller physikalischen Effekte bedarf einer transienten Betrachtung anhand sehr kleiner Kontrollvolumen und Zeitschritte. Die Notwendigkeit einer hohen Auflösung des Strömungsfeldes liegt vor allem in der räumlich und zeitlich ungeordneten Strömung begründet, auch turbulente Strömung genannt. Mathematisch zeigt sich die Turbulenz in den nichtlinearen Wechselwirkungen zwischen Zustandsgrößen und Impulsvektor. In einer zunächst laminaren Strömung entstehen Turbulenzen und Wirbel mit wachsendem Einfluss der Nichtlinearitäten. Zur Beschreibung laminarer und turbulenter Strömungen wird die dimensionslose Reynoldszahl Re verwendet, die das Verhältnis zwischen Trägheits- und Reibungskräften darstellt. Nimmt der glättende Einfluss der Reibungskräfte gegenüber den Trägheitskräften ab, bilden sich zunächst großskalige Wirbel, die in immer kleinere Wirbel übergehen und in denen die kinetische Energie zunehmend in thermische Energie umgewandelt wird. Mit der Theorie von Kolmogorov kann abgeschätzt werden, welche Größenordnung die kleinsten in der Strömung auftretenden Wirbel haben (siehe Abbildung 2.3). Die direkte Lösung der Navier-Stokes-Gleichungen unter Berücksichtigung aller relevanten Längenskalen und Frequenzen wird als direkte numerische Simulation (DNS) bezeichnet. Aufgrund des hohen Rechenaufwands findet die DNS in der Brandsimulation nahezu keine Anwendung.

Akzeptable Rechenzeiten werden u.a. durch die Approximation der turbulenten Strömung mittels der sogenannten Large-Eddy-Simulation (LES) oder den Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS) erlangt. Der geringere Rechenaufwand ergibt sich in erster Linie dadurch, dass kleinskalige Turbulenzen nicht durch das Rechenetz aufgelöst, sondern über Turbulenzmodelle modelliert werden. Eine Übersicht über die genannten Ansätze, deren Gitterweite und Lösungsweg in Relation zur Wirbelgröße zeigt Abbildung 2.3. [29, 30]

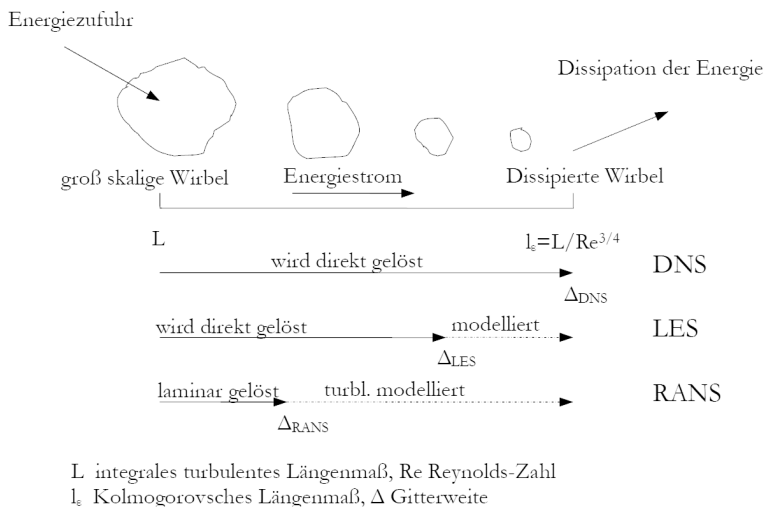


Abbildung 2.3: Charakteristika der Berechnungsmethoden turbulenter Strömungen im Überblick aus [30].

In der Large-Eddy-Simulation LES, auch Grobstruktursimulation genannt, wird das transiente, dreidimensionale Geschwindigkeitsfeld mittels geeigneter Tiefpassfilter in großskalige und kleinskalige Phänomene getrennt. Die turbulente Strömung wird bis zur Grenzfrequenz direkt berechnet. Der Einfluss der kleinskaligen Phänomene wird modelliert und im Spannungstensor der Impulserhaltungsgleichung der großskaligen Lösung berücksichtigt. Die LES Turbulenzmodelle basieren auf dem Ansatz von Smagorinsky. [31, 32]

Die RANS Gleichungen nutzen zeitlich gemittelte Strömungskenngrößen zur Beschreibung der Strömung. Als Unbekannte sind die Reynoldsspannungen enthalten, die den Impulsverlust infolge der Turbulenz beschreiben und die durch ein Turbulenzmodell approximiert werden. Die zu Grunde liegenden Modelle lassen sich hinsichtlich ihrer Struktur und Komplexität in Wirbelviskositätsmodelle (unterteilt in Null-, Ein- und Zweigleichungsmodelle), die auf der Boussinesq-Approximation basieren, und Reynoldsspannungsmodelle, die jede Komponente des Reynolds'schen Spannungstensors berechnen, unterteilen. [29, 31]

2.3.1.4 Verbrennung

Die Wärmeentwicklung infolge Verbrennung kann als Quellterm in der Energieerhaltungsgleichung, wie in Kapitel 2.3.1.1 erläutert, berücksichtigt werden. Die einfachste Möglichkeit einen Brand zu simulieren ist es demnach, die Wärmefreisetzung räumlich und zeitlich vorzugeben und die Wärmeausbreitung mit Hilfe der Grundgleichungen zu berechnen. Das gleiche gilt auch für die Berechnung der Rauchausbreitung.

Reale Verbrennungsvorgänge und -eigenschaften sind komplex und werden durch die Umgebungsbedingungen Temperatur, Druck, Sauerstoff- und Brennstoffkonzentration, Art des Brennstoffes, etc. beeinflusst. Die umfassende Beschreibung der Reaktion von Erdgas (Methan) mit Luft bedarf beispielsweise 53 Spezies und 325 Elementarreaktionen, die in Abhängigkeit von den Umgebungsbedingungen ablaufen. [33] Im Rahmen der Brandsimulation mit derzeitig verfügbaren Rechenleistungen wird daher auf stark vereinfachte Ansätze zurückgegriffen.

Grundsätzlich werden Verbrennungsvorgänge eines Brands in Bezug auf die anfängliche Durchmischung von Brenn- und Sauerstoff in vorgemischte bzw. nicht-vorgemischte Brandprozesse unterteilt. Nicht-vorgemischte Flammen nennt man Diffusionsflammen. Die Mischung von Brenn- und Sauerstoff findet durch Konvektion und Diffusion statt. Ferner werden Verbrennungsvorgänge hinsichtlich des geschwindigkeitsbestimmenden Prozesses unterschieden: Ist die physikalische Durchmischung von Brenn- und Sauerstoff der zeitlich limitierende Prozess der Verbrennung, geht man von unendlich schneller chemischer Reaktion (engl.: infinitely fast chemistry) bzw. der Annahme "gemischt ist gleich verbrannt" (engl.: mixed is burned) aus. Im Gegensatz dazu werden für Verbrennungsvorgänge, die durch die Reaktionsgeschwindigkeit limitiert werden, chemische Reaktionen mit endlicher Reaktionsrate (engl.: finite rate chemistry) betrachtet. [34]

Die für die Brandsimulation verwendeten Verbrennungsmodelle konzentrieren sich auf Diffusionsflammen und die Annahme, dass die physikalische Durchmischung die Verbrennungsrate limitiert und die chemischen Reaktionen unendlich schnell ablaufen. Im Folgenden werden anhand zweier verbreiteter Verbrennungsmodelle die grundlegenden Prinzipien erläutert.

Das einfachste Verbrennungsmodell zur Beschreibung einer Diffusionsflamme ist das Mischungsbruch-Modell. Es basiert auf den Voraussetzungen, dass die Verbrennungsreaktion einstufig, komplett, unendlich schnell und ohne Rückreaktion abläuft. Des Weiteren gilt, dass die Anzahl der Elemente vorgegeben und konstant bleibt, und die Diffusionskoeffizienten der einzelnen Spezies gleich sind. Unter diesen Voraussetzungen reagieren Brennstoff und Sauerstoff innerhalb des Kontrollvolumens unverzüglich bis eine der beiden Spezies verbraucht ist. Die Wärmefreisetzungsrate \dot{q}''' im Rahmen des Mischungsbruch-Modells ergibt sich in Anlehnung an Gleichung (2-6) aus der Brennstoff-Reaktionsrate \dot{m}_B''' und der vorgegebenden Verbrennungswärme bezogen auf die Brennstoffmasse ΔH_B .

$$\dot{q}''' = \dot{m}_B''' \cdot \Delta H_B \quad (2-12)$$

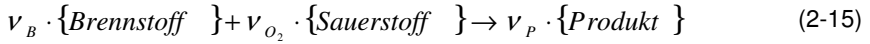
Der Mischungsbruch Z wird definiert als der Massenanteil des Brennstoffstroms \dot{m}_1 im Gemisch aus Brennstoffstrom und Luftstrom (bzw. Oxidatorstrom) \dot{m}_2 (siehe Gleichung (2-13)). Er kann Werte zwischen Null (im Luftstrom) und Eins (im Brennstoffstrom) annehmen. Mit dem Mischungsbruch ist auch die Gemisch-Zusammensetzung unter den genannten Voraussetzungen vollständig erfasst. Aus dem Mischungsbruch lässt sich der linear abhängige Elementmassenbruch β_i des Elements i bestimmen, mit den Elementmassenbrüchen des Elements i im Brennstoffstrom β_{i1} bzw. Luftstrom β_{i2} .

$$Z = \frac{\dot{m}_1}{\dot{m}_1 + \dot{m}_2} = \frac{\beta_i - \beta_{i2}}{\beta_{i1} - \beta_{i2}} \quad (2-13)$$

In Anlehnung an den Massenerhaltungssatz gilt folglich die Erhaltungsgleichung für den Mischungsbruch, mit dem Diffusionskoeffizienten D und den Randbedingungen für Luft ($Z = 0$) und Brennstoff ($Z = 1$) gemäß Gleichung (2-14). Zur Berechnung der räumlichen und zeitlichen Verteilung des Mischungsbruchs wird eine Transportgleichung für Z benötigt. Erweiterungen des Mischungsbruch-Modells betreffen beispielsweise die Zerlegung des Mischungsbruchs in einzelne Bestandteile zur Berechnung mehrstufiger Reaktionen und Effekte. Um derartige Details des Verbrennungsvorgangs im Modell abzubilden, sind weitere Erhaltungsgleichungen aufzustellen und die entsprechenden Transportgleichungen zu lösen. [33, 34]

$$\frac{\partial(\rho Z)}{\partial t} + \nabla \cdot \rho v Z = \nabla \cdot (\rho D \nabla Z) \quad (2-14)$$

Zur Veranschaulichung zeigt Abbildung 2.4 die linearen Zusammenhänge zwischen dem Mischungsbruch und den Massenbrüchen der einzelnen Spezies eines Zweistoffproblems mit Sauerstoff und Brennstoff, auch Burke-Schumann-Diagramm genannt. Die stöchiometrische Mischung für einen vollständigen Umsatz von Brenn- und Sauerstoff liegt in Abbildung 2.4 beispielhaft bei einem Mischungsbruch von $Z_{st\ddot{o}ch} = 0,2$ vor. Die zugehörige idealisierte Reaktionsgleichung, mit den stöchiometrischen Koeffizienten ν , lautet:



Für die stöchiometrische Mischung bei $Z = Z_{st\ddot{o}ch}$ liegen weder Brennstoff noch Sauerstoff vor. Das Gemisch besteht vollständig aus den Reaktionsprodukten. Im brennstoffarmen Bereich $Z \leq Z_{st\ddot{o}ch}$ wird der Brennstoff vollständig umgesetzt während im brennstoffreichen Bereich $Z \geq Z_{st\ddot{o}ch}$ der Sauerstoff vollständig reagiert. An den Randbedingungen $Z = 0$ und $Z = 1$ liegt reiner Sauerstoff bzw. reiner Brennstoff vor. Die Summe der Massenbrüche ergibt gemäß des Erhaltungssatzes zu jedem Zeitpunkt 1. [33, 34, 35]

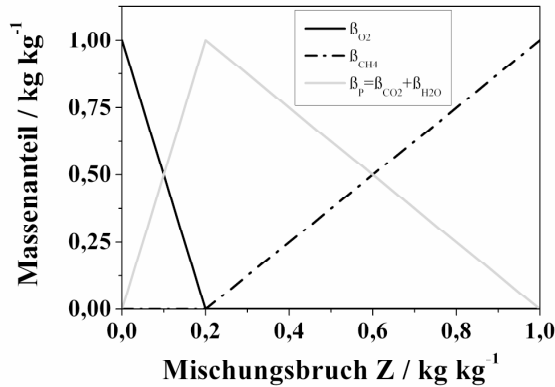


Abbildung 2.4: Zusammenhang zwischen Mischungsbruch und Massenbrüchen für ein einfaches Reaktionssystem (Burke-Schumann-Diagramm) [33-35].

Das Eddy-Dissipation Modell nach Magnussen für Diffusionsflammen ist eine Erweiterung des Eddy-Breakup-Modells für vorgemischte Flammen. [36, 37, 38] Die Geschwindigkeit der Verbrennung wird, in Anlehnung an die Voraussetzung der schnellen chemischen Reaktion, durch die Mischung auf molekularer Ebene vorgegeben. Im Gegensatz zum Mischungsbruch-Modell gilt nicht automatisch die Annahme, dass die Durchmischung und damit die Verbrennungsreaktion im Kontrollvolumen vollständig erfolgt, sondern die Reaktionsrate wird in Abhängigkeit von der Turbulenz bzw. dem Wirbelzerfall bestimmt. [30, 33]

Die Reaktionsrate R einer Brennstoffspezies α in einer Reaktion k ergibt sich aus Gleichung (2-16), mit den Massenanteilen der Edukte \tilde{Y}_E und Produkte \tilde{Y}_P , der Dichte des Fluids ρ , den empirischen Modellparametern A und B , den Molmassen M_α , M_E , M_P , den stöchiometrischen Koeffizienten der Reaktion k für die Spezies $\nu_{\alpha,k}$, für die Edukte $\nu_{E,k}$ und für die Produkte $\nu_{P,k}$ und der charakteristischen Mischungszeit t_{mix} :

$$R_{\alpha,k} = A \cdot M_\alpha \cdot \nu_{\alpha,k} \cdot \rho \cdot \frac{1}{t_{mix}} \cdot \min \left(\frac{\tilde{Y}_E}{\nu_{E,k} \cdot M_E}, B \frac{\sum_P \tilde{Y}_P}{\sum_P \nu_{P,k} \cdot M_P} \right) \quad (2-16)$$

Die Reaktionsrate des Eddy-Dissipation Modells ist proportional zum Kehrwert der charakteristischen turbulenten Mischungszeit. Diese Mischungszeit orientiert sich am angewendeten Turbulenzmodell. Für das Zweigleichungsmodell \bar{k} / ε lässt die Mischungszeit sich beispielsweise aus der turbulenten kinetischen Energie dividiert durch die Dissipationsgeschwindigkeit bestimmen. Beim LES Modell wird die Mischungszeit aus dem Tensor der Spannungsrate gebildet. Der erste Term in der Klammer bezieht sich auf den brennstoffarmen bzw. brennstoffreichen Bereich. Die Berechnung der Reaktionsrate ändert sich je nach limitierender Spezies der Edukte (Brennstoff oder Sauerstoff). Der zweite Term betrifft die Reaktionsprodukte: Liegen keine oder nur geringfügig heiße Reaktionsprodukte vor ist davon auszugehen, dass das Reaktionsvermögen von kaltem Brennstoff und Sauerstoff eingeschränkt ist. Auf diese Weise könne Situationen wie sie beispielsweise am Düsenaustritt vorzufinden sind modelliert werden, ohne einen eigenen Kinetik-Term zu verwenden. [33]

2.3.1.5 Wärmestrahlung

Ein Großteil der Wärmeenergie im Rahmen eines Brands wird durch elektromagnetische Strahlung mit Wellenlängen zwischen 10^{-3} m und 10^{-5} m (Infrarot-Strahlung) übertragen. Die Wärmeübertragung durch Strahlung ist im Gegensatz zur Konduktion und Konvektion nicht an ein Medium gebunden. Für die Simulation bedeutet dies, dass die Wärmestrahlung mit Hilfe gesonderter Transportgleichungen berechnet werden muss. Der Gesamtrechnaufwand wird dadurch je nach Ansatz empfindlich erhöht. Aufgrund der Bedeutung der Strahlung als Wärmeübertragungsmechanismus in Brandszenarien muss dieser Aufwand in Kauf genommen werden. Die bestehenden Strahlungsmodelle zielen jedoch darauf ab, die Wärmeübertragung durch Strahlung derart zu beschreiben, dass sie mit vertretbarem Rechenaufwand berechnet werden kann und dennoch die wesentlichen Kenngrößen berücksichtigt und transportiert werden.

Die Wärmestrahlung, die von einem Medium ausgeht, ist abhängig von dessen Temperatur, Emissionsgrad und Geometrie. Für den Strahlungstransport durch ein gasförmiges Fluid sind die Strahlungswellenlänge und Absorptions-, Emissions-, Reflexions- und Transmissionseigenschaften des Fluids von Bedeutung, die wiederum von der Wellenlänge und auch von Temperatur und Richtungswinkel abhängen. Im Modell wird der komplexe Prozess der Strahlungsübertragung durch unterschiedliche Annahmen vereinfacht. Angewandte und geeignete Vereinfachungen betreffen laut [30] u.a.:

- Strahlungsbetrachtung anhand limitierter Richtungen und Winkelunterteilungen
- deterministische oder statistische Bestimmung der Richtungswinkel und -anzahlen
- konstante Strahlungsintensität über alle Richtungen (diffuse Oberflächen)
- konstante, frequenzunabhängige Absorptionskoeffizienten (graue Strahlungskörper)

Eine Übersicht der aktuellen Strahlungsmodelle Diffusion Approximation (Rosseland), Spherical Harmonics Moment Approximation (P1), Discrete Ordinates Approximation (DO), Discrete Transfer Radiation Modell (DTRM) u.a. findet sich in [39, 40]. Die zu lösende Strahlungsübertragungsgleichung (engl.: radiation transfer equation RTE) nimmt regelmäßig die Form einer Erhaltungsgleichung hinsichtlich der Strahlungsintensität entlang der Strahlungsrichtung an. Die Strahlungsintensität setzt sich zusammen aus den die Strahlungsintensität steigernden Anteilen infolge von Streustrahlung (entlang der Strahlungsrichtung), spontaner Emission und den schwächenden Anteilen infolge Absorption und Streu-

ung im Kontrollvolumen. Je nach Strahlungsmodell werden unterschiedliche Verfahren und Approximationen zur Lösung der Strahlungsgleichung angewendet.

2.3.1.6 Randbedingungen

Wie in den vorangegangenen Abschnitten verdeutlicht, enthalten Feldmodelle zur Brandsimulation alle notwendigen Bestandteile, um Wärme- und Stoffausbreitung in einem Strömungsfeld zu berechnen. Um ein konkretes Brandszenario berechnen zu können sind darüber hinaus Angaben zur Geometrie und deren Randbedingungen vorzugeben. Dabei geht es regelmäßig um die Fragen, was in das Strömungsfeld ein- und ausfließt und wie die Strömung sich am Rand des Strömungsfeldes (bspw. an einer festen Wand) zu verhalten hat.

Die Randbedingungen lassen sich grundsätzlich in physikalische und numerische Randbedingungen unterscheiden, je nachdem ob sie vorgegeben werden oder berechnet werden müssen. Die vorgegebenen, physikalischen Größen betreffen meist den Druck, die Geschwindigkeiten, die Temperatur oder einen Massen- oder Volumenstrom am Einlass, Auslass oder Rand des Strömungsfeldes. Beispielsweise sind für einen definierten Zuströmrand eines dreidimensionalen Strömungsfeldes Druck, Temperatur und Geschwindigkeitsprofil vorzugeben. Für einen offenen Abströmrand ist dagegen der Druck der Umgebung ausreichend. Die zu berechnenden, numerischen Randbedingungen verknüpfen die Kenngrößen des Strömungsfeldes mit dessen Rand. Möglich sind hier die Anwendung von Erhaltungsgleichungen oder Extrapolationen aus dem Strömungsfeld auf die Ränder. Die Gesamtzahl der vorzugebenden physikalischen und numerischen Bedingungen eines Strömungsfeldrands entspricht immer der Anzahl der zu lösenden Erhaltungsgleichungen. [29]

Eine für die Brandsimulation wesentliche Randbedingung betrifft die Wärmefreisetzung. Die Wärmefreisetzung kann entweder hinsichtlich Ort, Zeit und Intensität fest vorgegeben werden oder in Abhängigkeit von den Umgebungsbedingungen berechnet werden. Dabei ist jede beliebige Kombination aus vorgegebener und berechneter Wärmefreisetzung möglich. Wie bereits beschrieben schließen aktuelle Modelle die Möglichkeit der brandlastabhängigen Berechnung der Wärmeentwicklung und -ausbreitung mit ein. Die Brandlasten begrenzen hierbei einerseits das Strömungsfeld. Andererseits wird in Abhängigkeit von der Temperatur der Brandlast Brennstoff in das Strömungsfeld abgegeben. Dazu notwendig ist zum einen die Auflösung der Temperatur des als Brandlast definierten Strömungsrandes. Dies geschieht regelmäßig unter Berücksichtigung der physikalischen und thermischen Eigenschaften der Brandlast selbst sowie den Bedingungen an deren vom Strömungsfeld abgekehrten Seite. Zum anderen wird die thermische Zersetzung der Brandlast modellhaft abgebildet. Diese als Pyrolysemodell bezeichneten Untermodelle werden im folgenden Abschnitt näher erläutert.

2.3.2 Pyrolysemodelle

Im Vergleich zum Entwicklungsstand hinsichtlich der Berechnung von Phänomenen in der Gasphase (z.B. Strömungsberechnung, Turbulenz, Verbrennung, etc.) steht die Entwicklung der Pyrolysemodelle noch in den Anfängen. Während umfassende Modelle für unterschiedlichste Fragestellungen der Gasphase zur Verfügung stehen, konzentrieren sich die

vorhandenen Pyrolysemodelle meist auf eine begrenzte Auswahl an Materialien und Umgebungsbedingungen. Der Begriff Pyrolyse wird dabei nicht nur auf die ursprüngliche Bedeutung der anaeroben, thermischen Zersetzung bezogen, sondern meist unabhängig vom Einfluss des Sauerstoffs verwendet.

Ziel der Pyrolysemodelle ist die numerische Beschreibung der thermischen Zersetzung von Werkstoffen hinsichtlich ihrer zeitlichen und/oder Stoffmengen bezogenen Ausprägungen. Einfache Modelle basieren dabei auf semi-empirischen Korrelationen zwischen Wärmeeintrag und Entzündungszeit oder Wärmefreisetzung, die in Anlehnung an experimentelle Ergebnisse aus Versuchen im Labormaßstab wie dem Cone Kalorimeter erarbeitet wurden. [17, 41, 42] Die Entwicklung der Pyrolysemodelle zielt mehr und mehr auf eine möglichst realistische Erfassung der maßgeblichen Prozesse und Phänomene der Pyrolyse ab. [7, 43] Dazu gehören ausgehend von der thermischen Randbedingung eines Materials insbesondere die Beschreibung der Wärmeübertragung im Werkstoff und die Kinetik der thermischen Zersetzung.

Die thermischen Randbedingungen konzentrieren sich meist auf den Wärmeeintrag einer Oberfläche des betrachteten Werkstoffs. Bei Gegenständen im Einflussbereich eines Brands sind alle Arten der Wärmeübertragung (Konvektion, Konduktion und Strahlung) von Bedeutung und werden mitunter in den Pyrolysemodellen berücksichtigt. Die Wärmeübertragung durch Konvektion betrifft zunächst nur die Oberfläche der Materialien. Die Wärmestrahlung dagegen wird gerade von Polymeren teilweise reflektiert, transmittiert und in Dickenrichtung absorbiert. Entsprechende Randbedingungen für den Wärmeeintrag durch Konvektion und Strahlung sind in den Gleichungen (2-16) und (2-17) dargestellt. Dabei sind \dot{q}_{conv} und \dot{q}_{rad} der Wärmestrom in Folge Konvektion und Strahlung, α_{conv} der Wärmeübergangskoeffizient, T_S und T_A die Oberflächen- bzw. die Umgebungstemperatur, ε die Emissivität und σ die Stefan-Boltzmann-Konstante.

$$\dot{q}_{conv} = \alpha_{conv} (T_S - T_A) \quad (2-16)$$

$$\dot{q}_{rad} = \varepsilon \sigma (T_S^4 - T_A^4) \quad (2-17)$$

Die Wärmestrahlungsabsorption polymerer Werkstoffe wird nicht zuletzt aufgrund ihrer Wellenlängenabhängigkeit in den Modellen nur vereinfacht wiedergegeben. Regelmäßig wird das Lambert-Beer'sche Gesetz (auch Bouguer-Lambert-Beer'sches Gesetz genannt) in Gleichung (2-18) verwendet, um die über das gesamte Spektrum der Wärmestrahlung gemittelte Absorption zu berechnen. Dabei ist $I_{(x)}$ die Strahlungsintensität der Dicke x , I_0 die Ausgangsintensität der Strahlung und a der über das gesamte Spektrum gemittelte Absorptionskoeffizient. Durch diesen Ansatz wird jedoch das Absorptionsverhalten von Polymeren nur approximiert. Im Einzelfall können Modell und Wirklichkeit voneinander abweichen, da beispielsweise das Phänomen der Dickenabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten nicht abgebildet wird. [44, 45]

$$I_{(x)} = I_{(0)} e^{-\alpha x} \quad (2-18)$$

Während die numerische Berücksichtigung der thermischen Randbedingungen auch hinsichtlich Strahlungsabsorption in der Regel ohne Schwierigkeiten zu implementieren ist, stellt die quantitative Bestimmung des Wärmeeintrages in einem Brandszenario selbst bei Brandprüfungen im Labormaßstab eine Herausforderung dar. Dazu tragen zum einen die dynamischen, turbulenten Bedingungen in der Gasphase und zum anderen die hohen Temperaturgradienten auf engem Raum, insbesondere in der Nähe brennender Oberflächen, bei.

Die im Rahmen aktueller Pyrolysemodelle berücksichtigten Phänomene der Wärmeübertragung konzentrieren sich auf die Wärmeleitung nach dem Fourier'schen Gesetz, wonach sich im vereinfachten Fall die Wärmeleistung eines Körpers mit zwei parallelen Wandflächen aus dem Produkt von Wärmeleitfähigkeit, Fläche und Temperaturunterschied dividiert durch den Abstand der Wände ergibt. Für den allgemeinen, dreidimensionalen Fall eines geschlossenen Systems lässt sich die folgende Wärmeleitungsgleichung ableiten, mit der Temperatur T , der Zeit t , der Wärmeleitfähigkeit λ , der Dichte ρ , der spezifischen Wärmekapazität c , den Koordinaten x, y, z und möglichen Wärmequellen bzw. -senken \dot{W} :

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\lambda}{\rho c} \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) + \frac{\dot{W}}{\rho c} \quad (2-19)$$

Die Wärmeübertragung durch Strahlung ist insbesondere bei porösen Materialien wie Schäumen und Rückständen von Bedeutung. Allgemeingültige Modelle sind hier vor dem Hintergrund inhomogener Materialien nicht zu erwarten. Dagegen spiegeln einzelne Modelle mit Hilfe von Approximationen und Vereinfachungen den Einfluss von Strahlung auf die Wärmeübertragung in den Werkstoffen wider und schätzen die effektive Wärmeleitung im Material ab. [46, 47]

Kern der Pyrolysemodelle ist die mathematische Formulierung der Kinetik der thermischen Zersetzung. Die Zersetzung von Polymeren findet regelmäßig durch Initialzerschnidungen, Depolymerisation oder auch komplexere Zersetzungsmechanismen mit beispielsweise Cyclisierung, Vernetzung oder Abspaltung von Molekülen statt. Neben der temperaturabhängigen Geschwindigkeit der Zersetzung spielt für das Brandverhalten, und damit das Pyrolysemodell, der Rückstand eine entscheidende Rolle. Als Brandrückstand werden sowohl thermisch stabile Füllstoffe als auch partiell zersetztes Polymermaterial verstanden. Letzteres wird auch als Char bezeichnet und setzt sich überwiegend aus wasserstoffarmen Kohlenstoffstrukturen zusammen. Diese Art von Rückstand weist häufig eine größere thermische Stabilität als das Ausgangspolymer auf, wird aber mitunter bei höheren Temperaturen weiter in Brennstoff und nicht brennbaren Rückstand zersetzt.

Im Rahmen der Pyrolysemodelle werden die komplexen Zersetzungsmechanismen regelmäßig über den Arrhenius Ansatz abgebildet. Gleichung (2-20) gibt den Zusammenhang wieder. Hier ist k die Geschwindigkeitskonstante der Zersetzungsreaktion, A der präexponentielle Faktor oder auch Arrhenius Koeffizient, E die Aktivierungsenergie, R

2 Grundlagen und Stand der Forschung

die universelle Gaskonstante und T die Temperatur. Durch Verschachtelung mehrerer Reaktionen mit unterschiedlichen Komponenten lassen sich vielfältige Pyrolysevorgänge und Zersetzungsraten in Abhängigkeit von der Temperatur abbilden. Die Hauptschwierigkeit stellt dann die Bestimmung der jeweiligen Eingabeparameter dar. Zu den aktuellen Herausforderungen von Pyrolysemodellen gehört vor allem die Beschreibung weiterer Phänomene der Pyrolyse wie beispielsweise der Sauerstoffabhängigkeit der Zersetzungsreaktionen.

$$k = A e^{\frac{-E}{RT}} \quad (2-9)$$

Die Numerik der Pyrolysemodelle basiert in der Regel auf einem Gleichungssystem von Gleichgewichts- und Erhaltungsgleichungen. Die verfügbaren Modelle unterscheiden sich in erster Linie hinsichtlich ihres Umfangs (1-D oder 2-D, Anzahl Reaktionen und Komponenten, etc.) und ihrer Flexibilität (Eingabeparameter als Polynom, Stufenfunktion oder Konstante, etc.) aber auch bezüglich ihrer Untermodelle zur Beschreibung relevanter Phänomene (z.B. Strahlungsabsorption ja/nein, Strahlungstransport ja/nein, etc.). Weit verbreitete Pyrolysemodelle sind beispielsweise FDS, ThermaKin, GPyro, OpenFoam [48-51].

3 Methoden und Simulationsprogramme

Im folgenden Abschnitt finden sich die Erläuterungen zu den in der Arbeit verwendeten Methoden und Simulationsprogrammen. Für die Vergleichs- und Validierungsexperimente der einzelnen Brandszenarien wurden unterschiedliche polymere Werkstoffe ausgewählt. Diese werden in den jeweiligen Kapiteln 4 bis 7 vorgestellt.

3.1 Methoden

Die Simulation eines Brands bzw. des Brandverhaltens von Polymeren basiert auf der Berechnung von Wärmeleitung, Brennstoff- und Wärmefreisetzung sowie deren Ausbreitung und Transport in einem vorgegebenen Berechnungsgebiet. Der Ausgangspunkt der Berechnungen wird in Form von Eingabeparametern vorgegeben. Dazu gehören unter anderem Parameter, um die zu simulierenden Werkstoffe zu charakterisieren. Die verwendeten Methoden zur Bestimmung dieser Eingabeparameter sowie die Validierungsexperimente der Brandszenarien SBI Test, Cone Kalorimeter Test bzw. Gasification Apparatus und UL 94 Test werden im Folgenden erläutert.

3.1.1 Thermogravimetrische Analyse

Zielgröße der thermogravimetrischen Analyse (TGA) ist die Probenmasse in Abhängigkeit von der Temperatur. Typischerweise wird der Massenverlauf bei konstanten Heizraten gemessen. Aus der Ableitung des Massensignals nach der Zeit wird die Temperatur- und heizratenabhängige Massenverlustrate bestimmt, auch differentielle Thermogravimetrie (DTG) genannt. Die TGA wurde verwendet, um die Kinetik der thermischen Zersetzung der ausgewählten Materialien zu untersuchen und zu quantifizieren. Die thermogravimetrischen Untersuchungen unter Stickstoffatmosphäre wurden an einer TGA der Firma Mettler/Toledo vom Typ TGA/SDTA 851 durchgeführt. Die Spülgasmenge betrug 30 ml/min. Die Proben mit einer Masse von 10 mg ($\pm 0,5$ mg) wurden in Aluminiumoxidtieglern bei Heizraten zwischen 1 K/min und 20 K/min von Raumtemperatur bis 1170 K erhitzt. Ergänzende TGA Versuche unter Luft wurden an einer Seiko TG/DTA 220 mit den gleichen Parametern durchgeführt.

3.1.2 Dynamische Differenzkalorimetrie

Mit der dynamischen Differenzkalorimetrie (DDK; engl.: differential scanning calorimetry DSC) werden Phasenänderungen und -übergänge von Werkstoffen untersucht. Die Methode basiert auf der Messung der abgegebenen bzw. aufgenommenen Wärmemenge einer Probe durch den Vergleich mit einer Referenzprobe. Die DDK wurde eingesetzt, um die spezifische Wärmekapazität, die Schmelzenthalpie und die Zersetzungsenthalpie der polymeren Werkstoffe zu untersuchen. Zur Bestimmung der spezifischen Wärmekapazität wurden leere Tiegel, der Referenzwerkstoff Saphir und die entsprechende polymere Probe nacheinander vermessen. Die Heizrate betrug 10 K/min, die Probenmasse 6 ± 1 mg und der Stickstoff Spülgasstrom 30 ml/min. Aus der Differenz von Referenzwerkstoff und Probe, korrigiert um die Basislinie des leeren Tiegels, wurde die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmt. Untersuchungen zur Vergasungsenthalpie bzw. Zersetzungsenthalpie wurden nach der Methode in [52] durchgeführt. Dazu wurden die Proben in einer Perkin Elmer DSC 7 bei halb geöffnetem Deckel

des Probentiegels über die Zersetzungstemperatur hinaus erhitzt und anhand des um die Basislinie korrigierten Wärmestroms die Zersetzungsenthalpie bestimmt.

3.1.3 Rheologische Untersuchungen

Zur Beschreibung des Tropfverhaltens wurden die Fließ- und Verformungseigenschaften der entsprechenden Polymere bzw. Polymerschmelzen untersucht. Die rheologischen Eigenschaften von Polymeren sind geprägt durch deren viskoelastisches Verhalten. Unter Viskoelastizität wird dabei die zeit-, temperatur- und frequenzabhängige Reaktion auf Beanspruchungen und Verformungen des Werkstoffs verstanden. Die Rheologie von Polymeren wird in einem Rheometer bestimmt, der den Werkstoff belastet bzw. deformiert (Scher- oder Dehndeformation) und die zugehörigen Deformationen bzw. die Gegenkräfte misst. Im Versuchsaufbau Platte/Platte ist die benötigte Kraft proportional zur Plattenfläche multipliziert mit der Deformationsgeschwindigkeit und dividiert durch den Plattenabstand. Der Proportionalitätsfaktor wird als dynamische Viskosität bezeichnet und hat die Einheit Ns/m^2 . Die kinematische Viskosität dagegen beschreibt das Verhältnis von dynamischer Viskosität und Proben-dichte. Ist die dynamische Viskosität eines Werkstoffs unabhängig von der Deformationsgeschwindigkeit und damit linear abhängig von der aufgewendeten Kraft so wird der Werkstoff als Newton'sches Fluid bezeichnet. [53]

Die rheologischen Untersuchungen wurden mit dem Anton Paar Rheometer Physica MCR 301 in der Messgeometrie Platte/Platte mit einem Plattendurchmesser von 25 mm und einem Messspalt von 1 mm durchgeführt. Die Proben wurden mit einer vorgegebenen Deformation von $\gamma = 0,5\%$ bei Frequenzen zwischen 0,1 Hz und 100 Hz unter Luft beansprucht. Aus den Messungen bei vier Temperaturen von 453 K, 498 K, 543 K und 588 K wurden die Masterkurven mit einer Referenztemperatur von 493,15 K mit Hilfe der zugehörigen Software erzeugt. In einer weiteren Versuchsreihe wurden thermisch vorbehandelte Proben untersucht. Die Vorbehandlung bestand in einer thermischen Belastung im Rohr-fen bei 503 K, 633 K, 653 K, 673 K bzw. 693 K für 480 s unter einem Stickstoff Spül-gasstrom von 50 ml/min. Die nachfolgenden Messungen im Rheometer wurden unter den oben genannten Bedingungen bei 588 K durchgeführt.

3.1.4 Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit

Die Wärmeleitfähigkeit wird in W/m/K angegeben und liegt für Polymere typischerweise im Bereich von 0,1 W/m/K bis 0,4 W/m/K . Sie ist unter anderem abhängig von der Temperatur des Werkstoffs und nimmt bei Polymeren mit steigender Temperatur zu. Methoden zur Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit von Polymeren basieren auf den 2-Platten-Messgeräten [54, 55], der DSC [56], der Laser-Flash Methode [57] oder der Line-Source-Methode [58, 59]. Letztere bietet die Möglichkeit die Wärmeleitfähigkeit von Polymeren bis nahe an die Zersetzungstemperatur zu bestimmen. Ein schlanker, nadelförmiger Heizdraht wird dazu in einen mit der Polymerschmelze gefüllten Zylinder eingetaucht. Während der Erwärmung der Probe mit einer definierten Heizrate wird die Temperatur direkt neben dem Heizdraht gemessen. Aus dem Temperaturanstieg kann die thermische Leitfähigkeit berechnet werden.

Die Wärmeleitfähigkeit der Ausgangsmaterialien wurde zwischen 300 K und 580 K mit dem Thermoflizer der Firma SWO Polymertechnik GmbH, der nach der Line Source Me-

thode arbeitet, gemessen. [60] Dazu wurden dünne, zylinderförmige Probekörper vorbereitet, im Prüfzylinder gestapelt und bis zur Schmelze erwärmt. Nach Eintauchen der nadelförmigen Heizquelle wurde die Probe abgekühlt und die Messungen bei etwas über Raumtemperatur begonnen. Die thermische Leitfähigkeit von Rückstand wurde bei Raumtemperatur mit der Laser-Flash Methode bestimmt.

3.1.5 Bestimmung der optischen Eigenschaften

Die für die Wärmeübertragung eines Polymers relevanten optischen Eigenschaften sind die Emissivität und das Absorptionsverhalten. Die Emissivität (auch Emissionsgrad oder Emissionsvermögen) eines Körpers verhält sich nach dem Kirchhoff'schen Strahlungsgesetz proportional zur Absorptivität. Ausgehend von einer externen Wärmestrahlungsquelle bezeichnet die Emissivität damit den um die Reflexion reduzierten Anteil der an der Oberfläche des Körpers eintreffenden Wärmestrahlung. Die eintreffende Strahlung wird vom Körper entweder transmittiert oder absorbiert. Das Strahlungsabsorptionsverhalten von Polymeren ist nicht zuletzt aufgrund der Wellenlängenabhängigkeit sehr komplex. Zur Vereinfachung wird regelmäßig angenommen, dass die Strahlungsabsorption dem Lambert-Beer'schen (auch Bouguer-Lambert-Beer'sches Gesetz) folgt, und zwar nicht nur auf einzelne Wellenlängen sondern gemittelt auch auf jedes relevante Spektrum bezogen. Untersuchungen zeigen jedoch anhand der Dickenabhängigkeit des Absorptionskoeffizienten, dass diese Annahme unter Umständen zu stark vereinfachend ist. [45, 61] Die Entwicklung weiterführender Modelle zur Berücksichtigung der wellenlängenabhängigen Strahlungsabsorption u.a. im Rahmen von Pyrolysemodellen wird nur vereinzelt verfolgt und steht noch am Anfang. [62]

Die Werte der Emissivität der Materialien wurden durch Mittelung der spektralen Emissivität über das Spektrum eines schwarzen Strahlers mit einer Temperatur von 1081 K erhalten. Die spektrale Emissivität wurde mit Hilfe eines FTIR Spektrometers und einem Versuchsaufbau mit einer reflektierenden Hohlkugel (Ulbricht-Kugel) gemessen. Die Mittelung über das Spektrum eines schwarzen Strahlers der Temperatur 1081 K wurde in Anlehnung an die Umgebungsbedingungen im Gasification Apparatus (siehe Abschnitt 3.1.8) durchgeführt. Die Bestimmung der Absorptionskoeffizienten der Materialien durch Dr. Linteris am National Institute for Standards and Technology NIST erfolgte sowohl mit einer Breitband Methode unter einem Radiator als auch mit Hilfe eines FTIR Spektrometers im Wellenlängenbereich von 1,5 μm bis 15 μm . Dabei zeigten die beiden Methoden, die in [61] ausführlich beschrieben sind, für die untersuchten Materialien eine sehr gute Übereinstimmung.

3.1.6 Single Burning Item Test

Der Single Burning Item (SBI) Test wurde im Zuge der Vereinheitlichung europäischer Brandschutz-Normen entwickelt. [63] Der Brandtest ist für das mittlere Beanspruchungsniveau von Bauprodukten ausgelegt und stellt einen Entstehungsbrand nach, der durch einen einzelnen brennenden Gegenstand in einer Zimmerecke ausgelöst wird. [64] Abbildung 3.1 zeigt den Versuchsraum mit dem Probenträgerwagen sowie dem Rauchabzug mit den Messwertaufnehmern für Temperatur, Lichtschwächung und Druck sowie der Probenentnahme für die Gasanalyse. Die Bestimmung der Sauerstoff und Kohlendioxid Anteile der Rauchgase sowie die Steuerung der Prüfapparatur befindet sich außerhalb des Versuchs-

raumes. Zielgröße des Versuches ist die über die Sauerstoffverbrauchsmethode berechnete Wärmefreisetzungsrate sowie die horizontale Brandausbreitung.

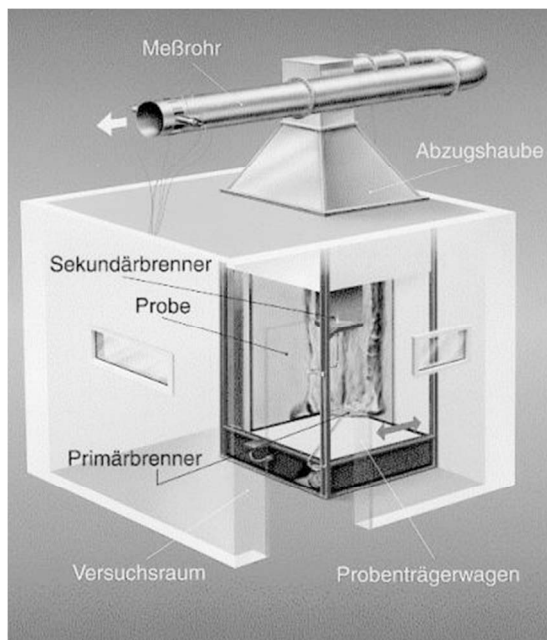


Abbildung 3.1: Skizzierter Versuchsaufbau des SBI Test (Quelle: MPA NRW).

In der vorliegenden Arbeit wird der SBI Test als eines von vier ausgewählten Brandszenarien zur Evaluierung der Brandsimulationen verwendet. Der SBI Test wurde ausgewählt, weil er aufgrund seiner Dimension (Kubikmeter) und der Wärmequelle (Diffusionsflamme) Rückschlüsse auf das Verhalten der Werkstoffe in einem realen Entstehungsbrand zulässt und damit die Verbindung zum Hauptanwendungsgebiet der Brandsimulation im Brandingenieurwesen herstellt. Gleichzeitig ist der SBI Test der zentrale europäische Brandtest zur Klassifizierung von Baustoffen. Der Prüfaufbau und -ablauf ist aufwendig und kostenintensiv und alternative Ansätze zur Unterstützung der Materialentwicklung von großem Interesse. Die quantitative Bestimmung der Wärmefreisetzungsrate im SBI Test bietet ferner die Möglichkeit einen direkten Vergleich mit numerischen Methoden anzustellen.

Die SBI Versuche wurden nach der Norm DIN EN 13823 an einer SBI Prüfapparatur der Firma FTT durchgeführt. Die zuvor gemäß DIN EN 13238 konditionierten Proben wurden ohne Hohlraum auf die Trägerplatten montiert und über Eck auf dem Probenträgerwagen angeordnet. Der Volumenstrom im Abzug betrug $0,6 \text{ m}^3/\text{s}$. Der Prüfablauf beinhaltete die Datenaufzeichnung ohne Brenner für 120 s, die Aufzeichnung der Grundlinie der Wärmefreisetzung anhand des Nebenbrenners zwischen $120 \text{ s} < t < 300 \text{ s}$, die eigentliche Beflammung der Probekörper für die Dauer von 1260 s sowie die Aufzeichnung der Bedingungen am Ende der Prüfung frühestens eine Minute nach Verlöschen der Probe. Die Versuchsergebnisse wurden mit Hilfe der Software Logger 2007 ausgewertet.

3.1.7 Cone Kalorimeter Test

Der Cone Kalorimeter Test [65, 66, 67] wird aufgrund der variablen Umgebungsbedingungen als Brandszenario der Phase des entstehenden und sich entwickelnden Brands zugeordnet. Ausgehend von einer externen Strahlungsquelle werden vergleichsweise kleine Probekörper auf der Oberfläche mit den Abmessungen 100 mm × 100 mm einer Wärmestrahlung von 0 kW/m² bis 100 kW/m² ausgesetzt. Die erzwungene Verbrennung der Werkstoffe wird hinsichtlich der Wärme-, Massen- und Stofffreisetzung untersucht. Dazu werden die Lichtschwächung und die Anteil an Sauerstoff, Kohlendioxid und Kohlenmonoxid in der Abluft im Abzug sowie die Masse der Probe über der Versuchszeit gemessen. Die Wärme freisetzung bestimmt sich nach der Sauerstoffverbrauchsmethode, wonach pro Kilogramm verbrauchtem Sauerstoff 13,1 MJ Wärme freigesetzt werden. Abbildung 3.2 zeigt eine Skizze des Versuchsaufbaus.

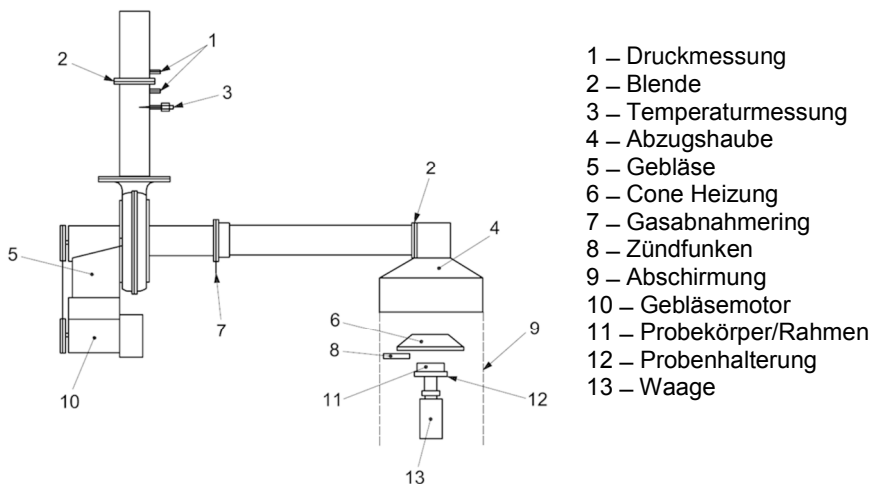


Abbildung 3.2: Skizzierter Versuchsaufbau des Cone Kalorimeter Test [67].

Der Cone Kalorimeter Test wurde zur Evaluierung der Brandsimulationen ausgewählt, da er sowohl von großer Bedeutung für die polymerwissenschaftliche Untersuchung des Brandverhaltens ist als auch aufgrund seiner Dimensionen die Verbindung zum Brandingenieurwesen herstellt [11]. Die Untersuchung der thermischen Zersetzung einer Probe findet im Cone Kalorimeter unter gleichförmigen und definierten thermischen Bedingungen statt. Dadurch wird eine annähernd eindimensionale Betrachtung der Pyrolyse zulässig und gleichzeitig die Unsicherheit bezüglich der Randbedingungen gering gehalten. Die Pyrolyserate selbst ist einerseits eine der wesentlichen Zielgrößen der polymerwissenschaftlichen Entwicklung flammgeschützter Materialien. Andererseits ist die numerische Abbildung der Pyrolyserate unter variierenden Umgebungsbedingungen die Grundlage einer großskaligen Simulation der Brandausbreitung.

Die Versuche wurden an einem Cone Kalorimeter der Firma FTT und in Anlehnung an die Norm ISO 5660 durchgeführt. Die gewählten Bestrahlungsstärken betragen 35 kW/m², 50 kW/m² und 70 kW/m² und der Abstand von Probenoberfläche zur Unterkante

der Heizspirale 25 mm. Um den Herausforderungen der Prüfung einiger Materialien zu begegnen, wurden unterschiedliche Halterungen der Probekörper verwendet. Standardmäßig wurden die Proben an den Seiten und der Unterseite in Aluminiumfolie eingeschlagen und im Standard Probenhalter platziert. Bei großen Verformungen oder Blasenbildung der Materialien im Cone Kalorimeter Test wurden die Proben ohne Probenhalter in Aluminiumfolie, die an der Oberfläche 4 mm bis 8 mm überstand, verpackt und direkt auf der Mineralwolle geprüft. Im Einzelfall wurde die Aluminiumfolie gegen dünne Stahlfolie der Dicke 0,25 mm ausgetauscht.

3.1.8 Gasification Apparatus

Der Gasification Apparatus bezeichnet ein am National Institute for Standards and Technology NIST (USA) entwickeltes Prüfgerät, bei dem in Anlehnung an den Aufbau des Cone Kalorimeters eine Probe an ihrer Oberfläche einer definierten Wärmestrahlung infolge einer konusförmigen Heizspirale ausgesetzt wird. [68] Der Unterschied zwischen dem Gasification Apparatus und dem Cone Kalorimeter liegt in erster Linie in der die Probe umgebenden Atmosphäre. Während der Cone Kalorimeter Test unter Luft durchgeführt wird, wird die Prüfkammer des Gasification Apparatus vollständig mit Stickstoff gespült. Die Versuchsbedingungen unter Stickstoff ermöglichen die Untersuchung der Pyrolyseprozesse der Werkstoffe ohne den Einfluss des Luftsauerstoffs bzw. der thermischen Rückkopplung der Verbrennung in der Gasphase. Die erfassten Messdaten konzentrieren sich neben der optischen Beobachtung auf den Massenverlauf über der Zeit. Abbildung 3.3 zeigt eine Skizze des Versuchsaufbaus des Gasification Apparatus.

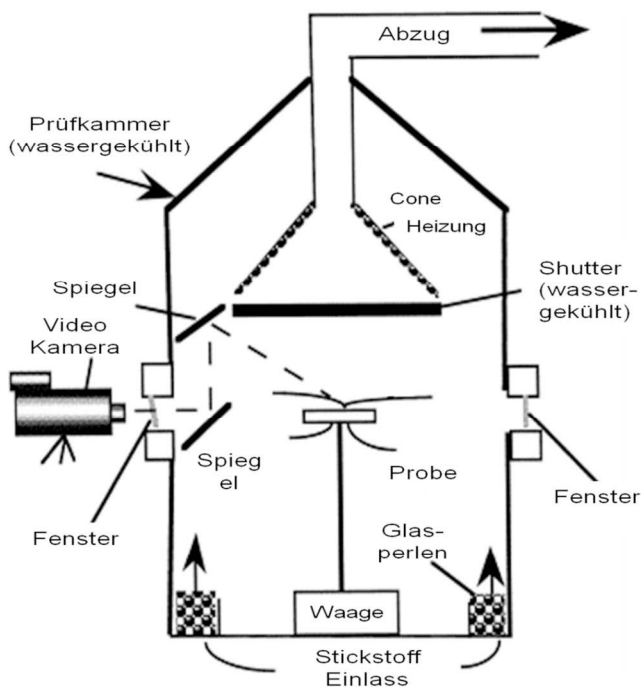


Abbildung 3.3: Skizzierter Versuchsaufbau des Gasification Apparatus [68, 69].

Die Versuche im Gasification Apparat wurden zur Evaluierung der Simulationen des Brandszenarios Cone Kalorimeter Test hinzugezogen, da aufgrund der Stickstoff Atmosphäre und der fehlenden Flamme die Unsicherheit hinsichtlich der thermischen Bedingungen im Vergleich zum Cone Kalorimeter Test auf ein Minimum reduziert sind. Die Randbedingungen an der Oberfläche der Probe bleiben über die gesamte Versuchsdauer auf die kalibrierte Bestrahlungsstärke beschränkt.

Die Prüfkammer ist 1,7 m hoch und hat einen Durchmesser von 0,61 m. Die Wasserkühlung hält die Außenwände der Kammer sowie den Shutter auf etwa 25°C. Der Stickstoff Spülgasstrom beträgt ca. 23 l/s. Die konusförmige Heizspirale hat einen Durchmesser von 0,3 m und ermöglicht eine gleichförmige Bestrahlung der Proben. Die Bestrahlungsstärke wird im Gegensatz zum Cone Kalorimeter über den Abstand der Probe zur Heizspirale eingestellt. Die Temperatur der Heizspirale und damit auch deren spektrale Verteilung der Wärmestrahlung bleibt über alle Bestrahlungsstärken konstant. Die gewählte Bestrahlungsstärke betrug 50 kW/m². Die Proben hatten eine kreisförmige Oberfläche mit einem Durchmesser von 75 mm. Sie wurden an den Seiten und der Unterseite in Aluminiumfolie eingeschlagen und in der entsprechenden etwa 5 mm tiefen Vertiefung eines Schaumglasblockes zentral unter der Heizspirale positioniert. Nachdem die Sauerstoffkonzentration in der Prüfkammer unter 0,1 % lag und die Temperatur in der Kammer sich stabilisierte wurde der Test gestartet. Die Masse der Probe wurde während des Versuchs jede 0,5 s mit einer maximalen Auflösung von 0,01 g aufgezeichnet.

3.1.9 UL 94 Test

Der UL 94 Test ist nicht zuletzt aufgrund seiner Bedeutung hinsichtlich der Materialzulassung für elektronische und elektrotechnische Anwendungen einer der meistverbreiteten Brandtests. Der UL 94 Tests entspricht hinsichtlich der Größenordnung und der Brandquelle einem für den Beginn eines Brands typischen Brandszenario und zielt auf die Untersuchung der Entflammbarkeit von Materialien ab. Die stabförmigen Probekörper werden zunächst in vertikaler Anordnung mit einer 20 mm hohen Prüf Flamme mit der Leistung von 50 W für zwei mal 10 s beflammt. Abbildung 3.4 skizziert den Versuchsaufbau des vertikalen UL 94 Tests.

Der UL 94 Test wurde als kleinstes Szenario zur Evaluierung der Brandsimulationen ausgewählt, da er von großer Bedeutung für die Materialentwicklung flammgeschützter Polymere ist und darüber hinaus an eine umfassende Simulation die Anforderung stellt, das Tropfverhalten der Probe abzubilden. Im UL 94 Test das Material je nach Tropfverhalten und Brennzeit einer der drei Klassifizierungen V-0, V-1 oder V-2 zugeordnet. Werden die Kriterien für die Klassifizierung V-2 nicht erreicht, so wird die Horizontalbrennprüfung (HB) durchgeführt. Um eine HB Klassifizierung zu erhalten, darf die Probe im horizontalen UL 94 Test die lineare Brenngeschwindigkeit von 75 mm/min nicht überschreiten. [70]

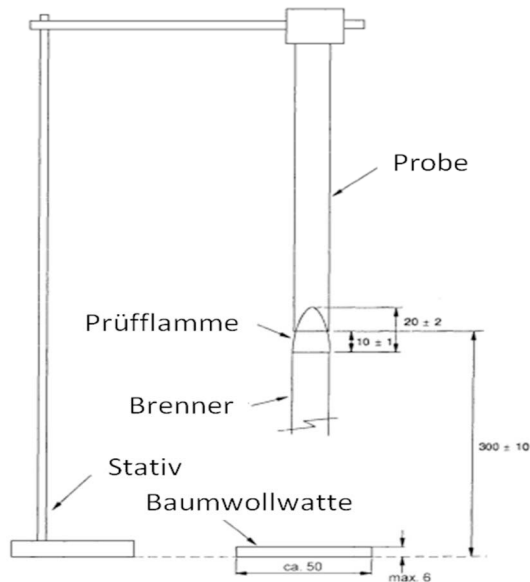


Abbildung 3.4: Skizzierter Versuchsaufbau des vertikalen UL 94 Tests [70].

Die Probekörper wurden bei 25°C und 50 % relativer Luftfeuchtigkeit für mindestens 48 h konditioniert. Die Versuche fanden gemäß der Norm IEC 60695-11-10 statt. Die Abmessungen der Probe waren 125 mm × 13 mm × 1,5 mm. Um den Massenverlust der Proben im vertikalen UL 94 Test zu untersuchen wurden in einer eigenen Testreihe der Probenhalter auf einer Waage platziert. Während der Messung wurde abtropfendes Material aufgefangen und damit nicht von der Messung der Waage erfasst. Die Masse der Probe wurde jede 0,5 s mit einer Genauigkeit von 0,01 g aufgezeichnet.

3.2 Simulationsprogramme

Zur numerischen Betrachtung der im Rahmen dieser Arbeit ausgewählten Brandszenarien wurden die Programme Fire Dynamics Simulator (FDS), ThermaKin und Particle Finite Element Method (PFEM) verwendet. Im Folgenden werden die Programme einzeln vorgestellt und die wesentlichen Eigenschaften erläutert.

3.2.1 FDS

Das Programm FDS wurde am National Institute for Standards and Technology NIST (USA) entwickelt. Es handelt sich um eine weit verbreitete Open Source Software die auf der Programmiersprache Fortran-95 basiert und unter Führung des NIST stetig weiterentwickelt wird. Das Programm FDS wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit verwendet, weil es den Stand der Technik der Brandsimulationen mit CFD Modellen repräsentiert und als eines der ersten Programme die zusätzliche Verwendung eines detaillierten Pyrolysemodells erlaubt. Der detaillierte Aufbau und die Funktionsweise des Programms sowie der zugehörigen Visualisierungssoftware sind den entsprechenden Handbüchern zu entnehmen.

men [48, 71, 72, 73]. Die Visualisierung der dreidimensionalen Geometrien und Simulationsergebnisse wird standardmäßig mit dem Programm Smokeview durchgeführt.

FDS ist ein sogenanntes Feldmodell oder CFD-Modell und verbindet die Berechnung von dreidimensionalen Strömungsfeldern mit brandrelevanten Untermodellen. Die numerische Strömungssimulation ist optimiert für die Berechnung brandtypischer, thermisch induzierter Unterschall-Strömungen. Die Form der Aufstellung und Lösung der Navier-Stokes Gleichungen geht auf die Arbeiten von Baum und Rehm zurück [74]. Die Diskretisierung des Strömungsgebiets erfolgt durch ein strukturiertes Gitter mit quaderförmigen Elementen. Die partiellen Ableitungen der Strömungsgleichungen werden durch die Finite Differenzen Methode gelöst. Das zugrunde liegende Turbulenzmodell folgt der Large Eddy Simulation LES.

Wesentlicher Bestandteil der Brandsimulation mit FDS sind das Strahlungsmodell und das Verbrennungsmodell inklusive der Berechnung von Rauchentstehung und -ausbreitung. Die Strahlungstransportgleichung wird über eine Methode, ähnlich der Finite Volumen Methode, am gleichen Gitter wie die Strömungsberechnung gelöst. Das durchstrahlte Fluid wird als graues Gas behandelt, das heißt es erfolgt eine wellenlängenunabhängige Emission und Absorption von Strahlung. Das Absorptionsverhalten des Gases ist abhängig von der vorhandenen Rauchmenge und wird über ein eigenes Untermodell angepasst. Die Wärme- und Rauchentstehung infolge von Verbrennungsreaktionen im Strömungsgebiet wird mit Hilfe des Mischungsbruch-Modells berechnet. Für die Gasphase steht eine vorzugebende globale Reaktionsgleichung zur Verfügung, über die in Abhängigkeit vom Mischungsbruch der Anteil der Edukte und Produkte bestimmt wird. Rauch wird durch Partikel simuliert und der Rauchtransport über die Lagrange'sche Betrachtungsweise gelöst.

Um die Anwendungsmöglichkeiten des Programms auszuweiten und die Möglichkeit der Simulation der Brandentstehung und Ausbreitung einzuschließen, wurde mit der FDS Version 5 im Oktober 2007 ein Pyrolysemodell integriert. Das Pyrolysemodell wird auf Oberflächen des Strömungsrandes definiert und basiert auf der Lösung einer eindimensionalen Wärmeübertragungsgleichung. Die zugrunde liegende Gittergröße wird unabhängig von der Diskretisierung des Strömungsfeldes bestimmt. Als Ausgangswert orientiert sich die Gittergröße des Pyrolysemodells an der Quadratwurzel der Diffusivität des Materials, also dem Quotienten aus Wärmeleitfähigkeit und dem Produkt Dichte mal Wärmekapazität und kann entsprechend angepasst werden.

Im Rahmen des Untermodells für die Pyrolyse wird der Oberfläche einer Zelle des Strömungsrandes eine fiktive Zusammensetzung aus verschiedenen Schichten mit verschiedenen Komponenten und einer vorgegebenen Dicke zugeordnet. Als Randbedingungen wird einerseits ein beliebiger Wärmeeintrag vorgegeben und andererseits der Wärmeeintrag aus der Gasphase berechnet. Das Modell berücksichtigt sowohl die Strahlungsreflexion an der Oberfläche als auch die Strahlungsabsorption in Dickenrichtung abhängig vom gemittelten Absorptionskoeffizienten des als optisch grau angesehenen Festkörpers. Letzteres wird über einen Quelltherm in der Wärmeleitungsgleichung für die Emission bzw. Absorption von Wärmestrahlung erreicht. In diesem Quelltherm ist in Anlehnung an die Schuster-Schwarzschild-Approximation die Strahlungsintensität in Abhängigkeit von der Entfernung zur Oberfläche enthalten.

Die Wärmeleitung im Festkörper wird in Abhängigkeit der Zusammensetzung der Schichten und der thermischen Eigenschaften der Komponenten berechnet. Jedes Material kann bis zu 10 unterschiedliche, auch verschachtelte Reaktionen mit bis zu 20 nachfolgenden Reaktionsschritten durchlaufen. Die Geschwindigkeitskonstanten der Reaktionen werden nach dem einstufigen Arrhenius Ansatz in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmt und können über Temperaturober- und -untergrenzen auch auf eine bestimmte Temperatur festgelegt werden. Es wird grundsätzlich zwischen den Reaktionsprodukten Rückstand (jede beliebige Komponente), Wasserdampf und Brennstoff unterschieden. Die Produkte Wasserdampf und Brennstoff werden unmittelbar nach Entstehen an die angrenzende Zelle des Strömungsfeldes übertragen. Der Rückstand verbleibt und beeinflusst die Wärmeleitung im Festkörper bzw. reagiert weiter.

Durch die Fokussierung auf die Simulation von Brandszenarien ist die Anwendung von FDS in diesem Bereich sehr weit verbreitet. Darüber hinaus haben Untersuchungen gezeigt, dass die Simulationsergebnisse mit FDS eine sehr gute Qualität erreichen können und Vorteile gegenüber anderen Simulationsprogrammen bestehen. [30, 75, 76, 77] Die Komplexität der Berechnung eines Brandszenarios wird jedoch vor allem dann deutlich, wenn die Simulation u.a. mit FDS zur Vorhersage eines Brandverlaufes eingesetzt wird. [78]

3.2.2 ThermaKin

Das Programm ThermaKin wurde von Stoliarov und Lyon an der Federal Aviation Administration FAA (USA) entwickelt und 2008 veröffentlicht. Das Programm ist in der Programmiersprache C++ geschrieben und wird derzeit an der Universität Maryland (USA) weiterentwickelt. Die Details hinsichtlich Aufbau, Funktionsumfang und Bedienung sind der technischen Anleitung zu entnehmen. [49]

ThermaKin ist ein reines, in der derzeitigen Version eindimensionales Pyrolysemodell. Es wurde zur Verwendung im Rahmen der vorliegenden Arbeit ausgewählt, weil es vor allem hinsichtlich seines Funktionsumfangs und seiner Aktualität ein zukunftsweisendes Pyrolysemodell darstellt. Darüber hinaus gilt es die numerische Abbildung der Pyrolyserate als wesentlichen Bestandteil der Brandsimulation nicht nur an einem Programm, sondern mit einer repräsentativen Auswahl an Pyrolysemodellen zu untersuchen und zu bewerten. ThermaKin basiert auf der numerischen Beschreibung der transienten Übertragung von Wärme und Stoffen (Pyrolysegase) sowie der chemischen Reaktionen in einem Werkstoff. Das Programm zielt darauf ab, ein quantitatives Verständnis der komplexen Abhängigkeiten zwischen Brandverhalten und Umgebungsbedingungen zu entwickeln. Es ist daher darauf ausgelegt, unterschiedlichste Mechanismen des Brandverhaltens von Materialien wie z.B. thermische Zersetzung, Rückstandsbildung, Intumeszenz, Barrierewirkung, etc. sowie verschiedenste Randbedingungen numerisch zu berücksichtigen.

Das Pyrolysemodell ThermaKin, wie auch FDS, berechnet auf Grundlage der Erhaltungsgleichungen für Masse, Energie und Spezies die thermische Zersetzung des untersuchten Werkstoffs. Der Werkstoff besteht dabei aus beliebigen Komponenten, deren temperaturabhängiges Eigenschaftsprofil vorgegeben wird. Die Strahlungsabsorption in Dickenrichtung ist über einen Algorithmus implementiert, nach dem die absorbierende Zelle

zufällig und unter Beachtung einer Wahrscheinlichkeitsfunktion, die sich an der Lambert-Beer'schen Verteilung der Strahlung in Dickenrichtung orientiert, ausgewählt wird.

Die berücksichtigten Zersetzungsreaktionen sind einstufig. Es werden maximal zwei Edukte zu maximal zwei Produkten unter Aufwendung der Reaktionsenthalpie umgesetzt. Die zugehörige Reaktionsrate ist temperaturabhängig und wird nach dem Arrhenius Ansatz bestimmt. Die Reaktionstemperatur kann durch zusätzliche Parameter exakt eingestellt werden. Die Anzahl der Reaktionen eines Werkstoffs ist auf 30 begrenzt.

In ThermaKin ist das Volumen eines Werkstoffs zum einen abhängig von der Dichte, die als Funktion der Temperatur angegeben wird. Darüber hinaus können die gasförmigen Reaktionsprodukte zum Volumen des Werkstoffs beitragen, diesen aufblähen und somit beispielsweise intumeszierende Materialien abbilden. Dabei wird der Transport der Gase aus tiefer liegenden Zellen an die Oberfläche verzögert und durch den Konzentrationsgradienten gesteuert.

Das Programm ThermaKin wurde erfolgreich zur Simulation der Massenfreisetzungsrates von typischen Thermoplasten eingesetzt, die nahezu ohne Rückstand zu bilden pyrolysieren. [60] Darüber hinaus wurde am Beispiel Rückstand bildender Polymere gezeigt, dass intumeszierende Werkstoffe zweckdienlich durch die Anpassung der effektiven Leitfähigkeit berechnet werden können. [79] Der Vergleich von FDS und ThermaKin hinsichtlich der Simulation eines Polymers mit konstruierten Eigenschaften zeigte eine weitgehend gute Übereinstimmung. [80] Der Beitrag von ThermaKin zum quantitativen Verständnis des Brandverhaltens von Polymeren wurde anhand der Parameterstudien in [52, 81] unter Beweis gestellt.

3.2.3 Particle Finite Element Method

Das Programm PFEM wurde am Centro Internacional de Metodos Numericos en Ingenieria CIMNE (Spanien) entwickelt. Es basiert auf der Software Plattform KRATOS und ist in der Programmiersprache Python geschrieben. Es handelt sich bei PFEM (und ebenso KRATOS) um eine Open Source Software, die am CIMNE weiterentwickelt wird. Einen detaillierten Überblick über das Programm hinsichtlich Aufbau und Funktion ist [82] zu entnehmen.

Die Verwendung von PFEM im Rahmen der Arbeit zielt darauf ab, die Möglichkeiten von Simulationsprogrammen hinsichtlich der Beschreibung des Tropfverhaltens von Polymeren im Brandszenario UL 94 Test zu untersuchen. PFEM wurde ausgewählt, da es eine innovative numerische Methode zur Berechnung unterschiedlichster zwei- und dreidimensionaler Fragestellungen ist und die grundsätzliche Eignung zur Beschreibung fließender Polymerschmelzen mit PFEM in Arbeiten von Butler et al. [83, 85, 85] gezeigt wurde. Der Schwerpunkt von PFEM liegt auf Fluid-Struktur-Kopplung, großen Verformungen, Mehrphasenproblemen und freien Oberflächen. Das Programm PFEM verbindet dazu Partikelmethode mit der klassischen Finite Elemente Methode (FEM). Die maßgeblichen Gleichungen werden anhand eines für FEM typischen Gitters gelöst. Die Gitterpunkte oder auch Knoten können dann im Gegensatz zur FEM in Anlehnung an die Lagrange'sche Betrachtungsweise ihre Position verändern. Dabei transportieren die Knoten all ihre Eigenschaften inklusive des Impulses und sind somit als Partikel zu betrachten. Nach der vom Zeitschritt abhängigen Positionierung wird ein neues Gitter über alle Knoten erzeugt. Wäh-

3 Methoden und Simulationsprogramme

rend der Gittergenerierung kann mit Hilfe eines Algorithmuses, genannt alpha-shape Algorithmus, über die geometrische Beziehung der Knoten zueinander die Veränderung von freien Oberflächen abgebildet werden.

Die Besonderheit von PFEM ist die Lagrange'sche Beschreibung (Updated-Lagrange-Formulierung) der räumlichen Bewegung der Knoten. Diese bewegen sich in Abhängigkeit von ihrer Dichte, Beschleunigung und Anfangsgeschwindigkeit vollkommen frei und können sich von ihrem ursprünglichen Nachbarknoten oder dem Verbund entfernen. Der grundlegende Algorithmus von PFEM folgt folgendem Ablauf:

- 1) Definition der Partikel (bzw. Knoten) und deren Eigenschaften (Dichte, Geschwindigkeit, etc.) sowie Festlegung des Volumens, der Randbedingungen und der freien Oberflächen.
- 2) Gittergenerierung mit Hilfe der Delaunay-Triangulation und Berechnung der Kräfte in den Partikeln durch Lösung der Navier-Stokes Gleichungen mittels FEM.
- 3) Berechnung der Geschwindigkeit und Beschleunigung jedes Partikels mit Hilfe einer Updated-Lagrange-Formulierung.
- 4) Positionsänderung der Partikel und weiter zu Schritt 1).

Hinsichtlich der Untersuchung von Fragestellungen zum Brandverhalten von Polymeren sind in PFEM zusätzliche Untermodelle vorgesehen. Ein Einblick in die Vorgehensweise und die Implementierung der Untermodelle wird in [83, 84] gegeben. Von grundsätzlicher Bedeutung ist dabei das Untermodell zur Beschreibung der thermischen Zersetzung. Zusätzliche Terme und Erhaltungsgleichungen berücksichtigen den Massenverlust infolge Pyrolyse sowie die entsprechende Zersetzungsenthalpie. In der aktuellen Version folgt die thermische Zersetzung dem einstufigen Arrhenius Ansatz erster Ordnung ohne die Berücksichtigung von Rückstandsbildung. Die Validierung des Untermodells zur Beschreibung der Pyrolyse ist in [85] wiedergegeben.

Das Programm PFEM hat sich als Berechnungswerkzeug für verschiedenste Problemstellungen bewährt. Beispiele betreffen u.a. die Simulation der Wellenbildung in Wasser, der Einfluss der Wellen auf Begrenzungswände, die Ausbreitung von Wasser nach dem Wegfall einer Begrenzungswand, die Bewegung einer Flüssigkeit in einem oszillierenden Behälter oder die Wechselwirkungen zwischen schwimmenden und nichtschwimmenden Festkörpern unterschiedlichster Geometrien und Fluiden. [82, 86, 88-91] Hinsichtlich des Brandverhaltens von Polymeren wurde in der Arbeit von Butler et al. gezeigt, dass PFEM in der Lage ist, den Schmelzfluss einer senkrechten Probe in Abhängigkeit von den Randbedingungen und der Materialeigenschaften in guter Übereinstimmung mit experimentellen Untersuchungen abzubilden. [83, 84, 85]

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus

Das erste Beispiel zur komplementären Nutzung von Brandsimulation und Polymerwissenschaft in der Dimension Kubikdekameter umfasst die Simulation der Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus. Ausgangspunkt ist ein realer Brandfall, der dazu führte, dass ein Einfamilienhaus komplett ausbrannte. Der Brand zeichnete sich durch eine sehr schnelle Brandausbreitung aus. Die Rekonstruktion der Ursache des Brands und des Brandverlaufs anhand von Brandrückständen und Zeugenaussagen durch Sachverständige und Gutachter führte zu erheblich unterschiedlichen Schlussfolgerungen. Insbesondere blieb vor Gericht lange Zeit strittig, ob, neben der bestätigten Brandquelle im Obergeschoss, Brandstiftung im Erdgeschoss zum kompletten Ausbrennen des Einfamilienhauses führte oder ob das Feuer sich entgegen der Auftriebsrichtung vom Obergeschoss aus selbständig nach unten ausbreiten konnte. Vor diesem Hintergrund werden im folgenden Beispiel die Anwendungsmöglichkeiten von Brandsimulationen im Rahmen der Brandursachenermittlung untersucht. Die Berechnungen zielen einerseits darauf ab Informationen zum zeitlichen Verlauf des Brands zu geben und zum anderen die Frage zu beantworten, ob und unter welchen Umständen eine Brandausbreitung entgegen der Auftriebsrichtung möglich war. Dazu werden zunächst die Charakteristika des Brandszenarios vorgestellt. Im Anschluss werden der Aufbau des Simulationsmodells erläutert und die Ergebnisse der Berechnungen mit den aus Gutachten und Zeugenaussagen zusammengetragenen Informationen verglichen und diskutiert.

4.1 Charakteristika des Brandszenarios

Das Brandszenario betrifft ein Einfamilienhaus mit Obergeschoss, Erdgeschoss und dem verbindenden innenliegenden Treppenhaus. Die Grundfläche des Gebäudes beträgt ca. 60 m^2 , das Gesamtvolumen etwa $0,35 \text{ dam}^3$. Abbildung 4.1 zeigt eine Skizze des Gebäudes mit Blick auf die Eingangstür. Abbildungen 4.2 und 4.3 stellen den Grundriss von Erd- und Obergeschoss dar.

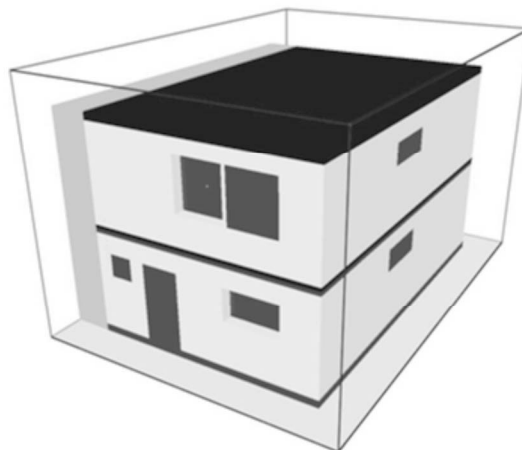


Abbildung 4.1: Skizze des Brandszenarios Einfamilienhaus.

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus

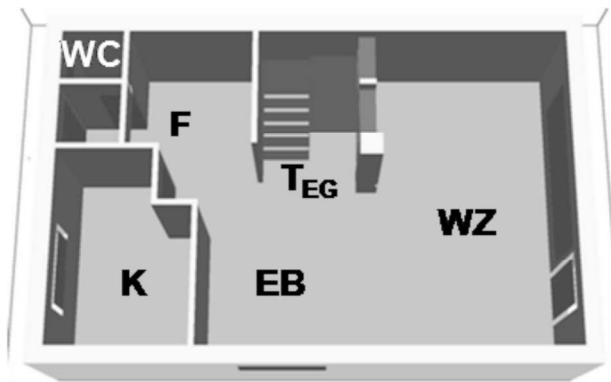


Abbildung 4.2: Grundriss des Erdgeschosses mit Küche (K), Flur (F), Gästetoilette (WC), Essbereich (EB), Wohnzimmer (WZ) und Treppenaufgang (T_{EG}).

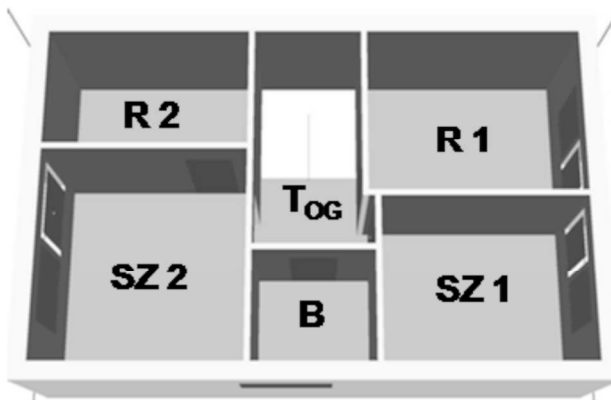


Abbildung 4.3: Grundriss des Obergeschosses mit Treppenaufgang (T_{OG}), Bad (B), Schlafzimmer 1 (SZ 1), Raum 1 (R 1), Schlafzimmer 2 (SZ 2) und Ankleideraum (R 2).

Der Brandverlauf wurde nicht messtechnisch festgehalten, sondern konnte nur anhand der Zeugenaussagen und Brandrückstände, die in verschiedenen Gutachten zusammengetragen wurden, nachvollzogen werden. [92-101] Tabelle 4.1 fasst die für den Brandverlauf wesentlichen Zeugenaussagen zusammen. Als Ausgangspunkt wurde Zeugenaussage Nr. 1 zum Zeitpunkt 00:00 h (hh:mm) gewählt. Zu diesem Zeitpunkt gibt es keinerlei Hinweise auf einen Brand. Etwa 15 bis 20 Minuten später berichteten erste Zeugen von brandtypischen Gerüchen außerhalb des Hauses. Zu einem nicht genau festzulegenden Zeitpunkt zwischen 00:15 h und 00:48 h nimmt Bewohner B im Treppenhaus des Obergeschosses Brandgerüche wahr und sieht unter der Tür des Schlafzimmers SZ 1 Rauch aufsteigen. Zum Zeitpunkt 00:48 h alarmiert Nachbar N3 die Feuerwehr aufgrund von deutlichen Brandmerkmalen, die aus dem Obergeschoss des Einfamilienhauses treten. Eine Minute später ruft auch der Bewohner B die Feuerwehr, öffnet die Haustür und verlässt das Haus. Zum Zeitpunkt 00:50 h trifft eine Polizeistreife ein und kann aufgrund des Brands nicht mehr als 2 m in das Haus vordringen. Vier Minuten später erreicht die Feuerwehr den Brandort und findet sowohl das Obergeschoss als auch das Erdgeschoss im Vollbrand vor.

Tabelle 4.1: Zusammenstellung der anhand von Zeugenaussagen zusammengetragene Informationen zum Brandverlauf und den zugehörigen Zeitpunkten (in hh:mm).

Nr.	Zeitpunkt	Ereignis
1	00:00	Bewohner B geht zu Bett (Obergeschoss), keine Auffälligkeiten
2	00:15 - 00:20	Nachbarn N1 und N2 nehmen Brandgerüche wahr
3	(00:20 - 00:48)	Bewohner B entdeckt Rauch unter der Tür des Schlafzimmers SZ 1
4	00:48	Nachbar N3 sieht deutliche Brandmerkmale aus dem Obergeschoss des Einfamilienhauses treten und alarmiert die Feuerwehr
5	00:49	Bewohner B alarmiert die Feuerwehr, öffnet die Haustür und verlässt das Haus
6	00:50	Polizeistreife erreicht den Brandort und kann ca. 2 m in das Haus vordringen
7	00:54	Ankunft der Feuerwehr, Vollbrand im Ober- und Erdgeschoss

Den Zeugenaussagen in Tabelle 4.1 ist zu entnehmen, dass sich der Brand sehr schnell über das ganze Haus ausgebreitet hat. Zwischen der Entdeckung des Brands im Obergeschoss des Hauses (Zeugenaussage Nr. 3, 4, 5) und dem Flash-over im Erdgeschoss (Nr. 6, 7) vergingen etwa 3-6 Minuten.

Die Brandursachenermittlungen der Sachverständigen ergaben anhand der Brandrückstände und übereinstimmend mit den Zeugenaussagen, dass ein Ursprung des Brands im Schlafzimmer SZ 1 lag. Aufgrund weiterer Anhaltspunkte, die die chemische Analyse der Brandrückstände betraf, auf die an dieser Stelle aber nicht näher eingegangen werden soll, blieb zunächst fraglich, ob es zusätzliche Brandherde im Erdgeschoss gegeben haben muss. Gerade die Tatsache, dass der Brand sich entgegen der Auftriebsrichtung und dazu sehr schnell ausgebreitet hat, hielt die Zweifel an der These eines einzigen Brandherds im Obergeschoss lange aufrecht. Die abschließende Rekonstruktion des Brandverlaufs geht davon aus, dass der Brand im Schlafzimmer SZ 1 begann und unterstützt durch die gegebenen Ventilationsbedingungen und Brandlastverteilungen von dort aus auf das gesamte Haus übergetreten ist.

Die Einrichtung des Hauses wurde als überladen und ansatzweise "vermüllt" beschrieben. In Schlafzimmer SZ 1, in dem der Brand ausgebrochen ist, bestand die Hauptbrandlast aus einer Matratze sowie zwei Regalen. Weitere relevante Brandlasten im Obergeschoss betreffen eine Doppelmatratze und Schränke/Kommoden im Schlafzimmer SZ 2 sowie eine Kommode und der Fußbodenbelag im Treppenhaus T_{OG}. Im Erdgeschoss standen im Wohnbereich WZ eine geräumige Polstergarnitur, diverse Teppiche sowie eine Regalwand u.a. mit Fernsehapparat. Im Essbereich befanden sich eine gepolsterte Sitz-ecke inkl. Esstisch und zwei Stühlen. Das Treppenhaus T_{EG} war im Wesentlichen mit einem

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus

an das Wohnzimmer WZ angrenzenden Einbauregal und einer Kommode zugestellt. Des Weiteren waren Wände und Decken in beiden Stockwerken mit einer Isolierung und einer darüber liegenden Holzpaneele verkleidet.

Die Außentemperatur zur Zeit des Brands betrug 16°C. Hinsichtlich der Ventilationsbedingungen im Einfamilienhaus gibt Tabelle 4.2 eine Übersicht der Stellungen von Fenstern und Türen. Die wesentlichen Veränderungen der Ventilationsbedingungen während des Brands betreffen die Eingangstür, die Tür zu Schlafzimmer SZ 1 sowie die Fenster der beiden Schlafzimmer SZ 1 und SZ 2 im Obergeschoss. Nachdem der Brand festgestellt wurde, öffnete ein Bewohner die Tür zum Schlafzimmer SZ 1 sowie kurze Zeit später eines der beiden Fenster in Schlafzimmer SZ 2. Durch den Brand wurde zeitnah zur Öffnung der Türe von Schlafzimmer SZ 1 das Fenster in Schlafzimmer SZ 1 zerstört und damit geöffnet. Die Haustüre wurde gemäß Zeugenaussage Nr. 5 in Tabelle 4.1 durch einen Bewohner kurz nach Alarmierung der Feuerwehr geöffnet. Die Polizeistreife, die kurz danach am Brandort eintraf, fand die Haustür im geöffneten Zustand vor. Exakte Zeitpunkte der einzelnen Vorgänge waren nicht zu rekonstruieren.

Tabelle 4.2: Übersicht der Stellungen von Fenstern und Türen im Einfamilienhaus

Öffnung	Ausgangsstellung	Veränderung
EG: Eingangstür	geschlossen	offen (durch Bewohner)
EG: Tür F - WC	geschlossen	-
EG: Tür F - K	geschlossen	-
EG: Terrassentür WZ	gekippt	-
OG: Tür T _{OG} - R 1	geschlossen	-
OG: Tür T _{OG} - SZ 1	geschlossen	offen (durch Bewohner)
OG: Tür T _{OG} - B	geschlossen	-
OG: Tür T _{OG} - SZ 2	offen	-
OG: Tür SZ 2 - R 2	geschlossen	-
OG: Fenster SZ 1	gekippt	offen (infolge Brand)
OG: Fenster SZ 2	gekippt	offen (durch Bewohner)

4.2 Aufbau des Simulationsmodells

Für die Simulation des Brandszenarios Einfamilienhaus wurde das Programm FDS, Version 5.4.3 - SVN 5210, verwendet. Der Aufbau des Simulationsmodells orientiert sich eng an den Charakteristika des Brandszenarios. Zunächst werden die der Berechnungen zugrunde liegende Geometrie und die gewählte Diskretisierung vorgestellt. Im Anschluss daran werden die Eingabeparameter sowie sonstige Randbedingungen erläutert.

4.2.1 Geometrie und Diskretisierung

Die Brandsimulation umfasst das Einfamilienhaus sowie einen Teil der Umgebung seitlich und über dem Gebäude. Abbildung 4.4 zeigt auf der linken Seite die Außenansicht des

berechneten Einfamilienhauses mit dem angedeuteten Rahmen der Berechnung, der einen Meter über das Hausvolumen hinausragt. Rechts daneben ist die Geometrie des zugehörigen Makrostruktur-Modells sowie die Anordnung der modellierten Gegenstände dargestellt.

Das Berechnungsgebiet hat eine Höhe von 6,8 m, eine Breite von 8,2 m und eine Tiefe von 11,6 m. Das zur Berechnung genutzte strukturierte Rechengitter besitzt eine in alle Raumrichtungen gleich große Gitterschrittweite von 0,1 m. Die Diskretisierung des Gebiets basiert damit auf insgesamt ca. 650.000 Zellen. Der anfängliche vom Programm berechnete und variabel gestaltete Zeitschritt beträgt 0,061 s. Die Berechnungen basieren auf dem LES Turbulenzmodell in der FDS Ausgangskonfiguration mit der Smagorinsky Konstanten $C_s=0,2$, der turbulenten Prandtl Zahl $Pr_t=0,5$ und der turbulenten Schmidt Zahl $Sc_t=0,5$.

Die Dicke der Außenwände in der Simulation beträgt 0,3 m, die der Innenwände und Türen 0,1 m. Die Fenster sind als nicht durchströmbare Zellwand ohne räumliche Ausdehnung in Dickenrichtung modelliert. Ein gekipptes Fenster bzw. Tür wird in der Simulation durch eine an den Seiten und oben 0,1 m weite Öffnung berücksichtigt. Die geöffnete, anteilige Fläche eines gekippten Fensters bzw. Tür beträgt damit je nach Größe der Fenster- bzw. Türöffnung zwischen 21 % und 28 %.

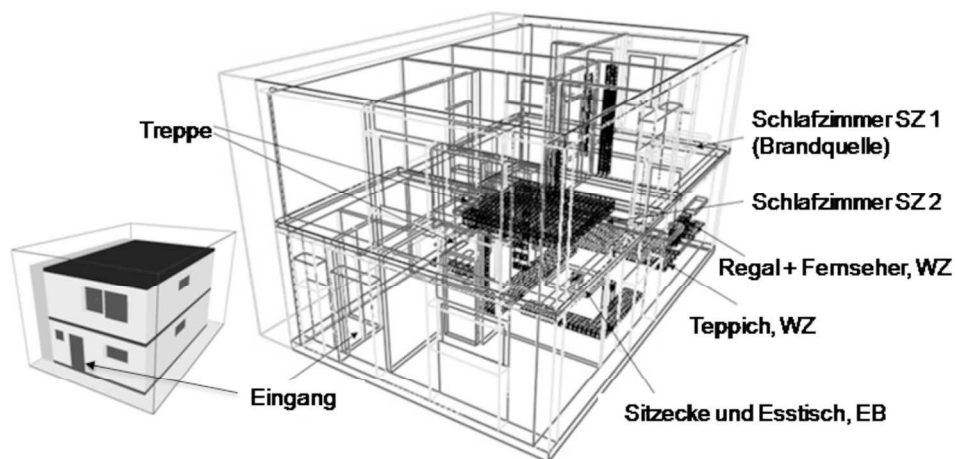


Abbildung 4.4: Außenansicht und Makrostruktur-Modell der berechneten Geometrie des Einfamilienhauses

4.2.2 Eingabeparameter und Randbedingungen

Die zu definierenden Eingabeparameter der Brandsimulation umfassen in erster Linie die numerische Beschreibung der Brandursache, der Verbrennungsreaktion in der Gasphase und der Eigenschaften der vorhandenen Brandlasten.

Brandursache: In den Simulationen wurde entsprechend der Brandursachenermittlung vorausgesetzt, dass der Brand im Schlafzimmer SZ 1 ausgelöst wurde. Als Brandursache wurde ferner der Abbrand der im Zimmer vorhandenen Schaumstoffmatratze unterstellt. Aufgrund des großen Brandrisikos von Matratzen und Polstermöbeln ist die Wärme-freisetzung dieser Gegenstände oft untersucht worden. [102, 103, 104]. Für die Brandsimu-

lationen wurde die Wärmefreisetzungsrate der Matratze in Anlehnung an Untersuchungen in [105] fest vorgegeben. Abbildung 4.5 zeigt den zeitlichen Verlauf der vorgegebenen Wärmefreisetzungsrate der Matratze im Schlafzimmer SZ 1. Nach einer Phase des Schwelens ($t < 120$ s) steigt die Wärmefreisetzungsrate auf maximal 950 kW/m^2 an. Nach etwa 9 Minuten ist die Matratze verbrannt. Die Werte entsprechen einer $2,00 \text{ m} \times 0,90 \text{ m} \times 0,15 \text{ m}$ großen Polyurethan-Matratze mit einer Dichte von 38 kg/m^3 und einer Verbrennungswärme von ca. 26 MJ/kg . Die gesamte Wärmefreisetzungsrate der Matratze beträgt 267 MJ .

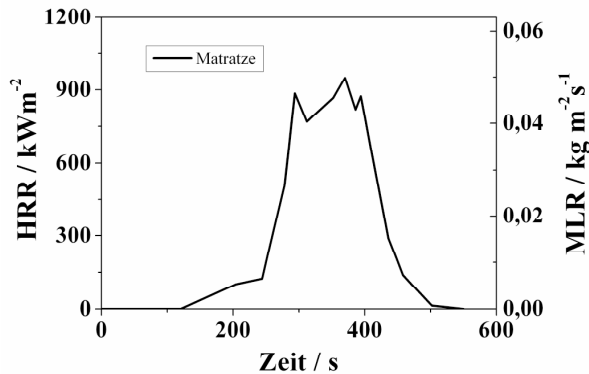
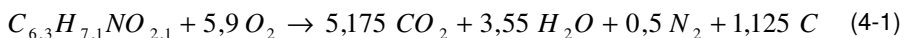


Abbildung 4.5: Vorgegebene Wärmefreisetzungsrate HRR bzw. zugehörige Brennstofffreisetzungsrate MLR in FDS der Brandquelle "Matratze" in Schlafzimmer SZ 1.

In FDS wird die vorgegebene Wärmefreisetzungsrate, die pro Fläche eines Körpers definiert wird, in eine Brennstofffreisetzungsrate entsprechend der globalen Gasphasenreaktion umgerechnet. Dieser Massenstrom tritt senkrecht aus der entsprechenden Fläche aus. Abbildung 4.5 gibt auf der vertikalen Sekundärachse die aus der vorgegebenen Wärmefreisetzungsrate bestimmte Brennstofffreisetzungsrate MLR wieder. Diese verhält sich proportional zur Wärmefreisetzungsrate. Der Proportionalitätsfaktor entspricht der Verbrennungswärme der globalen Verbrennungsreaktion.

Verbrennungsreaktion: Für die Gasphase wird in FDS eine globale Verbrennungsreaktion definiert. Einen großen Teil der Brandlast in Wohnräumen stellen polymere Werkstoffe und hier insbesondere Polstermöbel dar. Vor diesem Hintergrund orientiert sich die gewählte Verbrennungsreaktion an den Verbrennungseigenschaften von Polyurethan. Für die vollständige stöchiometrische Verbrennung lautet die verwendete Reaktionsgleichung:



Das Molekulargewicht des Brennstoffes $C_{6,3}H_{7,1}NO_{2,1}$ beträgt $130,3 \text{ g/mol}$, die Verbrennungswärme $19,043 \text{ MJ/kg}$. Für die Visualisierung der Rauchausbreitung wurde der Rauchanteil der Reaktion auf $0,1 \text{ g/g}$ festgesetzt. Abbildung 4.6 zeigt die Massenanteile

des Brennstoffs Y, des Sauerstoffs O_2 , des Stickstoffs N_2 , des Kohlendioxids CO_2 , des Wassers H_2O und des Kohlenstoffs C in Abhängigkeit vom Mischungsbruch Z.

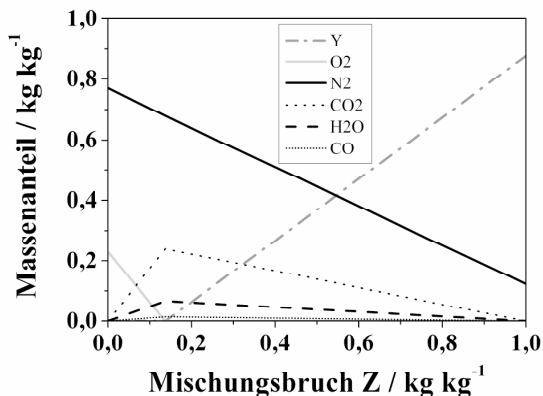


Abbildung 4.6: Massenanteile der Gasphasenspezies in Abhängigkeit vom Mischungsbruch Z für die verwendete Verbrennungsreaktion "Polyurethan".

Brandlasten: Die im Einfamilienhaus vorhandenen Brandlasten wurden für die Simulation vereinfachend in die zwei Hauptgruppen Holz und Kunststoff unterteilt. Die Gruppe Holz steht stellvertretend für die Wand- und Deckenverteilung sowie weitere Gegenstände aus dem Werkstoff Holz. Die Gruppe Kunststoff umfasst Matratzen, Polstermöbel sowie Fußbodenbeläge und sonstige Einrichtungsgegenstände. Die Verteilung der Brandlasten wurde in Anlehnung an die dokumentierten Verhältnisse im Einfamilienhaus vorgenommen und ist in Abbildung 4.4 dargestellt.

Die Beschreibung der Verbrennung des Holzes orientiert sich an den Ausführungen in [71, 106, 107]. Holz wird repräsentiert durch die Bestandteile A, B und C mit den Massenanteilen von 0,7 g/g für A, 0,1 g/g für B und 0,2 g/g für C. Daneben treten in der Zersetzungsreaktion das Zwischenprodukt D und die Endprodukte E und F auf. Die Bestandteile spiegeln die Zusammensetzung des Holzes aus Cellulose, Wasser und Lignin sowie die Pyrolyseprodukte Brennstoff und verkohlten Rückstand Char wieder. Die Verbrennungsreaktion läuft mehrstufig ab. Im ersten Schritt reagiert A zum Zwischenprodukt D. Parallel dazu verdampft B. C bleibt einem inerten Füllstoff gleich unverändert. Das Zwischenprodukt D reagiert in Abhängigkeit von der Temperatur und in gegenseitiger Konkurrenz weiter zu E und/oder dem Brennstoff F. Die Reaktionen sind in Abbildung 4.7 schematisch zusammengefasst. Um die Wärmeableitung an der Rückseite einer Holz-Oberfläche zu berücksichtigen, wurde in der Simulation unter der Holzschicht ein inerte Werkstoff G appliziert, dessen Temperaturprofil in Dickenrichtung ebenfalls berechnet wurde.

Die Zersetzung der Brandlasten der Gruppe Kunststoff läuft einstufig ab. Die entsprechenden Materialkennwerte wurden in Anlehnung an [71, 108] festgelegt. Einen Überblick über die im Rahmen der Simulation mit FDS verwendeten Eingabeparameter zur Charakterisierung der Brandlasten Holz und Kunststoff gibt Tabelle 4.3.

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus



Abbildung 4.7: Reaktionsschema für Brandlasten der Gruppe Holz, mit den Bestandteilen A, B, C, dem Zwischenprodukt D und den Endprodukten E, F.

Tabelle 4.3: Eingabeparameter zur Charakterisierung der Brandlasten Holz und Kunststoff.

Parameter	Einheit	Materialkomponente			
		A	B	C	D
Dichte	kg/m ³	400	1000	550	400
Wärmekapazität	kJ/kg/K	2,3	4,19	1,1	2,3
Wärmeleitfähigkeit	W/m/K	0,15-0,29	0,6	0,1	0,15-0,29
Absorptionskoeffizient	1/m	50000	50000	50000	50000
Emissivität	1	0,9	1	1	1

Parameter	Einheit	E	Materialkomponente		
		F	G	K	
Dichte	kg/m ³	140	200	100	
Wärmekapazität	kJ/kg/K	1,1	1	1	
Wärmeleitfähigkeit	W/m/K	0,08-0,25	0,06-0,25	0,05	
Absorptionskoeffizient	1/m	50000	50000	50000	
Emissivität	1	1	0,9	0,9	

Parameter	Einheit	Zersetzungsreaktion			
		A->D	B->H	D->(E+F)	D->F
Reaktionsenthalpie	kJ/kg	0	2260	418	418
Arrhenius Koeffizient A	1/s	2,8e19	1e20	1,3e10	3,23e14
Aktivierungsenergie E	kJ/kmol	2,42e5	1,62e5	1,51e5	1,97e5
Reaktionsprodukte		D (100%)	verdampft	E (35%) F (65%)	F (100%)
Verbrennungswärme (F)	MJ/kg			19	19

Parameter	Einheit	Zersetzungsreaktion
		K->F
Reaktionsenthalpie	kJ/kg	1500
Arrhenius Koeffizient A	1/s	1,39e16
Aktivierungsenergie E	kJ/kmol	2,19e5
Reaktionsprodukte		F (100%)
Verbrennungswärme (F)	MJ/kg	25

Die Wärmeleitfähigkeit wurde für die Komponenten A, D, E und G in Abhängigkeit von der Temperatur definiert. Die Komponenten A und D besitzen die gleiche Wärmeleitfähigkeit und ihr temperaturabhängiger Verlauf unterscheidet sich nur leicht von dem der Komponenten E und G. Abbildung 4.8 zeigt den Verlauf der Wärmeleitfähigkeiten über der Temperatur.

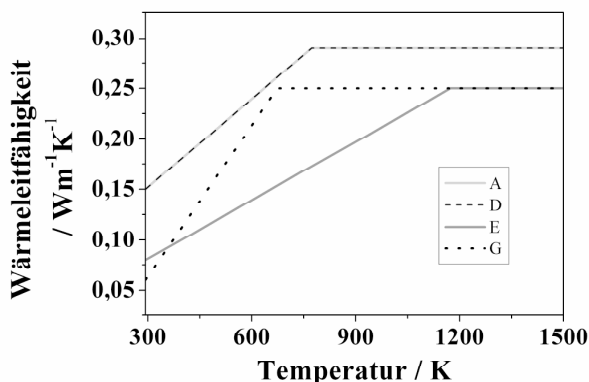


Abbildung 4.8: Wärmeleitfähigkeit der Komponenten A und D, E, G in Abhängigkeit von der Temperatur.

Wie in Kapitel 6 im Detail erläutert, werden zur Einordnung der Modellparameter regelmäßig vergleichende Untersuchungen im Labormaßstab durchgeführt. Dafür bietet sich der Cone Kalorimeter Test an. Anhand der experimentellen Daten können die verwendeten Modellparameter abgeglichen und evaluiert werden. Die zugrunde liegenden Annahmen und der Aufbau des Modells für das Brandszenario Cone Kalorimeter werden in Kapitel 6 diskutiert. Im Folgenden wird nur auf den Vergleich von experimentellen Daten mit den Simulationsergebnissen unter Verwendung der oben genannten Modellparameter für Holz und Kunststoff eingegangen.

Abbildung 4.9 zeigt den Vergleich von Simulation und Experiment für die Brandlastgruppe Kunststoff. Dargestellt ist die Wärmefreisetzungsrate in kW/m² bzw. die Gesamtwärmefreisetzungsrate in kW über der Zeit. Die Vergleichsexperimente wurden an PUR Schaumstoffen, wie sie für Sitzpolster eingesetzt werden, durchgeführt. Die Dichte des Schaumstoffes beträgt ~60 kg/m³, die Abmessungen der Probe 0,1 m × 0,1 m × 0,025 m und die Bestrahlungsstärke im Cone Kalorimeter Versuch 50 kW/m². Die entsprechenden Parameter für Probendicke und Bestrahlungsstärke wurden für die Simulation der Komponente K übernommen. Die Dichte der Komponente K wurde in der Simulation sowohl beim ursprünglichen Wert von 100 kg/m³ belassen (Sim_1 PUR) als auch an die Schaumstoffprobe (60 kg/m³) angepasst (Sim_2 PUR). Der Vergleich zeigt, dass sowohl die maximale Wärmefreisetzungsrate als auch die Gesamtwärmefreisetzungsrate von Experiment und Simulation im Cone Kalorimeter Szenario die gleiche Größenordnung aufweisen. Zusätzlich ist bei gleicher Dichte von 60 kg/m³ die Brenndauer in Simulation und Experiment sehr ähnlich. Folglich ist von einer Eignung der Modellparameter zur Simulation von häuslichen Brandlasten wie Matratzen, Polstermöbel und ähnliches auszugehen. In der Festlegung der Dich-

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus

te für die Brandlastgruppe Kunststoff auf 100 kg/m^3 wird die höhere Durchschnittsdichte typischer Brandlasten in Wohnräumen berücksichtigt.

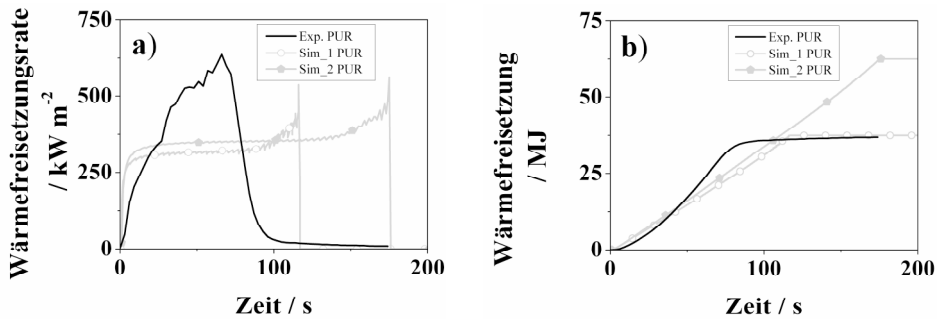


Abbildung 4.9: Wärmefreisetzungsraten (4.9a) und Wärmefreisetzung (4.9b) im Cone Kalorimeter Test (Bestrahlungsstärke: 50 kW/m^2) von Polyurethan-Schaumstoff (Exp. PUR) und den zugehörigen Simulationen mit variierender Dichte (Sim_1 PUR: 60 kg/m^3 ; Sim_2 PUR: 100 kg/m^3).

Abbildung 4.10 zeigt den Vergleich im Cone Kalorimeter Szenario für die Brandlastgruppe Holz. Die Vergleichsexperimente wurden an Holzproben mit den Abmessungen $0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m} \times 0,01 \text{ m}$ und der Bestrahlungsstärke im Cone Kalorimeter von 50 kW/m^2 durchgeführt. Die Dichte der Probekörper betrug etwa 550 kg/m^3 . Für die Simulation wurde die Dicke der Holzschicht und des inerten Materials an der Rückseite auf je $0,01 \text{ m}$ sowie die Bestrahlungsstärke auf 50 kW/m^2 festgelegt. Alle weiteren Parameter wurden entsprechend Tabelle 4.3 eingestellt. Die Ausgangsdichte der simulierten Probe beträgt 451 kg/m^3 und ist damit um 18 % geringer als die der Holzproben.

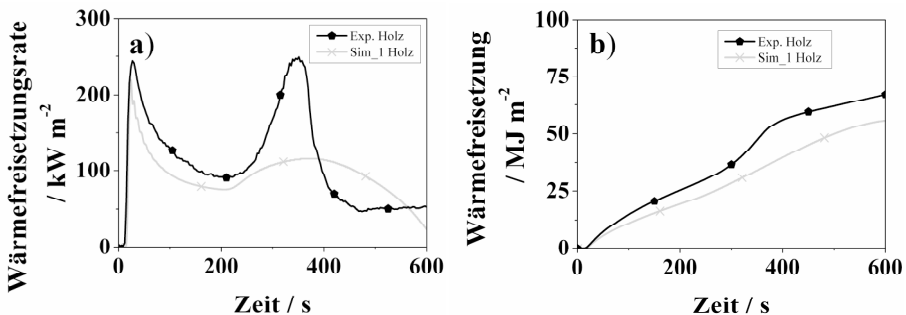


Abbildung 4.10: Wärmefreisetzungsraten (4.10a) und Wärmefreisetzung (4.10b) im Cone Kalorimeter Test (Bestrahlungsstärke: 50 kW/m^2) von Holz (Exp. Holz) und der zugehörigen Simulation (Sim_1 Holz).

Die Wärmefreisetzungsraten der Holzproben zeigt den typischen Verlauf eines Rückstand bildenden Materials. Nach einem ersten Maximum fällt die Wärmefreisetzungsraten ab, da der Rückstand den effektiven Wärmeeintrag auf die Pyrolysezone der Probe verringert. Das zweite Maximum entsteht, wenn in Folge fortgeschrittener Erwärmung der Probe bis zur rückseitigen Isolation an der Probenrückseite keine Wärme mehr abgeführt und somit die Zersetzung beschleunigt wird. Die Wärmefreisetzungsraten der simulierten Holz-

probe folgt qualitativ dem Verlauf des Experiments. Unterschiede sind vor allem hinsichtlich des niedrigeren, zweiten Maximums zu erkennen. Anhand der Gesamtwärmefreisetzung wird jedoch deutlich, dass unter den Bedingungen im Cone Kalorimeter die Modellparameter sehr gut geeignet sind, die Zersetzung von Holzwerkstoffen zu beschreiben. Unter Berücksichtigung des Dichteunterschiedes zeigt die Gesamtfreisetzungsrates einen nahezu identischen Verlauf.

Die Verteilung der Brandlast in der Simulation des Einfamilienhauses orientiert sich an typischen Brandlastdichten. Die Brandlastdichte beträgt für Wohnräume etwa 300-600 MJ/m² [109]. Tabelle 4.4 listet die für die Brandausbreitung im Einfamilienhaus relevanten Bereiche und deren Fläche, Brandlast und Brandlastdichte in der Simulation auf. Der Anteil der Wand- und Deckenverkleidung an der Brandlast liegt im Durchschnitt bei 50%.

Tabelle 4.4: Fläche, Brandlast und Brandlastdichte der für die Brandausbreitung im Einfamilienhaus relevanten Bereiche in der Simulation.

	Bereich			
	WZ + EB	T _{EG} + T _{OG}	SZ 1	SZ 2
Fläche	33,6 m ²	12,2 m ²	9,2 m ²	11,2 m ²
Brandlast	9000 MJ	5100 MJ	2900 MJ	4300 MJ
Brandlastdichte	268 MJ/m ²	418 MJ/m ²	315 MJ/m ²	384 MJ/m ²

Sonstige Randbedingungen: Die vorzugebenden Randbedingungen der Brandsimulation umfassen die Umgebungsbedingungen und die Ventilationsbedingungen. Das Einfamilienhaus wurde mit der Ausgangstemperatur $T = 295,15$ K initiiert. Die Umgebungstemperatur wurde auf $T = 289,15$ K voreingestellt. Die Ränder des Berechnungsgebiets zu den Seiten und nach oben hin stellen einen offenen Rand dar.

Hinsichtlich der Ventilationsbedingungen wurden die Stellung von Türen und Fenstern gemäß Tabelle 4.2 vorgegeben. Wie in Tabelle 4.2 erläutert ändern sich die Ventilationsbedingungen des Szenarios Einfamilienhaus während des Brandverlaufs. Das Öffnen von Fenstern oder Türen wurde in der Simulation durch eine Geometrieänderung zu fest vorgegebener Zeit mit Hilfe der FDS Funktion "&DEVC" erreicht. [79] Die Zeiten, an denen die Ventilationsbedingungen wechseln, orientieren sich an den Ergebnissen der Brandursachenermittlungen. Die Bezugszeit $t = 0$ s ist der Zeitpunkt, an dem der simulierte Brand im Schlafzimmer SZ 1 in Form des vorgegebenen Matratzenbrands beginnt. Die Tür und das gekippte Fenster des Schlafzimmers SZ 1 öffnen zum Zeitpunkt $t = 269$ s. Ein Fenster des Schlafzimmers SZ 2 öffnet elf Sekunden später zum Zeitpunkt $t = 280$ s. Die Haustür wird zum Zeitpunkt $t = 510$ s geöffnet und verbleibt offen.

4.3 Vergleich von Simulation und Brand

Der mit den genannten Eingabeparametern berechnete Brandverlauf ist in Abbildung 4.11 dargestellt. Die Bilder zeigen den Querschnitt des Einfamilienhauses, aufgenommen von der Längsseite des Hauses. Die Hauseingangstür befindet sich aus dieser Perspektive auf der linken Hausseite, die Terrassentür auf der rechten Seite. Das Treppenhaus grenzt an

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus

die rückseitige Wand. Die Ausgangssituation zur Zeit $t = 0$ s ist im ersten Bild festgehalten. Die schwarzen Quader stellen die Brandlasten der Gruppe Kunststoff dar.

Die Brandausbreitung ist anhand von Isoflächen für Wärmefreisetzungsraten von mehr als 750 kW/m^3 und in Anlehnung an eine Verbrennung mit Flammen skizziert. Zum Zeitpunkt $t = 253$ s entwickelt sich der Brand der Matratze in Schlafzimmer SZ 1 (OG rechts) gemäß der vorgegebenen Wärmefreisetzungsrate. Die Simulation weist durch die Isoflächen über der Matratze auf die Entstehung des Brands hin. Im Folgenden weitet sich der Brand auf die Wände und Decken des Schlafzimmers sowie die weiteren Einrichtungsgegenstände aus. Der Brand verläuft bei gekipptem Fenster und geschlossener Tür leicht unterventiliert. Nach dem Öffnen von Tür und Fenster (bei $t = 269$ s) beschleunigt sich die Brandausbreitung und erfasst das obere Treppenhaus (siehe Bild zum Zeitpunkt $t = 282$ s). Mit Öffnen des Fensters in Schlafzimmer SZ 2 ($t = 280$ s) erhöht sich die Sauerstoffkonzentration. In der Folge breitet sich der Brand auf das gesamte Obergeschoss aus. Das Bild zum Zeitpunkt $t = 345$ s deutet an, dass das Obergeschoss komplett vom Feuer erfasst ist. In der Simulation verbrennt der freigesetzte Brennstoff insbesondere dort, wo er auf sauerstoffreiche Luft trifft. Dies ist im Treppenhaus und an den Fensteröffnungen der Schlafzimmer zu beiden Seiten des Einfamilienhauses der Fall.

In der folgenden Zeit verbleibt das Feuer zunächst im Obergeschoss (siehe Bild zum Zeitpunkt $t = 404$ s). Die Brandlasten werden nach und nach zersetzt, wie andeutungsweise anhand der modellierten Regale in Bild $t = 489$ s ersichtlich. Die Temperaturen im Obergeschoss steigen weiter an und die Heißgasschicht senkt sich langsam. Zum Zeitpunkt $t = 505$ s hat das Feuer bereits die ersten Stufen des unteren Treppenhauses erfasst. Mit Öffnen der Hauseingangstür ($t = 510$ s) und dem Eintreten von Frischluft setzt sich das Feuer im Treppenhaus fest (siehe Bild zum Zeitpunkt $t = 511$ s). Gemäß Bild $t = 520$ s erfolgt die Ausbreitung des Brands in das Wohnzimmer in erster Linie über die Decke sowie die an das untere Treppenhaus angrenzenden Brandlasten der Gruppe Kunststoff. Zum Zeitpunkt $t = 536$ s befindet sich das Erdgeschoss und damit das gesamte Einfamilienhaus im Vollbrand.

Zwischen dem Öffnen der Fenster und Türen im Obergeschoss zum Zeitpunkt $t = 269$ s bzw. $t = 280$ s und dem Öffnen der Hauseingangstür zum Zeitpunkt $t = 510$ s verbleibt das Feuer für etwa 4 Minuten im Obergeschoss. Die Temperaturentwicklung kurz vor dem Öffnen der Hauseingangstür ist aus den beiden Bildern zum Zeitpunkt $t = 480$ s und $t = 510$ s der Abbildung 4.12 ersichtlich. Dargestellt ist die Temperatur in einer Schnittebene durch das Einfamilienhaus, die in Höhe der Hauseingangstür verläuft. Von Bedeutung sind in dieser Schnittebene die Bereiche des Treppenhauses sowie des Erdgeschosses. Die beiden Schlafzimmer SZ 1 und SZ 2 im Obergeschoss liegen außerhalb der Schnittebene.

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus

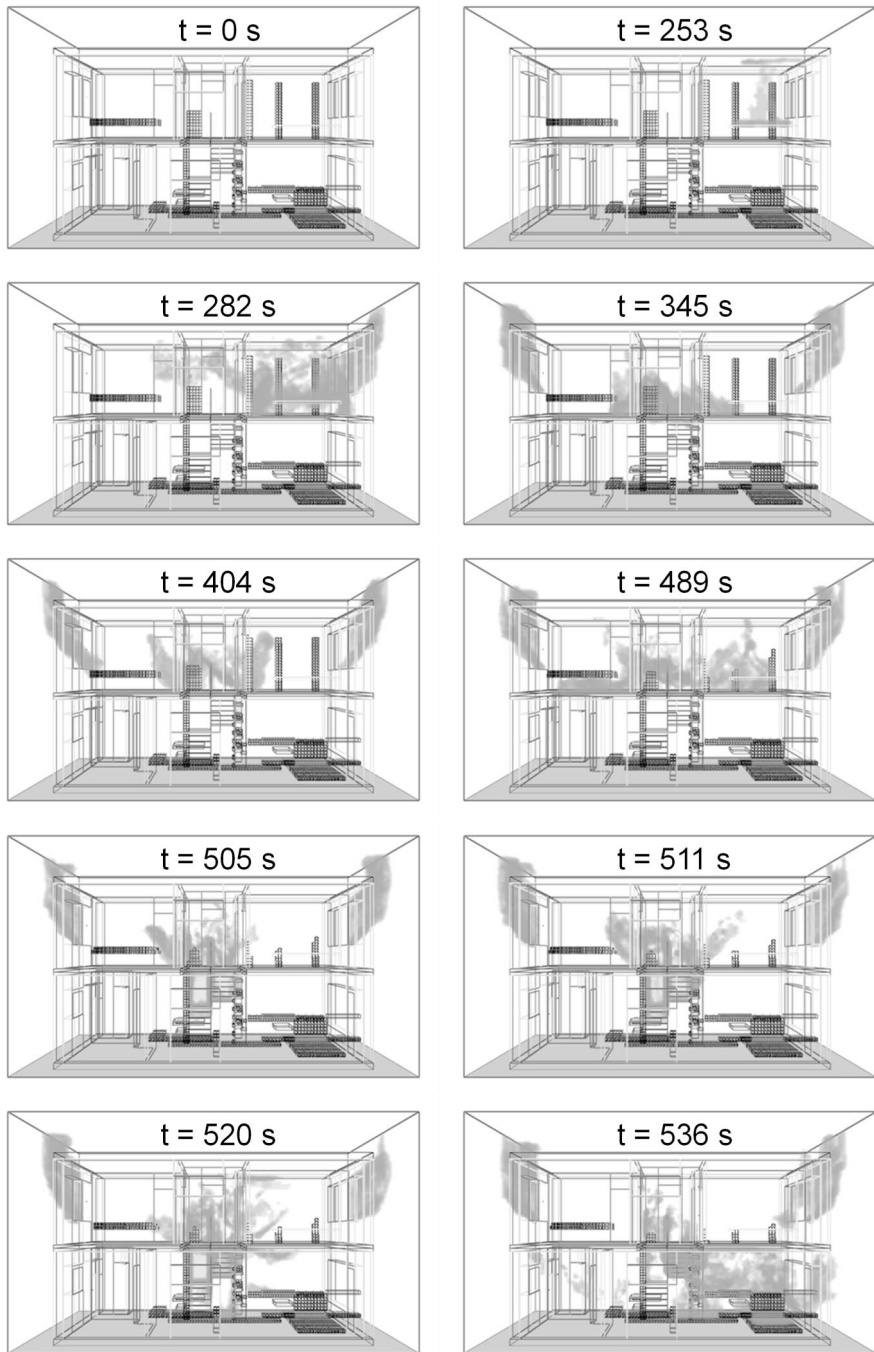


Abbildung 4.11: Berechneter Brandverlauf des Brandszenarios Einfamilienhaus zwischen 0s und 536s dargestellt anhand von Isoflächen für Wärmefreisetzungsraten von mehr als 750 kW/m^2 .

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus

Zum Zeitpunkt $t = 480$ s beginnt die Heißgasschicht etwa 0,5 m über dem Fußboden des Obergeschosses. Die Temperaturen unter der Decke des Obergeschosses erreichen 1000°C . Im Erdgeschoss sind keine substantiellen Temperaturveränderungen erkennbar. 30 Sekunden später zum Zeitpunkt $t = 510$ s, also zum Zeitpunkt des Öffnens der Hauseingangstür, spiegelt das Temperaturprofil die Brandausbreitung bis zum Treppenansatz wieder. Die Temperaturen im Wohnzimmer erscheinen unverändert. Weitere 30 Sekunden später zum Zeitpunkt $t = 540$ s haben die Temperaturen unter der Decke des Wohnzimmers bereits 600°C überschritten. Frische kühlere Luft strömt durch die offene Haustür in das Erdgeschoss. Die Heißgasschicht hat sich bis auf den Boden des Wohnzimmers gesenkt und das Wohnzimmer steht im Vollbrand.

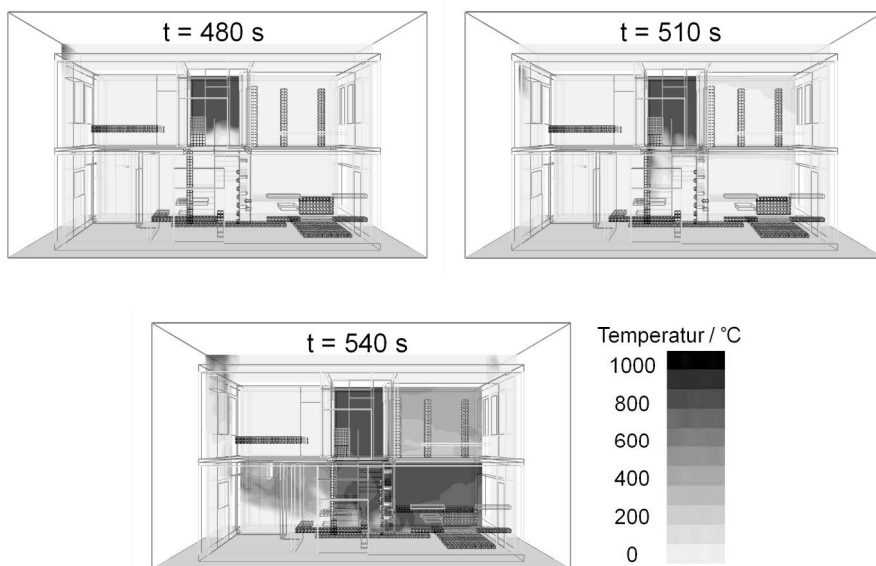


Abbildung 4.12: Temperaturprofil in der Schnittebene durch die Hauseingangstür nach 480 s, 510 s und 540 s.

Abbildung 4.13 zeigt die Geschwindigkeit des Strömungsfeldes in der Schnittebene. Zum Zeitpunkt $t = 480$ s befindet sich das Strömungsfeld im Erdgeschoss nahezu in Ruhe. Leichte Turbulenzen mit Geschwindigkeiten bis zu 3 m/s sind im oberen Treppenhaus vorhanden. Zum Zeitpunkt $t = 510$ s werden in der Schnittebene im Treppenhaus Geschwindigkeiten von bis zu 4 m/s erreicht. Das Wohnzimmer zeigt nach wie vor nur geringe Luftbewegungen. 30 Sekunden, nachdem die Hauseingangstür geöffnet wurde, hat sich die Situation stark verändert. Die höchsten Geschwindigkeiten werden mit bis zu 8 m/s nach wie vor im Bereich des Treppenhauses angezeigt. Im Wohnzimmer treten ebenfalls Turbulenzen mit Geschwindigkeiten von 4 - 6 m/s auf. Die Öffnung der Hauseingangstür führt damit zu einer deutlichen Änderung der Strömungsverhältnisse vor allem im Erdgeschoss. In der Folge wird die Durchmischung von sauerstoffreicher Frischluft und Brennstoff beschleunigt. Dadurch wird die Verbrennungsreaktion in der Gasphase unterstützt, was wiederum die turbulenten Verhältnisse zusätzlich fördert.

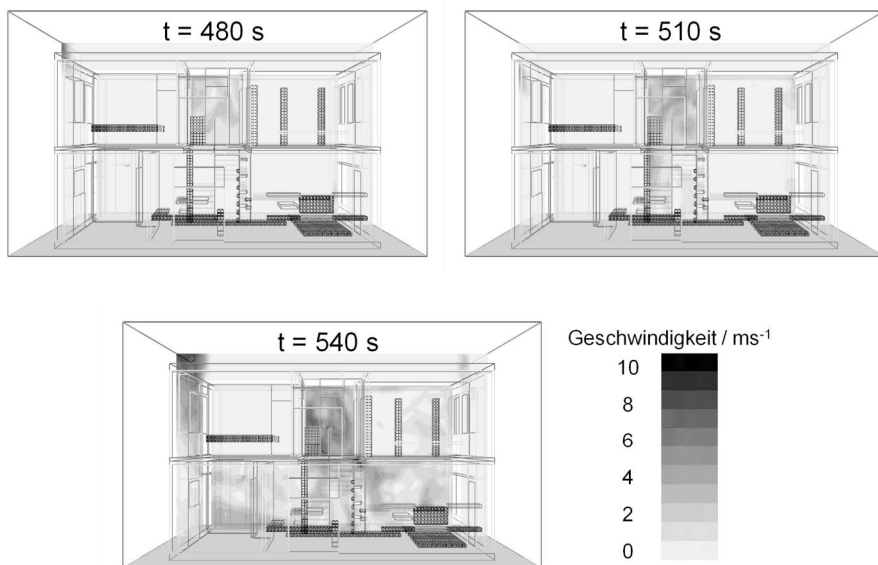


Abbildung 4.13: Geschwindigkeitsprofil in der Schnittebene durch die Hauseingangstür nach 480 s, 510 s und 540 s.

Abbildung 4.14 gibt die Sauerstoffkonzentration im Einfamilienhaus wieder. Bereiche mit einer Konzentration nahe der Ausgangskonzentration (Volumenanteil von 0,21) sind dunkel gekennzeichnet. Eine niedrigere Sauerstoffkonzentration weist darauf hin, dass Sauerstoff durch die Verbrennungsreaktion mit Brennstoff verbraucht wurde. Der Querschnitt zeigt die Querseite des Hauses. Auf der Vorderseite des Querschnitts befindet sich unten links die Hauseingangstür und oben rechts das Schlafzimmer SZ 2. Die Terrassentür liegt auf der Rückseite des Querschnitts, das Treppenhaus grenzt an die linke Außenwand an. Die gezeigte Schnittebene führt durch das Treppenhaus, das Bad im Obergeschoss sowie den Essbereich im Erdgeschoss.

Zum Zeitpunkt $t = 480\text{ s}$ ist im oberen Treppenhaus eine deutliche Grenze zwischen sauerstoffreicher und sauerstoffarmer Zone erkennbar. Die Lage dieser Grenze entspricht in etwa der unteren Grenze der Heißgasschicht (siehe Abbildung 4.12). Zum Zeitpunkt $t = 510\text{ s}$ sind die Übergänge zwischen sauerstoffreichen und sauerstoffarmen Bereichen fließender. Der Übergang befindet sich jedoch nach wie vor in einer ähnlichen Höhe, etwa 0,5 m über dem Fußboden des Obergeschosses. 30 Sekunden nach Öffnen der Hauseingangstür hat sich der Brand im gesamten Essbereich ausgebreitet. Die Sauerstoffkonzentration ist durchweg geringer als in der Ausgangssituation.

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus

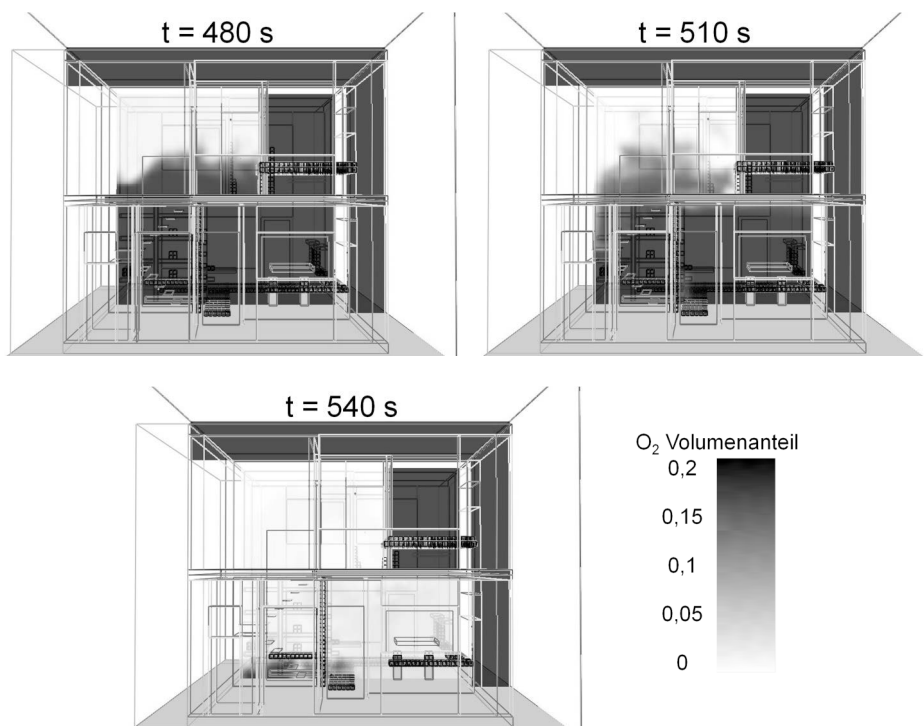


Abbildung 4.14: Sauerstoff-Volumenanteil in der Schnittebene durch das Treppenhaus nach 480 s, 510 s und 540 s.

Das Ergebnis der Simulation des Brandszenarios deutet darauf hin, dass, ausgehend von einem Brand der Matratze in Schlafzimmer SZ 1 im Obergeschoss des Einfamilienhauses, die Ausbreitung des Brands entgegen der Auftriebsrichtung auf das gesamte Haus möglich ist. In der Berechnung liegen zwischen Beginn des Matratzenbrands und dem Vollbrand im Wohnzimmer ca. 540 s (9 min). Ab Öffnung von Tür und Fenster des Schlafzimmers SZ 1 an gerechnet vergehen ca. 270 s (4,5 min) bis zum Vollbrand im Wohnzimmer. Zwischen ersten Flammen- und Raucherscheinungen am gekippten Fenster bis zum Flammenübersprung ins Wohnzimmer dauert es ca. 390 s (6,5 min).

Der zeitliche Verlauf des Brands in der Simulation passt somit zu den wesentlichen Anhaltspunkten aus den Zeugenaussagen der Brandursachenermittlungen zum Brandverlauf (siehe Tabelle 4.1). Aus den dokumentierten Zeitpunkten der Notrufe eines Nachbarn (Zeitpunkt 00:48 h) und eines Bewohners (Zeitpunkt 00:49 h) sowie den Ankunftszeiten der Polizei (Zeitpunkt 00:50 h) und der Feuerwehr (Zeitpunkt 00:54 h) lässt sich eine Zeit von drei bis sechs Minuten für die Brandausbreitung vom Schlafzimmer SZ 1 bis in das Erdgeschoss ableiten. Auch die Berechnung des Brandverlaufs weist wie erläutert auf eine sehr schnelle Brandausbreitung vom Obergeschoss ins Erdgeschoss je nach Bezugszeitpunkt innerhalb von 4,5 bis 6,5 Minuten hin.

Die Berechnung deutet darauf hin, dass insbesondere die Brandlasten im Bereich des Treppenhauses maßgeblich an der Brandausbreitung ins Wohnzimmer beteiligt sind. Dabei

sind für das Brandverhalten der Brandlasten sowohl die brandrelevanten Charakteristika des Materials (insbesondere die Wärme- bzw. Massenfreisetzungsraten) als auch die vorhandene Menge verantwortlich. Die Brandlasten sorgen allgemein dafür, dass ausreichend Brennstoff für die Wärmeentwicklung und Brandausbreitung zur Verfügung steht. Darüber hinaus zeigen die Ergebnisse, dass der Brand in der Simulation seinen Weg in das Wohnzimmer über die Decke und das offene Regal zwischen Treppenhaus und Wohnzimmer gefunden hat.

Die Berechnung zeigt ferner, dass neben der Öffnung der Tür des Schlafzimmers SZ 1 die Öffnung der Hauseingangstür einen großen Einfluss auf den Brand hat. Mit der Öffnung der Hauseingangstür verändert sich das Strömungsbild substantiell. Die zuvor ruhige Strömung im Erdgeschoss zeigt vermehrt turbulente Bereiche. Daneben steigen die Strömungsgeschwindigkeiten gerade im Flur, Wohnzimmer und Essbereich des Erdgeschosses deutlich an. In der Folge beschleunigt sich die Durchmischung von Brennstoff und Sauerstoff. Die Verbrennungsreaktion unterstützt durch Auftriebseffekte die turbulente Strömung zusätzlich.

Ausgangspunkt der Berechnung ist die Vorgabe der Wärmefreisetzungsraten des Matratzenabbrands im Schlafzimmer SZ 1. Diese Annahme hat zur Folge, dass unabhängig von Temperatur und Sauerstoffgehalt im Schlafzimmer SZ 1 Brennstoff in das Strömungsgebiet abgegeben wird. Auch wenn die gesamte Wärmefreisetzung der Matratze mit den tatsächlichen Gegebenheiten übereinstimmt, so kann doch der zeitliche Verlauf der Wärmefreisetzung stark voneinander abweichen. Geht man z.B. von einer Entzündung des Brands durch eine glühende Zigarette oder ähnliches aus, so wurde in Experimenten regelmäßig beobachtet, dass nicht zu einer offenen Flamme sondern vielmehr zu einem Schmelbrand kommt [110-113]. Die Vorgabe der Wärmefreisetzung und damit der Brennstofffreisetzungsraten in der Simulation verhindert detaillierte Aussagen zur Brandentstehung. Auf diese Weise kann, wenn auch nicht der zeitliche Verlauf eines Schmelbrands, so doch die Auswirkung auf die Umgebung im Falle der erneuten Frischluftzufuhr beschrieben werden. Wie in Abbildung 4.11 zum Zeitpunkt $t = 282 \text{ s}$ angedeutet, führt die Veränderung der Ventilationsbedingung zur Durchmischung der unverbrannten Pyrolysegase mit frischer, sauerstoffreicher Luft und letztlich zu einer Durchzündung des teils großräumig verteilten Gemisches.

Grundsätzlich ist die Simulation der Brandentstehung, ausgehend von relativ kleinen Initialzündungen, von großen Unsicherheiten begleitet. Einerseits sind instabile Zustände kurz nach der Entzündung durch große Energiegradienten auf kleinstem Raum gekennzeichnet, was eine modellhafte Beschreibung nahezu unmöglich macht. Andererseits stellt die für die Simulation der Brandentstehung zu wählende Gitterweite eine Schwierigkeit dar. Die für das Brandszenario Einfamilienhaus verwendete Gitterweite von $0,1 \text{ m}$ ist beispielsweise nicht geeignet, um die Entzündung mit kleinen Zündquellen im Bereich weniger Zentimeter und die anschließende Brandausbreitung aufzulösen. Die Vorgabe einer realistischen Wärmefreisetzungsraten zur Beschreibung der Brandentstehung und anfänglichen Brandausbreitung übergeht diese Schwierigkeiten und führt zu einer robusteren Modellbeschreibung mit belastbaren Ergebnissen.

Die Simulation eines komplexen Brandszenarios wie des Einfamilienhauses mittels eines Feldmodells kann jedoch immer nur Anhaltspunkte liefern, in welchen zeitlichen,

räumlichen und energetischen Größenordnungen ein Brand ablaufen kann. Zum einen liegt diese Einschränkung an der "unberechenbaren", komplexen Natur des Feuers selbst. Auch werden sonstige Mechanismen der Brandausbreitung beispielsweise durch Aufschmelzen, Fließen und Tropfen von Brandlasten oder auch der Verlust der statischen Stabilität bis dato nicht berücksichtigt. Zum anderen stellt die modellhafte Beschreibung der Eingangsparameter nach wie vor eine große Herausforderung dar. Während die Transport- und Verbrennungsvorgänge in der Gasphase in gewissen Grenzen exakt beschrieben werden können, ist es insbesondere das Zusammenspiel von Wärmetransport auf brennbare Körper und deren Brennstofffreisetzungsraten in Abhängigkeit von Aufheizrate, Temperatur, etc., die nur mit Hilfe von Annahmen und Vereinfachungen berechnet werden und gewissen Unsicherheiten unterliegen. Darüber hinaus haben geringe Veränderungen der Eingabeparameter große Auswirkungen, was im Rahmen der Parameterstudie im folgenden Unterkapitel gezeigt wird.

4.4 Parameterstudie

Ausgehend von der zuvor ausführlich vorgestellten Berechnung des Brandszenarios Einfamilienhaus wurde im Rahmen einer Parameterstudie der Einfluss verschiedener Eingabeparameter auf den Brandverlauf untersucht. Der Schwerpunkt der Untersuchung liegt auf der Art und Verteilung der Brandlasten im Einfamilienhaus sowie der Ventilationsbedingungen. Tabelle 4.5 gibt einen Überblick über die einzelnen Berechnungen und deren Charakteristika hinsichtlich Brandlast und Ventilation sowie das Ergebnis der maximalen räumlichen Brandausbreitung.

Tabelle 4.5: Übersicht der Berechnungen des Einfamilienhauses und deren Ausprägungen hinsichtlich Brandlast, Ventilation und Brandausbreitung.

Nr.	Brandlast		Ventilation (Öffnung nach t=...)				Brandausbreitung
	Holz	Kunststoff	Fenster SZ 1	Tür SZ 1	Fenster SZ 2	Haustür	
1	1 cm	ja	269 s	269 s	280 s	510 s	Wohnzimmer
2	nur Matratze (M)		269 s	269 s	280 s	510 s	Obergeschoss
3	M + Kunststoff		269 s	269 s	280 s	510 s	Obergeschoss
4	M + Decken		269 s	269 s	280 s	510 s	Obergeschoss
5	M + Wände		269 s	269 s	280 s	510 s	Obergeschoss
6	M+Wände+Decken		269 s	269 s	280 s	510 s	Treppenhaus
7	2 cm	nein	269 s	269 s	280 s	510 s	Treppenhaus
8	2 cm	ja	269 s	269 s	280 s	510 s	Treppenhaus
9	2 cm	ja	363 s	363 s	374 s	604 s	Treppenhaus
10	2 cm	ja,++T _{EG}	363 s	210 s	330 s	450 s	Wohnzimmer

Die Rechnungen Nr. 1 bis Nr. 6 zeigen die Bedeutung und den Einfluss unterschiedlicher Brandlasten und deren räumliche Lage auf das Simulationsergebnis. Rechnung Nr. 2 beinhaltet neben der vorgegebenen Wärmefreisetzungsraten der Matratze keine weiteren

Brandlasten und dient der Einordnung der Ergebnisse. Für die Rechnungen Nr. 3 bis Nr. 6 wurden verschiedene Brandlasten zusätzlich zum vorgegebenen Matratzenbrand mit in die Berechnung aufgenommen. Dazu gehörten die Brandlastgruppe Kunststoff (Nr. 3), die Decken (Nr. 4), die Wände (Nr. 5), Wände und Decken zusammen (Nr. 6) und schließlich die vollständige Simulation mit den Brandlastgruppen Holz und Kunststoff (Nr. 1). Während der Brand sich in Rechnungen Nr. 2 bis Nr. 5 nur in Teilen des Obergeschosses ausbreitete, erreichte der Brand in Simulation Nr. 6 das halbe Treppenhaus und führte in Simulation Nr. 1 schließlich zum Vollbrand des gesamten Hauses.

Abbildung 4.15 fasst die Ergebnisse der Brandsimulationen Nr. 1 bis Nr. 6 zusammen und zeigt die jeweilige Brennstofffreisetzungsrate des gesamten Berechnungsgebietes. Für die Graphen wurde die Brennstofffreisetzungsrate alle 10 s ermittelt und die so erhaltenen Datenpunkte mittels Geraden verbunden. FDS bietet neben der Brennstofffreisetzungsrate auch die Möglichkeit, die gesamte Wärmefreisetzungsrate zu ermitteln. Letztere birgt jedoch den Nachteil, dass Brennstoff, der unverbrannt das Berechnungsgebiet verlässt, nicht berücksichtigt wird, und damit die Strömungsverhältnisse und die geometrischen Bedingungen um das Einfamilienhaus herum einen Einfluss auf die Vergleichsgröße haben.

Wie in Abbildung 4.15 vergrößert dargestellt entspricht der Graph von Berechnung Nr. 2 der vorgegebenen Wärmefreisetzungsrate der Matratze (siehe Abbildung 4.5). Weder die zusätzliche Berücksichtigung der Brandlasten Kunststoff (Nr. 3) noch der Decken (Nr. 4) oder Wände (Nr. 5) verändert den Brandverlauf substantiell. In allen vier Berechnungen (Nr. 2 bis Nr. 5) breitet sich das Feuer nicht über das Schlafzimmer SZ 1 hinaus aus. Während das Feuer in den Berechnungen mit den Brandlasten Kunststoff (Nr. 3) und Decke (Nr. 4) nach 450 s nicht mehr in der Lage ist, relevante Mengen Brennstoffs freizusetzen, dauert der Brand bei Berechnung Nr. 5 unter Berücksichtigung der Wände im Schlafzimmer 100 s länger an. Erst unter Einbeziehung der Wände und der Decken in die Berechnung (Nr. 6) breitet sich der Brand im Obergeschoss und bis in den oberen Teil des Treppenhauses aus. Die Brennstofffreisetzungsrate erreicht ihr Maximum nach 510 s mit einem Wert von 1,72 kg/s. Berechnung Nr. 1, bei der der Brand bis ins Erdgeschoss vordringt, zeigt zum Zeitpunkt $t = 390$ s ein erstes Maximum von 2,13 kg/s und die maximale Brennstofffreisetzung von 3,55 kg/s nach 540 s.

Die Parametervariation der Berechnungen Nr. 1 bis Nr. 6 stellt klar, dass für die Simulation des Brandverlaufs nicht allein die Höhe der Brandlast maßgeblich ist, sondern auch die räumliche Lage und Verteilung von Bedeutung ist. Ausgehend vom Matratzenbrand ist es vor allem die umliegende Wand mit Holzverkleidung, die die Ausbreitung des Brands im Schlafzimmer SZ 1 vorantreibt. Über die Wände, und unterstützt durch die steigenden Temperaturen, breitet sich der Brand in Berechnung Nr. 6 auf die Decken aus. Anhand der Brennstofffreisetzungsrate wird der entscheidende Anteil der Decken für die weitere Brandausbreitung über das Schlafzimmer SZ 1 hinaus deutlich. Bei den voreingestellten Ventilationsbedingungen der Berechnungen Nr. 1 bis Nr. 6 ist es dann erst die Brandlastgruppe Kunststoff, die ein Übergreifen des Brands auf das Erdgeschoss in Berechnung Nr. 1 ermöglicht.

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus

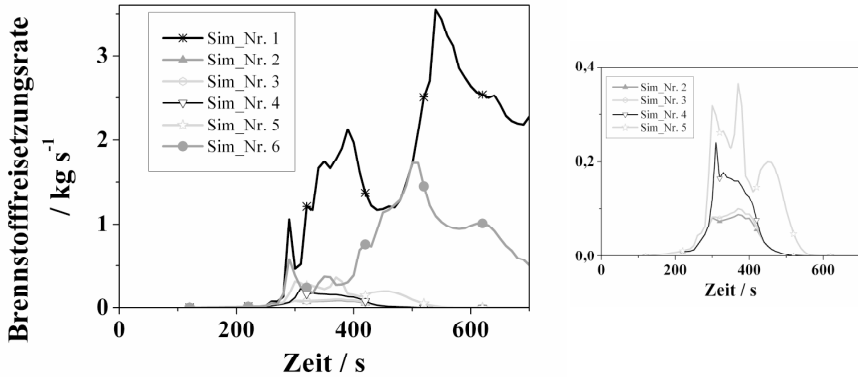


Abbildung 4.15: Brennstofffreisetzungsrates des gesamten Berechnungsgebiets in kg/s der Berechnungen Nr. 1 bis Nr. 6 (links) und vergrößerte Darstellung der Berechnungen Nr. 2 bis Nr. 4..

Die Berechnungen Nr. 7 bis Nr. 10 unterscheiden sich gegenüber Nr. 1 zum einen dadurch, dass die Brandlasten der Gruppe Holz eine Dicke von 2 cm anstelle von 1 cm aufweisen. Abbildung 4.16 zeigt den Vergleich der Wärmefreisetzungsrates und der gesamten Wärmefreisetzung der Brandlastgruppe Holz mit den Dicken 1 cm und 2 cm simuliert im Cone Kalorimeter Szenario bei einer Wärmestrahlung von 50 kW/m^2 . Das erste Maximum der beiden Stoffe ist in Höhe und Zeitpunkt nahezu identisch. In der Folge ist die Wärmefreisetzung der "Holzpaneele" mit der doppelten Dicke von 2 cm zwar verzögert aber insgesamt setzt sie doppelt so viel Wärme frei. Die Berechnungen Nr. 7 bis Nr. 10 weisen daher verglichen mit Nr. 1 eine doppelt so hohe Brandlast der Gruppe Holz auf. Des Weiteren sind in Berechnung Nr. 7 keine Brandlasten der Gruppe Kunststoff vorhanden, in Berechnung Nr. 10 zusätzliche Brandlasten im unteren Treppenhaus eingefügt und in Berechnungen Nr. 9 und Nr. 10 die Ventilationsbedingungen verändert, d.h. die Öffnung der Fenster und Türen erfolgt zu anderen Zeitpunkten. Die Betrachtung der Berechnungen Nr. 1, Nr. 7-10 zielt auf den Einfluss der Brandlastart und der Ventilationsbedingungen ab.

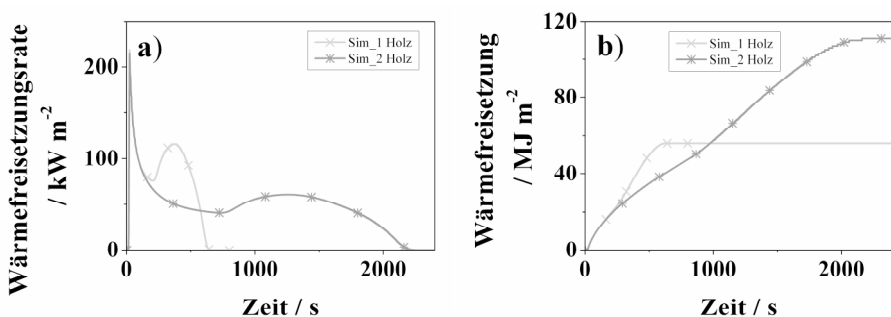


Abbildung 4.16: Berechnete Wärmefreisetzungsrates (4.16a) und Wärmefreisetzung (4.16b) im Cone Kalorimeter Test (Bestrahlungsstärke: 50 kW/m^2) bei variierender Probendicke (Sim_1 Holz: 1 cm; Sim_2 Holz; 2 cm).

Die Abbildungen 4.17 bis 4.19 zeigen das Temperaturprofil der Berechnungen Nr. 1, Nr. 7 und Nr. 8 in der Schnittebene durch das Treppenhaus. Der Querschnitt ist von der Querseite des Einfamilienhauses her mit Blick auf die Hauseingangstür aufgenommen. In Abbildung 4.17 sind die Temperaturen im Treppenhaus zum Zeitpunkt $t = 390$ s dargestellt. Zu diesem Zeitpunkt ist die Tür des Schlafzimmers bereits seit zwei Minuten geöffnet und der Brand hat sich auf das Obergeschoss ausgebreitet. Das Temperaturprofil der drei Berechnungen unterscheidet sich nur unwesentlich. Die Temperaturen an der Decke des Obergeschosses übersteigen 1000°C , im Wohnzimmer ist nahezu keine Temperaturveränderung vorzufinden.

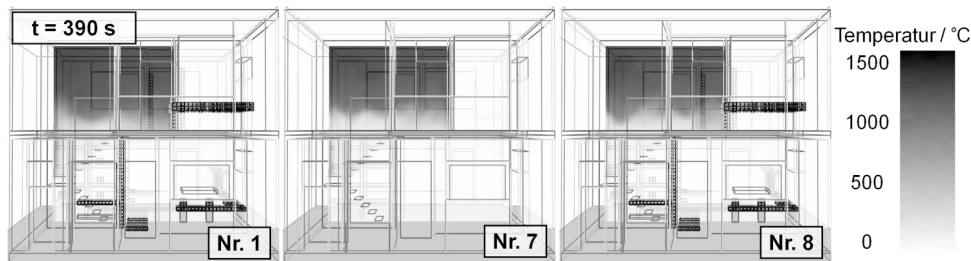


Abbildung 4.17: Temperaturprofil der Berechnungen Nr. 1, Nr. 7 und Nr. 8 in der Schnittebene durch das Treppenhaus des Einfamilienhauses zum Zeitpunkt $t = 390$ s.

Das Temperaturprofil im Treppenhaus zum Zeitpunkt $t = 450$ s ist in Abbildung 4.18 wiedergegeben. Bei allen 3 Berechnungen sind die Temperaturen insgesamt etwas zurückgegangen. Besonders ausgeprägt ist dieser Temperaturrückgang bei Berechnung Nr. 7 gefolgt von Nr. 8. Bei beiden Berechnungen gehen die Temperaturen nicht über 800°C hinaus. Nach wie vor ist die Temperatur im Erdgeschoss nahezu unverändert.

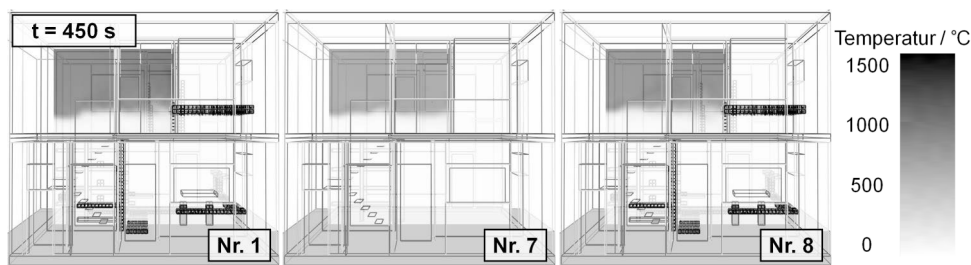


Abbildung 4.18: Temperaturprofil der Berechnungen Nr. 1, Nr. 7 und Nr. 8 in der Schnittebene durch das Treppenhaus des Einfamilienhauses zum Zeitpunkt $t = 450$ s

Weitere 60 Sekunden später zum Zeitpunkt $t = 510$ s zeigen sich deutliche Unterschiede zwischen den Temperaturprofilen, dargestellt in Abbildung 4.19. Während sich in Berechnung Nr. 1 die Temperaturen wieder erhöht haben und der Brand offensichtlich über das Treppenhaus in das Erdgeschoss fortschreitet sind die Temperaturen der beiden anderen Berechnungen deutlich zurückgegangen. Sie erreichen in Berechnung Nr. 7 noch etwa 400°C unter der Decke des Obergeschosses und in Nr. 8 etwa 500°C . Bei beiden Berech-

4 Brandausbreitung in einem Einfamilienhaus

nungen ist der Brand am Abklingen und das Erdgeschoss bleibt von Temperaturerhöhungen verschont.

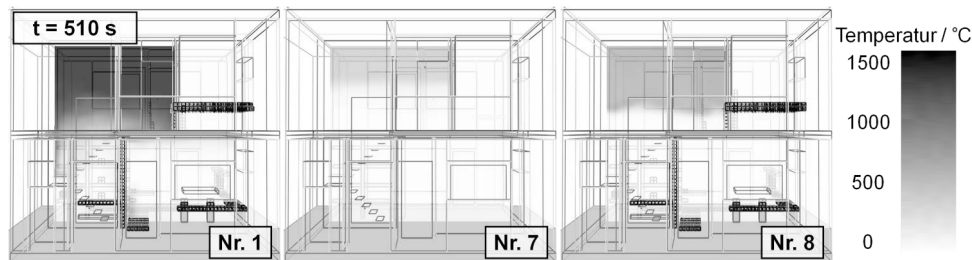


Abbildung 4.19: Temperaturprofil der Berechnungen Nr. 1, Nr. 7 und Nr. 8 in der Schnittebene durch das Treppenhaus des Einfamilienhauses zum Zeitpunkt $t = 510$ s

Die Abbildungen 4.17 bis 4.19 verdeutlichen, dass trotz erheblich erhöhter Gesamtbrandlast (etwa +50%) gegenüber Berechnung Nr. 1 die Brandausbreitung in Nr. 8 geringer ist und der Brand nicht bis ins Erdgeschoss gelangt. Die Veränderung der Dicke der Brandlast Holz hat bei gleichen thermischen Bedingungen eine insgesamt zwar vergrößerte, aber vor allem verzögerte Wärmefreisetzung zur Folge. Bei den gegebenen Ventilationsbedingungen führt dies dazu, dass der Brand zum Zeitpunkt des Öffnens der Hauseingangstür bei $t = 510$ s in Berechnung Nr. 8 soweit zurückgegangen ist, dass auch die Frischluftzufuhr aus dem Erdgeschoss keine weitere Ausbreitung des Brands bewirkt. In Berechnung Nr. 1 entwickelt sich der Brand nach einem leichten Rückgang bei $t = 450$ s bis zur Öffnung der Haustür derart weiter, dass unterstützt durch sauerstoffreiche Luft der Brand auch das Erdgeschoss erfasst.

Anhand der Brennstofffreisetzungsraten der Berechnungen Nr. 1, Nr. 7-10 in Abbildung 4.20 kann dieser Effekt im zeitlichen Verlauf nachvollzogen werden. Für die Berechnungen Nr. 1, Nr. 7 und Nr. 8 verläuft die Brennstofffreisetzungsratenrate etwa bis zum Zeitpunkt $t = 430$ s nahezu parallel. Dabei bewegt sich der Graph der Berechnung Nr. 7 auf einem etwas niedrigeren Niveau, letztlich bedingt durch das Fehlen der Brandlastgruppe Kunststoff. Nach einem Maximum etwa zum Zeitpunkt $t = 390$ s kommt es zu einem Rückgang der Brennstofffreisetzungsraten bei allen drei Berechnungen. Im Gegensatz zu den Berechnungen Nr. 7 und Nr. 8 währt der Rückgang bei Berechnung Nr. 1 nur etwa 50 s. Zum Zeitpunkt $t = 470$ s steigt die Brennstofffreisetzungsratenrate erneut stark an und der Brand erreicht bei $t = 520$ s das Erdgeschoss. In der Folge breitet der Brand sich dort wie gezeigt bis zum Vollbrand aus. Die Brennstofffreisetzungsratenrate der Berechnung Nr. 1 bewegt sich in dieser Zeit zwischen $2,5$ kg/s und $3,55$ kg/s. Zum Zeitpunkt $t = 600$ s bewegt sich die Brennstofffreisetzungsratenrate in Berechnung Nr. 8 im Bereich von $0,5$ kg/s, in Berechnung Nr. 7 ist der Brand verlöscht.

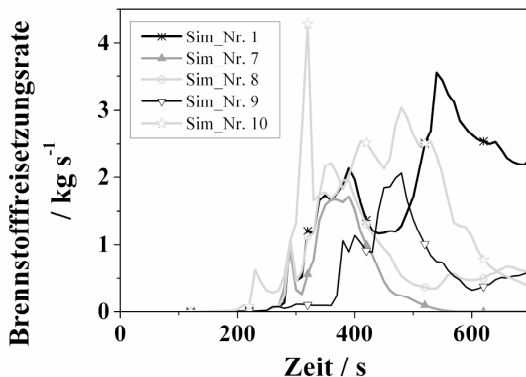


Abbildung 4.20: Brennstofffreisetzungsrate des gesamten Berechnungsgebiets in kg/s der Berechnungen Nr. 1 und Nr. 7 bis Nr. 10.

Die Verzögerung der Öffnungen der Türen und Fenster um 94 s in Berechnung Nr. 9 hat bezüglich der Brennstofffreisetzungsrate und des Brandverlaufs eine ähnliche Verzögerung zur Folge. Bis zum Erreichen des ersten Maximums der Brennstofffreisetzungsrates von Berechnung Nr. 9 vergehen 90 s mehr als bei den Berechnungen Nr. 1, Nr. 7 und Nr. 8. Auch der danach folgende Verlauf der Brennstofffreisetzungsrates ist dem von Berechnung Nr. 8 ähnlich. Zum Zeitpunkt des Öffnens der Hauseingangstür bei $t = 604$ s ist die Brennstofffreisetzungsrates stark zurückgegangen und der Brand schafft es in der Folge nicht, das Erdgeschoss zu erreichen, obwohl die gesamte Brandlast deutlich höher ist (etwa +50%) als bei Berechnung Nr. 1.

In Berechnung Nr. 10 wird die Tür des Schlafzimmers SZ 1 schon nach $t = 210$ s geöffnet. Die Brennstofffreisetzungsrates zeigt in diesem Zeitraum ein kleines Maximum aufgrund des zusätzlichen Sauerstoffangebots. Die Öffnung der Tür führt bereits zu diesem vergleichsweise frühen Zeitpunkt zu einer Ausbreitung des Brands in das Obergeschoss. Über die zusätzlichen Brandlasten im unteren Treppenhaus bahnt sich der Brand zwischen $t = 280$ s und $t = 300$ s seinen Weg ins Erdgeschoss und entwickelt sich dort bis zum Zeitpunkt $t = 315$ s zum Vollbrand. Das Maximum der Brennstofffreisetzungsrates bei $t = 320$ s entsteht kurz nach dem schnellen Ausbreiten des Brands ins Wohnzimmer, wo die sauerstoffreiche Luft mit dem Brennstoff reagiert und viel Wärme auf einmal freigesetzt wird. Nach der Ausbreitung des Brands ins Erdgeschoss ändern die Öffnung der Fenster im Obergeschoss (bei $t = 330$ s bzw. $t = 363$ s) oder der Hauseingangstür (bei $t = 450$ s) nichts Grundlegendes am Brandverlauf. Allein die Brennstofffreisetzungsrates reagiert jeweils mit einem leichten Anstieg. Bis zum Zeitpunkt $t = 600$ s werden der Großteil der Brandlasten verbraucht und der Brand geht langsam zurück.

Der Vergleich der Berechnungen Nr. 1 mit den Berechnungen Nr. 7 bis Nr. 10 zeigt einerseits, dass der Brandverlauf nicht nur von der Höhe und der räumlichen Verteilung der Brandlast abhängig ist, sondern auch deren Charakteristika hinsichtlich der thermischen Zersetzung eine entscheidende Rolle spielen. Obwohl in den Berechnungen Nr. 7 bis Nr. 9 eine ähnlich große oder sogar deutlich erhöhte Brandlast vorliegt, breitet sich der Brand

nicht bis ins Erdgeschoss aus. Hinsichtlich der Ventilationsbedingungen ist festzuhalten, dass die Öffnung der Tür des Schlafzimmers SZ 1 die Brandausbreitung erst ermöglicht und dementsprechend den Beginn der Ausbreitung auf das Obergeschoss vorgibt (Nr. 8 - Nr. 9). Die Öffnung der weiteren Fenster und Türen bringt zusätzlichen Sauerstoff und unterstützt die Verbrennungsreaktionen (Nr. 10). Erst wenn durch die Ventilationsbedingungen zum geeigneten Zeitpunkt und in Abhängigkeit von Art und Verteilung der Brandlast genügend Sauerstoff bereitgestellt wird, kann der Brand sich in das Erdgeschoss ausbreiten. Der kritische Bereich für die Brandausbreitung ist das Treppenhaus und hier insbesondere der Übergang zwischen Fußboden des Obergeschosses und Decke des Erdgeschosses. Ist dieser Bereich durch eine überhöhte Brandlast gekennzeichnet, wird die Brandausbreitung ins Erdgeschoss deutlich erleichtert.

4.5 Zwischenfazit

Die Untersuchungen zum Brandszenario Einfamilienhaus in der Dimension Kubikdekameter basieren auf einem Brandfall, in dessen Folge ein Einfamilienhaus komplett ausbrannte. Der Brand zeichnete sich durch eine sehr schnelle und vom Obergeschoss OG ins Erdgeschoss EG abwärts gerichtete Brandausbreitung aus. In den Brandursachenermittlungen und vor Gericht blieb lange strittig, ob der auffällige Brandverlauf durch einen Unfall (im OG) oder aufgrund von Brandstiftung (u.a. im EG) verursacht wurde.

Die komplementäre Nutzung von Brandsimulation und Polymerwissenschaft zielte darauf ab, ein Szenario für einen möglichen Brandverlauf im Einfamilienhaus zu entwickeln und vor dem Hintergrund der Ermittlungen zum Brandfall zu diskutieren. Dazu wurden zunächst die Charakteristika des Brandszenarios in Anlehnung an die Ergebnisse der Brandursachenermittlungen erarbeitet. Anschließend wurde das Simulationsmodell mit dem Programm FDS erstellt, die Berechnungsergebnisse erläutert und im Rahmen einer Parameterstudie untersucht.

Kern der Simulation des Brandverlaufs bzw. der Brandausbreitung ist das Zusammenspiel von Verbrennungssimulation in der Gasphase und der Berechnung der Brennstofffreisetzung der betroffenen Brandlasten. Während die numerische Beschreibung der Gasphase inklusive Strömungs- und Wärmefreisetzungsberechnung weit entwickelt und validiert ist (sowohl im Allgemeinen als auch bezüglich des Programms FDS), steckt die Validierung der Brennstofffreisetzung im Rahmen des Pyrolysemodells noch in den Anfängen. Daher galt es, die Kenntnisse der Polymerwissenschaft zum Brandverhalten von Werkstoffen einzusetzen, um eine belastbare numerische Beschreibung der Pyrolyse der Brandlasten zu erhalten.

Die Berechnung der Brandentstehung ausgehend von einer kleinen Zündquelle unterliegt bekanntermaßen großen Unsicherheiten. Grund dafür sind die ausgeprägten Energiegradienten und die begrenzte räumliche und zeitliche Auflösung, wodurch kleinste Veränderungen der Umgebungsbedingungen großen Einfluss auf die Berechnung haben. Um den Beginn der Simulation zu stabilisieren, wurde als Brandursache im Schlafzimmer des Obergeschosses die Entzündung des Gegenstandes mit dem größten Brandrisiko, die Matratze, angenommen und eine entsprechende Wärmefreisetzung vorgegeben.

Die sonstigen Ventilationsbedingungen und die Verteilung der Brandlasten wurden in Anlehnung an die in den vorliegenden Gutachten beschriebenen Begebenheiten im Einfamilienhaus vorgegeben. Die Hauptbrandlasten bestanden aus der umfassenden Holzverkleidung der Decken und Wände sowie der sonstigen, im Überfluss vorhandenen Einrichtungsgegenstände und wurden in der Simulation vereinfachend in Holz und Kunststoff unterteilt. Die numerische Beschreibung der Brandlasten wurde hinsichtlich des Verlaufes der entsprechenden Wärmefreisetzungsrate anhand von Brandversuchen im Cone Kalorimeter validiert.

In dem Simulationsergebnis des Brandszenarios Einfamilienhaus breitet sich der Brand ausgehend von der Brandquelle in einem Schlafzimmer des Obergeschosses entgegen der Auftriebsrichtung auf das gesamte Haus aus. Dieses Szenario der Brandausbreitung ohne Brandstiftung entspricht der zu diesem Brandfall gefällten Entscheidung des Gerichts. Darüber hinaus stimmen die Zeiten der Brandausbreitung in der Simulation mit den Anhaltspunkten des Brandverlaufs aus den Brandursachenermittlungen überein: Zwischen Beginn des Matratzenbrands und dem Vollbrand im Wohnzimmer liegen in den Berechnungen etwa 9 Minuten, ab Öffnung von Tür und Fenster des Schlafzimmers im Obergeschoss gerechnet, dauert es 4,5 Minuten bis zur Brandausbreitung ins Erdgeschoss.

Die durchgeführte Parametervariation zeigte den Einfluss der Ventilationsbedingungen und der Art und Verteilung der Brandlast auf das Simulationsergebnis. Hinsichtlich der Ventilationsbedingungen kommt der Öffnung der Haustür eine besondere Bedeutung zu, da in der Folge die Strömungsbedingungen im Haus stark verändert werden und zusätzlicher Sauerstoff eingebracht wird. Für die Brandausbreitung ins Erdgeschoss spielen die Brandlasten im Treppenhaus und am Übergang zum Wohnzimmer (offenes Regal) eine wichtige Rolle, da dies der direkte Weg für das Feuer ins Erdgeschoss ist. Die Gesamtmenge der Brandlast alleine ist nicht entscheidend für die Brandausbreitung. Die Verdoppelung der Dicke der Brandlastgruppe Holz führte nicht unbedingt zu einem Übergreifen des Brands auf das Erdgeschoss. Vielmehr kommt es auf eine zur Ventilation passende Wärmefreisetzungsrate der Brandlasten an.

Die Untersuchungen haben gezeigt, dass durch die komplementäre Nutzung von Brandsimulation und Kenntnissen zum Brandverhalten von Werkstoffen aus der Polymerwissenschaft eine belastbare Berechnung des Brandszenarios erreicht werden kann. Damit ist es möglich, insbesondere in schwierigen Fällen, einen wertvollen Beitrag zur Brandursachenermittlung zu leisten. Zusätzlich lassen sich Einflüsse der Umgebungsbedingungen durch eine gezielte Parametervariation untersuchen und so besondere Brandrisiken eines Szenarios herausarbeiten.

5 Wärmefreisetzungsrate im Single Burning Item Test

Das zweite Beispiel zur komplementären Nutzung von Brandsimulation und Polymerwissenschaft in der Dimension Kubikmeter behandelt das Brandverhalten im Single Burning Item (SBI) Test. Nachdem im vorangegangenen Kapitel gezeigt wurde, welche grundlegende Einflüsse die Art und räumliche Verteilung von Brandlasten auf die berechnete Brandausbreitung in dem komplexen Brandszenario Einfamilienhaus hat, wird in diesem Kapitel der Frage nachgegangen, welche Potentiale und Herausforderungen Brandsimulationsmodelle bieten, wenn es um das konkrete Brandverhalten eines Werkstoffs in einem Szenario geht. Unter dem Brandverhalten wird dabei allgemein das Verhalten eines Materials verstanden, mit dem es infolge seiner Zersetzung unter festgelegten Bedingungen zum Brandgeschehen und damit zur Wärmefreisetzung beiträgt. [8] Im Folgenden werden dazu zunächst die Charakteristika des Brandszenarios SBI Test genauer beleuchtet. Anschließend wird der Aufbau des Simulationsmodells vorgestellt, die Ergebnisse von Simulation und Experiment miteinander verglichen und anhand einer Parameterstudie die Sensitivität der Berechnungen hinsichtlich ausgewählter Eingabeparameter diskutiert.

5.1 Charakteristika des Brandszenarios

Der SBI Test dient in erster Linie der Klassifizierung des Brandverhaltens von Baustoffen im Rahmen des Euroclass Systems. Der gesamte Testraum mit den normgerechten Abmessungen ($L \times B \times H$) $3,0 \text{ m} (\pm 0,05 \text{ m}) \times 3,0 \text{ m} (\pm 0,05 \text{ m}) \times 2,4 \text{ m} (\pm 0,05 \text{ m})$ umfasst etwa 22 m^3 . Der Probekörper besteht aus zwei gleichhohen (Höhe: $1,5 \text{ m}$) aber unterschiedlich breiten (Breite: $0,495 \text{ m}$ und $1,0 \text{ m}$) Wandteilen, die im 90° Winkel zueinander aufgestellt werden. Die gesamte Probenfläche beträgt damit $2,25 \text{ m}^2$.



Abbildung 5.1: Bild des SBI Probenwagens mit laufendem Brenner (links) und Nahaufnahme der Diffusionsflamme des Brenners (rechts).

Das Prüfverfahren ist darauf angelegt, unter definierten Bedingungen das Brandverhalten von Baustoffen in einem Brandszenario zu beurteilen, welches dem eines einzelnen brennenden Objektes entspricht. Dieses brennende Objekt, das in der Realität beispielsweise ein brennender Papierkorb sein könnte, wird am Fuß der Probenecke platziert. Der SBI Test gehört zu den Brandversuchen im natürlichen Maßstab. Von der Größenordnung her ist der SBI Test zwischen dem Room-Corner-Test [114], einem ISO-Brandversuch im großen Maßstab, und dem Brandschachttest [115], einem ehemaligen DIN-Brandversuch im kleinen Maßstab, als Brandversuch im mittleren Maßstab einzuordnen.

Das einzelne brennende Objekt wird im SBI Test durch einen Sandbettbrenner repräsentiert. Dieser wird mit Propan betrieben und erzeugt eine Wärmeleistung von etwa 30 (± 2) kW, welche über den Massenstrom des Propangases geregelt wird. Setzt man den unteren Heizwert von Propan von 46,36 MJ/kg an, so wird ein Propangasstrom von etwa 0,65 g/s benötigt. Der Brenner produziert eine Diffusionsflamme mit Flammenhöhen zwischen 0,5 m und 0,7 m. Abbildung 5.1 zeigt auf der linken Seite den Probenwagen mit dem laufenden Brenner und rechts eine Nahaufnahme der Diffusionsflamme des Brenners.

Die Wärmeübertragung auf die Probekörper findet durch Wärmestrahlung und Konvektion statt. Der Anteil der Wärmestrahlung am Wärmetransport einer Propanflamme wird in der Literatur mit Werten zwischen 3 % und 33 % bestimmt [116, 117, 118]. Dabei zeigen die Untersuchungen, dass der Strahlungsanteil von der Austrittsgeschwindigkeit des Propans abhängig ist und der Anteil mit steigender Geschwindigkeit sinkt. Markstein bestimmte den Strahlungsanteil von turbulenten Diffusionsflammen und fand Werte zwischen 17 % und 25 % [117].

Untersuchungen im Rahmen einer Round Robin Studie an mehreren Instituten in Europa haben ergeben, dass der maximale Wärmestrom auf die Probe etwa bei 55 (± 4) kW/m² liegt. [119] Die mit diesem Wärmestrom belastete Probenfläche ist relativ klein (<150 cm² je Probekörper), beschränkt sich auf den Bereich direkt um die Brennerflamme und ist annähernd symmetrisch auf beide Probekörper verteilt. Wie eigene Aufnahmen mit einer Infrarot Kamera der Kalzium-Silikat-Platten kurz nach Verlöschen des Brenners in Abbildung 5.2 zeigen, ist die Wärmebelastung der Probe stark lokal begrenzt und nimmt sehr schnell mit der Entfernung zur Brennerflamme ab.



Abbildung 5.2: Aufnahme mit der Infrarot Kamera der Kalzium-Silikat-Platten auf dem SBI Probenwagen kurz nach Verlöschen der Brennerflamme.

5 Wärmefreisetzungsrate im SBI Test

Die maximalen Temperaturen auf der Probenoberfläche infolge des Wärmestroms des Brenners sind abhängig von den Eigenschaften der Proben und erreichen Werte von über 600 °C [119]. Die Temperaturen in der Gasphase wurden in einem eigenen Versuchsaufbau an 19 Punkten bei laufendem Brenner gemessen. Die Messstellen lagen 1 cm vor der Kalzium-Silikat-Platte. Der Brenner wurde nach $t = 1300$ s ausgeschaltet und der Versuch bei zwei unterschiedlichen Volumenströmen von $0,5 \text{ m}^3/\text{s}$ und $0,65 \text{ m}^3/\text{s}$ durchgeführt. Abbildung 5.3 zeigt die Lage der Messstellen und gibt die durchschnittliche Temperatur gemessen zwischen $t = 1000$ s und $t = 1200$ s des Versuchs wieder. Dunkelgrau hinterlegt sind die Messwerte bei einem Volumenstrom von $0,5 \text{ m}^3/\text{s}$ und hellgrau hinterlegt die Werte bei einem Volumenstrom von $0,65 \text{ m}^3/\text{s}$. Die durchschnittlichen Temperaturen der langen Proben-seite (links) liegen durchweg zwischen 9°C und 36°C höher als die der kurzen Proben-seite (rechts) und weisen auf eine geringfügige Asymmetrie der Strömungsverhältnisse hin. Dieser Effekt scheint bei höherem Volumenstrom ausgeprägter zu sein. Auch das Strömungsfeld im Bereich der Messstellen Nr. 3, Nr. 8 und Nr. 13 in der Ecke wird durch den Volumenstrom leicht verändert. Die Messstellen Nr. 3 und insbesondere Nr. 8 zeigen bei höherem Volumenstrom höhere Temperaturen an. Die veränderte Strömung führt offensichtlich dazu, dass die Flamme weiter in die Ecke gedrängt wird. In Höhe der Messstelle Nr. 13 wird dieser Effekt umgedreht.

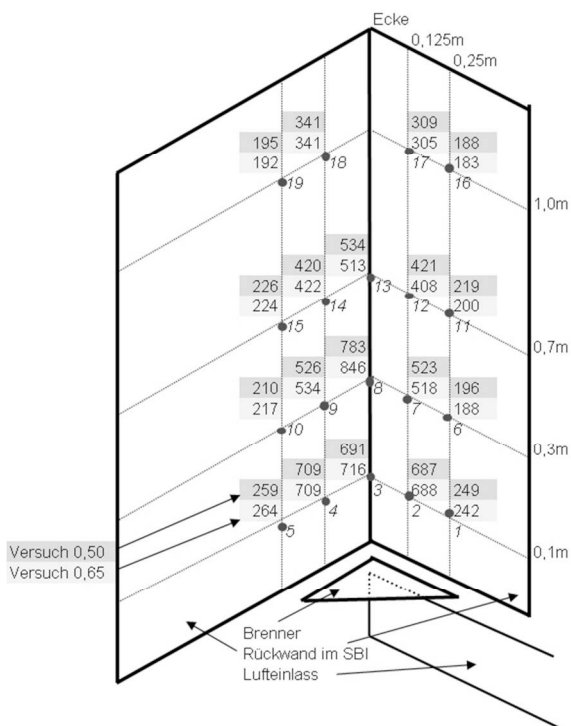


Abbildung 5.3: Temperaturprofil in °C über dem SBI-Brenner etwa 1 cm vor der Kalzium-Silikat-Platte gemessen bei Volumenströmen im Abzug von $0,5 \text{ m}^3/\text{s}$ und $0,65 \text{ m}^3/\text{s}$.

Die Schlussfolgerungen aus Abbildung 5.3 über die Charakteristika des Strömungsfeldes der verwendeten SBI Apparatur sind jedoch unter Berücksichtigung der Messunsicherheiten zu bewerten. Wie in Abbildung 5.4 anhand der Messungen an den Messstellen Nr. 6 bis Nr. 10 deutlich wird, unterliegen die Temperaturmessungen großen Schwankungen, die an einzelnen Messstellen bis zu $\pm 70^\circ\text{C}$ betragen. Aufgrund der zwar turbulenten aber vor allem räumlich begrenzten Diffusionsflamme des Brenners ziehen darüber hinaus geringe Abweichungen in der wandnahen Position der Thermoelemente deutliche Unterschiede nach sich.

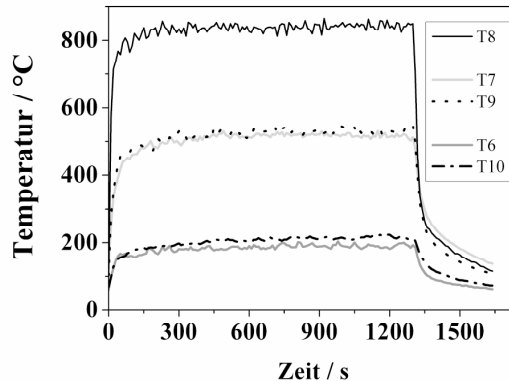


Abbildung 5.4: Gemessene Temperaturen an den Messstellen Nr. 6 bis Nr. 10 (30 cm über der Probenunterkante) über der Zeit bei einem Volumenstrom von $0,65 \text{ m}^3/\text{s}$.

Die Messunsicherheit von Brandtests steht zunehmend im Fokus von Untersuchungen. [120] Die grundsätzlichen Prinzipien bezüglich Bewertung und Darstellung von Messunsicherheiten sind im ISO Leitfadens "Guide to the Expression of Uncertainty in Measurement" (GUM) bzw. der deutschen Vornorm DIN V ENV 13005 zusammengestellt. Die Anpassung der Vorgaben auf die jeweiligen Tests stellt insbesondere für Brandversuche in mittelgroßen und großen Brandszenarien eine Herausforderung dar. Untersuchungen zur theoretischen Messunsicherheit hinsichtlich der Wärmefreisetzungsrate im SBI Test, durchgeführt von SP Swedish National Testing and Research Institute, ergaben eine relative, kombinierte Messunsicherheit von 10 % bis 13,5 %. Die Untersuchungen zeigten, dass die Messunsicherheit mit kleiner werdender Wärmefreisetzungsrate größer wird und hauptsächlich durch die Unsicherheit bei der Bestimmung der Sauerstoffkonzentration im Abzug der SBI Apparatur bestimmt ist. [121]

Die Größe des Brandszenarios SBI und der Probengeometrie führt bei brennbaren Werkstoffen und entsprechender Masse schnell zu einer für Versuchsaufbau und Umgebung unerwünschten Brandintensität. Die Klassifizierung im Brandszenario des SBI Tests erfolgt nur für Baustoffe, die höchstens einen hinnehmbaren Beitrag zum Brand leisten und demzufolge nach Euroclass D klassifiziert werden. Schwierig ist die Prüfung stark tropfender oder sehr instabiler Proben, da die Gefahr besteht, dass u.a. Teile auf den Brenner fallen und die Prüfapparatur beschädigen.

5 Wärmefreisetzungsrates im SBI Test

Für die Vergleichsmessungen im SBI Test wurde ein polymerer Baustoff ausgewählt, der als Dämmelement Verwendung findet. Es handelt sich um einen Polyurethan/ Polyisocyanurat PUR/PIR Hartschaum der Marke puren SE-B1, im folgenden PUR genannt, hergestellt von der puren GmbH. Der Werkstoff hat eine Dicke von 20 mm, eine Dichte von 30 kg/m^3 , bleibt auch bei hohen Temperaturen formstabil und schmilzt nicht. Ferner ist der Werkstoff PUR flammgeschützt und gehört nach DIN 4102 der Brandklasse B1 an. Für die Messungen wurde der Werkstoff mit Hilfe von Halteschrauben bzw. mittels eines Klebers ohne Luftspalt auf die Trägerplatten aus Kalzium-Silikat montiert. Abbildung 5.5 zeigt die Probenkonfiguration vor, während und gegen Ende des SBI Versuchs. Aus dem rechten Bild ist zu erkennen, dass in unmittelbarer Umgebung und in der Ecke über der Brennerflamme der Werkstoff fast vollständig verbrannt ist. Die thermische Zersetzung begrenzt sich jedoch auf die von der Brennerflamme erfassten Bereiche. Eine horizontale Brandausbreitung fand nicht statt.



Abbildung 5.5: PUR Hartschaum Proben vor (links), während (Mitte) und am Ende (rechts) der Prüfung im SBI Test.

Die Versuchsauswertung des SBI Tests berücksichtigt die Wärmefreisetzung, die Flammenausbreitung, die Geschwindigkeit der Brandausbreitung in Form der FIGRA Kennzahl, die Rauchentwicklung (SMOGRA) sowie das Verhalten der Probekörper hinsichtlich Abtropfen oder Abfallen brennender Teile. Im Rahmen des Vergleichs von Simulation und Experiment beschränkt sich die vorliegende Arbeit auf die thermische Zersetzung des Werkstoffs und die daraus resultierende Wärmefreisetzungsrates. Abbildung 5.6 zeigt die Wärmefreisetzungsrates von drei SBI Prüfungen des Werkstoffs PUR. Die Wärmefreisetzungsrates des Werkstoffs PUR steigt direkt nach Anschalten des Brenners stark an und erreicht Maxima von 9 kW bis 13,5 kW zum Zeitpunkt $12 \text{ s} < t < 24 \text{ s}$. Nach dem Maximum fällt die Wärmefreisetzungsrates stetig ab. Zum Zeitpunkt $t = 230 \text{ s}$ hat sie ein Plateau mit einem mittleren Wert von 1,5 kW erreicht. Die gesamte Wärmefreisetzung des Versuchs Nr. 1 zwischen $0 \text{ s} < t < 300 \text{ s}$ beträgt 1,2 MJ, der $\text{FIGRA}_{0,2\text{MJ}}$ ist 344 W/s und der $\text{FIGRA}_{0,4\text{MJ}}$ beträgt 147 W/s.

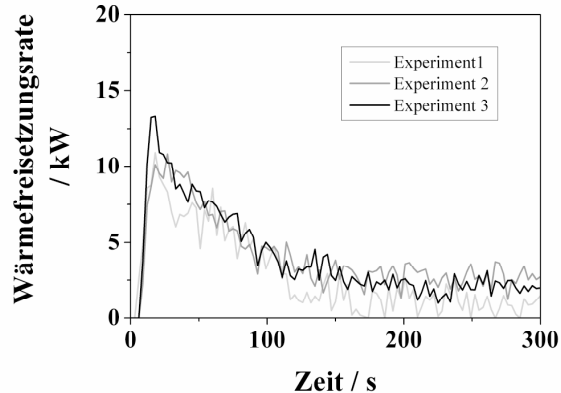


Abbildung 5.6: Wärmefreisetzungsrate von drei SBI Prüfungen des Werkstoffs PUR.

Der SBI Test ist nicht zuletzt aufgrund seiner Dimension und dem damit verbundenen Prüfaufwand ein interessantes Gebiet zur Entwicklung und Anwendung von Modellen und numerischen Simulationen. Im Mittelpunkt stehen regelmäßig die Zielgrößen, welche auch die Klassifizierung maßgeblich beeinflussen. In erster Linie ist dies die Kennzahl zur Beschreibung der Geschwindigkeit der Brandausbreitung FIGRA (engl.: fire growth rate). Hakkarainen [122] beispielsweise korreliert den FIGRA-Wert und damit die SBI Klassifizierung eines Werkstoffs mit Kennzahlen zur Wärmefreisetzung und Entzündung des Werkstoffs im Cone Kalorimeter Szenario.

Hinsichtlich der Simulation der Wärmefreisetzungsrate im SBI Test wurden in der Literatur unterschiedliche Ansätze verfolgt. Hakkarainen und Kokkala [123] entwickelten ein eindimensionales Brandausbreitungsmodell zur Berechnung der Wärmefreisetzungsrate im SBI basierend auf den Ergebnissen von Versuchen im Cone Kalorimeter des jeweiligen Werkstoffs. Ebenfalls auf Cone Kalorimeter Versuchen basiert das Modell von Messerschmidt, van Hees und Wickström [124], welches auf die Arbeiten von Wickström und Göransson zurückgeht [125]. Dieses Modell gibt die empirisch ermittelte Probenfläche über der Zeit vor, die vom Feuer erfasst wird. Die Wärmefreisetzungsrate wird mit Hilfe der Annahme berechnet, dass der Werkstoff pro Fläche in gleicher Weise Wärme freisetzt wie im Cone Kalorimeter Szenario.

North et al [126] bilden in ihrem Ansatz zunächst die Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs im Cone Kalorimeter mit einer Exponentialfunktion ab. Mit Hilfe eines analytischen Modells zur vertikalen Brandausbreitung im SBI Szenario wird die Ausbreitungsgeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Wärmefreisetzung der Probe hergeleitet. Über die Definition der Bedingungen für beschleunigende und zurückgehende Brandausbreitung kann so die Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs im SBI Test analytisch berechnet werden.

Feldmodelle werden im Umfeld des Brandszenarios SBI zum einen zur Abschätzung der thermischen Randbedingungen der Probekörper und der zugehörigen Einflussgrößen verwendet. [119, 127] Grundlegende Arbeiten zur Vergleichbarkeit von Simulation und Experiment im Brandszenario SBI Test finden sich in [64, 128]. Zum anderen wird mit

Feldmodellen unter Verwendung eines Pyrolysemodells die Wärmefreisetzungsrates von Werkstoffen im SBI Test berechnet. In Anlehnung an die analytischen Modelle werden dabei oft die Eingabeparameter durch iteratives Angleichen der Simulation an die Ergebnisse aus dem Cone Kalorimeter Test bestimmt. [130] Nur vereinzelt werden SBI Simulationen ausgehend von den physikalischen Eigenschaften der Werkstoffe durchgeführt [131]. Die Orientierung an den Werkstoffeigenschaften wird auch im vorliegenden Kapitel verfolgt. Der Aufbau des Simulationsmodells inklusive der Eingabeparameter und Randbedingungen wird im folgenden Abschnitt vorgestellt.

5.2 Aufbau des Simulationsmodells

Die Simulationen des Brandszenarios SBI Test wurden mit dem Programm FDS, Version 5.4.3 - SVN 5210, durchgeführt. Die Geometrie des Modells basiert auf den Ausführungen der entsprechenden Norm. An den Stellen, an denen die Norm nur Toleranzen vorgibt, wurden die tatsächlichen Ausprägungen des SBI Prüfstandes an der Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung übernommen. Im Folgenden werden Geometrie und Diskretisierung des Simulationsmodells sowie die Eingabeparameter und Randbedingungen erläutert.

5.2.1 Geometrie und Diskretisierung

Abbildung 5.7 zeigt das mit FDS erstellte Modell des SBI Prüfraumes. Auf der linken Seite ist der äußere Umriss der Geometrie mit dem zugrunde liegenden Gitter in den drei Raumebenen dargestellt. Die Abmessungen des Prüfraumes betragen ($L \times B \times H$) $3 \text{ m} \times 3 \text{ m} \times 2,4 \text{ m}$, die Aufbauten des Abzuges sind insgesamt $1,6 \text{ m}$ breit, $1,6 \text{ m}$ hoch und an der längsten Stelle $4,9 \text{ m}$ lang. Die gewählte Gitterweite betrug $0,05 \text{ m}$, d.h. das gesamte Berechnungsgebiet umfasste etwas mehr als 192.000 Zellen.

Auf der rechten Seite in Abbildung 5.7 ist der Probenwagen mit den im 90° Winkel zueinander stehenden Probekörpern (schwarz) und dem darunter befindlichen Lufteinlass des Prüfraumes zu sehen. In der von den Probekörpern geformten Ecke ist der Sandbettbrenner platziert. Der Brenner hat, bedingt durch die Tatsache, dass in FDS nur strukturierte orthogonale Gitter verwendet werden, eine Grundfläche von $0,02 \text{ m}^2$, wobei die längste Seite eine treppenartige Form aufweist. Die Entfernung des Brenners von der Probenunterkante beträgt $0,05 \text{ m}$. Über dem Probenwagen befindet sich der die Strömung leitende Rahmen (dunkelgrau).

Die in Abbildung 5.7 gezeigte Geometrie wurde für die Bewertung der Simulation hinsichtlich des Strömungsfeldes und der Temperaturen im Vergleich zum Prüfzenario verwendet. Simulationen mit einem auf den Probenwagen und den ersten Abschnitt des Abzuges verkleinerten Berechnungsgebiet (siehe Abbildung 5.8) zeigen keine substantiellen Abweichungen. Deshalb beschränken sich die weiteren Berechnungen zu Wärmefreisetzungsrates und Parametervariationen auf die Geometrie des Probenwagens, dessen offene Seiten als offene Randbedingung definiert wurden. Das verkleinerte Rechenggebiet wurde ebenfalls mit einer Gitterweite von $0,05 \text{ m}$ und insgesamt 41.000 Zellen diskretisiert.

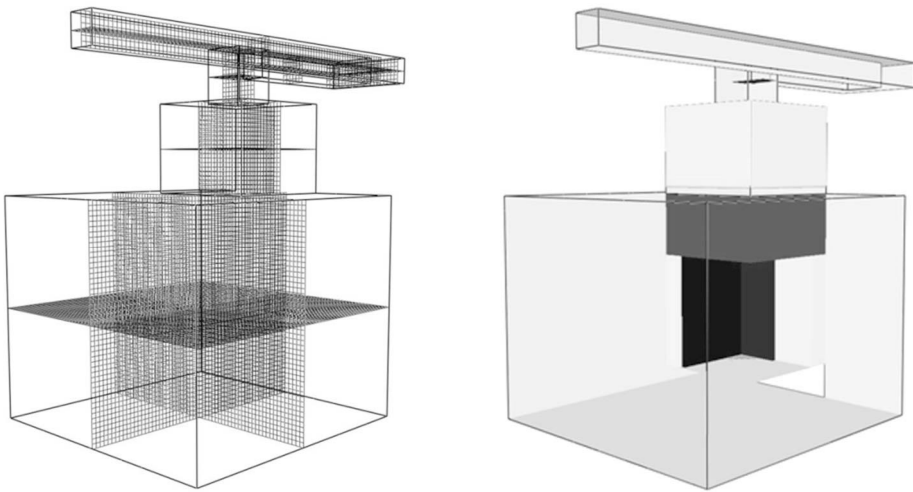


Abbildung 5.7: Geometrie und Rechengitter der Simulationen des Brandszenarios SBI Test mit dem Programm FDS.

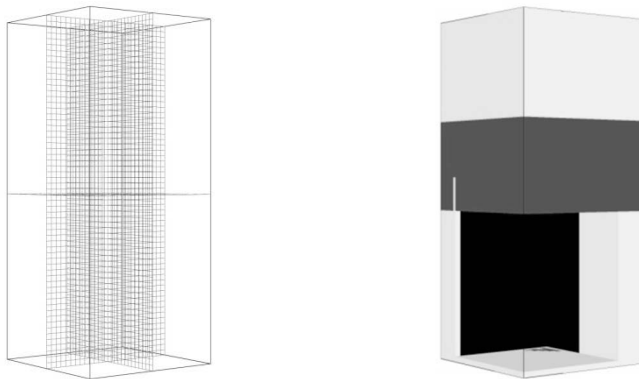


Abbildung 5.8: Verkleinerte Geometrie und Rechengitter der Simulationen des Brandszenarios SBI Test mit dem Programm FDS.

Die FDS Berechnungen basieren auf dem LES Turbulenzmodell in der FDS Ausgangskonfiguration mit der Smagorinsky Konstanten $C_s=0,2$, der turbulenten Prandtl Zahl $Pr_t=0,5$ und der turbulenten Schmidt Zahl $Sc_t=0,5$. Der anfängliche, vom Programm berechnete und variabel gestaltete Zeitschritt beträgt $0,045$ s. Das eindimensionale Pyrolysemodell basiert auf einer Unterteilung der Probekörper in Dickenrichtung in Zellen der Dicke $0,00007$ m.

5.2.2 Eingabeparameter und Randbedingungen

Die für die Berechnungen zu definierenden Eingabeparameter beziehen sich in erster Linie auf die Gasphase und die globale Verbrennungsreaktion, den SBI Brenner und die Eigenschaften der Probekörper im Rahmen des Pyrolysemodells. Darüber hinaus sind die Um-

gebungsbedingungen sowie die Randbedingungen am Ein- und Auslass zur Definition des Strömungsfeldes vorzugeben.

Gasphase/ Verbrennungsreaktion: Für die Simulation des Brandszenarios SBI Test wurde in Anbetracht der Vergleichsversuche am Werkstoff PUR die globale Verbrennungsreaktion von FDS für Polyurethan definiert. Die verwendete Reaktionsgleichung für die vollständige stöchiometrische Verbrennung ist der Gleichung (4-1) zu entnehmen. Das entsprechende Diagramm des Mischungsbruchs Z und der zugehörigen Massenanteile des Brennstoffs Y , des Sauerstoffs O_2 , des Stickstoffs N_2 , des Kohlendioxids CO_2 , des Wassers H_2O und des Kohlenstoffs C entspricht Abbildung 4.6. Die Verbrennungswärme des Brennstoffs beträgt mit der Polyurethan Reaktion 19,043 MJ/kg. Der voreingestellte Anteil der Wärmestrahlung am Wärmetransport in der Gasphase ist in Anlehnung an Markstein [117] auf 20 % festgelegt.

Zündquelle SBI Brenner: Der Sandbettbrenner des SBI Tests wird mit Propan und mit einer Wärmefreisetzung von etwa 30 kW betrieben. In den Simulationen wurde die Brennerleistung auf 30 kW festgesetzt. Die Definition des Brenners erfolgt in FDS über die Vorgabe der Wärmefreisetzungsrates pro Fläche. Die festgelegte Brennerfläche beträgt 0,02 m² und die zugehörige Wärmefreisetzungsrates pro Fläche 1500 kW/m². Der Brennstoffmassenstrom, den FDS an die vorgegebene Verbrennungswärme der Verbrennungsreaktion in der Gasphase anpasst, beträgt somit 1,58 g/s. Dieser Wert ist mehr als doppelt so hoch wie der Propan-Massenstrom des Sandbettbrenners während einer SBI Prüfung. Die Abweichung besteht aufgrund der in der Berechnung verwendeten Verbrennungsreaktion für Polyurethan. Diese Reaktion weist eine geringere Verbrennungswärme als Propan auf und dementsprechend wird der Massenstrom angepasst.

Werkstoff PUR: Die Eingabeparameter des eindimensionalen Pyrolysemodells von FDS für den Werkstoff PUR einzeln bestimmt bzw. der Literatur entnommen. Die notwendigen Daten umfassen die physikalischen Eigenschaften (Dichte, Abmessungen), die optischen Eigenschaften (Strahlungsemission, -absorption), die thermischen Eigenschaften (Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität) sowie die Zersetzungs- und Verbrennungseigenschaften (Arrhenius Koeffizient, Aktivierungsenergie, Zersetzungsenthalpie, Verbrennungswärme).

Die gemessene Dichte des Werkstoffs PUR beträgt 30 kg/m³, die Dicke der Probekörper 20 mm. Entsprechend der beobachteten Abbaustufen in der thermischen Analyse wird der Werkstoff in FDS durch mehrere Komponenten repräsentiert. Die Emissivität aller Komponenten wurde in Anlehnung an die experimentellen und numerischen Untersuchungen an Polyurethan Schäumen in [108] mit 0,9 festgelegt. Gemäß [44] liegt der IR-Absorptionskoeffizient von Polymeren meist zwischen 1000 1/m und 9000 1/m. Die Bestimmung des Absorptionskoeffizienten erfolgt dabei regelmäßig über die Transmission von Wärmestrahlung gemessen an dünnen Polymerfilmen und -proben. In den Arbeiten in [45] wurden Proben mit einer Dicke von 0,0001 m bis maximal 0,005 m verwendet, wobei das dickste Material eine Dichte von etwa 1190 kg/m³ und einen Absorptionskoeffizienten von 1000 1/m besaß. Als Folge der wellenlängenabhängigen Strahlungsabsorption von Polymeren wird der über ein Wellenlängenspektrum gemittelte Absorptionskoeffizient mit zunehmender Probendicke kleiner. [44, 45] Für die Simulation der porösen PUR Proben mit einer Dichte von 30 kg/m³ und einer Probendicke von 0,02 m wurde der Absorptionskoeffizient

mit 100 1/m vorgegeben. Nach dem Lambert-Beer'schen Gesetz werden damit etwa 65 % der effektiven Strahlung im ersten Zentimeter der Proben absorbiert.

Die spezifische Wärmekapazität von Polymeren ist temperaturabhängig und steigt mit der Temperatur an. [19] Um die Temperaturabhängigkeit zu berücksichtigen kann nach Stoliarov ein mittlerer Wert für die Wärmekapazität von Polymeren bestimmt werden [44]. Für die Simulation des Werkstoffs PUR wurde der mittlere Wert für Polyurethan von 2,5 kJ/kg/K verwendet. Die thermische Leitfähigkeit des Werkstoffs PUR beträgt bei Raumtemperatur 0,028 W/m/K. Aufgrund des steigenden Strahlungsanteils am Wärmetransport nimmt die Wärmeleitfähigkeit poröser Materialien mit steigenden Temperaturen nach [47] überproportional zu. In Anlehnung an die Untersuchungen in [47] wurde die Wärmeleitfähigkeit des Werkstoffs PUR abgeschätzt und ein mittlerer Wert von 0,1 W/m/K angenommen.

Wie aus Abbildung 5.9 ersichtlich findet die thermische Zersetzung von PUR in mehreren Stufen statt. Dargestellt ist die Masse bzw. die Massenverlustrate des Werkstoffs PUR in der thermischen Analyse unter Stickstoff Atmosphäre und unter Luft mit einer Aufheizrate von 20 K/min. Bis zu einer Temperatur von 600 K verlaufen die beiden Kurven sehr ähnlich. Zwischen 600 K und 800 K findet der Abbauprozess unter Stickstoffatmosphäre schneller statt als unter Luft. In der Folge ist der Rückstandsanteil unter Luft größer als unter Stickstoff. Bei Temperaturen von über 800 K beschleunigt der Abbau unter Luft während er unter Stickstoff stagniert. Wenn die Temperatur 850 K überschreitet bleibt der Anteil des Rückstands unter Stickstoff höher als unter Luft. Bei Versuchsende (1073 K) beträgt der Rückstand unter Stickstoff 22 %. Unter Luft Atmosphäre wird das Material bis zu einer Temperatur von 1100 K vollständig zersetzt.

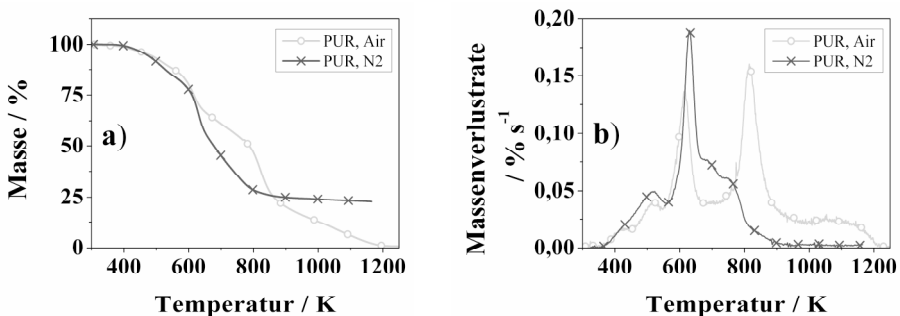


Abbildung 5.9: Experimentelle TG- (5.9a) und DTG-Signale (5.9b) von PUR Proben unter Luft (Air) und unter Stickstoff-Atmosphäre (N2).

Die unterschiedliche thermische Zersetzung mit und ohne Sauerstoff ist nach [132] darauf zurückzuführen, dass der Sauerstoff einerseits die Oxidation und damit den Abbau des Materials PUR fördert, andererseits jedoch bei Temperaturen zwischen 600 K und 800 K vorübergehend zu einer Stabilisierung durch Reaktion mit dem Werkstoff PUR führt. Diese chemischen Vorgänge im Zusammenhang mit Sauerstoff sind in der Simulation mit FDS nicht direkt zu berücksichtigen, da in der verwendeten Version keine Sauerstoff abhängigen Reaktionen definiert werden können. Um dennoch einen möglichen Einfluss des

5 Wärmefreisetzungsrate im SBI Test

unterschiedlichen Abbauverhaltens zu untersuchen, wurden die für die Simulation relevanten Reaktionsparameter für beide Zersetzungsmechanismen bestimmt.

Tabelle 5.1: Übersicht der Eingabeparameter der Zersetzungsreaktionen von PUR unter Stickstoff-Atmosphäre.

Parameter	Einheit	Zersetzungsreaktionen unter N ₂ -Atmosphäre		
		1	2	3
Reaktionsenthalpie	kJ/kg	800	800	800
Arrhenius Koeffizient	1/s	6,29e1	5,21e10	1,01e1
Aktivierungsenergie	kJ/kmol	4,01e4	1,51e5	4,68e4
Rückstand	Gew.-%	82	70	42
Verbrennungswärme	MJ/kg	12	12	12

Tabelle 5.2: Übersicht der Eingabeparameter der Zersetzungsreaktionen von PUR unter Luft.

Parameter	Einheit	Zersetzungsreaktionen unter Luft		
		1	2	3
Reaktionsenthalpie	kJ/kg	400	400	400
Arrhenius Koeffizient	1/s	2,37e6	1,37e6	2,78e8
Aktivierungsenergie	kJ/kmol	6,76e4	7,96e4	1,22e5
Rückstand	Gew.-%	97	91,8	74,2
Verbrennungswärme	MJ/kg	12	12	12

Parameter	Einheit	Zersetzungsreaktionen unter Luft		
		4	5	6
Reaktionsenthalpie	kJ/kg	400	400	400
Arrhenius Koeffizient	1/s	1,75e9	5,11e8	4,00e1
Aktivierungsenergie	kJ/kmol	1,49e5	1,68e5	7,88e4
Rückstand	Gew.-%	87,8	60	5
Verbrennungswärme	MJ/kg	12	12	12

Die Parameter der Zersetzungsreaktionen wurden schrittweise und unter der Annahme erarbeitet, dass alle Reaktionen nacheinander ablaufen. Für die Zersetzung unter Stickstoff-Atmosphäre wurden 3 Reaktionen und unter Luft 6 Reaktionen zur Abbildung der Abbaustufen verwendet. Der vorgegebene Massenanteil des Gesamtrückstands beträgt unter Luft 2 % und unter Stickstoff-Atmosphäre 22 %. Die Parameteranpassung wurde mit Hilfe einer FDS-Simulation zum Materialverhalten in der TG unterstützt. Dazu wurden einer Oberfläche die Charakteristika von PUR zugeordnet, deren Temperatur gleichförmig mit 20 K/min erhöht und der Massenverlauf sowie die Massenverlustrate berechnet. Eine Übersicht der Eingabeparameter zur Beschreibung der Zersetzungsreaktionen von PUR unter Stickstoff-Atmosphäre gibt Tabelle 5.1. Die entsprechenden Daten für die Reaktionen unter Luft zeigt Tabelle 5.2. Abbildung 5.10 zeigt den Vergleich der experimentellen und

simulierten TG- und DTG-Signale von PUR unter Stickstoff Atmosphäre, Abbildung 5.11 den Vergleich unter Luft. Die Graphen zeigen eine über den gesamten Temperaturverlauf sehr gute Übereinstimmung.

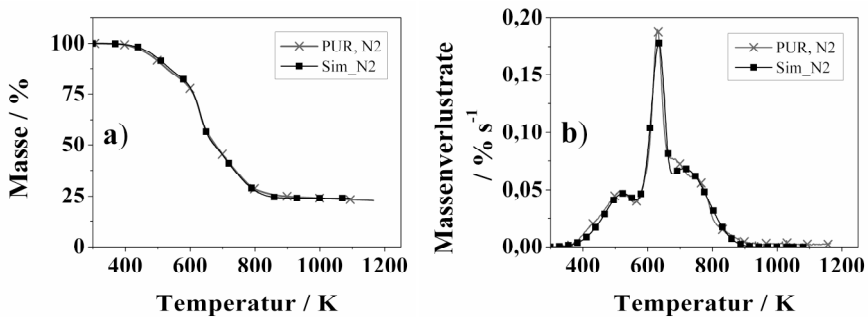


Abbildung 5.10: Experimentelle ("PUR, N2") und simulierte (Sim_N2) TG- (5.10a) und DTG-Signale (5.10b) von PUR unter Stickstoff-Atmosphäre.

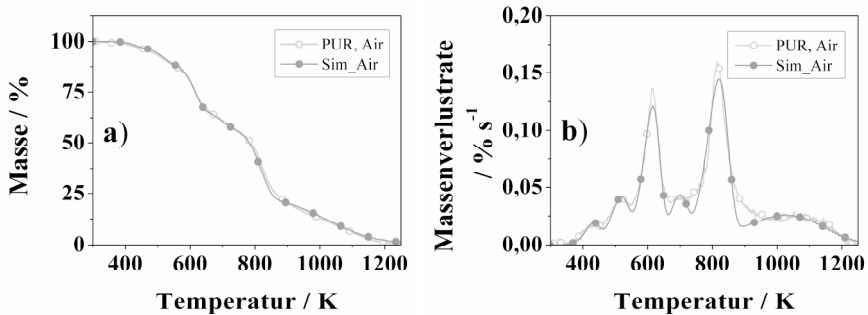


Abbildung 5.11 Experimentelle ("PUR, Air") und simulierte (Sim_Air) TG- (5.11a) und DTG-Signale (5.11b) von PUR unter Luft.

Eine weiterführende Validierung der Eingabeparameter zur Berechnung der Pyrolyse des Werkstoffs PUR wurde, wie schon für die Brandlasten in Kapitel 4, im Brandszenario Cone Kalorimeter durchgeführt. Details zum Modellaufbau sind Kapitel 6 zu entnehmen. Während die gezeigten Ergebnisse zur thermischen Zersetzung ausschließlich auf die Reaktionsparameter abzielen und zwar bei konstanter Heizrate, sind im Brandszenario Cone Kalorimeter die thermischen Eigenschaften und die Zersetzungsreaktionen bei unterschiedlichsten Heizraten von Bedeutung. Für die Simulation des Cone Kalorimeter Tests am Werkstoff PUR wurde von folgenden Vereinfachungen ausgegangen:

- konstanter, gleichförmiger Wärmeeintrag an der Probenoberfläche
- keine konvektiven/konduktiven Wärmeverluste an der Probenoberseite und den -seiten

Abbildung 5.12 stellt die Ergebnisse der Cone Kalorimeter Experimente an den PUR Proben mit den Abmessungen $0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m} \times 0,02 \text{ m}$ bei Bestrahlungsstärken von 50 kW/m^2 und 70 kW/m^2 dar. Auf der linken Seite ist die Wärmefreisetzungsrate in kW/m^2 abgebildet. Alle Graphen zeigen einen für ein Rückstand bildendes Material typischen Verlauf. Nach einem ersten Maximum erreicht die Wärmefreisetzungsrate ein Plateau, fällt

5 Wärmefreisetzungsrate im SBI Test

dann ab und es kommt zum Verlöschen der Flamme. Mit höherer Bestrahlung verkürzt sich die Zeit bis zur Entzündung. Das Maximum und die mittlere Wärmefreisetzungsrate sind erhöht. Die gesamte Branddauer ist bei 70 kW/m^2 länger als bei 50 kW/m^2 . Dies liegt einerseits daran, dass bei geringerer Bestrahlung von 50 kW/m^2 das kritische Niveau für ein Aufrechterhalten der Flamme bereits nach einer Brennzeit von etwa 50 s unterschritten wird, während die Brennzeit bei 70 kW/m^2 Bestrahlung über 60 s beträgt. Unabhängig vom Verlöschen der Flamme wird der Werkstoff PUR danach weiter zersetzt, wie aus der Massenverlustrate in Abbildung 5.12 rechte Seite ersichtlich ist. Andererseits weist die Massenverlustrate auch darauf hin, dass bei geringerer Bestrahlungsstärke mehr Rückstand gebildet wird bzw. weniger Rückstand zersetzt wird. Dieser Unterschied kommt dadurch zustande, dass in Abhängigkeit von der Bestrahlungsstärke unterschiedlich hohe Temperaturen und demnach unterschiedliche Zersetzungsgrade im Werkstoff erreicht werden. Nach 100 s beträgt der Rückstand bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 26% bzw. bei 70 kW/m^2 37%.

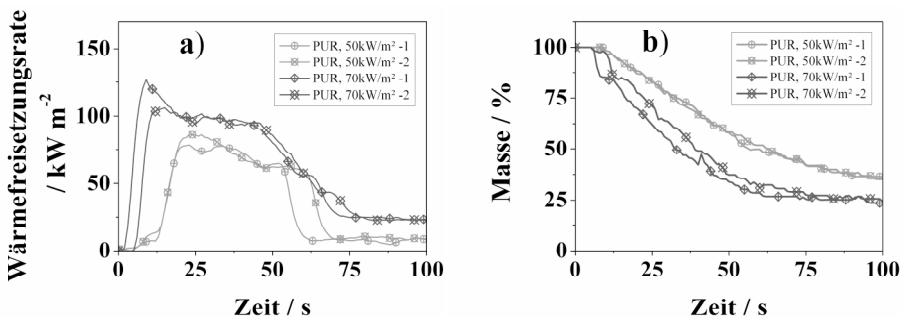


Abbildung 5.12: Experimentelle Wärmefreisetzungsrate (5.12a) und Massenverlauf (5.12b) von je zwei Proben des Werkstoffs PUR im Cone Kalorimeter Test unter 50 kW/m^2 und 70 kW/m^2 .

Die Ergebnisse der Simulation des Brandverhaltens des PUR Werkstoffs im Brandszenario Cone Kalorimeter unter Luft und Stickstoff-Atmosphäre sind in Abbildung 5.13 dargestellt. Die Wärmefreisetzungsrate (linkes Diagramm) der Simulation mit den Eingabeparametern für die Zersetzung unter Stickstoff-Atmosphäre zeigt hinsichtlich der Zeit bis zum Massenverlust und der Höhe der Maxima eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten. Der qualitative Verlauf der Wärmefreisetzungsrate offenbart deutliche Abweichungen, vor allem hinsichtlich der gesamten Branddauer. Der Verlauf der Masse (rechtes Diagramm) dagegen entspricht den experimentellen Ergebnissen. Nach 100 s wird ein Rückstand von 27% bzw. 36% für die beiden Bestrahlungsstärken von 50 kW/m^2 bzw. 70 kW/m^2 erreicht.

Die Wärmefreisetzungsrate der Simulation mit den Eingabeparametern für die Zersetzung unter Luft zeigt bei einer Bestrahlungsstärke von 70 kW/m^2 hinsichtlich der Zeit bis zur Entzündung des ersten Maximums und der gesamten Branddauer eine gute Übereinstimmung mit den Brandversuchen. Bei 50 kW/m^2 entspricht die simulierte Wärmefreisetzungsrate hinsichtlich der Zeit bis zur Entzündung und des ersten Maximums den experimentellen Ergebnissen. Beide Graphen weisen zwei zusätzliche lokale Maxima auf, die in den experimentellen Daten nicht auftreten. Der Rückstand nach 100 s beträgt für die Simulation

bei einer Bestrahlung von 50 kW/m^2 25% und bei einer Bestrahlung von 70 kW/m^2 23%. Es bleibt festzuhalten, dass die Validierung der Eingabeparameter des Werkstoffs PUR im Rahmen der Simulation des Brandverhaltens im Brandszenario Cone Kalorimeter verdeutlicht, dass trotz Unterschiede hinsichtlich der Wärmefreisetzungsrate die erarbeiteten Parameter qualitativ geeignet sind, um die thermische Zersetzung des Werkstoffs PUR zu berechnen.

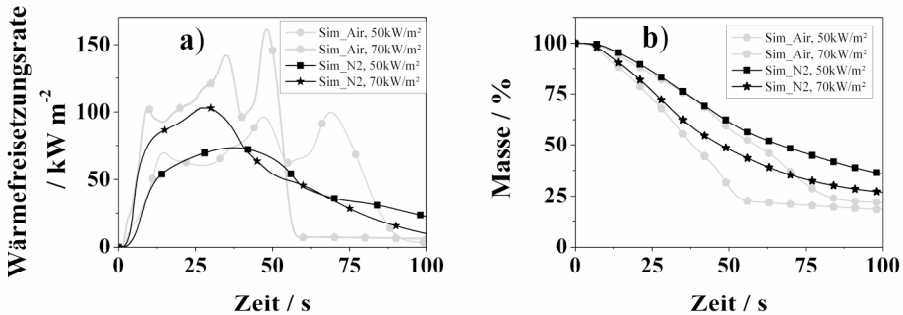


Abbildung 5.13: Berechnete Wärmefreisetzungsrate (5.13a) und Massenverlauf (5.13b) des Werkstoffs PUR im Brandszenario Cone Kalorimeter unter 50 kW/m^2 und 70 kW/m^2 mit den Zersetzungsparametern für Luft (Sim_Air) und für Stickstoff Atmosphäre (Sim_N2).

Sonstige Randbedingungen: Zu den sonstigen Randbedingungen der Berechnungen gehören die Umgebungsvariablen, die Ventilationsbedingungen und die Bedingungen an der Probenrückseite. Die Umgebungstemperatur der Simulationen des Brandszenarios SBI Test beträgt 295 K . Die Ventilationsbedingungen wurden über die FDS Funktion "VENT" eingestellt. Der Fläche des Abzuges wurde dazu eine Strömungsbedingung zugeordnet, die den Volumenstrom durch das Berechnungsgebiet in Anlehnung an die Bedingungen der Experimente auf $0,6 \text{ m}^3/\text{s}$ festlegt.

Die Probekörper sind auf der Prüfseite den Verhältnissen im Versuchsraum des SBI Tests ausgesetzt. An der Rückseite wurde gemäß der experimentellen Vorgehensweise die Isolation in Form der Kalzium-Silikat Platten rechnerisch berücksichtigt, d.h. der Wärmeübergang zwischen Probe und Trägerplatte numerisch aufgelöst. In der Simulation waren die Proben direkt mit den Kalzium-Silikat Platten verbunden. Den Kalzium-Silikat Platten wurden zudem die folgenden Eigenschaften zugeordnet: Dicke $0,03 \text{ m}$; Dichte 1000 kg/m^3 ; spezifische Wärmekapazität $1,4 \text{ kJ/kg/K}$; Wärmeleitfähigkeit $0,3 \text{ W/m/K}$; Emissivität $0,9$; Absorptionskoeffizient 50000 1/m .

5.3 Vergleich von Simulation und Experiment

Im Folgenden werden zunächst die vergleichenden Untersuchungen zu den im SBI Test herrschenden Bedingungen hinsichtlich der Temperaturen im Prüfraum und des Wärmeeintrags auf die Probe vorgestellt. Im Anschluss daran erfolgt der Vergleich der berechneten Wärmefreisetzungsrate mit den experimentellen Daten sowie eine optische Auswertung der Ergebnisse.

5 Wärmefreisetzungsrate im SBI Test

Die Wärmefreisetzungsrate des Brenners in der Simulation ergibt sich aus der Verbrennungsreaktion des Brennstoffstroms mit der Umgebungsluft im Berechnungsgebiet. Abbildung 5.14 zeigt die Wärmefreisetzungsrate über der Zeit für eine Simulation des Brenners mit einer Fläche von $0,2 \text{ m}^2$ und einem Massenstrom von $1,58 \text{ g/s}$. Die mittlere Wärmefreisetzungsrate beträgt wie erwartet $30,00 \text{ kW}$. Infolge der Berücksichtigung der turbulenten Verhältnisse im Strömungsgebiet (LES Turbulenzmodell) variiert die Wärmefreisetzung der Diffusionsflamme des Brenners in Abhängigkeit von der lokalen Durchmischung von Brennstoffstrom und sauerstoffreicher Luft. Die Standardabweichung der Wärmefreisetzungsrate, berechnet über einen Zeitraum von 200 s , beträgt $0,40 \text{ kW}$.

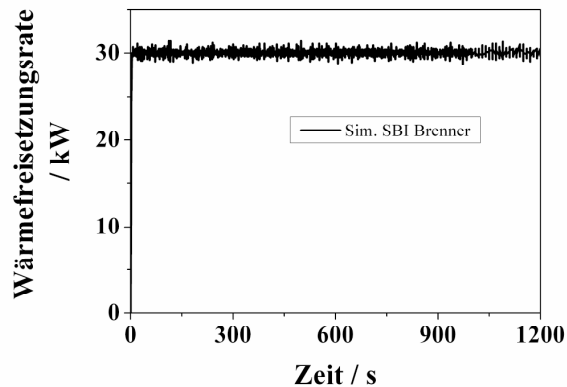


Abbildung 5.14: Berechnete Wärmefreisetzungsrate des in den Simulationen verwendeten Brenners mit einer Fläche von $0,2 \text{ m}^2$ und einem Brennstoffmassenstrom von $1,58 \text{ g/s}$.

Der Vergleich der berechneten Temperaturen mit den gemessenen Temperaturen im SBI Testraum ist in den Abbildungen 5.15a bis 5.15d dargestellt. Die Diagramme zeigen die Temperatur in der Ecke sowie die gemittelten Temperaturen $0,125 \text{ m}$ bzw. $0,25 \text{ m}$ entfernt von der Ecke in den Höhen $0,1 \text{ m}$ (Abbildung 5.15a), $0,4 \text{ m}$ (Abbildung 5.15b), $0,7 \text{ m}$ (Abbildung 5.15c) und 1 m (Abbildung 5.15d). Aufgrund der gewählten Gitterweite von 5 cm werden die berechneten Temperaturwerte für den Abstand $0,125 \text{ m}$ von der Ecke durch den Mittelwert der Temperaturen der Abstände $0,1 \text{ m}$ und $0,15 \text{ m}$ repräsentiert. Die berechneten Werte sind ferner über die FDS Funktion `WALL_TEMPERATURE` an den als adiabatisch angenommenen Probenoberflächen bestimmt worden. Dementsprechend handelt es sich dabei um die Oberflächentemperaturen, die die adiabate Randbedingung erfüllen, dass der aus Strahlung und Konvektion resultierende Wärmeeintrag Null beträgt.

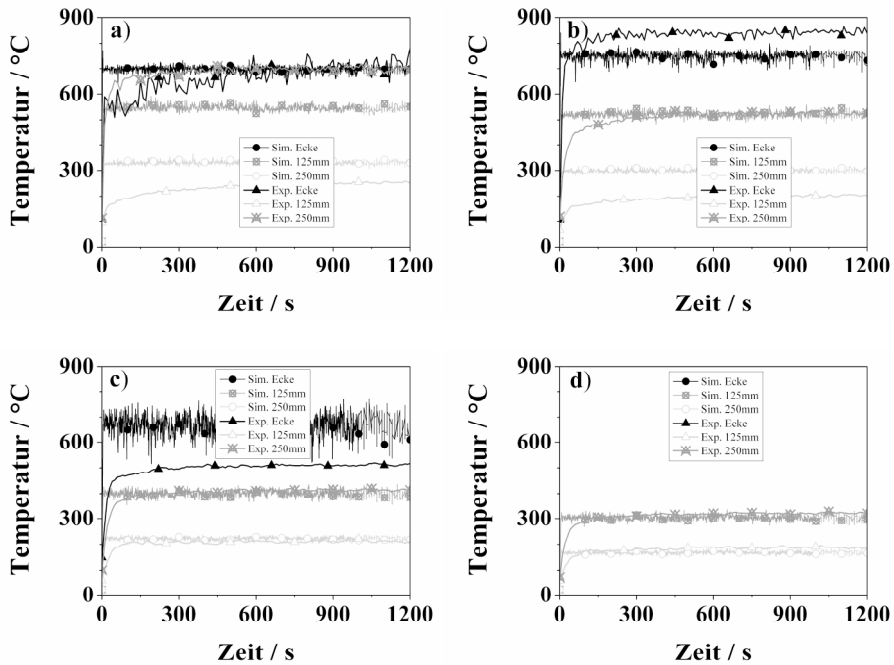


Abbildung 5.15: Vergleich der berechneten und gemessenen Temperaturen im SBI Testraum in den Höhen 0,1 m (5.15a), 0,4 m (5.15b), 0,7 m (5.15c) und 1 m (5.15d) über der Probenunterkante.

Der Vergleich der Temperaturen verdeutlicht, dass die Ergebnisse aus Simulation und Experiment qualitativ übereinstimmen und im Wesentlichen die gleiche Größenordnung besitzen. Die Daten in der Höhe von 0,1 m (Abbildung 5.15a) weisen auf eine breitere heiße Zone im Experiment hin, als sie in der Simulation berechnet wurde. Die maximalen Temperaturen in der Ecke stimmen sehr gut überein. In der Höhe 0,4 m haben sich die Unterschiede hinsichtlich der Temperaturverteilung in der Breite aufgehoben und das Temperaturprofil von Simulation und Experiment ist nahezu identisch. Bei einer Höhe von 0,7 m weist der Temperaturvergleich in der Ecke darauf hin, dass die Simulation eine länger gestreckte Flamme mit höheren Temperaturen in der Ecke prognostiziert. Die Temperaturen mit Abständen von 0,125 m und 0,25 m zur Ecke stimmen sowohl in der Höhe 0,7 m als auch in der Höhe 1 m sehr gut überein.

Einen Überblick über die Unterschiede und Gemeinsamkeiten von Simulation und Experiment hinsichtlich des Temperaturprofils und letztlich des Wärmeeintrags auf die Probekörper zeigt Abbildung 5.16. Verglichen werden eine Aufnahme der Kalzium-Silikat-Platten mit der Infrarot Kamera kurz nach Verlöschen des Brenners und die Probenoberflächentemperaturen einer Simulation des Brenners mit Probekörpern, denen die Eigenschaften von Kalzium-Silikat zugeordnet wurden. Dabei zeigt sich, dass die Temperaturen in derselben Größenordnung liegen. Hinsichtlich der Temperaturverteilung bleibt festzuhalten, dass die Simulation ein gestrecktes, schmaleres Temperaturprofil berechnet. Wesentlich ist jedoch die Erkenntnis, dass sowohl die absoluten Temperaturen als auch die Größe der erwärmten Bereiche der Probekörper sehr gut übereinstimmen.

5 Wärmefreisetzungsrates im SBI Test

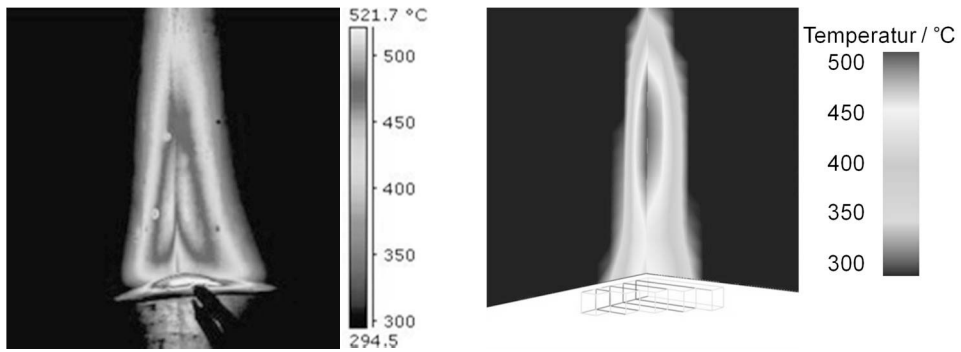


Abbildung 5.16: Vergleich des Temperaturprofils an Kalzium-Silikat-Platten infolge des Wärmeeintrags durch den SBI-Brenner im Experiment (links, IR-Kamera) und in der Simulation (rechts).

Ausschlaggebend für das Brandverhalten der Werkstoffe im SBI Test ist der Wärmeeintrag auf die Probe. Aufgrund der turbulenten Diffusionsflamme des SBI Brenners unterliegt die Probe einem räumlich und zeitlich veränderlichen Wärmestrom. Abbildung 5.17 zeigt ein berechnetes, räumlich und zeitlich repräsentatives Profil des Wärmeeintrags auf die Probekörper. Es handelt sich dabei um den Wärmeeintrag infolge Konvektion und Wärmestrahlung in kW/m^2 , der über die FDS Funktion GAUGE_HEAT_FLUX erhalten wird. Das Profil des Wärmeeintrags ähnelt dem der Temperaturen aus Abbildung 5.16 rechts. Der maximale Wärmestrom beträgt 55 kW/m^2 und entspricht damit den in [119] experimentell bestimmten Werten von maximal $54,8 \text{ kW/m}^2$ für den SBI Brenner.

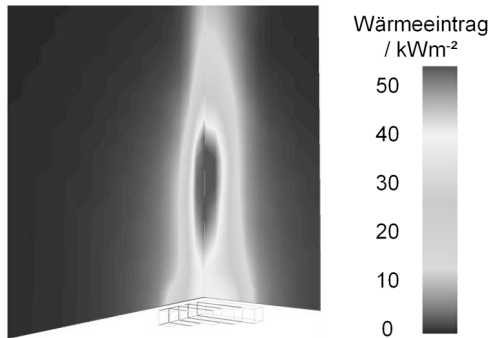


Abbildung 5.17: Berechneter, repräsentativer Wärmeeintrag durch die turbulente Diffusionsflamme des SBI-Brenners auf die Probekörper.

Abbildung 5.18 zeigt den Vergleich der Wärmefreisetzungsrates des Werkstoffs PUR zwischen der Simulation und dem Experiment. Dargestellt sind die Versuchsdaten sowie die Berechnungen mit den Eingabeparametern für die Zersetzung unter Luft (Sim_Air) und unter Stickstoffatmosphäre (Sim_N2) zwischen $0 \text{ s} < t < 300 \text{ s}$. Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ist vor dem Hintergrund der Messungenauigkeit im SBI Test durchweg überzeugend. Alle charakteristischen Kenngrößen der Berechnungen, die Zeit bis zur Wärmefreisetzung, der Anstieg, Maximum und Abfall der Wärmefreisetzungsrates, stimmen sehr gut mit den experimentellen Ergebnissen überein. Der Unterschied zwi-

schen den Berechnungen Sim_Air und Sim_N2 ist vernachlässigbar gering. Über den gesamten Zeitraum von 300 s liegen die beiden berechneten Wärmefreisetzungsraten nahezu parallel.

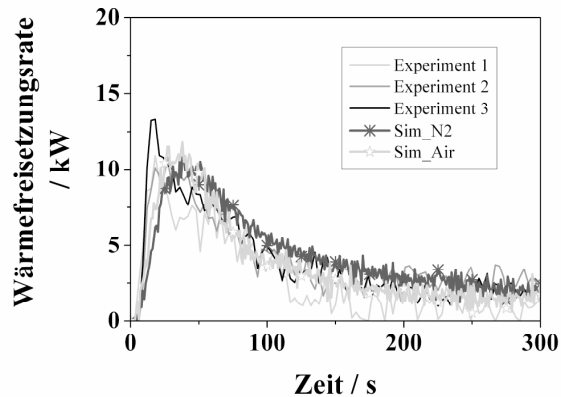


Abbildung 5.18: Vergleich der berechneten und der experimentell bestimmten Wärmefreisetzungsrate im SBI Test für den Werkstoff PUR.

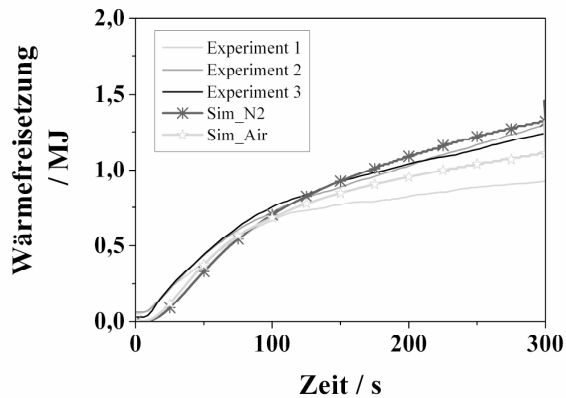


Abbildung 5.19: Vergleich des Verlaufs der berechneten und der experimentell bestimmten Wärmefreisetzung über der Zeit für den Werkstoff PUR.

Die sehr gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment zeigt sich auch am Verlauf der Gesamtwärmefreisetzung des Werkstoffs PUR (siehe Abbildung 5.19). Nach 300 s beträgt die gesamte Wärmefreisetzung der PUR Probekörper im Experiment 1,16 kW ($\pm 0,2$ kW), in der Berechnung Sim_N2 1,32 kW und in der Berechnung Sim_Air 1,11 kW. Die Wärmefreisetzung des Experiments Nr. 3 zeigt einen ab der Zeit von $t > 100$ s abweichenden Verlauf und eine um etwa 20% niedrigere Wärmefreisetzung nach $t = 300$ s. Ursache hierfür ist die ab $t > 100$ s im Schnitt um 1 kW niedrigere Wärmefreisetzungsrate des dritten Experiments. Gerade bei sehr geringen Wärmefreisetzungsrate liegt diese Abweichung im Bereich der Messgenauigkeit des Prüfaufbaus [121].

5 Wärmefreisetzungsrates im SBI Test

Gemäß der SBI Prüfnorm wird zur Klassifizierung der Werkstoffe in erster Linie der Kennwert FIGRA verwendet. Tabelle 5.3 stellt die maximalen FIGRA Kennwerte bei einer Gesamtwärmefreisetzung von mindestens 0,2 MJ bzw. 0,4 MJ für die Experimente und die Simulationen des Werkstoffs PUR gegenüber. Die Kennwerte $FIGRA_{0,2MJ}$ der Simulationen liegen aufgrund der zu Beginn und bis zum Erreichen des Maximums geringfügig verzögerten Wärmefreisetzung deutlich niedriger als die entsprechenden Kennwerte der Experimente. Dagegen stimmen die Kennwerte $FIGRA_{0,4MJ}$ der Simulationen mit dem Mittelwert der Experimente von 164,8 W/s überein.

Tabelle 5.3: Vergleich der experimentellen und berechneten Kennwerte $FIGRA_{0,2MJ}$ und $FIGRA_{0,4MJ}$ des Werkstoffs PUR im SBI Test.

	Einheit	Experiment			Simulation	
		1	2	3	Sim_N2	Sim_Air
FIGRA_{0,2MJ}	W/s	426,0	373,7	334,7	260,5	305,2
FIGRA_{0,4MJ}	W/s	183,9	186,0	124,4	152,5	165,6

Die Abbildungen 5.20 bis 5.23 stellen einen optischen Vergleich der SBI Simulationen und Experimente des Werkstoffs PUR dar. Gezeigt werden jeweils eine Aufnahme der FDS Simulationen der Sim_N2 (links) und Sim_Air (Mitte) sowie ein Foto des Experiments zu vier unterschiedlichen Zeiten 30 s, 60 s, 100 s und 300 s nach dem Anschalten des Brenners. In den Bildern der Simulationen stehen die flammenähnlichen Strukturen für Isoflächen mit einer Wärmefreisetzung von mehr als 750 kW/m³. Der Vergleich verdeutlicht die Leistungsfähigkeit der Visualisierung und die sehr gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ausprägungen hinsichtlich der räumlichen Ausbreitung der Flammen, die vom Maximum der Wärmefreisetzungsrates bei etwa 30 s bis zum Ende der Aufzeichnung bei t = 300 s abnimmt. Der Unterschied zwischen den Berechnungen Sim_N2 und Sim_Air ist vernachlässigbar.

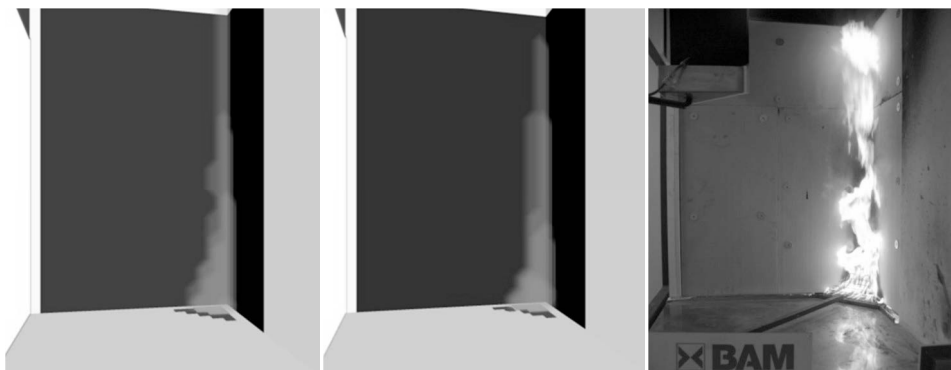


Abbildung 5.20: Aufnahmen der Berechnungen Sim_N2 (links) und Sim_Air (Mitte) sowie das Foto eines Experiments des Werkstoffs PUR (rechts) etwa 30 s nach Anschalten des Brenners.

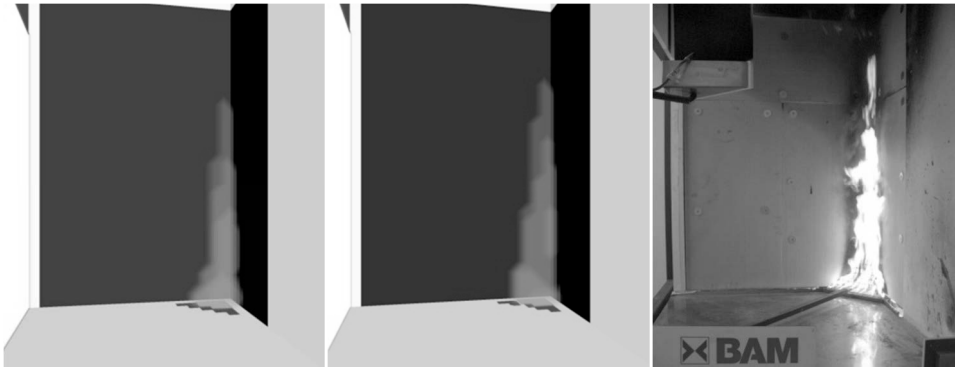


Abbildung 5.21: Aufnahmen der Berechnungen Sim_N2 (links) und Sim_Air (Mitte) sowie das Foto eines Experiments des Werkstoffs PUR (rechts) etwa 60 s nach Anschalten des Brenners.

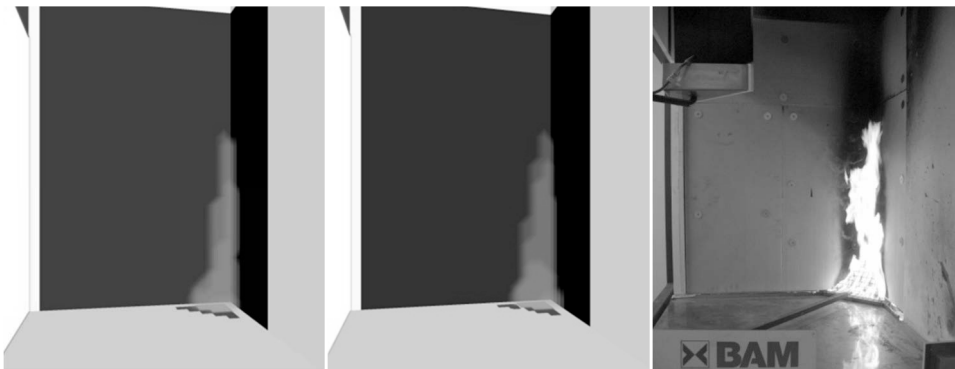


Abbildung 5.22: Aufnahmen der Berechnungen Sim_N2 (links) und Sim_Air (Mitte) sowie das Foto eines Experiments des Werkstoffs PUR (rechts) etwa 100 s nach Anschalten des Brenners.



Abbildung 5.23: Aufnahmen der Berechnungen Sim_N2 (links) und Sim_Air (Mitte) sowie das Foto eines Experiments des Werkstoffs PUR (rechts) etwa 300 s nach Anschalten des Brenners.

Der Vergleich von Simulation und Experiment zeigt, dass die Berechnungen mit dem Feldmodell FDS in der Lage sind, das Brandverhalten des Werkstoffs PUR im Brandszena-

rio SBI in sehr guter Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen abzubilden. Die Herausforderungen einer erfolgreichen Simulation des SBI Szenarios betreffen insbesondere die Wechselwirkungen zwischen Gasphase und sogenannter Festphase. Der Wärmeeintrag auf die Probekörper ist in seiner räumlichen und zeitlichen Dimension nicht vorab bekannt, sondern er muss über den Umweg der Simulation der Diffusionsflamme des SBI Brenners berechnet werden. Demzufolge kommt der Wärmefreisetzung und dem Wärmetransport in der Gasphase sowie der Wärmeübertragung zwischen Gasphase und Festphase eine besondere Bedeutung zu. Sind die thermischen Randbedingungen der Probekörper definiert, wird mittels des eindimensionalen Pyrolysemodells die zeitliche Brennstofffreisetzung berechnet. Hierzu ist es notwendig, eine numerische Beschreibung der thermischen Eigenschaften und der Zersetzung des Werkstoffs zu erarbeiten. Die Ergebnisse haben verdeutlicht, dass durch die Wahl geeigneter Parameter für die Untermodelle der Gasphase und der Festphase die Wärmefreisetzungsrates des Werkstoffs PUR im SBI Test berechnet werden kann. Wie empfindlich die Simulationen gegenüber Parametervariationen sind und welche Auswirkungen die Veränderung einzelner Parameter auf die berechnete Wärmefreisetzungsrates hat, wird im folgenden Abschnitt anhand ausgewählter Parameter untersucht.

5.4 Parameterstudie

Die im Rahmen der Parameterstudie untersuchten Parameter lassen sich in allgemeine Berechnungsparameter sowie Materialeigenschaften des Werkstoffs PUR unterscheiden. Hinsichtlich der Berechnungsparameter ist u.a. von Bedeutung, wie empfindlich das Ergebnis der Simulation auf eine veränderte räumliche bzw. zeitliche Diskretisierung des Berechnungsgebiets reagiert. Die zeitliche Diskretisierung wird in FDS durch einen Algorithmus iterativ angepasst, bis der Zeitschritt die vom Modell vorgegebenen Bedingungen hinsichtlich der maximalen Geschwindigkeiten und Beschleunigungen im Strömungsfeld erfüllt. Die räumliche Diskretisierung wird durch die vom Anwender zu wählende Gitterweite eingestellt. Sie beeinflusst maßgeblich das turbulente Strömungsfeld und damit auch die Wärmeerzeugung und Wärmeübertragung in der Gasphase. Abbildung 5.24 zeigt den Vergleich der Berechnungen Sim_Air mit Gitterweiten von 0,05 m bzw. 0,025 m. Die Graphen der beiden Berechnungen liegen übereinander und zeigen nur geringe Unterschiede in der Wärmefreisetzungsrates, die auf die unterschiedliche Auflösung der Turbulenz zurückzuführen sind. Die Unabhängigkeit des Berechnungsergebnisses von der gewählten Gitterweite wird gemeinhin als ein Qualitätskriterium der Simulation verstanden [133], da sie Einflüsse ausschließt, die allein von der numerischen Methode auf die Berechnung ausgehen.

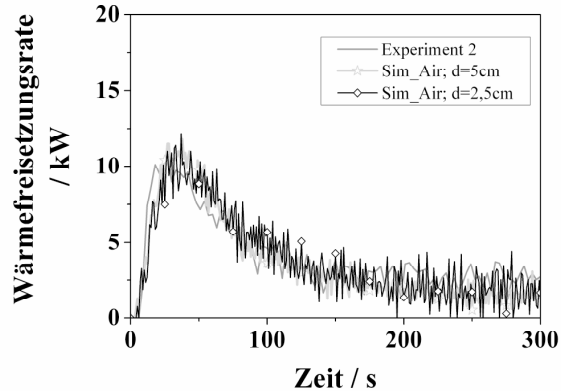


Abbildung 5.24: Einfluss der Halbierung der Gitterweite von 0,05 m auf 0,025 m auf die Wärmefreisetzungsrate der Berechnung Sim_Air.

Tabelle 5.4 zeigt im Überblick die sechs untersuchten Parameter und deren vier unterschiedliche Ausprägungen (insgesamt $6 \times 4 = 24$ Simulationen). Die Untersuchung des Einflusses eines Parameters auf die Wärmefreisetzungsrate basiert auf je vier Simulationen Sim_1 bis Sim_4, in denen der in der Tabelle hervorgehobene Ausgangswert des jeweiligen Parameters variiert wurde, während für alle anderen Eingabeparameter der Ausgangswert eingestellt blieb. Die Art der Variation wurde für jeden Parameter angepasst und zielt darauf ab, bei möglichst realistischen Veränderungen den grundsätzlichen Einfluss des Parameters zu untersuchen.

Tabelle 5.4: Übersicht der untersuchten Parameter und der jeweiligen Variationen (Ausgangswerte sind hervorgehoben) in den durchgeführten Simulationen 1 bis 4.

Parameter (einzeln variiert)	Einheit	Parametervariationen			
		(Sim_1)	(Sim_2)	(Sim_3)	(Sim_4)
Brennerleistung	kW	24	30	36	42
Strahlungsanteil	%	10	20	30	40
Wärmeleitfähigkeit	W/m/K	0,01	0,1	0,2	0,3
Wärmekapazität	kJ/kg/K	0,5	1,5	2,5	3,5
Absorptionskoeff.	1/m	10	100	1000	10000
Reaktionsenthalpie	kJ/kg	1200	1800	2400	3000

Die Auswirkungen der Variation der Brennerleistung auf die Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR ist in Abbildung 5.25a dargestellt. Die Brennerleistung wurde zwischen 24 kW und 42 kW variiert. Der Ausgangswert beträgt 30 kW. Die Variation der Brennerleistung führt zu einer annähernd proportionalen Veränderung der Wärmefreisetzungsrate. Die

5 Wärmefreisetzungsrate im SBI Test

Zeit bis zum Beginn der Wärmefreisetzung sowie der qualitative Verlauf der Wärmefreisetzungsrate werden nicht beeinflusst. Die Parameterstudie hinsichtlich des Strahlungsanteils an der Wärmeübertragung in der Gasphase zeigt eine sehr ähnliche Auswirkung auf die Wärmefreisetzungsrate (siehe Abbildung 5.25b). Die Variation des Strahlungsanteils (Ausgangswert 20 %) zwischen 10 % und 40 % führt zu einer proportionalen Veränderung des Wärmeeintrags auf die Probe und dementsprechend zu einer proportionalen Veränderung der Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR.

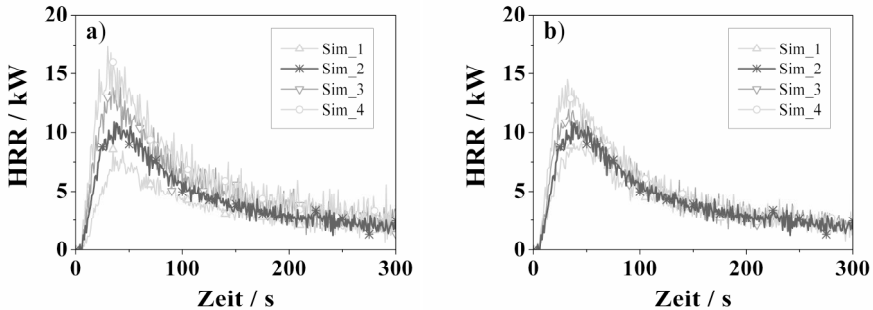


Abbildung 5.25: Einfluss der Parametervariation hinsichtlich Brennerleistung (5.25a) und Strahlungsanteil an der Wärmeübertragung in der Gasphase (5.25b) auf die berechnete Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR.

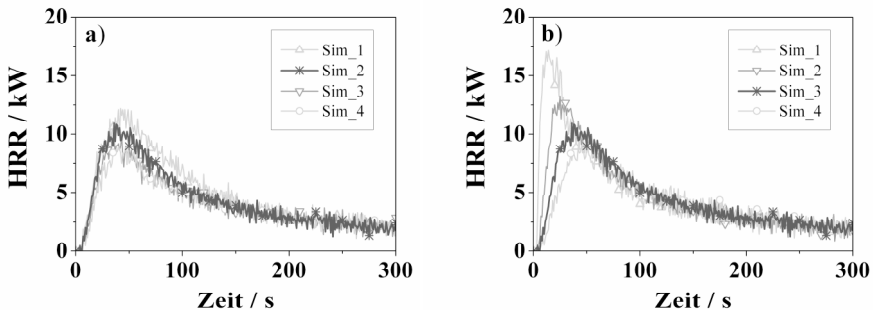


Abbildung 5.26: Einfluss der Parametervariation hinsichtlich der Materialeigenschaften Wärmeleitfähigkeit (5.26a) und Wärmekapazität (5.26b) auf die berechnete Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR.

Abbildung 5.26 zeigt die Parametervariationen für die Materialeigenschaften Wärmeleitfähigkeit (5.26a) und Wärmekapazität (5.26b). Die Wärmeleitfähigkeit wurde um den Ausgangswert von 0,1 W/m/K im Bereich von 0,01 W/m/K bis 0,3 W/m/K variiert. Die Verringerung der Wärmeleitfähigkeit führt zu einer geringfügigen Verzögerung beim Erreichen des Maximums der Wärmefreisetzungsrate bei gleichzeitiger Erhöhung dieses Maximums. Die Zeit bis zur Wärmefreisetzung sowie die Steigung bis zum Maximum bleiben nahezu unverändert. Eine höhere Wärmeleitfähigkeit des Werkstoffs PUR führt zu einem niedrigeren Maximum in der Wärmefreisetzungsrate. Dieser Effekt wird mit steigender Wärmeleitfähigkeit deutlich geringer. Die spezifische Wärmekapazität wurde zwischen 0,5 kJ/kg/K und 3,5 kJ/kg/K variiert. Der Ausgangswert beträgt 2,5 kJ/kg/K. Die Verringerung der Wärmeka-

pazität führt grundsätzlich dazu, dass das Material schneller aufgeheizt wird. Für die berechnete Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR führt eine verringerte Wärmekapazität zu einem schnelleren Erreichen des gleichzeitig erhöhten Maximums. Auch die Zeit bis zum Beginn der Wärmefreisetzung wird geringer.

Der Absorptionskoeffizient wurde im Bereich von 10 1/m bis 10000 1/m variiert. Der Ausgangswert beträgt 100 1/m. Abbildung 5.27a zeigt den Einfluss des Absorptionskoeffizienten auf die berechnete Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR. Eine Erhöhung des Absorptionskoeffizienten führt zu einem niedrigeren Maximum. Die Zeit bis zur Wärmefreisetzung und die Steigung der Wärmefreisetzungsrate bis zum Maximum bleiben nahezu gleich. Die Verringerung des Absorptionskoeffizienten von 100 1/m auf 10 1/m hat vergleichsweise großen Einfluss auf die Wärmefreisetzungsrate. Die Zeit bis zur Wärmefreisetzung und bis zum Erreichen des Maximums wird stark verzögert. Die anfängliche Steigung der Wärmefreisetzungsrate sowie das Maximum selbst sind mit kleinerem Absorptionskoeffizienten deutlich geringer. Bei einem Absorptionskoeffizienten von 10 1/m sind gemäß des Lambert-Beer'schen Gesetzes nach 0,02 m erst etwa 20% der auf die Probe treffenden Strahlungsenergie absorbiert. Die Restmenge trifft auf die Isolationssschicht an der Rückseite der Probe und erwärmt diese. Die Ursache für die starke Veränderung des Profils der Wärmefreisetzungsrate liegt folglich im numerischen Zusammenspiel von Strahlungsabsorption und Wärmeübertragung am Übergang der Probekörperückseite hin zur Kalzium-Silikat-Isolierung.

Die Parametervariation hinsichtlich der Reaktionsenthalpie des Werkstoffs PUR ist in Abbildung 5.27b dargestellt. Ausgehend vom Ausgangswert von 2400 kJ/kg wurde die Reaktionsenthalpie zwischen 1200 kJ/kg und 3000 kJ/kg variiert. Eine Verringerung der Zersetzungsenthalpie bedeutet, dass weniger Energie aufgewendet werden muss, um den Werkstoff PUR thermisch zu zersetzen und vom festen in den gasförmigen Zustand zu überführen. Sie hat zu Folge, dass das Maximum der Wärmefreisetzungsrate erhöht wird. Die Zeit bis zur Wärmefreisetzung sowie die Steigung der Wärmefreisetzungsrate werden nicht maßgeblich verändert.

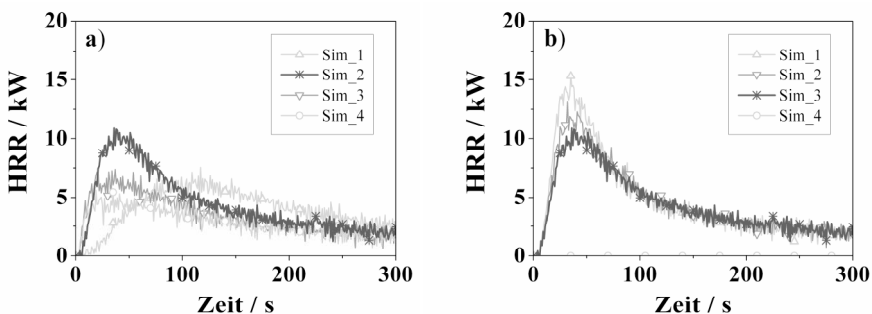


Abbildung 5.27: Einfluss der Parametervariation hinsichtlich des Absorptionskoeffizienten (5.27a) und der Zersetzungsenthalpie (5.27b) auf die berechnete Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR.

Es bleibt festzuhalten, dass, aufbauend auf einem belastbaren, validierten Simulationsmodell, eine Parametervariation die Möglichkeit bietet, den Einfluss der Eingabeparameter auf das Berechnungsergebnis zu untersuchen. Diese Informationen können unter

anderem für die Materialentwicklung von Bedeutung sein. Um beispielsweise das Maximum der Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR im Brandszenario SBI Test zu verringern, empfiehlt es sich in Anlehnung an die untersuchten Parameter die Wärmeleitfähigkeit, die Wärmekapazität den Absorptionskoeffizienten sowie die Zersetzungsenthalpie zu steigern.

5.5 Zwischenfazit

Im SBI Test wird das Brandverhalten von Baustoffen anhand der Wärmefreisetzungsrate klassifiziert. Der Test entspricht einem Brandszenario mittlerer Größe der Dimension Kubikmeter und berücksichtigt die horizontale und vertikale Brandausbreitung einer senkrecht über Eck aufgestellten Probe infolge des Wärmeeintrages einer Diffusionsflamme. Die Untersuchungen zu diesem Brandszenario zielten auf die Frage ab, welche Potentiale und Herausforderungen Brandsimulationen mit dem Programm FDS bieten, wenn es um das konkrete Brandverhalten eines Werkstoffs unter kontrollierten Umgebungsbedingungen geht. Zielgröße der Simulation war die Wärmefreisetzungsrate einer Polyurethan Hartschaum Probe.

Die Simulation des Brandszenarios SBI Test umfasste die Berechnung der Wärmefreisetzung der Probe unter Berücksichtigung der Wechselwirkungen von Gasphase (Strömungsgebiet) und Festphase (Strömungsrand). Ausgehend vom vorgegebenen Massenstrom werden der Wärmeeintrag des Gasbrenners auf die Probe sowie die voneinander abhängigen Brennstoff- und Wärmefreisetzungsraten der Probe bestimmt. Neben den aus der Gasphase abzuleitenden thermischen Randbedingungen standen die Pyrolyseeigenschaften der Probe im Mittelpunkt der Untersuchungen.

Der Wärmeeintrag des Gasbrenners auf die Probenoberfläche wurde berechnet und anhand der Temperaturen und des Wärmestroms auf der Probenoberfläche mit den experimentellen Untersuchungen abgeglichen. Die Beschreibung der thermischen Zersetzung basierte auf den thermogravimetrischen Untersuchungen des Werkstoffs. Die Zersetzungsraten unter Luft und unter Stickstoff Atmosphäre wichen deutlich voneinander ab. Für die Simulation wurden daher die Eingabeparameter für beide Zersetzungsmechanismen bestimmt. Eine weiterführende Validierung der Eingabeparameter, insbesondere hinsichtlich des Zusammenspiels der thermischen Eigenschaften und der Zersetzungsparameter, fand anhand des Vergleichs der experimentellen und berechneten Wärmefreisetzung bzw. des Massenverlustes im Cone Kalorimeter statt.

Der Vergleich von Simulation und Experiment zeigte einerseits, dass die gewählten Einstellungen der Gasphasenberechnung zu einer guten Übereinstimmung der thermischen Randbedingungen der Probe führten. Diese Übereinstimmung ist wesentlich für die weitere Berechnung des Brandverhaltens der Probe und weist gleichzeitig darauf hin, dass das Simulationsprogramm grundsätzlich in der Lage ist, die komplexe Verbrennung und Wärmeübertragung einer Diffusionsflamme quantitativ abzubilden. Andererseits stimmte die berechnete Wärmefreisetzung der PUR Probe sehr gut mit den experimentellen Ergebnissen überein. Dabei wurden mit den Zersetzungsparametern unter Luft und unter Stickstoff-Atmosphäre vergleichbare Ergebnisse erzielt. Der abschließende optische Vergleich von Simulation und Experiment überzeugte ebenfalls durch eine nahezu deckungsgleiche Darstellung der Flammenhöhe in Abhängigkeit von der Versuchsdauer bzw. Wärmefreisetzung der Probe.

Die Qualität der Simulation wird ferner vor dem Hintergrund der durchgeführten Parametervariationen offenbart. Zum einen wurde die Unabhängigkeit des Berechnungsergebnisses von der Gitterweite belegt. Zum anderen wies die Parameterstudie auf die vorhandene Empfindlichkeit der Berechnung gegenüber ausgewählten Eingabeparametern hin und unterstrich damit die Qualität der erarbeiteten Eingangsgrößen der Simulation. Die Wärmefreisetzungsrate zeigte sich besonders empfindlich gegenüber Veränderungen der Wärmekapazität, des Absorptionskoeffizienten und der Zersetzungsenthalpie der Probe.

Die Ergebnisse verdeutlichen, dass durch die Erarbeitung detaillierter Eingabeparameter die Wärmefreisetzungsrate eines Werkstoffs im Brandszenario SBI Test mit dem Programm FDS berechnet werden kann. Neben dem Wärmeeintrag aus der Gasphase kommt dabei vor allem den physikalischen und chemischen Eigenschaften der Probe eine besondere Bedeutung zu. Hier liefern die Kenntnisse zur thermischen Zersetzung und zum Brandverhalten von Werkstoffen aus der Polymerwissenschaft einen wertvollen Beitrag zur Bestimmung der Eingabeparameter und zum Ausschöpfen der Potentiale der Brandsimulation. Die Ergebnisse der Untersuchungen zeigen damit zum einen den Weg zur Optimierung von Brandsimulationen durch die konsequente Nutzung polymerwissenschaftlicher Erkenntnisse und Methoden auf. Zum anderen verdeutlichen die Berechnungsergebnisse das Potential der Brandsimulationen die Materialentwicklung zu unterstützen. Durch gezielte Parametervariationen können weiterführende Informationen zu den Struktur-Eigenschaftsbeziehungen hinsichtlich des Brandverhaltens der Werkstoffe erarbeitet werden.

6 Massenverlustrate im Cone Kalorimeter Test

Das dritte Beispiel zur komplementären Nutzung von Brandsimulation und Polymerwissenschaft in der Dimension Kubikdezimeter beschäftigt sich mit der Simulation der Massenverlustrate von polymeren Werkstoffen im Cone Kalorimeter Test. Im vorangegangenen Kapitel wurde das Potential von Simulationsmodellen untersucht, das Brandverhalten eines Werkstoffs unter Berücksichtigung der Wechselwirkungen zwischen Gasphase und Festphase zu berechnen. Im Mittelpunkt der Untersuchungen zum Cone Kalorimeter Test stehen nun ausschließlich Pyrolysemodelle zur Beschreibung der thermischen Zersetzung von Feststoffen. Der Schwerpunkt liegt zum einen in der detaillierten Bestimmung der Materialeigenschaften und zum anderen in der Validierung der Berechnungen anhand von Versuchsdaten, die unter umfassender Variation der Randbedingungen experimentell bestimmt wurden. Das Kapitel gibt zunächst einen Überblick über die Charakteristika des Brandszenarios Cone Kalorimeter. Anschließend werden der Aufbau des Simulationsmodells erläutert und die Ausprägungen hinsichtlich Geometrie und Diskretisierung sowie der Eingabeparameter und Randbedingungen vorgestellt. Danach werden die Ergebnisse von Simulation und Experiment verglichen und der Einfluss ausgewählter Parameter auf die Berechnungen im Rahmen einer Parameterstudie untersucht. Das Kapitel endet mit einem Zwischenfazit der Untersuchungen.

6.1 Charakteristika des Brandszenarios

Der Cone Kalorimeter Test zeichnet sich dadurch aus, dass an vergleichsweise kleinen Probekörpern brandrelevante Materialeigenschaften quantitativ bestimmt und bei für einen Brand realistischen Bestrahlungsstärken von bis zu 100 kW/m^2 untersucht werden. Abbildung 6.1 zeigt links die für die vorliegende Arbeit verwendete Prüfapparatur. Auf der rechten Seite ist eine brennende Probe während eines Versuchs dargestellt.

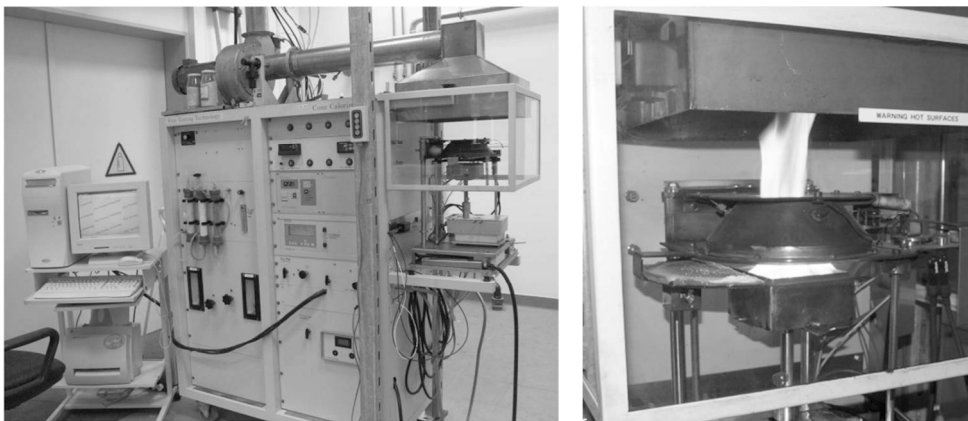


Abbildung 6.1: Aufnahme der verwendeten Cone Kalorimeter Prüfapparatur (links) und Nahaufnahme einer brennenden Probe während eines Versuchs (rechts).

Der abgeschirmte Prüfraum hat ein Volumen von etwa 80 dm^3 . Bestrahlt wird die Oberfläche der Probekörper, die typischerweise eine Fläche von $0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m}$ besitzt. Auf

dem Gebiet des Brandingenieurwesens stellen die Probenabmessungen den unteren Bereich der betrachteten Größenskalen dar, im Bereich der Polymerwissenschaft sind sie dem oberen Größenbereich der Probengeometrien zuzurechnen. In diesem Sinne stellt der Cone Kalorimeter eine mehr und mehr an Bedeutung gewinnende Verbindung dieser beiden wissenschaftlichen Disziplinen dar [11].

Die konusförmige Heizspirale, auf die der Name der Prüfapparatur zurückgeht, ist derart konstruiert, dass die Probenoberfläche einer möglichst gleichförmigen Wärmestrahlung ausgesetzt wird. Diese Bestrahlungsstärke ist zum einen abhängig von der Temperatur der Heizspirale und zum anderen vom Abstand zur Probenoberfläche zur Heizspirale. Die Konstruktion der Heizspirale ist optimiert für Versuchsaufbauten mit einem Abstand von etwa 25 mm zwischen Probe und Unterkante der Heizspirale. In diesem Bereich kann von einer gleichförmigen Bestrahlung der Probenoberfläche ausgegangen werden. Abbildung 6.2 belegt diese Annahme für die verwendete Prüfapparatur. Anhand eines Rasters mit 25 Messpunkten wurde die Verteilung der Bestrahlungsstärke auf der Probenoberfläche bei einem Abstand von 25 mm zur Heizspirale bestimmt. Dazu wurde mit dem zur Kalibrierung vorgesehenen Wärmestromsensor die Bestrahlungsstärke an 25 Punkten einer im Probenhalter eingespannten und gelochten Kalzium-Silikat-Platte (Abbildung 6.2 links) gemessen. Das Diagramm in Abbildung 6.2 rechts zeigt die gemessenen Bestrahlungsstärken in kW/m^2 bei einer zuvor in der Mitte des Prüfaufbaus eingestellten Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 . In weiten Bereichen der Fläche ist die Bestrahlungsstärke der Probenoberfläche gleichförmig, nur in den Ecken fällt sie leicht ab auf Werte von bis zu $47,5 \text{ kW/m}^2$. Der Mittelwert der 25 Messpunkte beträgt $50,5 \text{ kW/m}^2$, die Standardabweichung liegt bei $1,2 \text{ kW/m}^2$ bzw. bei $0,6 \text{ kW/m}^2$ ohne Berücksichtigung der vier Eckpunkte.

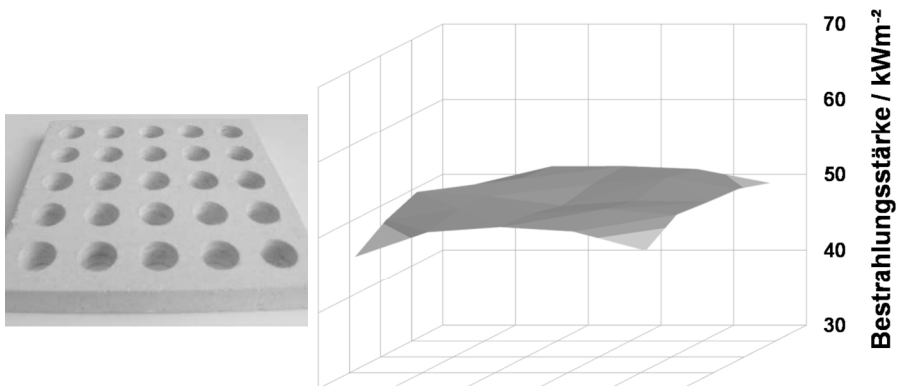


Abbildung 6.2: Kalzium-Silikat-Platte mit 25 Messpunkten zur Messung der Bestrahlungsstärke im Cone Kalorimeter (links) und die damit bestimmte Verteilung der Bestrahlungsstärke bei einem Abstand von 25 mm zur Unterkante der Heizspirale (rechts).

Das Brandszenario des Cone Kalorimeters ist neben der konstanten externen Wärmestrahlungsquelle durch folgende Eigenschaften gekennzeichnet:

- die Entzündung der freigesetzten Brennstoffgase wird durch einen Funken unterstützt

6 Massenverlustrate im Cone Kalorimeter Test

- die Verbrennung findet unter gut ventilerten Bedingungen statt
- der Versuchsaufbau ist horizontal, Tropfen und Fließen wird dadurch verhindert
- horizontale Brandausbreitung wird nicht berücksichtigt
- die Verbrennung findet folglich eindimensional in Dickenrichtung der Probe statt [11]

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden neben den Cone Kalorimeter Tests auch dem Cone Kalorimeter nahezu identische Experimente unter Stickstoff-Atmosphäre durchgeführt. Abbildung 6.3 zeigt auf der linken Seite den am National Institute for Standards and Technology NIST (USA) entwickelten und betriebenen Gasification Apparatus. Der Gasification Apparatus ermöglicht die Untersuchung der Pyrolyse von Werkstoffen ohne die Einflüsse der Verbrennungsreaktionen in der Gasphase und der damit verbundenen Wärmerückkopplung auf den Probekörper. Die Stickstoff Atmosphäre in der Prüfkammer unterbindet die Oxidation der brennbaren Pyrolysegase. Dadurch ist es ferner möglich die Probenoberfläche während der Pyrolyse zu beobachten. Abbildung 6.3 rechts zeigt eine Probe während des Versuchs im Gasification Apparatus bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 . Deutlich zu erkennen sind Bläschen unterschiedlicher Größe, die durch aufsteigende Pyrolysegase gebildet werden.

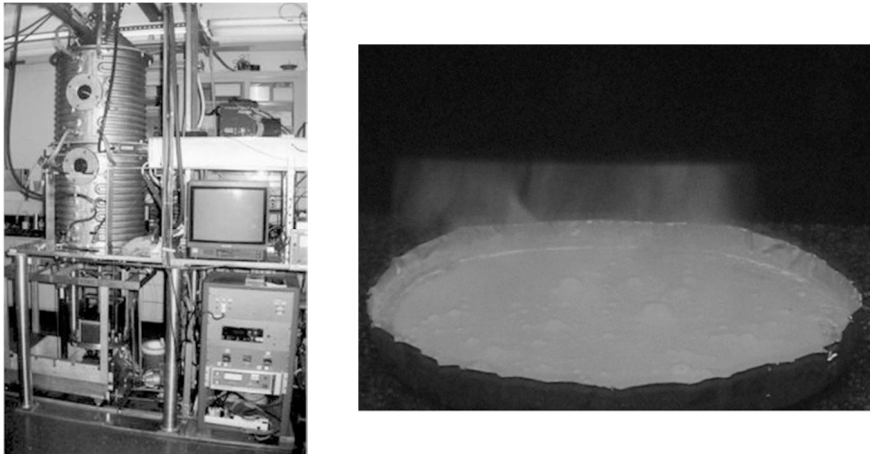


Abbildung 6.3: Aufnahme des am NIST betriebenen Gasification Apparatus (links) sowie die Nahaufnahme einer Probe (rechts) während eines Versuchs (Quelle: Dr. Kashiwagi, NIST).

Die experimentellen Untersuchungen im Cone Kalorimeter und im Gasification Apparatus dienen in erster Linie der Validierung der Simulationsmodelle. Für die Versuchsreihen wurden zwei Materialien ausgewählt, die sich unter anderem hinsichtlich der Rückstandsbildung unterscheiden. Es handelt sich zum einen um Polybutylenterephthalat (PBT) der Marke DSM Engineering Plastics Arnite T06 200 [134] und zum anderen um PBT verstärkt mit 30 Gew.-% Glasfasern (PBT-GF) der Marke DSM Engineering Plastics Arnite TV4 261 [135]. PBT verbrennt nahezu rückstandsfrei und PBT-GF hinterlässt etwa 30 Gew.-% Rückstand. Aus den Materialien wurden Probekörper der Abmessungen $100 \text{ mm} \times 100 \text{ mm} \times 4 \text{ mm}$ im Spritzgussverfahren hergestellt.

Im Mittelpunkt der Untersuchungen zu den Brandszenarien Cone Kalorimeter bzw. Gasification Apparat steht der Vergleich von Simulation und Experiment. Die Validierung der Simulationsergebnisse findet anhand der Massenverlustrate der Materialien unter den jeweiligen Versuchsbedingungen statt. Im Gasification Apparat Experiment wird ausschließlich die Massenverlustrate bestimmt. Im Cone Kalorimeter Test wird darüber hinaus mittels der Sauerstoffverbrauchsmethode die Wärmefreisetzungsrate der Probe ermittelt. Für die untersuchten Materialien und unter den gewählten Versuchsbedingungen im Cone Kalorimeter ist das Verhältnis von Massenverlustrate zu Wärmefreisetzungsrate konstant, mit der effektiven Verbrennungswärme als Proportionalitätsfaktor. Da gleichzeitig das Messsignal der Massenbestimmung u.a. bedingt durch die Konstruktion des Prüfaufbaus einem ausgeprägten Rauschen unterliegt, wurde die zur Validierung herangezogene Massenverlustrate im Cone Kalorimeter über die Wärmefreisetzungsrate durch Division mit der mittleren effektiven Verbrennungswärme berechnet. Abbildung 6.4 stellt die Massenverlustraten von PBT im Cone Kalorimeter (PBT CC, MLR) und im Gasification Apparat (PBT GA, MLR) sowie die aus Wärmefreisetzungsrate und mittlerer effektiver Verbrennungswärme berechneter Massenverlustrate (PBT CC, HRR/h_c) bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m² gegenüber. Die gemessene und die berechnete Massenverlustrate im Cone Kalorimeter liegen direkt übereinander und verdeutlichen die über den gesamten Versuchsablauf konstante effektive Verbrennungswärme.

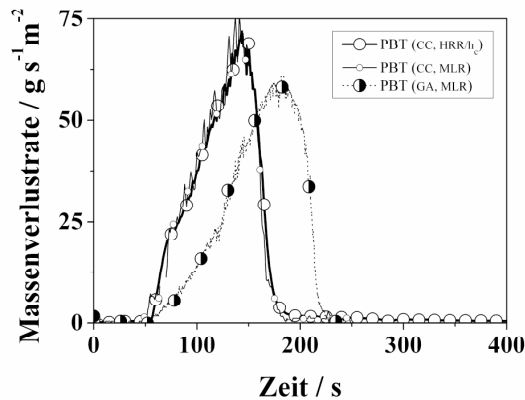


Abbildung 6.4: Vergleich der Massenverlustrate von PBT im Gasification Apparat (PBT GA, MLR) und der gemessenen (PBT CC, MLR) und berechneten Massenverlustrate (PBT CC, HRR/h_c) im Cone Kalorimeter bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m².

Der Vergleich in Abbildung 6.4 der Massenverlustraten von PBT zeigt anhand der identischen Zeit bis zur Zersetzung des Materials, dass die Verhältnisse in Cone Kalorimeter und Gasification Apparat bis zum Beginn des Massenverlustes bzw. der Entzündung vergleichbar sind. Unmittelbar nach der Entzündung weisen die beiden Graphen deutliche Unterschiede auf. Bedingt durch die Flamme und die damit verbundene Erhöhung des Wärmeeintrags auf die Probe steigt die Massenverlustrate im Cone Kalorimeter schneller an als im Gasification Apparat. Ferner ist die Zeit bis zum Erreichen des Maximums kürzer, der Wert des Maximums höher und die gesamte Dauer des Massenverlustes verkürzt.

Abbildung 6.5 zeigt den Vergleich der Massenverlustrate von PBT-GF im Cone Kalorimeter und im Gasification Apparatus bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 . Die identische Zeit bis zur Entzündung belegt erneut die bis dorthin vergleichbaren Versuchsbedingungen. Wie schon in den Versuchen mit PBT führt das Brennen der Probe im Cone Kalorimeter zu einem steileren Anstieg, dem früheren Erreichen eines erhöhten Maximums und der insgesamt reduzierten Brenndauer. Während der Verlauf der Massenverlustrate von PBT dem typischen Verlauf einer Probe mittlerer Dicke entspricht, die keinen Rückstand bildet, zeigt die Massenverlustrate von PBT-GF die Charakteristika einer Rückstand bildenden Probe mit einem frühen Maximum und einem darauffolgenden Plateau. [11, 15] Ähnliche Massenverlustraten für PBT und PBT-GF sind aus der Literatur bekannt [136, 137, 138]. Im Gegensatz zu PBT verändert jedoch der Graph von PBT-GF unter der Flammeneinwirkung seine grundsätzliche Form sehr deutlich. Während ohne Flamme im Gasification Apparatus die Massenverlustrate von PBT-GF nach einem sehr breiten ersten Plateau bzw. Maximum langsam abfällt, zeigt der Verlauf im Cone Kalorimeter ein ausgeprägtes erstes Maximum, ein darauffolgendes breites Plateau und nach einem leichten Anstieg zu einem zweiten Maximum einen deutlichen Abfall der Massenverlustrate.

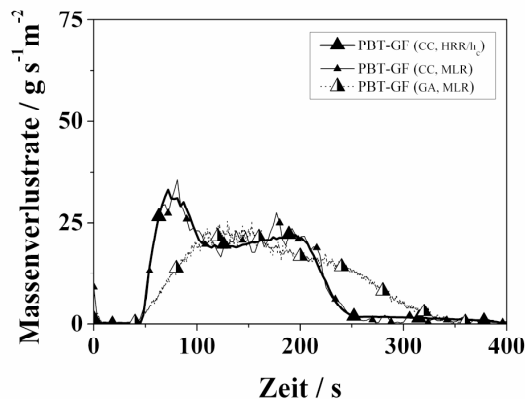


Abbildung 6.5: Vergleich der Massenverlustrate von PBT-GF im Gasification Apparatus (PBT-GF GA, MLR) und der gemessenen (PBT-GF CC, MLR) und berechneten Massenverlustrate (PBT-GF CC, HRR/h_c) im Cone Kalorimeter bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 .

Die charakteristischen Kennwerte der Massenverlustraten von PBT und PBT-GF in Cone Kalorimeter und Gasification Apparatus bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 sind in Tabelle 6.1 zusammengefasst. Dabei entspricht die Zeit bis zum Massenverlust (tML) der Zeit, bis die Massenverlustrate 1 g/s/m^2 überschreitet. Die gesamte Dauer der Pyrolyse (tPYR) ist die Zeitspanne zwischen dem Beginn der Massenfreesetzung tML und dem Zeitpunkt, an dem die Massenverlustrate unter 3 g/s/m^2 fällt. Die Grenzwerte der Massenverlustrate für die Entzündung (1 g/s/m^2) und das Verlöschen (3 g/s/m^2) entsprechen den experimentell ermittelten Durchschnittswerten von Polymeren [19]. Als dritte charakteristische Größe ist das Maximum der Wärmefreisetzungsrate (MaxMLR) angegeben. Die Zugabe von 30 Gew.-% Glasfasern in PBT verringert die tML um durchschnittlich 14 % bis 17 %, verlängert die tPYR um ca. 54 % bis 63 % und führt zu einem um ca. 54 % bis 58 % reduzierten MaxMLR (siehe letzte Spalte in Tabelle 6.1). Die Pyrolyse unter Flammenein-

wirkung führt zu keiner nennenswerten Veränderung der tML, verringert die tPYR um 24 % bis 28 % und erhöht das MaxMLR von PBT um 18 % und von PBT-GF um 32 % (siehe Δ CC/GA in der 3., 6. und 9. Zeile der Tabelle 6.1).

Tabelle 6.1: Charakteristische Kennwerte der Massenverlustraten von PBT und PBT-GF in Gasification Apparat (GA) und Cone Kalorimeter (CC) bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m²

Parameter	Einheit	Versuch	PBT	PBT-GF	Δ PBT/PBT-GF
tML	s	GA	56	47	-17 %
		CC	56	48	-14 %
		Δ CC/GA	0 %	2 %	
tPYR	s	GA	166	270	63 %
		CC	127	195	54 %
		Δ CC/GA	-24 %	-28 %	
MaxMLR	g/s/m ²	GA	60	25	-58 %
		CC	71	33	-54 %
		Δ CC/GA	18 %	32 %	

Die kontrollierten Bedingungen insbesondere hinsichtlich des Wärmeeintrags auf die Probe sowie die umfangreichen Messvorrichtungen machen den Cone Kalorimeter zu einem wertvollen Instrument zur quantitativen Untersuchung des Brandverhaltens von Polymeren. Auch die relative Messunsicherheit der Wärmefreisetzungsrates ist mit etwa 10 % vergleichsweise gering. [139-142] Die Bedeutung des Cone Kalorimeters für die Brandsimulation ist vielfältig. [11, 143] Einerseits dienen die Versuche der Bestimmung von Eingangsparametern der Simulationen. [75, 76, 77]. Andererseits werden Cone Kalorimeter Versuche zur Validierung von Simulationsmodellen verwendet. [60, 79].

Es hat sich gezeigt, dass numerische Pyrolysemodelle in einer eindimensionalen Konfiguration insbesondere in der Lage sind, die Massenverlustrate bzw. Wärmefreisetzungsrates von Materialien zu berechnen, die keinen Rückstand bilden. [41, 144-148] Hinsichtlich der Berechnung des komplexen Brandverhaltens von Rückstand bildenden Materialien gibt es weitaus weniger Untersuchungen. [50, 79, 151-154] Immer öfter wird bei der numerischen Brandsimulation auf Algorithmen zurückgegriffen, die zur Abbildung der jeweiligen Massenverlustraten passende Eingabeparameter generieren, ohne dass diese im direkten Bezug mit den Werkstoffeigenschaften stehen müssen. [155, 156]

Das vorliegende Kapitel zielt auf die Untersuchung des Potentials zweier Pyrolysemodelle ab, die Massenverlustrate eines Rückstand bildenden und eines nahezu ohne Rückstand verbrennenden Materials zu berechnen. Die Berechnungen verfolgen dabei konsequent den Ansatz, die notwendigen Eingabeparameter einzeln und unabhängig von der Simulation ohne iterative Anpassungen zu bestimmen. Im Folgenden werden zunächst der Aufbau der Simulationsmodelle und die Erarbeitung der Eingabeparameter detailliert beschrieben. Anschließend werden die Ergebnisse der Simulationen und der Experimente miteinander verglichen und im Rahmen einer Parameterstudie der Einfluss ausgewählter Parameter auf das Simulationsergebnis untersucht.

6.2 Aufbau des Simulationsmodells

Der Aufbau der Simulationsmodelle basiert auf der Annahme, dass die Ausbreitung der Pyrolyse im Gasification Apparatus bzw. Cone Kalorimeter eindimensional in Dickenrichtung der Probe stattfindet. Für die Untersuchungen zum Brandszenario Cone Kalorimeter wurden zwei unterschiedliche Pyrolysemodelle verwendet, die beide für die Berechnung der eindimensionalen thermischen Zersetzung von Werkstoffen optimiert sind. Es handelt sich dabei um das Pyrolysemodell des Feldmodells FDS, Version 5.4.3 - SVN 4210, und das reine Pyrolysemodell ThermaKin. Zur Beschreibung des Modellaufbaus gehören Geometrie und Diskretisierung sowie die Eingabeparameter und Randbedingungen.

6.2.1 Geometrie und Diskretisierung

Zur Berechnung der eindimensionalen Pyrolyse mit dem Pyrolysemodell des Feldmodells FDS wird in Anlehnung an [71] ein 3-D Strömungsfeld zur Initialisierung des numerischen Lösungsalgorithmus (Solver) benötigt. Die verwendete 3-D Geometrie besteht aus $3 \times 3 \times 4$ kubischen Zellen mit der Gitterweite von 0,1 m. Die Begrenzungen des Strömungsgebiets zur Seite und nach oben sind als offener Rand definiert und die Sauerstoffkonzentration mit einem Massenanteil von 0,01 Gew.-% initialisiert. Damit ist die Verbrennungsreaktion in der Gasphase faktisch ausgeschaltet und die relevanten Ergebnisse des Programms konzentrieren sich auf die Pyrolyse. Die entscheidenden Informationen (Bestrahlung, Materialeigenschaften, etc.) für das eindimensionale Pyrolysemodell, welches unabhängig von der gewählten 3-D Geometrie bzw. 3-D Gitterweite abläuft, werden regelmäßig einer beliebigen Zelloberfläche der 3-D Geometrie zugeordnet. In diesem Fall wurden die Informationen auf der Randfläche der mittleren Zelle an der Unterseite der Geometrie appliziert. In Anlehnung an den Versuchsaufbau im Cone Kalorimeter ist die Probe damit horizontal ausgerichtet und besitzt eine Oberfläche von $0,1 \text{ m} \times 0,1 \text{ m}$.

Das Programm ThermaKin stellt in der verwendeten Version ein reines, eindimensionales Pyrolysemodell dar. Die Berechnungsparameter für ThermaKin als auch für FDS wurden so eingestellt, dass die Probendicke von 4 mm durch mindestens 100 Zellen bzw. Berechnungsknoten diskretisiert ist. Der Zeitschritt der Berechnung wurde auf 0,01 s festgelegt. Eine weitere Reduzierung der zeitlichen oder räumlichen Diskretisierung führte zu keiner substantiellen Änderung der Simulationsergebnisse.

6.2.2 Eingabeparameter und Randbedingungen

Die Eingabeparameter zur Berechnung der Massenverlustrate im Brandszenario Cone Kalorimeter konzentrieren sich vor allem auf die Materialeigenschaften der Werkstoffe PBT und PBT-GF. Daneben gilt es, die Randbedingungen unter anderem hinsichtlich des Wärmeeintrags möglichst exakt zu definieren. Im Folgenden werden die verwendeten Eingabeparameter ausführlich erläutert.

Probendicke und -dichte: Wie auch in den Experimenten besitzen die simulierten Proben eine Ausgangsdicke von 4 mm. Insbesondere im Gasification Apparatus ist anhand der gut zu beobachtenden Volumenvergrößerung zu erkennen, dass sich während des Aufheizens die Dichte der Proben ändert. Dichtemessungen am Werkstoff PBT ergaben eine Abnahme der Dichte um 9 % zwischen RT und 260 °C. Abbildung 6.6 zeigt den Verlauf

der Dichte über der Temperatur, bestimmt am Institut für Polymerforschung IPF Dresden mit einer Gnomix-pVT-Apparatur.

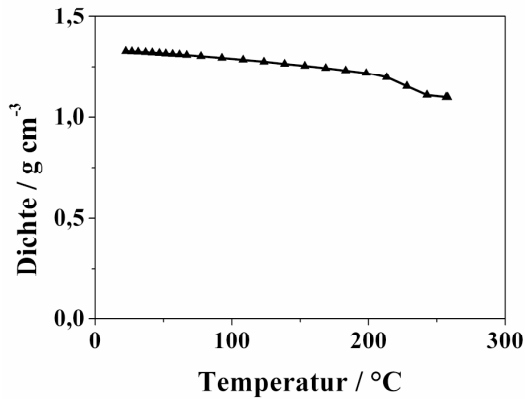


Abbildung 6.6: Dichteverlauf von PBT über der Temperatur gemessen mit einer pVT Apparatur am IPF Dresden (Quelle: Dr. Pionteck, IPF Dresden).

Für die Simulationen wurde eine konstante Dichte von 1300 kg/m^3 für PBT und von 1520 kg/m^3 für PBT-GF verwendet. Die Werte entstammen den Datenblättern der Werkstoffe und wurden in eigenen Messungen nach dem Auftriebsprinzip mit einer Abweichung von weniger als 2 % bestätigt. Die konstanten Werte wurden gewählt, um eine Vergleichbarkeit der beiden Simulationsprogramme zu gewährleisten. In der verwendeten FDS Version ist die Dichte nur als Konstante und nicht als Funktion der Temperatur einzugeben.

Optische Eigenschaften: Das Absorptionsverhalten eines Werkstoffs hinsichtlich der Wärmestrahlung wird über die Rückstrahlung oder Reflektion an der Oberfläche und den Absorptionskoeffizienten in Anlehnung an das Lambert-Beer'sche Gesetz beschrieben. Diese beiden optischen Eigenschaften wurden mit einem FTIR Spektrometer bestimmt. Zusätzlich wurde die Breitband Transmission der Proben unter einer konusförmigen Heizspirale (Temperatur: 1081 K) mit Hilfe eines Wärmestrommessers (Typ Schmidt-Boelter) gemessen. Beide Versuche lieferten vergleichbare Ergebnisse hinsichtlich der Strahlungstransmission und damit des Absorptionskoeffizienten. [61] Abbildung 6.7 zeigt die Ergebnisse der Transmissions- und Reflexionsmessungen an PBT Proben unterschiedlicher Dicke. Deutlich erkennbar ist der mit zunehmender Dicke abnehmende Absorptionskoeffizient.

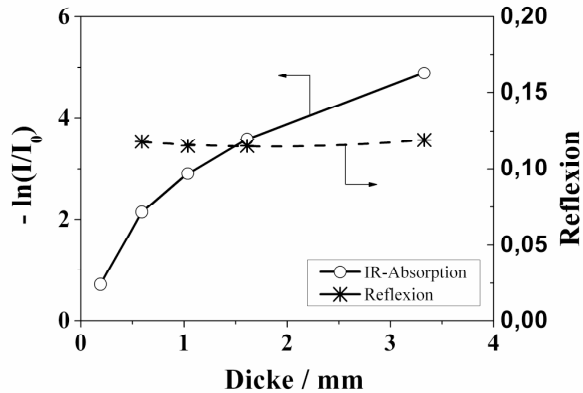


Abbildung 6.7: Wärmestrahlungsabsorption und -reflexion gemessenen im FTIR Spektrometer für den Werkstoff PBT.

Die FTIR Messungen am Werkstoff PBT-GF sind in Abbildung 6.8 dargestellt. Der Anteil der reflektierten Strahlung beträgt 13 % (PBT: 12 %). Die Werte der Emissivität berechnen sich zu Emissivität = 1 - Reflexion. Die Absorptionskoeffizienten für PBT und PBT-GF wurden in Anlehnung an das Bouguer'sche Gesetz anhand der Breitband Transmissionsmessungen unter der konusförmigen Heizspirale bei einer charakteristischen Probendicke von 1 mm bestimmt. Demnach liegt der Absorptionskoeffizient von PBT bei 2560 1/m und von PBT-GF bei 2860 1/m. Trotz aufwendiger Bestimmung der optischen Eigenschaften bleiben in den Versuchen auftretende Effekte, wie beispielweise lokale Deformation der Oberflächen, Blasenbildung oder andere transiente und temperaturabhängige Faktoren unberücksichtigt.

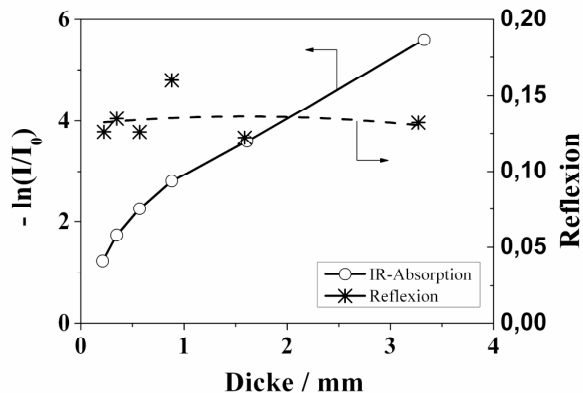


Abbildung 6.8: Wärmestrahlungsabsorption und -reflexion gemessenen im FTIR Spektrometer für den Werkstoff PBT-GF.

Thermische Materialeigenschaften: Die thermischen Eigenschaften spezifische Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit wurden für beide Werkstoffe in Abhängigkeit von

der Temperatur bestimmt. Die aus den DSC Messungen erhaltenen Ergebnisse der Wärmekapazität als Funktion der Temperatur für PBT und PBT-GF sind in Abbildung 6.9 zusammen mit den Werten aus den Datenblättern und dem letztlich in den Berechnungen verwendeten Verlauf aufgetragen. Bei Raumtemperatur beträgt die spezifische Wärmekapazität von PBT 1,1 kJ/kg/K und von PBT-GF 0,8 kJ/kg/K. Mit steigender Temperatur nimmt auch die Wärmekapazität zu und erreicht Werte von 1,85 kJ/kg/K für PBT bzw. 2,25 kJ/kg/K für PBT-GF. PBT weist als teilkristalliner Thermoplast eine mit der DSC bestimmten Schmelzenthalpie von 46 kJ/kg auf. Die Schmelztemperatur liegt bei 493,25 K. Die Schmelzenthalpie von PBT-GF beträgt 32 kJ/kg und entspricht damit dem PBT Gehalt in PBT-GF.

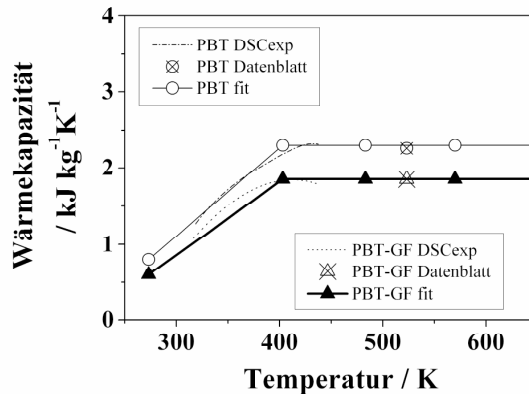


Abbildung 6.9: Spezifische Wärmekapazität als Funktion der Temperatur der Werkstoffe PBT und PBT-GF.

Die thermische Leitfähigkeit der Werkstoffe wurde mit einem HAAKE Thermoflizer in Abhängigkeit von der Temperatur zwischen 300 K und 570 K bestimmt. In der Messapparatur wird eine dünne, linienförmige Heizquelle verwendet, um beginnend in der Mittelachse eine zylinderförmige Probe aufzuheizen. Aus der Temperaturmessung in radialer Richtung wird die Wärmeleitfähigkeit bestimmt. Diese als "Line Source Method" bezeichnete Methode zur Messung der Wärmeleitfähigkeit ist unempfindlich gegen Störeinflüsse u.a. infolge der thermischen Diffusivität. Abbildung 6.10 zeigt die Messergebnisse für die beiden Werkstoffe PBT und PBT-GF sowie die für die Berechnungen verwendeten angepassten Verläufe. Die Wärmeleitfähigkeit bei Raumtemperatur beträgt für PBT 0,25 W/m/K und für PBT-GF 0,3 W/m/K. Mit steigender Temperatur steigt auch die Wärmeleitfähigkeit auf Werte von maximal 0,4 W/m/K für PBT und 0,32 W/m/K für PBT-GF.

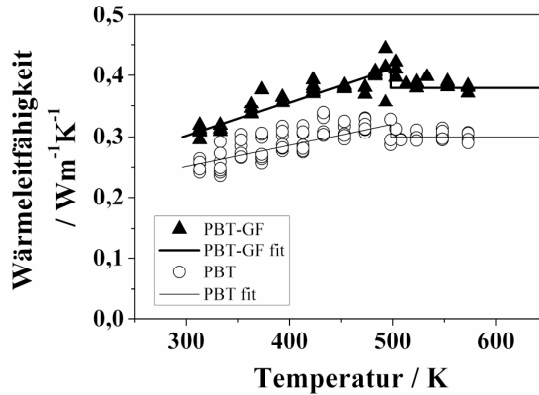


Abbildung 6.10: Thermische Leitfähigkeit als Funktion der Temperatur der Werkstoffe PBT und PBT-GF.

Zersetzungsparameter: Die thermische Zersetzung der Werkstoffe PBT und PBT-GF wurde in der TGA untersucht. Im Folgenden werden nur die Ergebnisse unter Stickstoff-Atmosphäre präsentiert. Hintergrund ist zum einen, dass die Zersetzungsprozesse im Cone Kalorimeter im Wesentlichen anaerob ablaufen. Zum anderen weist die Zersetzung von PBT unter Luft keine wesentlichen Unterschiede auf, was auch in anderen Arbeiten bestätigt wurde [157]. Abbildung 6.11 zeigt den Massenverlauf von PBT und PBT-GF über der Temperatur bei einer Heizrate von 10 K/min unter Stickstoff-Atmosphäre sowie die Massenverlustrate. Die Zersetzung der beiden Werkstoffe findet jeweils in einer Abbaustufe statt. Folglich wurde in den Pyrolysemodellen für die Zersetzung der Werkstoffe jeweils eine einzige Zersetzungsreaktion formuliert. In der thermischen Analyse bei 1000 K hinterlässt PBT einen Rückstand von 7 Gew.-% und PBT-GF von 36 Gew.-%. In den Cone Kalorimeter Versuchen betrug der Rückstand für PBT 3 Gew.-% und für PBT-GF 32 Gew.-%. Diese Werte wurden auch in den Simulationen des Cone Kalorimeter Szenarios verwendet.

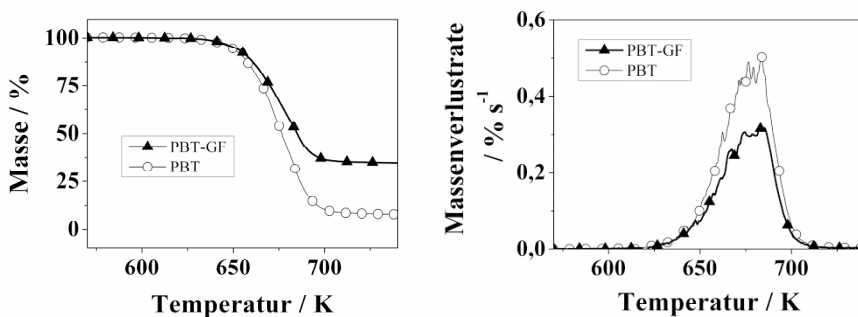


Abbildung 6.11: TG- (links) und DTG-Signale (rechts) von PBT und PBT-GF Proben bei einer Heizrate von 10 K/min.

Trägt man die relative PBT Masse bezogen auf den anfänglichen PBT Gehalt der beiden Werkstoffe PBT (PBT Ausgangsgehalt: 100 Gew.-%) und PBT-GF (PBT Ausgangs-

gehalt: 70 Gew.-%) über der Temperatur auf, wird deutlich, dass das Abbauverhalten von PBT durch die Zugabe von 30 Gew.-% Glasfasern nicht beeinflusst wird. Abbildung 6.12 zeigt den Verlauf der relativen Massen für Heizraten zwischen 1 K/min und 20 K/min. Die Glasfasern in PBT-GF verhalten sich wie ein inerter Füllstoff und die Kurven der relativen Masse bezogen auf den anfänglichen PBT Gehalt von PBT und PBT-GF liegen übereinander.

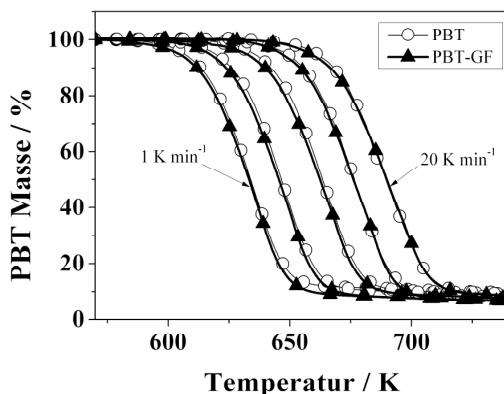


Abbildung 6.12: TG-Signale bezogen auf den anfänglichen PBT Gehalt der Werkstoffe PBT und PBT-GF bei Heizraten von 1 K/min, 2 K/min, 5 K/min, 10 K/min und 20 K/min.

Die Pyrolysemodelle von FDS und ThermoKin basieren auf dem Arrhenius Ansatz zur Beschreibung der thermischen Zersetzung. Die zur Beschreibung der Zersetzungsreaktion benötigten Parameter sind die Aktivierungsenergie und der Arrhenius Koeffizient. Die Zersetzung von PBT und PBT-GF wurde in der Simulation als einstufige Reaktion erster Ordnung behandelt. Die zugehörigen Parameter wurden in Anlehnung an [60] aus den TG Kurven gewonnen. Aufgrund des in Abbildung 6.12 dargestellten identischen Abbauverhaltens wurde für PBT und PBT-GF der gleiche Parametersatz verwendet. Abbildung 6.13 zeigt die Reaktionsraten der einzelnen TG Versuche in Arrhenius Schreibweise (natürlicher Logarithmus der Reaktionsrate über dem Kehrwert der Temperatur). Die Reaktionsrate wird dabei durch numerische Differenzierung der Masse der TG Daten nach der Zeit bestimmt. Aus dem Schnittpunkt der Ausgleichsgeraden mit der Ordinatenachse erhält man den Arrhenius Koeffizienten. Die Aktivierungsenergie berechnet sich aus der Steigung der Ausgleichsgeraden. Die für beide Werkstoffe PBT und PBT-GF verwendete Aktivierungsenergie beträgt 212479 J/mol, der Arrhenius Koeffizient $2,494 \times 10^{14}$ 1/s.

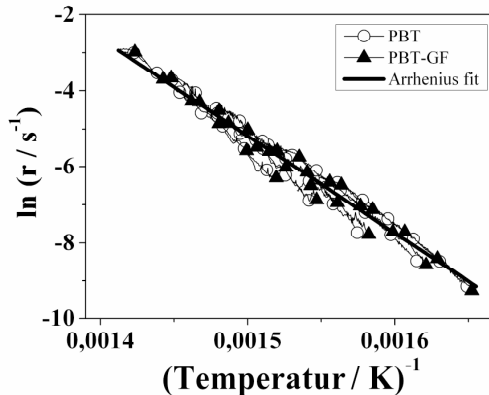


Abbildung 6.13: Reaktionsrate r (siehe [60]) von PBT und PBT-GF sowie die zugehörige Ausgleichsgerade (Arrhenius fit) dargestellt in Arrhenius Koordinaten.

Die Energie, die man zur Überwindung der Bindungskräfte und damit zur Zersetzung in den gasförmigen Zustand eines Materials benötigt, ist die Zersetzungsenthalpie. Während die Vergasungsenthalpie die gesamte zum Erwärmen und Aufschmelzen der Werkstoffe vom Ausgangszustand bei Raumtemperatur bis einschließlich der Zersetzung benötigte Energie bezeichnet, bezieht sich die Zersetzungsenthalpie auf die Energie der theoretisch isotherm ablaufenden Zersetzung. Literaturwerte zur Zersetzungsenthalpie von Polymeren sind rar. Als Messmethode bieten sich grundsätzlich DSC Versuche in Anlehnung an [52] an, die über die Zersetzungstemperatur hinaus durchgeführt werden. Die Messunsicherheit dieser Methode ist mit 20 % relativ hoch und wird mit Ablagerungen der Zersetzungsprodukte und zunehmendem Drift der Basislinie bei hohen Temperaturen weiter erhöht.

Die in den Simulationen verwendete Zersetzungsenthalpie wurde aus der Vergasungsenthalpie berechnet. Die Vergasungsenthalpie von PBT beträgt laut [19] 1300 kJ/kg. Durch Abzug der in Anlehnung an die thermischen Materialeigenschaften zum Erwärmen und Aufschmelzen der Probe bis zur Zersetzungstemperatur benötigten Energie erhält man die Zersetzungsenthalpie. Die Zersetzungstemperatur wurde aus den TG Kurven mit einer Aufheizrate von 20 K/min bestimmt und beträgt 650 K. Daraus folgt eine Zersetzungsenthalpie für PBT von 507 kJ/kg. Die Zersetzungsenthalpie für PBT-GF beträgt in Anbetracht des PBT Gehaltes von 70 Gew.-% 355 kJ/kg.

Die Annahme einer konstanten Zersetzungsenthalpie in Verbindung mit einer konstanten Zersetzungstemperatur wird in der Literatur kritisch gesehen [158]. Diese Problematik soll an folgendem Beispiel verdeutlicht werden: Verwendet man zur Bestimmung der Zersetzungsenthalpie von PBT nach obigem Ansatz nicht die Zersetzungstemperatur der TG Kurven mit der Heizrate von 20 K/min, sondern diejenigen mit der Heizrate von 1 K/min, so beträgt die Zersetzungstemperatur 600 K anstelle von 650 K. Damit erhält man eine um 24 % höhere Zersetzungsenthalpie für PBT. Welchen Einfluss dies auf die Simulation der Pyrolyse von PBT und PBT-GF hätte, wird im Abschnitt 6.4 Parameterstudie untersucht.

Eigenschaften des Rückstandes: Wird während der Pyrolyse eines Polymers Rückstand gebildet, so kann dadurch die Wärme- und Stoffübertragung der Probe stark beeinflusst werden. Der Werkstoff PBT-GF bildet einen Rückstand von 32 Gew.-%. Folglich sind die Eigenschaften des Rückstands bei der Berechnung der Wärmeübertragung zu berücksichtigen. Bei der Simulation des Werkstoffs PBT wurde dagegen auf eine Berücksichtigung des Einflusses von 3 Gew.-% Rückstand auf die thermischen Verhältnisse verzichtet. Gerade im Gasification Apparat wurde beobachtet, dass der feine, instabile Rückstand bei den Versuchen von PBT erst am Ende des Tests erkennbar wurde und darüber hinaus keine flächendeckende Struktur aufwies.

Die Dichte des im Wesentlichen aus den Glasfasern bestehenden GF-Rückstands von PBT-GF wurde in Anlehnung an den PBT-Gehalt, die Ausgangsdichten von PBT-GF und PBT und unter der Annahme, dass die Ausgangsdicke der Probe erhalten bleibt, berechnet. Die Emissivität des GF-Rückstands von 0,85 wurde den Literaturwerten für Glas entnommen [159]. Der Absorptionskoeffizient wurde unter Berücksichtigung des durch die Glasfasern bedingten Unterschiedes der Absorptionskoeffizienten von PBT und PBT-GF abgeschätzt. Die Wärmekapazität des GF-Rückstands wurde gemäß der Daten in [160] mit 0,85 kJ/kg/K definiert. Die Wärmeleitfähigkeit des Rückstands wurde mit der Laser-Flash-Methode untersucht und bei Raumtemperatur ein Wert von 0,0705 W/m/K gemessen. Tabelle 6.2 zeigt einen Überblick über die in den Simulationen verwendeten Materialeigenschaften von PBT, PBT-GF und des GF-Rückstandes. Für die in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmten Eigenschaften sind nur die bei Raumtemperatur verwendeten Werte angegeben.

Tabelle 6.2: Übersicht der in den Simulationen verwendeten Materialeigenschaften für PBT, PBT-GF und GF-Rückstand und der jeweiligen Werte bei Raumtemperatur.

Parameter	Einheit	PBT	PBT-GF	GF-Rückstand
Dichte	kg/m ³	1300	1520	482
Emissivität	1	0,88	0,87	0,85
Absorptionskoeffizient	1/m	2560	2860	10000
Wärmekapazität	kJ/kg/K	1,1	0,8	0,85
Wärmeleitfähigkeit	W/m/K	0,25	0,3	0,0705
Rückstand	kg/kg	0,03	0,32	
Zersetzungsenthalpie	kJ/kg	507	355	
Aktivierungsenergie	J/mol	212479	212479	
Arrhenius Koeffizient	1/s	2,494e14	2,494e14	

Messunsicherheiten der Materialeigenschaften: Die genannten Unsicherheiten der Eingabeparameter basieren auf der erweiterten Standardunsicherheit der Form $X \pm ku_c$ mit dem Mittelwert X , der abgeschätzten Standardabweichung u_c und dem Erweiterungsfaktor k . Der Erweiterungsfaktor beträgt $k = 2$ und der Vertrauensbereich damit 95 %. Grundlage ist die Normalverteilung der Daten. Die relativen Unsicherheiten werden in der Form ku_c / X wiedergegeben.

Die Unsicherheiten für die Materialeigenschaften thermische Leitfähigkeit, Wärmekapazität und Rückstand in Gew.-% betragen $\pm 15\%$. Die Unsicherheiten für die Emissivität und die Dichte liegen bei $\pm 5\%$. Hinsichtlich der Aktivierungsenergie und des Arrhenius Koeffizienten werden die Unsicherheiten auf $\pm 25\%$ abgeschätzt. Für die weiteren Parameter wie beispielsweise die Zersetzungsenthalpie können die Unsicherheiten aufgrund fehlender Datenbasis nicht angegeben werden.

Die Bestimmung des Wärmeeintrags auf die Probe unterliegt im Cone Kalorimeter und Gasification Apparatus einer Unsicherheit von $\pm 10\%$ und hinsichtlich der Massenverlustrate von $\pm 15\%$. Die Unsicherheiten bei der Bestimmung des Absorptionskoeffizienten bestehen unter anderem aufgrund der Veränderung des Absorptionskoeffizienten mit der untersuchten Probendicke [61]. Beispielsweise würde die Bestimmung des Absorptionskoeffizienten bei einer Probendicke, bei der 80% anstelle von 95% der Strahlung absorbiert würde (also bei einer geringeren Dicke), zu einer Steigerung des Absorptionskoeffizienten um 24 % für PBT und um 80 % für PBT-GF führen. Es bleibt hinsichtlich des Absorptionskoeffizienten jedoch festzuhalten, dass bei den relativ großen Absorptionskoeffizienten der Werkstoffe PBT und PBT-GF eine Veränderung bzw. Unsicherheit dieser Größenordnung einen vergleichsweise geringen Einfluss auf die Pyrolyse hätte. [80]

Sonstige Randbedingungen und Modellparameter: Die sonstigen Randbedingungen und Modellparameter umfassen die allgemeine Formulierung der Eingabeparameter im jeweiligen Pyrolysemodell, die thermischen Bedingungen an der Ober- und Unterseite der Probe, den Wärmeeintrag auf die Probe während des Versuchs sowie den Abgleich der Wärmestrahlungsmodelle.

Die in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmten Parameter Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit weisen einen stufenförmigen Verlauf auf. In FDS kann dieser Verlauf direkt über eine lineare Stufenfunktion eingegeben werden, da FDS die Definition von Datenpaaren (Parameter, Temperatur) vorsieht und diese linear verbindet. In ThermoKin wird die Ausprägung eines Parameters über eine beliebige temperaturabhängige Funktion maximal zweiter Ordnung vorgegeben. Der stufenförmige Verlauf von Wärmekapazität und Wärmeleitfähigkeit muss daher über einen Umweg umgesetzt werden. Dies geschieht durch die numerische Formulierung einer unendlich schnellen Reaktion eines Materials A zu einem Material B bei einer vorgegebenen Temperatur. Die Temperaturen entsprechen dabei den Stufenübergängen der Parameter, d.h. den Temperaturen T_{stufe} , bei denen sich die Ausprägung der jeweiligen Eigenschaft hinsichtlich ihrer Steigung ändert. Eine Reaktion bestimmt, dass zur Temperatur T_{stufe} ein Material A mit den Ausprägungen für $T < T_{\text{stufe}}$ vollständig zu einem Material mit den Ausprägungen für $T > T_{\text{stufe}}$ reagiert. Die Schmelzenthalpien der Werkstoffe wurde sowohl in FDS als auch in ThermoKin durch die numerische Formulierung einer Reaktion implementiert.

In den Versuchen im Cone Kalorimeter und im Gasification Apparatus ist die jeweils in Aluminiumfolie eingepackte Probe auf einer isolierenden Schicht gebettet. In den Simulationen wurde nur die Isolierung durch die Mineralwolle berücksichtigt. Dazu wurde in beiden Pyrolysemodellen an der Rückseite der Probe eine 1 mm starke Komponente mit einer Emissivität von Null und einer Wärmeleitfähigkeit von 1×10^{-5} W/m/K eingefügt, um Wärmeverluste zu unterbinden. Die thermischen Bedingungen an der Probenoberseite sind im Experiment durch Wärmeübertragungen infolge Konvektion geprägt. Diese konvektiven

Wärmeströme liegen in der Größenordnung weniger kW/m^2 [60] und werden in den Simulationen vernachlässigt.

Der Bestrahlung der Probe ist im Gasification Apparat über die gesamte Dauer des Versuchs konstant. In den Experimenten mit PBT und PBT-GF betrug die Bestrahlung der Probe 50 kW/m^2 . Im Cone Kalorimeter Szenario ist die Bestrahlung bis zur Entzündung der Probe gleich der zuvor eingestellten Bestrahlungsstärke. In den Versuchsreihen mit PBT und PBT-GF wurden Bestrahlungsstärken von 35 kW/m^2 (Heizspiralen-Temperatur $T_{\text{cone}} = \sim 940 \text{ K}$), 50 kW/m^2 ($T_{\text{cone}} = \sim 1030 \text{ K}$) und 70 kW/m^2 ($T_{\text{cone}} = \sim 1120 \text{ K}$) verwendet. Nach der Entzündung der Probe ändert sich die Bestrahlung aufgrund des zusätzlichen Wärmeeintrags durch den Einfluss der Flamme.

Um den Wärmestrom auf die Probe auch nach der Entzündung als Randbedingung der Pyrolysemodelle exakt vorgeben zu können, wurde eine eigene Versuchsreihe zur Ermittlung dieses effektiven Wärmestroms durchgeführt. Dafür wurde ein modifizierter Versuchsaufbau verwendet: In die Mitte der Proben wurde ein Loch gebohrt, um dort während des Cone Kalorimeter Versuchs mit Hilfe eines Wärmestromsensors (Typ: Schmidt-Boelter) mit einem Durchmesser von 12,5 mm den effektiven Wärmestrom auf die Probe zu messen. Abbildung 6.14 zeigt den modifizierten Probenhalter mit montierter Probe und dem positionierten Wärmestromsensor. In den Experimenten wurde die Oberfläche des Sensors parallel zur Probenoberfläche ausgerichtet. Der Abstand der Probenoberfläche zur Unterkante der Heizspirale betrug wie in den Cone Kalorimeter Experimenten 25 mm.

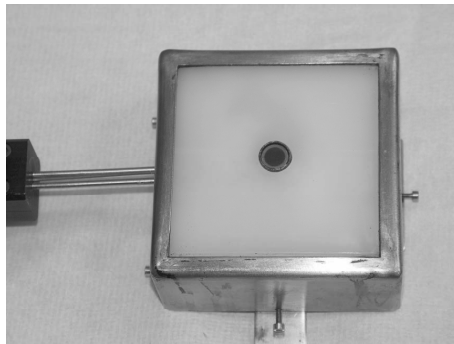


Abbildung 6.14: Modifizierter Probenhalter mit montierter Probe und im Zentrum positioniertem Wärmestromsensor zur Bestimmung des effektiven Wärmeeintrages auf die Probe während eines Cone Kalorimeter Versuchs.

Abbildung 6.15 zeigt eine Messung mit dem modifizierten Versuchsaufbau. Dargestellt ist die im Cone Kalorimeter ermittelte Wärmefreisetzungsrate sowie der mit dem Wärmestromsensor gemessene effektive Wärmestrom einer PBT-GF Probe bei einer Bestrahlungsstärke von 35 kW/m^2 . Sobald der Shutter des Cone Kalorimeters geöffnet wird (I) zeigt der Wärmestromsensor die Bestrahlungsstärke durch die Heizspirale des Cones von 35 kW/m^2 an (V). Nachdem die Probe sich entzündet (II) steigt die Wärmefreisetzungsrate an und der Wärmestromsensor misst den effektiven Wärmestrom auf die Probe (VI). Im Verlauf des Versuchs nehmen die Wärmefreisetzungsrate und letztendlich auch die Flammenhöhe ab. Wenn keine Flammen mehr über bzw. im Umfeld des Wärmestromsensors vor-

handen sind (III), zeigt dieser den Ausgangswert der Bestrahlungsstärke an. Wird der Shutter geschlossen (IV) fällt auch der gemessene Wärmestrom auf Werte um Null kW/m².

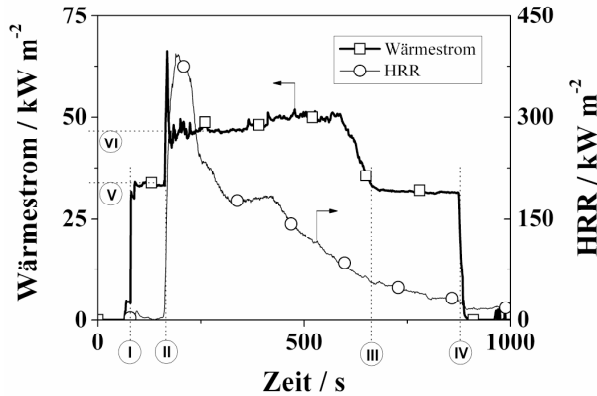


Abbildung 6.15: Messdaten eines Versuchs zur Bestimmung des effektiven Wärmestroms einer PBT-GF Probe unter 35 kW/m² im Cone Kalorimeter. (I) Shutter öffnet; (II) Entzündung; (III) Wärmestromsensor ohne Flammeneinfluss; (IV) Shutter schließt; (V) voreingestellte Bestrahlungsstärke von 35 kW/m²; (VI) effektiver Wärmestrom auf der Probe.

Der effektive Wärmestrom auf die Probe wurde für beide Werkstoffe PBT und PBT-GF unter Bestrahlungsstärken von 35 kW/m², 50 kW/m² und 70 kW/m² an jeweils mindestens zwei Proben gemessen. Tabelle 6.3 zeigt die Ergebnisse anhand der aus den ersten 20 s bis 40 s nach Entzündung der Probe bestimmten Mittelwerten des effektiven Wärmeintrags. Mit längerer Versuchsdauer wurden die Messungen mitunter durch auf dem gekühlten Wärmestromsensor kondensierende Zersetzungsprodukte verfälscht. Die Ergebnisse zeigen die Tendenz, dass der effektive Wärmestrom der PBT Proben höher ist als bei den PBT-GF Proben. Vor dem Hintergrund der Messunsicherheit von ± 2 kW/m² sind weitere Untersuchungen notwendig, um einen systematischen Unterschied zu belegen.

Tabelle 6.3: Effektiver Wärmestrom auf die Probe gemessen während der Cone Kalorimeter Versuche der Proben PBT und PBT-GF.

Bestrahlungsstärke (kW/m ²)	Probe	Effektiver Wärmeintrag (kW/m ²)
35	PBT	48,5
	PBT-GF	46,6
50	PBT	61,0
	PBT-GF	58,3
70	PBT	74,1
	PBT-GF	73,7

Um den Zeitpunkt des Beginns des Massenverlustes tML in den Berechnungen des Cone Kalorimeter Szenarios zu bestimmen, wurden für alle Bestrahlungsstärken Simulatio-

nen mit konstanter Bestrahlung von 35 kW/m^2 , 50 kW/m^2 bzw. 70 kW/m^2 durchgeführt. Die Zeitpunkte, an denen die Massenverlustrate 1 g/s/m^2 überschreitet wurde als tML festgelegt. In einer zweiten Berechnung wurde dann zu dieser Zeit die Ausgangsbestrahlungsstärke durch den effektiven Wärmeeintrag auf die Probe (Tabelle 6.3) ersetzt.

Die Pyrolysemodelle FDS und ThermaKin unterscheiden sich u.a hinsichtlich ihrer Untermodelle zur Beschreibung des Wärmestrahlungstransports in der Probe und der numerischen Umsetzung der Strahlungsabsorption in Dickenrichtung. Gerade bei porösen Materialien mit niedriger Wärmeleitfähigkeit bei Raumtemperatur wie dem GF-Rückstand ist es die Wärmestrahlung, die bei höheren Temperaturen die Wärmeübertragung in der Probe maßgeblich beeinflussen kann. [47] Um die Vergleichbarkeit der beiden Pyrolysemodelle und ihrer Untermodelle zur Absorption und zum Transport von Wärmestrahlung zu überprüfen, wurde ein Testszenario ausgewählt und die Simulationsergebnisse verglichen. In diesem Beispiel wurde eine 4 mm dicke Probe mit den Eigenschaften des GF-Rückstands auf einer 1 mm dicken Isolationsschicht platziert und einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 ausgesetzt. Abbildung 6.16 zeigt die mit FDS und ThermaKin berechneten Temperaturverläufe an der Ober- und der Unterseite der Probe. Insbesondere der identische Temperaturverlauf an der Probenrückseite weist auf die im Rahmen der Versuchsbedingungen (relativ dicke Proben und hohe Absorptionskoeffizienten) vorhandene Vergleichbarkeit der beiden Pyrolysemodelle FDS und ThermaKin hin.

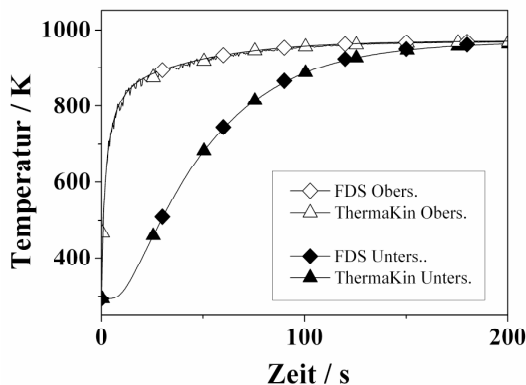


Abbildung 6.16: Mit FDS und ThermaKin berechnete Temperaturverläufe an der Ober- und Unterseite einer GF-Rückstand Probe im Cone Kalorimeter Test bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 .

6.3 Vergleich von Simulation und Experiment

Der Vergleich von Simulation und Experiment wird mit beiden Pyrolysemodellen FDS und ThermaKin und beiden Werkstoffen PBT und PBT-GF anhand des Versuchs im Gasification Apparatus bei 50 kW/m^2 sowie der Versuche im Cone Kalorimeter bei 35 kW/m^2 , 50 kW/m^2 und 70 kW/m^2 diskutiert. Damit werden einerseits die Herausforderungen der Simulation eines ohne Rückstand verbrennenden und eines Rückstand bildenden Materials untersucht. Zum anderen wird das Potential zweier Pyrolysemodelle hinsichtlich der Be-

rechnung der Massenverlustrate in einem breiten Bereich an Bestrahlungsstärken analysiert.

Abbildung 6.17 zeigt den Vergleich der Simulationen und Experimente des Werkstoffs PBT. Die Untersuchungen zum Verhalten von PBT im Gasification Apparatus sind in Abbildung 6.17a dargestellt. Die Übereinstimmung von Simulation und Experiment ist sowohl hinsichtlich der qualitativen als auch der quantitativen Merkmale der Graphen sehr gut. Die charakteristischen Größen Maximum der Massenverlustrate (MaxMLR) und Gesamtdauer der Pyrolyse (tPYR) liegen im Bereich von $\pm 15\%$, die Zeit bis zum Massenverlust (tML) der Simulationen weicht bis zu $\pm 23\%$ vom experimentellen Wert ab.

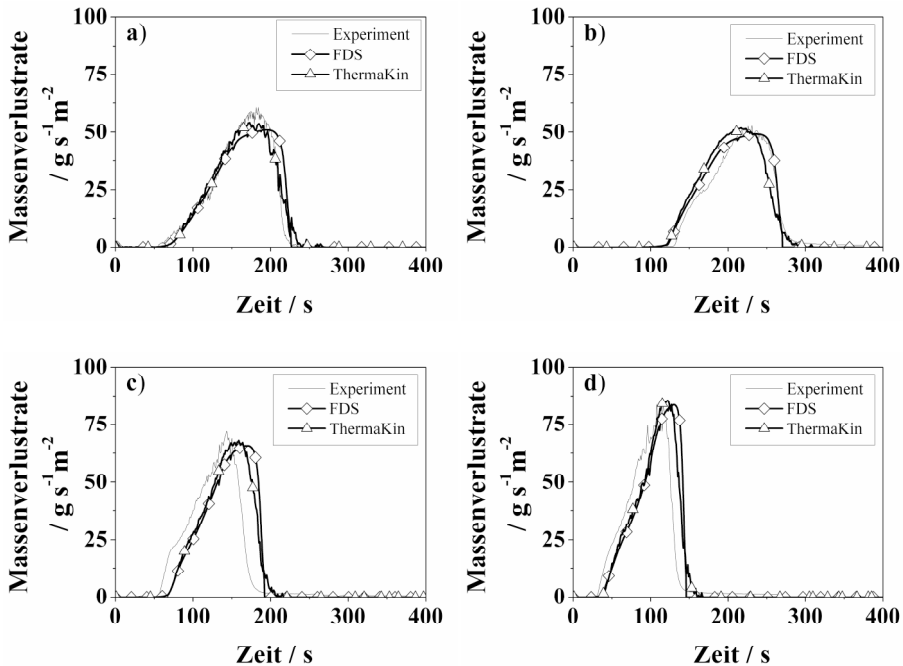


Abbildung 6.17: Experimentelle und simulierte Massenverlustrate von PBT im Gasification Apparatus bei 50 kW/m^2 (6.17a) sowie im Cone Kalorimeter Test bei 35 kW/m^2 (6.17b), 50 kW/m^2 (6.17c) und 70 kW/m^2 (6.17d).

Abbildungen 6.17b bis 6.17d zeigen die Versuche und Simulationen von PBT im Cone Kalorimeter bei 35 kW/m^2 , 50 kW/m^2 und 70 kW/m^2 . Gerade hinsichtlich des MaxMLR stellt sich der Einfluss der Bestrahlungsstärke auf die Massenverlustrate der Materialien dar. Eine Verdoppelung der Bestrahlungsstärke von 35 kW/m^2 auf 70 kW/m^2 hat eine Steigerung des MaxMLR um 80 % zur Folge. Vor diesem Hintergrund wird die Bedeutung einer exakten Bestimmung des Wärmeeintrags auf die Probe deutlich. Mit den experimentell bestimmten Werten für den Wärmeeintrag auf die Probe nach der Entzündung ist die Simulation in der Lage, den Einfluss der Bestrahlungsstärke auf die Massenverlustrate abzubilden. Die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ist sehr gut. Die charakteristischen Größen liegen im Bereich von $\pm 20\%$. Der mittlere Unterschied zwischen den

Pyrolysemodellen FDS und ThermaKin beträgt hinsichtlich der charakteristischen Größen weniger als $\pm 4\%$. Verglichen mit dem Einfluss der Eingabeparameter ist der Einfluss der Wahl des Pyrolysemodells für die untersuchten Verhältnisse vernachlässigbar gering.

Abbildung 6.18a zeigt die Ergebnisse für PBT-GF im Gasification Apparat bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 . Im Experiment besitzt die Massenverlustrate einen breiten ersten Maximum und fällt dann langsam aber stetig ab. Die Simulationen von FDS und ThermaKin weisen qualitativ einen sehr ähnlichen Verlauf auf und sind in der Lage, diese für ein Rückstand bildendes Material typischen Verlauf abzubilden. Die größten quantitativen Abweichungen von den experimentellen Daten ergeben sich hinsichtlich der tML mit bis zu $\pm 39\%$. MaxMLR und tPYR stimmen zu $\pm 20\%$ überein.

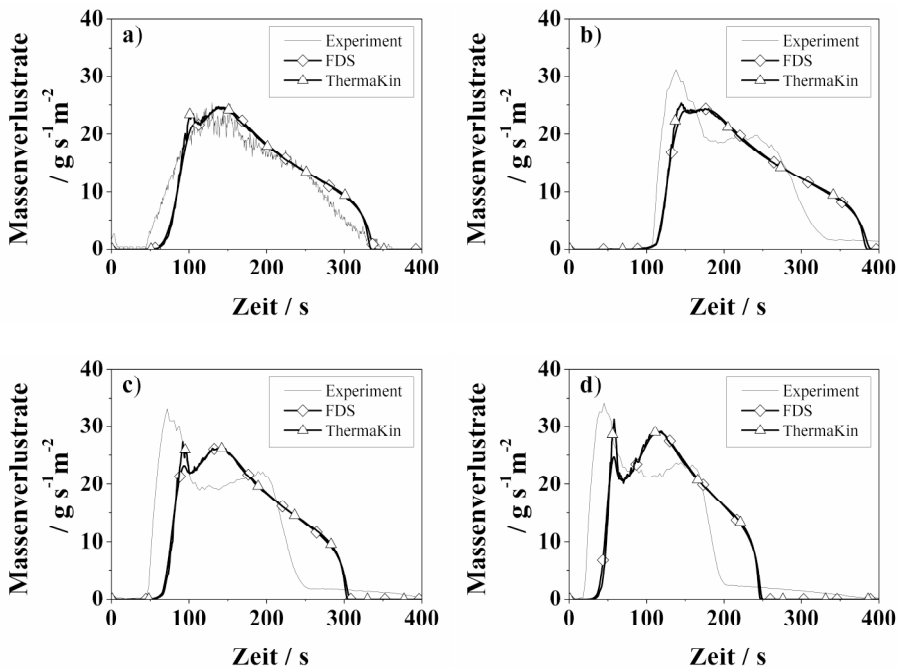


Abbildung 6.18: Experimentelle und simulierte Massenverlustrate von PBT-GF im Gasification Apparat bei 50 kW/m^2 (6.18a) sowie im Cone Kalorimeter Test bei 35 kW/m^2 (6.18b), 50 kW/m^2 (6.18c) und 70 kW/m^2 (6.18d).

Die Untersuchungen an PBT-GF im Cone Kalorimeter sind in Abbildungen 6.18b bis 6.18d dargestellt. Die Veränderung der Bedingungen nach der Entzündung der Probe führt im Vergleich zum Gasification Apparat zu einem steileren Anstieg der Massenverlustrate, einem ausgeprägten ersten Maximum, einem darauf folgenden breiten Plateau und einem kleinen zweiten Maximum kurz vor dem Ende der Pyrolyse. Diese deutlichen Veränderungen in der experimentellen Massenverlustrate werden in der Simulation nicht abgebildet. Die einzige Veränderung der Eingabeparameter der Simulation im Vergleich zum Gasification Apparat ist der erhöhte Wärmeeintrag auf die Probe. Eine solche Änderung alleine führt jedoch nicht zu einer Anpassung der Massenverlustrate der Simulation an die des

Experiments. Mit steigender Bestrahlungsstärke zeigen die Simulationen zwar ein zweites Maximum in der Massenverlustrate, dieses ist jedoch vom Wert her höher und liegt zeitlich deutlich früher als im Experiment. Die größten Abweichungen betreffen die tML mit bis zu $\pm 115\%$.

Trotz der Unterschiede im Verlauf der Massenverlustrate von PBT-GF bleibt festzuhalten, dass die grundsätzliche Übereinstimmung von Simulation und Experiment gut ist. Vor allem der Effekt der Glasfasern wird von der Simulation in Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erfasst. Im Gasification Apparatus (bzw. Cone Kalorimeter) unter 50 kW/m^2 wird das MaxMLR durch die Zugabe von 30 Gew.-% Glasfasern um 58 % (54 %) reduziert. Diese Reduktion wird in der Simulation abgebildet: Das Pyrolysemodell FDS berechnete eine Reduzierung des MaxMLR um 52 % (60 %) und ThermaKin von 55 % (60 %). Die MaxMLR im Gasification Apparatus stimmen zu $\pm 4\%$ überein. Die Unterschiede zwischen den beiden Pyrolysemodellen hinsichtlich des MaxMLR und der tPYR bei variierenden Bestrahlungsstärken liegen im Bereich von $\pm 22\%$.

6.4 Parameterstudie

Die im Folgenden präsentierte Parameterstudie konzentriert sich auf die Untersuchung des Einflusses ausgewählter Parameter auf das Brandrisiko der Werkstoffe. Das Brandrisiko wird zum einen durch den Einfluss des Rückstands und die Eigenschaften der gasförmigen Zersetzungsprodukte beeinflusst. Zu beiden Parametern werden nachfolgend grundsätzliche Zusammenhänge erläutert. Das Brandrisiko lässt sich unter anderem auch durch die Zeit bis zum Massenverlust (bzw. Zeit bis zur Entzündung) und das Maximum der Massenverlustrate (bzw. Maximum der Wärmefreisetzungsrates) charakterisieren. Die diesbezüglich simulierten Variationen der Eingabeparameter zielen einerseits auf die Bestimmung der Sensitivität der Berechnungsergebnisse gegenüber einzelnen Parametern und andererseits auf deren Beeinflussung durch Rückstandsbildung ab.

Zum Einfluss der Qualität der Eingabeparameter: Das Simulationsergebnis wird in erster Linie durch die Charakteristika des Modells und der Eingabeparameter bestimmt. Hinsichtlich der Eingabeparameter verdeutlicht Abbildung 6.19 am Beispiel der Wärmeleitfähigkeit k und der Wärmekapazität c_p , welchen Einfluss deren Qualität auf das Simulationsergebnis von PBT und PBT-GF im Gasification Apparatus bei 50 kW/m^2 , berechnet mit FDS, haben kann. Die gezeigten Massenverlustraten vergleichen die Berechnungen basierend auf den isothermen Daten aus den Datenblättern der Materialien ("FDS*": PBT: $c_p = 2260 \text{ J/kg/K}$; $k = 0.109 \text{ W/m/K}$; PBT-GF: $c_p = 1850 \text{ J/kg/K}$; $k = 0.185 \text{ W/m/K}$), den gemessenen Werten bei Raumtemperatur ("FDS***": siehe Tabelle 6.2) und den in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmten Charakteristika für die Wärmeleitfähigkeit k und die Wärmekapazität c_p ("FDS(f(T))": siehe Abbildungen 6.9 und 6.10). Abbildung 6.19 zeigt, dass sowohl für PBT als auch für PBT-GF erst durch die Verwendung der temperaturabhängigen Eingabeparameter eine sehr gute Übereinstimmung der Simulationen mit den experimentellen Ergebnissen erreicht wird. Auch wenn ähnliche Ergebnisse mit über der Temperatur gemittelten Eingabeparametern erreicht werden können [44, 80], wird anhand der großen Abweichungen in Abbildung 6.19 deutlich, dass der Qualität der Eingabeparameter eine besondere Bedeutung zukommt.

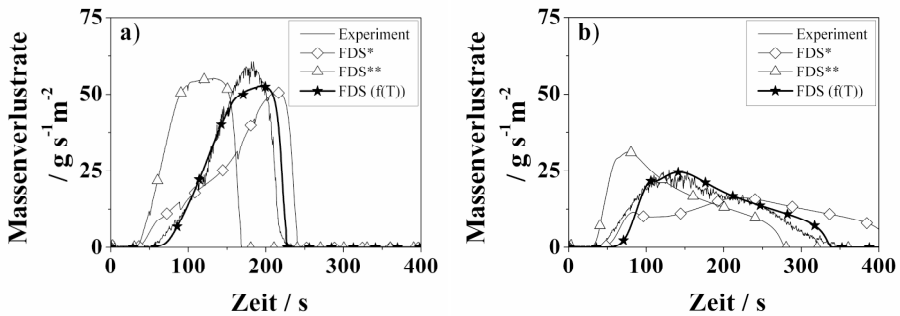


Abbildung 6.19: Einfluss unterschiedlicher Eingabeparameter für die Wärmeleitfähigkeit k und die Wärmekapazität c_p (FDS*: aus Datenblatt; FDS**: gemessen bei RT; FDS($f(T)$): temperaturabhängig) auf die Massenverlustrate von PBT und PBT-GF im Gasification Apparatus bei 50 kW/m^2 .

Zum Einfluss des Rückstandes: Die Rückstandsbildung beeinflusst die Wärmefreisetzung und damit das Brandrisiko eines Werkstoffs sowohl durch die Barrierewirkung hinsichtlich Wärme- oder Stoffübertragung als auch durch die grundsätzliche Reduzierung des gesamten Massenverlustes. Um die Wärmeübertragung des Rückstands zu berechnen, müssen dessen thermischen Eigenschaften idealerweise in Abhängigkeit von der Temperatur bestimmt werden. Insbesondere die effektive thermische Leitfähigkeit sowie der Absorptionskoeffizient sind einerseits für den Wärmetransport kritische Parameter und zum anderen bedingt durch die meist porösen, inhomogenen und fragilen Eigenschaften messtechnisch kaum zu erfassen. Vor diesem Hintergrund wird vermehrt der Ansatz genutzt, die Eingabeparameter unbekannter oder schwer zu bestimmender Eigenschaften durch inverse Simulationen zu bestimmen, d.h. die fehlenden Unbekannten Größen durch iterative Vorgehensweise an experimentelle Bezugsgrößen, wie beispielsweise der Massenverlustrate, bestmöglich anzupassen. [156]

Hinsichtlich des Brandrisikos werden sowohl das MaxMLR (bzw. folglich auch die maximale Wärmefreisetzungsraten) als auch der gesamte Massenverlust durch die Menge des gebildeten Rückstands beeinflusst. Dabei ist der gesamte Massenverlust linear abhängig vom erzeugten Rückstand. [19] Auch der gesamte Massenverlust von PBT-GF wurde durch den Rückstand im Vergleich zu PBT um 30 % reduziert. In den oben gezeigten Simulationen wurde die Rückstandsmenge in Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen vorgegeben. Die Pyrolysemodelle sind jedoch durch Verschachtelung mehrerer Zersetzungsreaktionen mit beispielsweise unterschiedlichen Zwischenprodukten und Rückstandsmengen in der Lage, komplexere Materialien und die zugehörige Rückstandsbildung bei unterschiedlichen Umgebungsbedingungen zu berechnen [107]. Die Hauptherausforderung ist auch hierbei wieder die exakte Bestimmung der notwendigen Eingabeparameter der Komponenten, Zwischenprodukte und Rückstände.

Zum Einfluss der Verbrennung in der Gasphase: Im Rahmen der Untersuchungen von PBT und PBT-GF im Gasification Apparatus und Cone Kalorimeter stand die Pyrolyse, und damit die Massenverlustrate im Mittelpunkt. Sie ist aber nur einer der Hauptparameter, die die Wärmefreisetzung, und damit das Brandrisiko beeinflussen. Die Wärmefreisetzung ist ferner abhängig von den Verbrennungseigenschaften der gasförmigen Pyrolyseprodukte im jeweiligen Szenario. Die Verbrennung in der Gasphase wird durch die Verbrennungs-

wärme und die Verbrennungseffizienz charakterisiert (siehe Formel 2-1). Die Verbrennungswärme polymerer Materialien ohne Berücksichtigung zusätzlicher Flammschutzmittel liegt im Bereich von 8,4 kJ/g (PTFE) und 43 kJ/g (PP), die Verbrennungseffizienz variiert bei unter gut ventilerten Bedingungen typischerweise zwischen 0,5 (PVC) und 0,99 (PMMA) [19]. Zum Vergleich: die Literaturwerte für die Verbrennungswärme und die Verbrennungseffizienz von PBT sind 23,8 kJ/g und 0,91. Die Wärmefreisetzung ist linear abhängig von beiden Eigenschaften. Daraus folgt, dass die Verbrennungsreaktionen in der Gasphase einen großen Einfluss auf die Wärmefreisetzung haben. Für herkömmliche Polymere beträgt der Unterschied bedingt durch die Gasphase in Anlehnung an die genannten Ausprägungen bis zu 1000% (Faktor 10). Gerade bei der Simulation großskaliger Brandszenarien, bei der unterschiedliche Materialien und Umgebungsbedingungen involviert sind, ist der Einfluss der Gasphase zu berücksichtigen.

Parameterstudie zur Zeit bis zum Massenverlust (tML): Um die Sensitivität auf die berechnete tML der Materialien PBT und PBT-GF zu untersuchen, wurden der Absorptionskoeffizient, die Wärmeleitfähigkeit, die Wärmekapazität und die Zersetzungsenthalpie um +20 % und -20 % ihres Ausgangswertes variiert und für jede Variation eine eigene Berechnung durchgeführt. Die Werte der temperaturabhängigen Größen Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität wurden dabei über den gesamten Verlauf um 20 % gesteigert bzw. reduziert.

Eine Parametervariation um $\pm 20\%$ zielt einerseits auf einen Vergleich der Sensitivität des jeweiligen Parameters auf die Charakteristika der Massenverlustrate ab, ist jedoch andererseits vor dem Hintergrund der Ausprägungen und Messunsicherheiten jedes einzelnen Parameters unterschiedlich einzuordnen. Für einige Parameter, wie der Dichte, der Zersetzungstemperatur oder der Emissivität, umfassen $\pm 20\%$ die gesamte Bandbreite der Ausprägungen von Polymeren (Dichte: $1100\text{kg/m}^3 \pm 20\%$; Zersetzungstemperatur: $720\text{K} \pm 20\%$; Emissivität: $0,9 \pm 20\%$) [19]. Andere Parameter, wie beispielsweise die Wärmekapazität oder die Wärmeleitfähigkeit, verändern sich mit der Temperatur um $\pm 20\%$ und mehr. Insbesondere wenn die Abhängigkeit von der Temperatur oder anderen Bezugsgrößen bestimmt wird, kann auch die Messunsicherheit im Bereich von $\pm 20\%$ und mehr liegen. Für Polymere variieren die Ausprägungen einiger Materialeigenschaften um den Faktor zwei und größer. Beispiele hierfür sind der Absorptionskoeffizient (1100 1/m bis 9000 1/m), die Wärmekapazität (1,7 kJ/kg/K bis 2,9 kJ/kg/K), die Wärmeleitfähigkeit (0,11 W/m/K bis 0,42 W/m/K) oder auch die Zersetzungsenthalpie (0,7 MJ/kg bis 2,5 MJ/kg) [19, 44].

Tabelle 6.4 zeigt den relativen Einfluss der Variation der Parameter um $\pm 20\%$ auf die tML von PBT und PBT-GF. Sowohl für PBT als auch für das Rückstand bildende PBT-GF reagiert die tML am sensibelsten gegenüber Veränderungen der Wärmekapazität und der Wärmeleitfähigkeit. Alle anderen Parameter zeigen nur einen geringen oder gar keinen Einfluss auf die tML. Diese Zusammenhänge stimmen mit den theoretischen Überlegungen zur tML überein [19]. Solange noch kein Rückstand gebildet wurde, verhalten sich die beiden Materialien PBT und PBT-GF grundsätzlich ähnlich.

Tabelle 6.4: Relativer Einfluss der Parametervariation um $\pm 20\%$ auf die Zeit bis zum Massenverlust (tML) von PBT und PBT-GF im Gasification Apparatus bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 .

	Parameter	Variation (%)	$\Delta\text{tML:}$	$\Delta\text{tML:}$
			PBT	PBT-GF
Polymer	Absorptionskoeffizient	+20	-0,8	-0,8
		-20	1,6	0,8
	Wärmeleitfähigkeit	+20	8,7	6,2
		-20	-12,7	-11,6
	Wärmekapazität	+20	19,8	19,4
		-20	-19,8	-20,2
Zersetzungsenthalpie	+20	0,0	0,0	
	-20	0,0	0,0	
Rückstand	Absorptionskoeffizient	+20	--	0,0
		-20	--	0,0
	Wärmeleitfähigkeit	+20	--	0,0
		-20	--	0,0
	Wärmekapazität	+20	--	0,0
		-20	--	0,0

Parameterstudie zum Maximum der Massenverlustrate (MaxMLR): Das MaxMLR und somit auch das Maximum der korrespondierenden Wärmefreisetzungsrates ist eines der bedeutsamsten Charakteristika zur Beschreibung des Brandrisikos eines Materials. Den relativen Einfluss der Variation um $\pm 20\%$ des Ausgangswertes ausgewählter Parameter auf das MaxMLR ist in Tabelle 6.5 dargestellt. Das MaxMLR von PBT reagiert am sensibelsten auf Veränderungen der Zersetzungsenthalpie. Eine Variation der Zersetzungsenthalpie um $+20\%$ (-20%) führt zu einer Veränderung des MaxMLR um $-14,7\%$ ($+20,9\%$). Im Gegensatz dazu ist der Einfluss der anderen Parameter vernachlässigbar. Für den Werkstoff PBT-GF zeigt sich das MaxMLR am empfindlichsten, wenn die Parameter Wärmeleitfähigkeit ($+12,4\%$ / $-13,3\%$), Zersetzungsenthalpie ($-8,6\%$ / $+11,3\%$) oder Wärmekapazität ($-8,5\%$ / $+11,4\%$) variiert werden. Daneben wird das MaxMLR auch durch die Variation der Wärmeleitfähigkeit des Rückstands ($+4,2\%$ / $-4,9\%$) beeinflusst.

Tabelle 6.5 verdeutlicht, dass das MaxMLR der Werkstoffe PBT und PBT-GF sehr unterschiedlich auf die Parametervariationen reagiert. Am Beispiel der Wärmekapazität lassen sich die Unterschiede anschaulich erläutern und der Zusammenhang von Parametervariation und Pyrolyseverhalten der beiden Werkstoffe herstellen: Für die Massenverlustrate von PBT hat eine Variation der Wärmekapazität um $+20\%$ zur Folge, dass das MaxMLR nahezu unverändert bleibt, die tML jedoch deutlich erhöht wird. Das MaxMLR von PBT befindet sich am Ende der Pyrolyse (siehe Abbildung 6.17). Zu diesem Zeitpunkt ist das gesamte Material aufgeheizt. Es herrschen nahezu isotherme Verhältnisse und eine Änderung der Wärmekapazität beeinflusst die Massenverlustrate nur noch geringfügig. Die vollständig erwärmte Probe verhält sich dann ähnlich einem thermisch dünnen Material und das

MaxMLR ist nur noch von der Zersetzungsenthalpie abhängig. Die experimentellen Beobachtungen belegen diese Schlussfolgerung aus der Parameterstudie: Aufgrund der thermischen Eigenschaften fand die Aufheizung der Probe deutlich schneller statt als das Fortschreiten der Pyrolysezone. Die PBT Probe war bereits vor Ende der Pyrolyse vollständig aufgeschmolzen. Im Gegensatz zum Verlauf der Massenverlustrate von PBT befindet sich das MaxMLR der PBT-GF Probe am Anfang der Pyrolyse (siehe Abbildung 6.18). Zu diesem Zeitpunkt ist das MaxMLR u.a. abhängig von der Wärmekapazität des Materials und es liegt ein thermisch dickes Verhalten der Probe vor.

Tabelle 6.5: Relativer Einfluss der Parametervariation um $\pm 20\%$ auf das Maximum der Massenverlustrate (MaxMLR) von PBT und PBT-GF im Gasification Apparatus bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 .

	Parameter	Variation (%)	Δ MaxMLR PBT	Δ MaxMLR: PBT-GF
Polymer	Absorptionskoeffizient	+20	-0,4	-0,4
		-20	0,5	0,6
	Wärmeleitfähigkeit	+20	0,4	12,4
		-20	-0,5	-13,3
	Wärmekapazität	+20	-1,8	-8,5
		-20	1,9	11,4
	Zersetzungsenthalpie	+20	-14,7	-8,6
		-20	20,9	11,3
Rückstand	Absorptionskoeffizient	+20	--	-1,0
		-20	--	1,5
	Wärmeleitfähigkeit	+20	--	4,2
		-20	--	-4,9
	Wärmekapazität	+20	--	-0,4
		-20	--	0,4

Bezüglich der Wärmeleitfähigkeit und der Wärmekapazität ist festzustellen, dass ihr Einfluss auf die tML von PBT und PBT-GF grundsätzlich ähnlich ist: Eine Steigerung der Parameter führt zu einer Verzögerung der tML. Die höhere Wärmekapazität sorgt dafür, dass mehr Energie benötigt wird, um das Material aufzuheizen, und eine zunehmende Wärmeleitfähigkeit führt mehr Energie pro Zeit aus der Pyrolysezone ab und verzögert dadurch die tML. Hinsichtlich des MaxMLR ist eine entgegengesetzte Wirkung von Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität festzustellen: Eine Steigerung der Wärmekapazität führt zu einer Verringerung und eine Steigerung der Wärmeleitfähigkeit zu einer Zunahme des MaxMLR. Dieser Zusammenhang stimmt mit den theoretischen Überlegungen zur Massenverlustrate unter Gleichgewichtsbedingungen und der korrespondierenden Dicke der Pyrolysezone überein. Danach ist die Dicke der Pyrolysezone und damit die Massenverlustrate annähernd proportional zur Wärmeleitfähigkeit bzw. zum Kehrwert der Wärmekapazität. [17]

In den Tabellen 6.4 und 6.5 sowie den vorangehenden Untersuchungen wurden die Parameter jeweils einzeln variiert und so der Einfluss auf die Massenverlustrate untersucht. Die Berechnungen ermöglichen darüber hinaus umfassendere Parametervariationen beispielsweise zur Untersuchung von Einflüssen und Abhängigkeiten zwischen den Parametern und den Charakteristika der Massenverlustrate. Abbildung 6.20 zeigt den relativen Einfluss der kombinierten Variation von Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität um je $\pm 20\%$ auf das MaxMLR von PBT-GF bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 . Die maximale Reduzierung des MaxMLR um $25,9\%$ wird erreicht, wenn die Wärmeleitfähigkeit erhöht und die Wärmekapazität verringert wird. Verglichen mit den Ergebnissen der Tabelle 6.5 stellt sich dieser Zusammenhang als eine Superposition der einzelnen Variationen der Parameter dar. Die linearen Korrelationskoeffizienten hinsichtlich des MaxMLR betragen $r_{MLR,k} = 0,77$ für die Wärmeleitfähigkeit und $r_{MLR,cp} = 0,63$ für die Wärmekapazität. Die partiellen Korrelationskoeffizienten $r_{cp/MLR,k} = 0,99$ und $r_{k/MLR,cp} = 0,99$ belegen die Unabhängigkeit der Parameter Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität voneinander hinsichtlich ihres Einflusses auf das MaxMLR.

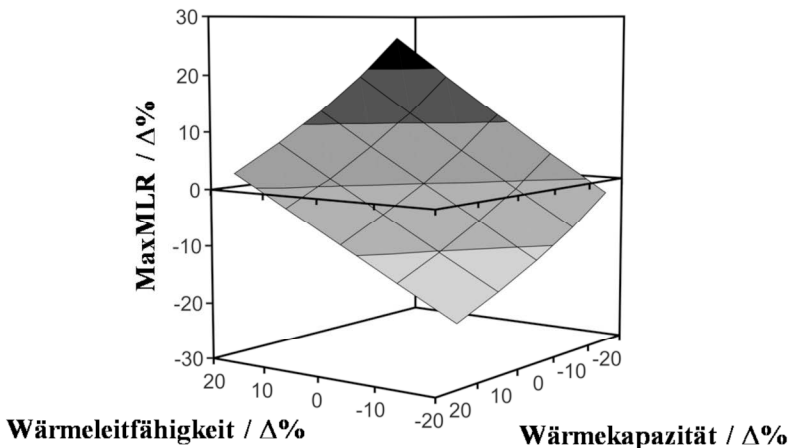


Abbildung 6.20: Einfluss der Parametervariation von Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität auf das mit FDS berechnete Maximum der Massenverlustrate von PBT-GF im Gasification Apparatus bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2 .

6.5 Zwischenfazit

Der Cone Kalorimeter Test wird sowohl in der Zulassung von Werkstoffen als auch vermehrt in der Forschung und Entwicklung flammgeschützter Polymere eingesetzt. Nicht zuletzt hinsichtlich seiner Dimension Kubikdezimeter stellt er eine wertvolle Verbindung zwischen Brandingenieurwesen und Polymerwissenschaft dar. Die Untersuchungen zum Brandszenario Cone Kalorimeter beschäftigten sich mit der Frage, welches Potential aktuelle Modelle aufweisen, um die Pyrolyse polymerer Werkstoffe unter definierten Bedingungen vorherzusagen, d.h. ausgehend von den physikalisch-chemischen Materialeigenschaften zu berechnen.

Dazu wurden zwei Pyrolysemodelle, FDS und ThermaKin, verwendet, die beide auf einem vergleichbaren System von Erhaltungsgleichungen für Energie, Masse und Spezies

basieren. Die Unterschiede der Modelle hinsichtlich ihres Pyrolysemodells betreffen die Untermodelle der Strahlungsabsorption bzw. der Wärmeübertragung durch Strahlung und die Art und Weise, in der Parameter numerisch eingegeben werden. Um den Einfluss von Rückstandsbildung zu untersuchen, wurden die beiden Materialien PBT und PBT-GF ausgewählt. PBT verbrennt nahezu vollständig, während PBT-GF Rückstand hinterlässt. Betrachtet wurden ferner die Versuchsbedingungen im Gasification Apparatus unter Stickstoff Atmosphäre sowie im Cone Kalorimeter unter Luft bei unterschiedlichen Bestrahlungsstärken zwischen 35 kW/m^2 und 70 kW/m^2 . Die Eingabeparameter der Pyrolysemodelle beziehen sich auf die physikalischen und chemischen Materialeigenschaften sowie die thermischen Randbedingungen der Probe. Zur Bestimmung der Eingabeparameter wurden die Materialien PBT und PBT-GF umfassend charakterisiert. Zusätzlich wurden die Randbedingungen im Cone Kalorimeter Test durch Messung des Wärmeeintrags auf die Proben während des Versuchs bestimmt.

Der Vergleich von Simulation und Experiment zeigte, dass die Programme FDS und ThermaKin die Massenverlustrate von PBT sowohl im Gasification Apparatus als auch im Cone Kalorimeter unter verschiedenen Bestrahlungsstärken in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment abbilden. Die charakteristischen Werte der simulierten Massenverlustraten mit FDS und ThermaKin lagen im Bereich von $\pm 4 \%$. Gleichzeitig wurde in der Parameterstudie die Empfindlichkeit der Berechnungen gegenüber Variationen der Eingabeparameter und die Bedeutung der Parameterqualität für das Berechnungsergebnis deutlich. Vor diesem Hintergrund bleibt festzuhalten, dass die Pyrolyseprogramme ein großes Potential hinsichtlich der Berechnung der Massenverlustrate im Brandszenario Cone Kalorimeter bieten, dieses Potential aber nur ausgeschöpft wird, wenn die Eingabeparameter in ausreichender Qualität bestimmt werden.

Hinsichtlich der Rückstand bildenden PBT-GF Proben offenbarte der Vergleich zwischen Simulation und Experiment die Grenzen bzw. Herausforderungen des gewählten Ansatzes. Der grundsätzliche Unterschied zwischen PBT und PBT-GF wurde in den Berechnungen widergegeben, und auch die berechnete Massenverlustrate im Gasification Apparatus stimmte mit den experimentellen Daten überein. Die Ergebnisse der Cone Kalorimeter Tests ließen jedoch vergleichsweise deutliche Unterschiede erkennen. Der Einfluss der Flammenbildung auf das Brandszenario wurde in den Berechnungsergebnissen nicht vollständig reproduziert. Zukünftige Ansätze, die zur Optimierung der Simulationen beitragen können, betreffen insbesondere die Untersuchung und numerische Berücksichtigung der temperaturabhängigen Eigenschaften des Rückstandes, der Randeffekte, der konvektiven Wärmeströme, der Veränderungen der Probendicke und des Zusammenspiels der Wärmeübertragung durch Strahlung und Konvektion auf die Probe bzw. Strahlung und Konduktion innerhalb der Probe.

In der Parameterstudie zeigte sich das Potential der Brandsimulation für die Polymerwissenschaft. Aufbauend auf einer validierten Simulation bietet die numerische Parametervariation die Möglichkeit, den Einfluss der Eingabeparameter auf das Berechnungsergebnis zu bestimmen. Am Beispiel von PBT und PBT-GF zeigte sich, dass die unterschiedlichen Charakteristika bezüglich der Rückstandsbildung zu unterschiedlichen Einflüssen der Eingabeparameter führen. Die durch die Parametervariation gewonnenen Informationen können so die Entwicklung und Optimierung von Werkstoffen zielgerichtet unterstützen.

7 Komplexes Brandverhalten im UL 94 Test

Das vierte Beispiel zur komplementären Nutzung von Brandsimulation und Polymerwissenschaft in der Dimension Kubikzentimeter umfasst das komplexe Brandverhalten von Polymeren im vertikalen UL 94 Test. Der UL 94 Test ist das kleinste der untersuchten Szenarien und findet nicht zuletzt aufgrund der Probengröße und Einfachheit des Versuchsaufbaus und -ablaufs in der Klassifizierung des Brandverhaltens von Polymeren vielfältige Anwendungsbereiche. Mittels einer übersichtlichen Versuchsdurchführung und -auswertung auf der einen Seite, wird auf der anderen Seite das komplexe Brandverhalten der untersuchten Werkstoffe inklusive Pyrolyse, Gasphasenverbrennung und Verformung bzw. Fließen und Tropfen bewertet. Gerade die Verbindung von Pyrolyse, Verbrennung und Tropfverhalten im UL 94 Szenario stellt eine neue Herausforderung für die Brandsimulation dar. Aufbauend auf den Ergebnissen der voranstehenden Kapitel zu Brandverlauf, Wärmefreisetzungsrate und Massenverlustrate steht im Mittelpunkt der Untersuchungen zum UL 94 Szenario die Weiterentwicklung und Validierung eines numerischen Modells zur Brandsimulation von Polymeren unter Berücksichtigung des Fließ- und Tropfverhaltens. Dazu werden nachfolgend zunächst die Charakteristika des Brandszenarios UL 94 Test vorgestellt und der Aufbau des Simulationsmodells erläutert. Anschließend werden die Ergebnisse der Simulation mit den experimentellen Resultaten verglichen und in einer Parameterstudie der Einfluss ausgewählter Parameter auf die Berechnungen diskutiert. Das Kapitel schließt mit einem Zwischenfazit der numerischen Betrachtungen des Brandszenarios UL 94 Test.

7.1 Charakteristika des Brandszenarios

Der UL 94 Test ist der wichtigste Brandtest zur Beurteilung der Entflammbarkeit polymerer Materialien. Die UL 94 Klassifizierung berücksichtigt u.a. das Fließ- und Tropfverhalten der Proben: Einerseits führt das brennende Abtropfen zu einer Abwertung der Klassifizierung, andererseits kann durch nicht brennendes Abtropfen das Erlöschen der Probe ermöglicht bzw. beschleunigt und so eine bessere Klassifizierung erreicht werden. Demzufolge gehören sowohl das Tropfverhalten als auch die Charakteristika der Pyrolyse und der Verbrennung in der Gasphase zu den wesentlichen Phänomenen des vertikalen UL 94 Tests.

Auch wenn im Rahmen der Prüfung das Tropfverhalten nur auf das Brandszenario UL 94 Test bezogen beurteilt werden kann, spiegeln sich darin doch für einen Brand relevante Charakteristika wider. Insbesondere thermoplastische Polymere weisen bei Temperaturen über der Glas- bzw. Schmelztemperatur oft ein ausgeprägtes Fließverhalten auf. Im Rahmen eines Brands kann das Verformen und Fließen der Brandlasten die Brandausbreitung entscheidend beeinflussen. Einerseits beschleunigen Fließen und Tropfen, zusätzliche Lachenfeuer und abwärts gerichtete Ausbreitung die Brandentwicklung, u.a. durch eine größere Oberfläche. Andererseits wird die Brandausbreitung verzögert oder gar gestoppt, wenn brennbares Material durch Fließen und Tropfen der Brandquelle entzogen wird. [161-165]

Der UL 94 Test wird in einigen Bereichen als normative Voraussetzung zur Verwendung von Materialien eingesetzt. Beispielsweise ist für Anwendungen der Elektrotechnik und Elektronik oft die UL 94 Klassifizierung V-0 bzw. V-1 vorgeschrieben. Das Erreichen der Klassifizierung V-0 bzw. V-1 ist für viele Polymere sehr anspruchsvoll und wird regelmäßig als Definition für flammgeschützte Polymere angesehen. Vor dem Hintergrund der

großen Bedeutung des UL 94 Tests als Standard Brandtest zur Klassifizierung von Materialien bleibt jedoch festzuhalten, dass das Ergebnis des UL 94 Tests ausschließlich der Klassifizierung dient und der Nutzen des Tests für eine differenzierte Betrachtung und Untersuchung von (Flammschutz-) Mechanismen sehr eingeschränkt ist. [11, 70]

Der Prüfkammer des UL 94 Tests besitzt mindestens ein Volumen von $0,5 \text{ m}^3$. Sie ist in erster Linie dafür zuständig, die Strömungsverhältnisse um die Probe weitgehend zu neutralisieren und den Prüfer vor den Zersetzungsprodukten zu schützen. Die Probe selbst hat die Abmessungen $125 \text{ mm} \times 13 \text{ mm}$ bei variierender Dicke ($<13 \text{ mm}$) von typischerweise $1,5 \text{ mm}$ oder 3 mm . Die stabförmige Probe wird senkrecht aufgehängt und am unteren Ende mit einer Prüfflamme beflammt. Um eine stets gleiche thermische Belastung zu garantieren, ist die Leistung der Prüfflamme auf 50 W sowie der Abstand zur Probe auf 10 mm festgelegt. Abbildung 7.1 zeigt links den verwendeten Prüfaufbau und rechts zwei Nahaufnahmen einer Probe, die nach der Beflammung mit der Prüfflamme selbständig weiterbrennt und brennend abtropft.

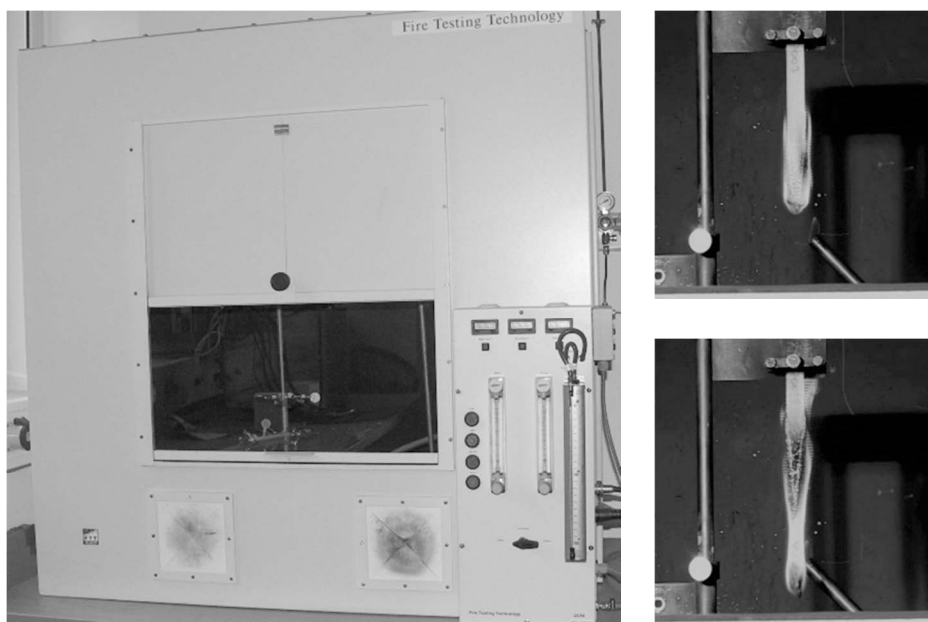


Abbildung 7.1: Prüfkammer des UL 94 Tests (links) und Nahaufnahmen einer selbständig brennenden und dann brennend abtropfenden Probe (rechts).

Die thermische Belastung der Probe ist durch den Prüfaufbau hinreichend definiert, der tatsächliche Wärmeeintrag ist jedoch weitgehend unbekannt. Abbildung 7.2 zeigt eine Aufnahme einer Probe während des Versuchs mit der IR Kamera. Die zugehörigen Temperaturwerte können aufgrund der brennenden Probe nur zur Orientierung herangezogen werden. Die maximalen Oberflächentemperaturen in der Größenordnung von 800 K deuten auf einen Wärmeeintrag von deutlich mehr als 50 kW/m^2 hin [11].

Untersuchungen zum Wärmeeintrag durch die Prüfflamme weisen große Abweichungen mit Werten zwischen 20 kW/m² und 65 kW/m² [166, 167, 168] bzw. bis zu 100 kW/m² [169] auf. Ausführliche Arbeiten zum Wärmestrom einer Kerzenflamme zeigen lokale Wärmestrommaxima von bis zu 150 kW/m² direkt über der Flammenspitze. [170]

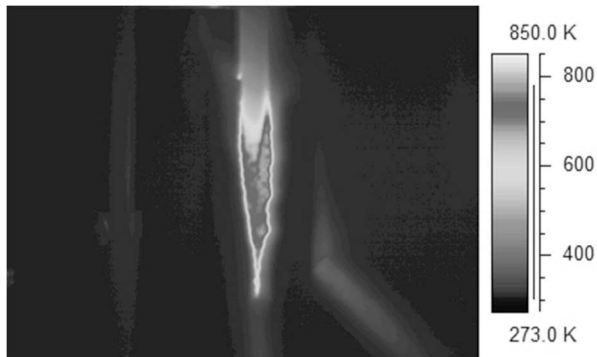


Abbildung 7.2: Aufnahme einer Probe während des UL 94 Tests mit der IR-Kamera.

Die zwecks Vergleich von Simulation und Experiment im Brandszenario UL 94 Test untersuchten Materialien bestehen aus vier Polycarbonat / Acrylnitril-Butadien-Styrol Blends (PC-ABS) mit und ohne dem Flammschutzmittel Bisphenol-A-bis(diphenylphosphat) (BDP) und dem Additiv Polytetrafluorethylen (PTFE). Die Materialien mit BDP enthielten 12,5 Gew.-% BDP, die Materialien mit PTFE 0,45 Gew.-% PTFE. Das Verhältnis von PC zu ABS wurde mit 4,7:1 konstant gehalten, das Verhältnis von A:B:S beträgt 21:13:66. Details zur Morphologie und zum Brandverhalten der vier Materialien PC/ABS, PC/ABS+BDP, PC/ABS+PTFE und PC/ABS+BDP+PTFE sind [171, 172, 173] zu entnehmen.

Abbildung 7.3 zeigt eine Probe (1) vor dem UL 94 Test sowie die Rückstände der Materialien PC/ABS (2), PC/ABS+BDP (3), PC/ABS+PTFE (4) und PC/ABS+BDP+PTFE (5) nach dem UL 94 Test. PC/ABS erreichte im UL 94 Test eine V-2 Klassifizierung. Die Probe verformte sich durch das Fließen der Polymerschmelze und tropfte schließlich bis zum Verlöschen ab. Auch PC/ABS+BDP wurde mit V-2 klassifiziert. Für beide Materialien dominierte das Tropfen das Testergebnis, wobei die Probe PC/ABS+BDP durch das zusätzlich als Weichmacher wirkende Additiv BDP ein ausgeprägteres Tropfverhalten aufwies. Anhand der Rückstände in Abbildung 7.3 ist das Fließen der Proben deutlich erkennbar.

Die PC/ABS+PTFE Proben tropften nicht, brannten nahezu vollständig ab und wurden demzufolge mit HB klassifiziert. Der Rückstand der Probe zeigt im Gegensatz zu PC/ABS bzw. PC/ABS+BDP, dass kein Fließen stattfand. Das Additiv PTFE wirkt als Anti-Tropfmittel und verhindert nicht nur das Tropfen, sondern führt darüber hinaus zu einem Zusammenziehen der Polymerschmelze, was an der Form des Rückstands erkenntlich wird. Die Verbindung beider Additive mit PC/ABS zu PC/ABS+BDP+PTFE zeigte synergistische Effekte: Die Proben verlöschten ohne zu Tropfen nahezu direkt nach Entfernen der Prüfflamme und erreichten so eine V-0 Klassifizierung.

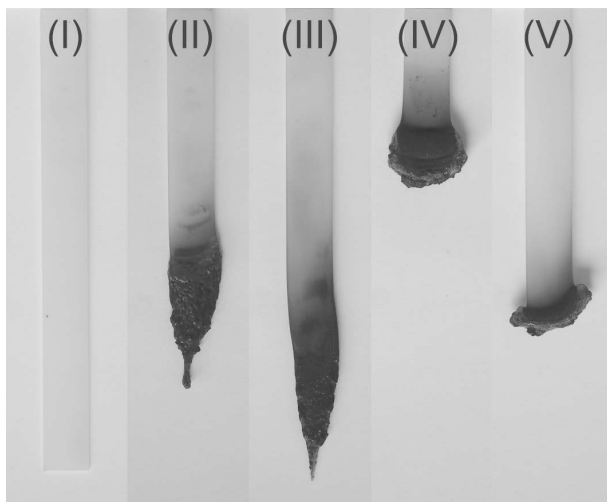


Abbildung 7.3: Probekörper vor dem Test (I) sowie Rückstände der untersuchten Materialien PC/ABS (II), PC/ABS+BDP (III), PC/ABS+PTFE (IV) und PC/ABS+BDP+PTFE (V) nach dem UL 94 Test.

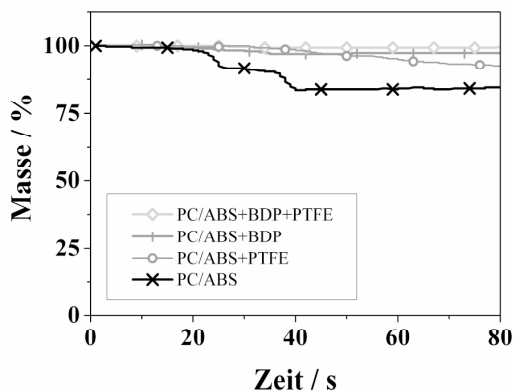


Abbildung 7.4: Massenverlauf über der Zeit von ausgewählten Proben im UL 94 Test.

Abbildung 7.4 zeigt die charakteristischen Massenverläufe über der Zeit der vier Materialien im UL 94 Test. PC/ABS+BDP+PTFE tropft nicht, brennt nach Entfernen der Prüf Flamme nicht eigenständig weiter und verliert daher nahezu keine Masse. PC/ABS+BDP tropft sehr schnell bis zum Verlöschen ab. Zwei kleine Stufen im Massenverlauf deuten auf das laut Prüfablauf zweimalige Beflammen mit der Prüfflamme hin. Der gesamte Massenverlust ist gering (< 5 %). Die PC/ABS+PTFE Probe brennt fast bis zur Aufhängung ab. Der Massenverlust durch Pyrolyse ist nahezu konstant. Nach einer Versuchsdauer von 80 s sind etwa 10 % der Ausgangsmasse freigesetzt worden. Die durchschnittliche Massenverlustrate beträgt $0,005 \pm 0,002$ g/s und stimmt damit von der Größenordnung her mit Untersuchungen der durchschnittlichen Massenverlustrate verschiedener Materialien in [174] überein. Der Massenverlauf von PC/ABS zeigt zwei deutliche Stufen, die dem Abtropfen in

Folge der zwei getrennten Beflammungsphasen zuzuordnen sind. Der Massenverlust je Stufe, der hauptsächlich durch Abtropfen hervorgerufen wird, beträgt etwa 10 %.

In der Literatur bezieht sich die Untersuchung der Charakteristika und Mechanismen des UL 94 Tests auf ausgesuchte Eigenschaften und Materialien. [166, 174-177] Vorhandene Ansätze zur Modellierung des UL 94 Tests basieren meist auf empirischen Korrelationen einzelner Kenngrößen zum Brandverhalten von Materialien mit deren UL 94 Klassifizierung. [142, 178, 179, 180] Komplexere Ansätze zur Simulation des Brandverhaltens im UL 94 Test konzentrieren sich auf eine Zielgröße, z.B. die Entzündungszeit [177]. Die vorliegende Arbeit beinhaltet mit der Berücksichtigung des Tropfverhaltens von Polymeren im Rahmen der Simulation des UL 94 Tests einen vollständig neuen Ansatz. Herkömmliche CFD Modelle sind aufgrund ihrer festen räumlichen Diskretisierung nur bedingt geeignet, um große Deformationen mit sich ändernden freien Oberflächen abzubilden. Daher wurde ein bestehendes, innovatives Modell zur Beschreibung von Fluid-Struktur Interaktionen derart angepasst, dass es zur Untersuchung des komplexen Brandverhaltens von Polymeren im UL 94 Test eingesetzt werden kann. Nachfolgend wird der Aufbau des Simulationsmodells einschließlich der Eingabeparameter und Randbedingungen vorgestellt. Im Anschluss daran werden die Ergebnisse der Simulationen und Experimente verglichen und anhand einer Parameterstudie zum Tropfverhalten die Zusammenhänge diskutiert.

7.2 Aufbau des Simulationsmodells

Für die Untersuchungen zum Brandszenario UL 94 Test wurde das Simulationsmodell Particle Finite Element Method (PFEM) verwendet. Das Modell selbst und die in Zusammenarbeit mit dem Institut CIMNE weiterentwickelten Untermodelle zur Pyrolyse und der Verknüpfung mit der Gasphase sind in Kapitel 3 "Methoden und Simulationsprogramme" beschrieben. Im Folgenden wird auf die gewählten Ausprägungen, Eingabeparameter und Randbedingungen der Simulationen zum UL 94 Test eingegangen.

7.2.1 Geometrie und Diskretisierung

Der UL 94 Prüfaufbau ist in der Simulation durch eine rechteckige, vertikal ausgerichtete Probe dargestellt. Im Experiment wird die Probe für 10 s der Prüf Flamme ausgesetzt und sobald die Probe erlischt erneut für 10 s mit der Prüf Flamme beflammt. Die Berechnungen des Brandverhaltens der Probe sind zur Entwicklung und Validierung der einzelnen Untermodelle hinsichtlich ihres Komplexitätsgrades schrittweise aufgebaut. Die Simulationen konzentrieren sich zunächst auf einen dauerhaften, konstanten Wärmeeintrag und erst im nächsten Schritt auf die erste Beflammungsphase mit einer Dauer von 10 s. Vor dem gleichen Hintergrund des schrittweisen Aufbaus der Simulationen wird zunächst eine zweidimensionale Geometrie genutzt und erst im darauffolgenden Schritt wird die Probe mit den Originalabmessungen dreidimensional abgebildet. Abbildung 7.5 zeigt einen Ausschnitt der zwei- und dreidimensionalen Gitterstrukturen. Die Knoten entsprechen den Berechnungspunkten bzw. Elementen und die Linien den entsprechenden Verbindungen bzw. Rändern. Die zweidimensionale Geometrie hat die Abmessungen 125 mm × 13 mm und wurde aus 1978 Elementen zusammengesetzt, die 3701 dreieckige Zellen formen. Die dreidimensionale Geometrie mit den Abmessungen 125 mm × 13 mm × 1,5 mm wurde mittels 5727 Berechnungspunkten diskretisiert, die zusammen 21854 Tetraeder bilden. Die zeitliche Diskretisierung wurde durch einen festen Zeitschritt von 0,01 s vorgegeben.

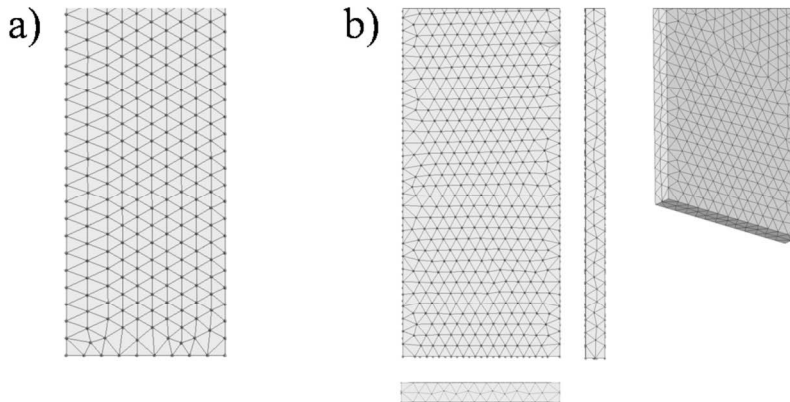


Abbildung 7.5: Ausschnitt der zweidimensionalen (7.5a) und dreidimensionalen (7.5b) Geometrie der Probe im UL 94 Test mit den zugrunde liegenden Berechnungsgittern.

7.2.2 Eingabeparameter und Randbedingungen

Der Schwerpunkt der Berechnungen zum Brandszenario UL 94 Test liegt auf dem Tropfverhalten sowie der Verknüpfung des Tropfverhaltens mit der Pyrolyse und der Verbrennung der Pyrolyseprodukte in der Gasphase. Die Bestimmung der Eingabeparameter konzentriert sich daher auf die das Tropfverhalten beschreibenden rheologischen Eigenschaften der Materialien. Im Mittelpunkt der Randbedingungen steht die Beschreibung des Wärmeeintrages auf die Probe in Folge der Prüfflamme und der brennenden Pyrolyseprodukte. Die verwendeten Parameter zur Simulation des Brandverhaltens werden im Folgenden erläutert.

Rheologische Eigenschaften der Materialien: Abbildung 7.6 zeigt die im logarithmischen Maßstab aufgetragene Viskosität der Schmelzen der vier untersuchten Materialien über der Temperatur. [171] Mit zunehmender Temperatur nimmt die Viskosität der Proben ab. Die Materialien mit dem Flammschutzmittel BDP weisen aufgrund des auch als Weichmacher wirkenden Additivs eine deutlich niedrigere Viskosität auf. Der Einfluss von PTFE auf die Viskosität und die damit verbundene Verhinderung des Abtropfens im UL 94 Test ist aus den Messungen in Abbildung 7.6 bei 10 Hz nur ansatzweise erkenntlich. Im Bereich um 625 K zeigt sich eine erhöhte Viskosität der Materialien mit PTFE. Dieser Effekt wird jedoch durch den störenden Einfluss der einsetzenden Zersetzung auf die Viskositätsmessung ab einer Temperatur von 650 K überlagert.

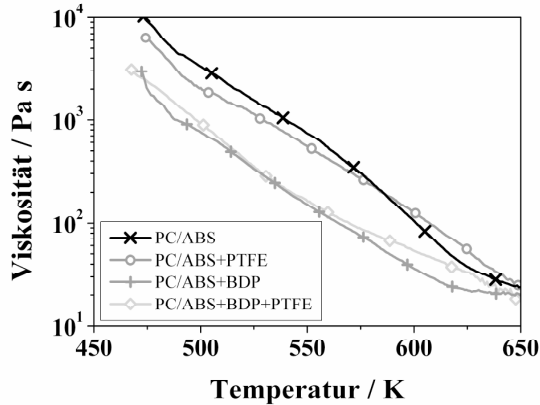


Abbildung 7.6: Viskosität der untersuchten Materialien in Abhängigkeit von der Temperatur, gemessen bei 10 Hz und einer Aufheizrate von 5 K/min [171].

Das Fließen und letztendlich Tropfen einer Polymerschmelze beginnt bei zunächst sehr kleinen Schergeschwindigkeiten. Um das rheologische Verhalten in Abhängigkeit von der Schergeschwindigkeit zu untersuchen, wurden die Materialien bei konstanten Temperaturen von jeweils 488 K, 498 K, 543 K und 588 K unterschiedlichen Scherraten zwischen 0,1 Hz und 100 Hz ausgesetzt. Abbildung 7.7 zeigt die aus der Überlagerung der Einzelkurven erhaltene Masterkurve für eine Temperatur von 523 K. Dargestellt in doppelt logarithmischen Koordinaten ist die Schubspannung in Abhängigkeit von der Scherrate. Bei Scherraten von mehr als 1 Hz ist die plastifizierende Wirkung von BDP deutlich erkennbar. Die Materialien mit BDP weisen eine bis um den Faktor 5 niedrigere Schubspannung auf als die Materialien ohne BDP. Mit abnehmender Scherrate zeigt sich der Einfluss von PTFE: Die Materialien mit PTFE weisen eine Fließgrenze von etwa 400-600 Pa auf. Dies bedeutet, dass sie auch bei sehr kleinen Scherraten erst ab Kräften in Höhe der Fließgrenze plastisch zu verformen sind. Die Materialien ohne PTFE weisen bei niedrigen Scherraten die Charakteristika eines überwiegend Newton'schen Fluids auf und zeigen mit zunehmenden Scherraten eine leicht abnehmende Viskosität bzw. abnehmende Steigung der Schubspannung in Abbildung 7.7 (Scherverdünnung). Übertragen auf die Bedingungen und Beobachtungen im UL 94 Test bleibt festzuhalten, dass zum einen das Flammenschutzmittel BDP die Viskosität erniedrigt und somit das Fließen und Tropfen beschleunigt. Zum anderen weisen die Materialien mit PTFE eine Fließgrenze auf. Der damit verbundene Widerstand gegen plastische Verformungen führt dazu, dass das Fließen und Tropfen der Proben im UL 94 Test verhindert wird.

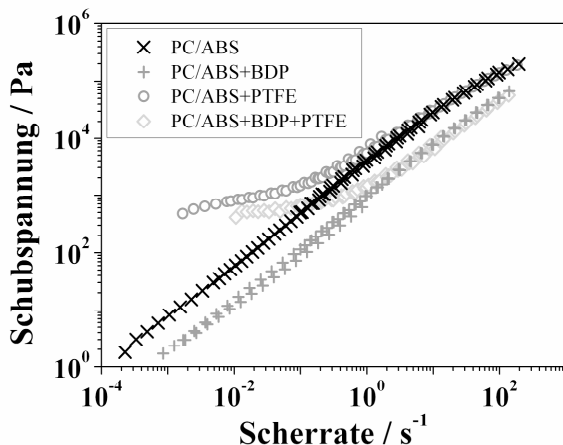


Abbildung 7.7: Masterkurven der Schubspannung vs. Scherrate der vier PC/ABS Blends.

Neben der Temperatur und der Scherrate ist die Viskosität eines Polymers von weiteren Parametern abhängig, wie beispielsweise dem Molekulargewicht oder dem Grad der thermischen Zersetzung. Gerade im UL 94 Test unter Beflammung mit der Prüfflamme wird das geprüfte Material thermisch geschädigt und zersetzt. Der Einfluss der thermischen Zersetzung auf die Viskosität von PC/ABS wurde im Plattenrheometer anhand von Materialproben untersucht, die in einem Rohrofen unter Stickstoff-Atmosphäre unterschiedlich stark thermisch vorgeschädigt wurden. Abbildung 7.8 zeigt die Proben nach der thermischen Vorbehandlung. Die Referenzprobe (I) wurde bei 503 K für 480 s aufgeschmolzen. Die Proben (II) bis (V) waren die gleiche Zeitdauer einer Temperatur von 633 K, 653 K, 673 K bzw. 693 K ausgesetzt. Anhand der dunkler werdenden Farbe ist die unterschiedlich starke thermische Vorschädigung deutlich erkennbar, die mit steigender Temperatur im Rohrofen zunimmt.

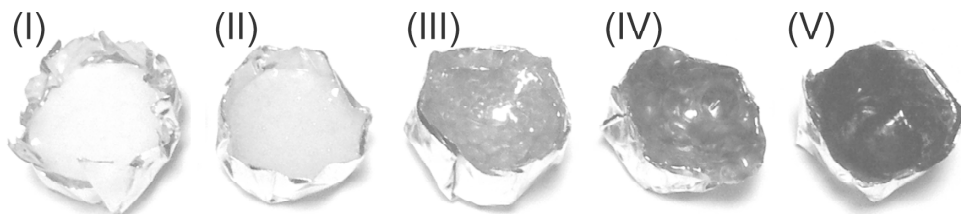


Abbildung 7.8: Im Rohrofen für 480 s bei 503 K (I), 633 K (II), 653 K (III), 673 K (IV) und 693 K (V) vorbehandelte PC/ABS Proben.

Der Einfluss der unterschiedlichen thermischen Vorschädigung auf die Viskosität der Proben wurde im Plattenrheometer bei einer Temperatur von 588 K unter Variation der Scherrate von 0,1 Hz bis 100 Hz bestimmt. Abbildung 7.9 zeigt den Vergleich der fünf vorbehandelten Proben mit einer unbehandelten Referenzprobe. Die Viskositätskurven der unbehandelten Probe und der bei 503 K, also nur geringfügig über der Schmelztemperatur aufgeschmolzenen Probe, liegen über die gesamte Scherratenbandbreite parallel. Eine

Vorschädigung ist bei 503 K damit nicht zu erkennen. Mit steigender Vorbehandlungstemperatur weisen die Proben einen mehr und mehr abfallenden Viskositätsverlauf auf. Die thermische Vorschädigung führt damit insbesondere bei hohen Scherraten zu einer im gemessenen Scherratenbereich bis um den Faktor 10 geringeren Viskosität. Im Bereich sehr kleiner Scherraten und damit im relevanten Bereich für die Entstehung des Schmelzflusses und letztendlich des Tropfverhaltens, ist der Unterschied in der Viskosität der Proben vernachlässigbar. Für die Berechnungen kann daher angenommen werden, dass die thermische Zersetzung keinen substantiellen Einfluss auf die Viskosität der Proben im für das Tropfverhalten relevanten Scherratenbereich besitzt. Diese Annahme steht im Gegensatz zu den Untersuchungen von Butler et al., wonach thermisch vorgeschädigtes Polypropylen eine reduzierte Viskosität im Vergleich zum Ausgangsmaterial aufweist [83, 84, 85]. Auch die Arbeiten von Kandola et al. führten zu dem Ergebnis, dass die thermische Zersetzung einen Einfluss auf das Tropfverhalten der untersuchten Werkstoffe hat [181]. Für die vorliegenden Untersuchungen an den PC/ABS Blends macht Abbildung 7.9 jedoch deutlich, dass die Annahme eines vernachlässigbaren Einflusses der thermischen Zersetzung auf die Viskosität der Materialien bei niedrigen Scherraten durchaus gerechtfertigt ist. Diese Schlussfolgerung gilt insbesondere vor dem Hintergrund, dass der Einfluss der Temperatur und der Additive auf die Viskosität wesentlich ausgeprägter ist.

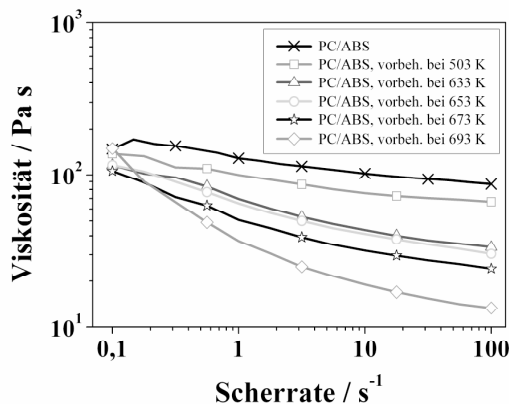


Abbildung 7.9: Einfluss der thermischen Vorbehandlung auf die Viskosität von PC/ABS gemessen in Abhängigkeit von der Scherrate bei 588 K.

Die Zielgröße zur numerischen Beschreibung des Fließverhaltens der Materialien für die Simulation ist die Viskosität in Abhängigkeit von der Temperatur. Das Fließen der Polymerschmelze und das Abtropfen haben ihren Ursprung in relativen Bewegungen des Materials bei geringen Schergeschwindigkeiten. Folglich wurden die Eingabeparameter zur Beschreibung der temperaturabhängigen Viskositäten der vier PC/ABS Blends im Plattenrheometer bei der geringsten Scherrate von 0,1 Hz bestimmt. Abbildung 7.10 zeigt die einzelnen Messpunkte, die bis zu einer maximalen Temperatur von 588 K gemessen wurden. Die maximale Messtemperatur wurde so gewählt, dass sie unterhalb der ab etwa 600 K einsetzenden Zersetzung liegt, und somit die daraus resultierenden Pyrolyseprodukte keine Gefahr für die Messapparatur darstellen können. Oberhalb von 588 K wurde der

Verlauf der Viskosität aufbauend auf den vorausgehenden Messpunkten des jeweiligen Materials abgeschätzt. Die Projektionen der Viskosität für Temperaturen größer als 588 K sind in Abbildung 7.10 als Linien dargestellt. Im Vergleich zu PC/ABS und PC/ABS+BDP zeigen die Materialien mit PTFE bei Temperaturen über 500 K eine deutlich höhere Viskosität auf.

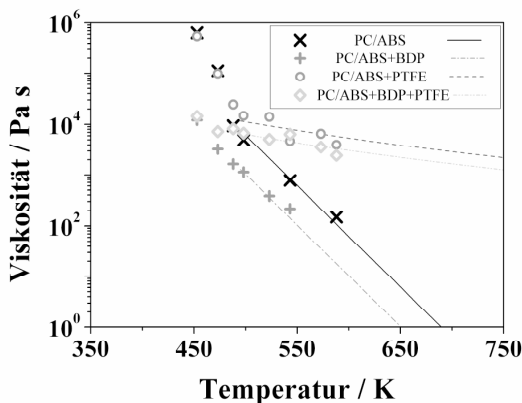


Abbildung 7.10: Viskosität vs. Temperatur der vier PC/ABS Blends gemessen bei 0,1 Hz (Punkte) und die für höhere Temperaturen genutzte Extrapolation der Messdaten (Linien).

Sonstige Materialeigenschaften: In der verwendeten PFEM Version basiert das Untermodell der Pyrolyse und die Berechnung der Massenverlustrate auf einer einstufigen Arrhenius Gleichung erster Ordnung. Die Bildung von Rückstand wird in der kondensierten Phase vernachlässigt und nur in der Gasphase durch Reduzierung der freigesetzten Masse berücksichtigt. Eine weitere Vereinfachung dieser PFEM Version betrifft die Strahlungsabsorption, die ausschließlich auf der Probenoberfläche und nicht in Dickenrichtung stattfindet. [85] Der sonstige Aufbau des PFEM Modells ähnelt den in den vorangegangenen Kapiteln verwendeten Programmen FDS und ThermoKin. Die in PFEM zur Berechnung der Wärmeübertragung und des Massenverlustes benötigten Eingabeparameter sind die Dichte, die Emissivität, die Wärmekapazität, die Wärmeleitfähigkeit, die Aktivierungsenergie, der Arrhenius Koeffizient und die Zersetzungsenthalpie.

Für alle vier Werkstoffe wurden dieselben Werte für die Dichte, die optischen und thermischen Eigenschaften sowie die Zersetzungsparameter Aktivierungsenergie und Arrhenius Koeffizient verwendet. Die Materialien unterscheiden sich damit numerisch nur durch die Viskosität und ihre Verbrennungscharakteristika in der Gasphase. Hintergrund dieser Vereinfachungen sind zum einen die Einschränkungen des PFEM Untermodells der Pyrolyse hinsichtlich der Zersetzungsreaktionen und der Rückstandsbildung. Zum anderen werden damit im Hinblick auf den Fokus der Untersuchungen die wesentlichen Unterscheidungskriterien berücksichtigt.

Die verwendete Dichte beträgt 1130 kg/m³. Dieser Wert entstammt dem Datenblatt des kommerziellen PC/ABS Blends Bayblend T65 von Bayer MaterialScience. Die Wärmeleitfähigkeit wurde auf den Wert 0,35 W/m/K festgelegt und die Wärmekapazität beträgt

1740 J/kg/K. Die Emissivität wurde als perfekt angenommen und damit auf 1,0 festgesetzt. Der Arrhenius Koeffizient beträgt $1,4 \times 10^{10}$ 1/s, die Aktivierungsenergie 185 J/mol und die Zersetzungsenthalpie 1050 kJ/kg/K.

Die verwendeten Materialeigenschaften zur Beschreibung der Gasphase sind die effektive Verbrennungswärme, die Verbrennungseffizienz und der Massenanteil des Rückstands. Die effektive Verbrennungswärme der freigesetzten Gase wurde für alle Werkstoffe auf 27,4 kJ/g festgesetzt und basiert auf Messungen mit dem Pyrolysis Combustion Flow Calorimeter (PCFC) [171]. Die Werte für die Verbrennungseffizienz und den Massenanteil des Rückstands wurden aus den Ergebnissen von Cone Kalorimeter Versuchen in [171] abgeleitet. Demnach ist die effektive Verbrennungswärme von PC/ABS gleich 1, von PC/ABS+BDP gleich 0,98, von PC/ABS+PTFE gleich 0,8 und von PC/ABS+BDP+PTFE gleich 0,75. Der Massenanteil des Rückstands für PC/ABS beträgt 0,2 kg/kg, für PC/ABS+BDP 0,23 kg/kg, für PC/ABS+PTFE 0,23 kg/kg und für PC/ABS+BDP+PTFE 0,3 kg/kg.

Randbedingungen: Die Untermodelle zur Beschreibung des Wärmeeintrages auf die Probe umfassen zum einen den Wärmeeintrag in Folge der Prüf Flamme und zum anderen die Wärmerückkopplung der Verbrennung der Pyrolysegase. Die Abschätzung des Wärmeeintrags durch die Prüf Flamme greift auf ausführliche Untersuchungen in der Literatur zur Wärmefreisetzung einer Kerzenflamme zurück [170]. Dabei zeigte sich, dass der maximale Wärmestrom einer Kerzenflamme mit der Wärmeleistung von 77 W und einer Flammenhöhe von 42 mm direkt über der Flammenspitze anliegt und bis zu 150 kW/m² beträgt. Dieser maximale Wärmeeintrag von 150 kW/m² wurde auch für die Simulationen angenommen und an der Unterseite bzw. am tiefsten Punkt der Probe, dort wo die Prüf Flamme auf die Probe trifft, appliziert. Mit zunehmendem Abstand vom tiefsten Punkt der Probe in Richtung Probenaufhängung nimmt der Wärmeeintrag exponentiell ab. Der gesamte Wärmeeintrag auf die Probe wurde somit auf ~48 W festgelegt.

Für die Simulation der Wärmerückkopplung in Folge der Verbrennung der Pyrolysegase wurde eine einfache Beziehung zwischen freigesetzter Masse und Wärmeeintrag auf die Probe verwendet. Aus der freigesetzten Masse multipliziert mit der effektiven Verbrennungswärme und der Verbrennungseffizienz des entsprechenden Materials wurde die Wärmefreisetzung bestimmt. Die verwendete Version von PFEM berücksichtigt noch keine Rückstandsbildung in der Pyrolyse. Um dennoch den wesentlichen Einfluss des Rückstands einzubeziehen, wurde die Wärmefreisetzung um den Anteil des Rückstands des jeweiligen Materials reduziert. Die freigesetzte Wärme infolge der Verbrennung der Pyrolysegase wurde in jedem Zeitschritt auf die Probe appliziert. Dabei wurde angenommen, dass der maximale Wärmeeintrag am untersten Punkt der Probe stattfindet und mit dem Quadrat des Abstandes zu diesem Punkt in Richtung Probenaufhängung abnimmt. Zusätzlich wurde der maximal mögliche Wärmeeintrag durch die brennenden Pyrolysegase an der Probenunterseite auf 150 kW/m² begrenzt.

7.3 Vergleich von Simulation und Experiment

Die Validierung der Berechnungen und der Vergleich von Simulation und Experiment erfolgt in vier Schritten. Zunächst wird anhand der zweidimensionalen Geometrie die grundsätzliche Fähigkeit von PFEM untersucht, das Tropfverhalten in Abhängigkeit von der Viskosität

zu berechnen. Danach wird das Untermodell der Pyrolyse hinzugezogen. Im darauffolgenden Schritt wird die dreidimensionale Geometrie unter den gleichen Parametern verwendet. Der Wärmeeintrag auf die Probe im Rahmen dieser ersten drei Schritte wird als konstant und dauerhaft angenommen. Im abschließenden Schritt wird das Untermodell der Verbrennung in der Gasphase in das 3-D Modell implementiert und die Beflammungszeit mit der Prüf Flamme in Anlehnung an die Experimente auf 10 s beschränkt..

2-D Simulationen zum Tropfverhalten: Abbildung 7.11 zeigt Aufnahmen der Simulationen unter konstantem, dauerhaftem Wärmeeintrag der Prüf Flamme. Die Untermodelle für die Pyrolyse und die Gasphase wurden in diesen Berechnungen nicht verwendet. Dargestellt sind die Ergebnisse zwischen 0 s und 60 s für die Materialien PC/ABS+BDP (a) und PC/ABS+PTFE (b). Die Eingabeparameter der Materialien unterscheiden sich hinsichtlich der Werte für die temperaturabhängige Viskosität. Alle anderen Parameter zur Berechnung aller vier Materialien sind identisch. Die Aufnahmen der Simulationen von PC/ABS+BDP und PC/ABS+PTFE zeigen, dass mit den eingesetzten Funktionen der Viskosität das Simulationsprogramm PFEM in der Lage ist, das in den Experimenten beobachtete unterschiedliche Tropfverhalten zu berechnen. Während PC/ABS+BDP zu fließen beginnt und dann abtropft, bleibt die PC/ABS+PTFE Probe formstabil.

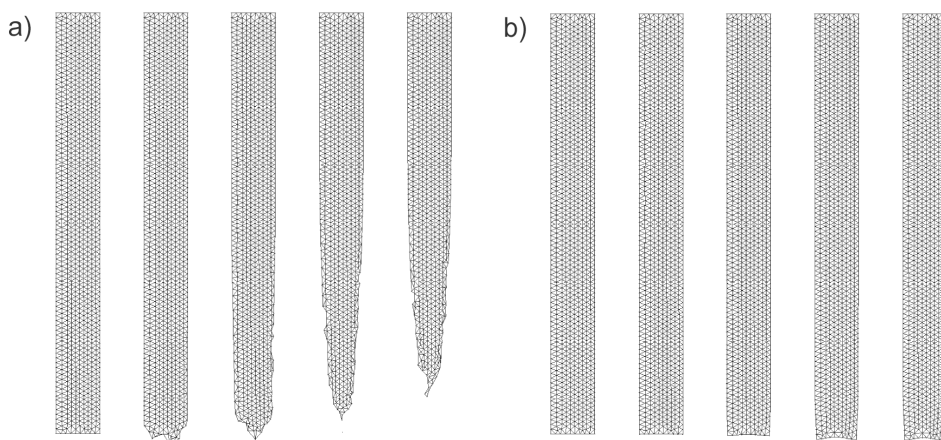


Abbildung 7.11: Aufnahmen der zweidimensionalen Simulationen von PC/ABS+BDP (a) und PC/ABS+PTFE (b) unter konstantem, dauerhaftem Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme.

Der berechnete Massenverlauf der vier Materialien über der Zeit im UL 94 Test ist in Abbildung 7.12 dargestellt. Die Materialien PC/ABS+PTFE und PC/ABS+BDP+PTFE besitzen eine größere Viskosität insbesondere bei hohen Temperaturen als die beiden anderen Materialien. In der Folge bewahren diese beiden Proben im UL 94 Test ohne zu tropfen ihre anfängliche Struktur und verlieren keine Masse. Dagegen nimmt die Masse von PC/ABS und PC/ABS+BDP aufgrund des Fließens der Schmelze mit anschließendem Abtropfen ab. Das Tropfverhalten von PC/ABS+BDP ist aufgrund der Zugabe von BDP und der damit verbundenen geringeren Viskosität im Vergleich zu PC/ABS ausgeprägter. Der Massenverlauf von PC/ABS+BDP weist folglich einen deutlicheren Massenverlust auf.

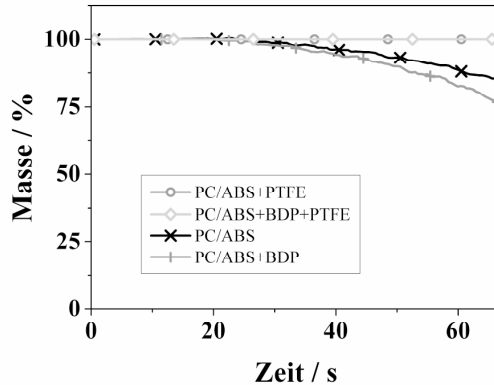


Abbildung 7.12: Berechneter 2-D Massenverlauf über der Zeit der vier untersuchten Materialien in der UL 94 Konfiguration bei konstantem Wärmeeintrag durch die Prüfflamme.

2-D Simulationen zu Tropfverhalten und Pyrolyse: Die im Folgenden präsentierten Simulationsergebnisse basieren auf Berechnungen bei konstantem, dauerhaftem Wärmeeintrag durch die Prüfflamme unter Berücksichtigung der Pyrolyse der Proben. Abbildung 7.13 zeigt das Verhalten der PC/ABS (a) und PC/ABS+PTFE (b) Proben in den ersten 60 s der Simulation. Während die PC/ABS Probe ein ausgeprägtes Tropfverhalten aufweist, verändert die PC/ABS+PTFE Probe ihre Form ausschließlich aufgrund des Massenverlustes durch die Pyrolyse. Der Massenverlust von PC/ABS beträgt nach 60 s 13 % und von PC/ABS+PTFE 7 % der Ausgangsmasse. Die maximalen Temperaturen an der Oberfläche der Proben beträgt etwa 800 K bis 840 K. Die Oberflächentemperatur der PC/ABS+PTFE Probe ist über die Zeit betrachtet etwas höher als die entsprechende Temperatur der PC/ABS Probe. Dies liegt daran, dass die wärmsten Bereiche der PC/ABS Probe die geringste Viskosität aufweisen und zuerst fließen und abtropfen.

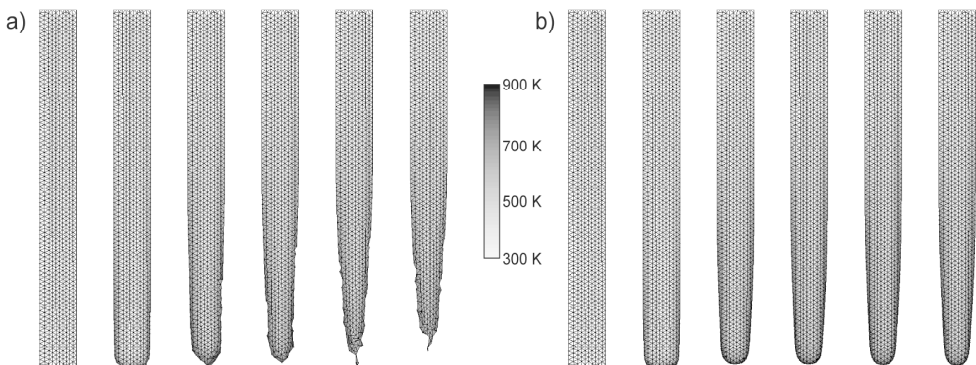


Abbildung 7.13: Aufnahmen der zweidimensionalen Simulationen von PC/ABS+BDP (a) und PC/ABS+PTFE (b) unter konstantem, dauerhaftem Wärmeeintrag durch die Prüfflamme unter Berücksichtigung der Pyrolyse.

Neben der niedrigeren Oberflächentemperatur lässt sich aufgrund des Fließens und Abtropfens der Proben ein weiteres Phänomen ableiten. Das Abtropfen der wärmsten Bereiche der Probe führt zu einem niedrigeren Temperaturprofil und gleichzeitig zu einer niedrigeren Massenfreisetzungsrates infolge der Pyrolyse, nachstehend Pyrolyserate genannt. Im Extremfall führen das Abtropfen und die niedrigere Pyrolyserate zum Verlöschen einer brennenden Probe, wie es für die PC/ABS und PC/ABS+BDP Proben beobachtet wurde. Der Flammschutzeffekt durch Abtropfen und der daraus resultierenden verringerten Pyrolyserate wird auch aus den Simulationsergebnissen deutlich. Abbildung 7.14 zeigt die Pyrolyserate über der Zeit der vier untersuchten Materialien im UL 94 Test. Mit zunehmender Aufheizung steigt die Pyrolyserate aller vier Materialien zu Beginn gleichmäßig an. Nach etwa 20 s bis 30 s erreicht die Pyrolyserate der nicht tropfenden Materialien mit PTFE ein Plateau und die thermische Zersetzung verbleibt aufgrund der konstanten Randbedingungen auf diesem Niveau.

Die Pyrolyserate der tropfenden Materialien besitzt einen anderen Kurvenverlauf. Mit Beginn des Tropfens nimmt die Pyrolyserate im Vergleich zu den nicht tropfenden Materialien ab. Dieser Effekt findet bei der PC/ABS+BDP Probe mit dem ausgeprägteren Tropfverhalten aufgrund des eher eintretenden Tropfens zum einen früher statt. Zum anderen bewegt sich bei der konstanten Randbedingung die Pyrolyserate von PC/ABS+BDP auf einem vergleichsweise niedrigeren Niveau als die Pyrolyserate von PC/ABS. Das Zusammenspiel von Pyrolyserate und Tropfverhalten der Materialien stellt einen wichtigen Mechanismus im UL 94 Test dar und hat einen wesentlichen Einfluss auf deren Klassifizierung. Anhand der Abbildungen 7.13 und 7.14 wird deutlich, dass das Simulationsprogramm PFEM die konkurrierenden Mechanismen des Tropfverhaltens und der Pyrolyse erfasst und in der Lage ist, die unterschiedlichen Einflüsse auf die Pyrolyserate der Materialien numerisch abzubilden.

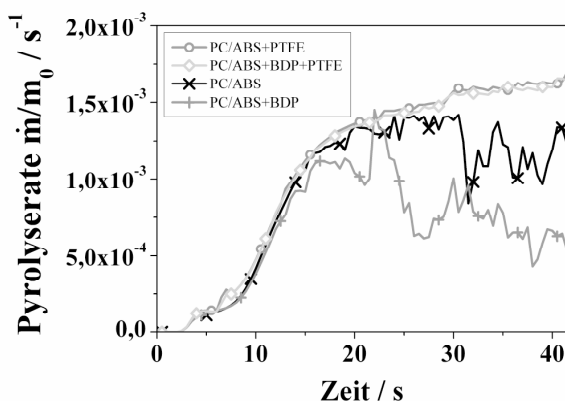


Abbildung 7.14: Berechnete 2-D Pyrolyserate über der Zeit der vier untersuchten Materialien in der UL 94 Konfiguration bei konstantem Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme.

3-D Simulationen zu Tropfverhalten und Pyrolyse: Die dreidimensionalen Berechnungen basieren auf den gleichen Eingabeparametern wie die zweidimensionalen Simulationen. Neben dem Rechenaufwand und den technischen Herausforderungen der Gitterge-

nerierung und Lösungsmethodik liegen die Unterschiede vor allem im Bereich der thermischen Randbedingung. In der zweidimensionalen Betrachtung des UL 94 Tests wird die thermische Randbedingung über eine Linienbelastung des Probenrands formuliert. Dieser Ansatz entspricht der Annahme einer im Vergleich zur Breite sehr großen Dicke der Probe. Im Gegensatz dazu wird in der dreidimensionalen Geometrie die Wärme, wie auch im Experiment, von allen Seiten her auf die Probe übertragen.

In Abbildung 7.15 sind Aufnahmen der 3-D Simulationen von PC/ABS und PC/ABS+BDP dargestellt. Die Aufnahmen beginnen mit dem Ausgangszustand der Proben und zeigen den Simulationsfortschritt nach jeweils 2 s, bis ein ausgeprägtes Tropfverhalten beobachtet wurde. Die Maximalen Temperaturen auf der Oberfläche der Proben liegen im Bereich um 820 K. Sowohl die Größenordnung der Temperaturen als auch der Effekt, dass die nicht tropfenden Proben tendenziell höhere Temperaturen aufweisen, entspricht aufgrund der identischen Eingabeparameter den Ergebnissen der zweidimensionalen Untersuchungen.

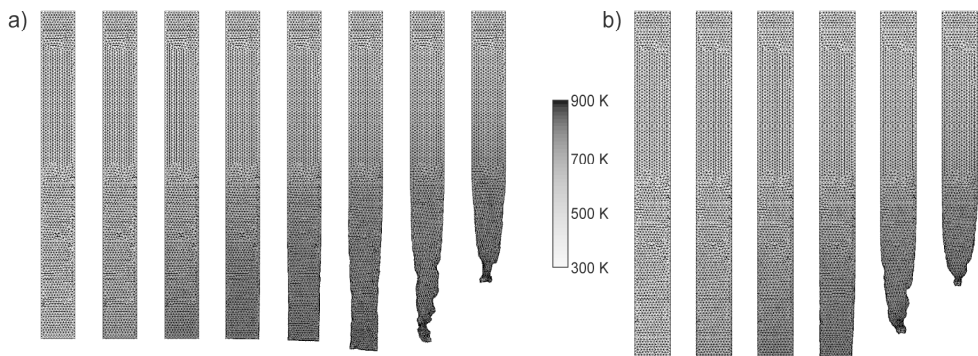


Abbildung 7.15: Aufnahmen der dreidimensionalen Simulationen der Materialien PC/ABS (a) und PC/ABS+BDP (b) in der UL 94 Konfiguration bei konstantem Wärmeeintrag durch die Prüfflamme und Berücksichtigung der Pyrolyse.

Unter den verwendeten Randbedingungen der Prüfflamme beginnt die PC/ABS Probe nach etwa 12 s zu tropfen. Dieser Wert liegt im Bereich der experimentellen Untersuchungen. Der Mittelwert der Zeit bis zum Verlöschen durch Abtropfen lag für PC/ABS bei 17,7 s. In der Simulation weist PC/ABS eine Zeit bis zum Abtropfen von etwa 8 s auf und damit 4 s weniger als PC/ABS. Auch dieser Zeitunterschied zwischen den beiden Materialien liegt in der Größenordnung der experimentellen Ergebnisse: PC/ABS+BDP tropfte nach durchschnittlich 13,3 s bis zum Verlöschen ab, etwa 4 s früher als PC/ABS.

Abbildung 7.16 zeigt die in den dreidimensionalen Simulationen des Brandszenarios UL 94 Test berechneten Pyrolyseraten der vier PC/ABS Blends. Für die nicht tropfenden Materialien mit dem Additiv PTFE erreicht die Pyrolyserate nach etwa 10 s bis 15 s ein Plateau. Aufgrund des Tropfverhaltens verbunden mit dem Abtropfen der wärmsten Bereiche der PC/ABS und PC/ABS+BDP Proben ist deren Pyrolyserate reduziert. Ausgeprägtes Tropfen wird durch die starke Abnahme der Pyrolyseraten nach etwa 7 s für PC/ABS+BDP und etwa 12 s für PC/ABS widerspiegelt. Die entsprechenden Zeiten korrespondieren mit

den Aufnahmen aus Abbildung 7.15. Aufgrund der konstanten thermischen Randbedingungen in der Simulation zeigen die Proben in der Folge ein stetiges Abtropfen begleitet von einer auf einem Niveau bleibenden Pyrolyserate. Dieses Niveau der Pyrolyserate liegt bei der stärker tropfenden PC/ABS+BDP Probe niedriger als bei PC/ABS. Die Simulationen zeigen, dass PFEM auch im dreidimensionalen Modellaufbau das Zusammenspiel von Tropfverhalten und Pyrolyse abbildet und die zentralen Effekte der unterschiedlichen Viskositäten in einem mit den experimentellen Ergebnissen übereinstimmenden Zeitmaßstab berechnet.

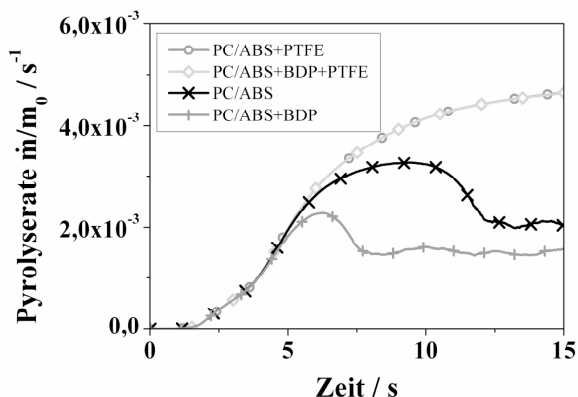


Abbildung 7.16: Berechnete 3-D Pyrolyserate über der Zeit der vier untersuchten Materialien in der UL 94 Konfiguration bei konstantem Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme.

3-D Simulationen zu Tropfverhalten, Pyrolyse und Verbrennung: Die Rückkopplung des Wärmeeintrags infolge der Verbrennung der Pyrolysegase basiert auf einer einfachen Korrelation mit der freigesetzten Masse der Probe und wird in jedem Zeitschritt berechnet. Der Einfluss des Flammschutzmittels sowie das unterschiedliche Brandverhalten der Blends u.a. hinsichtlich des Rückstands werden über die Verbrennungseffizienz und den Massenanteil des Rückstands berücksichtigt. Im Vergleich zu PC/ABS wurde die Wärmefreisetzung der Probe infolge der Pyrolyse und damit der Wärmeeintrag auf die Probe für PC/ABS+PTFE um insgesamt 6 % reduziert, für PC/ABS+BDP um 23 % und für PC/ABS+BDP+PTFE um 34 %.

Die in Abbildung 7.17 gezeigte Pyrolyserate beinhaltet die Mechanismen des Tropfens, der Pyrolyse sowie den Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme und die Verbrennung der Pyrolysegase. In der Zeit $0 \text{ s} < t < 10 \text{ s}$ setzt sich der Wärmeeintrag auf die Probe aus der Prüf Flamme und der Verbrennung der Pyrolyseprodukte zusammen. In der Zeit $t > 10 \text{ s}$ besteht der Wärmeeintrag nur noch aus der Rückkopplung hinsichtlich der Verbrennung der Pyrolyseprodukte in der Gasphase. Der Unterschied zwischen den einzelnen Materialien besteht folglich zum einen in dem für die Viskosität verwendeten Wert. Zum anderen differiert in Folge der Pyrolyse das den Wärmeeintrag bestimmende Produkt aus Verbrennungseffizienz und Anteil des Rückstandes.

Die Pyrolyseraten der Materialien in Abbildung 7.17 verlaufen in den ersten 5 s der Simulationen parallel. In dieser Zeit ist der maßgebliche Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme für alle Materialien gleich. Mit dem Beginn des Tropfverhaltens und dem steigenden Einfluss des Wärmeeintrags infolge Pyrolyse driften die Graphen auseinander. Nach 10 s zeigt PC/ABS+PTFE die größte Pyrolyserate. Durch den Beginn des Fließens und Tropfens ist der Wert der Pyrolyserate von PC/ABS zu diesem Zeitpunkt etwas niedriger. Die Pyrolyserate von PC/ABS+BDP+PTFE ist aufgrund des vergleichsweise stark reduzierten Wärmeeintrags infolge der niedrigeren Verbrennungseffizienz und des erhöhten Anteils des Rückstands deutlich geringer. Die PC/ABS+BDP Probe weist eine sowohl maßgeblich durch das Tropfverhalten als auch durch den geringeren Wärmeeintrag reduzierte Pyrolyserate auf. Sobald der Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme nach 10 s wegfällt, zeigen alle Materialien eine abnehmende Pyrolyserate. Für PC/ABS+PTFE ist der Wärmeeintrag durch das Untermodell der Gasphase jedoch groß genug, um die Abnahme der Pyrolyserate abzufangen und sie erneut zu steigern. Die Pyrolyserate der PC/ABS Probe verbleibt zwischen $10\text{ s} < t < 20\text{ s}$ auf einem konstanten Niveau. In dieser Zeit sorgt das konkurrierende Zusammenspiel von Abtropfen und thermischer Zersetzung für einen gleichbleibenden Wärmeeintrag auf die Probe. Dieser instabile Zustand ändert sich sobald vermehrtes Abtropfen die Pyrolyserate sinken lässt, wodurch wiederum auch der Wärmeeintrag geringer wird. Die Probe erlischt schließlich und die Pyrolyserate geht vollständig zurück. Für PC/ABS+BDP als auch für PC/ABS+BDP+PTFE sind die Pyrolyseraten und damit der Wärmeeintrag nach Entfernen der Prüf Flamme zu gering, um eine weitere thermische Zersetzung der Proben aufrecht zu erhalten. Die Proben verlöschen nahezu unmittelbar nach Wegfall des Wärmeeintrags der Prüf Flamme.

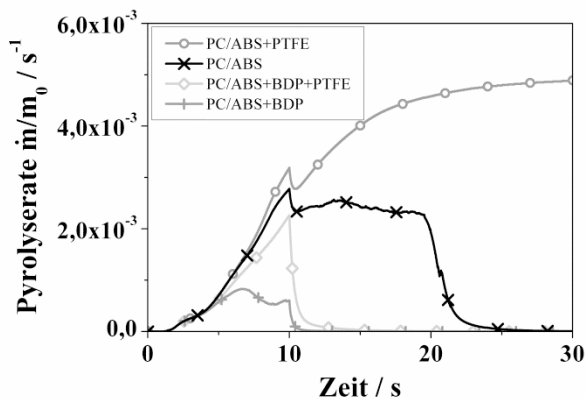


Abbildung 7.17: Berechnete 3-D Pyrolyserate über der Zeit der vier untersuchten Materialien in der UL 94 Konfiguration bei 10 s Beflammung mit der Prüf Flamme und dem simulierten Wärmeeintrag infolge der Verbrennung der Pyrolysegase in der Gasphase.

Die in Abbildung 7.17 dargestellten Ergebnisse der Simulationen stimmen sehr gut mit den experimentellen Beobachtungen im UL 94 Test überein. Ordnet man den Verläufen der berechneten Pyrolyseraten die entsprechenden UL 94 Klassifikationen zu, so erhält PC/ABS+PTFE bedingt durch die lange Brennzeit und den Abbrand bis zur Aufhängung eine HB Klassifizierung. PC/ABS und PC/ABS+BDP werden aufgrund des Abtropfens nach

V-2 klassifiziert und PC/ABS+BDP+PTFE, das unmittelbar nach Entfernen der Prüfflamme ohne zu tropfen verlöscht, erhält die Klassifizierung V-0. Neben der Übereinstimmung von Simulation und Experiment hinsichtlich der UL 94 Klassifizierungen werden in den Berechnungen mit PFEM auch das konkurrierende Zusammenspiel der entscheidenden Mechanismen Tropfverhalten, Pyrolyse und Verbrennung sowie die zugehörigen Zeitmaßstäbe passend zu den experimentellen Ergebnissen abgebildet. Die Sensibilität des Zusammenspiels gegenüber einzelnen Parametern wird im nachfolgenden Abschnitt untersucht.

7.4 Parameterstudie

Die Parameterstudie zum UL 94 Test zielt auf den grundsätzlichen Einfluss ausgewählter Parameter auf das Zusammenspiel von Tropfverhalten und Pyrolyse ab. Die Parameteranalyse konzentriert sich auf das Material PC/ABS und die Parameter Wärmekapazität, Wärmeleitfähigkeit und Zersetzungsenthalpie. Die genannten Parameter wurden um ihren Ausgangswert um $\pm 50\%$ variiert und die Simulationsergebnisse mit der zweidimensionalen Simulation von PC/ABS mit und ohne Untermodell der Pyrolyse verglichen. Tabelle 7.1 fasst die berechneten Variationen zusammen.

Tabelle 7.1: Übersicht der Parametervariationen des Materials PC/ABS im UL 94 Test

	Einheit	Sim_1	Sim_2	Sim_3	2-D ohne Pyrol.	2-D mit Pyrol.
Wärmekapazität	J/kg/K	870	1740	2410	X	X
Wärmeleitfähigkeit	W/m/K	0,175	0,35	0,525	X	X
Zersetzungsenthalpie	kJ/kg	525	1050	1575	---	X

Abbildung 7.18 zeigt den Verlauf der relativen Masse von PC/ABS und den Variationen der spezifischen Wärmekapazität c_p um $\pm 50\%$. Die Ergebnisse entstammen der zweidimensionalen Simulation ohne Berücksichtigung der Pyrolyse bei konstantem Wärmeeintrag infolge der Prüfflamme. Der Massenverlust durch Tropfen beginnt für PC/ABS nach etwa 25 s. Nach 60 s sind 15 % der Ausgangsmasse abgetropft. Die Verringerung der Wärmekapazität um -50% verkürzt den Beginn des Abtropfens fast um die Hälfte. Die Probe wird deutlich schneller aufgeheizt. Damit verbunden verringert sich die Viskosität und das Tropfen beginnt früher. Das Tropfverhalten ist ausgeprägter und bereits zum Zeitpunkt $t = 35$ s sind 15 % der Ausgangsmasse abgetropft. In der Folge führten numerische Instabilitäten zum Abbruch der Rechnung. Eine um $+50\%$ erhöhte Wärmekapazität verlängert die Zeit bis zum Tropfen und verringert die Tropfgeschwindigkeit, so dass nach 60 s erst 5 % der Ausgangsmasse abgetropft sind.

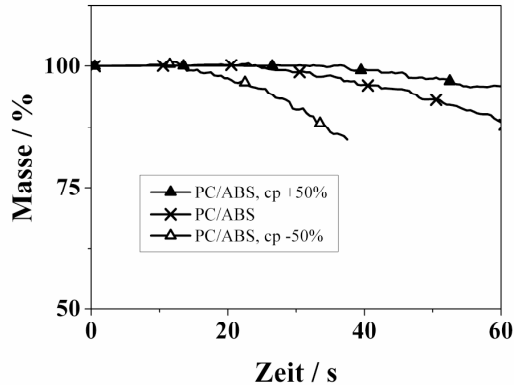


Abbildung 7.18: Relative Masse über der Zeit der Parametervariationen zur Wärmekapazität von PC/ABS in der 2-D Simulation ohne Untermodell der Pyrolyse.

Der Einfluss der Variation der Wärmeleitfähigkeit um $\pm 50\%$ auf das Tropfverhalten von PC/ABS in der zweidimensionalen Simulation ohne das Untermodell der Pyrolyse ist in Abbildung 7.19 dargestellt. Eine Erhöhung der Wärmeleitfähigkeit führt zu einem ausgeprägten Tropfverhalten, während eine Verringerung das Tropfverhalten abschwächt. Obwohl eine geringere Wärmeleitfähigkeit die Temperaturen an der Probenoberfläche schneller ansteigen und damit die Viskosität schneller sinken lässt, wird das Tropfverhalten verzögert. Das Tropfverhalten wird folglich dadurch beschleunigt, dass die Viskosität nicht nur an der Oberfläche, sondern möglichst gleichmäßig bis zu einer gewissen Tiefe in Dickenrichtung verringert wird. Im Vergleich der Abbildungen 7.18 und 7.19 scheint insgesamt der Einfluss der Variation der Wärmeleitfähigkeit auf das Tropfverhalten verglichen mit dem Einfluss der Wärmekapazität geringer zu sein.

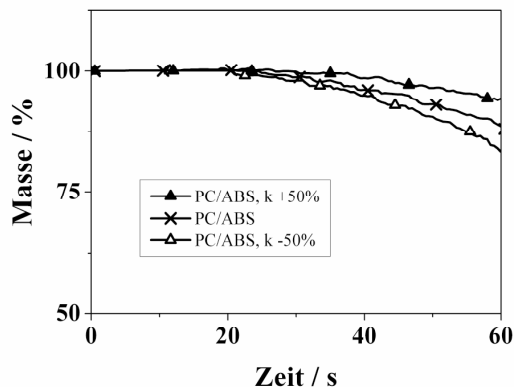


Abbildung 7.19: Relative Masse über der Zeit der Parametervariationen zur Wärmeleitfähigkeit von PC/ABS in der 2-D Simulation ohne Untermodell der Pyrolyse.

Im Folgenden wird der Einfluss der Parametervariationen auf die Ergebnisse der zweidimensionalen Simulation mit dem Untermodell der thermischen Zersetzung vorgestellt und anhand der Pyrolyserate erläutert. Abbildung 7.20 zeigt die Pyrolyserate von PC/ABS mit den entsprechenden Variationen der Wärmekapazität. Die verringerte Wärmekapazität führt zu einer beschleunigten Erwärmung der Probe und damit im Vergleich zum Ausgangsmaterial PC/ABS zu einem deutlich früheren Beginn der Pyrolyse und einer erhöhten Pyrolyserate. Bedingt durch das gleichzeitig verstärkte Tropfverhalten sinkt im Laufe der Simulation die Pyrolyserate unter die entsprechende Kurve des Ausgangsmaterials. Die Erhöhung der Wärmekapazität verzögert die Pyrolyse und verringert die anfängliche Pyrolyserate. Die geringere Abtropftrate führt ab dem Zeitpunkt $t = 30$ s zu einer Kompensation des Effektes.

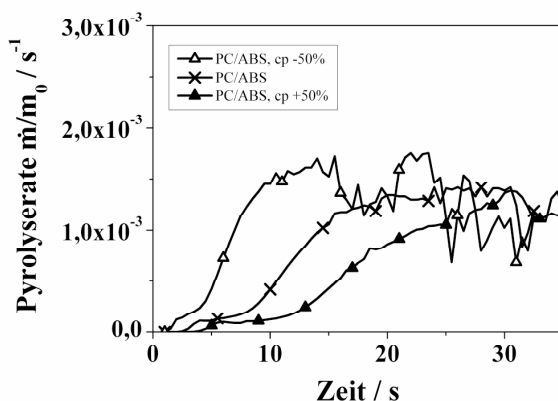


Abbildung 7.20: Pyrolyserate über der Zeit der Parametervariationen zur Wärmekapazität von PC/ABS in der 2-D Simulation.

Die geringere Wärmeleitfähigkeit führt in der Simulation zu einer deutlich erhöhten Pyrolyserate (siehe Abbildung 7.21). Zum einen wird die Energie langsamer von der Probe in das Material abgeführt, zum anderen tropft weniger Material ab. Eine erhöhte Wärmeleitfähigkeit dagegen verringert die Oberflächentemperaturen und damit die Pyrolyserate im Vergleich zum Ausgangsmaterial PC/ABS. Zusätzlich wird die Pyrolyserate durch das ausgeprägtere Tropfverhalten im Laufe der Simulation reduziert. Während, bedingt durch das Zusammenspiel von Tropfverhalten und Pyrolyse, die Effekte der Wärmekapazität auf die Pyrolyserate sich gegenseitig tendenziell aufheben, wird der Einfluss der Wärmeleitfähigkeit zusätzlich verstärkt.

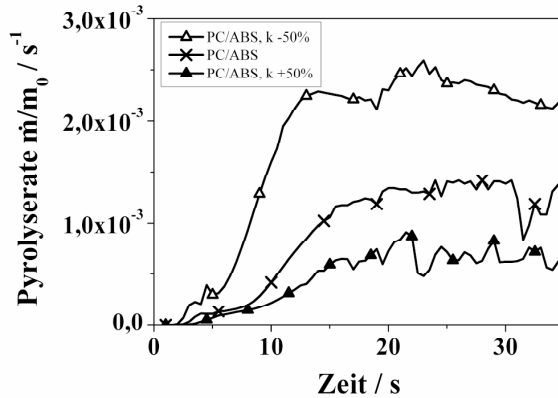


Abbildung 7.21: Pyrolyserate über der Zeit der Parametervariationen zur Wärmeleitfähigkeit von PC/ABS in der 2-D Simulation.

Abbildung 7.22 zeigt den Einfluss der Zersetzungsenthalpie auf die Pyrolyserate des tropfenden Materials PC/ABS. Durch eine geringere Zersetzungsenthalpie wird weniger Wärmeenergie während der Zersetzungreaktion absorbiert. Die thermischen Eigenschaften vor Beginn der Pyrolyse bleiben unverändert. In der Folge wird der Beginn der Pyrolyse durch die Variation der Zersetzungsenthalpie nicht beeinflusst. Durch die geringere Zersetzungsenthalpie steigen die Temperaturen der Probe schneller an und die Pyrolyserate ist erhöht. Eine erhöhte Zersetzungsenthalpie führt zu dem entgegengesetzten Effekt. Die höheren Temperaturen verstärken das Tropfverhalten. Das Tropfen setzt früher ein, erkennbar an den Schwankungen der Pyrolyserate, und die Pyrolyserate wird reduziert. Damit führt das Zusammenspiel von Tropfverhalten und Pyrolyse ähnlich wie für die Wärmekapazität zu einer Kompensation des Einflusses der Zersetzungsenthalpie.

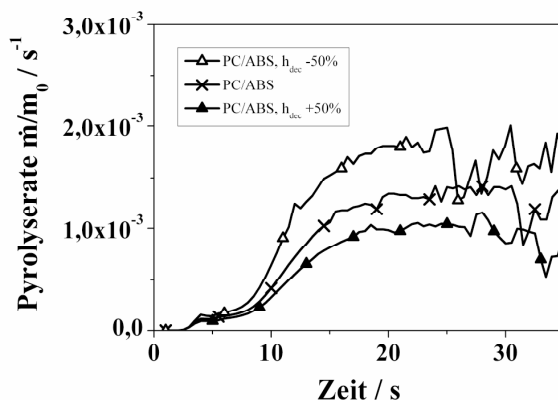


Abbildung 7.22: Pyrolyserate über der Zeit der Parametervariationen zur Zersetzungsenthalpie von PC/ABS in der 2-D Simulation.

7.5 Zwischenfazit

Der UL 94 Test ist der wichtigste Test zur Klassifizierung der Entflammbarkeit polymerer Materialien. Gleichzeitig ist der Nutzen des Tests für eine differenzierte Betrachtung und Untersuchung des Brandverhaltens von Werkstoffen eingeschränkt. Im Rahmen der UL 94 Klassifizierung wird das komplexe Brandverhalten inklusive Pyrolyse, Gasphasenverbrennung und Fließen/ Tropfen bewertet. Die Untersuchungen zu diesem Brandszenario der Dimension Kubikzentimeter zielten darauf ab, mittels eines neuen Modellierungsansatzes das Brandverhalten von Polymeren im vertikalen UL 94 Test unter Berücksichtigung des Zusammenspiels von Pyrolyse, Verbrennung und Tropfverhalten erstmals zu simulieren.

Die untersuchten Materialien bestanden aus vier PC/ABS Blends mit und ohne dem Flammenschutzmittel BDP und dem Additiv PTFE. Die Materialien erreichten abhängig von Tropfverhalten und Verbrennungseigenschaften unterschiedliche UL 94 Klassifizierungen (V-0; V-2; HB). Zur Untersuchung des Tropfverhaltens und Bestimmung der Eingabeparameter der Simulation wurden insbesondere die rheologischen Eigenschaften der Materialien analysiert. Es zeigte sich, dass BDP plastifizierend wirkt und das Tropfverhalten beschleunigt, während die Zugabe von PTFE dazu führt, dass die Proben eine Fließgrenze aufweisen und dadurch das Tropfen verhindert wird. Zur Simulation des Brandszenarios UL 94 Test wurde das Programm PFEM verwendet. Die aktuelle Version des Programms besitzt Untermodelle zur Beschreibung von großen Deformationen unter Berücksichtigung der freien Oberflächen, der Pyrolyse und der Änderung der Viskosität mit der Temperatur. Im Rahmen der Arbeiten wurde zusätzlich ein simples Untermodell implementiert, das die Wärmerückkopplung der Verbrennung der Pyrolysegase auf die Probe abbildet.

Der Vergleich von Simulation und Experiment zeigte, dass, basierend auf der Bestimmung der temperaturabhängigen Viskosität, PFEM in der Lage ist, das Tropfverhalten der vier Materialien im UL 94 Test in Übereinstimmung mit den experimentellen Beobachtungen zu simulieren. Darüber hinaus wurde mit PFEM das komplexe Zusammenspiel von Pyrolyse, Verbrennung und Tropfverhalten im vertikalen UL 94 Test wiedergegeben. Das Abtropfen sorgt für eine Reduzierung der Pyrolyserate. Dadurch wird grundsätzlich die Klassifizierung negativ beeinflusst, aber gleichzeitig auch ein vorzeitiges Verlöschen der Probe ermöglicht. Im Gegensatz dazu führt das Verhindern des Abtropfens zu einer grundsätzlich höheren Pyrolyserate, allerdings können auf diese Weise Flammenschutzmittel erst ihre ganze Wirkung entfalten.

Aus den Simulationen wurden ferner nicht nur das Zusammenspiel der grundlegenden Phänomene sondern auch die korrekte UL 94 Klassifizierung der vier Materialien abgeleitet. Die berechneten Zeiten bis zum Abtropfen bzw. Verlöschen lagen in der Größenordnung der Experimente. Wie anhand der Parametervariation verdeutlicht wurde, bleibt festzuhalten, dass PFEM ein leistungsfähiges numerisches Instrument zur Simulation des Brandverhaltens von Polymeren im UL 94 Test ist. Durch die komplementäre Nutzung polymerwissenschaftlicher Kenntnisse und der Brandsimulation wurde damit die Erweiterung des Anwendungsbereiches der Brandsimulation auf das komplexe Verhalten im UL 94 Test erreicht. Die im Rahmen einer Parameterstudie mögliche Generierung zusätzlicher Informationen zum komplexen Zusammenspiel von Pyrolyse, Verbrennung und Tropfverhalten bietet darüber hinaus das Potential, die Materialentwicklung in der Polymerwissenschaft gezielt zu unterstützen.

8 Zusammenfassung

Der Einsatz von Brandsimulationen gewinnt nicht zuletzt dank immer leistungsstärkerer Computer an Bedeutung. Zu den Anwendungsgebieten gehören in erster Linie das Brand- und Bauingenieurwesen. Hier haben die unter dem Begriff Ingenieurmethoden zusammengefassten Modelle bereits Eingang in die baurechtliche Entwicklung gefunden und werden vermehrt zur Unterstützung von Brandschutzkonzepten und -nachweisen eingesetzt. Aktuelle Programme verbinden Verbrennungsmodelle mit numerischer Strömungsmechanik und eignen sich so für die flexible Bearbeitung unterschiedlichster Fragestellungen.

Die Brandsimulationen werden insbesondere zur Berechnung der Wärme- und Rauchausbreitung in Folge eines vorgegebenen Bemessungsbrands eingesetzt. Darüber hinaus bieten erste Programme die Möglichkeit, Untermodelle zur Beschreibung des Feststoffabbrands bzw. der Pyrolyse von Brandlasten einzufügen. In der Polymerwissenschaft stellt die Untersuchung und Optimierung des Brandverhaltens einschließlich der Pyrolyse eine wichtige Disziplin dar. Aufgrund des Brandrisikos wird die Verwendung polymerer Werkstoffe häufig beeinträchtigt. Die Entwicklung flammgeschützter Materialien hat daher eine große Bedeutung und es existieren detaillierte Methoden zur Charakterisierung brandrelevanter Materialeigenschaften.

Die vorliegende Arbeit zielte vor diesem Hintergrund darauf ab, die Potentiale und Herausforderungen der komplementären Nutzung von Brandsimulation und Polymerwissenschaft zu untersuchen. Die Untersuchungen fanden im Rahmen von vier ausgewählten Brandszenarien statt, die sowohl die im Brandingenieurwesen (dm^3 , m^3 , dam^3 und größer) als auch in der Polymerwissenschaft (dm^3 , cm^3 und kleiner) betrachteten Größenskalen umfassen: der Brand in einem Einfamilienhaus in der Dimension Kubikdekameter (dam^3), der SBI Test in der Dimension Kubikmeter (m^3), der Cone Kalorimeter Test in der Dimension Kubikdezimeter (dm^3) und der UL 94 Test in der Dimension Kubikzentimeter (cm^3). Die Brandszenarien wurden zunächst ausführlich charakterisiert, ein jeweils passendes Simulationsmodell erstellt, die Berechnungsergebnisse mit den realen Ausprägungen verglichen und schließlich die Simulationen unterstützt durch eine Parameterstudie bewertet.

Das Brandszenario Einfamilienhaus basierte auf einem Brandfall, in dessen Folge ein Einfamilienhaus komplett ausbrannte. In den Brandursachenermittlungen und vor Gericht blieb lange strittig, ob der sehr schnelle und abwärtsgerichtete Brandverlauf durch einen Unfall im Obergeschoss oder aufgrund von zusätzlicher Brandstiftung verursacht wurde. Aufbauend auf den vorliegenden Gutachten wurden Brandsimulation und Polymerwissenschaft komplementär genutzt, um einen möglichen Brandverlauf im Einfamilienhaus zu berechnen und vor dem Hintergrund der Ermittlungen zum Brandfall zu diskutieren.

Die Charakteristika des Brandfalls u.a. hinsichtlich Geometrie, Ventilationsbedingungen und Art und Verteilung der Brandlasten wurden in Anlehnung an Begebenheiten im Einfamilienhaus vorgegeben. Die Hauptbrandlasten wurden in der Simulation mit FDS vereinfachend in Holz und Kunststoff unterteilt und die zugehörigen Eingabeparameter anhand von polymerwissenschaftlichen Brandversuchen validiert. Im Simulationsergebnis breitete sich der Brand selbständig vom Obergeschoss auf das gesamte Haus aus. Dieses Szenario der Brandausbreitung ohne Brandstiftung entspricht der letztlich zu diesem Brandfall gefällten Entscheidung des Gerichts. Darüber hinaus stimmten die Zeiten der Brand-

8 Zusammenfassung

ausbreitung in der Simulation mit den Anhaltspunkten des Brandverlaufs aus den Brandursachenermittlungen überein. Die Parametervariation verdeutlichte, dass der abwärtsgerichtete Brandverlauf in der Simulation durch zusätzliche Ventilation (offene Haustür) und vermehrte Brandlasten im Treppenhaus unterstützt wird. Dagegen war die Gesamtmenge der Brandlast nicht alleine entscheidend für die Brandausbreitung, sondern es kam auf den zeitlichen Verlauf der Wärmefreisetzung der Brandlasten in Verbindung mit den Ventilationsbedingungen an.

Das Brandszenario SBI Test entspricht einem Brandszenario mittlerer Größe und berücksichtigt die horizontale und vertikale Brandausbreitung senkrecht über Eck aufgestellter Proben infolge des Wärmeeintrages einer Diffusionsflamme. Die Untersuchungen zu diesem Brandszenario konzentrierten sich auf die Simulation mit dem Programm FDS und den Vergleich mit experimentellen Daten hinsichtlich des konkreten Brandverhaltens eines Werkstoffs unter kontrollierten Umgebungsbedingungen im SBI Test. Zielgröße der Berechnungen war die Wärmefreisetzungsrates einer Probe aus Polyurethan/Polyisocyanat Hartschaum.

Die thermischen Randbedingungen der Probekörper in Folge der Brennerflamme von Simulation und Experiment wurden abgeglichen. Die Pyrolyseeigenschaften der Probe wurden u.a. in der TGA unter Luft und unter Stickstoff Atmosphäre analysiert und im Rahmen weiterer Brandversuche validiert. Die Berechnungsergebnisse zeigten sowohl hinsichtlich der Wärmefreisetzungsrates als auch der optischen Darstellung der Flammenhöhe eine sehr gute Übereinstimmung mit den Experimenten. Eine Reduzierung der gewählten Gitterweite veränderte das Ergebnis unwesentlich und belegte die Unabhängigkeit des Berechnungsergebnisses von der Gitterweite. Die Parametervariation stellte den großen Einfluss der Eingabeparameter, insbesondere der Wärmekapazität, des Absorptionskoeffizienten und der Zersetzungsenthalpie der Probe, heraus und unterstrich damit die Qualität der verwendeten Eingabeparameter.

Der Cone Kalorimeter Test wird sowohl in der Zulassung von Werkstoffen als auch vermehrt in der Forschung und Entwicklung flammgeschützter Polymere eingesetzt und stellt eine wichtige Verbindung zwischen Brandingenieurwesen und Polymerwissenschaft dar. Zur Kalibrierung des Versuchsaufbaus gehört u.a die exakte Bestimmung der thermischen Randbedingung der Probe. Im Rahmen dieses annähernd eindimensionalen Brandszenarios wurden die Pyrolysemodelle FDS und ThermaKin hinsichtlich ihres Potentials untersucht, um die Massenverlustrate polymerer Werkstoffe unter definierten Bedingungen vorherzusagen, d.h. ausgehend von den physikalisch-chemischen Materialeigenschaften zu berechnen.

Für die Untersuchungen wurden die beiden Materialien PBT und PBT-GF ausgewählt. PBT verbrennt nahezu vollständig, während PBT-GF Rückstand hinterlässt. Betrachtet wurden ferner die Versuchsbedingungen unter Stickstoff Atmosphäre sowie unter Luft bei unterschiedlichen Bestrahlungsstärken zwischen 35 kW/m^2 und 70 kW/m^2 . Die Materialien wurden umfassend charakterisiert, um die entsprechenden Eingabeparameter zu generieren. Zusätzlich wurden die thermischen Randbedingungen der brennenden Proben während des Cone Kalorimeter Test bestimmt. Der Vergleich von Simulation und Experiment zeigte, dass die Programme FDS und ThermaKin nahezu identische Ergebnisse liefern und die Massenverlustrate von PBT unter verschiedenen Umgebungsbedingungen und Be-

strahlungsstärken in sehr guter Übereinstimmung mit dem Experiment vorhersagen. Hinsichtlich der Rückstand bildenden PBT-GF Proben waren Unterschiede erkennbar, die darauf zurückzuführen sind, dass die thermischen Einflüsse der Flammenbildung auf das Brandszenario unter Luft mit dem gewählten Berechnungsansatz nicht vollständig reproduziert wurden. Doch auch hier wurde der grundsätzliche Unterschied zwischen PBT und PBT-GF in den Berechnungen widergegeben. Auch die berechnete Massenverlustrate von PBT-GF unter Stickstoff Atmosphäre stimmte mit den experimentellen Daten überein. Die Parameterstudie belegte, dass die unterschiedlichen Ausprägungen der Materialien bezüglich der Rückstandsbildung zu unterschiedlichen Einflüssen der Eingabeparameter auf die charakteristischen Größen der Massenverlustrate führen.

Der UL 94 Test ist ein weit verbreiteter Versuch zur Klassifizierung von Materialien hinsichtlich ihrer Entflammbarkeit. Im Rahmen der UL 94 Klassifizierung wird das komplexe Brandverhalten inklusive Pyrolyse, Gasphasenverbrennung und Fließen/ Tropfen bewertet. Die Untersuchungen zum kleinsten Brandszenario zielten darauf ab, mittels eines neuen Modellierungsansatzes erstmals das Brandverhalten von Polymeren im vertikalen UL 94 Test unter Berücksichtigung des Zusammenspiels von Pyrolyse, Verbrennung und Tropfverhalten zu simulieren.

Die untersuchten Materialien bestanden aus vier PC/ABS Blends mit und ohne dem Flammschutzmittel BDP und dem Additiv PTFE. Zur Untersuchung des Tropfverhaltens und Bestimmung der Eingabeparameter der Simulation wurden insbesondere die rheologischen Eigenschaften der Materialien analysiert. Die Berechnungen basierten auf dem Programm PFEM. Zusätzlich zu den bereits vorhandenen Untermodellen der Beschreibung von großen Deformationen unter Berücksichtigung der freien Oberflächen, der Pyrolyse und der Änderung der Viskosität mit der Temperatur wurde im Rahmen der Arbeit ein Untermodell implementiert, das die Wärmerückkopplung der Verbrennung der Pyrolysegase auf die Probe abbildet. Der Vergleich von Simulation und Experiment zeigte, dass PFEM in der Lage ist, das Tropfverhalten der vier Materialien, das komplexe Zusammenspiel von Pyrolyse, Verbrennung und Tropfverhalten im vertikalen UL 94 Test und auch die entsprechende Klassifizierung sowie die Zeiten des Abtropfens und Verlöschens der Proben in Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen des vertikalen UL 94 Tests wiederzugeben.

Die Untersuchungen zu den vier Brandszenarien haben gezeigt, dass durch die komplementäre Nutzung von Brandsimulation und Polymerwissenschaft belastbare numerische Berechnungen erarbeitet werden können. Grundlage für die Ergebnisse waren stets die detaillierte Charakterisierung der brandrelevanten Eigenschaften der Werkstoffe und die Qualität der Eingabeparameter. Anhand der Beispiele wurden Wege zur Optimierung und Erweiterung der Anwendungsbereiche von Brandsimulationen durch die gezielte Nutzung polymerwissenschaftlicher Kenntnisse und Methoden aufgezeigt. Die Untersuchungen zum Brandszenario Einfamilienhaus zeigten die realistische Berechnung eines Brandverlaufes in einer komplexen Geometrie und mit unterschiedlichen Brandlasten. Die Ergebnisse verdeutlichten die Eignung von Brandsimulationen zur Abschätzung eines möglichen Brandverlaufes sowie zugehöriger Einflussgrößen im Rahmen der Brandursachenermittlung. Die Übereinstimmung der simulierten und experimentellen Wärmefreisetzungsraten im SBI Test stellte das Potential zur Berechnung des Brandverhaltens von Werkstoffen in mittelgroßen und großen Brandversuchen heraus.

8 Zusammenfassung

Gleichzeitig wiesen insbesondere die Brandszenarien Cone Kalorimeter und UL 94 Test auf den wertvollen Beitrag von Brandsimulationen für die Polymerwissenschaft hin. Im Brandszenario Cone Kalorimeter Test wurde die Massenfreisetzungsrates von Werkstoffen mit und ohne Rückstandsbildung und unter variierenden Umgebungsbedingungen in überzeugender Übereinstimmung mit den Experimenten berechnet. Im Brandszenario UL 94 Test wurde darüber hinaus das komplexe Zusammenspiel von Pyrolyse, Verbrennung und Tropfverhalten erstmals quantitativ bestimmt. Im Rahmen der gezeigten Parametervariationen wurden aufbauend auf einem validierten Simulationsmodell zusätzliche Erkenntnisse über die Struktur-Eigenschaftsbeziehungen von Polymeren hinsichtlich des Brandverhaltens im jeweiligen Brandszenario gewonnen. Darauf aufbauend können Brandsimulationen die polymerwissenschaftliche Materialentwicklung unterstützen und zur Entwicklung flammgeschützter Werkstoffe gezielt beitragen.

Die Herausforderungen der komplementären Nutzung von Brandsimulation und Polymerwissenschaft liegen derzeit in erster Linie in der stetigen Verbesserung der Qualität der Eingabeparameter. Während hinsichtlich der Zielgrößen Brandverlauf oder großflächige Wärmefreisetzungsrates gemittelte Materialeigenschaften zu Simulationsergebnissen mit ausreichender Qualität führen können, ist insbesondere bei kleineren Szenarien und den Zielgrößen lokale Massenverlustrate oder Tropfverhalten die Bestimmung der Eingabeparameter in Abhängigkeit von der Temperatur gefragt. Gerade mit Blick auf die Eigenschaftsprofile von Rückständen, hinsichtlich Absorption und Wärmeübertragung von Strahlung und bei hohen Temperaturen sind umfassendere Daten erforderlich. Auch die genauere Bestimmung der thermischen Randbedingungen einer Probe wie beispielsweise im UL 94 Test werden zur Optimierung zukünftiger Brandsimulationen entscheidend beitragen. Erst mit steigender Qualität der Eingabeparameter und damit verbunden belastbaren Berechnungsergebnissen wird der Nutzen von Brandsimulationen für die Polymerwissenschaft nachhaltig verbessert und gefestigt.

Literaturverzeichnis

1. Hosser D. Leitfaden Ingenieurmethoden des Brandschutzes. Technischer Bericht vfdb TB 04-01, 2. Auflage, Braunschweig 2009.
2. VDI 6019 Blatt 1: Ingenieurverfahren zur Bemessung der Rauchableitung aus Gebäuden - Brandverläufe, Überprüfung der Wirksamkeit. VDI, Düsseldorf 2006.
3. VDI 6019 Blatt 2: Ingenieurverfahren zur Bemessung der Rauchableitung aus Gebäuden - Ingenieurmethoden. VDI, Düsseldorf 2009.
4. Hosser D, Richter E. Konstruktiver Brandschutz im Übergang von DIN 4102 zu den Eurocodes. In: Bergmeister K, Fingerloos F, Wörner JD (Hrsg.), Betonkalender 2009. Ernst&Sohn, Berlin 2009, S. 499-553.
5. Schneider U, Kersken-Bradley M, Kirchberger H. Brandschutz im Industriebau. In: Fouad NA (Hrsg.), Bauphysik Kalender 2011. Ernst&Sohn, Berlin 2011, S. 213-270.
6. DIN EN 1991-1-2. Eurocode 1: Einwirkungen auf Tragwerke - Teil 1-2: Allgemeine Einwirkungen - Brandeinwirkungen auf Tragwerke.
7. Di Blasi C. Modeling and simulation of combustion processes of charring and non-charring solid fuels. Progress in Energy and Combustion Science 19 (1993), S. 71-104.
8. ISO 13943. Fire safety - Vocabulary.
9. Emmons HW. Heat transfer in fire. Journal of Heat Transfer 95 (1973), S. 145-151.
10. Löhmer S. Risikominimierung durch Brand- und Explosionsschutz. vdf Hochschulverlag, Zürich 1995.
11. Scharfel B. Uses of Fire Tests in Materials Flammability Development. In: Wilkie CA, Morgan AB (Hrsg.), Fire Retardancy of Polymeric Materials. 2nd edition, CRC Press, Boca Raton 2010.
12. Hofmann A, Knaust C, Aschenbrenner D. Hazards of Fires in Children's Rooms - Experimental and Numerical Investigation of Different Scenarios. In: Proceedings 5th International Seminar on Fire and Explosion Hazards ISFEH, Edinburgh 2007, S. 349-360.
13. Hofmann A. Brandgefahr im Kinderzimmer - Numerische und experimentelle Untersuchung von verschiedenen Szenarien. In: Hosser D (Hrsg.), Braunschweiger Brandschutz-Tage 2007. Braunschweig 2007, S. 63-72.
14. Troitzsch J. Plastics Flammability Handbook. Carl Hanser Verlag, München 2004.
15. Scharfel B, Hull TR. Development of fire-retarded materials - Interpretation of cone calorimeter data. Fire and Materials 31 (2007), S. 327-354.
16. Fouad NA (Hrsg.), Bauphysik-Kalender 2011. Ernst&Sohn, Berlin 2011.
17. Lyon RE. Heat Release Kinetics. Fire and Materials 24 (2000), S. 179-186.
18. Lyon RE. Solid-State Thermochemistry of Flaming Combustion. In: Fire Retardancy of Polymeric Materials. Wilkie CA, Grand AF (Hrsg.), Marcel Dekker Inc., New York 2000, S. 391-447.
19. Lyon RE, Janssens ML. Polymer Flammability. Federal Aviation Administration, Technical Report DOT/FAA/AR-05/14, Washington 2005.

20. Lyon RE, Janssens ML. Polymer Flammability. Encyclopedia of Polymer Science and Engineering (on-line edition), Wiley & Sons, New York 2005.
21. Bourbigot S, Le Bras M. Flame retardants. In: Troitzsch J (Hrsg), *Plastics Flammability Handbook*. Hanser Verlag, München 2004, S. 133-157.
22. Zukoski EE, Cetegen BM, Kubota T. Visible structure of buoyant diffusion flames. In: Proc. 20th Int. Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh 1985, S 361-366.
23. Heskestad D. Peak gas velocities and flame heights of buoyancy-controlled turbulent diffusion flames. In: Proc. 18th Int. Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh 1981, S. 951-960.
24. McCaffrey BJ. Purely buoyant diffusion flames: some experimental results. Technical Report NBSIR 79-1910, National Bureau of Standards, Washington 1979.
25. Max U. Zur Berechnung der Ausbreitung von Feuer und Rauch in komplexen Gebäuden, Dissertation, Universität Kassel, 1990.
26. Jones WW, Peacock RD, Forney GP, Reneke PA. CFAST - Consolidated Model of Fire Growth and Smoke Transport. Technical Reference Guide. NIST Special Publication 1026, Washington 2009.
27. Oertel H, Laurien E. Numerische Strömungsmechanik. 2. Auflage, Vieweg Verlag, Braunschweig/München 2003.
28. Tannehaill JC, Anderson DA, Pletcher RH. Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer. 2nd edition, Taylor & Francis, Washington 1997.
29. Lecheler S. Numerische Strömungsberechnung. Vieweg+Teubner, Wiesbaden 2009.
30. Knaust C. Modellierung von Brandszenarien in Gebäuden. Dissertation, Technische Universität Wien, Wien 2009.
31. Pope SB. Turbulent Flows. Cambridge University Press, Cambridge 2000.
32. Pope SB. Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows. *New Journal of Physics* 6 (2004), S. 1-24.
33. Joos F. Technische Verbrennung. Springer Verlag, Berlin 2006.
34. Peters N. Turbulent Combustion. Cambridge University Press, Cambridge 2004.
35. Warnatz J, Maas U, Dibble RW. Combustion. 4th edition, Springer Verlag, Berlin 2006.
36. Gerlinger P. Numerische Verbrennungssimulation. Springer Verlag, Berlin 2005.
37. Spalding DB. Development of the eddy-break-up model of turbulent combustion. In: Proc. 16th Int. Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh 1976, S. 1657-1663.
38. Magnussen BF. On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion. In: Proc. 16th Int. Symposium on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh 1976, S. 719-729
39. Knaust C. Analytische Lösungen von Rechenmodellen als Voraussetzung zur Überprüfung der Güte der in Rechenprogrammen angewendeten Strahlungsmodelle. *Bauphysik* 27 (2005), S. 158-167.

40. Lienhard JH, Lienhard JH. A Heat Transfer Textbook. 3rd edition, Phlogiston Press, Cambridge 2001.
41. Tewarson A, Pion RF. Flammability of Plastics - 1. Burning Intensity. Combustion and Flame 26 (1976), S. 85-103.
42. Quintiere JG. A simulation model for fire growth on materials subject to a room-corner test. Fire Safety Journal 20 (1993), S. 313-339.
43. Di Blasi C. The state of the art of transport models for charring solid degradation. Polymer International 49 (2000), S. 1133-1146.
44. Stoliarov SI, Safronava N, Lyon RE. The effect of variation in polymer properties on the rate of burning. Fire and Materials 33 (2009). S. 257-271.
45. Tsilingiris PT. Comparative evaluation of the infrared transmission of polymer films. Energy Conversion and Management 14 (1974), S. 717-723.
46. Andersen CE, Ketchum DE, Mountain WP. Thermal Conductivity of Intumescent Chars. Journal of Fire Sciences 6 (1988), S. 390-410
47. Staggs JEJ. Thermal Conductivity estimates of intumescent chars by direct numerical simulation. Fire Safety Journal 45 (2010), S. 228-237.
48. McGrattan KB, Hostikka S, Floyd J, Baum H,Rehm R, Mell W, McDermott R. Fire Dynamics Simulator (Version 5) Technical Reference Guide - Mathematical Model. NIST Special Publication 1018-5, Washington 2009.
49. Stoliarov SI, Lyon RE. Thermo Kinetic Model of Burning. Federal Aviation Administration, Technical Note DOT/FAA/AR-TN08/17, Washington 2009.
50. Lautenberger C, Fernandez-Pello AC. Generalized Pyrolysis Model for Combustible Solids. Fire Safety Journal 44 (2009), S.819-839.
51. Open Foam User Guide. Open Foam Foundation, www.openfoam.com, 2012.
52. Stoliarov SI, Walters RN. Determination of the heats of gasification of polymers using differential scanning calorimetry. Polymer Degradation and Stability 93 (2008), S. 422-427.
53. Mezger TG. Das Rheologie Handbuch. 2. Auflage, Vincentz Network, Hannover 2006.
54. DIN 52612-2. Wärmeschutztechnische Prüfungen; Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit mit dem Plattengerät.
55. DIN EN ISO 22007-2. Kunststoffe - Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit und der Temperaturleitfähigkeit - Teil 2: Transientes Flächenquellverfahren (Hot Disk Verfahren).
56. Marcus SM, Blaine RL. Thermal conductivity of polymers, glasses and ceramics by modulated DSC. Thermochemica Acta 243 (1994), S. 231-239.
57. DIN EN ISO 22007-4. Kunststoffe - Bestimmung der Wärmeleitfähigkeit und der Temperaturleitfähigkeit - Teil 4: Laserblitzverfahren.
58. Menges G, Haberstroh E, Michaeli W, Schmachtenberg E. Werkstoffkunde Kunststoffe. 5. Auflage, Hanser Verlag, München 2002.
59. Lobo H, Cohen C. Measurement of thermal conductivity of polymer melts by the line source method. Polymer Engineering and Science 30 (1990), S. 65-70.
60. Stoliarov SI, Crowley S, Lyon RE, Linteris GT. Prediction of the burning rates of non-charring polymers. Combustion and Flame 156 (2009), S. 1068-1083.

61. Linteris GT, Zammarano M, Wilthan B, Hanssen L. Absorption and reflection of infra-red radiation by polymers in fire like environments. *Fire and Materials*, doi: 10.1002/fam.1113 .
62. Manohar SS, Kulkarni AK, Thynell ST. In-depth absorption of externally incident radiation on nongray media. *Journal of Heat Transfer-Transactions of Asme* 117 (1995), S. 146-151.
63. DIN EN 13823. Prüfungen zum Brandverhalten von Bauprodukten - Thermische Beanspruchung durch einen einzelnen brennenden Gegenstand für Bauprodukte mit Ausnahme von Bodenbelägen.
64. Hofmann A. Modellierung des Single Burning Item Tests. *Bauphysik* 26 (2004), S. 246-251.
65. Babrauskas V. Development of the Cone Calorimeter - A bench scale heat release rate apparatus based on oxygen consumption. *Fire and Materials* 8 (1984), S. 81-95.
66. Babrauskas V. The Cone Calorimeter. In: National Fire Protection Association (Hrsg.), *The SFPE Handbook of Fire Protection Engineering*, 3rd edition, Quincy 2002, S. 3-63 - 3-81.
67. ISO 5660 Part 1-3. Reaction-to-fire tests - Heat release, smoke production and mass loss rate.
68. Austin PJ, Buch RR, Kashiwagi T. Gasification of Silicone Fluids Under External Thermal Radiation. NIST Interagency Report NISTIR 6041, Springfield 1997.
69. Austin PJ, Buch RR, Kashiwagi T. Gasification of silicone fluids under external thermal radiation - Part 1: Gasification rate and global heat of gasification. *Fire and Materials* 22 (1998), S. 221-237.
70. DIN EN 60695-11-10. Prüfungen zur Beurteilung der Brandgefahr - Teil 11-10: Prüf-flammen - Prüfverfahren mit 50-W-Prüfflamme horizontal und vertical.
71. McGrattan KB, Hostikka S, Floyd J. *Fire Dynamics Simulator (Version 5) User's Guide*. NIST Special Publication 1019-5, Washington 2009.
72. Forney G. *Smokeyview (Version 6) - A Tool for Visualizing Fire Dynamics Simulator Data - Volume 1: User's Guide*. NIST Special Publication 1017-1, Washington 2009.
73. Forney G. *Smokeyview (Version 6) - A Tool for Visualizing Fire Dynamics Simulator Data - Volume 2: Technical Reference Guide*. NIST Special Publication 1017-2, Washington 2009.
74. Rehm RG, Baum HR. The Equations of Motion for Thermally Driven, Buoyant Flows. *Journal of Research of the NBS* 83 (1978), S. 297-308.
75. Gann RG. Final Report on the Collapse of World Trade Center Building 7, Federal Building and Fire Safety Investigation of the World Trade Center Disaster (NIST NCSTAR 1A). Washington 2008.
76. Bryner N, Madrzykowski D, Grosshandler W. Reconstructing the station nightclub fire - Computer modeling of the fire growth and spread. Report of the technical investigation of The Station nightclub fire (NIST NCSTAR 2). Washington 2005.
77. Barowy A, Madrzykowski D. Simulation of the dynamics of a wind-driven fire in a ranch-style house - Texas. NIST Technical Note 1729, Washington 2012.
78. Rein G, Torero JL, Jahn W, Stern-Gottfried J, Ryder NL, Desanghere S, Lazaro M, Mowrer F, Coles A, Joyeux D, Alvear D, Capote JA, Jowsey A, Abecassis-Empis C,

- Reszka P. Round-robin study of a priori modeling predictions of the Dalmarnock Fire Test One. *Fire Safety Journal* 44 (2009), S. 590-602.
79. Stoliarov SI, Crowley S, Walters RN, Lyon RE. Prediction of the burning rates of charring polymers. *Combustion and Flame* 157 (2010), S. 2024-2034.
80. Linteris G. Numerical Simulations of polymer pyrolysis rate: Effect of property variations. *Fire and Materials* 35 (2011), S. 463-480.
81. Patel P, Hull R, Stec AA, Lyon RE. Influence of physical properties on polymer flammability in the cone calorimeter. *Polymers for Advanced Technologies* 22 (2011), S. 1100-1107.
82. Oñate E, Idelsohn SR, Del Pin F, Aubry R. The particle finite element method. An overview. *International Journal of Computational Methods* 1 (2004), S. 267-307.
83. Butler KM, Ohlemiller TJ, Linteris GT. A Progress Report on Numerical Modeling of Experimental Polymer Melt Flow Behavior. In: *Interflam 2004*. Interscience Communications, London 2004, S. 937-948.
84. Butler KM, Oñate E, Idelsohn SR, Rossi R. Modeling polymer melt flow using the Particle Finite Element Method. In: *Interflam 2007 Volume 2*. Interscience Communications, London 2007, S. 929-940.
85. Oñate E, Rossi R, Idelsohn SR, Butler KM. Melting and spread of polymers in fire with the particle finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 81 (2009), S. 1046-1072.
86. Idelsohn SR, Oñate E, Del Pin F. A lagrangian meshless finite element method applied to fluid-structure interaction problems. *Computers and Structures* 81 (2003), S. 655-671.
87. Idelsohn SR, Oñate E, Calvo N, Del Pin F. The meshless finite element method. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 58 (2003), S. 893-912.
88. Idelsohn SR, Oñate E, Del Pin F. The particle finite element method: a powerful tool to solve incompressible flows with free-surfaces and breaking waves. *International Journal for Numerical Methods in Engineering* 61 (2004), S. 964-989.
89. Oñate E, Idelsohn SR, Celigueta MA, Rossi R. Advances in the particle finite element method for the analysis of fluid-multibody interaction and bed erosion in free surface flows. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197 (2008), S. 1777-1800.
90. Idelsohn SR, Marti J, Limache A, Oñate E. Unified Lagrangian formulation for elastic solids and incompressible fluids: Application to fluid-structure interaction problems via the PFEM. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering* 197 (2008), S. 1762-1776.
91. Idelsohn SR, Marti J, Souto-Iglesias A, Oñate E. Interaction between an elastic structure and free-surface flows: experimental versus numerical comparisons using the PFEM. *Computational Mechanics* 41 (2008), S. 125-132.
92. Allin K. Gutachterliche Stellungnahme LKA. Berlin 2006
93. Burrasch E. LKA Bericht zum Brand. Berlin 2003
94. Pirsch. LKA Untersuchungsbericht. Berlin 2003
95. Hupfeld J. Gutachten zur Brandursache - Stellungnahme zu den Gutachten Burrasch, Pirsch, Allin, Richter, Rabes, Creydt. Preetz 2004.

96. Rabes P, Creydt HG. Gutachten zur Entstehungsursache des Brandschadens. Berlin 2004.
97. Richter M. Gutachterliche Stellungnahme. Nr. 2004-115. Bremen 2004.
98. Wirts HD. Gutachterliche Stellungnahme zum Nachweis von Brandbeschleunigern auf Basis von Spiritus durch LKA. Hannover 2006.
99. Engewald W. Stellungnahme zur Brandsache Spiritus. Leipzig 2004.
100. Löffler S. Behördengutachten gemäß §256 StPO. Wiesbaden 2007.
101. Pann U, Krause U. Gutachterliche Stellungnahme zur Methodik der Brandursachenermittlung zum Brand. Berlin 2009.
102. Pakkala L. Ignitability of beds and bedding. VTT Research Report 247. Espoo 1984.
103. Babrauskas V, Krasny JF. Upholstered furniture transition from smoldering to flaming. *Journal of Forensic Sciences* 11 (1997), S. 1029-1031.
104. Babrauskas V. Ignition Handbook. Fire Science Publishers, Issaquah 2003.
105. Hirschler MM. Use of heat release rate to predict whether individual furnishings would cause self propagating fires. *Fire Safety Journal* 32 (1999), S. 273-296.
106. Matala A, Hostikka S, Mangs J. Estimation of pyrolysis model parameters for solid materials using thermogravimetric data. *Fire Safety Science* 9 (2009), S. 1213-1223.
107. Matala A. Estimation of solid phase reaction parameters for fire simulation. Master's Thesis, Helsinki University of Technology, Espoo 2008.
108. Prasad K, Krämer R, Marsh N, Nyden MR. Numerical simulation of fire spread on polyurethane foam slabs. *Proceedings of the 11th Int. Conference of Fire and Materials 2009*, Interscience Communications, London 2009, S. 697-708.
109. Bundesministerium für Verkehr, Bau- und Wohnungswesen. Brandschutzleitfaden für Gebäude besonderer Art und Nutzung. Bonn 1998.
110. Kempel F, Hofmann A, Schartel B, Krause U. Investigations on a real fire case with downward fire spread in a family home. In: *Proceedings of the 11th International Symposium on Fire Protection*, vfdB, Leipzig 2010.
111. Levchik SV, Weil ED. Thermal decomposition, combustion and fire-retardancy of polyurethanes - a review of recent literature. *Polymer International* 53 (2004), S. 1585-1610.
112. Torero JL, Fernandez-Pello AC, Kitano M. Opposed Forced Flow Smoldering of Polyurethane Foam. *Combustion Science and Technology* 91 (1993), S. 95-117.
113. Ohlemiller TJ. Smoldering Combustion. In: *National Fire Protection Association (Hrsg.), The SFPE Handbook of Fire Protection Engineering*, 3rd edition, Quincy 2002, S. 2-200 - 2-210.
114. ISO 9705. Fire tests; full-scale room tests for surface products.
115. DIN 4102-15. Brandverhalten von Baustoffen und Bauteilen; Brandschacht.
116. Gomez-Mares M, Munoz M, Casal J. Radiant heat from propane jet fires. *Experimental Thermal and Fluid Science* 34 (2010), S. 323-329.
117. Markstein GH. Radiative energy transfer from turbulent diffusion flames. Technical Report 22361-2, Factory Mutual Research 1975.

118. Tewarson A. Generation of heat and chemical compounds in fire. In: National Fire Protection Association (Hrsg.), The SFPE Handbook of Fire Protection Engineering, 3rd edition, Quincy 2002, S. 3-82 - 3-161.
119. Blanc C, Rumbau V. EGOLF - SBI thermal attack measurements Round Robin 2. Report 27 ENF 6704/ CEMATE/1.
120. van Mierlo R, Sette B. The Single Burning Item (SBI) test method - a decade of development and plans for near future. Heron 4 (2005), S. 191-207.
121. Axelsson J, Andersson P, Lönnemark A, Van Hees P, Wetterlund I. Uncertainties in measuring heat and smoke release rates in the Room/Corner Test and the SBI. Nordtest Technical Report 477, SP Report 2001:04, Borås 2001.
122. Hakkarainen T. Rate of heat release and ignitability indices in predicting SBI test results. Journal of Fire Sciences 19 (2001), S. 284-305.
123. Hakkarainen T, Kokkala MA. Application of a one-dimensional thermal flame spread model on predicting the rate of heat release in the SBI test. Fire and Materials 25 (2001), S. 61-70.
124. Messerschmidt B, Van Hees P, Wickström U. Prediction of SBI (Single burning item) test results by means of Cone Calorimeter Test results. In: Interflam proceedings 1999, Interscience communications, London 1999, S. 11-22.
125. Wickström U, Göransson U. Full-Scale/Bench-Scale Correlations of Wall and Ceiling linings. Journal of Fire and Materials 16 (1992), S. 15-22.
126. North G, Karlsson B, Gojkovic D, Van Hees P. Simple analytical and numerical techniques for modeling flame spread on solids. Lund University Report 7014, Lund 2001.
127. Zhang J, Delichatsios M, Colobert M. Assessment of Fire Dynamics Simulator for heat flux and flame heights predictions from fires in SBI tests. Fire Technology 46 (2010), S. 291-306.
128. Hofmann A. Modellierung eines Entstehungsbrands und die Anwendung auf den Single Burning Item Test. Dissertation, Technische Universität Berlin, Berlin 2002.
129. Rinne T, Mikkola E. Fire simulation studies for coated mineral wood products in different scales. VTT Technical Research, Espoo 2007.
130. Hietaniemi J, Hostikka S, Vari J. FDS simulation of fire spread - comparison of model results with experimental data. VTT working papers 4, Espoo 2004.
131. Hjøhlman M, Andersson P, Van Hees P. Flame spread modeling of complex textile materials. Fire Technology 47 (2011), S. 85-106.
132. Duquesne S, LeBras M, Bourbigot S, Delobel R, Camino G, Eling B, Lindsay C, Roels T. Thermal degradation of polyurethane and polyurethane/expandable graphite coatings. Polymer Degradation and Stability 74 (2001), S. 493-499.
133. Stock B, Wallasch K, Jäger G. Ingenieurmethoden nach Norm? FeuerTRUTZ Magazin 4 (2010), S. 38-41.
134. DSM Engineering Plastics, Product Datasheet, Arnite T06-200, Heerlen 2010, <<http://depmdac.dsm.com/dsm/matdb/matdb.php>>.
135. DSM Engineering Plastics, Product Datasheets, Arnite TV4-261, Heerlen 2010, <<http://depmdac.dsm.com/dsm/matdb/matdb.php>>.

136. Braun U, Schartel B. Flame Retardancy Mechanisms of Aluminium Phosphinate in Combination with Melamine Cyanurate in Glass-Fibre-Reinforced Poly(1,4-butylene terephthalate). *Macromolecular Materials and Engineering* 293 (2008), S. 206–217.
137. Braun U, Bahr H, Sturm H, Schartel B. Flame retardancy mechanisms of metal phosphinates and metal phosphinates in combination with melamine cyanurate in glass-fibre-reinforced poly(1,4-butylene terephthalate). *Polymers for Advanced Technologies* 19 (2008), S. 680–692.
138. Gallo E, Braun U, Schartel B, Russo P, Acierno D. Halogen-free flame retarded poly(butylene terephthalate) (PBT) using metal oxides/PBT nanocomposites in combination with aluminium phosphinate. *Polymer Degradation and Stability* 94 (2009), S. 1245–1253.
139. Zhao L. Bench Scale Apparatus Measurement Uncertainty and Uncertainty Effects on Measurement of Fire Characteristics of Material Systems. Master's Thesis, Worcester Polytechnic Institute, Worcester 2005.
140. Lukosius A, Vekteris V. Precision of Heat Release Rate Measurement Results. *Measurement Science Review (Section 3)* 3 (2003), S. 13-16.
141. Enright PA, Fleischmann CM. Uncertainty of heat release rate calculation of the ISO 5660-1 cone calorimeter standard test method. *Fire Technology* 35 (1999), S. 153–169.
142. Morgan AB, Bundy M. Cone Calorimeter analysis of UL-94 V-rated plastics. *Fire and Materials* 31 (2007), S. 257-283.
143. Babrauskas V. Ten years of heat release research with the cone calorimeter. In: Hasemi (Hrsg.), *Heat Release and Fire Hazard, Volume 1*, Building Research Institute, Tsukuba 1993, S. 3-1 - 3-8.
144. Vovelle C, Delfau JL, Reuillon M, Bransier M, Laraqui N. Experimental and Numerical Study of the Thermal Degradation of PMMA. *Combustion Science and Technology* 53 (1987), S. 187-201.
145. Steckler KD, Kashiwagi T, Baum HR, Kanemaru K. Analytical model for transient gasification of non-charring thermoplastic materials. In: Cox G, Landford B (Hrsg.), *Proceedings 3rd Int. Symposium on Fire Safety Science*, Elsevier, Oxford 1991, S. 895-904.
146. Hopkins D, Quintiere JG. Material Fire Properties and Predictions for Thermoplastics. *Fire Safety Journal* 26 (1996), S. 241-268.
147. Rhodes BT, Quintiere JG. Burning rate and flame heat flux for PMMA in a cone calorimeter. *Fire Safety Journal* 26 (1996), S. 221-240.
148. Linteris GT, Gewuerz L, McGrattan KB, Forney GP. Modeling Solid Sample Burning. In: *Proceedings 8th Int. Symposium on Fire Safety Science*, Elsevier, Beijing 2005, S. 625-636.
149. Staggs JEJ, Whiteley RH. Modelling the combustion of solid-phase fuels in cone calorimeter experiments. *Fire and Materials* 23 (1999), S. 63-69.
150. Staggs JEJ. Modelling thermal degradation of polymers using single-step first-order kinetics. *Fire Safety Journal* 32 (1999), S. 17-34.
151. Lautenberger C, Kim E, Dembsey N, Fernandez-Pello AC. The Role of Decomposition Kinetics in Pyrolysis Modeling - Application to a Fire Retardant Polyester Compo-

- site. Fire Safety Science In: B. Karlsson (Hrsg.), Proceedings 9th Int. Symposium on Fire Safety Science, IAFSS 2008, S. 1201-1212.
152. Wasan SR, Rauwoens P, Vierendeels J, Merci B. Application of a simple enthalpy-based pyrolysis model in numerical simulations of pyrolysis of charring materials. *Combustion and Flame* 157 (2010), S. 715-734.
 153. Weng WG, Fan WC. A pyrolysis model of charring materials considering the effect of ambient oxygen concentration. *Fire and Materials* 31 (2007), S. 463-475.
 154. Zhang J, Delichatsios M. Further Validation of a Numerical Model for Prediction of Polymer Nanocomposites in the Cone Calorimeter. *Fire Technology* 46 (2010), S. 307-319.
 155. Lautenberger C, Rein G, Fernandez-Pello C. The Application of a Genetic Algorithm to Estimate Material Properties for Fire Modeling from Bench-Scale Fire Test Data. *Fire Safety Journal* 41 (2006), S. 204-214.
 156. Rein G, Lautenberger C, Fernandez-Pello C., Torero JL, Urban DL. Application of Genetic Algorithms and Thermogravimetry to Determine the Kinetics of Polyurethane Foam in Smoldering Combustion. *Combustion and Flame* 146 (2006), S. 95-108.
 157. van Bennekom AC, Willemsen PA, Gaymanst RJ. Amide-modified poly(butylenterephthalate): thermal stability. *Polymer* 37 (1996), S. 5447-5459.
 158. Staggs JEJ. The heat of gasification of polymers. *Fire Safety Journal* 39 (2004), S. 711-720.
 159. Bräuer G. Large area glass coating. *Surface and Coatings Technology* 112 (1999), S. 358–365.
 160. SCHOTT 2004. TIE-31: Mechanical and Thermal Properties of Optical Glass. Technical Information – Advanced Optics, pp. 1–10.
 161. Zhang J, Shields TJ, Silcock GWH. Effect of Melting Behavior on Upward Flame Spread of Thermoplastics, *Fire and Materials* 21 (1997), S. 1-6.
 162. Zhang J, Shields TJ, Silcock GWH. Fire Hazard Assessment of Polypropylene Wall Linings Subjected to Small Ignition Sources. *Journal of Fire Sciences* 14 (1996), S. 67-84.
 163. Sherrat J, Drysdale D. The effect of the melt-flow process on the fire behaviour of thermoplastics. In: *Interflam 2001*, Interscience Communications, London, 2001; S. 149-159.
 164. Ohlemiller TJ, Butler KM. Influence of polymer melt behaviour on flammability. Proceedings of the 15th Joint Panel Meeting on Fire Research and Safety, UJNR, Volume 1, 2000, S. 81-88.
 165. Denecker C, Liggat JJ, Snape CE. Relationship between the thermal degradation chemistry and flammability of commercial flexible polyurethane foams. *Journal of Applied Polymer Science* 100 (2006), S. 3024-3033.
 166. Quintiere JG, Downey BP, Lyon RE. An investigation of the vertical Bunsen burner test for flammability of plastics. Report No. DOT/FAA/AR-TN11/19, US Department of Transport, Washington 2012.
 167. Downey BP. An Investigation of the UL-94V Plastics Flammability Test. Master's Thesis, University of Maryland, Ann Arbor 2009.

168. Patel P, Hull TR, Moffatt C. PEEK polymer flammability and the inadequacy of the UL-94 classification. *Fire and Materials* 36 (2012), S. 185-201.
169. Wang Y, Zhang F, Jiao C, Jin Y, Zhang J. Convective Heat Transfer of the Bunsen Flame in the UL 94 Vertical Burning Test for Polymers. *Journal of Fire Sciences* 28 (2010) S. 337-356.
170. Hamins A, Bundy M, Dillon SE. Characterization of Candle Flames. *Journal of Fire Protection Engineering* 15 (2005), S. 265-285.
171. Pawlowski KH, Schartel B. Flame retardancy mechanisms of triphenyl phosphate, resorcinolbis(diphenyl phosphate) and bisphenol A bis(diphenyl phosphate) in polycarbonate/ acrylonitrile–butadiene–styrene blends. *Polymer International* 56 (2007), S. 1404-1414.
172. Perret B, Pawlowski KH, Schartel B. Fire retardancy mechanisms of arylphosphates in polycarbonate(PC) and PC/acrylonitrile-butadiene-styrene: The key role of decomposition temperature. *Journal of Thermal Analysis and Calorimetry* 97 (2009), S. 949-958.
173. Wawrzyn E, Schartel B, Ciesielski M, Kretzschmar B, Braun U, M. Döring M. Are novel aryl phosphates competitors for bisphenol A bis(diphenyl phosphate) in halogen-free flame-retarded polycarbonate/acrylonitrile-butadiene-styrene blend? *European Polymer Journal* 48 (2012), S. 1561-1574.
174. Wang Y, Zhang F, Chen X, Jin Y, Zhang J. Burning and dripping behaviors of polymers under UL 94 vertical burning test conditions. *Fire and Materials* 34 (2010), S. 203-215.
175. Wang Y, Zhang J. Influences of specimen size and heating mode on the ignitability of polymeric materials in typical small scale fire test conditions. *Fire and Materials* 36 (2011), S. 231-240.
176. Wang Y, Zhang F, Jiao C, Jin Y, Zhang J. Convective Heat Transfer of the Bunsen Flame in the UL 94 Vertical Burning Test for Polymers. *Journal of Fire Sciences* 28 (2010), S. 337-356.
177. Wang Y, Zhang J, Jow J, Su K. Analysis and Modeling of Ignitability of Polymers in the UL-94 Vertical Burning Test Condition. *Journal of Fire Sciences* 27 (2009). S. 561-581.
178. Schartel B, Braun U. Comprehensive Fire Behaviour Assessment of Polymeric Materials Based on Cone Calorimeter Investigations. *e-Polymers* (2003), art. no. 13.
179. Bundy M, Ohlemiller TJ. Bench scale flammability measures for electronic equipment. NISTIR 7031, Washington 2003.
180. Lyon RE, Safronava N, Walters R, Stoliarov SI. A statistical model for the results of flammability tests. *Proceedings 11th Int. Conference of Fire and Materials, Interscience Communications, London 2009*, S. 141-153.
181. Kandola B, Price D, Milnes J, DaSilva A. Fire behaviour of melt dripping thermoplastics. 243rd Meeting of the American Chemical Society ACS, San Diego 2012.

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 2.1: Zeitlicher Temperaturverlauf und Phaseneinteilung eines Brands in einem Raum: Phase 1 Entzündung, Phase 2 Brandentstehung, Phase 3 Flash-over, Phase 4 Vollbrand, Phase 5 Abklingender Brand. [10, 11]	5
Abbildung 2.2: Schematische Übersicht der Hauptprozesse bei der Verbrennung von Polymeren [19, 20].	7
Abbildung 2.3: Charakteristika der Berechnungsmethoden turbulenter Strömungen im Überblick aus [30].	14
Abbildung 2.4: Zusammenhang zwischen Mischungsbruch und Massenbrüchen für ein einfache Reaktionssystem (Burke-Schumann-Diagramm) [33-35].	17
Abbildung 3.1: Skizzierter Versuchsaufbau des SBI Test (Quelle: MPA NRW).	26
Abbildung 3.2: Skizzierter Versuchsaufbau des Cone Kalorimeter Test [67].	27
Abbildung 3.3: Skizzierter Versuchsaufbau des Gasification Apparatus [68, 69].	28
Abbildung 3.4: Skizzierter Versuchsaufbau des vertikalen UL 94 Tests [70].	30
Abbildung 4.1: Skizze des Brandszenarios Einfamilienhaus.	35
Abbildung 4.2: Grundriss des Erdgeschosses mit Küche (K), Flur (F), Gästetoilette (WC), Essbereich (EB), Wohnzimmer (WZ) und Treppenaufgang (T _{EG}).	36
Abbildung 4.3: Grundriss des Obergeschosses mit Treppenaufgang (T _{OG}), Bad (B), Schlafzimmer 1 (SZ 1), Raum 1 (R 1), Schlafzimmer 2 (SZ 2) und Ankleideraum (R 2).	36
Abbildung 4.4: Außenansicht und Makrostruktur-Modell der berechneten Geometrie des Einfamilienhauses	39
Abbildung 4.5: Vorgegebene Wärmefreisetzungsrate HRR bzw. zugehörige Brennstofffreisetzungsrate MLR in FDS der Brandquelle "Matratze" in Schlafzimmer SZ 1.	40
Abbildung 4.6: Massenanteile der Gasphasenspezies in Abhängigkeit des Mischungsbruchs Z für die verwendete Verbrennungsreaktion "Polyurethan"	41
Abbildung 4.7: Reaktionsschema für Brandlasten der Gruppe Holz, mit den Bestandteilen A, B, C, dem Zwischenprodukt D und den Endprodukten E, F.	42
Abbildung 4.8: Wärmeleitfähigkeit der Komponenten A und D, E, G in Abhängigkeit der Temperatur.	43
Abbildung 4.9: Wärmefreisetzungsrate (4.9a) und Wärmefreisetzung (4.9b) im Cone Kalorimeter Test (Bestrahlungsstärke: 50 kW/m ²) von Polyurethan-Schaumstoff (Exp. PUR) und den zugehörigen Simulationen mit variierender Dichte (Sim_1 PUR: 60 kg/m ³ ; Sim_2 PUR: 100 kg/m ³).	44

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 4.10: Wärmefreisetzungsrate (4.10a) und Wärmefreisetzung (4.10b) im Cone Kalorimeter Test (Bestrahlungsstärke: 50 kW/m ²) von Holz (Exp. Holz) und der zugehörigen Simulation (Sim_1 Holz).....	44
Abbildung 4.11: Berechneter Brandverlauf des Brandszenarios Einfamilienhaus zwischen 0s und 536s dargestellt anhand von Isoflächen für Wärmefreisetzungsraten von mehr als 750 kW/m ³	47
Abbildung 4.12: Temperaturprofil in der Schnittebene durch die Hauseingangstür nach 480 s, 510 s und 540 s.....	48
Abbildung 4.13: Geschwindigkeitsprofil in der Schnittebene durch die Hauseingangstür nach 480 s, 510 s und 540 s.....	49
Abbildung 4.14: Sauerstoff-Volumenanteil in der Schnittebene durch das Treppenhaus nach 480 s, 510 s und 540 s.....	50
Abbildung 4.15: Brennstofffreisetzungsrate des gesamten Berechnungsgebiets in kg/s der Berechnungen Nr. 1 bis Nr. 6 (links) und vergrößerte Darstellung der Berechnungen Nr. 2 bis Nr. 4.....	54
Abbildung 4.16: Berechnete Wärmefreisetzungsrate (4.16a) und Wärmefreisetzung (4.16b) im Cone Kalorimeter Test (Bestrahlungsstärke: 50 kW/m ²) bei variierender Probendicke (Sim_1 Holz: 1 cm; Sim_2 Holz: 2 cm).....	54
Abbildung 4.17: Temperaturprofil der Berechnungen Nr. 1, Nr. 7 und Nr. 8 in der Schnittebene durch das Treppenhaus des Einfamilienhauses zum Zeitpunkt t = 390 s.	55
Abbildung 4.18: Temperaturprofil der Berechnungen Nr. 1, Nr. 7 und Nr. 8 in der Schnittebene durch das Treppenhaus des Einfamilienhauses zum Zeitpunkt t = 450 s	55
Abbildung 4.19: Temperaturprofil der Berechnungen Nr. 1, Nr. 7 und Nr. 8 in der Schnittebene durch das Treppenhaus des Einfamilienhauses zum Zeitpunkt t = 510 s	56
Abbildung 4.20: Brennstofffreisetzungsrate des gesamten Berechnungsgebiets in kg/s der Berechnungen Nr. 1 und Nr. 7 bis Nr. 10.....	57
Abbildung 5.1: Bild des SBI Probenwagens mit laufendem Brenner (links) und Nahaufnahme der Diffusionsflamme des Brenners (rechts).	60
Abbildung 5.2: Aufnahme mit der Infrarot Kamera der Kalzium-Silikat-Platten auf dem SBI Probenwagen kurz nach Verlöschen der Brennerflamme.....	61
Abbildung 5.3: Temperaturprofil in °C über dem SBI-Brenner etwa 1 cm vor der Kalzium-Silikat-Platte gemessen bei Volumenströmen im Abzug von 0,5 m ³ /s und 0,65 m ³ /s.....	62
Abbildung 5.4: Gemessene Temperaturen an den Messstellen Nr. 6 bis Nr. 10 (30 cm über der Probenunterkante) über der Zeit bei einem Volumenstrom von 0,65 m ³ /s.	63

Abbildung 5.5: PUR Hartschaum Proben vor (links), während (mitte) und am Ende (rechts) der Prüfung im SBI Test.	64
Abbildung 5.6: Wärmefreisetzungsdaten von drei SBI Prüfungen des Werkstoffs PUR.	65
Abbildung 5.7: Geometrie und Rechengitter der Simulationen des Brandszenarios SBI Test mit dem Programm FDS.	67
Abbildung 5.8: Verkleinerte Geometrie und Rechengitter der Simulationen des Brandszenarios SBI Test mit dem Programm FDS.....	67
Abbildung 5.9: Experimentelle TG- (5.9a) und DTG-Signale (5.9b) von PUR Proben unter Luft (O ₂) und unter Stickstoff-Atmosphäre (N ₂).	69
Abbildung 5.10: Experimentelle ("PUR, N ₂ ") und simulierte (Sim_N ₂) TG- (5.10a) und DTG-Signale (5.10b) von PUR unter Stickstoff-Atmosphäre.	71
Abbildung 5.11: Experimentelle ("PUR, O ₂ ") und simulierte (Sim_O ₂) TG- (5.11a) und DTG-Signale (5.11b) von PUR unter Luft.	71
Abbildung 5.12: Experimentelle Wärmefreisetzungsrate (5.12a) und Massenverlauf (5.12b) von je zwei Proben des Werkstoffs PUR im Cone Kalorimeter Test unter 50 kW/m ² und 70 kW/m ²	72
Abbildung 5.13: Berechnete Wärmefreisetzungsrate (5.13a) und Massenverlauf (5.13b) des Werkstoffs PUR im Brandszenario Cone Kalorimeter unter 50 kW/m ² und 70 kW/m ² mit den Zersetzungsparametern für Luft (Sim_O ₂) und für Stickstoff Atmosphäre (Sim_N ₂).	73
Abbildung 5.14: Berechnete Wärmefreisetzungsrate des in den Simulationen verwendeten Brenners mit einer Fläche von 0,2 m ² und einem Brennstoffmassenstrom von 1,58 g/s.....	74
Abbildung 5.15: Vergleich der berechneten und gemessenen Temperaturen im SBI Testraum in den Höhen 0,1 m (5.15a), 0,4 m (5.15b), 0,7 m (5.15c) und 1 m (5.15d) über der Probenunterkante.....	75
Abbildung 5.16: Vergleich des Temperaturprofils an Kalzium-Silikat-Platten infolge des Wärmeeintrags durch den SBI-Brenner im Experiment (links, IR-Kamera) und in der Simulation (rechts).	76
Abbildung 5.17: Berechneter, repräsentativer Wärmeeintrag durch die turbulente Diffusionsflamme des SBI-Brenners auf die Probekörper.....	76
Abbildung 5.18: Vergleich der berechneten und der experimentell bestimmten Wärmefreisetzungsdaten im SBI Test für den Werkstoff PUR.....	77
Abbildung 5.19: Vergleich des Verlaufs der berechneten und der experimentell bestimmten Wärmefreisetzung über der Zeit für den Werkstoff PUR.	77
Abbildung 5.20: Aufnahmen der Berechnungen Sim_N ₂ (links) und Sim_O ₂ (mitte) sowie das Foto eines Experiments des Werkstoffs PUR (rechts) etwa 30 s nach Anschalten des Brenners.....	78

Abbildungsverzeichnis

Abbildung 5.21: Aufnahmen der Berechnungen Sim_N2 (links) und Sim_O2 (mitte) sowie das Foto eines Experiments des Werkstoffs PUR (rechts) etwa 60 s nach Anschalten des Brenners.....	79
Abbildung 5.22: Aufnahmen der Berechnungen Sim_N2 (links) und Sim_O2 (mitte) sowie das Foto eines Experiments des Werkstoffs PUR (rechts) etwa 100 s nach Anschalten des Brenners.....	79
Abbildung 5.23: Aufnahmen der Berechnungen Sim_N2 (links) und Sim_O2 (mitte) sowie das Foto eines Experiments des Werkstoffs PUR (rechts) etwa 300 s nach Anschalten des Brenners.....	79
Abbildung 5.24: Einfluss der Halbierung der Gitterweite von 0,05 m auf 0,025 m auf die Wärmefreisetzungsrate der Berechnung Sim_O2.....	81
Abbildung 5.25: Einfluss der Parametervariation hinsichtlich Brennerleistung (5.25a) und Strahlungsanteil an der Wärmeübertragung in der Gasphase (5.25b) auf die berechnete Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR.	82
Abbildung 5.26: Einfluss der Parametervariation hinsichtlich der Materialeigenschaften Wärmeleitfähigkeit (5.26a) und Wärmekapazität (5.26b) auf die berechnete Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR.	82
Abbildung 5.27: Einfluss der Parametervariation hinsichtlich des Absorptionskoeffizienten (5.27a) und der Zersetzungsenthalpie (5.27b) auf die berechnete Wärmefreisetzungsrate des Werkstoffs PUR.....	83
Abbildung 6.1: Aufnahme der verwendeten Cone Kalorimeter Prüfapparatur (links) und Nahaufnahme einer brennenden Probe während eines Versuchs (rechts).	86
Abbildung 6.2: Kalzium-Silikat-Platte mit 25 Messpunkten zur Messung der Bestrahlungsstärke im Cone Kalorimeter (links) und die damit bestimmte Verteilung der Bestrahlungsstärke bei einem Abstand von 25 mm zur Unterkante der Heizspirale (rechts).....	87
Abbildung 6.3: Aufnahme des am NIST betriebenen Gasification Apparatus (links) sowie die Nahaufnahme einer Probe (rechts) während eines Versuchs (Quelle: Dr. Kashiwagi, NIST).	88
Abbildung 6.4: Vergleich der Massenverlustrate von PBT im Gasification Apparatus (PBT GA, MLR) und der gemessenen (PBT CC, MLR) und berechneten Massenverlustrate (PBT CC, HRR/h _c) im Cone Kalorimeter bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m ²	89
Abbildung 6.5: Vergleich der Massenverlustrate von PBT-GF im Gasification Apparatus (PBT-GF GA, MLR) und der gemessenen (PBT-GF CC, MLR) und berechneten Massenverlustrate (PBT-GF CC, HRR/h _c) im Cone Kalorimeter bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m ²	90
Abbildung 6.6: Dichteverlauf von PBT über der Temperatur gemessen mit einer pVT Apparatur am IPF Dresden (Quelle: Dr. Pionteck, IPF).....	93

Abbildung 6.7: Wärmestrahlungsabsorption und -reflexion gemessenen im FTIR Spektrometer für den Werkstoff PBT.	94
Abbildung 6.8: Wärmestrahlungsabsorption und -reflexion gemessenen im FTIR Spektrometer für den Werkstoff PBT-GF.	94
Abbildung 6.9: Spezifische Wärmekapazität als Funktion der Temperatur der Werkstoffe PBT und PBT-GF.	95
Abbildung 6.10: Thermische Leitfähigkeit als Funktion der Temperatur der Werkstoffe PBT und PBT-GF.	96
Abbildung 6.11: TG- (links) und DTG-Signale (rechts) von PBT und PBT-GF Proben bei einer Heizrate von 10 K/min.	96
Abbildung 6.12: TG-Signale bezogen auf den anfänglichen PBT Gehalt der Werkstoffe PBT und PBT-GF bei Heizraten von 1 K/min, 2 K/min, 5 K/min, 10 K/min und 20 K/min.	97
Abbildung 6.13: Reaktionsrate r (siehe [60]) von PBT und PBT-GF sowie die zugehörige Ausgleichsgerade (Arrhenius fit) dargestellt in Arrhenius Koordinaten.	98
Abbildung 6.14: Modifizierter Porbenhalter mit montierter Probe und im Zentrum positioniertem Wärme-stromsensor zur Bestimmung des effektiven Wärmeeintrages auf die Probe während eines Cone Kalorimeter Versuchs.	101
Abbildung 6.15: Messdaten eines Versuchs zur Bestimmung des effektiven Wärmestromes einer PBT-GF Probe unter 35 kW/m^2 im Cone Kalorimeter. (I) Shutter öffnet; (II) Entzündung; (III) Wärmestromsensor ohne Flammeneinfluss; (IV) Shutter schließt; (V) voreingestellte Bestrahlungsstärke von 35 kW/m^2 ; (VI) effektiver Wärmestrom auf der Probe.	102
Abbildung 6.16: Mit FDS und ThermaKin berechnete Temperaturverläufe an der Ober- und Unterseite einer GF-Rückstand Probe im Cone Kalorimeter Test bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m^2	103
Abbildung 6.17: Experimentelle und simulierte Massenverlustrate von PBT im Gasification Apparat bei 50 kW/m^2 (6.17a) sowie im Cone Kalorimeter Test bei 35 kW/m^2 (6.17b), 50 kW/m^2 (6.17c) und 70 kW/m^2 (6.17d).	104
Abbildung 6.18: Experimentelle und simulierte Massenverlustrate von PBT-GF im Gasification Apparat bei 50 kW/m^2 (6.18a) sowie im Cone Kalorimeter Test bei 35 kW/m^2 (6.18b), 50 kW/m^2 (6.18c) und 70 kW/m^2 (6.18d).	105
Abbildung 6.19: Einfluss unterschiedlicher Eingabeparameter für die Wärmeleitfähigkeit k und die Wärmekapazität c_p (FDS*: aus Datenblatt; FDS**: gemessen bei RT; FDS(f(T)): temperaturabhängig) auf die Massenverlustrate von PBT und PBT-GF im Gasification Apparat bei 50 kW/m^2	107
Abbildung 6.20: Einfluss der Parametervariation von Wärmeleitfähigkeit und Wärmekapazität auf das mit FDS berechnete Maximum der Massenverlustrate	

Abbildungsverzeichnis

von PBT-GF im Gasification Apparaturs bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m ²	111
Abbildung 7.1: Prüfkammer des UL 94 Tests (links) und Nahaufnahmen einer selbständig brennenden und dann brennend abtropfenden Probe (rechts).....	114
Abbildung 7.2: Aufnahme einer Probe während des UL 94 Tests mit der IR-Kamera.	115
Abbildung 7.3: Probekörper vor dem Test (I) sowie Rückstände der untersuchten Materialien PC/ABS (II), PC/ABS+BDP (III), PC/ABS+PTFE (IV) und PC/ABS+BDP+PTFE (V) nach dem UL 94 Test.	116
Abbildung 7.4: Massenverlauf über der Zeit von ausgewählten Proben im UL 94 Test.	116
Abbildung 7.5: Ausschnitt der zweidimensionalen (7.5a) und dreidimensionalen (7.5b) Geometrie der Probe im UL 94 Test mit den zugrunde liegenden Berechnungsgittern.....	118
Abbildung 7.6: Viskosität der untersuchten Materialien in Abhängigkeit der Temperatur, gemessen bei 10 Hz und einer Aufheizrate von 5 K/min [171].	119
Abbildung 7.7: Masterkurven der Schubspannung vs. Scherrate der vier PC/ABS Blends.	120
Abbildung 7.8: Im Rohrofen für 480 s bei 503 K (I), 633 K (II), 653 K (III), 673 K (IV) und 693 K (V) vorbehandelte PC/ABS Proben.....	120
Abbildung 7.9: Einfluss der thermischen Vorbehandlung auf die Viskosität von PC/ABS gemessen in Abhängigkeit der Scherrate bei 588 K.	121
Abbildung 7.10: Viskosität vs. Temperatur der vier PC/ABS Blends gemessen bei 0,1 Hz (Punkte) und die für höhere Temperaturen genutzte Extrapolation der Messdaten (Linien).	122
Abbildung 7.11: Aufnahmen der zweidimensionalen Simulationen von PC/ABS+BDP (a) und PC/ABS+PTFE (b) unter konstantem, dauerhaften Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme.	124
Abbildung 7.12: Berechneter 2-D Massenverlauf über der Zeit der vier untersuchten Materialien in der UL 94 Konfiguration bei konstantem Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme.	125
Abbildung 7.13: Aufnahmen der zweidimensionalen Simulationen von PC/ABS+BDP (a) und PC/ABS+PTFE (b) unter konstantem, dauerhaften Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme unter Berücksichtigung der Pyrolyse.	125
Abbildung 7.14: Berechnete 2-D Pyrolyserate über der Zeit der vier untersuchten Materialien in der UL 94 Konfiguration bei konstantem Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme.	126

Abbildung 7.15: Aufnahmen der dreidimensionalen Simulationen der Materialien PC/ABS (a) und PC/ABS+BDP (b) in der UL 94 Konfiguration bei konstantem Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme und Berücksichtigung der Pyrolyse.	127
Abbildung 7.16: Berechnete 3-D Pyrolyserate über der Zeit der vier untersuchten Materialien in der UL 94 Konfiguration bei konstantem Wärmeeintrag durch die Prüf Flamme.	128
Abbildung 7.17: Berechnete 3-D Pyrolyserate über der Zeit der vier untersuchten Materialien in der UL 94 Konfiguration bei 10 s Beflammung mit der Prüf Flamme und dem simulierten Wärmeeintrag infolge der Verbrennung der Pyrolysegase in der Gasphase.	129
Abbildung 7.18: Relative Masse über der Zeit der Parametervariationen zur Wärmekapazität von PC/ABS in der 2-D Simulation ohne Untermodell der Pyrolyse.	131
Abbildung 7.19: Relative Masse über der Zeit der Parametervariationen zur Wärmeleitfähigkeit von PC/ABS in der 2-D Simulation ohne Untermodell der Pyrolyse.	131
Abbildung 7.20: Pyrolyserate über der Zeit der Parametervariationen zur Wärmekapazität von PC/ABS in der 2-D Simulation.....	132
Abbildung 7.21: Pyrolyserate über der Zeit der Parametervariationen zur Wärmeleitfähigkeit von PC/ABS in der 2-D Simulation.....	133
Abbildung 7.22: Pyrolyserate über der Zeit der Parametervariationen zur Zersetzungsenthalpie von PC/ABS in der 2-D Simulation.	133

Tabellenverzeichnis

Tabelle 4.1: Zusammenstellung der anhand von Zeugenaussagen zusammengetragene Informationen zum Brandverlauf und den zugehörigen Zeitpunkten (in hh:mm).....	37
Tabelle 4.2: Übersicht der Stellungen von Fenstern und Türen im Einfamilienhaus	38
Tabelle 4.3: Eingabeparameter zur Charakterisierung der Brandlasten Holz und Kunststoff.....	42
Tabelle 4.4: Fläche, Brandlast und Brandlastdichte der für die Brandausbreitung im Einfamilienhaus relevanten Bereiche in der Simulation.....	45
Tabelle 4.5: Übersicht der Berechnungen des Einfamilienhauses und deren Ausprägungen hinsichtlich Brandlast, Ventilation und Brandausbreitung.....	52
Tabelle 5.1: Übersicht der Eingabeparameter der Zersetzungsreaktionen von PUR unter Stickstoff-Atmosphäre.....	70
Tabelle 5.2: Übersicht der Eingabeparameter der Zersetzungsreaktionen von PUR unter Luft.....	70
Tabelle 5.3: Vergleich der experimentellen und berechneten Kennwerte $FIGRA_{0,2MJ}$ und $FIGRA_{0,4MJ}$ des Werkstoffs PUR im SBI Test.....	78
Tabelle 5.4: Übersicht der untersuchten Parameter und der jeweiligen Variationen (Ausgangswerte sind hervorgehoben) in den durchgeführten Simulationen 1 bis 4.....	81
Tabelle 6.1: Charakteristische Kennwerte der Massenverlustraten von PBT und PBT-GF in Gasification Apparatus (GA) und Cone Kalorimeter (CC) bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m ²	91
Tabelle 6.2: Übersicht der in den Simulationen verwendeten Materialeigenschaften für PBT, PBT-GF und GF-Rückstand und der jeweiligen Werte bei Raumtemperatur.....	99
Tabelle 6.3: Effektiver Wärmestrom auf die Probe gemessen während der Cone Kalorimeter Versuche der Proben PBT und PBT-GF.....	102
Tabelle 6.4: Relativer Einfluss der Parametervariation um $\pm 20\%$ auf die Zeit bis zum Massenverlust (tML) von PBT und PBT-GF im Gasification Apparatus bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m ²	109
Tabelle 6.5: Relativer Einfluss der Parametervariation um $\pm 20\%$ auf das Maximum der Massenverlustrate (MaxMLR) von PBT und PBT-GF im Gasification Apparatus bei einer Bestrahlungsstärke von 50 kW/m ²	110
Tabelle 7.1: Übersicht der Parametervariationen des Materials PC/ABS im UL 94 Test.....	130

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

bzw.	beziehungsweise
bspw.	beispielsweise
CFD	Computational Fluid Dynamics
DDK	Dynamische Differenzkalorimetrie
DNS	Direkt Numerical Simulation
DTG	differentielle Thermogravimetrie
etc.	et cetera
FTIR	Fourier Transform Infrarot (Spektroskopie)
HRR	Wärmefreisetzungsrate
LES	Large Eddy Simulation
MaxMLR	Maximum der Massenverlustrate
RANS	Reynolds Averaged Numerical Simulation
RTE	Radiation Transfer Equation
SBI	Single Burning Item (Test)
TG	Thermogravimetrie
TGA	thermogravimetrische Analyse
tPYR	Gesamtdauer der Pyrolyse
tML	Zeit bis zum Massenverlust
z.B.	zum Beispiel
A	Arrhenius Koeffizient
C_s	Smagorinsky Konstante
c	spezifische Wärmekapazität
D	Diffusionskoeffizient
g	Gewichtskraft
E	Aktivierungsenergie
e	innere Energie
h	Enthalpie
h_c	Verbrennungswärme bei vollständiger Verbrennung

Symbol- und Abkürzungsverzeichnis

h_d	Bindungsdissoziationsenthalpie
h_{dec}	Zersetzungsenthalpie
h_f	Schmelzenthalpie
h_g	Vergasungsenthalpie je vergastem Massenanteils
h_s	Entropieanteil an der Erwärmung
h_v	Verdampfungsenthalpie
I	Strahlungsintensität
k	Wärmeleitfähigkeitskoeffizient
L_g	Vergasungsenthalpie
\dot{m}	Massenverlustrate
p	Druck
Pr	Prandtl Zahl
\dot{q}_{net}	effektiver Wärmeeintrag
\dot{q}_{ext}	Wärmestrom externer Wärmequellen
\dot{q}_{flame}	Wärmestrom aufgrund der Strahlung einer Flamme
\dot{q}_{rerad}	Wärmestrom infolge Strahlungsreflektion
\dot{q}_{conv}	konvektiver Wärmestrom
\dot{q}_g	Wärmestrom zur Vergasung/Rückstandsbiidung
\dot{q}_{cond}	konduktiver Wärmestrom
R	universelle Gaskonstante
Sc	Schmidt Zahl
t	Zeit
T_a	Umgebungstemperatur
T_s	Oberflächentemperatur
T_0	Ausgangstemperatur
v	Geschwindigkeit
Z	Mischungsbruch
α	Wärmeübergangskoeffizient
β	Elementmassenbruch
γ	Deformation

ε	Emissivität
μ	Massenanteil Rückstand
ν	stöchiometrischer Koeffizient
ρ	Dichte
σ	Stefan Boltzmann Konstante
τ	Schubspannung
χ	Verbrennungseffizienz
∇	Nabla-Differentialoperator der Divergenz

Danksagung

Herrn Prof. Dr. Manfred Wagner danke ich für die Betreuung und Begutachtung meiner Arbeit, die Offenheit für fachliche und organisatorische Fragen und die Bereitschaft, rheologische Untersuchungen in seinem Fachgebiet Polymertechnik und Polymerphysik an der TU Berlin durchzuführen.

Herrn Prof. Dr. John Banhart danke ich für die Übernahme des Vorsitzes der Prüfungskommission.

Mein besonderer Dank gilt Frau Dr. Anja Hofmann-Böllinghaus und Herrn PD Dr. habil. Bernhard Schartel. Neben der wissenschaftlichen Betreuung meiner Arbeit danke ich vor allem für den stets motivierenden und freundschaftlichen Umgang während meiner Zeit an der BAM Bundesanstalt für Materialforschung und -prüfung.

Für das gute Arbeitsklima, die angenehme Zusammenarbeit und Unterstützung jeglicher Art bedanke ich mich herzlichst bei meinen Vorgesetzten, Kolleginnen und Kollegen der Fachgruppen Beständigkeit von Polymeren und Brandingenieurwesen Dr. Birgit Perret, Marie-Claire Despinasse, Dr. Guang Mei Wu, Dr. Eliza Wawrzyn, Dr. Emanuela Gallo, Kerstin Brademann-Jock, Sabine Kowallik, Petra Zander, Tina Raspe, Dr. Sabine Pfister, Dr. Simone Krüger, Dr. Ulrike Braun, Horst Bahr, Patrick Klack, Dietmar Neubert, Andreas Hörold, Dr. Henrik Seefeldt, Sven Brehme, Dr. Christian Knaust, Nils Monreal, Frederik Rabe, Alexander Klippel, Rüdiger Mühlwinkel, Sven Riemer, Igor Uzelac, Benjamin Klaffke, Enrico Köppe, Dr. Matthias Bartholmai, Dr. Manfred Korzen und Prof. Dr. Ulrich Krause.

Herrn Dr. Tobias Himmel (PTK, TU-Berlin) danke ich für die Durchführung der rheologischen Untersuchungen, Herrn Bernd Kretschmar (IPF Dresden) für die Herstellung von Probekörpern, Herrn Dr. Jürgen Pionteck (IPF Dresden) für die pVT-Daten, Frau Anka Kohl (BAM) für die FTIR Untersuchungen und Herrn Christian Huth (BAM) für rheologische Messungen.

Für die fachliche Unterstützung und Gastfreundschaft während meiner Forschungsaufenthalte am NIST National Institute of Standards and Technology (Gaithersburg, USA), der FAA Federal Aviation Administration (Atlantic City Airport, USA) und dem Centro Internacional de Investigación de Métodos Numéricos en Ingeniería CIMNE (Barcelona, Spanien) bedanke ich mich herzlichst bei Dr. Greg Linteris, Dr. Kathryn Butler und Dr. Takashi Kashiwagi (NIST), Dr. Richard Lyon, Richard Walters und Prof. Dr. Stanislav Stoliarov (FAA), Dr. Julio Marti, Dr. Riccardo Rossi und Prof. Dr. Eugenio Oñate (CIMNE).

Mein ganz besonderer Dank gilt meiner Familie und insbesondere meiner Ehefrau für ihre Unterstützung und ihr Verständnis für diese Zeit raubende Arbeit.