

Universität der Bundeswehr München  
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik  
Institut für Thermodynamik

## **Untersuchungen zur mehrphasigen Strömung und Verdampfung in porösen Medien**

Dipl.-Ing. Franz Ferdinand Lindner

Vollständiger Abdruck der bei der  
Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik  
der Universität der Bundeswehr München  
zur Erlangung des akademischen Grades eines

### **Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)**

eingereichten Dissertation

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr. rer. nat. habil. Christian J. Kähler  
1. Berichterstatter: Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Michael Pfitzner  
2. Berichterstatter: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Christian Mundt  
3. Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. Rainer Helmig

Diese Dissertation wurde am 22.03.2016 bei der Universität der Bundeswehr München,  
85577 Neubiberg eingereicht und durch die Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik am 29.08.2016  
angenommen.

Tag der Prüfung: 08.11.2016



# Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Thermodynamik der Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik an der Universität der Bundeswehr München. Mein Dank gilt Univ.-Prof. Dr. rer. nat. Michael Pfitzner und Univ.-Prof. Dr.-Ing. Christian Mundt, die mir diese Arbeit ermöglicht haben. Die Förderung durch fachliche Gespräche und den unkomplizierten Umgang durch wissenschaftlichen Freiraum und Vertrauen wusste ich immer zu schätzen. Ich danke ebenfalls Prof. Dr.-Ing. Rainer Helmig für die Übernahme des Korreferats dieser Arbeit.

Ich danke Volodymyr Ilchenko, Michael Pöhner und Uwe Strecker für das Vertrauen und Verständnis, meine Arbeit in einen wissenschaftlichen Rahmen zu betten.

Mein Dank gilt den Studenten, durch deren Betreuung sehr gute Abschlussarbeiten entstanden sind, die mir auch in dieser Arbeit weiterhelfen konnten: David Droste, Florian Löser, Martin Scharl, Thomas Weisensee und Manuel Mayer. Ein besonderer Dank gebührt meinen Co-Autoren Philipp Nuske und Kilian Weishaupt vom Institut für Wasser- und Umweltsystemmodellierung der Universität Stuttgart, die große Arbeit in unsere gemeinsamen Publikationen gesteckt haben und durch bereichernde Diskussionen zu dieser Arbeit beigetragen haben.

Des Weiteren danke ich allen Technikern, die meine experimentellen Arbeiten unterstützt haben. Zu guter Letzt danke ich allen weiteren Mitarbeitern und Doktoranden am Institut für Thermodynamik. Der fachliche Austausch half mir stets, über mein eigenes Thema hinaus über den Tellerrand blicken zu können. Noch viel mehr haben mir der freundschaftliche Umgang und Unternehmungen abseits der Arbeit geholfen, einen Ausgleich zur Dissertation zu finden.

München, im März 2016

Franz Ferdinand Lindner

# Kurzzusammenfassung

Multiphasenströmungen in porösen Medien sind in den Geowissenschaften und für verschiedene technische Anwendungen von großem Interesse. Hierbei sind der Wärme- und Stofftransport sowie der Phasenwechsel in Form von Verdampfung des Fluids von besonderer Relevanz. Das Fluid kann aus verschiedenen Komponenten bestehen und sich in seiner Temperatur von der festen Phase unterscheiden, wodurch ein Wärmeübergang zwischen der festen Phase und dem Fluid wirkt. Ebenfalls können Kapillarkräfte, die an den Phasengrenzflächen entstehen, zur Beeinflussung des Wärme- und Stofftransports beitragen.

Es besteht eine Forschungslücke hinsichtlich der numerischen Beschreibung der komplexen Mechanismen der Multiphasen- und Multikomponenten Strömung in porösen Medien und dem Phasenwechsel des Fluids als Übergang vom flüssigen Zustand zum überhitzten Zustand, die mit Experimenten validiert ist. Überdies erschwert die Berücksichtigung von Kapillarkräften und lokalem thermischen Nichtgleichgewicht die Modellierung. In dieser Arbeit wird diese Konzeption physikalisch beschrieben, in mathematischen Modellen auf Basis von Multiphasen Mischungsmodellen in MATLAB<sup>®</sup> implementiert, auf Testfälle zur Plausibilisierung angewandt und anschließend mit experimentellen Daten validiert, die eigens erzeugt wurden.

Dies umfasst im Speziellen die numerische Simulation der Verdampfung eines einkomponentigen Fluids anhand eines Testfalls der Transpirationskühlung. Die Verifizierung erfolgt anhand von bereits veröffentlichten Ergebnissen aus der Literatur und einem DuMu<sup>x</sup> Modell, das extern zu dieser Arbeit entstanden ist und nicht die Konzeption eines Mischungsmodells verwendet. Es kann gezeigt werden, dass die Ergebnisse qualitative Übereinstimmung aufweisen. Die quantitativen Abweichungen werden diskutiert, in den Kontext der Behandlung der Numerik gesetzt und hinsichtlich der Sensibilität auf einzelne Parameter untersucht. Das Multiphasen Mischungsmodell für einkomponentige Strömung verfügt bei einer vorgegebenen Temperaturverteilung über die gleichen Geschwindigkeits- und Druckverläufe wie das DuMu<sup>x</sup> Modell.

Die Anwendung des Lösers für einkomponentige Fluide auf einen Testfall zur 2D Strömung mit Verdampfung innerhalb von vertikalen Kanälen bildet eine Problemstellung, die in der Literatur bis zum Zeitpunkt der Erstellung dieser Arbeit noch nicht beschrieben wurde. Eine Parametervariation anhand von dimensionslosen Kennzahlen veranschaulicht die physikalische Plausibilisierung.

Die Konzeption des Mischungsmodells wird für mehrere Fluidkomponenten fortgeführt und hinsichtlich der numerischen Implementierung detailliert beschrieben. Der so entstandene Löser für das Multiphasen Multikomponenten Mischungsmodell wird auf einen Testfall zur Transpirationskühlung angewandt und anhand einer Parametervariation plausibilisiert.

Abschließend werden experimentelle Daten präsentiert. Zum einen wird die instationäre Fluidausbreitung experimentell gemessen und abgeglichen mit Ergebnissen aus der numerischen Simulation. Zum anderen wird die Verdampfung innerhalb eines porösen Mediums für 1D Strömung gemessen. Die ermittelten Temperaturprofile zeigen unter Variation des Massenstroms, der Wärmezufuhr und der Fluidzusammensetzung eine qualitative Übereinstimmung zu den numerischen Ergebnissen.

Zusammengefasst entwickelt diese Arbeit eine Beschreibung von Multiphasen- und Multikomponentenströmungen in porösen Medien, untersucht sie mittels Modellierung und numerischer Simulation und validiert sie mit Hilfe experimenteller Verfahren. Dieser Beitrag ist einfach anwendbar durch die Verwendung der vorgestellten Mischungsmodelle und modular hinsichtlich Erweiterungen der physikalischen Effekte.

# Abstract

Multiphase flow in porous media is a vital process for a wide range of aspects in earth science and for many technical applications. In this regard, heat and mass transfer as well as the phase change by evaporation are of particular interest. The fluid can contain various constituents and can differ in its temperature from the solid phase, with whom it may exchange heat. Furthermore, capillary forces acting on phase interfaces can influence the heat and mass transfer.

The current state of research lacks a validated numerical approach of solving the complex mechanisms of multiphase multicomponent flow in porous media and complete phase change of the fluid in terms of the transition from the subcooled to the superheated state. In addition, the consideration of capillary forces and local thermal non-equilibrium impairs the modeling. In this work, these concepts are described in a physical manner, implemented in MATLAB<sup>®</sup> in forms of multiphase mixture models and applied to test cases. The developed numerical code is validated with experimental data which were produced for this work.

In particular, the numerical simulation of the evaporation of a single component fluid is conducted with the application of transpiration cooling. The verification is done with data obtained from the literature and an open source model for porous media flow (DuMu<sup>x</sup>) which was developed independently of this work and does not comprise the concept of a multiphase mixture model. In this thesis, it is shown that qualitative accordance is found. The quantitative differences are discussed and put in context with the numerical treatment. Moreover, the sensitivity to parameters is investigated. It was found that the multiphase mixture model for single component 1d flow produces the same velocity and pressure profiles as the DuMu<sup>x</sup> model, if equal temperature profiles are provided for both models.

The application of this multiphase mixture solver for single component fluids to 2d flow with evaporation inside of vertical porous channels produces results which have not been described in the literature yet. A parameter variation with dimensionless quantities shows that the results are physically reasonable.

The concept of this mixture model is extended to multiple constituents and is discussed in detail with regard to the numerical implementation. The result, the multiphase, multicomponent mixture model is applied to a transpiration cooling test case and shows physically reasonable results.

Finally, this work presents experimental data for validation. Firstly, the isothermal mass transport is measured with an experiment and compared with numerical data. Secondly, the evaporation inside a porous medium is experimentally measured for 1d flow. The temperature profiles with varying boundary conditions such as mass flux, heat input and fluid composition conform with the numerical results in a qualitative way.

In conclusion, using modeling and simulation methods in conjunction with experimental validation, the numerical description of multiphase and multicomponent flow in porous media was explored. This contribution can be applied readily using the introduced mixture model and is modular with regard to the introduction of additional physical effects.

# Inhaltsverzeichnis

|  |            |
|--|------------|
| <b>Inhaltsverzeichnis</b>  | <b>I</b>   |
| <b>Abbildungsverzeichnis</b>   | <b>VII</b> |
| <b>Tabellenverzeichnis</b>   | <b>X</b>   |
| <b>Akronym- und Symbolverzeichnis</b>  | <b>XI</b>  |
| <b>1. Einleitung</b>   | <b>1</b>   |
| 1.1. Motivation . . . . .  | 1          |
| 1.2. Übersicht zur Modellierung - Stand der Forschung . . . . .                                      | 1          |
| 1.3. Zielsetzung der Arbeit . . . . .  | 7          |
| 1.4. Struktur der Arbeit . . . . .   | 7          |
| <b>2. Physikalische Grundlagen und konzeptuelle Modelle</b>  | <b>9</b>   |
| 2.1. Grundlagen der Durchströmung und Verdampfung in porösen Medien . . . . .                        | 9          |
| 2.1.1. Strömung durch poröse Medien . . . . .  | 10         |
| 2.1.1.1. Permeabilität . . . . .   | 10         |
| 2.1.1.2. Strömungsregime . . . . .   | 14         |
| 2.1.1.3. Imbibition . . . . .  | 16         |
| 2.1.2. Wechselwirkungen zwischen den durchströmenden Phasen . . . . .                                | 16         |
| 2.1.2.1. Oberflächenspannung . . . . .   | 16         |
| 2.1.2.2. Kapillardruck auf der Mikroskala . . . . .  | 16         |
| 2.1.2.3. Kapillardruck auf der Makroskala . . . . .  | 17         |
| 2.1.3. Wärmeleitung und Verdampfung in porösen Medien . . . . .                                      | 18         |
| 2.1.3.1. Wärmeleitung . . . . .  | 18         |
| 2.1.3.2. Verdampfen von Multikomponentenfluiden . . . . .  | 18         |
| 2.1.4. Dimensionslose Kennzahlen . . . . .   | 22         |
| 2.2. Modellierung des Wärme- und Stofftransports in porösen Medien . . . . .                         | 23         |
| 2.2.1. Einfache Modelle für isotherme Massenerhaltung, -transport und Impulserhaltung . . . . .      | 24         |
| 2.2.1.1. Sättigungsgleichung . . . . .   | 25         |
| 2.2.1.2. Die Poisson Gleichung für den Druck für stationäre Strömung mit konstanter Dichte . . . . . | 26         |
| 2.2.1.3. Lösungen bei vereinfachenden Annahmen . . . . .   | 29         |
| 2.2.2. Modelle für Massen-, Impuls- und Energieerhaltung in porösen Medien . . . . .                 | 29         |
| 2.2.2.1. Multiphase Flow Model . . . . .   | 29         |
| 2.2.2.2. Multiphasen Mischungsmodelle . . . . .  | 30         |

|   |           |
|---|-----------|
| <b>3. Physikalische und mathematische Modellierung</b>  | <b>36</b> |
| 3.1. Modellierung der Erhaltungsgleichungen mit dem Multiphasen Mischungsmodell für eine Komponente . . . . . | 36        |
| 3.1.1. Massen- und Impulserhaltung . . . . .  | 36        |
| 3.1.1.1. Lösung für stationäre Strömung in MATLAB® . . . . .  | 36        |
| 3.1.1.2. Lösung für instationäre Strömung . . . . .   | 37        |
| 3.1.2. Numerische Einbindung der gekoppelten Energieerhaltungen und Randbedingungen . . . . .                 | 38        |
| 3.1.3. Behandlung des degenerierten Diffusionskoeffizienten . . . . .   | 43        |
| 3.1.4. Analytische Lösungen anhand globaler Energieerhaltung . . . . .  | 44        |
| 3.2. Modellierung des Multi-{phasen,komponenten} Mischungsmodells . . . . .                                   | 45        |
| 3.2.1. Mischungsgrößen und konstitutive Gleichungen . . . . .   | 45        |
| 3.2.2. Wärmestrom beim Sieden . . . . .   | 52        |
| 3.2.3. Erhaltungsgleichungen . . . . .  | 53        |
| 3.2.4. Globale Energiebetrachtung mittels erstem Hauptsatz der Thermodynamik                                  | 60        |
| 3.2.5. Diskretisierung der stationären Energieerhaltungsgleichung . . . . .                                   | 61        |
| 3.2.6. Numerische Lösung des Multiphasen Mischungsmodells . . . . .   | 63        |
| <br>  |           |
| <b>4. Lösung der Multiphasen Mischungsmodelle</b>   | <b>66</b> |
| 4.1. Lösung des Multiphasen Mischungsmodells für eine Komponente . . . . .                                    | 66        |
| 4.1.1. Testfall 1D, stationär . . . . .   | 66        |
| 4.1.1.1. Mathematische Modelle . . . . .  | 66        |
| 4.1.1.2. Numerische Lösung . . . . .  | 68        |
| 4.1.1.3. Problemstellung & Randbedingungen . . . . .  | 71        |
| 4.1.1.4. Ergebnisse und Diskussion . . . . .  | 72        |
| 4.1.1.5. Zusammenfassung . . . . .  | 76        |
| 4.1.2. Testfall 2D, stationär . . . . .   | 77        |
| 4.1.2.1. Problembeschreibung . . . . .  | 77        |
| 4.1.2.2. Verwendete Gleichungen und Randbedingungen . . . . .   | 78        |
| 4.1.2.3. Numerische Lösung . . . . .  | 78        |
| 4.1.2.4. Ergebnisse und Diskussion für Strömung entgegen der Schwerkraft                                      | 79        |
| 4.1.2.4.1. Effekt der Stanton Zahl auf die Strömung und den Wärmeübergang . . . . .                           | 79        |
| 4.1.2.4.2. Effekt der Rayleigh Zahl auf die Strömung und den Wärmeübergang . . . . .                          | 81        |
| 4.1.2.4.3. Effekt der Péclet Zahl auf die Strömung und den Wärmeübergang . . . . .                            | 81        |
| 4.1.2.5. Schlussfolgerungen . . . . .   | 83        |
| 4.2. Lösung des Multi-{phasen,komponenten} Mischungsmodells . . . . .   | 84        |
| 4.2.1. Vorüberlegungen . . . . .  | 84        |
| 4.2.2. Mathematisches Modell . . . . .  | 85        |
| 4.2.3. Problemstellung & Randbedingungen . . . . .  | 86        |
| 4.2.4. Ergebnisse und Diskussion . . . . .  | 86        |
| <br>  |           |
| <b>5. Experimentelle Untersuchungen und Validierung</b>   | <b>91</b> |
| 5.1. Präparierung des porösen Mediums . . . . .   | 92        |
| 5.2. Permeabilität und Anwendbarkeit des Darcy Gesetzes . . . . .   | 92        |

---

|           |   |            |
|-----------|---|------------|
| 5.3.      | Isotherme Verteilung mit Laser-Transmission . . . . .   | 95         |
| 5.3.1.    | Methoden zur Messung von Mehrphasenströmungen . . . . .   | 95         |
| 5.3.2.    | Aufbau des Versuchs . . . . .   | 95         |
| 5.3.3.    | Validierung mittels numerischer Rechnungen . . . . .  | 96         |
| 5.3.4.    | Randbedingungen für die numerische Simulation . . . . .   | 98         |
| 5.3.5.    | Abgleich der experimentellen Daten mit Sättigungsprofilen aus der numerischen Lösung . . . . .    | 98         |
| 5.4.      | Experimentelle Ergebnisse zur Verdampfung und Validierung . . . . .                               | 100        |
| 5.4.1.    | Randbedingungen für die numerische Simulation . . . . .   | 104        |
| 5.4.2.    | Verdampfung von Wasser . . . . .  | 105        |
| 5.4.2.1.  | Vergleichbarkeit zwischen experimentellen Daten und numerischen Daten . . . . .                   | 105        |
| 5.4.2.2.  | Ergebnisse der Validierung . . . . .  | 106        |
| 5.4.2.3.  | Sensibilität der Ergebnisse für Modellparameter . . . . .   | 109        |
| 5.4.3.    | Verdampfung eines Ethanol/Wasser Gemischs . . . . .   | 110        |
| 5.4.3.1.  | Vergleichbarkeit zwischen experimentellen Daten und numerischen Daten . . . . .                   | 110        |
| 5.4.3.2.  | Ergebnisse der Validierung . . . . .  | 110        |
| 5.4.4.    | Reproduzierbarkeit der Ergebnisse . . . . .   | 113        |
| 5.4.5.    | Zusammenfassung der Ergebnisse der Validierung . . . . .  | 114        |
| 5.5.      | Fehlerabschätzung der experimentellen Messungen . . . . .   | 115        |
| <b>6.</b> | <b>Zusammenfassung und Ausblick</b>   | <b>116</b> |
| <b>A.</b> | <b>Druckgleichung und Sättigungsgleichung in fractional flow Formulierung</b>                     | <b>118</b> |
| <b>B.</b> | <b>Mathematisches Modell des Zweiphasen Mischungsmodells im lokalen thermischen Gleichgewicht</b> | <b>120</b> |
| <b>C.</b> | <b>Lösung des Systems aus der Poisson-Gleichung für den Druck</b>                                 | <b>122</b> |
|           | <b>Literaturverzeichnis</b>   | <b>123</b> |

# Abbildungsverzeichnis

|       |  |    |
|-------|--|----|
| 1.1.  | Schema der Transpirationskühlung nach Shi und Wang (2011). . . . .   | 2  |
| 1.2.  | Verdampfung innerhalb eines porösen Mediums durch Wärmezufuhr von unten bei impermeablen Wänden (Kaviany, 1995). . . . .   | 3  |
| 1.3.  | Schematische Strukturierung der Dissertation. . . . .  | 8  |
| 2.1.  | Skalen und REV nach Helmig (1997); Nuske (2014). . . . .   | 10 |
| 2.2.  | Von der Mikroskala zur Makroskala nach Nuske (2014). . . . .   | 10 |
| 2.3.  | Das Experiment zur Filtration von Darcy (1856). . . . .  | 11 |
| 2.4.  | Dispersionsmechanismen und Tortuosität $T$ . . . . .   | 12 |
| 2.5.  | Phasenverteilung in porösen Medien in Anwesenheit einer benetzenden und nicht benetzenden Phase, nach Bear (1991); Neumann (2007). . . . .   | 13 |
| 2.6.  | Relative Permeabilitäten einer Zweiphasenströmung in Abhängigkeit der Sättigung (Neumann, 2007). . . . .   | 14 |
| 2.7.  | Zusammenhang zwischen der Anwendbarkeit des Darcy Gesetzes und den Strömungsregimen. . . . .   | 15 |
| 2.8.  | Kapillardruck bei kapillaren Röhren. . . . .   | 17 |
| 2.9.  | Kapillare Hysterese aufgrund der Porengeometrie. . . . .   | 18 |
| 2.10. | Isobares Siedediagramm für die Mischung n-Heptan(1), n-Dodekan(2). . . . .   | 20 |
| 2.11. | Isobares Siedediagramm für die Mischung Ethanol(1), Wasser(2) bei $p = 1$ atm. . . . .   | 21 |
| 2.12. | Schematische Strukturierung der Modelle, der Modellentwicklung und deren Anwendung. . . . .  | 24 |
| 2.13. | Schematische Darstellung eines <b>K</b> -Orthogonalen Gitters für die inkompressible TPFA-Methode. . . . .   | 27 |
| 2.14. | Abbildung aus Shi und Wang (2011): Temperaturen ( <b>a</b> ) und Sättigungsprofile ( <b>b</b> ) bei Variation des Wärmestroms in das System. . . . .   | 35 |
| 3.1.  | Rechengebiet und Randbedingungen für einen Testfall. . . . .   | 51 |
| 3.2.  | Verlauf der volumetrischen Enthalpie $H$ am Kondensationspunkt für verschiedene $\mathcal{E}$ nach Gl. 3.78 für einen generischen Testfall nach Abb. 3.1. . . . .  | 51 |
| 3.3.  | Skizze zum makroskopischen Übergang am Kondensationspunkt des Mischungsmodells. . . . .  | 62 |
| 3.4.  | Diskretisierungssystem der gekoppelten Energieerhaltungen für die Fluidenthalpie und die Festkörpertemperatur. . . . .   | 64 |
| 3.5.  | Flussdiagramm für den Löser für ein zweikomponentiges Fluid. . . . .   | 65 |
| 4.1.  | Flussdiagramm für den Löser für ein einkomponentiges Fluid. . . . .  | 69 |
| 4.2.  | Makroskopische Phasengrenzen. . . . .  | 70 |
| 4.3.  | Problemstellung und Randbedingungen für beide Modelle. . . . .   | 71 |
| 4.4.  | Gitterkonvergenz mit $\dot{q}_{\text{heat},s} = 2 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$ , $\dot{m} = 0.5 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$ . Es wird der Einfluss der Gitterauflösung auf die Sättigung des DuMu <sup>x</sup> Modells gezeigt ( <b>links</b> ) und auf das TPMM ( <b>rechts</b> ). In dieser Notation entspricht die Sättigung $S_w$ der Sättigung der flüssigen Phase: $S_w = s_l = s$ . . . . . | 72 |
| 4.5.  | <b>Links:</b> Vergleich zwischen TPMM und Shi und Wang (2011), <b>rechts:</b> Ergebnisse des DuMu <sup>x</sup> Modells, Wärmestrom von $\dot{q}_{\text{heat},s} = 1.5 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$ . . . . .  | 73 |

|  |     |
|--|-----|
| 4.6. <b>Links:</b> Vergleich zwischen TPMM und Shi und Wang (2011), <b>rechts:</b> Ergebnisse des DuMu <sup>x</sup> Modells, Wärmestrom von $\dot{q}_{\text{heat},s} = 2 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$ . . . . .   | 74  |
| 4.7. Sättigung der benetzenden Phase für zwei Wärmeströme. . . . .   | 74  |
| 4.8. Ergebnisse des TPMM: Einfluss des Exponenten $\omega$ der relativen Permeabilität auf das Sättigungsprofil bei einer Wärmestromzufuhr von $2 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$ und einem Massenstrom von $0.5 \text{ kg/m}^2 \text{ s}$ ( <b>links</b> ) und Einfluss der Glättung von $\Gamma_h$ auf die Fluidtemperatur bei einer Wärmestromzufuhr von $10^6 \text{ W/m}^2$ und einem Massenstrom von $0.3 \text{ kg/m}^2 \text{ s}$ ( <b>rechts</b> ). . . . . | 75  |
| 4.9. Vergleich verschiedener Drücke für die unterschiedlichen Modelle. . . . .   | 75  |
| 4.10. Vergleich der Phasengeschwindigkeiten aus Abb. 4.9. Die Phasengeschwindigkeiten der benetzenden Phase sind skaliert mit dem Faktor 1000 für eine bessere Lesbarkeit der Abbildung. . . . .   | 76  |
| 4.11. Skizze der Problemstellung und Randbedingungen für Strömung entgegen und mit der Schwerkraft. . . . .  | 77  |
| 4.12. Fluid- und Solidtemperaturen, Verdampfungsfront und Sättigungsprofile an der beheizten Wand für Strömung entgegen der Schwerkraft bei Variation von St. . . . .  | 80  |
| 4.13. Temperaturen und Temperaturdifferenzen an der beheizten Wand für Strömung entgegen der Schwerkraft; Variation von St. . . . .  | 81  |
| 4.14. Abhängigkeit des Phasenwechsels und der freien Querschnittfläche für die flüssige Phase von den dimensionslosen Parametern Pe, St für $\text{Ra} = 226, \text{Bi} = 0.2$ . . . . .   | 82  |
| 4.15. Skizze zu den typischen Massenströmen für das MMM, 1D, stationär. . . . .  | 84  |
| 4.16. Normierte Position der Zweiphasenzone für einen generischen Testfall, um Gitterkonvergenz zu demonstrieren und Flüssigkeitssättigung für diese Gitter. . . . .   | 87  |
| 4.17. Temperaturen für den Beginn und das Ende der Verdampfungsregion für zwei verschiedene Wärmeströme. <b>Links:</b> Beginn der Verdampfung, <b>rechts:</b> Ende der Verdampfung. . . . .  | 88  |
| 4.18. Phasengeschwindigkeiten und Massenanteile für n-Heptan für zwei Wärmeströme wie in Abb. 4.17. . . . .  | 89  |
| 4.19. Sättigungsprofile für eine Parametervariation. . . . .   | 90  |
| 5.1. Aufnahme unter dem Mikroskop von der eingeharzten Stirnfläche. . . . .  | 92  |
| 5.2. Skizze des Aufbaus zur Messung der Permeabilität. . . . .   | 93  |
| 5.3. <b>Links:</b> Permeabilität in Abhängigkeit der Porosität $\phi$ mit gemessenen Daten vom CHP, <b>Rechts:</b> Reibungsfaktor $f^*$ in Abhängigkeit der Reynolds Zahl $\text{Re}_K$ für verschiedene Porositäten (Zhong et al., 2011). . . . .   | 94  |
| 5.4. Experimenteller Aufbau zur isothermen Fluidausbreitung mittels Lasertransmission. . . . .   | 95  |
| 5.6. Schema des Ablaufs der Bildverarbeitung mittels Differenzbildern und MATLAB <sup>®</sup> . Aus den zeitaufgelösten Bildern kann durch geeignete Bildbearbeitung ein Befüllungsvorgang pro Pixel berechnet werden. . . . .   | 96  |
| 5.5. Skizze der Lasertransmission durch den porösen Verdampfer in einer Plexiglasaufnahme. . . . .   | 96  |
| 5.7. Parameter für die numerischen Simulation. . . . .   | 97  |
| 5.9. Rechennetz für die numerische Simulation in MATLAB <sup>®</sup> . . . . .   | 98  |
| 5.8. Simulation der Füllung des Verdampfers bei verschiedenen Zeitschritten. . . . .   | 98  |
| 5.10. Ergebnisse der numerischen Simulation mit Überlagerung der Transmissionsmessungen. . . . .   | 99  |
| 5.11. Messbereich der Transmissionsmessung nach Abb. 2.5. . . . .  | 99  |
| 5.12. Schema der Messung zur Verdampfung im porösen Material. . . . .  | 100 |

---

|  |     |
|--|-----|
| 5.13. Skizze des verwendeten Prüflings für Messung der Verdampfung. . . . .  | 101 |
| 5.14. Prüflinge zur Messung von Verdampfung. . . . .   | 102 |
| 5.15. Skizzierte Wärmeströme bei eingearzteten Fasern. . . . .   | 102 |
| 5.16. Randbedingungen und Rechengebiet für die numerischen Rechnungen zur Validierung. . . . .   | 104 |
| 5.17. Skizze des Querschnitts des Prüflings mit generischer Sättigungsverteilung. . . . .  | 105 |
| 5.18. Verdampfung von Wasser bei 0.50 g/min, <b>links:</b> Temperaturen am porösen Medium $T_V$ und an der Heizung $T_H$ , <b>rechts:</b> Temperaturen an der Heizung $T_H$ und Fluidtemperaturen der numerischen Simulation $T_{f,num.}$ zum Vergleich. . . . .                               | 107 |
| 5.19. Verdampfung von Wasser bei 0.65 g/min, <b>links:</b> Temperaturen am porösen Medium $T_V$ und an der Heizung $T_H$ , <b>rechts:</b> Temperaturen an der Heizung $T_H$ und Fluidtemperaturen der numerischen Simulation $T_{f,num.}$ zum Vergleich. . . . .                               | 108 |
| 5.20. Verdampfung von Wasser. Verdampfungsposition und -länge in Abhängigkeit der Stanton Zahl der Verdampfung, <b>links:</b> 0.50 g/min, <b>rechts:</b> 0.65 g/min. . . . .   | 108 |
| 5.21. Verdampfung von Ethanol/Wasser bei 5 Mol% Ethanol und 0.62 g/min, <b>links:</b> Temperaturen am porösen Medium $T_V$ und an der Heizung $T_H$ , <b>rechts:</b> Temperaturen an der Heizung $T_H$ und Fluidtemperaturen der numerischen Simulation $T_{f,num.}$ zum Vergleich. . . . .    | 111 |
| 5.22. Verdampfung von Ethanol/Wasser. Verdampfungsposition und -länge in Abhängigkeit der Stanton Zahl der Verdampfung, <b>links:</b> bei 5 Mol% Ethanol und 0.62 g/min, <b>rechts:</b> bei 22.5 Mol% Ethanol und 0.50 g/min. . . . .  | 111 |
| 5.23. Verdampfung von Ethanol/Wasser bei 22.5 Mol% Ethanol und 0.50 g/min, <b>links:</b> Temperaturen am porösen Medium $T_V$ und an der Heizung $T_H$ , <b>rechts:</b> Temperaturen an der Heizung $T_H$ und Fluidtemperaturen der numerischen Simulation $T_{f,num.}$ zum Vergleich. . . . . | 112 |
| 5.24. Reproduzierbarkeit der experimentellen Daten zur Verdampfung. . . . .  | 113 |

# Tabellenverzeichnis

|      |  |     |
|------|--|-----|
| 1.1. | Literaturübersicht zu den Mischungsmodellen zur Untersuchung der Verdampfung.  | 6   |
| 2.1. | Antoine Parameter für Ethanol und Wasser. . . . .  | 21  |
| 2.2. | Pseudo Code für das Vorgehen in MRST für instationäre Fluidausbreitung. . . . .  | 26  |
| 2.3. | Erhaltungsgleichungen für die Masse und die gekoppelte Energieerhaltung in DuMu <sup>x</sup> .   | 30  |
| 2.4. | Mischungsvariablen für ein Multiphasen Mischungsmodell im LTNE (Shi und Wang, 2011). . . . .   | 31  |
| 2.5. | Temperatur, Sättigung und Phasengeschwindigkeiten aus den Mischungsgrößen (Wang, 1997). . . . .  | 33  |
| 2.6. | Erhaltungsgleichungen bei Shi und Wang (2011) für ein Mischungsmodell im LTNE.   | 34  |
| 3.1. | Sättigung, Konzentrationen, Dichte und Enthalpien in einem idealen binären System mit Aggregatswechsel. . . . .                              | 50  |
| 3.2. | Erhaltungsgleichungen für eine Multiphasen und Multikomponenten Mischung im LTNE. . . . .  | 53  |
| 3.3. | Klassifizierung der Terme für die Energieerhaltung des Fluids, Gl. 3.94. . . . .   | 56  |
| 3.4. | Klassifizierung der Terme für die Energieerhaltung des Fluids, siehe Tabelle 3.3, Gl. 3.82, 3.94 und die Vereinfachung in Gl. 3.107. . . . . | 59  |
| 3.5. | Wärmeströme am makroskopischen Übergang am Kondensationspunkt des Mischungsmodells. . . . .  | 62  |
| 4.1. | Eigenschaften des porösen Mediums. . . . .   | 71  |
| 4.2. | Fluideigenschaften, die von beiden Modellen benutzt werden. . . . .  | 72  |
| 4.3. | Vergleich der Fluidtemperaturen am Austritt. . . . .   | 73  |
| 4.4. | Randbedingungen für die betrachtete Strömung mit Wärmeeintrag nach Abb. 4.11. . . . .  | 78  |
| 4.5. | Dimensionslose Parameter für die Studie zum Effekt der Stanton Zahl. . . . .   | 79  |
| 4.6. | Fluideigenschaften für n-Heptan und n-Dodekan. . . . .   | 86  |
| 5.1. | Faserdickenverteilung und -orientierung des porösen Materials (Schladitz und Godehardt, 2013). . . . .                                       | 91  |
| 5.2. | Makroskopische Transporteigenschaften und geometrische Informationen (Rief und Printsypar, 2012). . . . .                                    | 97  |
| 5.3. | Position der Thermoelemente für Abb. 5.14. . . . .   | 101 |
| 5.4. | Versuchsmatrix zur Verdampfung des Ethanol/Wasser Gemischs. . . . .  | 104 |
| 5.5. | Sensibilität der Verdampfungsposition für Modellparameter bei der Verdampfung von Wasser bei 0.50 g/min, $P_{el} = 27.05$ W. . . . .         | 109 |
| B.1. | Verwendete Gleichungen bei Wang (1997) für ein Multiphasen Mischungsmodell im LTE. . . . .   | 121 |

# Akronym- und Symbolverzeichnis

## Akronyme

| <b>Symbol</b> | <b>Beschreibung</b>                                |
|---------------|--|
| CCD           | Charge-Coupled Device                              |
| CFD           | Computational Fluid Dynamics                       |
| CHP           | Constant Head Permeameter                          |
| CT            | Computertomographie                                |
| DHF           | Dryout Heat Flux                                   |
| EVP           | Error Vector Propagation                           |
| FFT           | Fast Fourier Transformation                        |
| FHP           | Falling Head Permeameter                           |
| FSO           | Full Scale Output                                  |
| LTE           | Local Thermal Equilibrium                          |
| LTNE          | Local Thermal Non-Equilibrium                      |
| MFM           | Multiphase Flow Model                              |
| MMM           | Multiphase Mixture Model                           |
| MPFA          | Multi-Point Flux Approximation                     |
| MRST          | MATLAB Reservoir Simulation Toolbox                |
| PDE           | Partial Differential Equation                      |
| PEM           | Polymerelektrolytbrennstoffzellen                  |
| REV           | Representative Elementary Volume                   |
| RMS           | Root Mean Square                                   |
| SFM           | Separate Flow Model                                |
| SIMPLE        | Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations |
| SPM           | Separate Phase Model                               |
| TPFA          | Two-Point Flux Approximation                       |
| TPMM          | Two Phase Mixture Model                            |
| UFT           | Unsaturated Flow Theory                            |
| VLE           | Vapor Liquid Equilibrium                           |

### Dimensionslose Zahlen

| Symbol          | Beschreibung                              |
|-----------------|---|
| Bi              | Biot Zahl                                 |
| Mo              | Mobilitätsverhältnis                      |
| Nu              | Nusselt Zahl                              |
| Pe              | Péclet Zahl                               |
| Pr              | Prandtl Zahl                              |
| Ra              | Rayleigh Zahl                             |
| Re              | Reynolds Zahl                             |
| Re <sub>K</sub> | Reynolds Zahl auf Basis der Permeabilität |
| St              | Stanton Zahl                              |

### Griechische Symbole

| Symbol           | Beschreibung  | Einheit                |
|------------------|---|------------------------|
| $\alpha_{sf}$    | Spezifische Oberfläche der Poren                          | 1/m                    |
| $\alpha$         | Diffusionskoeffizient                                     | m <sup>2</sup> /s      |
| $\beta$          | Trägheitskoeffizient, thermischer Expansionskoeffizient   | –, 1/K                 |
| $\varepsilon$    | Konvergenzkriterium                                       | –                      |
| $\eta$           | Ähnlichkeitsvariable                                      | m/√s                   |
| $\Gamma_h$       | Effektiver Diffusionskoeffizient                          | m <sup>2</sup> /s      |
| $\gamma$         | Aktivitätskoeffizient                                     | –                      |
| $\gamma_h$       | Korrekturkoeffizient für Advektion                        | –                      |
| $\gamma_p$       | Korrekturkoeffizient für die Impulserhaltung              | –                      |
| $\gamma_j$       | Interface zwischen Zellen in der TPFA-Methode             | m <sup>2</sup>         |
| $\lambda$        | Mobilität, relative Mobilität                             | –                      |
| $\Lambda$        | Diffusionskoeffizient für die TPFA-Methode                | s, m <sup>3</sup> s/kg |
| $\mu$            | Dynamische Mischungviskosität, chemisches Potential       | Pa s, J/mol            |
| $\mu$            | Dynamische Viskosität                                     | Pa s                   |
| $\nu$            | Kinematische Viskosität                                   | m <sup>2</sup> /s      |
| $\Omega$         | Faktor für den Zeitterm der Fluidenergieerhaltung, Gebiet | –, –                   |
| $\partial\Omega$ | Rand des Gebiets  | –                      |
| $\phi$           | Porosität   | –                      |
| $\varphi$        | Koordinate in Zylinderkoordinaten                         | rad                    |

|                     |  |                        |
|---------------------|--|------------------------|
| $\vec{\pi}$         | Vektor der Drücke an den Zellflächen                     | Pa                     |
| $\Psi$              | Hilfsgröße für die Kirchhoff-Methode                     | $\text{m}^2/\text{sK}$ |
| $\rho$              | Dichte   | $\text{kg}/\text{m}^3$ |
| $\Delta\rho$        | Dichtedifferenz der flüssigen und gasförmigen Phase      | $\text{kg}/\text{m}^3$ |
| $\rho_{\text{kin}}$ | Kinetische Dichte  | $\text{kg}/\text{m}^3$ |
| $\sigma$            | Oberflächenspannung                                      | $\text{N}/\text{m}$    |
| $\theta$            | Faktor für Diskretisierung in der Zeit, Benetzungswinkel | —                      |
| $\Xi$               | Konstante zur Definition der volumetrischen Enthalpie    | —                      |
| $\zeta$             | Hilfsvariable zur Integration über den Kapillardruck     | —                      |

**Operatoren**

| Symbol      | Beschreibung                        |
|-------------|-------------------------------------|
| $\dot{a}$   | Zeitliche Ableitung einer Größe $a$ |
| $\tilde{a}$ | Molare Größe                        |
| $\vec{a}$   | Vektorielle Größe                   |
| $\nabla$    | Nabla Operator                      |

**Lateinische Symbole**

| Symbol  | Beschreibung   | Einheit               |
|---|--|-----------------------|
| $A$   | Fläche   | $\text{m}^2$          |
| $A_{12}, A_{21}$  | Konstanten für die Margules Gleichung                | —                     |
| $A, B, C$   | Konstanten für die Antoine Gleichung                 | —                     |
| $\mathbf{A}, \mathbf{B}, \mathbf{C}, \mathbf{D}, \mathbf{F}, \mathbf{L},$<br>$\mathfrak{B}, \mathbf{A}^*, \mathbf{B}^*$ | Matrizen für die Diskretisierung                     | versch.               |
| $a_{ij}, b_i$   | Einträge in der Diskretisierungsmatrix               | versch.               |
| $b_{sf}$  | Konstante für Blasensieden                           | —                     |
| $Ca_{ik}$   | Kapillarfaktor                                       | Pa                    |
| $c_k$   | Kompressibilität der Phase $k$                       | $\text{m}^2/\text{N}$ |
| $c_{p,k}$   | Isobare spezifische Wärmekapazität für die Phase $k$ | $\text{J}/\text{kgK}$ |
| $c_s$   | Spezifische Wärmekapazität für die feste Phase       | $\text{J}/\text{kgK}$ |
| $Cs_k^\alpha$   | Konzentrationsabhängiger Kapillarfaktor              | Pa                    |
| $Ct_k$  | Thermischer Kapillarfaktor                           | $\text{Pa}/\text{K}$  |
| $D$   | Faserdurchmesser                                     | m                     |
| $D_c$   | Kapillarer Diffusionskoeffizient                     | $\text{m}^2/\text{s}$ |
| $d_p$   | Kugeldurchmesser                                     | m                     |

## Akronym- und Symbolverzeichnis

---

|                               |   |                                 |
|-------------------------------|---|---------------------------------|
| $D_s$                         | Konzentrationsabhängiger kapillarer Diffusionskoeffizient               | $\text{m}^2/\text{s}$           |
| $D_t$                         | Thermokapillarer Diffusionskoeffizient                                  | $\text{m}^2/\text{sK}$          |
| $f$                           | Hindrance Funktion  | —                               |
| $f, f^*$                      | Reibungsfaktor  | —                               |
| $G$                           | Gravitationsterm  | $\text{m}/\text{s}^2$           |
| $g$                           | Gravitationskonstante   | $\text{m}/\text{s}^2$           |
| $H$                           | Volumetrische Enthalpie   | $\text{J}/\text{m}^3$           |
| $h$                           | Spezifische Enthalpie, Koordinate                                       | $\text{J}/\text{kg}, \text{m}$  |
| $h_{fg}$                      | Verdampfungsenthalpie   | $\text{J}/\text{kg}$            |
| $\bar{h}_{sk}$                | Mittlerer Wärmeübergangskoeffizient zwischen fester Phase und Phase $k$ | $\text{W}/\text{m}^2 \text{K}$  |
| $J$                           | Leverett J-Funktion   | —                               |
| $j$                           | Diffusiver Massenstrom innerhalb der Mischung                           | $\text{kg}/\text{s m}^2$        |
| $j_k$                         | Diffusiver Massenstrom der Phase $k$ innerhalb der Mischung             | $\text{kg}/\text{m}^2 \text{s}$ |
| $K$                           | Permeabilität   | $\text{m}^2$                    |
| $K'$                          | Proportionalitätsfaktor für Druckverlust bei Durchströmung              | $\text{m}^3 \text{s}/\text{kg}$ |
| $k$                           | Wärmeleitfähigkeit  | $\text{W}/\text{mK}$            |
| $k_r$                         | Relative Permeabilität  | —                               |
| $l, L, \mathcal{L}$           | Länge   | $\text{m}$                      |
| $M$                           | Molare Masse  | $\text{kg}/\text{mol}$          |
| $m$                           | Globale Mobilität   | —                               |
| $\dot{m}$                     | Massenstrom   | $\text{kg}/\text{m}^2 \text{s}$ |
| $n$                           | Anzahl der Teilchen   | —                               |
| $n_x, n_y$                    | Anzahl der Zellen   | —                               |
| $P_{el}$                      | Elektrische Leistung  | $\text{W}$                      |
| $p$                           | Druck   | $\text{Pa}$                     |
| $p_c$                         | Kapillardruck   | $\text{Pa}$                     |
| $p^0$                         | Sättigungsdampfdruck  | $\text{Pa}$                     |
| $Q$                           | Volumenstrom  | $\text{m}^3/\text{s}$           |
| $\dot{q}$                     | Wärmestrom  | $\text{W}/\text{m}^2$           |
| $\dot{q}_{\text{boil}}$       | Wärmestrom beim Sieden  | $\text{W}/\text{m}^2$           |
| $\dot{q}_{\text{convective}}$ | Konvektive Wärmequelle  | $\text{W}/\text{m}^3$           |

|                            |  |  |
|----------------------------|--|--|
| $\dot{q}_{\text{heat}}$    | Nicht konvektive Wärmequelle                                 | $\text{W}/\text{m}^3$  |
| $\dot{q}_{sf}$             | Wärmeaustausch zwischen fester Phase und Fluid               | $\text{W}/\text{m}^3$  |
| $r, R$                     | Radius   | m  |
| $R_{\text{Kap}}$           | Kapillarradius   | m  |
| $S$                        | Entropie   | $\text{J}/\text{K}$  |
| $\bar{S}$                  | Linearisierter Wärmeaustausch                                | $\text{W}/\text{m}^2$  |
| $S_n$                      | Sättigung der nicht benetzenden Phase                        | —  |
| $S_w$                      | Sättigung der benetzenden Phase                              | —  |
| $S_P, S_{P1}, S_{P2}, S_C$ | Faktoren für die Linearisierung des Wärmeaustauschs          | $\text{W}/\text{m}^2, \text{W}/\text{m}^2 \text{K}, \text{m}/\text{s}$ |
| $s$                        | Sättigung der flüssigen Phase = $s_l$                        | —  |
| $s_r$                      | Residualsättigung  | —  |
| $s_k$                      | Sättigung der Phase $k$                                      | —  |
| $T$                        | Temperatur, Tortuosität                                      | $\text{K}, —$  |
| $t_{ij}, T_{ij}$           | Transmissibilität der Zelle $i, j$                           | $\text{m}^4 \text{s}/\text{kg}$  |
| $T_s$                      | Temperatur der festen Phase                                  | $\text{K}$   |
| $T_{\text{sat}}$           | Sättigungstemperatur   | $\text{K}$   |
| $T_V, T_H$                 | Experimentell gemessene Temperaturen                         | $^\circ\text{C}$   |
| $t$                        | Zeit   | s  |
| $\Delta t$                 | Zeitschritt  | s  |
| $U_C, U_P$                 | Faktoren zur Linearisierung des konduktiven Wärme-<br>stroms | $\text{K}, \text{K m}^3/\text{J}$                                      |
| $u$                        | spezifische innere Energie                                   | $\text{J}/\text{kg}$   |
| $\vec{u} = (u, v)$         | Geschwindigkeitsvektor (2D)                                  | $\text{m}/\text{s}$  |
| $V$                        | Volumen  | $\text{m}^3$   |
| $V_P$                      | Porenvolumen   | $\text{m}^3$   |
| $v_{ij}$                   | Fluss durch das Interface $\gamma_{ij}$ in der TPFA-Methode  | $\text{m}^3/\text{s}$  |
| $v$                        | Darcy Geschwindigkeit  | $\text{m}/\text{s}$  |
| $W$                        | Länge  | m  |
| $w$                        | Massenbruch  | —  |
| $x, y$                     | Koordinate, Molenbruch                                       | m, —   |
| $\Delta x, \Delta y$       | Zellbreite in $x, y$ -Richtung                               | m  |
| $Z, K, P$                  | Konstanten für die Phasenregel von Gibbs                     | —  |
| $z$                        | Koordinate   | m  |

### Subscripte

| Symbol | Beschreibung           |
|--------|------------------------|
| boil   | Am Siedezustand        |
| dryout | Am dryout Zustand      |
| $f$    | Fluid                  |
| eff    | Effektiv               |
| exit   | Austritt               |
| $i, j$ | Diskrete Werte         |
| in     | Eintritt               |
| $j$    | Beliebige Phase $j$    |
| $k$    | Phase                  |
| kin    | Kinetisch              |
| korr.  | Korrigierter Wert      |
| kompl  | komplementär           |
| $l$    | Flüssige Phase         |
| max    | Maximum                |
| $n$    | Nicht benetzende Phase |
| norm   | Normiert               |
| $s$    | Solid (feste Phase)    |
| sat    | Am Sättigungszustand   |
| total  | Total                  |
| umg    | Am Umgebungszustand    |
| $v$    | Gasförmige Phase       |
| $w$    | Benetzende Phase       |

### Superscripte

| Symbol   | Beschreibung                  |
|----------|-------------------------------|
| $\alpha$ | Komponente                    |
| $e$      | Im Equilibrium                |
| *        | Wert der vorherigen Iteration |

# 1. Einleitung

## 1.1. Motivation

Multiphasenströmungen in porösen Medien erfahren große Aufmerksamkeit in den Geowissenschaften und bei verschiedenen technischen Anwendungen. Nur wenige Beispiele hierfür sind Grundwasserströmungen, Prozesse zur Öl- und Gasgewinnung, Bodensanierung, industrielle Prozesse zur Trocknung, andauernde Nachkühlung des Kraftwerkerns nach einer Kernschmelze, Verdunstung, Transpirationskühlung und zahlreiche weitere verfahrenstechnische Anwendungen. Hier handelt es sich oftmals um Multiphasenströmungen mit Phasenwechsel, bei denen die Temperaturen des porösen Mediums und des Fluids oder der Fluide unterschiedlich sein können. Die beteiligten Phasen, d.h. die nicht mischbaren Fluide, können aus mehreren Komponenten bestehen. Der Wechsel des Aggregatzustands ist die Folge einer Reihe von Wärme- und Stoffübertragungsmechanismen mit Interaktion der Phasen untereinander und einer Interaktion des Fluids mit der festen porösen Struktur.

## 1.2. Übersicht zur Modellierung - Stand der Forschung

Die Phänomenologie des Phasenwechsels in porösen Medien wird von Bear (1991); Kaviany (1995); Vafai (2005) beschrieben. Zunächst werden die Begriffe Verdunstung und Verdampfung erörtert. Für die folgende Betrachtung wird thermodynamisches Gleichgewicht derart angenommen, dass die beteiligten Phasen die gleiche Temperatur besitzen. Beim Begriff des Phasenwechsels gilt es zu unterscheiden, ob es sich um Verdunstung oder Verdampfung handelt. Maßgebend für Verdunstung ist die Anwesenheit mindestens einer weiteren Komponente in der gasförmigen Phase. Verdunstung ist gekennzeichnet durch den Aggregatswechsel in ein Gasgemisch hinein. Verdampfung hingegen ist gekennzeichnet durch den Aggregatswechsel in den eigenen Dampf hinein. Ist mindestens eine weitere Komponente in der gasförmigen Phase anwesend, so teilt sich der Gesamtdruck  $p_{\text{total}}$  auf in die Partialdrücke  $p_i$ . Es gilt somit Dalton's Gesetz:

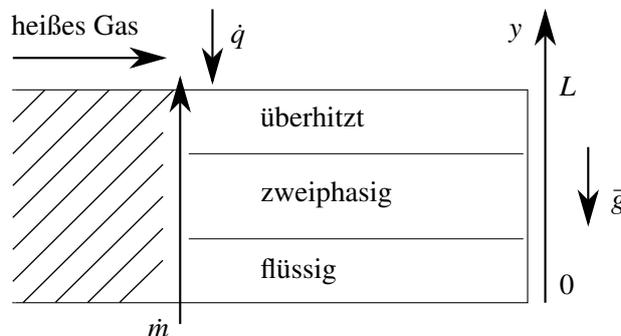
$$\sum_i p_i = p_{\text{total}}. \quad (1.1)$$

Im Gleichgewicht entspricht der Partialdruck des Dampfes direkt über der Phasengrenzfläche dem Sättigungsdampfdruck  $p^0$  bei der jeweiligen Temperatur  $T$ . Nach Gl. 1.1 tragen jedoch auch die anderen Komponenten in der Gasphase zum Gesamtdruck bei. Durch diffusive und konvektive Effekte wird der Partialdruck des Dampfes an der Oberfläche nicht zwingend seinen Gleichgewichtswert, sprich seinen Sättigungsdampfdruck annehmen, falls dieser Stoffaustausch in geeignetem Maße zugelassen wird. Es kann also Verdunstung stattfinden, da der Partialdruck des Dampfes kleiner ist als der Sättigungsdampfdruck. Bei Verdunstung nehmen die Moleküle an der Flüssigkeitsoberfläche teil, die in Kontakt mit einem Konzentrationsgradienten in der gasförmigen Phase stehen. Entsprechend diesem Konzentrationsgradienten kann z.B. ein diffusiver Massentransport nach der Fick'schen Regel stattfinden. Verdampfung geschieht hingegen bei der Siedetemperatur, d.h. der Partialdruck entspricht dem Gesamtdruck bzw. dem Sättigungsdampfdruck. Bei homogener Fluidtemperatur nehmen alle Moleküle der Flüssigkeit teil, nicht nur diejenigen an der Flüssigkeitsoberfläche.

berfläche. Es ist nun möglich, dass in einem System der Flüssigkeitsgehalt größer ist als der Sättigungswert. Somit kann nur ein Teil des Fluids im gasförmigen Aggregatzustand vorliegen. Die restliche Masse liegt dann als Kondensat vor, entweder in flüssiger Form oder in fester Form.

Die Veröffentlichungen zu Verdunstung in porösen Medien sind vielseitig und hauptsächlich im Bereich der Grundwasserströmungen und in der Trocknungsindustrie anzufinden. Eine gute Übersicht findet sich bei Vu (2006); Miscevic et al. (2006); Shahraneini und Or (2011); Nuske et al. (2014); Nuske (2014). Gebräuchliche Modelle sind das Trocknungsmodell von Philip und Vries (1957); Vries (1958), die Modelle von Luikov (1966a,b, 1975) oder Krischer (1978) und die Modelle von Whitaker (1977, 1980).

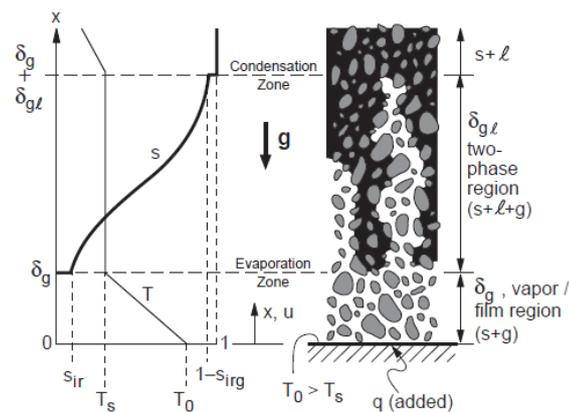
Unter Transpirationskühlung wird der Prozess der Injektion eines Fluids in ein poröses Medium, das an der Oberfläche einem Wärmestrom ausgesetzt ist, verstanden. Abb. 1.1 zeigt ein Schema der Transpirationskühlung nach Shi und Wang (2011): Es wird von unten, entgegen der Schwerkraft, ein Kühlmittel mit dem Massenstrom  $\dot{m}$  eingebracht und von oben ein Wärmestrom  $\dot{q}$  aufgebracht. Das Kühlmittel verdampft innerhalb des porösen Mediums und bildet drei Zonen entsprechend seines Aggregatzustands aus: flüssig, zweiphasig und überhitzt (gasförmig).



**Abb. 1.1.:** Schema der Transpirationskühlung nach Shi und Wang (2011).

Dieser Vorgang ist geprägt durch Verdampfung und Verdunstung spielt aufgrund der hohen Temperaturen eine untergeordnete Rolle. Der Begriff der Transpirationskühlung wird nicht nur bei einem flüssigem Fluid verwendet, das verdampft. Auch die Anwendung mittels gasförmigen Fluiden ist weit verbreitet. Anwendungen sind zu finden in Form von thermalem Schutz von Oberflächen in Brennkammern, Turbinenschaufeln, Raketendüsen, Gasturbinen, oder Strukturen von Wiedereintrittskörpern (Spalding, 1960; Bayley und Turner, 1970; Eckert und Cho, 1994; Glass et al., 2001; Kays et al., 2012). Im weiteren Verlauf wird sich auf die Anwendung mit eingebrachtem flüssigem Fluid beschränkt. Es kann sich innerhalb des porösen Mediums eine stationäre oder bewegende Front des Phasenwechsels ausbilden. Diese Interfaces können als makroskopische Phasengrenzen bezeichnet werden. Die Phasengrenzen auf einer kleineren Skala, an der Mikrostruktur des porösen Mediums, sollten damit nicht verwechselt werden. Diese makroskopischen Phasengrenzen sind im Allgemeinen nicht stationär; die Abhängigkeit von Parametern und Randbedingungen wird in der Literatur diskutiert (Koh et al., 1968; Kaviany, 1995; Rodriguez, 2002). Eine Unterscheidung der Transpirationskühlung mit permeablen oder impermeablen Wänden ist zweckmäßig: Bei impermeablen Wänden können sich Vereinfachungen ergeben, die unter gewissen Annahmen analytische Lösungen erlauben (Lipinski, 1982; Udell, 1983), bei permeablen Wänden sind keine analytischen Lösungen bekannt. Literatur für Transpirationskühlung mit impermeablen Wänden findet sich zum Beispiel bei Terry und Caras (1966); Lipinski (1982); Udell (1983); Chawla et al. (1985); Kaviany (1995); vonWolfersdorf (2005). Abb. 1.2 zeigt eine Skizze für impermeable Wände mit der Zufuhr

eines Wärmestroms von unten. Bei Erhöhung des zugeführten Wärmestroms über einen kritischen Wert wird die untere Grenzfläche nicht mehr benetzt sein. Der Übergang zwischen dem Zustand wenn die Oberfläche benetzt ist, zu dem Zustand, wenn sich ein dampfförmiger Film auf der beheizten Oberfläche ausbildet, spricht dryout, geschieht erstmals bei der kritischen Wärmezufuhr (Kaviany, 1995). Experimentelle Ergebnisse zu Transpirationskühlung mit permeablen Wänden werden von Udell (1985); Tsai und Catton (1987); Rahli et al. (1996); Forrest et al. (2009); He et al. (2013) gezeigt. Viele experimentelle Arbeiten widmen sich der Bestimmung des kritischen Wärmestroms, der die Ausbildung von trockenen Zonen innerhalb des porösen Mediums kennzeichnet, andere experimentelle Arbeiten bestimmen die Phänomenologie des Siedens in porösen Medien (Miscevic et al., 2002, 2006).



**Abb. 1.2.:** Verdampfung innerhalb eines porösen Mediums durch Wärmezufuhr von unten bei impermeablen Wänden (Kaviany, 1995).

Die Modellierung des Wärme- und Stofftransports kann auf der Mikroskala erfolgen oder auf der Makroskala vor dem Hintergrund einer Volumenmittelung. Neben der Modellierung auf der Mikroskala unterteilen Wang und Beckermann (1993) sowie Wang und Cheng (1997) die existierenden makroskopischen Modelle in drei Kategorien: die Theorie ungesättigter Strömung (Unsaturated Flow Theory, UFT), Multiphasen Mischungsmodelle (MMM) und Multiphase Flow Model (MFM).

### Die Theorie der ungesättigten Strömung

Die Theorie der ungesättigten Strömung (Unsaturated Flow (Bear, 1991) oder Undersaturated Flow (Scheidtger, 1974)) findet vor allem in der Hydrologie Verwendung (Morel-Seytoux, 1973; Milly, 1988). Da in dieser Formulierung kein Massenstrom der nicht benetzenden Phase möglich ist, sind die Möglichkeiten der Anwendbarkeit beschränkt, wenngleich bei Problemen der Wärmeübertragung mit Kondensation dieses Modell angewandt wird von Shekarriz und Plumb (1986) und Majumdar und Tien (1990).

### Multiphasen Mischungsmodelle

Multiphasen Mischungsmodelle (MMM) verwenden eine Konzeption der Mittelung im Raum (d.h. eine Betrachtung auf der Makrostruktur) und einer Mittelung der beteiligten Phasen: Sie basieren auf der Beschreibung von Wang und Beckermann (1993); Wang et al. (1994); Wang (1997) für eine Komponente und der Erweiterung von Wang und Cheng (1996b) für beliebige Komponenten. Es werden Mischungsvariablen verwendet und somit der inhärente Vorteil genutzt, dass wenige Primärvariablen zu lösen sind, ohne die Information über phasenaufgelöste Zustandsgrößen zu ver-

lieren. Das Set an Erhaltungsgleichungen ist für alle Gebiete gültig und ähnelt vom Typus dem der einphasigen Strömung. Die MMM konnten für einige Probleme aus der Praxis erfolgreich getestet werden (Wang et al., 1994; Easterday et al., 1995; Cheng und Wang, 1996; Wang, 1997), siehe auch Starikovicius (2003) für eine Zusammenfassung für MMM und für Multiphasenströmung in porösen Medien im Allgemeinen. Die Verwendung für Polymerelektrolytbrennstoffzellen (PEM) gilt als Stand der Technik (Xue, 2008; Promislow und Wetton, 2009; Wang, 2009). Dies ist im Kontext der Artikel von Wang und Wang (2006b, 2007) zu betrachten, welche die MMM für PEM anwenden und eine intensive Diskussion hinsichtlich der Eignung zur Beschreibung der komplexen Prozesse und der Annahmen für die Modellierung der Impulsgleichung angestoßen haben (Gurau et al., 2008; Wang, 2009; Gurau, 2009). Die MMM können kategorisiert werden in Eingleichungsmodelle für die Energiegleichung (local thermal equilibrium, LTE) und Zweigleichungsmodelle (local thermal non-equilibrium, LTNE).

Bei Eingleichungsmodellen für die Energieerhaltung gibt es eine gemeinsame lokale Temperatur für das poröse Medium und die durchströmenden Phasen. In der Zweiphasenzone bleibt die Temperatur für einkomponentige Fluide bei isobaren Zustandsänderungen konstant und damit kann dort keine Wärme durch Wärmeleitung übertragen werden. In der Realität hat der Festkörper immer die Fähigkeit zur Wärmeleitung und das Ausmaß des Wärmestroms durch Wärmeleitung ist durch den Temperaturgradienten bestimmt. Dieser Temperaturgradient ist in der Realität, unter anderem, von dem Wärmeübergang zum Fluid abhängig. Nur in Ausnahmefällen wird der Wärmeübergang vom Fluid zum Festkörper derart sein, dass auch der Temperaturgradient des Festkörpers null beträgt. Ein Modell mit LTE führt also einen künstlichen Isolator im Zweiphasengebiet ein (Wei et al., 2012). Eine Quantifizierung des Fehlers des LTE wird von Wang und Wang (2006a) mit Hilfe einer analytischen Lösung durchgeführt. Die Anwendung dieses Eingleichungsmodells ist weit verbreitet in der Literatur und wird teils auf 2D und 3D Rechengebieten und teils mit instationärer Strömung angewandt (Wang et al., 1994; Waite, 1999; Zhao und Liao, 1999; Zhao et al., 2000; Najjari und Nasrallah, 2005a,b, 2006; Li et al., 2010a,b,c; Yuki et al., 2010; Alomar et al., 2014a,b).

Bei Zweigleichungsmodellen ist lokal eine Unterscheidung der Temperaturen zwischen porösem Medium und Fluid möglich. Während Zweigleichungsmodelle für die Energie mit einer volumengemittelten Betrachtung in der Literatur üblich sind (Duval et al., 2004; Straughan, 2013), sind Mischungsmodelle mit diesen Eigenschaften in der Literatur nicht stark vertreten. Peterson und Chang (1997) verwenden ein Zweigleichungsmodell für stationäre Strömung von Wasser in 2D ohne Berücksichtigung von Kapillarkräften, die durch die Druckdifferenzen an Phasengrenzflächen entstehen. Shi und Wang (2011) verwenden ein Zweigleichungsmodell für den Anwendungsfall einer Transpirationskühlung und mit Phasenwechsel von reinem Wasser, dadurch wird also für eine Komponente gelöst. Durch Verbindung eines Zweiphasen Mischungsmodells mit lokalem thermischen Nichtgleichgewicht konnte der Einfluss von Parametern wie der Porosität, Permeabilität und Wärmeleitung in einem eindimensionalen Modell gezeigt werden. Neben der Arbeit von Shi und Wang (2011) sind besonders die Arbeiten von Ghafir und Lauriat (2001); Yuki et al. (2008) zu nennen, die die Basis für die verwendeten Erhaltungsgleichungen und konstitutiven Gleichungen gelegt haben. Wei et al. (2012) erweitern die Konzeption des Mischungsmodells, indem sie davon ausgehen, dass die freie Gibbs Energie der flüssigen und gasförmigen Phase im Zweiphasengebiet gleich ist, dadurch wird die Annahme gleicher Temperaturen der fluiden und festen Phase nicht benötigt und ebenfalls eine variable (d.h. druckabhängige) Verdampfungstemperatur ermöglicht.

### **Multiphase Flow Modelle**

Die Konzeption der Multiphase Flow Modelle sollte davon abgegrenzt werden, da die verschiedenen Phasen als eigenständige Fluide betrachtet und die Erhaltungsgleichungen für jede Phase einzeln gelöst werden. Dies führt zu Kopplungsbedingungen an den Phasengrenzen (z.B. am Inter-

face zwischen rein flüssiger und zweiphasiger Strömung) und zur Notwendigkeit, Phasengrenzen zu verfolgen, da diese a priori nicht bekannt sind. Weiterhin kann die Auswahl der Primärvariablen abhängig sein vom Phasenzustand. Dies sind nachteilige Aspekte im Vergleich zu einem Ansatz der Multiphasen Mischungsformulierung, der diese Aspekte vermeidet. Crone et al. (2002) und Crone et al. (2005) verwenden eine Kombination aus MFM und MMM, welche die Vorteile von beiden Ansätzen zu verbinden versucht. Die Anwendung ist die Aufheizung eines inerten Haufwerks mit kondensierendem Dampf aus Luft und Wasser: Das Mischungsmodell wird benutzt, indem ein Mischungsansatz für die fluiden Phasen das System der Differentialgleichungen reduziert. Die Massen- und Energieerhaltung wird für ein fluides Mehrphasengemisch (Mischungsdichte und Mischungsenthalpie) gelöst. Anschließend folgt eine Betrachtung individueller Phasen (MFM): Intensive Zustandsgrößen des Systems (Druck, Temperatur und Molanteile) werden im Rahmen einer thermodynamischen Rückwärtsberechnung bestimmt. Zu beachten ist hier, dass Ergebnisse für Verdampfung eines Multikomponentenfluides (Wasser und Luft) gezeigt werden, dies aber beschränkt ist auf den Phasenwechsel von einer Komponente (Wasser).

### **Chronologische Einordnung des Stands der Forschung**

Tab. 1.1 zeigt eine chronologische Übersicht über Publikationen zur Verdampfung in porösen Medien. Inhaltlich erfolgt eine Kategorisierung hinsichtlich der Beschreibung eines vollständigen Phasenwechsels (d.h. flüssig  $\rightarrow$  zweiphasig  $\rightarrow$  überhitzt), einer Berücksichtigung von lokal unterschiedlichen Fluid- und Festkörpertemperaturen (LTNE) und von Kapillarkräften. Weiterhin erfolgt eine Unterscheidung anhand der Anzahl der verdampfenden Fluidkomponenten und anhand der Anzahl von Dimensionen. Bis auf wenige Ausnahmen sind hier ausschließlich Publikationen mit Multiphasen Mischungsmodellen aufgenommen worden. Weitere Veröffentlichungen, die eine andere konzeptuelle Basis benutzen, indem sie keinen Mischungsansatz verwenden oder indem sie die Mikro- statt Makrostruktur betrachten, sind in Tab. 1.1 bewusst nicht mit aufgenommen, um die Übersicht kurz zu halten. Ausnahmen sind einige Veröffentlichungen mit experimentellen Daten wie Naik und Dhir (1982); Udell (1985); Tsai und Catton (1987); Easterday et al. (1995); Rahli et al. (1996); Class und Helmig (2002); Foreest et al. (2009); Yuki et al. (2010); He et al. (2013); He und Wang (2014). Weitere Ausnahmen stellen die Arbeiten von Class et al. (2002) und Class und Helmig (2002) dar, die Ansätze für den Phasenwechsel von Multikomponentenfluiden zeigen, aber keine Ergebnisse für den vollständigen Phasenwechsel beinhalten.

Veröffentlichungen in dem Gebiet der Multiphasenströmungen mit Verdampfung einer Multikomponentenmischung und lokalem thermischen Nichtgleichgewicht (LTNE) sind sowohl auf der experimentellen Ebene als auch in der numerischen Beschreibung der maßgebenden Effekte rar gestreut. Multiphase Flow Modelle können dies nur in Teilen bewerkstelligen: Die Simulationsumgebung MUFTE\_UG (Assteerawatt et al., 2006), die von Class et al. (2002) verwendet wird, führte in einer Weiterentwicklung zu der Simulationsumgebung DuMu<sup>x</sup> (Helmig, 1997; Flemisch et al., 2011; Nuske et al., 2014; Lindner et al., 2016a); TOUGH (Adenakan und Patzek, 1993; Falta et al., 1995) oder OpenGeoSys (Kolditz et al., 2012) können diese Funktionalität nicht vollständig abdecken. Numerische Studien, die die numerische Beschreibung der Verdampfung von Multikomponentenfluiden im LTNE zeigen und anhand experimenteller Daten validiert wurden, nehmen bis zum Zeitpunkt der Erstellung dieser Arbeit eine Ausnahmeposition ein. Für Multiphasen Mischungsmodelle wurden validierte Lösungen dieser Problemstellung noch nicht publiziert.

In allen erwähnten Veröffentlichungen, die ein Multiphasen Mischungsmodell mit LTNE verwenden, handelt es sich um Lösungen für einkomponentige Fluide. Lösungen für den Ansatz von Wang und Cheng (1996b) für Multikomponenten Fluide und einer Beschreibung des Phasenwechsels mit LTNE sind in der Literatur zum Zeitpunkt dieser Arbeit nicht vorhanden. Kern dieser Arbeit ist es, diese Lücke zu schließen.

**Tab. 1.1.:** Literaturübersicht zur Untersuchung der Verdampfung in porösen Medien ( $\triangleright$   $\equiv$  Experimentelle Arbeit,  $\circ$   $\equiv$  Numerische Arbeit,  $\bullet$   $\equiv$  Numerische Arbeit mit einem Multiphasen Mischungsmodell,  $\blacksquare$   $\equiv$  vollständige Verdampfung (d.h. flüssig $\rightarrow$ zweiphasig $\rightarrow$ überhitzt),  $\square$   $\equiv$  nicht vollständige Verdampfung).

| Autor (Jahr)                   | Verdampfung    | LTNE Modell  | Kapillarkräfte | Anzahl verdampfende Fluidkomponenten                        |                           | Anzahl Dimensionen        |                           |                  |
|--------------------------------|----------------|--------------|----------------|---|---------------------------|---------------------------|---------------------------|------------------|
|                                |                |              |                | 1   | 2                         | 1                         | 2                         | 3                |
| Naik und Dhir (1982)           | $\blacksquare$ |              | $\checkmark$   | $\triangleright$  |                           | $\triangleright$          |                           |                  |
| Udell (1985)                   | $\blacksquare$ |              | $\checkmark$   | $\triangleright$  |                           | $\triangleright$          |                           |                  |
| Tsai und Catton (1987)         | $\blacksquare$ |              | $\checkmark$   | $\triangleright$  |                           | $\triangleright$          |                           |                  |
| Wang et al. (1993)             | $\blacksquare$ |              | $\checkmark$   | Herleitung ( $\bullet$ ) für 1 Komponente, 3 Dimensionen    |                           |                           |                           |                  |
| Wang et al. (1994)             | $\square$      |              | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Easterday et al. (1995)        | $\square$      |              | $\checkmark$   | $\triangleright, \bullet$                                   |                           |                           | $\triangleright, \bullet$ |                  |
| Rahli et al. (1996)            | $\blacksquare$ |              | $\checkmark$   | $\triangleright, \circ$                                     |                           |                           | $\triangleright, \circ$   |                  |
| Wang und Cheng (1996b)         | $\blacksquare$ |              | $\checkmark$   | Herleitung ( $\bullet$ ) für $n$ Komponenten, 3 Dimensionen |                           |                           |                           |                  |
| Cheng und Wang (1996)          | $\square$      |              | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Peterson und Chang (1997)      | $\square$      | $\checkmark$ |                | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Wang (1997)                    | $\blacksquare$ |              | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Waite (1999)                   | $\square$      |              |                | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Zhao und Liao (1999)           | $\square$      |              | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Ghafir und Lauriat (2001)      | $\square$      | $\checkmark$ | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Miscevic et al. (2002, 2006)   | $\blacksquare$ |              |                | $\triangleright$  |                           | $\triangleright$          |                           |                  |
| Class et al. (2002)            | $\square$      | $\checkmark$ | $\checkmark$   |   | $\circ$                   | $\circ$                   | $\circ$                   |                  |
| Class und Helmig (2002)        | $\square$      | $\checkmark$ | $\checkmark$   |   | $\circ, \triangleright$   | $\circ, \triangleright$   | $\circ, \triangleright$   |                  |
| Crone et al. (2002, 2005)      | $\blacksquare$ | $\checkmark$ | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Duval et al. (2004)            | $\square$      | $\checkmark$ | $\checkmark$   | $\circ$   |                           | $\circ$                   |                           |                  |
| Najjari et al. (2005a,b, 2006) | $\square$      |              | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Wang und Wang (2006b)          | $\square$      |              | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Xue (2008)                     | $\blacksquare$ |              | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Yuki et al. (2008)             | $\square$      | $\checkmark$ | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Foreest et al. (2009)          | $\blacksquare$ |              |                | $\triangleright$  |                           |                           |                           | $\triangleright$ |
| Li et al. (2010a)              | $\square$      |              | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           |                           | $\bullet$        |
| Li et al. (2010b,c)            | $\square$      |              | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           |                           | $\bullet$                 |                  |
| Yuki et al. (2010)             | $\square$      |              | $\checkmark$   | $\triangleright, \bullet$                                   |                           |                           | $\triangleright, \bullet$ |                  |
| Shi und Wang (2011)            | $\blacksquare$ | $\checkmark$ | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           | $\bullet$                 |                           |                  |
| Wei et al. (2012)              | $\square$      | $\checkmark$ | $\checkmark$   | $\circ$   |                           | $\circ$                   |                           |                  |
| He et al. (2013, 2014)         | $\blacksquare$ |              | $\checkmark$   | $\triangleright, \circ$                                     |                           | $\triangleright, \circ$   |                           |                  |
| Alomar et al. (2014a,b)        | $\blacksquare$ |              | $\checkmark$   | $\bullet$   |                           | $\bullet$                 |                           |                  |
| Vorliegende Arbeit (2016)      | $\blacksquare$ | $\checkmark$ | $\checkmark$   | $\triangleright, \bullet$                                   | $\triangleright, \bullet$ | $\triangleright, \bullet$ | $\bullet$                 |                  |

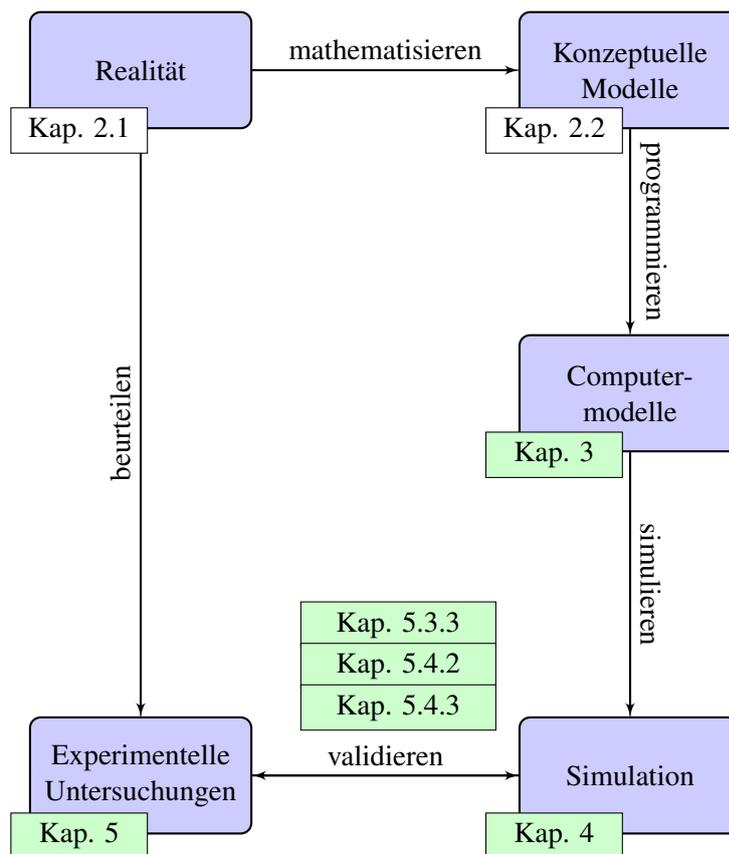
### 1.3. Zielsetzung der Arbeit

In Anbetracht des Forschungsstandes lässt sich die Zielsetzung dieser Arbeit formulieren als ein Beitrag, um Multiphasenströmungen mit Phasenwechsel des Fluids in porösen Medien zu analysieren und mit CFD Rechnungen simulieren zu können. Die konzeptuellen Grundlagen basieren auf den Beschreibungen, die den Stand der Forschung bilden. An gezielten Stellen werden diese Grundlagen ergänzt und um Annahmen erweitert. Dies ermöglicht einerseits eine große Abdeckung von physikalischen Effekten und vermeidet andererseits allzu grundlegende Vereinfachungen. Der Kern der physikalischen Erfordernisse umfasst die Verteilung und Verdampfung eines (einkomponentigen oder zweikomponentigen) Fluids in porösen Medien im lokalen thermischen Nichtgleichgewicht mit Berücksichtigung von Kapillarkräften.

Diese Erfordernisse werden in Multiphasen Mischungsmodelle implementiert, mit experimentellen Daten validiert und münden in ein numerisches Programm. Für einkomponentige Fluide wird der Ansatz von Shi und Wang (2011) übernommen, für zweikomponentige Fluide wird der Ansatz von Wang und Cheng (1996b) übernommen und auf LTNE erweitert. Da keine Lösungen für letzteren Ansatz vorhanden sind und die Erweiterung auf LTNE eine zusätzliche Komplexität einbringt, liegt ein Fokus auf der konzeptuellen Beschreibung des Modells für zweikomponentige Fluide.

### 1.4. Struktur der Arbeit

Abb. 1.3 zeigt die Struktur dieser Arbeit. Das Schema führt bei jedem Element die zugehörigen Kapitel auf. Weiß hinterlegte Kapitel erläutern den Stand der Forschung, grün hinterlegte beschreiben die Arbeit, die dieser Dissertation zugrunde liegt. Kap. 2.1 beschreibt zunächst phänomenologisch, welche physikalischen Grundlagen bei der Verdampfung in porösen Medien eine Rolle spielen. Anschließend werden Modellkonzepte in Kap. 2.2 erörtert. Ausgehend von dieser Basis werden eigene Computermodelle in Kap. 3 vorgestellt. Diese Modelle werden in Kap. 4.1 und 4.2 Testfällen unterzogen, um deren Plausibilität zu untersuchen. Die Testfälle gliedern sich auf in Lösungen für ein- und zweikomponentige Fluide. Für das einkomponentige Fluid Wasser werden zwei Testfälle untersucht. Beim ersten Testfall handelt es sich um einen Modellvergleich mit einem anderen Löser, der außerhalb dieser Dissertation entwickelt wurde. Beim zweiten Testfall handelt es sich um eine Parameterstudie zu dem entwickelten Modell dieser Arbeit. Der verbleibende Testfall für zweikomponentige Fluide stellt eine Plausibilisierung der Thermodynamik anhand einer Parametervariation dar. Um den Rückschluss ziehen zu können, ob diese Modelle in einem geeigneten Maß der Realität entsprechen, ist der Abgleich mit experimentellen Daten erforderlich. Es wurde eine eigene experimentelle Datenbasis geschaffen, die in Kap. 5 beschrieben wird. Mittels dieser Daten wird in den Kapiteln 5.3.3, 5.4.2 und 5.4.3 eine Validierung durchgeführt. Es wird gezeigt, dass für die Massen- und Impulserhaltung der Multiphasen-, Multikomponentenströmung in Mischungsformulierung eine Analogie zur einphasigen, isothermen Strömung gezogen werden kann. Um sicher zu gehen, dass die Implementierung der Gleichungen für die isotherme Strömung korrekt umgesetzt ist, wird zusätzlich eine Verteilung des Fluids in porösen Medien unter isothermen Bedingungen, d.h. ohne Verdampfung, im Rahmen von experimentellen Daten und einer Validierung erläutert.



**Abb. 1.3.:** Schematische Strukturierung der Dissertation.

Um die genannten Erfordernisse umzusetzen, werden folgende Schritte in dieser Arbeit durchgeführt:

- Adaption der bestehenden mathematischen Modelle & Implementierung in Form eines numerischen Programmes
- Erweiterung dieses Programmcodes auf die Erfordernisse, die in Kap. 1.3 formuliert wurden
- Berechnung von Testfällen zur Plausibilisierung
- Validierung anhand von experimentellen Daten

Auf diese Vorgehensweise wird in Kap. 2.2 näher eingegangen. Da in dieser Arbeit (teils eigene) englischsprachige Publikationen aufgegriffen werden und deren Abbildungen teils übernommen werden, wird durchgehend die englische Notation mit dem Punkt (.) als Dezimaltrennzeichen für Zahlen verwendet.

## 2. Physikalische Grundlagen und konzeptuelle Modelle

Der erste Abschnitt erläutert die physikalischen Grundlagen der Durchströmung und Verdampfung in porösen Medien (Kap. 2.1). Der zweite Abschnitt behandelt die Modelle, die die physikalischen Grundlagen mathematisch beschreiben (Kap. 2.2).

### 2.1. Grundlagen der Durchströmung und Verdampfung in porösen Medien

Poröse Medien werden als Festkörper verstanden, die kleinskalige Hohlräume, die namensgebenden Poren, beinhalten. Poren können dabei verschiedene Größen aufweisen und miteinander verbunden oder voneinander getrennt sein. Der verbundene Teil der Poren wird der effektive Porenraum genannt. Die Porosität  $\phi$  ist der Volumenanteil der Poren  $V_P$  an dem Gesamtvolumen  $V_{\text{Gesamt}}$ :

$$\phi = \frac{V_P}{V_{\text{Gesamt}}}. \quad (2.1)$$

Berücksichtigt man nur den effektiven Porenraum, kann diese Definition analog für eine effektive Porosität herangezogen werden. Im Folgenden wird in dieser Arbeit der Begriff Porosität gleichbedeutend mit der effektiven Porosität benutzt. Zu differenzieren sind bei den Transportprozessen eine globale Strömung aus makroskopischer Sicht von einer mikroskopischen Betrachtungsweise. Die makroskopische Beschreibung entspricht einer Mittelung über viele mikroskopische Einzelströmungen durch eine Vielzahl unregelmäßig geformter Porenkanäle. Die mikroskopische Beschreibung stützt sich nicht auf diese Mittelung, sondern führt vielmehr die Betrachtung in kleineren Skalen durch. Abb. 2.1 zeigt eine Unterteilung in Skalen, die sich durch die Größe des Mittelungsvolumens unterscheiden. Die Mittelung einer physikalischen Eigenschaft führt bei kleinen Größenordnungen zunächst zu Fluktuationen dieser Eigenschaft (Bereich I in Abb. 2.1). Nachdem ein gewisses Mittelungsvolumen erreicht wurde, sind keine Fluktuationen mehr erkennbar (Bereich II in Abb. 2.1). Die Skala, bei der diese konstanten Eigenschaften beobachtbar sind, wird hier als Makroskala bezeichnet (Nuske, 2014). Das Volumen, für das dies möglich ist, wird als representative elementary volume (REV) bezeichnet. Im Falle eines inhomogenen porösen Mediums bedeutet eine Vergrößerung des Mittelungsvolumens eine nicht konstante beobachtbare Eigenschaft (Bereich III in Abb. 2.1). Aufgrund der großen Komplexität in der Mikrostruktur ist es nicht vorteilhaft, die rein geometrische Umschreibung der Poren zu Hilfe zu nehmen.

Theoretisch ist zwar die analytische Beschreibung der Oberfläche, die den Porenraum abgrenzt, zur Definition eines porösen Mediums ausreichend. Praktisch ist dies natürlich bis auf einige geordnete Materialien nicht möglich. Aus einer statistischen Herangehensweise heraus kann ein Ensemble aus porösem Material betrachtet werden, das sich in den entscheidenden Kriterien dem tatsächlichen porösen Medium gleich verhält. In dieser Arbeit wird mit Erhaltungsgleichungen auf der Makroskala gerechnet und dadurch werden gemittelte physikalische Eigenschaften berücksichtigt, siehe Abb. 2.2.

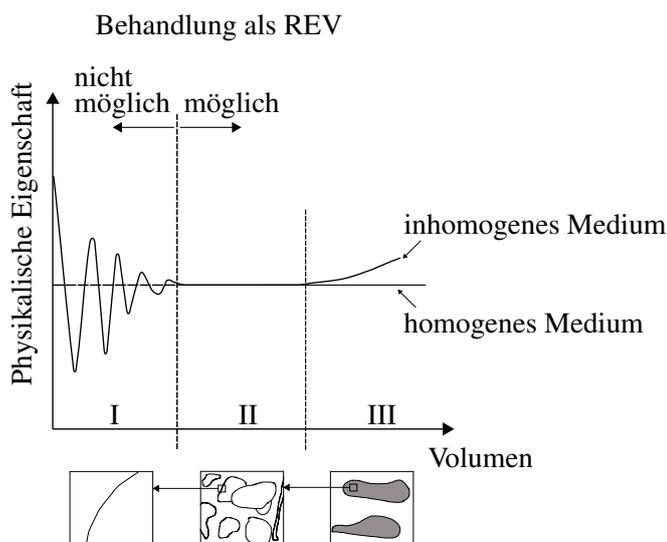


Abb. 2.1.: Skalen und REV nach Helmig (1997); Nuske (2014).

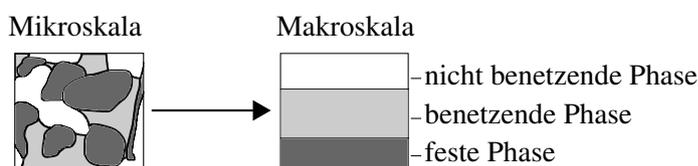


Abb. 2.2.: Von der Mikroskala zur Makroskala nach Nuske (2014).

### 2.1.1. Strömung durch poröse Medien

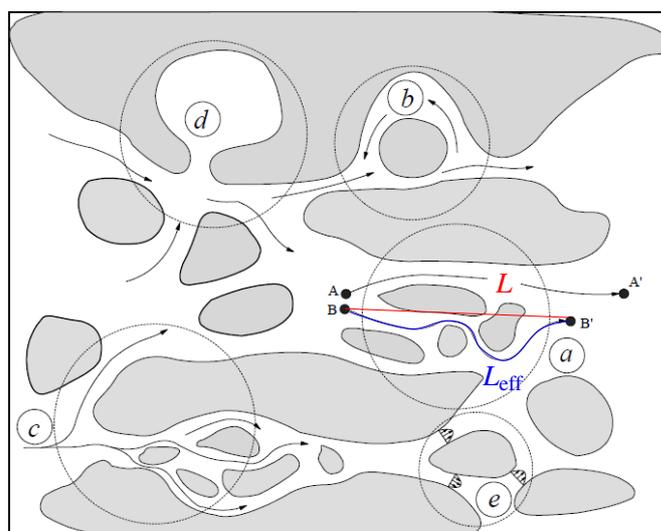
Im Folgenden werden einige grundlegende Konzepte zur Durchströmung von porösen Medien erläutert. Zunächst wird in Kap. 2.1.1.1 auf den Begriff der Permeabilität eingegangen. In Kap. 2.1.1.2 wird weiter erläutert, welche Arten von Strömungen möglich sind. In Kap. 2.1.1.3 wird auf den Begriff der Imbibition eingegangen, der im Zusammenhang mit Kap. 5.3 verwandt wird.

#### 2.1.1.1. Permeabilität

Das Darcy Gesetz beschreibt den laminaren Fluss von Fluiden durch poröse Medien. Dieses basiert auf der Annahme, dass bei laminarer Strömung durch homogene poröse Medien die viskosen Reibungskräfte dominieren. Eine analytische Herleitung aus den Navier-Stokes Gleichungen wird von Neuman (1977) gezeigt. Der klassische Versuch wurde von Darcy (1856) durchgeführt, der eine empirische Korrelation für isotherme, stationäre Strömung ohne Quell- oder Senkterme für die Masse herleitet (Gurau et al., 2008). Schematisch ist der Aufbau in Abb. 2.3 dargestellt. Ein homogenes Filterbett der Höhe  $h$  mit dem Querschnitt  $A$  ist durch einen Aufbau abgegrenzt. Das Filterbett wird durchströmt von einem inkompressiblen Fluid mit der Dichte  $\rho$ . Mit einem Manometer kann die folgende Gesetzmäßigkeit hergeleitet werden:

$$Q = -K'A \frac{(h_2 - h_1)}{h} = -K'A \frac{(p_2 - p_1 + \rho gh)}{h}. \quad (2.2)$$





**Abb. 2.4.:** Dispersionsmechanismen und Tortuosität  $T = L_{\text{eff}}/L$  nach Boukhezar (2004); Diezinger (2006). (a) Dispersion aufgrund der Tortuosität des porösen Mediums. (b) Dispersion aufgrund von Rezirkulationen. (c) Dispersion aufgrund der unterschiedlichen Zugänglichkeit und Durchströmungslängen von Poren. (d) Dispersion aufgrund von nicht durchströmbaren Poren. (e) Dispersion aufgrund von Inhomogenitäten im Strömungsfeld.

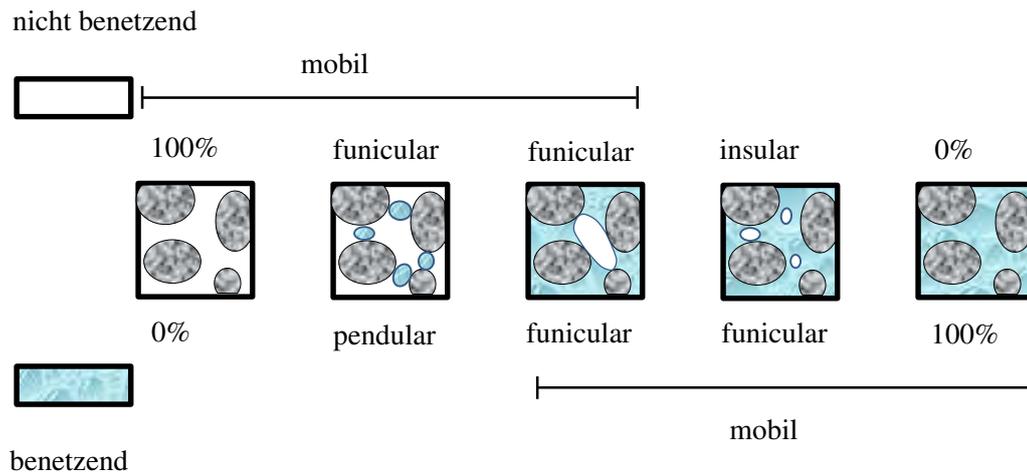
in Analogie zur molekularen Diffusion. In der Regel ist der Dispersionskoeffizient größer als der molare Diffusionskoeffizient. Der Dispersionskoeffizient hängt somit von der Geschwindigkeit ab (Bear und Cheng, 2010).

Hohlräume können gefüllt sein von mehreren nicht mischbaren Fluiden (Gasen und/oder Flüssigkeiten), sprich Phasen. Bei Multiphasenströmungen sind die freien Querschnittflächen aufgeteilt auf die vorhandenen Phasen und es kommt zu Wechselwirkungen an den Grenzflächen. Es ist zweckmäßig, dies im Sinne von Sättigungen zu erläutern. Die Sättigung einer Phase  $k$ ,  $s_k$ , ist definiert als deren Volumenanteil am verfügbaren Porenraum. Die Sättigung nimmt Werte in  $[0, 1]$  an. Einem Zustand vollkommener Füllung eines repräsentativem Elementarvolumens durch eine Phase  $k$  wird die Sättigung  $s_k = 1$  zugeschrieben. Es zeigt sich, dass unter Umständen eine Restsättigung nie unterschritten wird (Scheidegger, 1974). Diese Residualsättigung  $s_{r,k}$ , auch immobile Sättigung genannt, kann dazu dienen, eine effektive Sättigung  $s_{\text{eff}}$  zu definieren:

$$s_{\text{eff},k} = \frac{s_k - s_{r,k}}{1 - s_{r,k}}. \quad (2.5)$$

Eine mögliche Verdampfung dieser Restsättigung bleibt zu berücksichtigen. Im Folgenden wird auf die Unterscheidung zwischen effektiver Sättigung und Sättigung verzichtet. Abb. 2.5 zeigt schematisch mögliche Phasenverteilungen bei zwei nicht mischbaren Fluiden.

Die Permeabilität ist abhängig vom freien Volumen innerhalb der Poren: Sie steigt mit zunehmender Sättigung dieses Fluids. Die Permeabilität, wie sie in Gl. 2.4 verwendet wird, muss somit erweitert werden. Als Faktor wird die relative Permeabilität  $k_{r,k}(s_k)$  verwendet, die eine Funktion der Sättigung ist. Gl. 2.4 stellt somit nur den Sonderfall dar, wenn das poröse Medium komplett mit der Phase  $k$  gesättigt ist. Die effektive Permeabilität trägt dem Vorhandensein mehrerer Phasen und



**Abb. 2.5.:** Phasenverteilung in porösen Medien in Anwesenheit einer benetzenden und nicht benetzenden Phase, nach Bear (1991); Neumann (2007).

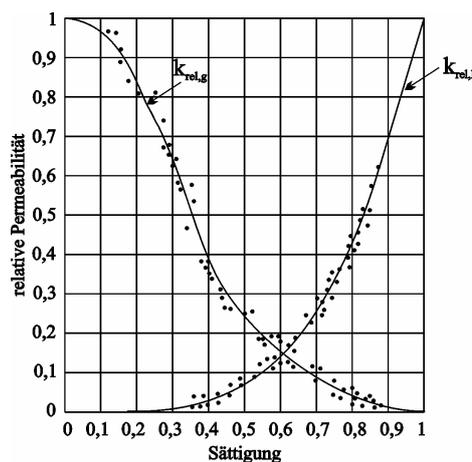
deren gegenseitiger Beeinflussung Rechnung (Wyckoff und Botset, 1936):

$$\mathbf{K}_{\text{eff},k} = k_{r,k}(s_k)\mathbf{K}. \quad (2.6)$$

Die relative Permeabilität nimmt Werte in  $[0, 1]$  an. Die effektive Permeabilität  $\mathbf{K}_{\text{eff},k}$  ist ein Maß für den effektiven inversen Durchströmungswiderstand jeder Phase. Dieser ergibt sich aus der intrinsischen Permeabilität  $\mathbf{K}$  der Einphasenströmung und der relativen Permeabilität. Der Zusammenhang zwischen  $k_{r,k}$  und der Sättigung  $s_k$  ist aufgrund von Hystereseeffekten abhängig davon, ob es sich um eine Befüllung oder Drainage handelt. Weitere Abhängigkeiten ergeben sich aus den kapillaren Eigenschaften des porösen Mediums, dem Verhältnis der Viskositäten sowie den Benetzungseigenschaften (Neumann, 2007). Abb. 2.6 zeigt die Verläufe der relativen Permeabilitäten bei einer Luft/Wasser-Strömung in Abhängigkeit von der Wassersättigung. Hier wird deutlich, dass die Summe der relativen Permeabilitäten immer kleiner als 1 ist, also ein Interferenzwiderstand auftritt. Ein einfacher Ansatz für die relativen Permeabilitäten (Index  $w$  für wetting, benetzende Phase; Index  $n$  für non wetting, nicht benetzende Phase) mit einer Potenzfunktion findet sich bei Udell (1985) mit  $n = 2$ , siehe Gl. 2.7 und 2.8. Zur einfacheren Schreibweise wird hier für die Sättigung der benetzenden Phase die Schreibweise benutzt:  $s_w = s$ . Es ist zu beachten, dass ein Fluid immer nur im Zusammenhang mit der umgebenden festen Phase und dem zweiten Fluid als benetzend oder nicht benetzend bezeichnet werden kann. So ist Mineralöl auf einer festen Oberfläche in Gegenwart von Luft benetzend. Mineralöl auf einer festen Oberfläche in Gegenwart von Wasser ist jedoch nicht benetzend. Im weiteren Verlauf ist die benetzende Phase gleichbedeutend mit der flüssigen Phase und die nicht benetzende Phase ist gleichbedeutend mit der gasförmigen Phase. Für die Subscripte  $k$ , d.h. die Indizes der Phasen, werden also die Symbole  $k = l$  für die flüssige Phase und  $k = v$  für die gasförmige Phase verwendet.

$$k_{rw} = s^n, \quad (2.7)$$

$$k_{rn} = (1 - s)^n. \quad (2.8)$$



**Abb. 2.6.:** Relative Permeabilitäten einer Zweiphasenströmung in Abhängigkeit der Sättigung (Neumann, 2007).

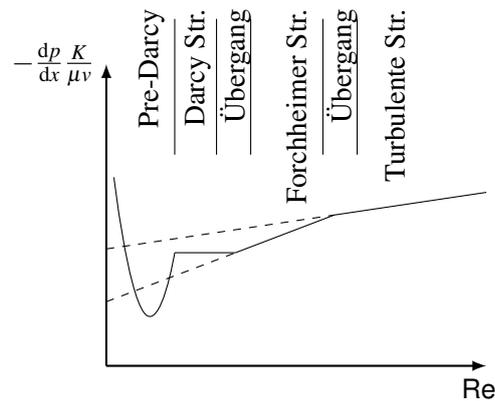
### 2.1.1.2. Strömungsregime

Zur Abgrenzung der Strömungsgebiete wird die Reynolds Zahl, das Verhältnis von Trägheitskräften zu viskosen Kräften, gebildet mit einer Geschwindigkeit, herangezogen. Es ist zweckmäßig, für die Geschwindigkeit eine einfach zu bestimmende Größe zu verwenden, die sich aus einem makroskopischen Volumenstrom durch einen gegebenen Querschnitt bilden lässt. Diese Geschwindigkeit, die die Porosität und auch die Tortuosität nicht berücksichtigt, wird Darcy Geschwindigkeit genannt und ist in Gl. 2.4 bereits verwendet worden. Mit der kinematischen Viskosität  $\nu$  und der charakteristischen Länge  $L$  ist in Gl. 2.9 eine Definition der Reynolds Zahl gegeben zu:

$$\text{Re} = \frac{\text{Trägheitskräfte}}{\text{viskose Kräfte}} = \frac{Lv}{\nu}. \quad (2.9)$$

Für ein Schüttgut aus zufällig verteilten Kugeln bestimmen Kececioglu und Jiang (1994) den Zusammenhang zwischen der Anwendbarkeit des Darcy Gesetzes und den Strömungsregimen bei Durchströmung mit Wasser, siehe Abb. 2.7. Bei kleinen Reynolds Zahlen, dem Pre-Darcy Flow, bestimmen die Wechselwirkungen zwischen Fluid und porösem Medium das Strömungsverhalten. In einem schmalen Bereich der Reynolds Zahl gilt der vom Darcy Gesetz vorhergesagte lineare Zusammenhang zwischen dem Druckgradient und Geschwindigkeit, d.h., der Term  $-\frac{dp}{dx}K/(\mu v)$  ist über der Reynolds Zahl konstant. Bei weiterer Erhöhung der Reynolds Zahl schließt sich nach einem Übergangsbereich das Gebiet der Forchheimer Strömung an. In diesem Strömungsregime, das durch Trägheitskräfte beeinflusst ist, werden erste Grenzschichten in den Poren gebildet. Daraus folgt ein nichtlinearer Zusammenhang zwischen Druckgradient und der Strömungsgeschwindigkeit. Bei weiterer Erhöhung der Reynolds Zahl folgt nach einem Übergang ein Strömungsregime, in dem sich erste Wirbel bilden. Für größeres  $\text{Re}$  liegt turbulente Strömung vor (Neumann, 2007).

Soll ein Bezug zu experimentellen Messungen hergestellt werden, kann Zhong et al. (2011) aufgegriffen werden, um die Gültigkeit des Darcy Gesetzes einfach zu überprüfen. Sie messen zunächst  $q \propto \Delta p$  für kleine Druckdifferenzen  $\Delta p$  entlang einer Strecke  $x$  mit der Darcy Geschwindigkeit  $v$ . Für kleine  $\Delta p$  gibt es einen linearen Zusammenhang, aus dem sich die Permeabilität berechnen



**Abb. 2.7.:** Zusammenhang zwischen der Anwendbarkeit des Darcy Gesetzes und den Strömungsregimen bei Durchströmung von zufällig verteilten Kugeln mit Wasser nach Kececioglu und Jiang (1994).

lässt. Die Ausgangsgleichung bei Zhong et al. (2011) lautet mit dem Trägheitskoeffizienten  $\beta$ :

$$-\frac{dp}{dx} = \frac{\mu v}{K} + \beta \frac{\rho v^2}{\sqrt{K}}. \quad (2.10)$$

Mit dieser Permeabilität wird die Reynolds Zahl auf Basis der Permeabilität,  $Re_K$ , und der Reibungsfaktor  $f$  berechnet:

$$f = \frac{(-dp/dx)\sqrt{K}}{\rho v^2}, \quad (2.11)$$

$$Re_K = \frac{\rho v \sqrt{K}}{\mu}. \quad (2.12)$$

Reine Darcy Strömung bedeutet somit:

$$f = \frac{1}{Re_K}. \quad (2.13)$$

Mit Trägheitseinfluss gilt:

$$f = \frac{1}{Re_K} + \beta. \quad (2.14)$$

Gl. 2.10 berücksichtigt keinen Gravitationseinfluss. Wird die Gravitation bei senkrechter Durchströmung berücksichtigt, ergibt sich somit ein modifizierter Reibungsfaktor  $f^*$ , alternativ zu Gl. 2.11:

$$f^* = \frac{(-dp/dx \pm \rho |g|)\sqrt{K}}{\rho v^2}. \quad (2.15)$$

Gl. 2.13 und 2.14 gelten somit weiterhin auch mit dem modifizierten Reibungsfaktor  $f^*$ . Das Vorzeichen vor dem Gravitationsterm richtet sich danach, ob vertikale Strömung in Richtung der Schwerkraft (+) oder entgegner der Schwerkraft (-) betrachtet wird.

### 2.1.1.3. Imbibition

Wird ein poröses Medium in Kontakt mit der freien Oberfläche einer Flüssigkeit gebracht, erfolgt ein Aufsaugen der Flüssigkeit mit Dochteffekt durch Kapillarwirkung, sprich Imbibition (Dullien, 1992; Masoodi, 2010). Imbibition ist die spontane Absorption eines Fluids in ein poröses Medium unter Wirkung des Kapillardrucks (Dullien, 1992). Bei der spontanen Imbibition ist die treibende Kraft die Kapillarkraft. Der Druckabfall über dem System entspricht dem Kapillardruck. Bei der freien spontanen Imbibition wird ein poröses Medium, das eine nicht-benetzende Phase enthält (z.B. Luft), in Kontakt mit einer benetzenden Phase (z.B. Wasser) gebracht. Die benetzende Phase verdrängt spontan einen Teil der nicht-benetzenden Phase. Hier ist die Rate der spontanen Imbibition festgelegt durch den Widerstand des porösen Mediums gegenüber der Strömung. Als ein Maß für diesen Widerstand kann die (reziproke) Permeabilität gesehen werden. Je größer die Permeabilität ist, desto besser ist die Leitfähigkeit und damit desto geringer der Widerstand. Bei der kontrollierten spontanen Imbibition kann die Rate geringer sein als bei der freien Imbibition, weil ein externer Widerstand dies begrenzt oder aber die Rate wird durch eine Pumpe festgelegt. In letzterem Fall, unter Verwendung einer Pumpe, spricht man auch von erzwungener Imbibition. Bei der erzwungenen Imbibition ist der Druckabfall über dem System größer als der Kapillardruck.

### 2.1.2. Wechselwirkungen zwischen den durchströmenden Phasen

Da hier Multiphasenströmungen betrachtet werden, sind Wechselwirkungen zwischen den durchströmenden Phasen von großer Bedeutung. Es werden Grundbegriffe im Zusammenhang von Wechselwirkungen beschrieben. Im Folgenden wird der Begriff der Oberflächenspannung (Kap. 2.1.2.1) und des Kapillardrucks (Kap. 2.1.2.2 und 2.1.2.3) behandelt.

#### 2.1.2.1. Oberflächenspannung

Im porösen Medium werden sich gekrümmte Phasengrenzflächen befinden. Die einfachste Form der Modellierung, die zu der Durchströmung Beihilfe tragen kann, ist mit Hilfe der Young-Laplace Gleichung gegeben. In einem kugelförmigen Tropfen mit Radius  $r$  herrscht aufgrund einer Oberflächenspannung  $\sigma$  an der Grenzfläche zwischen Tropfen und Gas ein erhöhter Druck, ausgedrückt durch Gl. 2.16:

$$p_{\text{in}} = p_{\text{out}} + \frac{2\sigma}{r} \quad (2.16)$$

#### 2.1.2.2. Kapillardruck auf der Mikroskala

Der Kapillardruck entsteht an der Grenzfläche zwischen zwei Fluiden aufgrund der Krümmung des Interface, siehe Abb. 2.8 mit einem Radius  $R$  und einem Benetzungswinkel  $\theta$ . Allgemein wird der Kapillardruck definiert als Differenz zwischen den Drücken der nicht benetzenden und der benetzenden Phase:

$$p_c = p_n - p_w. \quad (2.17)$$

Für kapillare Röhren gilt:

$$p_c = \frac{2\sigma \cos \theta}{R}. \quad (2.18)$$

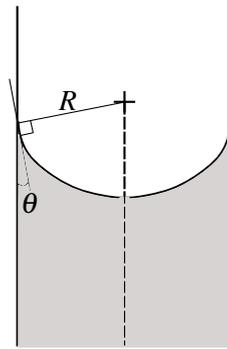


Abb. 2.8.: Kapillardruck bei kapillaren Röhren.

Masoodi (2010) stellt mehrere Möglichkeiten vor, für poröse Medien einen effektiven Radius  $R_e$  zu definieren, um Gl. 2.18 zu benutzen. Eine Betrachtung mittels äquivalenter Porendurchmesser als statistische Mittelwerte einer gegebenen Porengrößenverteilung für parallele oder serielle Kapillaren ist ebenfalls möglich (Scheidegger, 1974). Der Zusammenhang zwischen Benetzungswinkel  $\theta$  und den Oberflächenenergien der beteiligten Fluide ist nach der Young Gleichung gegeben (Young, 1805). Die Oberflächenenergie einer ebenen Oberfläche  $\sigma_{sv}$ , die Grenzflächenenergie  $\sigma_{sl}$  zwischen dem Festkörper und einem Flüssigkeitstropfen, der sich darauf befindet, und die Oberflächenspannung des Fluids  $\sigma_{lv}$  mit dem Benetzungswinkel  $\theta$  sind verbunden durch den Zusammenhang:

$$\cos \theta = \frac{\sigma_{sv} - \sigma_{sl}}{\sigma_{lv}}. \quad (2.19)$$

### 2.1.2.3. Kapillardruck auf der Makroskala

Nach Gl. 2.16 ist der Kapillardruck vom mittleren Radius der Mensicii innerhalb der Poren abhängig. Ein Maß für diesen mittleren Radius innerhalb der Poren stellt die Sättigung dar. Der mathematische Zusammenhang zwischen der Sättigung und dem Kapillardruck auf der Makroskala wird oftmals mit einer van Genuchten Parametrisierung ausgedrückt (vanGenuchten, 1980), durch ein van Genuchten-Mualem Modell (Mualem, 1976) oder durch eine Brooks-Corey Parametrisierung (Brooks und Corey, 1964). Der Zusammenhang zwischen dem Kapillardruck und der Sättigung ist nicht eindeutig, da sich Hysterese zeigen kann. Durch Einschluss der nicht benetzenden Phase kann es Mehrdeutigkeiten im Zusammenhang zwischen dem Kapillardruck und der Sättigung für mehrmalige Drainage geben. Die physikalischen Gründe sind in der Hysterese des Benetzungswinkels und in der Porengeometrie zu suchen, siehe Abb. 2.9 (Bear, 1991).

Ein häufig verwendeter Ansatz für den Kapillardruck wird mit der Leverett J-Funktion  $J(s)$  (Leverett, 1941) gebildet (Udell, 1985; Bear, 1991; Kaviani, 1995; Rahli et al., 1996):

$$p_c = \sigma \sqrt{\frac{\phi}{K}} \underbrace{(1.263(1-s)^3 - 2.120(1-s)^2 + 1.417(1-s))}_{J(s)}. \quad (2.20)$$

Gl. 2.20 beinhaltet außerdem den Einfluss der Oberflächenspannung  $\sigma$ , der Permeabilität  $K$  und der Porosität  $\phi$ .

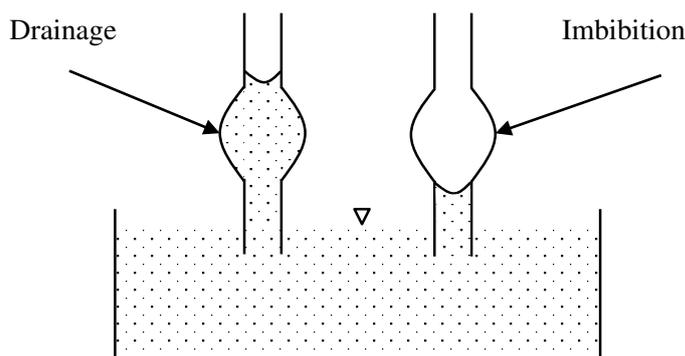


Abb. 2.9.: Kapillare Hysterese aufgrund der Porengeometrie.

### 2.1.3. Wärmeleitung und Verdampfung in porösen Medien

Im Folgenden werden einige grundlegende Konzepte für die Wärmeleitfähigkeit (Kap. 2.1.3.1) und Zusammenhänge bei der Verdampfung von Multikomponentenfluiden (Kap. 2.1.3.2) erläutert.

#### 2.1.3.1. Wärmeleitung

Im Rahmen der Betrachtung als REV ist es zweckmäßig, die effektive Wärmeleitfähigkeit zu betrachten. Diese lässt sich in einfachen Fällen nach sogenannten Lumped Parameter Modellen oder einem Composite Layer Modell, auch Krischer-Esdorn Modell genannt, modellieren (Krischer, 1978; Aichlmayr und Kulacki, 2006; Gerstner et al., 2009, 2012). Das Lumped Parameter Modell geht davon aus, dass für periodische Strukturen die effektive Wärmeleitung aus einer Kombination von in Reihe und parallel geschalteten Wärmewiderständen dargestellt werden kann. Ein einfacher Zusammenhang für die effektive Wärmeleitfähigkeit des Fluids und des porösen Mediums, d.h.  $k_{f,eff}$  und  $k_{s,eff}$ , wird bei Shi und Wang (2011) verwendet in Form von Gl. 2.21 und Gl. 2.22: Die effektiven Wärmeleitfähigkeiten ergeben sich durch Gewichtung mit der Porosität  $\phi$ . Die Wärmeleitfähigkeit des Fluids  $k_f$  wird mit der sättigungsgewichteten Wärmeleitfähigkeit der beteiligten Phasen, d.h.  $k_w$  und  $k_n$ , berechnet:

$$k_{f,eff} = \phi k_f \quad \text{mit } k_f = s k_w + (1 - s) k_n, \quad (2.21)$$

$$k_{s,eff} = (1 - \phi) k_s. \quad (2.22)$$

#### 2.1.3.2. Verdampfen von Multikomponentenfluiden

Betrachtet werden  $P$  Phasen aus  $K$  Komponenten (Stephan et al., 2010). Jede Phase ist eindeutig festgelegt durch den Druck, die Temperatur und die Zusammensetzung der einzelnen Komponenten. Damit sind die intensiven Zustandsfunktionen bekannt. Das bedeutet, dass jede Phase durch eine Fundamentalgleichung  $U(S, V, n_1, n_2, \dots, n_K)$  eindeutig charakterisiert wird. Sind Temperatur, Druck und die chemischen Potentiale jeder Komponenten in allen Phasen gleich, herrscht Gleichgewicht. Die Gleichgewichtsbedingungen haben zur Folge, dass nicht alle intensiven Größen  $T$ ,  $p$  und die Molenbrüche in allen Phasen frei gewählt werden können. Allgemein lassen sich die Freiheitsgrade, also die Anzahl der intensiven Parameter in einem im Gleichgewicht befindlichen System, für ein System aus  $P$  Phasen und  $K$  Komponenten bestimmen. Bei  $K$  Komponenten gibt es

in jeder Phase als intensive Variablen: Temperatur  $T$ , Druck  $p$  und  $K - 1$  unabhängige Molenbrüche  $x_1, x_2, \dots, x_{K-1}$ . In einer Phase gibt es also  $K - 1 + 2$  intensive Variablen. In der nächsten Phase bleiben Temperatur und Druck unverändert, aber die Molenbrüche können andere Werte annehmen. Es ergibt sich also  $2(K - 1) + 2$  intensive Variablen für zwei Phasen. Für  $P$  Phasen gibt es somit  $P(K - 1) + 2$  intensive Variablen. Die chemischen Potentiale jeder Komponente sind in allen Phasen  $k$  gleich, d.h.  $\mu_k^1 = \mu_k^2$  für  $k = 1, 2, \dots, K$ . Die Zahl der Freiheitsgrade ist somit durch die Phasenregel von Gibbs berechenbar zu  $Z = P(K - 1) + 2 - (P - 1)K$  bzw. mit:

$$Z = K + 2 - P. \quad (2.23)$$

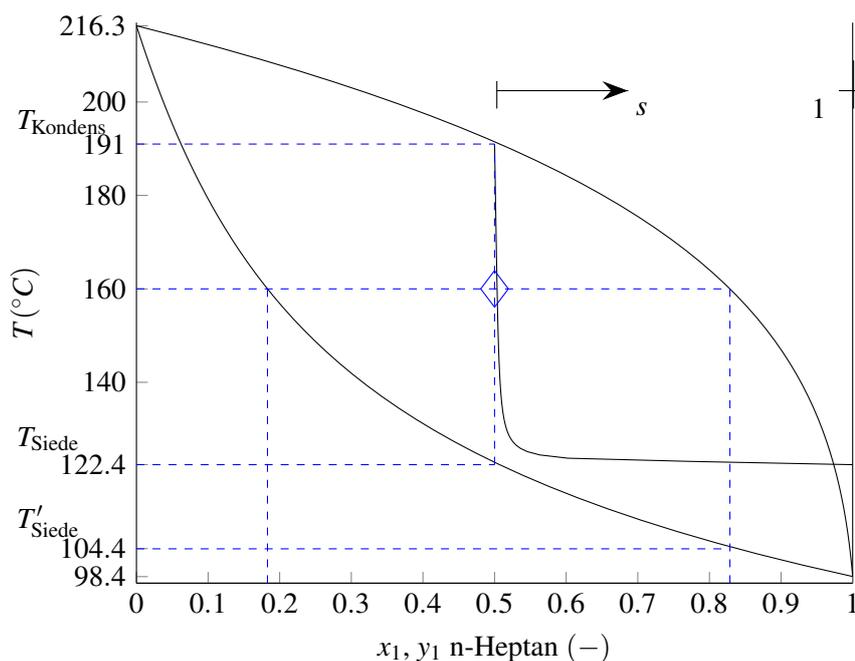
Im thermodynamischen Nichtgleichgewicht kann es Unterschiede in Temperatur, Druck und in den chemischen Potentialen jeder Teilchenart in den Phasen geben. Außerdem ist bei gekrümmten Oberflächen der Fluiden noch der höhere Druck aufgrund der Oberflächenspannung zu beachten. Durch die gekrümmte Phasengrenzfläche kann dies zu einer Dampfdruckreduktion, einer Reduktion des chemischen Potentials, einer Überhitzung der Flüssigkeit und zu einer Erhöhung der Verdampfungswärme führen (Kaviany, 1995). Im Folgenden wird sich auf ideale binäre Mischungen im Gleichgewicht beschränkt. vanStralen (1970) zeigt, dass der Wärmestrom, der zum vollständigen Verdampfen (dryout heat flux, DHF) notwendig ist, für Blasensieden unter Umständen für gewisse Konzentrationen höher ist als für die Reinstoffe. Diese Konzentrationen liegen eher bei kleinen (Mol-)Anteilen des Leicht sieders vor. Experimentelle Werte von Reddy und Lienhard (1989), die binäres Blasensieden auf kleinen horizontalen Drähten untersuchen, zeigen, dass der maximale DHF bei 2.3 Mol% Ethanol zu beobachten ist, siehe auch Pruzan et al. (1990); Wang et al. (1996c); Wang et al. (1996d). Weitere Quellen zur Verdampfung von Multikomponentenfluiden in porösen Medien sind Pruzan et al. (1990); Wang und Cheng (1997); Class (2001). Abb. 2.10 zeigt das isobare Siedediagramm (Vapour Liquid Equilibrium, VLE) für die Mischung n-Heptan(1)/n-Dodekan(2) sowie den Verlauf der Sättigung im Zweiphasengebiet, mit zweiter Abszissenachse.

Für eine beliebige Konzentration und Temperatur (hier  $T = 160^\circ\text{C}$  und  $x_1 = 0.5$ ), siehe die Markierung  $\diamond$ , sind die Siedetemperatur (hier  $T_{\text{Siede}} = 122.9^\circ\text{C}$ ) und die Kondensationstemperatur (hier  $T_{\text{kondens}} = 191.5^\circ\text{C}$ ) eingezeichnet. Die flüssige Phase entspricht hier im Gleichgewichtszustand ca.  $x_1^e = 0.182$ , die gasförmige Phase ca.  $y_1^e = 0.83$ . Das Superscript  $e$  gibt an, dass es sich um Gleichgewichtswerte handelt (equilibrium). Der Volumenanteil der Flüssigphase, d.h. die Sättigung, nimmt im Bereich nahe der Siedetemperatur stark ab. Bei höheren Temperaturen, nahe der Kondensationslinie, nimmt die Sättigung nur noch wenig ab. Um die Molanteile des Dampfes ( $y_i$  für  $i \in \{1, 2\}$ ) bzw. der Flüssigkeit ( $x_i$ ) im Zweiphasengebiet zu erhalten, werden Raoult's Gesetz und Dalton's Gesetz für ideale Mischungen kombiniert. Raoult's Gesetz lautet, dass der Partialdruck der Komponente 1 im Gas  $p_1$  direkt proportional zum Dampfdruck der Komponente 1,  $p_1^0$ , ist. Die Proportionalitätskonstante ist der Molanteil der Komponente 1 in dem Flüssigkeitsgemisch  $x_1$ , siehe Gl. 2.24. Dies ist eine gute Näherung für kleine Massenanteile der Komponente 1 im Gas, für große Massenanteile der Komponente 1 im Gas ist das Henry Gesetz besser geeignet (Class, 2001).

$$p_1 = p_1^0 x_1. \quad (2.24)$$

Dalton's Gesetz sagt aus, dass der Partialdruck der Komponente 1 im Gas  $p_1$  direkt proportional zum Totaldruck  $p_{\text{total}}$  im Gas ist. Die Proportionalitätskonstante ist der Molenbruch der Komponente 1 in dem Gasgemisch  $y_1$ :

$$p_1 = p_{\text{total}} y_1. \quad (2.25)$$



**Abb. 2.10.:** Isobares Siedediagramm für die Mischung n-Heptan(1), n-Dodekan(2) bei  $p = 1$  atm sowie Verlauf der Sättigung im Zweiphasengebiet mit den Gl. 2.24 bis 2.26. Die Berechnung der Sättigung basiert auf der Methodik von Kap. 3.2.1.

Wird Gl. 2.24 mit Gl. 2.25 kombiniert, so wird erhalten:

$$x_1 = \frac{y_1 p_{\text{total}}}{p_1^0}$$

Die Sättigungsdampfdrücke können für eine Reihe von Fluiden in einem bestimmten Temperaturbereich durch die Antoine Gleichung berechnet werden:

$$\lg(p_1^0) = A - \frac{B}{C + T} \quad (2.26)$$

Die Antoine Koeffizienten  $A$ ,  $B$  und  $C$  können Tabellenwerten in einem gültigen Temperaturbereich entnommen werden. Die Einheiten vom Druck  $p$  und der Temperatur  $T$  in Gl. 2.26 können dabei je nach Stoff variieren, siehe Tab. 2.1 für Ethanol(1)/Wasser(2) und Tab. 4.6 für n-Heptan(1)/n-Dodekan(2).

Die Berechnungsmethodik des isobaren Siedediagramms für ein binäres Gemisch ist nur iterativ möglich (Lüdecke und Lüdecke, 2000). Für einen gegebenen Massenanteil einer Komponente und eine gegebene Temperatur kann somit der Massenanteil der flüssigen Phase und der Massenanteil der gasförmigen Phase (bzw. deren Molanteile) im Gleichgewicht berechnet werden. Für reale binäre Gemische kann Gl. 2.24 erweitert werden um einen Aktivitätskoeffizienten  $\gamma$ :

$$p_1 = p_1^0 x_1 \gamma_1 \quad (2.27)$$

Dieser Aktivitätskoeffizient lässt sich einem Tabellenwerk entnehmen oder mit den Margules Gleichungen

**Tab. 2.1.:** Antoine Parameter für Ethanol (Superscript  $\alpha = 1$ ) und Wasser ( $\alpha = 2$ ) (Lüdecke und Lüdecke, 2000). Die Einheiten sind dimensionslos, falls in Gl. 2.26 der Druck dimensionslos gemacht wird, indem durch mmHg geteilt wird und indem die Temperatur durch  $^{\circ}\text{C}$  geteilt wird.

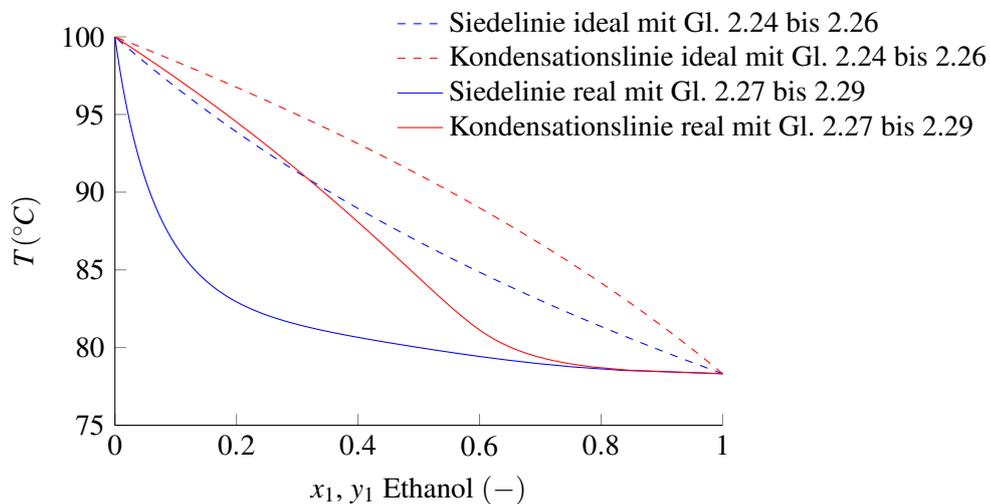
| Parameter    |              | Wert    | Einheit |
|--------------|--------------|---------|---------|
| $A^{\alpha}$ | $\alpha = 1$ | 8.20417 | –       |
|              | $\alpha = 2$ | 8.07131 | –       |
| $B^{\alpha}$ | $\alpha = 1$ | 1642.89 | –       |
|              | $\alpha = 2$ | 1730.63 | –       |
| $C^{\alpha}$ | $\alpha = 1$ | 230.3   | –       |
|              | $\alpha = 2$ | 233.426 | –       |

chungen berechnen:

$$\ln \gamma_1 = x_2^2 (A_{12} + 2(A_{21} - A_{12})x_1), \quad (2.28)$$

$$\ln \gamma_2 = x_1^2 (A_{21} + 2(A_{12} - A_{21})x_2), \quad (2.29)$$

mit den Koeffizienten  $A_{12}$  und  $A_{21}$ , die für eine Fluidkombination gültig sind. Ein Beispiel für diese Modellierung mit idealer Gasphase und realer Flüssigphase ist in Abb. 2.11 dargestellt für die Mischung Ethanol und Wasser. Die Margules Parameter nehmen für diese Mischung die Werte an:  $A_{12} = 1.6022, A_{21} = 0.7947$  (Lüdecke und Lüdecke, 2000).



**Abb. 2.11.:** Isobares Siedediagramm für die Mischung Ethanol(1), Wasser(2) bei  $p = 1 \text{ atm}$ .

### 2.1.4. Dimensionslose Kennzahlen

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit werden Parametervariationen anhand von dimensionslosen Kennzahlen durchgeführt. Neben der bereits genannten Reynolds Zahl werden die Kennzahlen erläutert, die in den späteren Kapiteln dieser Arbeit Verwendung finden.

Die Biot Zahl gibt beim Wärmetransport durch die Oberfläche eines Körpers das Verhältnis vom äußeren Wärmeübergang in Form des Wärmetransports von der Oberfläche zum Fluid, zum inneren Wärmeübergang in Form der Wärmeleitung durch den Körper an. Formal ähnelt sie der Nusselt Zahl, wird jedoch statt mit der Wärmeleitfähigkeit des Fluids mit der Wärmeleitfähigkeit des Festkörpers gebildet. Des Weiteren hängt sie von dem Wärmeübergangskoeffizienten an der Oberfläche  $\bar{h}_{sf}$  und einer charakteristischen Länge  $L$  ab. In porösen Medien kann sie als dimensionsloser Temperaturgradient an den inneren Oberflächen der Porenräume interpretiert werden (Wang und Wang, 2006a; Lindner et al., 2015):

$$\text{Bi} = \frac{\bar{h}_{sf}L}{k_s}. \quad (2.30)$$

Die Stanton Zahl ist ein Maß für die relative Kühlintensität. Sie bildet sich formal aus den Definitionen der Nusselt, Reynolds und Prandtl Zahl:  $\text{St} = \text{Nu}/(\text{RePr})$ . Wang und Wang (2006a) definieren die Stanton Zahl mit der spezifischen isobaren Wärmekapazität des Fluids  $c_{p,f}$  als:

$$\text{St} = \frac{\bar{h}_{sf}}{\dot{m}c_{p,f}}. \quad (2.31)$$

Es soll hier betont werden, dass sich diese Definition der Stanton Zahl auf einen reduzierten Wärmestrom für poröse Medien bezieht. Andere Definitionen der Stanton Zahl im Bereich des Wärme- und Stofftransports können von dieser Definition abweichen: In der Aerodynamik wird die Stanton Zahl als dimensionslose Wärmestromdichte verstanden in Form des Verhältnisses der gesamten übergehenden Wärme zur konvektiv transportierten Wärme. In Kap. 4.1.2.4 wird eine leicht abweichende Definition der Stanton Zahl benutzt, die sich an Wang und Wang (2006a) anlehnt. Lindner et al. (2015) sehen in der Stanton Zahl ein Maß für die Menge an eingebrachtem Wärmestrom durch eine Neumann Randbedingung  $\dot{q}$  entlang einer Wand mit Koordinate  $y$  und der beheizten Länge  $L$ :

$$\text{St} = \frac{\text{gesamter zugeführter Wärmestrom}}{\text{zur Verdampfung notwendiger Wärmestrom}} = \frac{\int_1^2 \dot{q} dy}{L \dot{q}_{\text{dryout}}}. \quad (2.32)$$

Der dryout Wärmestrom  $\dot{q}_{\text{dryout}}$  ist der Wärmestrom, der notwendig ist, um einen Fluidmassenstrom vollständig zu verdampfen (Kaviany, 1995). Das Mobilitätsverhältnis ist ein Maß dafür, wie stabil voraussichtlich das Eindringen in ein poröses Medium bei nicht mischbaren Fluiden ist:

$$\text{Mo} = \frac{\mu_v k_{rl}}{\mu_l k_{rv}}. \quad (2.33)$$

Ist das Mobilitätsverhältnis größer als eins, so gilt dies als günstig für stabiles Eindringen. Das Mobilitätsverhältnis wird in der Literatur auch definiert mit Hilfe des Verhältnisses der Viskositäten zwischen eindringendem und verdrängtem Fluid bei Imbibition:

$$\text{Mo} = \frac{\mu_{\text{eindringend}}}{\mu_{\text{verdrängt}}}. \quad (2.34)$$

Die Pécelet Zahl definiert Kaviany (1995) mit einer Länge  $L$  und Geschwindigkeit  $u$  zu:

$$\text{Pe} = \frac{\text{konvektiv transportierte Wärme}}{\text{geleitete Wärmemenge}} = \frac{\rho c_p u L}{k_f}. \quad (2.35)$$

Von Li et al. (2010b) und Lindner et al. (2015) wird  $\text{Pe}$  verwendet als:

$$\text{Pe} = \frac{uL}{0.0033 \text{ m}^2/\text{s}}. \quad (2.36)$$

Da Li et al. (2010b) die Bedeutung des Zahlenwerts  $0.0033 \text{ m}^2/\text{s}$  nicht erörtern, ist zu vermuten, dass dieser Zahlenwert die Wärmeleitfähigkeit von flüssigem Wasser wiedergibt. Es gilt in etwa für flüssiges Wasser:  $2.5 \times 10^4 \times k_f / \rho / c_p = 0.0033 \text{ m}^2/\text{s}$ . Die Konstante  $2.5 \times 10^4$  wurde vermutlich beliebig von Li et al. (2010b) gewählt. Zur besseren Vergleichbarkeit der Ergebnisse dieser Arbeit mit den Ergebnissen von Li et al. (2010b) wird der Zahlenwert übernommen. Eine weitere Kennzahl zur Beurteilung des Verhältnisses aus konvektiver zu geleiteter Wärmemenge wird von Li et al. (2010b) und Lindner et al. (2015) mit der Rayleigh Zahl  $\text{Ra}$  verwendet, vgl. auch Bear (1991):

$$\text{Ra} = \frac{Kg\rho_l c_{p,l}L}{\nu_l k_{f,\text{eff}}}. \quad (2.37)$$

## 2.2. Modellierung des Wärme- und Stofftransports in porösen Medien

Zunächst folgen in Kap. 2.2.1 einfache Modelle für die Massenerhaltung, -transport und die Impulserhaltung. Hierbei wird sich auf rein isotherme Modelle beschränkt, die keine Energiegleichung lösen. Auch exakte und analytische Lösungen existieren für spezielle Annahmen und Randbedingungen. Da diese Annahmen sehr restriktiv sind, wird im Rahmen dieser Arbeit nur kurz in Kap. 2.2.1.3 darauf eingegangen.

Wird von diesen einfachen Modellen abgesehen, sind die Ansätze des Stands der Forschung zur Modellierung der Erhaltungsgleichungen vielfältig unter jeweils unterschiedlichen Annahmen, die die Gültigkeit und den Anwendungsbereich bestimmen. Eine Übersicht über Modelle wird in Kap. 2.2.2 gegeben. In Kap. 2.2.2.1 werden Multiphase Flow Modelle (MFM) erläutert und in Kap. 2.2.2.2 folgen Multiphasen Mischungsmodelle (MMM), deren Typus für die Modelle dieser Arbeit verwendet werden.

Abb. 2.12 zeigt ein Schema zur Strukturierung der Modelle, der Modellentwicklung und deren Anwendung. Blau hinterlegte Elemente stehen für Kategorien von Modellen. Weiß hinterlegte Elemente stehen für Lösungsschemata dieser kategorisierten Elemente, die dem Stand der Forschung entsprechen und somit nicht selbst entwickelt wurden im Rahmen dieser Arbeit. Grün hinterlegte Elemente stehen für die Anwendung eines Modells oder für die Erarbeitung eines Modells, das im Rahmen dieser Arbeit entstanden ist.

Die Modellierung, die in dieser Arbeit verwendet wird, basiert auf zwei Grundpfeilern. Zum einen wird ein Modul der MATLAB<sup>®</sup> Reservoir Simulation Toolbox (MRST) (Lie et al., 2012), das als open source vorhanden ist (Free Software Foundation, 1991), verwendet. Die Verwendung findet statt, indem die Funktionalität unverändert angewandt wird auf zweiphasige Strömung mit konstanter Dichte (Kap. 2.2.1.1) für ein instationäres Problem, das in Kap. 5.3.3 zur Validierung herangezogen wird. Die zu Grunde liegenden Gleichungen wurden auch in der Software COMSOL<sup>®</sup>

umgesetzt.

Zum anderen findet sich eine einfache Umsetzung der Massen- und Impulserhaltung mit konstanter Dichte für einphasige, stationäre Strömung in MRST, siehe Kap. 2.2.1.2. Eine eigene Erweiterung dieser Toolbox, für Strömung mit veränderlicher Fluidichte ( $\rho \neq \text{const.}$ ) wird in Kap. 3.1.1.1 beschrieben. Diese Erweiterung wird benötigt, da die Massen- und Impulserhaltung für Mischungsmodelle vom selben Typus ist wie die einphasige Massen- und Impulserhaltung. Mit dieser Analogie kann der Löser aus Kap. 3.1.1.1 für Multiphasen-, Multikomponentenmischungen heran gezogen werden, was in Kap. 3 beschrieben wird. Die Anwendung der Mischungsmodelle wird anhand von Testfällen in Kap. 4 beschrieben. In Kap. 5 wird zu einer experimentellen Datenbasis eine Validierung dieser Modelle gezeigt.

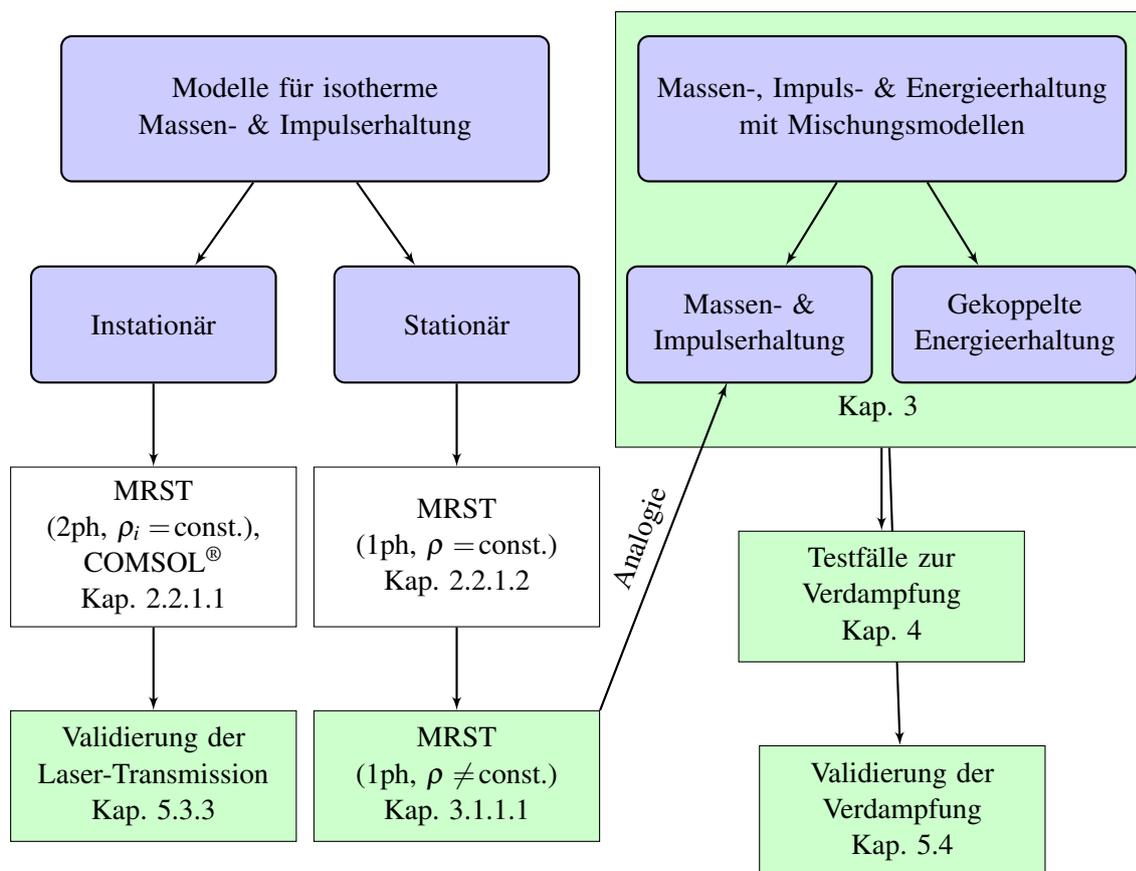


Abb. 2.12.: Schematische Strukturierung der Modelle, der Modellentwicklung und deren Anwendung.

### 2.2.1. Einfache Modelle für isotherme Massenerhaltung, -transport und Impulserhaltung

Die Sättigungsgleichung, Kap. 2.2.1.1, stellt eine einfache Form der Massenerhaltung und des Massentransports dar. In Kap. 2.2.1.2 wird erörtert, dass eine Verbindung der Massenerhaltung und der Darcy Gleichung für stationäre Strömung eine Poisson Gleichung für den Druck ergibt. Beide Modelle für diese Erhaltungsgleichungen sind in der Toolbox MRST implementiert und dienen zur

Validierung der experimentellen Daten in Kap. 5.3.3 und, in einer Erweiterung der Methodik von Kap. 2.2.1.2, zur Modellierung von Mischungsmodellen.

### 2.2.1.1. Sättigungsgleichung

Die Massenerhaltung in einer Formulierung mit der Sättigung  $s_k$  und der Transportgeschwindigkeit  $\vec{u}_k$  für die Phase  $k \in \{l, v\}$  mit einer Quelle  $q_k$  lautet nach der Anwendung einer Volumenmittelung (Bjørnarå und Aker, 2008):

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_k s_k) + \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k) = q_k. \quad (2.38)$$

Die Phasengeschwindigkeit  $\vec{u}_k$  kann mit den kapillaren Kräften, der Gravitation, den viskosen Kräften und Quellen/Senken berechnet werden (Bear, 1988; Chen et al., 2006; Bjørnarå und Aker, 2008). Die Phasengeschwindigkeit (Darcy Geschwindigkeit) ist mit Gl. 2.4 und 2.6:

$$\vec{u}_k = -\frac{\mathbf{K}k_{r,k}}{\mu_k} (\nabla p_k + \rho_k g \nabla z). \quad (2.39)$$

Der Ansatz nach der fractional flow formulation verwendet die Sättigung einer Phase und einen globalen Druck als Primärvariablen. Der Begriff des globalen Drucks findet sich in der Literatur auch synonym mit totalem Druck als Abgrenzung zu Phasendrückeren. Die Multiphasen Strömung wird behandelt als eine Gesamtströmung einer Mischung mit Geschwindigkeit  $\vec{u}_{\text{total}}$  und beschreibt die einzelnen Phasen als Anteile dieser Gesamtströmung. Es werden zwei Gleichungen, für den globalen Druck und die Sättigung, benötigt. Diese beiden Gleichungen werden gefunden, indem (1.) die Massenerhaltung, Gl. 2.38, für beide Phasen addiert wird; (2.) die Massenerhaltung für beide Phasen subtrahiert wird. Für (1.) wird der Umstand genutzt, dass gilt:  $\sum_k s_k = 1$  und angenommen, dass die jeweiligen Phasendichten konstant sind ( $\rho_k = \text{const.}$ , isotherm):

$$\sum_k \left( \frac{\partial}{\partial t} (\phi s_k) + \nabla \cdot \vec{u}_k \right) = \frac{\partial \phi}{\partial t} + \nabla \cdot (\underbrace{\vec{u}_l + \vec{u}_v}_{= \vec{u}_{\text{total}}}) = \frac{q_l}{\rho_l} + \frac{q_v}{\rho_v}. \quad (2.40)$$

Für ein inkompressibles poröses Medium ergibt sich:

$$\nabla \cdot \vec{u}_{\text{total}} = \frac{q_l}{\rho_l} + \frac{q_v}{\rho_v}. \quad (2.41)$$

Es gilt also mit der Mobilität  $\lambda_k = k_{r,k}/\mu_k$  und dem Kapillardruck  $p_c = p_v - p_l$  (Gl. 2.17) für die Phasengeschwindigkeit der flüssigen Phase, der gasförmigen Phase und für die totale Geschwindigkeit:

$$\vec{u}_l = \frac{\lambda_l}{\lambda_l + \lambda_v} \vec{u}_{\text{total}} + \lambda_v \frac{\lambda_l}{\lambda_l + \lambda_v} \mathbf{K} (\nabla p_c + (\rho_l - \rho_v) \vec{g}), \quad (2.42)$$

$$\vec{u}_v = \frac{\lambda_v}{\lambda_l + \lambda_v} \vec{u}_{\text{total}} + \lambda_l \frac{\lambda_v}{\lambda_l + \lambda_v} \mathbf{K} (\nabla p_c + (\rho_l + \rho_v) \vec{g}), \quad (2.43)$$

$$\vec{u}_{\text{total}} = -\mathbf{K} ((\lambda_l + \lambda_v) \nabla p - (\lambda_l \rho_l + \lambda_v \rho_v) g \nabla z). \quad (2.44)$$

Die weiteren Umformungen werden im Anhang A erläutert. Die Sättigungsgleichung formuliert die Massenerhaltung der flüssigen Phase in Abhängigkeit von der totalen Geschwindigkeit und Termen, die nur von der Sättigung abhängen. Für inkompressible Fluide und ein inkompressibles

poröses Medium ergibt sich die Sättigungsgleichung mit  $s = s_l$  als:

$$\phi \frac{\partial s}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{\lambda_l}{\lambda_l + \lambda_v} \left( \vec{u}_{\text{total}} + \mathbf{K} \lambda_v \frac{dp_c}{ds} \nabla s + \mathbf{K} \lambda_v (\rho_l - \rho_v) G \right) \right) = \frac{q_l}{\rho_l}. \quad (2.45)$$

Die Vorgehensweise in MRST zur Lösung der Sättigungsgleichung für instationäre Strömung bei konstanter Dichte und erzwungener Imbibition ist in Tab. 2.2 in Pseudo code zusammengefasst.

---

```

Gitter generieren, Fluid definieren, Randbedingungen setzen
inkompressible Strömung initialisieren
Iteration für n Zeitschritte
    Transportgleichung 2.45 lösen:
        Jacobi-Matrix aufstellen
        Newton-Raphson Iteration
    Nach dem Druck für inkompressible Strömung lösen, siehe Kap. 2.2.1.2
Ende
    
```

---

**Tab. 2.2.:** Pseudo Code für das Vorgehen in MRST für instationäre Fluidausbreitung.

Die Sättigungsgleichung ist eine parabolische Differentialgleichung. Falls das Wirken des Kapillardrucks vernachlässigt wird, entfällt der diffusive Term  $\mathbf{K} \lambda_v \frac{\lambda_l}{\lambda_l + \lambda_v} \frac{dp_c}{ds} \nabla s$  und der Typus der Sättigungsgleichung wechselt zu einer hyperbolischen Differentialgleichung.

### 2.2.1.2. Die Poisson Gleichung für den Druck für stationäre Strömung mit konstanter Dichte

Es wird im Folgenden von stationärer Strömung eines Fluids mit konstanter Dichte durch ein poröses Medium ausgegangen. Die Darcy Gleichung 2.4 wird kombiniert mit der Massenerhaltung, Gl. 2.38 und  $\Lambda = \mathbf{K}/\mu$ , zu einer Gleichung vom Typ:

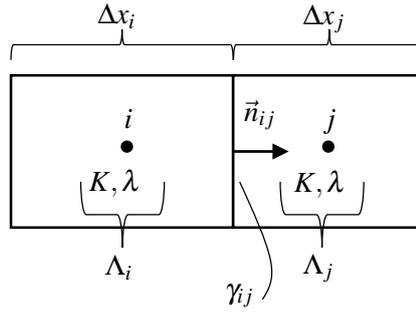
$$-\nabla \cdot \Lambda \nabla p = r, \quad (2.46)$$

mit dem Druck  $p$  als Primärvariable. Der Term auf der rechten Seite  $r$  steht für Quellen/Senken in der Massenerhaltung oder Flüsse an den Rändern. Für Gl. 2.46 erläutern Aarnes et al. (2007) eine numerische Lösung nach der Finite Volumen Methode. Nach der two-point flux approximation Methode (TPFA) wird  $\nabla p$  mit finiten Differenzen zwischen zwei Punkten diskretisiert, siehe Abb. 2.13.

Damit wird  $\nabla p$  ersetzt mit

$$\partial p_{ij} = \frac{2(p_j - p_i)}{\Delta x_i + \Delta x_j}. \quad (2.47)$$

In Abb. 2.13 kann ein Fluss  $v_{ij}$  durch das Interface  $\gamma_{ij}$  fließen. Mit der Transmissibilität  $t_{ij}$  kann dies



**Abb. 2.13.:** Schematische Darstellung eines  $\mathbf{K}$ -Orthogonalen Gitters für die inkompressible TPFA-Methode.

geschrieben werden als

$$\begin{aligned}
 v_{ij} &= - \int_{\gamma_{ij}} (\Lambda \nabla p) \cdot \vec{n} \, dv \\
 &= \partial p_{ij} \int_{\gamma_{ij}} \Lambda \, dv \\
 &= - |\gamma_{ij}| \Lambda_{ij} \partial p_{ij} \\
 &= 2 |\gamma_{ij}| \underbrace{\left( \frac{\Delta x_i}{\Lambda_{i,ij}} + \frac{\Delta x_j}{\Lambda_{j,ij}} \right)^{-1}}_{= t_{ij}} (p_i - p_j).
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

Für jede Zelle wird  $\mathbf{K}$  und  $\lambda$  im Zellzentrum definiert. Für den Fluss durch das Interface  $\gamma_{ij}$ , der als Produkt von Transmissibilität und Potentialgradient zu verstehen ist, sind interpolierte Werte auf  $\gamma_{ij}$  notwendig. Gl. 2.48 lässt sich umschreiben zu:

$$\sum_j t_{ij} (p_i - p_j) = \int_{\Omega_i} r \, dx. \tag{2.49}$$

In Matrixschreibweise geschrieben lautet diese Gleichung:

$$\mathbf{A} \cdot \vec{p} = \vec{q}, \tag{2.50}$$

mit den Einträgen  $a_{ik}$  (Zeile  $i$ , Spalte  $k$ ) in der Matrix  $\mathbf{A}$ , wobei:

$$a_{ik} = \begin{cases} \sum_j t_{ij} & \text{falls } k = i, \\ -t_{ik} & \text{falls } k \neq i \text{ und die Zelle } k \text{ ein Nachbar von } i \text{ ist,} \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases} \tag{2.51}$$

Das erste Element auf der Diagonalen von  $\mathbf{A}$  muss noch angepasst werden um eine eindeutige Lösung zu erhalten. Die Matrix  $\mathbf{A}$  ist somit schwach besetzt. Sie besteht aus einem tridiagonalen Teil, der den Ableitungen in Raumrichtung  $x$  entspricht, und zwei Banden neben der Hauptdiagonalen, die den Ableitungen in  $y$  entsprechen. Der Vorteil der TPFA-Methode ist die einfache Formulierung des Flusses, der durch nur zwei Punkte approximiert wird. Diese Methode ist jedoch nur dann

zulässig, falls jede Zelle ein Parallelepiped ist und gilt:

$$\vec{n}_{ij} \cdot \mathbf{K} \vec{n}_{ik} = 0, \quad \forall \Omega_i \subset \Omega, \quad \vec{n}_{ij} \neq \vec{n}_{ik}. \quad (2.52)$$

$\vec{n}_{ij}$  und  $\vec{n}_{ik}$  sind zwei nicht-parallele Normalenvektoren zu der Zelle. Das Gitter muss somit  $\mathbf{K}$ -orthogonal sein. Das bedeutet, dass der Permeabilitätstensor  $\mathbf{K}$  für ein kartesisches Gitter nur Einträge auf der Hauptdiagonalen haben darf. Ist dies nicht der Fall, so sind sogenannte Multipoint Flux-Approximation (MPFA) Schemata möglich, die auch für Gitter, die nicht  $\mathbf{K}$ -orthogonal sind, eine korrekte Approximation für den Fluss liefern. Die Toolbox MRST löst Gl. 2.46 für ein- oder zweiphasige Durchströmung eines porösen Mediums (Lie et al., 2012). Es wird somit die Darcy Gleichung und die inkompressible Massenerhaltungsgleichung auf dem Gebiet  $\Omega$  gelöst. Als Randbedingungen auf  $\partial\Omega$  können sowohl Neumann- als auch Dirichlet-Randbedingungen gesetzt werden. Alle Ränder, auf die keine Randbedingung aufgeprägt wurde, sind impermeable Wände. Zusammenfassend wird ein System von Differentialgleichungen gelöst:

$$\left. \begin{array}{l} \vec{u} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} \nabla p \quad \text{auf } \Omega \\ \nabla \cdot \vec{u} = \vec{q} \quad \text{auf } \Omega \\ \vec{u} \cdot \vec{n} = \vec{0} \quad \text{auf } \partial\Omega \end{array} \right\} \vec{u}_i = \mathbf{T}_i (\vec{e}_i p_i - \vec{\pi}_i). \quad (2.53)$$

Die Matrix  $\mathbf{T}_i$  enthält die Transmissibilitäten  $t_{ij}$ . Die Diskretisierung dieser Gleichungen lässt sich zum Beispiel mit der TPFA-Methode, Finite Elemente-Methoden, MPFA-Methoden oder mimetischen Finite-Differenzen Methoden vornehmen (Aarnes et al., 2007; Lie et al., 2012). Im Folgenden wird angenommen, dass ein konsistentes Schema der Diskretisierung nach Gl. 2.53 existiert.  $p_i$  sind die Drücke in den Zellen und  $\vec{\pi}_i$  ist der Vektor der Drücke an den Zellenflächen. Das System 2.53 lässt sich in einer hybriden Formulierung aufstellen. Dadurch wird ein positiv-definites System erhalten. MRST stellt ein lineares System auf in der Form:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B} & \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{C}^T & 0 & 0 \\ \mathbf{D}^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \vec{u} \\ -\vec{p} \\ \vec{\pi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{0} \\ \vec{q} \\ \vec{0} \end{bmatrix}. \quad (2.54)$$

$\mathbf{B}$  und  $\mathbf{C}$  sind block-diagonal und jeder Block entspricht einer Zelle. Die Matrix  $\mathbf{B}$  enthält die Inversen der Transmissibilitäten der Matrix  $\mathbf{T}_i$  und  $\mathbf{C}$  enthält  $\vec{e}_i = (1, \dots, 1)^T$ . Jede Spalte von  $\mathbf{D}$  steht für eine Fläche der Zellen und hat ein Element (äußere Flächen) bzw. zwei Elemente (innere Flächen) ungleich null. Das System aus Gl. 2.54 ist positiv definit und damit kann  $\mathbf{B}$  invertiert werden. Die erste Zeile entspricht somit dem Darcy Gesetz in der Formulierung der TPFA-Methode:

$$\vec{u} = \mathbf{B}^{-1} (\mathbf{C} \vec{p} - \mathbf{D} \vec{\pi}). \quad (2.55)$$

Die zweite Zeile formuliert die inkompressible Massenerhaltung für alle Zellen und die dritte Zeile die Kontinuität für alle Flüsse der Zellen. Die Lösung dieses Systems mittels Reduktion mit Schur-Komplement wird im Anhang C erläutert.

### 2.2.1.3. Lösungen bei vereinfachenden Annahmen

Es gibt exakte integrale Lösungen für Zweiphasenströmungen von zwei inkompressiblen Fluiden bei horizontaler, radialer Strömung und eindimensionaler Strömung. Diese Lösungen lassen sich aufstellen, falls es keinen Phasenwechsel gibt und Gravitation keine Rolle spielt. Dafür wird eine Ähnlichkeitstransformation, die Boltzmann Transformation, angewendet. Mit Hilfe der Ähnlichkeitsvariable  $\eta = x/\sqrt{t}$  ist schließlich die Formulierung einer exakten Lösung möglich (Pruess et al., 1987; McWhorter und Sunada, 1990; Wang und Cheng, 1997). Weitere Lösungen lassen sich für Gl. 2.45 erhalten, falls verschiedene Annahmen getätigt werden. Buckley und Leverett (1942) diskutieren eine Vereinfachung auf der Basis einer 1D Strömung, mit Vernachlässigung der Kapillarkräfte, ohne Gravitation und ohne Kompressibilität. Es existieren viele Arbeiten zur Lösung dieser Gleichung in der Literatur, siehe z.B. Rose (2001); Cueto-Felgueroso (2009); Goumiri et al. (2012).

### 2.2.2. Modelle für Massen-, Impuls- und Energieerhaltung in porösen Medien

Im Folgenden wird eine Übersicht über zwei verschiedene Kategorien für die makroskopische Behandlung der Massen-, Impuls- und Energieerhaltung in porösen Medien gegeben. Dies stellt keinen Anspruch auf Vollständigkeit dar, da auch Modelle auf der mikroskopischen Skala weite Verbreitung finden, die hier nicht im Detail beschrieben werden sollen. Eine Kategorisierung in Multiphase Flow Modelle (Kap. 2.2.2.1) und Mischungsmodelle (Kap. 2.2.2.2) ist zweckmäßig und wird hier vorgestellt.

#### 2.2.2.1. Multiphase Flow Model

Multiphase Flow Modelle werden auch bezeichnet als Separate Flow Model (SFM) (Abriola und Pinder, 1985; Bear, 1991; Xin et al., 2014). Die verschiedenen Phasen werden als eigenständige Fluide betrachtet mit individuellen thermodynamischen Eigenschaften, Transporteigenschaften und Strömungsgeschwindigkeiten. Die Erhaltungsgleichungen werden für jede Phase einzeln gelöst und geeignete Kopplungsbedingungen z.B. an den Interfaces zwischen den Phasen aufgestellt. Der Umstand, dass die Gesamtmasse erhalten bleibt, kann genutzt werden, um für die Massenerhaltung nur noch eine Erhaltungsgleichung für zwei Phasen lösen zu müssen. Die makroskopischen Gleichungen können heuristisch hergeleitet werden oder durch die Methode der Volumenmittlung (Hassanizadeh und Gray, 1980; Whitaker, 1986). Die Modelle dieser Kategorie zeichnen sich durch eine große Anzahl von Primärvariablen aus und ihre stark nichtlinearen Gleichungen. Entsprechend sind exakte Lösungen nur für stark vereinfachte Beispiele möglich. Die sich bewegenden Phasengrenzen sind a priori nicht bekannt und müssen daher durch die Rechnung verfolgt werden. Dies bedeutet einen hohen numerischen Aufwand durch komplexe Koordinatenfunktionen oder erneutes Vernetzen (Wang und Cheng, 1997). In diese Kategorie der Multiphase Flow Modelle fällt auch das Separate Phase Model (SPM) von Ramesh und Torrance (1990), die bei Phasenwechsel jeweils sowohl für die unterkühlte und überhitzte Region, als auch für das Verdampfungsgebiet die Erhaltungsgleichungen einzeln lösen. Die Verfolgung der Phasengrenzen und die große Anzahl an Primärvariablen stellen auch hier eine Herausforderung dar.

Eine Umsetzung von einem Multiphase Flow Model wird anhand von dem open source Modul für DUNE, DuMu<sup>x</sup>, erläutert (Flemisch et al., 2011). In DuMu<sup>x</sup> werden zwei Arten von Modellen benutzt: Voll gekoppelte und entkoppelte Modelle. Bei den voll gekoppelten Modellen wird

ein Strömungssystem mit stark gekoppelten Gleichungen beschrieben. Diese Gleichungen können die Massenerhaltung sein, die Erhaltungsgleichungen der Komponenten und im Falle von nicht-isothermer Strömung die Energieerhaltungsgleichung. Ein entkoppeltes Modell besteht aus einer Druckgleichung, die iterativ gekoppelt wird mit einer Sättigungsgleichung, Erhaltungsgleichungen der Komponenten oder der Energieerhaltungsgleichung.

### Lokales thermisches Gleichgewicht

Wird lokales thermisches Gleichgewicht angenommen, so resultiert daraus eine Energieerhaltungsgleichung für die feste poröse Matrix und die Fluide mit deren spezifischer innerer Energie  $u$ . Class et al. (2002) leiten diese Gleichung für nicht-isotherme Zweiphasenströmung eines Zweikomponentenfluids her, inklusive dem diffusiven Fluss der Komponenten in der Gasphase.

### Lokales thermisches Nichtgleichgewicht

Für lokales thermisches Nichtgleichgewicht sind in DuMu<sup>x</sup> gekoppelte Energiegleichungen für das Fluid und die poröse Matrix möglich, siehe Tab. 2.3 (Lindner et al., 2016a). Als Quellen und Senken bzw. an den Rändern sind für die Energieerhaltungen des Fluids und der festen Phase Wärmeströme möglich ( $\dot{q}_f$  und  $\dot{q}_s$ ), sowie der Wärmeaustausch zwischen dem Fluid und der festen Phase  $\dot{q}_{sf}$ .

**Tab. 2.3.:** Erhaltungsgleichungen für die Masse und die gekoppelte Energieerhaltung für ein DuMu<sup>x</sup> Modell.

---

|                        |  |        |
|------------------------|--|--------|
| Erhaltung<br>der Masse | $\sum_k \frac{\partial}{\partial t} (\phi s_k \rho_k) + \sum_k \nabla \cdot (\rho_k v_k) = \sum_k \dot{m}_k$ | (2.56) |
|------------------------|--|--------|

|                               |   |        |
|-------------------------------|---|--------|
| Erhaltung<br>der Fluidenergie | $\sum_k \frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_k s_k u_k) + \sum_k \nabla \cdot (\rho_k v_k h_k) - \nabla \cdot (k_{f,\text{eff}} \nabla T_f) = \dot{q}_f + \dot{q}_{sf}$ | (2.57) |
|-------------------------------|---|--------|

|                               |   |        |
|-------------------------------|---|--------|
| Erhaltung<br>der Solidenergie | $\frac{\partial}{\partial t} ((1 - \phi) \rho_s c_s T_s) - \nabla \cdot (k_{s,\text{eff}} \nabla T_s) = \dot{q}_s - \dot{q}_{sf}$ | (2.58) |
|-------------------------------|---|--------|

---

### 2.2.2.2. Multiphasen Mischungsmodelle

Die alternative Formulierung zu der Aufstellung der Erhaltungsgleichungen für alle Phasen einzeln geht von einer binären Mischung aus zwei Phasen aus und wurde zunächst für eine Komponente hergeleitet (Wang und Beckermann, 1993; Wang et al., 1994; Wang, 1997), um später auf mehrere Komponenten erweitert zu werden (Wang und Cheng, 1996b). Eine Übersicht über die Erhaltungsgleichungen und konstitutiven Gleichungen findet sich bei Wang und Beckermann (1993); Wang und Cheng (1997), die das Konzept der Mischungsformulierung ausarbeiten. Das System von Erhaltungsgleichungen wird für die Mischung derart erhalten, so dass eine physikalisch vollständig äquivalente Formulierung zu den Multiphase Flow Modellen aus dem vorherigen Kapitel umgesetzt ist. Im Folgenden wird dieser Ansatz skizziert anhand der Publikation von Shi und Wang (2011), die ein Zweigleichungsmodell für die Energieerhaltung verwenden. Mischungsgrößen sind ohne Index versehen, Variablen mit Index beziehen sich auf die Phase  $k \in \{l, v\}$ . Um einen Mischungsansatz zu verfolgen, sind die Definitionen der Mischungsvariablen nötig, die in Tab. 2.4 zusammengefasst sind. Die Mischungsvariablen gehen auf Ansätze der Mittelung aus phasenspezifischen Größen hervor, die nachfolgend anhand der Herleitung der Erhaltungsgleichungen skizziert werden.

|                                    |  |
|------------------------------------|--|
| Dichte                             | $\rho = \rho_l s + \rho_v(1 - s)$  |
| Geschwindigkeit                    | $\rho \vec{u} = \rho_l \vec{u}_l + \rho_v \vec{u}_v$   |
| Enthalpie                          | $H = \rho(h - 2h_{v,\text{sat}})$ mit $\rho h = \rho_l s h_l + \rho_v(1 - s)h_v$   |
| Kinetische Dichte                  | $\rho_{\text{kin}} = \rho_l(1 - \beta_l(T - T_{\text{sat}}))\lambda_l + \rho_v(1 - \beta_v(T - T_{\text{sat}}))\lambda_v$  |
| Viskosität                         | $\mu = \frac{\rho_l s + \rho_v(1 - s)}{k_{rl}/v_l + k_{rv}/v_v}$   |
| Korrekturkoeffizient für Advektion | $\gamma_h = \frac{((\rho_v/\rho_l)(1 - s) + s)(h_{v,\text{sat}}(1 + \lambda_l) - h_{l,\text{sat}}\lambda_l)}{(2h_{v,\text{sat}} - h_{l,\text{sat}})s + (\rho_v h_{v,\text{sat}}/\rho_l)(1 - s)}$ |
| Effektiver Diffusionskoeffizient   | $\Gamma_h = \frac{1}{1 + (1 - \rho_v/\rho_l)h_{v,\text{sat}}/h_{fg}} D + k_{f,\text{eff}} \frac{dT}{dH}$   |
| Kapillarer Diffusionskoeffizient   | $D = \frac{(\phi \mathbf{K})^{1/2} \sigma}{\mu_l} \frac{k_{rl} k_{rv}}{(v_v/v_l)k_{rl} + k_{rv}} (-J')$  |
| Relative Mobilität                 | $\lambda_l = \frac{k_{rl}/v_l}{k_{rl}/v_l + k_{rv}/v_v}, \quad \lambda_v = \frac{k_{rv}/v_v}{k_{rl}/v_l + k_{rv}/v_v}$   |
| Hindrance Funktion                 | $f = \frac{k_{rl} k_{rv}/v_l}{k_{rl}/v_l + k_{rv}/v_v}$  |

**Tab. 2.4.:** Mischungsvariablen für ein Multiphasen Mischungsmodell im LTNE (Shi und Wang, 2011).

### Massenerhaltung

Ausgangspunkt für die Herleitung einer Mischungsformulierung ist die Summe der Massenerhaltungen der einzelnen Phasen  $k$ , siehe Gl. 2.56. Für inkompressible Fluide und ein inkompressibles poröses Medium wird diese Summe unverändert in die Massenerhaltung der Multiphasen Mischung übernommen:

$$\text{Gl. 2.56} \longrightarrow \phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0, \quad (2.59)$$

und führt somit zur Definition der Mischungsdichte  $\rho$  und zur Mischungsgeschwindigkeit  $\vec{u}$ .

### Impulserhaltung

Ausgangspunkt für die Herleitung der Mischungsformulierung ist ebenfalls die Impulserhaltung der einzelnen Phasen  $k$  (Bear, 1988):

$$\vec{u}_k = -\mathbf{K} \frac{k_{rk}}{\mu_k} (\nabla p_k - \rho_k \vec{g}). \quad (2.60)$$

Gl. 2.60 wird für beide Phasen multipliziert mit der jeweiligen Phasendichte  $\rho_k$  und das Ergebnis wird addiert:

$$\rho \vec{u} = -\frac{\mathbf{K}}{v} ((\lambda_l \nabla p_l + \lambda_v \nabla p_v) - (\lambda_l \rho_l + \lambda_v \rho_v) \vec{g}). \quad (2.61)$$

Gl. 2.61 führt zur Definition der kinematischen Mischungsviskosität  $v = \mu/\rho$ :

$$v = \left( \frac{k_{rl}}{v_l} + \frac{k_{rv}}{v_v} \right)^{-1}, \quad (2.62)$$

und der relativen Mobilität  $\lambda_k$ :

$$\lambda_l = \frac{k_{rl}/v_l}{k_{rl}/v_l + k_{rv}/v_v}, \quad \lambda_v = \frac{k_{rv}/v_v}{k_{rl}/v_l + k_{rv}/v_v}. \quad (2.63)$$

Die Druckgradienten der einzelnen Phasen in Gl. 2.61 können überführt werden in einen Druckgradienten des Mischungsdrucks  $p$ , der ursprünglich von Chavent (1976) beschrieben wurde:

$$p = \frac{p_l + p_v}{2} + \frac{1}{2} \int_0^{p_c} (\lambda_v(\zeta) - \lambda_l(\zeta)) d\zeta. \quad (2.64)$$

Eine physikalische Deutung dieses Drucks ist derjenige Druck, der sich für eine Fluidmischung mit globaler Mobilität  $m$  einstellt, d.h. der Summe der Mobilitäten der flüssigen und gasförmigen Phase:

$$m = \frac{k_{rl}}{\mu_l} + \frac{k_{rv}}{\mu_v}. \quad (2.65)$$

Somit treibt ein Mischungsdruckgradient eine Mischungsgeschwindigkeit:

$$\vec{u} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} (\nabla p - \rho_{\text{kin}} \vec{g}), \quad (2.66)$$

mit der kinetischen Dichte, welche die gewichtete Summe der Phasendichten darstellt und die thermischen Expansionskoeffizienten  $\beta_k$  berücksichtigt (Shi und Wang, 2011):

$$\rho_{\text{kin}} = \rho_l (1 - \beta_l(T - T_{\text{sat}})) \lambda_l + \rho_v (1 - \beta_v(T - T_{\text{sat}})) \lambda_v. \quad (2.67)$$

### Energieerhaltung

Die spezifischen Enthalpien für die Phasen werden definiert zu (Wang und Beckermann, 1993):

$$h_l = c_{p,l} T, \quad (2.68)$$

$$h_v = c_{p,v} T + ((c_{p,l} - c_{p,v}) T_{\text{sat}} + h_{fg}), \quad (2.69)$$

mit der Annahme, dass gilt:  $h_l|_{T=0} = 0$  und  $(h_v - h_l)|_{T=T_{\text{sat}}} = h_{fg}$ . Die spezifische Mischungsenthalpie  $h$  wird gewichtet mit der Sättigung und der phasenspezifischen Fluidichte:

$$\rho h = \rho_l s h_l + \rho_v (1 - s) h_v. \quad (2.70)$$

Besondere Beachtung verdient die Verwendung der volumetrischen Enthalpie  $H$ , die auf Wang (1997) zurückgeht. Er beschreibt den numerischen Algorithmus zur Berechnung von Wärme- und Stofftransport in Zweiphasenströmungen für lokales thermisches Gleichgewicht in einer Erweiterung der Konzeption von Wang und Beckermann (1993); Wang et al. (1994). Da die Formulierung mit der spezifischen Enthalpie  $h$  oder der volumetrischen Enthalpie nicht zielführend war für Probleme mit vollständigem Phasenwechsel in vorherigen Publikationen, führte Wang (1997) eine alternative Definition der volumetrischen Enthalpie  $H$  ein:

$$H = \rho (h - 2h_{v,\text{sat}}). \quad (2.71)$$

$h_{v,\text{sat}}$  ist die spezifische Enthalpie der Gasphase bei der Sättigungstemperatur und  $s = 0$ . Mit der Annahme von lokalem thermischen Gleichgewicht wird für das System aus beiden fluiden Phasen und der festen Phase die Energieerhaltung formuliert (Wang und Beckermann, 1993):

$$\frac{\partial}{\partial t} ((1 - \phi) \rho_s h_s + \phi (s \rho_l h_l + (1 - s) \rho_v h_v)) + \nabla \cdot \left( \sum_k \rho_k \vec{u}_k h_k \right) = \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T) + \dot{q}, \quad (2.72)$$

mit einer effektiven Wärmeleitfähigkeit  $k_{\text{eff}}$  und Quellen/Senken  $\dot{q}$ . Dies ist analog zu Gl. 2.57 und 2.58. Gl. 2.72 lautet in Mischungsformulierung (Wang und Beckermann, 1993):

$$\frac{\partial}{\partial t} ((1 - \phi) \rho_s h_s + \phi \rho h) + \nabla \cdot (\rho \vec{u} h_{\text{kin}}) = \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T) + \nabla \cdot ((h_v - h_l) \vec{j}) + \dot{q}, \quad (2.73)$$

mit der kinetischen Mischungsenthalpie  $h_{\text{kin}}$ :

$$h_{\text{kin}} = h_l \lambda_l + h_v \lambda_v. \quad (2.74)$$

Die Formulierung mit lokalem thermischen Gleichgewicht findet in der Literatur Verwendung, wengleich für Probleme mit Phasenwechsel dies einen Fehler einbringen kann. Aus diesem Grunde wird jenes Modell weiter im Anhang B erläutert.

### Phasenspezifische Größen aus Mischungsgrößen

Da während der isobaren Verdampfung eines einkomponentigen Fluids die Temperatur konstant bleibt, können phasenspezifische Größen mit der Sättigung ermittelt werden, die mit der volumetrischen Enthalpie  $H$  berechenbar ist. Der Zusammenhang zwischen der gemeinsamen Temperatur  $T$  der beiden Fluidphasen mit der volumetrischen Enthalpie ist in Tab. 2.5 dargestellt. Ebenfalls ist die Berechnung der Sättigung dargestellt. Die Phasengeschwindigkeiten  $\vec{u}_k$  lassen sich mit einer arithmetischen Gleichung aus dem diffusiven Massenstrom innerhalb der Mischung  $\vec{j}$  berechnen.

$$\begin{array}{l}
 T = \begin{cases} \frac{H + 2\rho_l h_{v,\text{sat}}}{\rho_l c_{p,l}} & \text{falls } H \leq -\rho_l (2h_{v,\text{sat}} - h_{l,\text{sat}}), \\ T_{\text{sat}} & \text{falls } -\rho_l (2h_{v,\text{sat}} - h_{l,\text{sat}}) < H \leq -\rho_v h_{v,\text{sat}}, \\ T_{\text{sat}} + \frac{H + \rho_v h_{v,\text{sat}}}{\rho_v c_{p,v}} & \text{falls } -\rho_v h_{v,\text{sat}} < H. \end{cases} \\
 s = \begin{cases} 1 & \text{falls } H \leq -\rho_l (2h_{v,\text{sat}} - h_{l,\text{sat}}), \\ -\frac{H + \rho_v h_{v,\text{sat}}}{\rho_l h_{fg} + (\rho_l - \rho_v) h_{v,\text{sat}}} & \text{falls } -\rho_l (2h_{v,\text{sat}} - h_{l,\text{sat}}) < H \leq -\rho_v h_{v,\text{sat}}, \\ 0 & \text{falls } -\rho_v h_{v,\text{sat}} < H. \end{cases} \\
 \rho_l \vec{u}_l = \lambda_l \rho \vec{u} + \vec{j} \quad \text{mit} \quad \vec{j} = -\rho_l D \nabla s + f \frac{\mathbf{K} \Delta \rho}{v_v} \vec{g}
 \end{array}$$

**Tab. 2.5.:** Temperatur, Sättigung und Phasengeschwindigkeiten aus den Mischungsgrößen (Wang, 1997).

### Lokales thermisches Nichtgleichgewicht

Shi und Wang (2011) verwenden das MMM mit einer Energiegleichung für das Fluid und einer einfachen Wärmeleitungsgleichung für die poröse Matrix (bestehend aus Kugeln mit dem Durchmesser  $d_p$ ) für eine stationäre numerische Rechnung, siehe Tab. 2.4 und 2.6. Da das Mischungsmodell bei einem einkomponentigen, zweiphasigen Fluid Verwendung findet, wird dieses Modell als Two Phase Mixture Model (TPMM) bezeichnet. Die Basis für die Arbeit von Shi und Wang (2011) bilden die Arbeiten von Wang (1997); Ghafir und Lauriat (2001); Yuki et al. (2008), mit der Anwendung eines lokalen thermischen Nichtgleichgewichts. Die Neuerung bei Shi und Wang (2011) ist hier, dass eine Parameterstudie durchgeführt wurde und die Darcy Gleichung benutzt wird. Erhaltungsgleichungen sind wie für Mischungsmodelle üblich auf der Makroskala formuliert vor dem Hintergrund einer Volumenmittelung. In Abb. 1.1 wurde bereits der untersuchte Testfall erläutert. Die Vorgehensweise erfolgt dabei wie folgt:

1. Initialisierung einer Enthalpieverteilung. Die Temperaturen und Sättigungen werden berechnet.
2. Die thermischen Eigenschaften und Koeffizienten werden mit den Temperaturen und Sättigungen vom vorherigen Schritt berechnet.
3. Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und beide Energieerhaltungsgleichungen werden auf einem kartesischen Gitter mit gegebenen Randbedingungen gelöst.
4. Die Geschwindigkeit, Enthalpie, Temperatur und Sättigung wird aktualisiert.
5. Wiederholung ab Schritt 2 bis Konvergenz eintritt.

Shi und Wang (2011) untersuchen den Einfluss der Temperaturleitfähigkeit, der Porosität und des Kugeldurchmessers  $d_p$  auf die Temperatur- und Sättigungsverteilung innerhalb des porösen Mediums.

---

|  |                                   |        |
|--|-----------------------------------|--------|
| Massenerhaltung<br>(Gl. 2.59, stationär) | $\nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$ | (2.75) |
|--|-----------------------------------|--------|

|                               |  |  |
|-------------------------------|--|--|
| Impulserhaltung<br>(Gl. 2.66) | $\vec{u} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} (\nabla p - \rho_{\text{kin}} \vec{g})$ |  |
|-------------------------------|--|--|

|                               |   |        |
|-------------------------------|---|--------|
| Erhaltung<br>der Fluidenergie | $\nabla \cdot (\gamma \vec{u} H) = \nabla \cdot (\Gamma_h \nabla H) + \nabla \cdot \left( f \frac{\mathbf{K} \Delta \rho h_{fg}}{\nu} \vec{g} \right) + \dot{q}_{sf}$ | (2.76) |
|-------------------------------|---|--------|

|                               |   |        |
|-------------------------------|---|--------|
| Erhaltung<br>der Solidenergie | $\nabla \cdot (k_{s,\text{eff}} \nabla T_s) = \dot{q}_{sf}$ | (2.77) |
|-------------------------------|---|--------|

---

**Tab. 2.6.:** Erhaltungsgleichungen bei Shi und Wang (2011) für ein Multiphasen Mischungsmodell im LTNE.

Die Eigenschaften der Phasen werden durch arithmetische Gleichungen aus den Mischungsvariablen erhalten, siehe Tab. 2.5. Im ersten Term der Energieerhaltung für das Fluid in Gl. 2.76 werden die advektiven Energieflüsse der einzelnen Phasen berücksichtigt. Energieströme in Form von relativen Phasenbewegungen können aufgrund von kapillarer Diffusion durch den Kapillardruck oder aufgrund von Gravitationseffekten durch Dichteunterschiede entstehen. Ersteres wird durch den zweiten Term und zweiteres durch den dritten Term berücksichtigt. Wärmeleitung wird berücksichtigt durch einen Unterterm im zweiten Term durch den effektiven Diffusionskoeffizienten  $\Gamma_h$ , siehe

Tab. 2.4. Der Term für den Wärmestromaustausch zwischen fester Phase und Fluiden, Quellterm  $\dot{q}_{sf}$ , wird phasenabhängig mit der spezifischen Oberfläche der Poren  $\alpha_{sf}$  berechnet zu:

$$\dot{q}_{sf} = \bar{h}_{sl}\alpha_{sf}(T_s - T_f) \quad \text{für } s = 1, \quad (2.78)$$

$$\dot{q}_{sf} = (1 - s)\bar{h}_{sv}\alpha_{sf}(T_s - T_f) + s\alpha_{sf}\dot{q}_{\text{boil}} \quad \text{für } 0 < s < 1, \quad (2.79)$$

$$\dot{q}_{sf} = \bar{h}_{sv}\alpha_{sf}(T_s - T_f) \quad \text{für } s = 0, \quad (2.80)$$

wobei

$$\dot{q}_{\text{boil}} = \mu_l h_{fg} \left( \frac{g(\rho_l - \rho_v)}{\sigma} \right)^{0.5} \left( \frac{c_{p,l}(T_s - T_{\text{sat}})}{b_{sf} h_{fg} \text{Pr}^n} \right)^3 \quad (2.81)$$

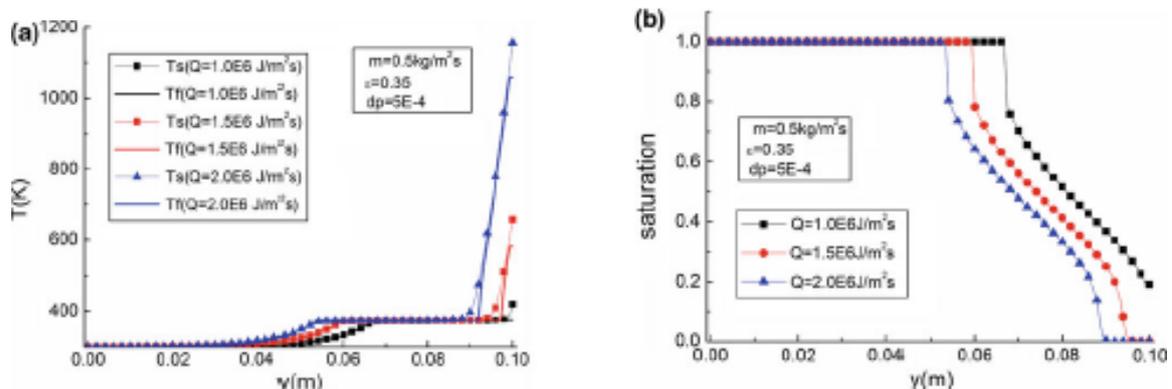
die Wärmemenge ist, die zwischen Festkörper und Fluid bei Siedevorgängen ausgetauscht wird (Rohsenow, 1952; Clark und Rohsenow, 1954). Der Parameter  $b_{sf}$  repräsentiert eine Konstante für die Kombination von Fluid und Feststoffoberfläche mit  $b_{sf} = 0.006$  für Wasser und Bronze. Gl. 2.81 kann aufgeteilt werden in den Term der Temperaturdifferenz mit  $(T_s - T_{\text{sat}})^3$  und die restlichen Terme, die in einen Vorfaktor  $c_{\text{boil}}$  gebündelt werden können. Dieser Umstand wird noch in Kap. 3.2.2 genutzt. Der Wärmeübergangskoeffizient  $\bar{h}_{sk}$  für das jeweilige Fluid wird mit Hilfe der Nusselt Zahl und der charakteristischen Länge  $\mathcal{L}$  in Gl. 2.82 bestimmt.

$$\text{Nu}_k = \frac{\bar{h}_{sk}\mathcal{L}}{k_k}. \quad (2.82)$$

Die zugehörige Nusselt Korrelation ist gültig für Wärmeübergang in einem porösen Medium bei einphasiger Strömung (Shi und Wang, 2011):

$$\text{Nu}_k = 2 + 1.1\text{Pr}_k^{1/3}\text{Re}_k^{3/5}. \quad (2.83)$$

Abb. 2.14 ist ein Auszug aus der Publikation von Shi und Wang (2011) für ein Rechengebiet nach Abb. 1.1. Dargestellt sind Temperaturen und Sättigungsprofile bei Variation des Wärmestroms in das System. Für größere Wärmeströme verschiebt sich das Verdampfungsgebiet stromauf.



**Abb. 2.14.:** Abbildung aus Shi und Wang (2011): Temperaturen (a) und Sättigungsprofile (b) bei Variation des Wärmestroms in das System.

# 3. Physikalische und mathematische Modellierung der Fluidverteilung und Verdampfung in porösen Medien

Im Folgenden wird die physikalische und mathematische Modellierung der Fluidverteilung und Verdampfung in porösen Medien erläutert. Dazu wird zunächst die Modellierung der Erhaltungsgleichungen für ein einkomponentiges Fluid in Kap. 3.1 erläutert. Die Erweiterung auf ein zweikomponentiges Fluid erfolgt in Kap. 3.2.

## 3.1. Modellierung der Erhaltungsgleichungen mit dem Multiphasen Mischungsmodell für eine Komponente

Es folgt zunächst die Modellierung der Massen- und Impulserhaltung in Kap. 3.1.1. Die Einbindung der gekoppelten Energieerhaltungen und deren Randbedingungen wird in Kap. 3.1.2 erörtert. Da der effektive Diffusionskoeffizient  $\Gamma_h$  an den makroskopischen Phasengrenzen degeneriert, wird eine Methodik zur Regularisierung in Kap. 3.1.3 diskutiert. Die anschließenden analytischen Lösungen in Kap. 3.1.4 basieren auf einer globalen Energieerhaltung und werden zur Plausibilisierung von Ergebnissen herangezogen.

### 3.1.1. Massen- und Impulserhaltung

Die Erhaltungsgleichungen aus Tab. 2.6 dienen als Basis für die weitere Modellierung des Mischungsmodells für ein einkomponentiges Fluid. Wird die Kontinuitätsgleichung in die Impulserhaltung (d.h. das Darcy Gesetz) eingesetzt, so muss nur eine Gleichung gelöst werden, aus deren Lösung der Mischungsdruck hervorgeht. Dies geschieht in der Erweiterung des MRST für Zweiphasenmischungen, die im folgenden Kapitel erläutert wird.

#### 3.1.1.1. Lösung für stationäre Strömung in MATLAB®

Ausgehend von den Erläuterungen in Kap. 2.2.1.2 für Massen- und Impulserhaltung mit konstanter Fluiddichte in einer Mischungsformulierung, wird nun Gl. 2.46 für ein Fluid mit nicht konstanter Dichte betrachtet:

$$-\nabla \cdot \left( \rho \frac{\mathbf{K}}{\mu} \nabla p \right) = r. \quad (3.1)$$

Der rechte Rand  $r$  steht für Quellen/Senken in der Massenerhaltung oder Flüsse an den Rändern und kann einen Term für Gravitation enthalten. Gl. 3.1 lässt sich mit  $\Lambda = \frac{\rho \mathbf{K}}{\mu}$  schreiben als:

$$-\nabla \cdot \Lambda \nabla p = r^*. \quad (3.2)$$

Diese Gleichung kann mit der TPFA-Methode nach Kap. 2.2.1.2 gelöst werden. Es ergibt sich analog zu Gl. 2.50:

$$\mathbf{A} \cdot \vec{p} = \vec{q}. \quad (3.3)$$

Da nun die Dichte im Zellzentrum berücksichtigt wird, wird die Transmissibilität aus Kap. 2.2.1.2 mit  $\Lambda_{i,j} = (\rho \mathbf{K} / \mu)_{i,j}$  gesetzt als:

$$t_{ij} = 2 |\gamma_j| \left( \frac{\Delta x_i}{\Lambda_{i,j}} + \frac{\Delta x_j}{\Lambda_{j,i}} \right)^{-1}. \quad (3.4)$$

Für die Formulierung mit einem Mischungsmodell muss also die Dichte im Zellzentrum in die Matrix  $\mathbf{B}$  von Gl. 2.54 einbezogen werden. Das kann erreicht werden, indem die inverse Transmissibilität  $\frac{\mu}{\rho \mathbf{K}}$  anstatt  $\frac{\mu}{\mathbf{K}}$  auf der Hauptdiagonale und den Nebendiagonalen der Matrix  $\mathbf{B}$  berechnet werden, siehe Gl. 2.51. Diese Matrix wird nun mit  $\mathfrak{B}$  bezeichnet und enthält  $\frac{\mu}{\rho \mathbf{K}}$  als Einträge. Es ergibt sich somit - statt dem System 2.54 - das neue System:

$$\begin{bmatrix} \mathfrak{B} & \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{C}^T & 0 & 0 \\ \mathbf{D}^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \rho \vec{u} \\ -\vec{p} \\ \vec{\pi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{0} \\ \vec{q} \\ \vec{0} \end{bmatrix}, \quad (3.5)$$

Die eigene Erweiterung für Massen- und Impulserhaltung mit variabler Dichte, Gl. 3.5, wird somit zur Lösung von Gl. 3.1 herangezogen.

### 3.1.1.2. Lösung für instationäre Strömung

Wang (1997) gibt zur Lösung der instationären Masse- und Impulserhaltung für inkompressible Fluide zwei Ansätze an. Die druckbasierte Methode löst die Gleichung für den Mischungsdruck,

$$\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla \cdot \left( \rho \left( \frac{\mathbf{K}}{\mu} (\nabla p - \rho_{\text{kin}} \vec{g}) \right) \right) = r, \quad (3.6)$$

umgeformt nach der zweiten Ableitung des Drucks,

$$\nabla^2 p = \frac{v}{\mathbf{K}} \left( \phi \frac{\partial \rho}{\partial t} - \nabla p \nabla \left( \frac{\mathbf{K}}{v} \right) + \nabla \cdot \left( \frac{\mathbf{K}}{v} \rho_{\text{kin}} \vec{g} \right) \right). \quad (3.7)$$

Gl. 3.7 kann mit der stabilisierten error vector propagation (EVP) Methode und Finiten Differenzen gelöst werden (Roache, 1971, 1976). Die Zeitableitung der Dichte  $\partial \rho / \partial t$  ist zunächst unbekannt. Es gilt drei Fälle nach Aggregatzustand zu unterscheiden ( $\beta_k = 0$ ):

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = \begin{cases} 0 & \text{falls } s = 1, \\ \frac{\partial}{\partial t} (s(\rho_l - \rho_v) + \rho_v) = \Delta \rho \frac{\partial s}{\partial t} & \text{falls } 0 < s < 1, \\ 0 & \text{falls } s = 0. \end{cases} \quad (3.8)$$

Das Vorgehen lässt sich wie folgt zusammenfassen:

1. Initialisieren der Koeffizienten und  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  für alle Zellen initialisieren.
2.  $\nabla^2 p$  mit EVP-Methode lösen.
3. Mischungsgeschwindigkeitsvektor  $\vec{u}$  mit der Darcy Gleichung berechnen.
4. Residuum bilden, Iterieren bis zur Konvergenz.
5. Erneut den Mischungsgeschwindigkeitsvektor  $\vec{u}$  mit der Darcy Gleichung berechnen.
6. Die Energiegleichung lösen.

Der zweite Ansatz von Wang (1997) verwendet primitive Variablen: den Geschwindigkeitsvektor  $\vec{u}$  und den Mischungsdruck  $p$ . Der SIMPLE Algorithmus von Patankar (1980) eignet sich hierfür, wobei die Druckkorrektur nicht notwendig ist, da die Geschwindigkeit direkt proportional zum Druckgradienten ist. Alternativ zu den Ansätzen von Wang (1997) kann das System 3.5 erweitert werden um die zeitliche Änderung der Dichte in der zweiten Zeile des Systems. Es ergibt sich somit:

$$\begin{bmatrix} \mathfrak{B} & \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{C}^T & 0 & 0 \\ \mathbf{D}^T & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \rho \vec{u} \\ -\vec{p} \\ \vec{\pi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{0} \\ \vec{q} - \phi \frac{\partial \rho}{\partial t} \\ \vec{0} \end{bmatrix}. \quad (3.9)$$

Der Term  $\phi \frac{\partial \rho}{\partial t}$  wirkt somit als Senke für den Massenstrom.

### 3.1.2. Numerische Einbindung der gekoppelten Energieerhaltungen und Randbedingungen

Die Energiegleichungen für das Fluid und den Festkörper sind Tab. 2.6 zu entnehmen. Beide Gleichungen sind mit dem Term  $\dot{q}_{sf}$  gekoppelt, der den Wärmeaustausch zwischen dem Fluid und der festen Phase bewirkt. Der Kopplungsterm  $\dot{q}_{sf}$  ist eine Funktion der Festkörpertemperatur  $T_s$  und der Fluidtemperatur  $T_f$ , bzw. der Fluidenthalpie  $H$ . Im Einphasengebiet geht die Temperaturdifferenz  $T_s - T_f$  linear ein. Im Zweiphasengebiet geht die Temperaturdifferenz  $T_s - T_f$  mit einem Polynom dritter Ordnung ein, und wird mit der Sättigung gewichtet. Angewandt wird die Methode der Finiten Volumen mit Upwind oder Power-Law für die advektiven Terme. Die Energieerhaltung für das Fluid lautet in 2D für eine Zelle mit Zellzentrum in  $i, j$ :

$$\int_{i-1/2}^{i+1/2} \int_{j-1/2}^{j+1/2} \left\{ \nabla \cdot \left( \gamma_h \vec{u} H - \Gamma_h \nabla H - f \frac{K \Delta \rho h_{fg}}{\nu_v} \vec{g} \right) \right\} dx dy - \underbrace{\int_{i-1/2}^{i+1/2} \int_{j-1/2}^{j+1/2} \dot{q}_{sf} dx dy}_S = 0. \quad (3.10)$$

In einphasigen Zellen gilt:

$$\dot{q}_{sf} = \text{Funktion}(T_s - T_f). \quad (3.11)$$

In zweiphasigen Zellen gilt:

$$\dot{q}_{sf} = \text{Funktion}(T_s - T_f) + \text{Funktion}(T_s - T_f)^3. \quad (3.12)$$

Da die Fluidtemperatur  $T_f$  eine Funktion der volumetrischen Enthalpie  $H$  ist, muss der kubische Term linearisiert werden und die Gleichung iterativ gelöst werden. Für den volumengemittelten

Quellterm  $\bar{S}$  gilt:

$$\bar{S} = S\Delta x\Delta y = S_C + S_P T_s. \quad (3.13)$$

Wird Gl. 3.13 mit der Taylor-Reihe entwickelt, so lässt sich schreiben:

$$\bar{S} = \bar{S}^* + \left( \frac{d\bar{S}}{dT_s} \right)^* (T_s - T_s^*). \quad (3.14)$$

Das Symbol \* als Superscript bedeutet, dass der jeweilige Wert der vorherigen Iteration benutzt wird. Um die Diagonaldominanz der Diskretisierungsmatrix zu stärken, sollte  $S_P$  aus Gl. 3.13 negativ sein.

$$\int_{i-1/2}^{i+1/2} \int_{j-1/2}^{j+1/2} \left\{ \frac{d}{dx}(\dots) + \frac{d}{dy}(\dots) \right\} dx dy - \underbrace{\int_{i-1/2}^{i+1/2} \int_{j-1/2}^{j+1/2} \dot{q}_{sf} dx dy}_S = 0 \quad (3.15)$$

Zunächst wird nur das erste Flächenintegral betrachtet. Der Einfluss des Terms für die Wärmekopplung wird anschließend diskutiert.

$$\begin{aligned} & \int_{i-1/2}^{i+1/2} \int_{j-1/2}^{j+1/2} \left\{ \frac{d}{dx}(\dots) + \frac{d}{dy}(\dots) \right\} dx dy = \\ \Delta y & \left( \gamma_h u H \Big|_{i+1/2,j} - \gamma_h u H \Big|_{i-1/2,j} - \Gamma_h \frac{dH}{dx} \Big|_{i+1/2,j} + \Gamma_h \frac{dH}{dx} \Big|_{i-1/2,j} - \right. \\ & \left. f \frac{K\Delta\rho h_{fg}}{\nu_v} g_x \Big|_{i+1/2,j} + f \frac{K\Delta\rho h_{fg}}{\nu_v} g_x \Big|_{i-1/2,j} \right) + \\ \Delta x & \left( \gamma_h v H \Big|_{i,j+1/2} - \gamma_h v H \Big|_{i,j-1/2} - \Gamma_h \frac{dH}{dy} \Big|_{i,j+1/2} + \Gamma_h \frac{dH}{dy} \Big|_{i,j-1/2} - \right. \\ & \left. f \frac{K\Delta\rho h_{fg}}{\nu_v} g_y \Big|_{i,j+1/2} + f \frac{K\Delta\rho h_{fg}}{\nu_v} g_y \Big|_{i,j-1/2} \right) \end{aligned} \quad (3.16)$$

Basierend auf dieser Diskretisierung werden die advektiven und diffusiven Flüsse gemäß eines Upwind/Power-Law Schema modelliert. Es werden Verfahren erster Ordnung angewandt. Die Péclet Zahl wird gebildet mit Hilfe der konvektiven Flüsse  $F := \gamma_h \vec{u}$  und der diffusiven Flüsse  $D|_{\text{nach } x} := \Gamma_h / \Delta x$  bzw.  $D|_{\text{nach } y} := \Gamma_h / \Delta y$ :

$$\text{Pe} = \frac{F}{D}. \quad (3.17)$$

Für  $|\text{Pe}| \geq 10$  wird Upwind gewählt, für  $|\text{Pe}| < 10$  wird ein Power-Law gewählt. Ein Power-Law mit  $|\text{Pe}| \geq 10$  ist nicht möglich, da sonst die entstehende Diskretisierungsmatrix nicht vollen Rang haben kann. Im Folgenden werden die Terme für die Diskretisierung in  $x$ -Richtung (Index  $i$ ) vorgestellt.

Der erste Ausdruck auf der rechten Seite von Gl. 3.16 lässt sich somit weiter formulieren zu:

$$\Delta y \left( F_{i+1/2,j} H_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j} H_{i-1/2,j} - D_{i+1/2,j} (H_{i+1,j} - H_{i,j}) + D_{i-1/2,j} (H_{i,j} - H_{i-1,j}) - f \frac{K \Delta \rho h_{fg}}{v_v} g_x \Big|_{i+1/2,j} + f \frac{K \Delta \rho h_{fg}}{v_v} g_x \Big|_{i-1/2,j} \right). \quad (3.18)$$

Analog wird für den zweiten Term auf der rechten Seite von Gl. 3.16 verfahren. Nach Patankar (1980) wird nun für die Ausdrücke innerhalb der Klammer die Form angestrebt:

$$a_{i,j} H_{i,j} = a_{i+1,j} H_{i+1,j} + a_{i-1,j} H_{i-1,j} + a_{i,j+1} H_{i,j+1} + a_{i,j-1} H_{i,j-1} + b_{i,j}, \quad (3.19)$$

mit dem Quellterm  $b_{i,j} = \text{const.} \cdot f/v_v$  falls die Gravitation einen Anteil in  $x$ -Richtung hat. Das Upwind-Schema für die Werte an den Zellinterfaces in  $x$ -Richtung lautet:

$$F_{i+1/2,j} H_{i+1/2,j} = H_{i,j} \max(F_{i+1/2,j}, 0) - H_{i+1,j} \max(-F_{i+1/2,j}, 0), \quad (3.20)$$

$$F_{i-1/2,j} H_{i-1/2,j} = H_{i-1,j} \max(F_{i-1/2,j}, 0) - H_{i,j} \max(-F_{i-1/2,j}, 0). \quad (3.21)$$

Somit ergibt sich für die Koeffizienten  $a_{i,j}$  aus Gl. 3.19 für Upwind:

$$\begin{aligned} a_{i,j} &= a_{i+1,j} + a_{i-1,j} + (F_{i+1/2,j} - F_{i-1/2,j}) \quad \text{mit} \quad (3.22) \\ a_{i+1,j} &= D_{i+1/2,j} + \max(-F_{i+1/2,j}, 0), \\ a_{i-1,j} &= D_{i-1/2,j} + \max(F_{i-1/2,j}, 0). \end{aligned}$$

Für Power-Law gilt weiterhin Gl. 3.22, nur die Koeffizienten  $a_{i\pm 1,j}$  werden berechnet zu:

$$\begin{aligned} a_{i+1,j} &= D_{i+1/2,j} \max((1 - 0.1 |\text{Pe}_{i+1/2,j}|)^5, 0) + \max(-F_{i+1/2,j}, 0), \\ a_{i-1,j} &= D_{i-1/2,j} \max((1 - 0.1 |\text{Pe}_{i-1/2,j}|)^5, 0) + \max(F_{i-1/2,j}, 0). \end{aligned}$$

Nun fehlt noch der Einfluss des Wärmekopplungsterms. Dazu wird Gl. 3.11 diskretisiert und im einphasigen, flüssigen Bereich ergibt sich:

$$\dot{q}_{sf,i,j} \Big|_{s=1} = \Delta x \Delta y \bar{h}_{sl} \alpha_{sf} \left( T_s - \frac{H_{i,j}}{\rho_l c_{p,l}} - \frac{2 \rho_l h_{v,\text{sat}}}{\rho_l c_{p,l}} \right). \quad (3.23)$$

Im einphasigen, überhitzten Bereich ergibt sich:

$$\dot{q}_{sf,i,j}|_{s=0} = \Delta x \Delta y \bar{h}_{sv} \alpha_{sf} \left( T_s - T_{\text{sat}} - \frac{H_{i,j}}{\rho_v c_{p,v}} - \frac{\rho_v h_{v,\text{sat}}}{\rho_v c_{p,v}} \right). \quad (3.24)$$

Im Zweiphasengebiet ergibt sich nach Gl. 3.14 mit  $T_f = T_{\text{sat}}$ :

$$S_{C,i,j} = \Delta x \Delta y \left\{ c_5 (T_{\text{sat}} - T_{s,i,j}^*) - c_6 (T_{s,i,j}^* - T_{\text{sat}})^3 - (-c_5 - 3c_6 (T_{s,i,j}^* - T_{\text{sat}})^2) T_{s,i,j}^* \right\}, \quad (3.25)$$

$$S_{P,i,j} = \Delta x \Delta y \left\{ -c_5 - 3c_6 (T_{s,i,j}^* - T_{\text{sat}})^2 \right\}. \quad (3.26)$$

Mit  $c_5 = (1-s)\bar{h}_{sv}\alpha_{sf}$ ,  $c_6 = s\alpha_{sf}c_{q\text{boil}}$ . Somit ist  $S_P$  negativ, um die Diagonaldominanz der Diskretisierungsmatrix zu stärken. Analog kann für die Energiegleichung des porösen Mediums geschrieben werden:

$$\int_{i-1/2}^{i+1/2} \int_{j-1/2}^{j+1/2} \{ \nabla \cdot (k_{s,\text{eff}} \nabla T_s) \} dx dy = \int_{i-1/2}^{i+1/2} \int_{j-1/2}^{j+1/2} \{ \dot{q}_{sf} \} dx dy. \quad (3.27)$$

Das diskretisierte erste Flächenintegral wird erhalten zu:

$$\begin{aligned} & \int_{i-1/2}^{i+1/2} \int_{j-1/2}^{j+1/2} \{ \nabla \cdot (k_{s,\text{eff}} \nabla T_s) \} dx dy = \\ & \Delta y D|_{\text{nach } x} (T_{s,i+1,j} + T_{s,i-1,j} - 2T_{s,i,j}) + \\ & \Delta x D|_{\text{nach } y} (T_{s,i,j+1} + T_{s,i,j-1} - 2T_{s,i,j}). \end{aligned} \quad (3.28)$$

Werden die Terme aus  $\dot{q}_{sf}$  berücksichtigt, die den Quellterm sowohl für die Festkörper- als auch die Energiegleichung für das Fluid beeinflussen und die Kopplung zur Festkörpertemperatur bewerkstelligen, lässt sich somit eine System Matrix formulieren vom Typ:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{A}^* \\ \mathbf{B}^* & \mathbf{B} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \vec{H} \\ \vec{T}_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{b} \\ \vec{c} \end{bmatrix}. \quad (3.29)$$

### Darstellung in Zylinderkoordinaten

In Zylinderkoordinaten mit  $r, \varphi, z$  ergibt sich am Beispiel für den mathematisch diffusiven Term der volumetrischen Enthalpie  $H$  folgende Differentiation:

$$\nabla \cdot (\Gamma_h \nabla H) = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \Gamma_h \frac{\partial H}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{1}{r} \Gamma_h \frac{\partial H}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma_h \frac{\partial H}{\partial z} \right). \quad (3.30)$$

Im Folgenden wird Achsensymmetrie angenommen und alle Terme mit  $\partial/\partial \varphi$  sind null.

Eine alternative Schreibweise zu Gl. 3.16 ist somit für Zylinderkoordinaten unter der Annahme eines regelmäßigen kartesischen Gitters (d.h.  $r_{i-1/2,j} = r_{i+1/2,j}$ ,  $\Delta z, \Delta r = \text{const.}$ ) mit Gravitation in  $y$ -Richtung (Index  $j$ ):

$$\int_{z=i-1/2}^{i+1/2} \int_{r=j-1/2}^{j+1/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (\gamma_h r v H) + \frac{\partial}{\partial z} (\gamma_h u H) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r \Gamma_h \frac{\partial H}{\partial r} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( \Gamma_h \frac{\partial H}{\partial z} \right) - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left( r f \frac{K \Delta \rho h_{fg}}{v_v} g_y \right) \right\} r dz dr d\varphi =$$

$$2\pi \left\{ \Delta z \left( \gamma_h r v H|_{i,j+1/2} - \gamma_h r v H|_{i,j-1/2} \right) + \Delta r \left( r \gamma_h u H|_{i+1/2,j} - r \gamma_h u H|_{i-1/2,j} \right) - \Delta z \left( r \Gamma|_{h,i,j+1/2} \frac{H_{i,j+1} - H_{i,j}}{\Delta r} - r \Gamma|_{h,i,j-1/2} \frac{H_{i,j} - H_{i,j-1}}{\Delta r} \right) - \Delta r r_{i,j} \left( \Gamma_{h,i+1/2,j} \frac{H_{i+1,j} - H_{i,j}}{\Delta z} - \Gamma_{h,i-1/2,j} \frac{H_{i,j} - H_{i-1,j}}{\Delta z} \right) - \Delta z \left( f \frac{K \Delta \rho h_{fg}}{v_v} g_y \Big|_{i,j+1/2} - f \frac{K \Delta \rho h_{fg}}{v_v} g_y \Big|_{i,j-1/2} \right) - \frac{1}{2} \dot{q}_{sf,i,j} \Delta z \left( r_{i,j+1/2}^2 - r_{i,j-1/2}^2 \right) \right\}. \quad (3.31)$$

Für die Energiegleichung für  $T_s$  gilt in Zylinderkoordinaten:

$$\int_{z=i-1/2}^{i+1/2} \int_{r=j-1/2}^{j+1/2} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \left\{ \nabla \cdot (k_{s,\text{eff}} \nabla T_s) \right\} r dz dr d\varphi =$$

$$2\pi \left\{ \Delta z \left( r k|_{s,\text{eff},i,j+1/2} \frac{T_{s,i,j+1} - T_{s,i,j}}{\Delta r} - r k|_{s,\text{eff},i,j-1/2} \frac{T_{s,i,j} - T_{s,i,j-1}}{\Delta r} \right) + \Delta r r_{i,j} \left( k_{s,\text{eff},i+1/2,j} \frac{T_{s,i+1,j} - T_{s,i,j}}{\Delta z} - k_{s,\text{eff},i-1/2,j} \frac{T_{s,i,j} - T_{s,i-1,j}}{\Delta z} \right) \right\}. \quad (3.32)$$

### Randbedingungen

Als Randbedingung für das poröse Medium am Eintritt wird eine gekoppelte Randbedingung analog zu Shi und Wang (2011) benutzt:

$$k_{s,\text{eff}} \frac{\partial T_s}{\partial x} + \Gamma_h \frac{\partial H}{\partial x} = \bar{h}_{sl} (T_s - T_f). \quad (3.33)$$

Diese Randbedingung ist vom Typ einer Robin Randbedingung. Die Randbedingung für das Fluid ist eine Dirichlet-Randbedingung:  $H = H_{\text{Eintritt}}$ .

Die RB für das poröse Medium am Austritt ist eine Neumann-Randbedingung:

$$k_{s,\text{eff}} \frac{\partial T_s}{\partial x} = \dot{q}. \quad (3.34)$$

Die Randbedingung für das Fluid am Austritt sowie an allen adiabaten Wänden ist eine Neumann-Randbedingung:

$$\Gamma_h \frac{\partial H}{\partial \vec{n}} = 0, \quad (3.35)$$

analog gilt für die Randbedingung für das poröse Medium an adiabaten Wänden:

$$k_{s,\text{eff}} \frac{\partial T_s}{\partial \vec{n}} = 0. \quad (3.36)$$

### 3.1.3. Behandlung des degenerierten Diffusionskoeffizienten

Der Diffusionskoeffizient  $\Gamma_h$  für das Modell im lokalen thermischen Nichtgleichgewicht ist nicht-linear, diskontinuierlich, mit Sprüngen der Ordnung  $\mathcal{O} \approx 10^9$  und größer und degeneriert an den makroskopischen Phasengrenzen:

$$\lim_{s \rightarrow 0^+} \Gamma_h = 0, \quad \lim_{s \rightarrow 1^-} \Gamma_h = 0.$$

Dieses Verhalten ist auf den ersten Term von  $\Gamma_h$  in Tab. 2.4, proportional zum kapillaren Diffusionskoeffizienten  $D$ , zurückzuführen.  $D$  ist null im einphasigen Gebiet und ungleich null im Zweiphasengebiet. Somit entsteht eine Unstetigkeit im Verlauf von  $\Gamma_h$  an den makroskopischen Phasengrenzen. Dieses Verhalten wird ausführlich diskutiert für einkomponentige Fluide bei Alomar et al. (2014a) (LTE) und Wei et al. (2012) (LTNE) und für ein zweikomponentiges Fluid (LTNE) bei Lindner et al. (2016c). Unterschieden werden muss  $\Gamma_h$  für Modelle im Nichtgleichgewicht (LTNE) oder Gleichgewicht (LTE), da hier die Wärmeleitfähigkeit anders definiert ist. Beim LTE ist die Wärmeleitfähigkeit des Festkörpers inbegriffen; beim LTNE ist dies nicht der Fall, da der Festkörper eine eigene Energiegleichung hat. Der Diffusionskoeffizient ist eine Funktion der Sättigung, die nur im Zellzentrum  $i$  definiert ist. Für die Diskretisierung sind jedoch die Werte des Diffusionskoeffizienten an den Zellgrenzen  $\Gamma_{h,i \pm 1/2}$  notwendig. An den Phasengrenzflächen ist die Ermittlung nicht trivial. Die harmonische Mittelung von  $\Gamma_h$  an diesen Grenzen liefert in der Regel eine zu kleine Diffusion (Voller und Swaminathan, 1993). Eine Alternative stellt die modifizierte Kirchhoff-Methode dar, die iterativ die Diffusionskoeffizienten ermittelt (Xue, 2008; Li et al., 2010c) und im Folgenden beschrieben wird.

Zunächst wird eine neue Größe  $\Psi$  definiert:

$$\Psi = \int_{T_{\text{ref}}}^T \Gamma(\alpha) d\alpha. \quad (3.37)$$

Die Referenztemperatur  $T_{\text{ref}}$  und der Integrationsbereich werden so gewählt, dass zwei benachbarte Zellen, z.B. mit  $T_i$  und  $T_{i+1}$  eingeschlossen sind. Somit ergibt sich für  $\Gamma_{h,i \pm 1/2}$  an den Zellinterfaces:

$$\Gamma_{h,i+1/2} = \frac{\Psi_{i+1} - \Psi_i}{T_{i+1} - T_i}, \quad \Gamma_{h,i-1/2} = \frac{\Psi_i - \Psi_{i-1}}{T_i - T_{i-1}}. \quad (3.38)$$

Der Einfluss der verschiedenen Handhabungen für den Diffusionskoeffizienten wird ausführlich in Lindner et al. (2016a) erläutert.

### 3.1.4. Analytische Lösungen anhand globaler Energieerhaltung

Analytische Betrachtungen, basierend auf globalen Energiebilanzen, helfen bei der Beurteilung der numerischen Lösungen. Für eine Simulation in 1D mit Wärmestrom am Austritt lässt sich der Phasenwechsel wie folgt beschreiben:

$$\underbrace{\text{flüssig}} \xrightarrow{\quad} \left| \quad \right| \quad \underbrace{\text{2-Phasen Gebiet}} \quad \left| \quad \right| \quad \xrightarrow{\quad} \underbrace{\text{gasförmig.}}$$

$$\Delta\dot{q} = \dot{m}c_{p,l}(T_{\text{sat}} - T_{\text{in}}), \quad \Delta\dot{q} = \dot{m}h_{fg}, \quad \Delta\dot{q} = \dot{m}c_{p,v}(T_{\text{Austritt}} - T_{\text{sat}})$$

Das heißt  $\dot{q}_{\text{dryout}} = \dot{m}(c_{p,l}(T_{\text{sat}} - T_{\text{in}}) + h_{fg})$  ist der minimale Wärmestrom ab dem keine flüssigen Fluidanteile mehr im Verdampfer vorliegen. Die Austrittstemperatur lässt sich somit mit der Randbedingung für den Wärmestrom  $\dot{q}$  am Austritt analytisch berechnen zu:

$$T_{\text{Austritt}} = \begin{cases} T_{\text{in}} + \frac{\dot{q}}{\dot{m}c_{p,l}} & \text{falls } \dot{q} \leq \dot{m}c_{p,l}(T_{\text{sat}} - T_{\text{in}}), \\ T_{\text{sat}} & \text{falls } \dot{m}c_{p,l}(T_{\text{sat}} - T_{\text{in}}) < \dot{q} < \dot{q}_{\text{dryout}}, \\ T_{\text{sat}} + \frac{\dot{q} - \dot{q}_{\text{dryout}}}{\dot{m}c_{p,v}} & \text{falls } \dot{q}_{\text{dryout}} \leq \dot{q}. \end{cases}$$

Ein Maß für die Güte der numerischen Lösung ist, dass die über den Festkörper eingebrachte Wärme auf das Fluid vollständig übertragen wird. Der Wärmetransferterm  $\dot{q}_{sf}$  aus Gl. 3.11 bzw. 3.12 wird im Finite Volumen Verfahren integriert für ein Kontrollvolumen der Länge  $\Delta x$ . Die Summe aller Wärmeströme pro Zelle über alle Zellen  $i$  muss also der Randbedingung für den Wärmestrom entsprechen:

$$\frac{1}{L} \int_0^L \dot{q}_{sf} \Delta x dx \approx \sum_i \dot{q}_{sf,i} \Delta x = \dot{q}. \quad (3.39)$$

Dies gilt nur unter der Bedingung, dass der Festkörper und das Fluid am Eintritt keine Wärme nach außen leiten:

$$k_{s,\text{eff}} \left. \frac{\partial T_s}{\partial x} \right|_{\text{Eintritt}} = 0, \quad k_f \left. \frac{\partial T_f}{\partial x} \right|_{\text{Eintritt}} = 0. \quad (3.40)$$

## 3.2. Modellierung des Multi-{phasen,komponenten} Mischungsmodells

Für die nachfolgenden Kapitel wird der Unterbau der Theorie von Wang und Cheng (1996b, 1997) benutzt. Mit geeigneten Mischungsregeln und den Grundlagen für Gleichgewichtsbeziehungen für ideale Mischungen wird hier die analytische Herleitung der Multiphasen und Multikomponenten Mischung präsentiert. Im Folgenden werden die Definitionen der Mischungsgrößen, konstitutiven Gleichungen und der Erhaltungsgleichungen für eine Multiphasenmischung, bestehend aus zwei Komponenten (Superscript  $\alpha \in \{1,2\}$ ) und zwei Phasen (Subscript  $k \in \{l,v\}$ ) vorgestellt. Es werden die Annahmen getroffen, dass ein inkompressibles poröses Medium betrachtet wird, lokales thermisches Gleichgewicht für alle Fluidkomponenten und lokales thermisches Nichtgleichgewicht zwischen Festkörper und Fluiden gültig ist, d.h.  $T_l = T_v = T_f = T \neq T_s$ . Weiterhin wird angenommen, dass Volumenänderungsarbeit und die kinetische Energie vernachlässigbar sind. Es wird somit ein Zweigleichungsmodell für die Energie des Festkörpers und der Fluide benutzt, ähnlich zu der Formulierung aus Kap. 3.1.

### 3.2.1. Mischungsgrößen und konstitutive Gleichungen

Im Folgenden werden die Mischungsgrößen definiert und konstitutive Gleichungen eingeführt. Die Definitionen der Mischungsdichte  $\rho$ , Mischungsgeschwindigkeit  $u$ , spezifischen Mischungsenthalpie  $h$  und der Mischungsdruck  $p$  sind in Gl. 3.41 bis 3.46 gegeben.

$$\rho = \sum_k \rho_k s_k, \quad (3.41)$$

$$\rho \vec{u} = \sum_k \rho_k \vec{u}_k, \quad (3.42)$$

$$\rho w^\alpha = \sum_k \rho_k s_k w_k^\alpha, \quad (3.43)$$

$$\rho h = \sum_k \rho_k s_k h_k, \quad (3.44)$$

$$\rho \vec{D} = \sum_k \rho_k s_k \vec{D}_k^\alpha, \quad (3.45)$$

$$p = p_k + \sum_i \int_0^s C a_{ik} ds_i + \sum_\alpha \int_0^{w^\alpha} C s_k^\alpha dw^\alpha + \int_0^T C t_k d\tilde{T}. \quad (3.46)$$

Die Variablen ohne Subscript sind Mischungsgrößen. Die Mischungsgeschwindigkeit ist ein massengewichtetes Mittel. Sind die Kapillarkräfte vernachlässigbar, vereinfacht sich Gl. 3.46 zu  $p = p_k$ . Die Variablen  $C a_{ik}$ ,  $C s_k^\alpha$  und  $C t_k$  werden Kapillarfaktor, konzentrationsabhängiger Kapillar- und thermischer Kapillarfaktor genannt:

$$C a_{ik} = \sum_j \lambda_j \left( \frac{\partial p_{cjk}}{\partial s_i} \right), \quad (3.47)$$

$$C s_k^\alpha = \sum_j \lambda_j \left( \frac{\partial p_{cjk}}{\partial \sigma_{jk}} \frac{\partial \sigma_{jk}}{\partial w^\alpha} \right), \quad (3.48)$$

$$C_{l_k} = \sum_j \lambda_j \left( \frac{\partial p_{cjk}}{\partial \sigma_{jk}} \frac{\partial \sigma_{jk}}{\partial T} \right). \quad (3.49)$$

Der makroskopische Tensor zweiter Ordnung  $\vec{D}_k^\alpha$  ist unter anderem eine Funktion der molekularen Diffusion und Fluidgeschwindigkeit. Es wird damit eine effektive Diffusivität für die Masse angegeben (Adler und Brenner, 1988). Für die kinematische Mischungsviskosität  $\nu$  und die Beweglichkeit  $\lambda$  der einzelnen Phasen gilt:

$$\nu = \left( \sum_k \frac{k_{rk}}{\nu_k} \right)^{-1}, \quad (3.50)$$

$$\lambda_k = \frac{k_{rk}}{\nu_k} \nu, \quad \sum_k \lambda_k = 1. \quad (3.51)$$

Der Massenbruch einer Phase  $k$  berechnet sich zu:

$$w_k = \frac{m_k}{m} = \frac{m_k}{m_l + m_v}, \quad (3.52)$$

und der Massenbruch einer Komponente  $\alpha$  in einer Phase  $k$  zu:

$$w_k^\alpha = \frac{m_k^\alpha}{m_k}. \quad (3.53)$$

Mit dem Molenbruch  $x^\alpha = n^\alpha/n$  und der molaren Masse  $M$  kann geschrieben werden:

$$w^\alpha = \frac{m^\alpha}{m} = \frac{M^\alpha}{M} x^\alpha. \quad (3.54)$$

Es gelten folgende triviale Zusammenhänge:

$$\sum_\alpha w_k^\alpha = 1, \quad (3.55)$$

$$\sum_\alpha w^\alpha = 1, \quad (3.56)$$

$$\sum_k \left( \sum_\alpha w_k^\alpha \right) = 2 \quad \text{im 2ph-Gebiet.} \quad (3.57)$$

Die Sättigung ist das Volumenverhältnis  $s_k = V_k/V_{\text{Gesamt}}$ . Mit Gl. 3.52 gilt für den Zusammenhang mit dem Massenbruch:

$$s_k = \frac{w_k \rho}{\rho_k}. \quad (3.58)$$

Die Mischungsdichte  $\rho$  nach Gl. 3.41 berechnet sich volumengemittelt für die flüssige Phase. Für ein Zweikomponentengemisch gilt insbesondere, ohne Verwendung des Volumenbruchs (Flüssigkeitssättigung  $s = s_l$ ), für die flüssige Phase bestehend aus den Flüssigkeiten  $\alpha$  und  $\beta$  (Brennen, 2005):

$$\rho_l = \frac{\rho_l^\alpha + \rho_l^\beta \frac{V^\beta}{V^\alpha}}{1 + \frac{V^\beta}{V^\alpha}} \quad \text{mit} \quad \frac{V^\beta}{V^\alpha} = \frac{w^\beta \rho_l^\alpha}{w^\alpha \rho_l^\beta}. \quad (3.59)$$

Für die gasförmige Phase gilt nach dem Gesetz von Amagat mit Massengewichtung (Lüdecke und Lüdecke, 2000):

$$\rho_v = \left( \sum_{\alpha} w_v^{\alpha} / \rho_v^{\alpha} \right)^{-1}. \quad (3.60)$$

Die spezifische Enthalpie einer Phase  $h_k$ , sowie die spezifische Enthalpie einer Multiphasenmischung  $h$  sind massengewichtet definiert (Brennen, 2005):

$$h_k = \sum_{\alpha} (w_k^{\alpha} h_k^{\alpha}), \quad (3.61)$$

$$h = \sum_k (w_k h_k) = \frac{1}{\rho} \sum_k (\rho_k s_k h_k) = \frac{\rho h}{\rho}. \quad (3.62)$$

Die spezifische Enthalpie der Spezies  $\alpha$  in der flüssigen Phase berechnet sich zu:

$$h_l^{\alpha} = \int_0^T c_{p,l}^{\alpha} d\tilde{T} + h_{l,\text{ref}}^{\alpha}. \quad (3.63)$$

$h_{l,\text{ref}}^{\alpha}$  wird willkürlich zu null gesetzt, da in der Numerik nur Enthalpiedifferenzen von Bedeutung sind. Bei der Sättigungstemperatur wird somit für die spezifische Enthalpie erhalten:

$$h_{l,\text{sat}}^{\alpha} = \int_0^{T_{\text{sat}}} c_{p,l}^{\alpha} d\tilde{T}. \quad (3.64)$$

Für Multikomponentenmischungen sind die Wärmen für Phasenwechsel in Tamir et al. (1983) erläutert. Für Mischungen ist die Anzahl der Freiheitsgrade im Zweiphasengebiet und Gleichgewicht gleich der Anzahl an Komponenten. Daraus folgt, dass sich unter isobarer Verdampfung kontinuierlich die Temperatur und Zusammensetzung der Mischung ändert. Gleiches gilt für Druck und Zusammensetzung während isothermer Verdampfung. Zusätzlich zu der Änderung der Zusammensetzung innerhalb der Phasen, wird der Prozess des Phasenwechsels auch von einem Phasentransfer begleitet. Es wird also teilweise oder vollständig die flüssige Phase verdampft. Dies führt zur notwendigen Unterscheidung zwischen differentiellen latenten Wärmen und integralen latenten Wärmen, sowohl bei konstantem Druck als auch bei konstanter Temperatur. Differentielle latente Wärmen werden hier definiert als absorbierte oder emittierte Wärme wenn sich ein Zweiphasensystem einer kleinen Veränderung unterzieht von einem Gleichgewichtszustand zum nächsten. Dies kann reversibel oder irreversibel geschehen. Für eine infinit kleine Molmenge  $dn_1 + dn_2 = dn'$  des flüssigen Anteils eines Zweikomponentengemischs aus Komponente 1 und 2 kann die Entropieänderung betrachtet werden. Ein Transfer von  $dn'$  Molen zwischen den Phasen setzt sich zusammen aus einem direkten Term und einem indirekten Term in der Änderung der Entropie. Der direkte Term resultiert aus der getrennten und unabhängigen Entropieänderung der beiden Komponenten  $dn_1$  und  $dn_2$  beim Übergang flüssig zu gasförmig bei konstantem Druck und Temperatur. Da beide Phasen jetzt nicht mehr im Gleichgewicht zueinander stehen, muss es einen indirekten Term geben, der der Entropieänderung bei Wiederherstellung des Gleichgewichts Rechnung trägt. Dieser resultiert aus einer Druckänderung  $dp$  und Temperaturänderung  $dT$ . Für finite Mengen von Mischungen sind integrale Wärmen notwendig und die Temperatur des Systems steigt beim Verdampfungsvorgang von der Siedetemperatur (bubble point) zur Kondensationstemperatur (dew point). Es gilt für die integrale molare Verdampfungsenthalpie einer Multikomponentenmischung  $h_{fg,\text{integral}}$  der Zusammensetzung mit dem Molanteil in der flüssigen Phase  $x_i$  und den molaren Enthalpien  $\tilde{h}_i$  der Komponente  $i$  bei

konstantem Druck  $p$ :

$$h_{fg,\text{integral}}|_p = -h_{gf,\text{integral}}|_p = \sum_{\alpha=1}^2 x^\alpha (\tilde{h}_v^\alpha(x^\alpha) - \tilde{h}_l^\alpha(x^\alpha)) = \tilde{h}_v - \tilde{h}_l = \sum_{\alpha=1}^2 x^\alpha h_{fg,\text{integral}}|_p(x^\alpha). \quad (3.65)$$

Die molaren Enthalpien  $\tilde{h}^\alpha$  für die Komponente  $\alpha$  der Mischung basieren in der Gasphase bei isobarem Phasenwechsel und dem Molanteil in der gasförmigen Phase  $y^\alpha$  auf der molaren Enthalpie der reinen Komponente  $\tilde{h}_{T^\alpha}^\alpha$  bei der Siedetemperatur  $T^\alpha(p)$ :

$$\tilde{h}_v^\alpha|_p(y^\alpha) = \tilde{h}_{T^\alpha,v}^\alpha + \underbrace{\int_{T^\alpha}^T \tilde{c}_{p,v}^\alpha dT}_{\spadesuit} + \Delta\tilde{h}_v^\alpha(y^\alpha). \quad (3.66)$$

Analog gilt in der flüssigen Phase:

$$\tilde{h}_l^\alpha|_p(x^\alpha) = \tilde{h}_{T^\alpha,l}^\alpha + \underbrace{\int_{T^\alpha}^T \tilde{c}_{p,l}^\alpha dT}_{\clubsuit} + \Delta\tilde{h}_l^\alpha(x^\alpha). \quad (3.67)$$

Die Terme  $\Delta\tilde{h}_v^\alpha(y^\alpha)$  und  $\Delta\tilde{h}_l^\alpha(x^\alpha)$  sind die Mischungswärmen der Komponente  $\alpha$  entsprechend der Mischungszusammensetzung. Für binäre Mischungen sind die Terme  $\spadesuit$  und  $\clubsuit$  immer positiv für Leichtsieder und negativ für Schwertsieder im Zweiphasengebiet, da der Integrationsbereich von  $T^\alpha$  bis  $T$  positiv oder negativ ist. Für die Enthalpie der Komponente  $\alpha$  in der gesättigten flüssigen Phase bei  $x^\alpha$  ergibt sich:

$$h_{l,\text{sat}}^\alpha(x^\alpha, T) = h_{l,\text{sat}}^\alpha(T^\alpha) + \int_{T^\alpha}^T c_{p,l}^\alpha dT + \Delta h_l^\alpha(x^\alpha), \quad (3.68)$$

und analog für die Enthalpie der gesättigten gasförmigen Phase:

$$h_{v,\text{sat}}^\alpha(y^\alpha, T) = \int_{T_{\text{ref}}}^{T^\alpha} c_{p,l}^\alpha dT + h_{fg}^\alpha(T^\alpha) + \int_{T^\alpha}^T c_{p,v}^\alpha dT + \Delta h_v^\alpha(y^\alpha). \quad (3.69)$$

Die Referenztemperatur  $T_{\text{ref}}$  kann null gesetzt werden. Der dryout Wärmestrom ergibt sich somit für einen flüssigen Eintritt für die beiden Komponenten  $\alpha$  und  $\beta$  zu:

$$\begin{aligned} \dot{q}_{\text{dryout}} = \dot{m} & \left( \underbrace{\left( w^\alpha c_{p,l}^\alpha + (1-w^\alpha) c_{p,l}^\beta \right) (T_{\text{Siede}} - T_{\text{ein}})}_{\text{sensible Wärme}} + \right. \\ & w^\alpha \left( \underbrace{(h_{v,T^\alpha}^\alpha - h_{l,T^\alpha}^\alpha)}_{h_{fg}^\alpha(T^\alpha)} + c_{p,v}^\alpha (T_{\text{Kondens}} - T^\alpha) - c_{p,l}^\alpha (T_{\text{Siede}} - T^\alpha) \right) + \\ & \left. (1-w^\alpha) \left( \underbrace{(h_{v,T^\beta}^\beta - h_{l,T^\beta}^\beta)}_{h_{fg}^\beta(T^\beta)} + c_{p,v}^\beta (T_{\text{Kondens}} - T^\beta) - c_{p,l}^\beta (T_{\text{Siede}} - T^\beta) \right) \right). \end{aligned} \quad (3.70)$$

Unter Berücksichtigung der Mischungswärme  $\Delta\tilde{h}_l$  gilt mit Gl. 3.62 und 3.63 für die flüssige Phase:

$$h_l = \sum_{\alpha} w_l^{\alpha} \int_0^T c_{p,l}^{\alpha} d\tilde{T} + \Delta\tilde{h}_l, \quad (3.71)$$

und für die gasförmige Phase:

$$h_v = \sum_{\alpha} w_v^{\alpha} \left( \int_{T_{\text{kondens}}}^T c_{p,v}^{\alpha} d\tilde{T} + h_{v,\text{sat}}^{\alpha} \right) + \Delta\tilde{h}_v. \quad (3.72)$$

Bei Mischungen von idealen Gasen und von idealen Flüssigkeiten sind die Mischungswärmen  $\Delta\tilde{h}_k$  identisch null. Orwoll und Flory (1967) leiten für Mischungen einiger Alkane die thermodynamischen Exzesseigenschaften aus einer Zustandsgleichung her. Sie geben Exzess Volumina für n-Dodekan mit n-Heptan mit  $2 \times 10^{-7} \text{ m}^3/\text{mol}$  bei  $35^\circ\text{C}$  an. Diese steigen mit der Temperatur, sind aber im Vergleich zu den Volumina der Einzelkomponenten, z.B. n-Heptan mit  $M^{\text{Heptan}}/\rho^{\text{Heptan}} = 1.471 \times 10^{-4} \text{ m}^3/\text{mol}$ , vernachlässigbar gering. Ghogomu et al. (1997) zeigen, dass für binäre Mischungen von flüssigen n-Alkanen, die eine ähnliche Kettenlänge besitzen, die Mischungsenthalpien vernachlässigbar gering sind. Dies gilt zumindest für die untersuchten Mischungen mit Dokosan, Trikosan und Tetrakosan ( $\text{C}_{22}+\text{C}_{24}$  und  $\text{C}_{23}+\text{C}_{24}$ ). Für andere flüssige binäre Mischungen ist die Mischungsenthalpie abhängig von Molanteil, Druck und Temperatur (Desmyter und van der Waals, 1958; McGlashan und Morcom, 1961). Kumaran und Benson (1986) zeigen experimentelle Daten für Mischungsenthalpien bei 298 K für n-Dodekan mit n-Heptan und geben dafür eine empirische Formel mit dem Molanteil  $x$  des Leichtsieders:

$$\frac{\Delta\tilde{h}_l}{\text{J/mol}} = x(1-x) \sum_{j=1}^m c_j (1-2x)^{j-1}. \quad (3.73)$$

Die Koeffizienten  $c_j$  sind einer Tabelle zu entnehmen (Kumaran und Benson, 1986). Die molare Exzessenthalpie nach Gl. 3.73 ist z.B. für  $x = 0.5, T = 298.15 \text{ K}$  mit ca.  $30 \text{ J/mol}$  gering im Vergleich zur molaren Enthalpie der Summe der Einzelkomponenten, z.B. n-Heptan und n-Dodekan mit  $7511 \text{ J/mol}$  bei einer Referenztemperatur von  $T = 273.15 \text{ K}$ . Eine Vernachlässigung der molaren Exzessenthalpie würde eine Verfälschung der Temperatur um maximal  $0.1 \text{ K}$  bedeuten in der flüssigen Phase. In dieser Größenordnung liegen auch die Exzessenthalpien für gasförmige binäre Mischungen (Wormald, 1977; Wormald et al., 1979).

Die Enthalpie  $\rho h$  nach Gl. 3.44 ist insbesondere mit Verwendung von Gl. 3.58 und Gl. 3.62:

$$\rho h = \sum_k \rho_k s_k h_k = \sum_k w_k \rho h_k = \rho \sum_k (w_k h_k) = \rho h. \quad (3.74)$$

Mit Gl. 3.74 wird der Korrekturfaktor für advektiven Energietransport definiert als:

$$\gamma_h = \frac{\rho \sum_k \lambda_k h_k}{\sum_k \rho_k s_k h_k} = \frac{\rho \sum_k \lambda_k h_k}{\rho h}. \quad (3.75)$$

Im Einphasengebiet wird in dieser Arbeit die vorletzte Schreibweise von Gl. 3.74 benutzt:  $\rho h|_{1ph} = \rho|_{1ph} \sum_{\alpha} (w_k^{\alpha} h_k^{\alpha})$ . Im Zweiphasengebiet wird die erste Schreibweise benutzt  $\rho h = \sum_k \rho_k s_k h_k$  mit  $\rho_k$  aus Gl. 3.59 und 3.60. Für massengewichtete Größen wird der Massenbruch  $w_k$  (für eine Multiphasenmischung) bzw.  $w_k^{\alpha}$  (für eine Multikomponentenmischung mit der Komponente  $\alpha$ ) benötigt.

### 3. Physikalische und mathematische Modellierung

Um diese Größen zu erhalten, wird für binäre Mischungen das isobare Siedediagramm heran gezogen, siehe Kap. 2.1.3.2, Gl. 3.52 bzw. Gl. 3.53. Im 2ph-Bereich gilt für die Enthalpie der flüssigen Mischung:

$$h_k = \sum_{\alpha} (w_k^{\alpha,e} h_k^{\alpha,e}). \quad (3.76)$$

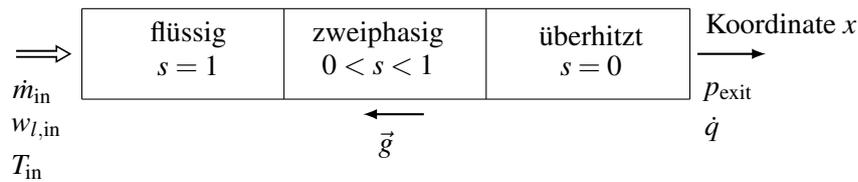
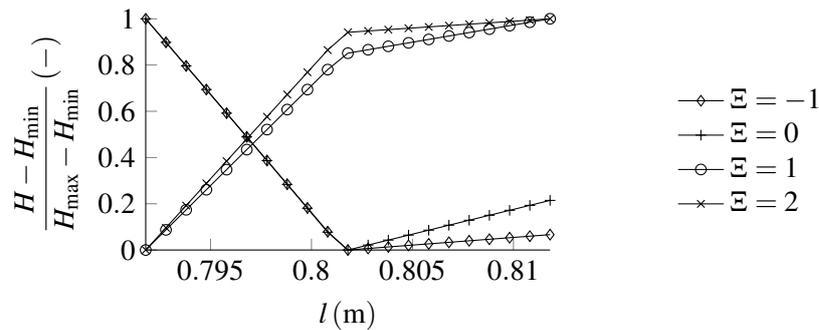
Die gesamte spezifische Enthalpie im 2ph-Bereich berechnet sich damit zu:

$$h = \sum_k (w_k^e h_k^e). \quad (3.77)$$

Die Flüssigkeitssättigung nach Gl. 3.58, lässt sich direkt mit dem Aggregatzustand berechnen (Wang und Cheng, 1996b), siehe Tab. 3.1. Hier ist ebenfalls die Berechnungsmethodik für die Dichte, spezifische Enthalpie und die Enthalpie zusammengefasst.

| Bedingung                          | $w < w_l^e$              | $w_l^e \leq w \leq w_v^e$   | $w > w_v^e$              |
|------------------------------------|--------------------------|---|--------------------------|
| Phasenzustand                      | flüssig                  | zweiphasig  | überhitzt                |
| Sättigung $s$                      | 1                        | $\frac{\rho_v(w - w_v^e)}{\rho_l(w_l^e - w) + \rho_v(w - w_v^e)}$ | 0                        |
| Konzentration $w_l$                | $w$                      | $w_l^e(T, p)$   | 0                        |
| Konzentration $w_v$                | 0                        | $w_v^e(T, p)$   | $w$                      |
| Mischungsdichte $\rho$             | Gl. 3.59                 | Gl. 3.41, 3.59, 3.60  | Gl. 3.60                 |
| spezifische Mischungsenthalpie $h$ | Gl. 3.61, 3.71           | Gl. 3.62 zweiter Term   | Gl. 3.61, 3.72           |
| Mischungsenthalpie $\rho h$        | Gl. 3.74 vorletzter Term | Gl. 3.74 zweiter Term   | Gl. 3.74 vorletzter Term |

**Tab. 3.1.:** Sättigung, Konzentrationen, Dichte und Enthalpien in einem idealen binären System mit Aggregatswechsel.


**Abb. 3.1.:** Rechengebiet und Randbedingungen für einen Testfall.

**Abb. 3.2.:** Verlauf der volumetrischen Enthalpie  $H$  am Kondensationspunkt für verschiedene  $\Xi$  nach Gl. 3.78 für einen generischen Testfall nach Abb. 3.1.

Da die Enthalpie  $\rho h$  keine streng monotone (steigende oder fallende) Funktion des thermodynamischen Zustands beim Phasenübergang ist, ist diese Größe laut Wang (1997) nicht geeignet für eine numerische Berechnung aufgrund des mangelnden Konvergenzverhaltens des numerischen Programms. Weiterhin wird ein eindeutiger Zusammenhang zwischen der volumetrischen Enthalpie und der Temperatur benötigt, der nur durch eine streng monotone Funktion sichergestellt ist. Im Folgenden wird daher eine weitere Größe, die volumetrische Enthalpie  $H$ , eingeführt, um eine numerisch geeignete Energiegleichung zu formulieren. Analog zur Vorgehensweise bei Zweiphasenmodellen einer Einkomponenten Mischung wird mit einer Konstante  $\Xi$  definiert (Wang, 1997):

$$H := \rho(h - \Xi h_{v,\text{sat}}). \quad (3.78)$$

Abb. 3.2 zeigt den Einfluss von  $\Xi$  auf  $H$  am Kondensationspunkt (bei ca.  $l = 0.802\text{ m}$ ) für einen generischen Testfall. Es handelt sich hier um ein poröses Medium und Verdampfung entlang einer Länge  $l$ . Hierzu wurde eine Temperatur vorgegeben und die entsprechende volumetrische Enthalpie  $H$  mit verschiedenen  $\Xi$  berechnet. Dargestellt ist die normierte Enthalpie für diese Rechnungen. Es zeigt sich, dass bei  $\Xi > 0$  eine streng monotone Funktion beim makroskopischen Phasenübergang erhalten wird.

### 3.2.2. Wärmestrom beim Sieden

Die übertragene Wärme zwischen Festkörper und Fluid für Reinkomponenten bei Blasensieden,  $\dot{q}_{\text{boil}}$ , nach Gl. 2.81,

$$\dot{q}_{\text{boil}} = \underbrace{\mu_l h_{fg} \left( \frac{g(\rho_l - \rho_v)}{\sigma} \right)^{0.5}}_{\natural} \underbrace{\left( \frac{c_{p,l}}{b_{sf} h_{fg} \text{Pr}^n} \right)^3}_{\sharp} (T_s - T_{\text{sat}})^3,$$

bedarf bei einer Multikomponentenmischung besonderer Behandlung. Die Sättigungstemperatur ist nunmehr nicht mehr konstant, sondern ein Teil der Lösung pro Zelle. Vom Autor dieser Arbeit wurde keine Informationen zu der Gültigkeit dieser Gleichung bei Blasensieden von Multikomponentenmischungen gefunden. Sowohl für den Faktor  $b_{sf}$  als auch für den Exponenten  $n$  der Prandtl Zahl liegen keine experimentellen Daten vor für Multikomponentenmischungen.

Zur Vereinfachung wurde im weiteren Verlauf angenommen, dass Gl. 2.81 auch für Multikomponentenmischungen gültig ist, und dass die Sensibilität der Lösung für den Faktor  $b_{sf}$  als auch für den Exponenten  $n$  der Prandtl Zahl klein ist. Für die übertragene Wärme bei Blasensieden von Multikomponentenmischungen wurde angenommen, dass sich der Temperaturdifferenz-unabhängige Term von Gl. 2.81, Term  $\natural$ , massengewichten lässt. Dieser Term wird anschließend mit der Temperaturdifferenz zwischen Festkörper und Multikomponentengemisch multipliziert, Term  $\sharp$ .

$$\dot{q}_{\text{boil, Multikomp.}} = \left( \sum_{\alpha} \left( w_l^{\alpha} \mu_l^{\alpha} h_{fg}^{\alpha} \left( \frac{g(\rho_l^{\alpha} - \rho_v^{\alpha})}{\sigma} \right)^{0.5} \left( \frac{c_{p,l}^{\alpha}}{b_{sf} h_{fg}^{\alpha} \text{Pr}^n} \right)^3 \right) \right) (T_s - T)^3. \quad (3.79)$$

### 3.2.3. Erhaltungsgleichungen

Die Erhaltungsgleichungen für eine Multiphasen und Multikomponenten Mischung sind in Tab. 3.2 zusammengefasst.

**Tab. 3.2.:** Erhaltungsgleichungen für eine Multiphasen und Multikomponenten Mischung im lokalen thermischen Nichtgleichgewicht.

|                            |   |        |
|----------------------------|---|--------|
| Massenerhaltung            | $\phi \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$   | (3.80) |
| Impulserhaltung            | $\rho \vec{u} = -\frac{\mathbf{K}}{\nu} (\nabla p - \gamma_\rho \rho \vec{g})$  | (3.81) |
| Erhaltung der Fluidenergie | $\phi \frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \nabla \cdot (\gamma_h \vec{u} \rho h) - \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T) - \nabla \cdot ((h_j - h_v) \vec{j}_l) = \dot{q}_f + \dot{q}_{sf}$ | (3.82) |
| Erhaltung der Solidenergie | $(1 - \phi) \frac{\partial}{\partial t} (\rho_s c_s T_s) - \nabla \cdot (k_{s,\text{eff}} \nabla T_s) = \dot{q}_s - \dot{q}_{sf}$   | (3.83) |

Die Impulserhaltung leitet sich ab vom Darcy Gesetz, siehe Gl. 3.84 für die Phase  $k$ , mit dem Mischungsdruck aus Gl. 3.46.

$$\rho_k \vec{u}_k = -\frac{\mathbf{K} k_{rk}}{\nu_k} (\nabla p_k - \rho_k \vec{g}). \quad (3.84)$$

Der Korrekturfaktor  $\gamma_\rho$  für die Impulserhaltung ist eine Folge dieser Umformulierung auf Mischungsgrößen und ist definiert als:

$$\gamma_\rho = \frac{\rho_l \lambda_l + \rho_v \lambda_v}{\rho_l s + \rho_v (1 - s)}. \quad (3.85)$$

#### Kommentare zur Energieerhaltung für das Fluid

Der Ausgangspunkt für die weitere Betrachtung ist die Summe der Energieerhaltungen der einzelnen Phasen  $k$  aus Gl. 2.57 in einer Formulierung mit der spezifischen Enthalpie  $h_k$  und mit einem Wärmekopplungsterm  $\dot{q}_{sf}$  analog zu Gl. 2.78 bis 2.80:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \phi \sum_k \rho_k s_k h_k \right) + \nabla \cdot \left( \sum_k \rho_k \vec{u}_k h_k \right) - \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T) = \dot{q} + \dot{q}_{sf}. \quad (3.86)$$

Wang und Cheng (1996b) leiten daraus die Energieerhaltung der Mischung her, indem der advective Term von Gl. 3.86 umgeformt wird zu:

$$\sum_k \rho_k \vec{u}_k h_k = \rho \vec{u} \sum_k \lambda_k h_k + \sum_k h_k \vec{j}_k, \quad (3.87)$$

mit dem diffusiven Massenstrom der Phase  $l$  innerhalb der Multiphasenmischung:

$$\vec{j}_l = \rho_l (-D_c \nabla s_l - D_s \nabla w^\alpha - D_t \nabla T) + \frac{\lambda_l \lambda_v \mathbf{K} (\rho_l - \rho_v)}{\nu} \vec{g}. \quad (3.88)$$

Die Koeffizienten

$$D_c = \frac{\mathbf{K}}{\rho_l \nu} \lambda_l \lambda_v \left( -\frac{\partial p_c}{\partial s} \right), \quad (3.89)$$

$$D_s = \frac{\mathbf{K}}{\rho_l \nu} \lambda_l \lambda_v \left( -\frac{\partial p_c}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial w^\alpha} \right) \quad \text{und} \quad (3.90)$$

$$D_t = \frac{\mathbf{K}}{\rho_l \nu} \lambda_l \lambda_v \left( -\frac{\partial p_c}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial T} \right) \quad (3.91)$$

werden als kapillarer, konzentrationsabhängiger kapillarer und thermokapillarer Diffusionskoeffizient bezeichnet, siehe auch Gl. 3.47 bis 3.49. Wang und Cheng (1996b) schreiben den Temperaturgradienten als:

$$\nabla T = \frac{1}{c_{p,j}} \nabla h_j. \quad (3.92)$$

Da in diesem neuen Multikomponentenmodell auch die spezifischen isobaren Wärmekapazitäten der Phasen von der Konzentration der Komponenten in ebendiesen Phasen abhängig sind, wird in diesem Modell für die Enthalpie der flüssigen Phase Gl. 3.71 benutzt. Somit ergibt sich für den Temperaturgradienten die Gleichung 3.93, die Gl. 3.92 mit  $j = l$  o.B.d.A. ersetzt:

$$\nabla T = \frac{1}{\sum_{\alpha} w_l^{\alpha} c_{p,l}^{\alpha}} \left( \nabla h_l - T \nabla \left( \sum_{\alpha} w_l^{\alpha} c_{p,l}^{\alpha} \right) \right). \quad (3.93)$$

Die spezifische isobare Wärmekapazität der Mischung  $c_{p,l} = \sum_{\alpha} w_l^{\alpha} c_{p,l}^{\alpha}$  ist nicht konstant im Zweiphasengebiet. Damit birgt Gl. 3.92 eine zusätzliche Annahme für das Zweiphasengebiet, die hier vermieden werden soll. Für lokales thermisches Nichtgleichgewicht zwischen Festkörper und Fluiden, für eine beliebige Phase  $j$  und Gl. 3.75 gilt somit Gl. 3.82:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho h) + \underbrace{\nabla \cdot (\gamma_h \vec{u} \rho h)}_{(1)} - \underbrace{\nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T)}_{(2)} - \underbrace{\nabla \cdot ((h_j - h_v) \vec{j}_l)}_{(3)} - \dot{q} - \dot{q}_{sf} = 0.$$

Die neue Definition der volumetrischen Enthalpie  $H$  aus Kap. 3.2.1 wird verwendet. Bei Verwendung von Gl. 3.78 müssen die Terme (1) bis (3) von Gl. 3.82 anders formuliert werden. Aus Gl. 3.78 folgt:

$$h = \frac{H + \Xi \rho h_{v,\text{sat}}}{\rho}.$$

Somit lassen sich die Terme (1) bis (3) mit  $j = l$  o.B.d.A. umformulieren zu:

$$\begin{aligned}
 (1): \quad \nabla \cdot (\gamma_h \vec{u} \rho h) &= \nabla \cdot \underbrace{(\gamma_h \vec{u} H)}_I + \nabla \cdot \underbrace{(\gamma_h \vec{u} \Xi \rho h_{v,\text{sat}})}_V, \\
 (2): \quad \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T) &= \nabla \cdot \underbrace{\left( \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} \nabla \left( \frac{H}{\rho_l s} \right) \right)}_{II+III} + \nabla \cdot \underbrace{\left( \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} \nabla \left( \frac{1}{\rho_l s} (\Xi \rho h_{v,\text{sat}} - \rho_v (1-s) h_v) \right) \right)}_{VI} \\
 &\quad - \nabla \cdot \underbrace{\left( \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} T \nabla c_{p,l} \right)}_{VIII^*}, \\
 (3): \quad \nabla \cdot \left( (h_l - h_v) \vec{j}_l \right) &= \nabla \cdot \underbrace{\left( \vec{j}_l \left( H \frac{1}{\rho_l s} + \frac{\Xi \rho h_{v,\text{sat}}}{\rho_l s} - \left( \frac{\rho_v (1-s)}{\rho_l s} + 1 \right) h_v \right) \right)}_{IV+VII}.
 \end{aligned}$$

Wird der Term (2) betrachtet, so taucht nach dessen Umformulierung mit  $H$  der Term  $\nabla(H/(\rho_l s))$  auf. Diese Ableitung kann mit der Produktregel weiter zerlegt werden. Nach Einsetzen und weiterer Umformung ergibt sich:

$$\begin{aligned}
 \phi \frac{\partial}{\partial t} (H + \Xi \rho h_{v,\text{sat}}) + \nabla \cdot \left( \underbrace{\gamma_h \vec{u} H}_I + \underbrace{\gamma_h \vec{u} \Xi \rho h_{v,\text{sat}}}_V - \underbrace{\dots}_{II} - \underbrace{\dots}_{III} - \underbrace{\vec{j}_l \frac{1}{\rho_l s} H}_{IV} \right) \\
 - \underbrace{\frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} \nabla \left( \frac{\Xi \rho h_{v,\text{sat}} - \rho_v (1-s) h_v}{\rho_l s} \right)}_{VI} - \underbrace{\vec{j}_l \left( \frac{\Xi \rho h_{v,\text{sat}}}{\rho_l s} - \left( \frac{\rho_v (1-s)}{\rho_l s} + 1 \right) h_v \right)}_{VII} \\
 - \underbrace{\frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} T \nabla c_{p,l}}_{VIII^*} - \dot{q} - \dot{q}_{sf} = 0.
 \end{aligned} \tag{3.94}$$

Die Terme  $II$  und  $III$  sind eine Folge der Anwendung der Produktregel, wie oben beschrieben. Gl. 3.94 ist eine Advektions-Diffusions-Gleichung für die gesuchte Variable  $H$ . Durch die Anwesenheit von  $h_v(H)$  in den Termen  $VI$  und  $VII$  und durch die Anwesenheit von der Fluidtemperatur  $T$  im Term  $VIII^*$ <sup>1</sup> ist die Energieerhaltung noch schwach mit der eigenen Lösung gekoppelt. Eine Möglichkeit der Entkoppelung wird in diesem Kapitel noch beschrieben. Der Term  $II$  wird abhängig vom Phasenzustand gebildet:

$$II = \begin{cases} \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} \nabla \left( \frac{1}{\rho} \right) H & \text{für } s = 1 \\ \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} \nabla \left( \frac{1}{\rho_l s} \right) H & \text{für } 0 < s < 1 \\ \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,v}} \nabla \left( \frac{1}{\rho} \right) H & \text{für } s = 0. \end{cases} \tag{3.95}$$

<sup>1</sup>Im weiteren Verlauf dieses Kapitels wird noch darauf eingegangen, warum dieser Term in dieser Form nicht wünschenswert ist.

Ebenso wird der Term *III* abhängig vom Phasenzustand gebildet:

$$III = \begin{cases} \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l} \rho} \frac{1}{\rho} \nabla H & \text{für } s = 1 \\ \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l} \rho} \frac{1}{\rho} \nabla H & \text{für } 0 < s < 1 \\ \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,v} \rho} \frac{1}{\rho} \nabla H & \text{für } s = 0. \end{cases} \quad (3.96)$$

Gl. 3.94 kann für stationäre Strömung abstrahiert werden auf eine folgende Form:

$$\nabla \cdot (F \cdot H - \bar{J} \nabla H + \bar{g}) - \dot{q}_{sf} = 0. \quad (3.97)$$

Ein advektiver Fluss im mathematischen Sinne ist in dieser Gleichung der Term  $F \cdot H$ , ein mathematisch diffusiver Fluss ist  $\bar{J} \nabla H$  und ein mathematisch konservativer Fluss ist  $\bar{g}$ . Die Terme *I* bis *VIII\** lassen sich nach Tab. 3.3 einteilen, geordnet nach mathematisch und physikalisch advektiven, diffusiven und konservativen Flüssen. Die physikalisch diffusiven Flüsse, durch Wärmeleitung innerhalb des Fluids, werden durch die Formulierung mit Mischungsgrößen teilweise zu advektiven oder konservativen Flüssen. Dies trifft auf die Terme *II*, *IV*, *VI*, *VII* und *VIII\** zu. Des Weiteren ist der Term *V*, hervorgerufen durch den physikalisch advektiven Fluss, in der Mischungsformulierung ein konservativer Fluss. In der Diskretisierung ist es möglich, bei Verwendung des Power-Law und/oder Upwind-Schemas die Péclet-Zahl nach den mathematischen oder nach den physikalischen Typen zu definieren.

| Term           | mathematischer Typ  | physikalischer Typ  | Besonderheit                |
|----------------|---------------------|---------------------|-----------------------------|
| <i>I</i>       | advektiver Fluss    | advektiver Fluss    |                             |
| <i>II</i>      | advektiver Fluss    | diffusiver Fluss    | null im einphasigen Bereich |
| <i>III</i>     | diffusiver Fluss    | diffusiver Fluss    |                             |
| <i>IV</i>      | advektiver Fluss    | diffusiver Fluss    | null im einphasigen Bereich |
| <i>V</i>       | konservativer Fluss | advektiver Fluss    |                             |
| <i>VI</i>      | konservativer Fluss | diffusiver Fluss    | null im einphasigen Bereich |
| <i>VII</i>     | konservativer Fluss | diffusiver Fluss    | null im einphasigen Bereich |
| <i>VIII*</i>   | konservativer Fluss | diffusiver Fluss    | null im einphasigen Bereich |
| $\dot{q}$      | konservativer Fluss | konservativer Fluss |                             |
| $\dot{q}_{sf}$ | konservativer Fluss | konservativer Fluss |                             |

**Tab. 3.3.:** Klassifizierung der Terme für die Energieerhaltung des Fluids, Gl. 3.94.

Für die gekoppelten Energiegleichungen fehlt noch ein eindeutiger Zusammenhang zwischen  $H$  und  $T$ . Die Monotonitätsforderung an die volumetrische Enthalpie  $H$  ermöglicht diesen eindeutigen Zusammenhang für  $T(H)$ . Für einphasige Strömung mit den vorher getroffenen Annahmen ist der folgende analytische Zusammenhang möglich:

$$T = \begin{cases} H \frac{1}{\underbrace{\left(\sum_{\alpha} w_l^{\alpha} c_{p,l}^{\alpha}\right)}_{\triangle} \rho_l} + \frac{\Xi h_{v,\text{sat}}}{\underbrace{\sum_{\alpha} w_l^{\alpha} c_{p,l}^{\alpha}}_{\diamond}} & \text{für } s = 1, \\ H \frac{1}{\underbrace{\left(\sum_{\alpha} w_v^{\alpha} c_{p,v}^{\alpha}\right)}_{\blacktriangle} \rho_v} + \frac{(\Xi - 1) h_{v,\text{sat}}}{\underbrace{\sum_{\alpha} w_v^{\alpha} c_{p,v}^{\alpha}}_{\blacklozenge}} & \text{für } s = 0. \end{cases} \quad (3.98)$$

Für 1D Strömung sind die Terme  $\triangle, \diamond, \blacktriangle, \blacklozenge$  in ihrem jeweiligen Gültigkeitsbereich konstant und können somit unabhängig von der Lösung der Erhaltungsgleichungen gebildet werden. Für den Wärmestrom des Festkörpers auf das Fluid ergibt sich zum Beispiel analytisch für  $s = 1$ :

$$\dot{q}_{sf} = \bar{h}_{sl} \alpha_{sf} (T_s - (H\triangle + \diamond)). \quad (3.99)$$

Im Zweiphasengebiet gibt es keinen analytischen Zusammenhang zwischen  $H$  und  $T$ , da die Gleichgewichtskonzentrationen  $w_k^e$  iterativ berechnet werden müssen, siehe Gl. 3.77. Deswegen wird  $H(w, T)$  für eine gegebene Massenkonzentration mit einem abschnittsweise definiertem Polynom dritter Ordnung mit  $n$  Stützstellen auf einer Linie konstantem Massenanteils ( $w = \text{const.}$ ) approximiert. Aus diesem Polynom  $p$  kann die Umkehrfunktion  $T(w, H)$  mit einer Taylor-Entwicklung bis inklusive dem dritten Glied um einen Entwicklungspunkt  $H_0$  gebildet werden. Es wird also angenommen:

$$p: \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R} \quad \text{mit} \quad H \approx p(T) = p_1 T^3 + p_2 T^2 + p_3 T + p_4, \quad (3.100)$$

für den Definitionsbereich  $\mathbb{D}_i = [T_i, T_{i+1}]$  und den Abbildungsbereich  $\mathbb{A}_i = [H_i, H_{i+1}]$  mit  $i = 1 \dots n$ . Da  $H$  in der Nähe der Siedetemperatur stärker steigt als bei höheren Temperaturen, wurde die Intervallbreite  $T_{i+1} - T_i$  für den Bereich  $[T_{\text{Siede}}, T_{\text{Siede}} + 5 \text{ K}]$  klein gewählt und für den Bereich  $]T_{\text{Siede}} + 5 \text{ K}, T_{\text{Kondens}}]$  größer gewählt. Die Umkehrfunktion  $q(H)$  gibt das triviale Ergebnis:

$$p(q(H)) = H.$$

Einsetzen eines Entwicklungspunktes  $(T_0, H_0)$  in Gl. 3.100 und differenzieren ergibt somit die Ableitungen  $q', q'', q'''$  und schließlich die Taylor-Reihe mit

$$T = q(H) \approx \underbrace{q(H_0)}_{T_0} + \sum_{n=1}^3 \frac{q^{(n)}}{n!} (H - H_0)^n. \quad (3.101)$$

Terme der Ordnung  $\mathcal{O}^4$  werden vernachlässigt. Gl. 3.101 wird benutzt, um die Temperaturdifferenz  $T_s - T(H)$  zu berechnen. Da  $T(H)$  approximiert wurde, wird für  $0 < s < 1$  näherungsweise mit dem Entwicklungspunkt  $H_0$  der übertragene Wärmestrom berechnet zu

$$\begin{aligned} \dot{q}_{sf} \approx & (1-s)\bar{h}_{sv}\alpha_{sf} \left( T_s - T(H_0) - \sum_{n=1}^3 \frac{q^{(n)}}{n!} (H - H_0)^n \right) \\ & + sc_{qboil}\alpha_{sf} \left( T_s - T(H_0) - \sum_{n=1}^3 \frac{q^{(n)}}{n!} (H - H_0)^n \right)^3, \end{aligned} \quad (3.102)$$

siehe dazu Gl. 2.79. Diese Terme werden zur Quelltermlinearisierung benutzt. Hier ist  $\dot{q}_{sf}$  nicht-linear in der Ordnung 3 von  $T_s$  und in der Ordnung 9 von  $H$ . Zur Vereinfachung wird analog zu Kap. 3.1.2 benutzt:

$$\begin{aligned} -\dot{q}_{sf}\Delta x = \bar{S} = S\Delta x = S_C + S_{P1}T_s + S_{P2}H = \\ \bar{S}^* + \left( \frac{d\bar{S}}{dT_s} \right)^* (T_s - T_s^*) + \left( \frac{d\bar{S}}{dH} \right)^* (H - H^*). \end{aligned} \quad (3.103)$$

Auch hier gilt analog zu Kap. 3.1.2, dass  $S_{P1}$  negativ und  $S_{P2}$  positiv sein sollten, um die Diagonaldominanz der Diskretisierungsmatrizen zu stärken.

Eine Fehlerbetrachtung der Approximation in Gl. 3.100 mit 4 diskreten Zwischenwerten in  $]T_i, T_{i+1}[$  ergibt einen RMS-Wert von  $1 \times 10^5$  für den Bereich  $[T_{\text{Siede}}, T_{\text{Siede}} + 5\text{K}]$  und einen RMS-Wert von  $3 \times 10^1$  für den Bereich  $[T_{\text{Siede}} + 5\text{K}, T_{\text{Kondens}}]$  für ein exemplarisches  $w = 0.5$  im Zweiphasengebiet. Gemessen an der Größenordnung von  $H$  ist dies ein vertretbar kleiner Wert.

Gl. 3.101 lässt sich auch nutzen, um die notwendige Temperatur  $T$  im Term  $VIII^*$  von Gl. 3.94 durch einen Zusammenhang mit der gesuchten Größe  $H$  zu ersetzen. Anwenden eines ähnlichen Schemas wie in Gl. 3.103 liefert somit:

$$\text{Term } VIII^* = T \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} \nabla c_{p,l} \approx \left( q(H_0) + \sum_{n=1}^3 \frac{q^{(n)}}{n!} (H - H_0)^n \right) \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} \nabla c_{p,l} \approx (U_C + U_P H) \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} \nabla c_{p,l}. \quad (3.104)$$

Gl. 3.104 enthält einen Term, der direkt mit der Enthalpie  $H$  multipliziert wird, und einen Term ohne  $H$ . Konsistent mit der vorherigen Nummerierung der Terme  $I$  bis  $VII$  wird nun verwendet:

$$\text{Term } VIII = U_P H \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} \nabla c_{p,l}, \quad (3.105)$$

und

$$\text{Term } IX = U_C \frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,l}} \nabla c_{p,l}. \quad (3.106)$$

Eine Vereinfachung ergibt sich, falls auf Seite 55, Term (2), die Temperatur direkt mit diesem Ansatz ersetzt wird zu:

$$\nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla T) \approx \nabla \cdot (k_{\text{eff}} \nabla (U_C + U_P H)) = \nabla \cdot \underbrace{(k_{\text{eff}} H \nabla U_P)}_X + \nabla \cdot \underbrace{(k_{\text{eff}} U_P \nabla H)}_{XI} + \nabla \cdot \underbrace{(k_{\text{eff}} \nabla U_C)}_{XII}. \quad (3.107)$$

| Term           | mathematischer Typ  | physikalischer Typ  | Besonderheit                                   |
|----------------|---------------------|---------------------|--|
| <i>I</i>       | advektiver Fluss    | advektiver Fluss    |  |
| <i>IV</i>      | advektiver Fluss    | diffusiver Fluss    | null im einphasigen Bereich                    |
| <i>V</i>       | konservativer Fluss | advektiver Fluss    |  |
| <i>VII</i>     | konservativer Fluss | diffusiver Fluss    | null im einphasigen Bereich                    |
| <i>X</i>       | advektiver Fluss    | diffusiver Fluss    | null im einphasigen Bereich, falls $U_C = T^*$ |
| <i>XI</i>      | diffusiver Fluss    | diffusiver Fluss    | null im einphasigen Bereich, falls $U_C = T^*$ |
| <i>XII</i>     | konservativer Fluss | diffusiver Fluss    |  |
| $\dot{q}$      | konservativer Fluss | konservativer Fluss |  |
| $\dot{q}_{sf}$ | konservativer Fluss | konservativer Fluss |  |

**Tab. 3.4.:** Klassifizierung der Terme für die Energieerhaltung des Fluids, siehe Tabelle 3.3, Gl. 3.82, 3.94 und die Vereinfachung in Gl. 3.107.

Nach dieser Vereinfachung ist der Term *X* ein advektiver Fluss, der Term *XI* ein diffusiver Fluss und der Term *XII* ein konservativer Fluss in der Energiegleichung für das Fluid. Tab. 3.3 bekommt somit andere Einträge, die Terme *II*, *III*, *VI* und *VIII* entfallen, siehe Tab. 3.4. Die Diskretisierung mittels dieser Vereinfachung hat sich als stabiler herausgestellt, da der Term *VI* numerische Probleme beim Phasenübergang verursachen kann. In einphasigen Gebieten ist  $U_P = 0$  und  $U_C \neq 0$ , falls  $U_C$  der Temperatur im vorherigen Iterationsschritt  $T^*$  gleichgesetzt wird. Im Zweiphasengebiet ist  $U_P, U_C \neq 0$  und die Taylor Reihenentwicklung von Gl. 3.101 wird genutzt. Im Folgenden werden nur Ergebnisse gezeigt, die auf diesem Ansatz beruhen.

### 3.2.4. Globale Energiebetrachtung mittels erstem Hauptsatz der Thermodynamik

Eine analytische Lösung mit Anfangs- und/oder Endpunkt im Zweiphasengebiet ist nicht möglich, da im Zweiphasengebiet die Gleichgewichtszusammensetzung iterativ bestimmt werden muss. Jedoch ist die Bestimmung einer exakten Endtemperatur für das Fluid möglich, indem eine globale Energiebilanz über das Gebiet gezogen wird. Das Integral von Gl. 3.86 über das gesamte Rechengebiet für 1D Strömung und eine stationäre Lösung liefert ein Kriterium für die globale Energieerhaltung im System mit den Energieströmen  $\dot{q}_i$  an den Rändern:

$$\underbrace{\sum_k \rho_k u_k h_k \Big|_{\text{Austritt}} - \sum_k \rho_k u_k h_k \Big|_{\text{Eintritt}}}_{\dagger} - \sum_i \dot{q}_i \stackrel{!}{=} 0. \quad (3.108)$$

Es ist zu beachten, dass  $u_v$  negativ sein kann, insbesondere für  $s < 1$  bei Temperaturen knapp oberhalb der Siedetemperatur aufgrund des adversen Druckgradienten für den Dampf. Weiterhin ist der Term  $\sum_k \rho_k u_k h_k$  nicht streng monoton steigend im Übergangsbereich zwischen der Flüssigkeit und dem Zweiphasengebiet und der Term  $\dagger$  kann negativ werden. Als Maß für die globale Energieerhaltung wird die Abweichung von Gl. 3.108 bezogen auf den Eintrittszustand herangezogen:

$$\frac{\sum_k \rho_k u_k h_k \Big|_{\text{Austritt}} - \sum_k \rho_k u_k h_k \Big|_{\text{Eintritt}} - \sum_i \dot{q}_i}{\sum_k \rho_k u_k h_k \Big|_{\text{Eintritt}}} \stackrel{!}{=} 0. \quad (3.109)$$

Die Anwendung des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik, bei Berücksichtigung aller Flüsse in und aus dem Rechengebiet, liefert eine analytische Austrittstemperatur mittels einer globalen Energiebilanz. Die Zunahme der Enthalpie des Fluids über dem Rechengebiet entspricht der Netto Wärmezuführung in das Rechengebiet, sprich der integralen Wärme vom porösen Verdampfer in das Fluid:

$$h_{\text{Austritt}} = h_{\text{Eintritt}} + \frac{\dot{q}_{\text{total}}}{\dot{m}}. \quad (3.110)$$

Mit Gl. 3.98 kann diese spezifische Enthalpie in Zusammenhang mit einer analytischen Austrittstemperatur gebracht werden, analog zu der Beschreibung in Kap. 3.1.4 für ein einkomponentiges Fluid.

### 3.2.5. Diskretisierung der stationären Energieerhaltungsgleichung

Im Folgenden wird eine stationäre 1D Strömung betrachtet mit der Methode der Finiten Volumen. Die Energiegleichung für das Fluid, Gl. 3.94, kann in der Finite Volumen Schreibweise geschrieben werden, mit den advektiven Flüssen  $F \cdot H$ , diffusiven Flüssen  $\bar{J}\Delta H$  und konservativen Flüssen  $\bar{g}$  nach Gl. 3.97. Nach Integration mit  $\int_{i-1/2}^{i+1/2} \dots dx$  ergibt sich somit:

$$H_{i+1/2}F_{i+1/2} - H_{i-1/2}F_{i-1/2} - \bar{J}_{i+1/2}(H_{i+1} - H_i) + \bar{J}_{i-1/2}(H_i - H_{i-1}) + \bar{g}_{i+1/2} - \bar{g}_{i-1/2} - \underbrace{\dot{q}_{sf}\Delta x}_{\text{s. Gl. 3.99, 3.103}} = 0. \quad (3.111)$$

Nach geeigneter Umformung (Patankar, 1980) wird schließlich in Matrixschreibweise erhalten:

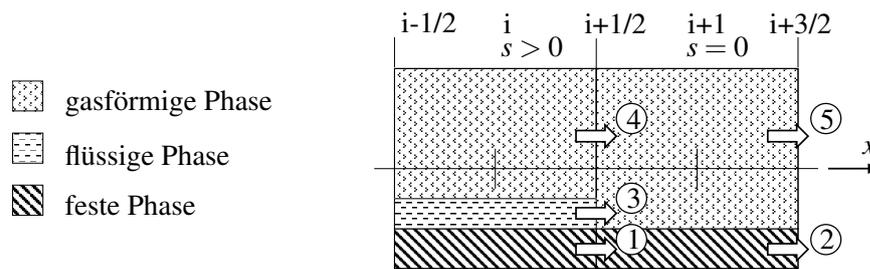
$$a_{i-1}H_{i-1} - a_iH_i + a_{i+1}H_{i+1} + G(s, T, w)T_{s,i} = b_i. \quad (3.112)$$

Der Vorfaktor  $G(s, T, w)$  ist u.a. abhängig vom Phasenzustand und nimmt entweder den Wert  $\Delta x \bar{h}_{sl} \alpha_{sf}$  an ( $s = 1$ ), den Wert  $\Delta x \bar{h}_{sv} \alpha_{sf}$  an ( $s = 0$ ) oder den Wert  $-SP_1$  an ( $0 < s < 1$ ). Mit der Energiegleichung für die Festkörpermatrix wird analog vorgegangen. Gl. 3.94 und die Wärmeleitungsgleichung für den Festkörper, siehe Tab. 2.6, bilden somit nach Diskretisierung ein gekoppeltes Gleichungssystem mit der System-Matrix ähnlich zum System 3.29:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{A}^* \\ \mathbf{B}^* & \mathbf{B} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \vec{H} \\ \vec{T}_s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{b} \\ \vec{c} \end{bmatrix}.$$

Die Terme *IV*, *VI* und *VII* in Gl. 3.94 weisen eine Singularität für  $s = 0$  auf. Diese Singularität macht sich durch Division durch null bemerkbar und ist eine künstlich induzierte Folge der Formulierung als Mischungsmodell. Die Handhabung dieser Terme an den makroskopischen Phasengrenzen zwischen Zweiphasengebiet und überhitztem Dampf erfordert somit besondere Aufmerksamkeit. In einem Finite Volumen Verfahren mit Zentrierung der Kontrollvolumina auf den Zellzentren befindet sich die makroskopische Phasengrenze am Zellinterface. Somit hat die erste Zelle mit Index  $i + 1$  im überhitzten Gebiet am rechten Zellinterface  $i + 3/2$  die Sättigung  $s = 0$  und am linken Zellinterface  $i + 1/2$  einen unbestimmten Wert, siehe dazu Abb. 3.3 und Tab. 3.5. Die Bestimmung des advektiven Wärmestroms am Interface  $i + 1/2$  für die flüssige Phase,  $k = l$ , ist physikalisch nicht definiert, da die flüssige Phase stromab von diesem Interface nicht mehr vorliegt. Damit bleibt dies eine offene Frage der Diskretisierung. In Tab. 3.5 wird dies mit einem Fragezeichen vermerkt. Wird an der Position  $i + 1/2$  und stromauf im Zweiphasengebiet stattdessen die gasförmige Phase bilanziert,  $k = v$ , verlagert sich das Problem lediglich auf die makroskopische Phasengrenze am Übergang von flüssigem Phasenzustand zum Zweiphasengebiet und die fehlende gasförmige Phase stromauf. Wird auch für dieses Interface  $i + 1/2$  die übliche Berechnung der Flüsse im Zweiphasengebiet angewandt, so muss eine Approximation zwischen  $s = 0$  (bei  $i + 1$ ) und  $s > 0$  (bei  $i$ ) benutzt werden. Dies führt dazu, dass die erste Zelle  $i + 1$  im überhitztem Dampf von links (stromauf) einen Anteil der konservativen Flüsse *VI* und *VII* erfährt, aber von rechts (stromab) keinen Anteil der Flüsse *VI* und *VII* und kann zu numerischer Instabilität führen. Eine mögliche Herangehensweise ist die Interpolationen von der Sättigung  $s$  für dieses Interface  $i + 1/2$  mit dem arithmetischen Mittel zwischen den Zellzentren  $i$  und  $i + 1$ , oder andere Formen der Mittelung. Die Verwendung des arithmetischen Mittels an dieser Position hat konvergierende numerische Rechnungen hervorgerufen und wurde bei allen Ergebnissen, die im Rahmen dieser Arbeit gezeigt werden, genutzt.

Eine Alternative besteht darin, diese Terme zu regularisieren. D.h. die Terme VI und VII können für kleine Sättigungen um einen Faktor erniedrigt werden, z.B. mit dem Vorfaktor  $s$ . Auf diese Weise sind die konservativen Flüsse am Interface  $i + 1/2$  verkleinert bzw. gehen gegen null. Eine weitere Alternative stellt sich dar, falls mit einer Residualsättigung  $s_r$  nach Gl. 2.5 gerechnet wird. Dies kann physikalisch als Restfluidmenge betrachtet werden, die nicht verdampfen kann. Dies führt dazu, dass sich überhitzter Dampf zusammen mit Restfluid in einer Zelle befinden kann. Wird die Residualsättigung erreicht, dann ist der Kondensationspunkt überschritten und der Phasenzustand entspricht dem des überhitzten Fluids. Diese beiden Alternativen konnten keine konvergierenden numerischen Rechnungen hervorbringen und wurden somit als ungeeignet verworfen.



**Abb. 3.3.:** Skizze zum makroskopischen Übergang am Kondensationspunkt des Mischungsmodells. Gezeigt ist ein REV, die Ausdehnung lateral zur  $x$ -Achse dient nur zur Verdeutlichung. Der Kondensationspunkt befindet sich in einem zellzentrierten Modell am Zellinterface  $i+1/2$ . Die Wärmeströme sind mit Pfeilen und Nummern gekennzeichnet, siehe Tab. 3.5. Nicht dargestellt sind die Wärmeströme am Interface  $i - 1/2$  und der Wärmekopplungsterm  $\dot{q}_{sf}$ , der im Zellzentrum wirkt, siehe Gl. 3.102. Zur Lage des Kondensationspunkt siehe auch Abb. 2.10.

| Wärmeströme                     | Modellierung <sup>1</sup>                                 | Modellierung <sup>2</sup>  |
|---------------------------------|---|--|
| Wärmeleitung Festkörper ①       | $k_{s,\text{eff}} _{i+1/2} \frac{dT_s}{dx} \Big _{i+1/2}$ |  |
| Wärmeleitung gasförmige Phase ④ | $k_{\text{eff}} _{i+1/2} \frac{dT_f}{dx} \Big _{i+1/2}$   | $\frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,v}} \Big _{i+1/2} \frac{dh_v}{dx} \Big _{i+1/2}$ |
| Oberfläche Flüssigkeit Gas ③    | advektiver Strom nach Gl. 3.87                            | $J_l _{i+1/2} (h_l - h_v) _{i+1/2}$  |
| Wärmeleitung Festkörper ②       | $k_{s,\text{eff}} _{i+3/2} \frac{dT_s}{dx} \Big _{i+3/2}$ |  |
| Wärmeleitung gasförmige Phase ⑤ | $k_{\text{eff}} _{i+3/2} \frac{dT_f}{dx} \Big _{i+3/2}$   | $\frac{k_{\text{eff}}}{c_{p,v}} \Big _{i+3/2} \frac{dh_v}{dx} \Big _{i+3/2}$ |

<sup>1</sup> Formulierung der Energieerhaltung als Summe der einzelnen Phasen  $k$

<sup>2</sup> Formulierung der Energieerhaltung im Mischungsmodell

**Tab. 3.5.:** Wärmeströme am makroskopischen Übergang am Kondensationspunkt des Mischungsmodells; Notation und Erläuterung siehe Skizze in Abb. 3.3.

### 3.2.6. Numerische Lösung des Multiphasen Mischungsmodells

Das folgende Lösungsschema wird benutzt, um das Multiphasen Mischungsmodell iterativ für 1D und stationäre Strömung zu lösen, siehe auch Abb. 3.5.

1. Initialisierung  $\rightarrow T = T_s = T_{\text{in}}$
2. Äußere Iteration
  - a) VLE lösen für gegebenen Druck  $\rightarrow w_l^\alpha, w_v^\alpha, s, T_{\text{siede}}, T_{\text{kondens}}$ ; Mischungsvariablen berechnen
  - b) Massen- und Impulserhaltung lösen, Gl. 3.80, 3.81
  - c) Phasengeschwindigkeiten berechnen,  $\vec{j}_l$  und  $\vec{h}_{sk}$ , Gl. 4.12 (Lindner et al., 2015, 2016a)
  - d) Innere Iteration: Gekoppelte Energiegleichungen 3.82, 2.58 lösen
    - i. Die Terme  $q^{(n)}$  für die Taylor Reihe von  $T(H)$  berechnen, Gl. 3.101
    - ii. (falls notwendig) Die Terme  $S_{P1}, S_{P2}, S_C$  für die Wärmestromkopplung im Zweiphasengebiet berechnen, Gl. 3.103
    - iii. Berechne die Flüsse und erstelle das Diskretisierungssystem, siehe Abb. 3.4
    - iv. Löse nach der volumetrischen Enthalpie und der Temperatur des Solids ( $\vec{H}, \vec{T}_s$ ), siehe Abb. 3.4
    - v. Berechne die Temperatur  $T$  aus  $H$  mit dem analytischen Zusammenhang aus Gl. 3.98 in einphasigen Gebieten, in Zweiphasengebieten löse  $T(H)$  mit der inversen Funktion 3.101
    - vi. Berechne das Residuum der inneren Iteration mit Gl. 3.113, und fahre fort mit Schritt 2(d)i falls das Konvergenzkriterium nicht erfüllt ist

$$\text{Residuum} = \left( \frac{1}{2nx} \sum_i \left( \left( \frac{T_{s,i}^{n+1} - T_{s,i}^n}{T_{s,i}^n} \right)^2 + \left( \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{T_i^n} \right)^2 \right) \right)^{1/2} < \varepsilon. \quad (3.113)$$

- e) Berechne das Residuum der äußeren Iteration mit Gl. 3.113, fahre fort mit Schritt 2a falls das Konvergenzkriterium nicht erfüllt ist

Abb. 3.4 zeigt die Diskretisierungsmatrix als schwach besetzte Matrix für einen generischen Testfall mit  $nx = 7$  Zellen, um die Darstellung übersichtlich zu gestalten. Gelöst wird nach der volumetrischen Enthalpie  $H$  und der Solid Temperatur  $T_s$ . Es handelt sich um eine tridiagonale Matrix mit zwei weiteren Nebendiagonalen, die die Kopplung mit dem Wärmestrom  $\dot{q}_{sf}$  anzeigen. An den Rändern, in den Zeilen 1,  $nx$ ,  $nx + 1$  und  $2nx$ , gibt es nur ein Element für eine Dirichlet Randbedingung bzw. zwei Elemente für eine Neumann Randbedingung, siehe Kap. 3.1.2. Für die Randbedingung der Festkörpertemperatur am Eintritt ist eine Dirichlet Randbedingung gewählt worden. Eine Frage der Diskretisierung ist, ob für die Flüsse der Energieerhaltung im äußeren Iterationsschritt  $n + 1$  die Werte der vorangegangenen Iteration  $n$  benutzt werden sollten. In der folgenden inneren Iteration wären somit die Flüsse der Energieerhaltung konstant und nur die Terme  $S_{P1}, S_{P2}, S_C$  der Quelltermlinearisation würden sich in der inneren Iteration ändern.



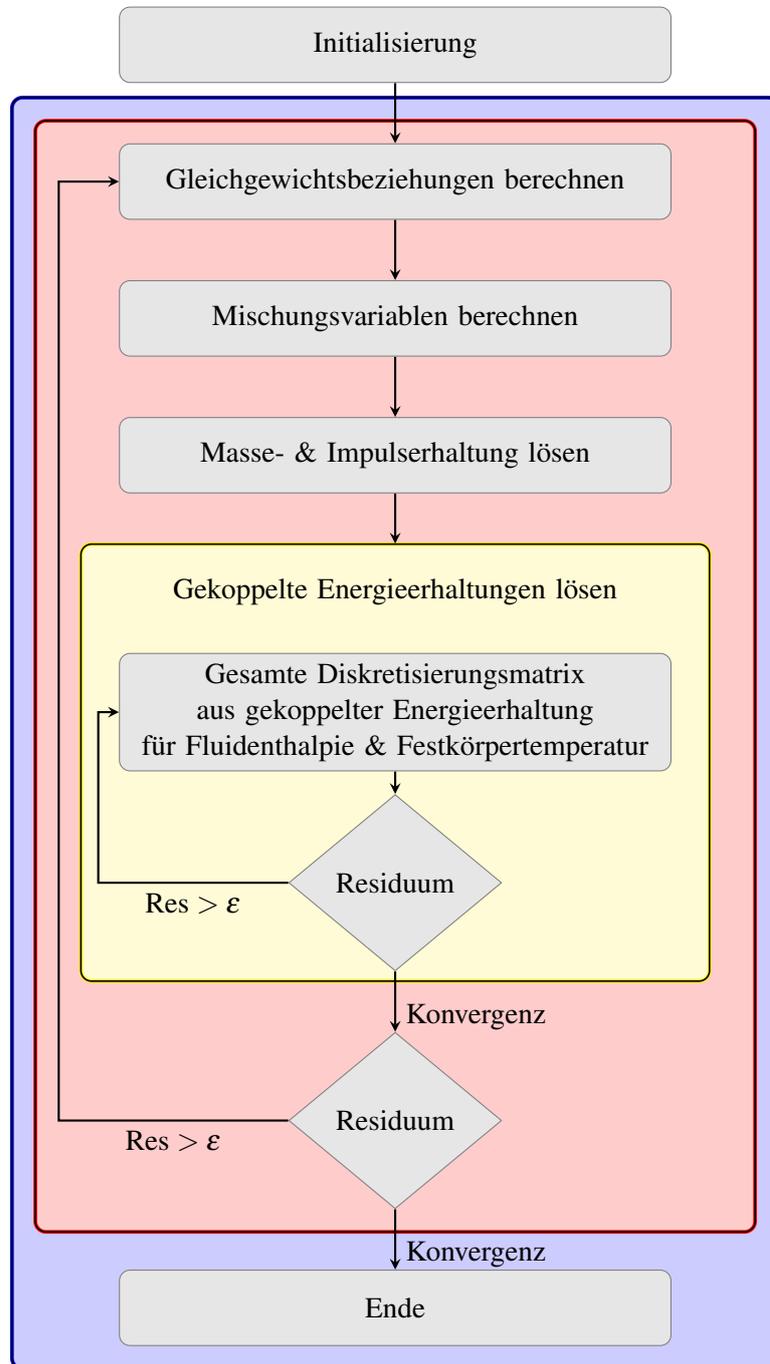


Abb. 3.5.: Flussdiagramm für den Löser für ein zweikomponentiges Fluid.

## 4. Lösung der Multiphasen Mischungsmodelle

Die Modelle aus Kap. 3 werden angewandt für drei verschiedene Anwendungen. Zum einen handelt es sich um die Verdampfung von Wasser (Kap. 4.1.1 und 4.1.2) und um die Verdampfung einer Mischung aus Alkanen (Kap. 4.2).

### 4.1. Lösung des Multiphasen Mischungsmodells für eine Komponente

In diesem Abschnitt werden Ergebnisse des Multiphasen Mischungsmodells für eine Komponente, für 1D und stationäre Strömung am Anwendungsfall einer Transpirationskühlung gezeigt. Dies sind Ergebnisse, die in Lindner et al. (2016a) veröffentlicht wurden, siehe dazu auch Droste (2012); Droste et al. (2013). Es handelt sich um einen Modellvergleich zwischen dem in dieser Arbeit angewandten Mischungsmodell aus Kap. 3.1 mit dem Löser DuMu<sup>x</sup> (Flemisch et al., 2011). Weiterhin werden beide Lösungen mit den Daten von Shi und Wang (2011) als Referenzfall verglichen, deren Ergebnisse ebenfalls auf einem Mischungsmodell basieren.

#### 4.1.1. Testfall 1D, stationär

Im Rechengebiet findet Verdampfung innerhalb einer stationären 1D Strömung statt. Die verwendeten mathematischen Modelle werden in Kap. 4.1.1.1 beschrieben. Der Vorgang für die numerische Lösung wird in Kap. 4.1.1.2 erläutert. Mit den Randbedingungen für die Problemstellung (Kap. 4.1.1.3) werden die Ergebnisse in Kap. 4.1.1.4 diskutiert und in Kap. 4.1.1.5 erfolgt eine Zusammenfassung.

##### 4.1.1.1. Mathematische Modelle

Beide Modelle verwenden die konstitutiven Gleichungen von Shi und Wang (2011) und deren Randbedingungen. Für das DuMu<sup>x</sup> Modell werden die Erhaltungsgleichungen von Tab. 2.3 benutzt. Dieses Modell wird im weiteren Verlauf auch als das voll gekoppelte DuMu<sup>x</sup> Modell oder kurz als (fully) coupled bezeichnet. Es werden folgende Primärvariablen gelöst: Druck der benetzenden Phase ( $p_w$ ), Fluidtemperatur ( $T_f$ ) und Temperatur des porösen Verdampfers ( $T_s$ ). Das Fluid und die feste Phase werden mit einem Mittelungsansatz behandelt. Quellen und Senken für das Fluid und die feste Phase, wie auch der Wärmeübergang zwischen beiden, sind inbegriffen.

Für das Zweiphasen Mischungsmodell (TPMM) im lokalen thermischen Nichtgleichgewicht werden die Erhaltungsgleichungen von Shi und Wang (2011) benutzt, siehe Tab. 2.6. Es werden die Primärvariablen Mischungsdruck ( $p$ ), volumetrische Fluidenthalpie ( $H$ ) und Temperatur des porösen Verdampfers ( $T_s$ ) gelöst.

Gemeinsamkeiten und Unterschiede beider Modelle werden ausführlich in Lindner et al. (2016a) erörtert. Zusammenfassend lässt sich festhalten: Der Wärmeübergang basiert auf dem Phasenzustand, sowie auf den Fluideigenschaften, siehe Gl. 2.78 bis Gl. 2.81. Die Sättigungstemperatur  $T_{\text{sat}}$  wird für einen gewählten Druck des Zweiphasen Systems verwendet und fixiert, ebenso wie

temperaturunabhängige und druckunabhängige Stoffwerte.  $\dot{q}_{\text{boil}}$  in Gl. 2.81 kann negativ sein zu Beginn der Verdampfungsregion (Shi und Wang, 2011). Dies bedeutet Kondensation von stromaufströmenden Wasserdampf aufgrund des adversen Druckgradienten in der Gasphase. Der mittlere Wärmeübergangskoeffizient zwischen dem Solid und den entsprechenden Fluidphasen  $k$ ,  $\bar{h}_{sk}$ , wird mit Gl. 2.82 berechnet. Die Nusselt Zahl wird mit Gl. 2.83 berechnet (Wakao et al., 1979). Als charakteristische Länge  $\mathcal{L}$  wird eine charakteristische Größe des porösen Mediums (Kugeldurchmesser)  $d_p = 5 \cdot 10^{-4}$  m gewählt. Phasenspezifische Reynolds Zahlen werden mit den entsprechenden Phasengeschwindigkeiten  $v_k$  berechnet. Für den Fall des Mischungsmodells werden die Phasengeschwindigkeiten aus der Mischungsgeschwindigkeit berechnet, indem der diffusive Massenstrom  $j$  berücksichtigt wird, siehe Tab. 2.5. Das DuMu<sup>x</sup> Modell erhält Volumen gemittelte Geschwindigkeiten durch Mittelung der Phasengeschwindigkeit, die an den Zellgrenzen definiert ist. Für die relative Permeabilität und den Kapillardruck werden Gl. 2.7, 2.8 und 2.20 benutzt. Beide Modelle nutzen den einfachen Fall einer Linearkombination von Wärmeleitfähigkeiten, gewichtet mit der Sättigung, siehe Gl. 2.21 und 2.22. Volumenänderungsarbeit wird vernachlässigt und die Fluideigenschaften werden als konstant angenommen, siehe Tab. 4.2. Die Behandlung der Impulsgleichung stellt einen besonderen Aspekt dieser Arbeit dar, da zum ersten Mal das Konzept der Mischungsgeschwindigkeiten mit einem Mischungsdruck auf die Probe gestellt wird. Durch den Vergleich mit den Phasendrüken, die aus dem DuMu<sup>x</sup> Modell entstammen, konnten folgende Schlussfolgerungen gezogen werden. Das DuMu<sup>x</sup> Modell berechnet die Phasengeschwindigkeiten  $v_k$  basierend auf den Phasendrüken  $p_k$  zu:

$$v_k = -\frac{Kk_{rk}}{\mu_k} (\nabla p_k - \rho_k g). \quad (4.1)$$

Beide Modelle benutzen das Darcy Gesetz in verschiedenen Schreibweisen. Das TPMM Modell geht von der Definition eines pseudo Mischungsdrucks  $p$  aus (Chavent, 1976), der von Wang und Beckermann (1993) benutzt wird,

$$p = \frac{p_w + p_n}{2} + \frac{1}{2} \int_0^{p_c} (\lambda_n(\zeta) - \lambda_w(\zeta)) d\zeta, \quad (4.2)$$

mit der reduzierten Mobilität  $\lambda$  wird somit ein Mischungsdruckgradient  $\nabla p$  eine Mischungsgeschwindigkeit  $v$  treiben, siehe Tab. 2.6:

$$v = -\frac{K}{\mu} (\nabla p - \rho_{\text{kin}} g). \quad (4.3)$$

Für die Definition der kinetischen Dichte, siehe Shi und Wang (2011). Chavent (1976) benutzt eine etwas andere Formulierung von Gl. 4.2:

$$p = \frac{p_w + p_n}{2} + \frac{1}{2} \int_{\bar{s}}^{s_n} (\lambda_n - \lambda_w) \frac{\partial p_c}{\partial s_n} ds_n + \text{const.}, \quad (4.4)$$

wobei  $\bar{s}$  ein beliebiger Punkt in  $[0, 1]$  ist. Wird Gl. 2.20 benutzt, so wird aus Gl. 4.4:

$$p = \frac{p_w + p_n}{2} + \frac{1}{2} \sigma \sqrt{\frac{\phi}{K}} \int_{\bar{s}}^{s_n} (\lambda_n - \lambda_w) (-J'(s_w)) ds_n + \text{const.} \quad (4.5)$$

Es wird  $\bar{s} = 0$  gewählt und erhalten:

$$p = \frac{p_w + p_n}{2} + \frac{1}{2} \sigma \sqrt{\frac{\phi}{K}} \int_{s_w}^1 (\lambda_n - \lambda_w) (-J'(s_w)) ds_w + \text{const.} \quad (4.6)$$

Wang und Beckermann (1993) stellen die Behauptung auf, dass dieses Mischungskonzept, insbesondere die Verwendung von Gl. 4.2 und 4.3 keine zusätzlichen Approximationen erfordern.

##### 4.1.1.2. Numerische Lösung

Auf die numerische Lösung des DuMu<sup>x</sup> Modells soll hier kaum eingegangen werden. Da DuMu<sup>x</sup> einem langen Entwicklungspfad entspringt, sind ausführliche Dokumentationen an anderer Stelle verfügbar (Flemisch et al., 2011; Nuske et al., 2014). Es soll hier nur darauf hingewiesen werden, dass alle Ergebnisse der Arbeit in Lindner et al. (2016a) mit der Revisionsnummer 12744 von DuMu<sup>x</sup> erzeugt wurden. Der Quellcode ist online frei verfügbar<sup>1</sup>. Für das Mischungsmodell wurden zwei verschiedene Entwicklungsumgebungen genutzt, um einen Quervergleich der Implementierung zuzulassen. Es handelt es sich hier um einen eigens entwickelten MATLAB<sup>®</sup> Löser, basierend auf MATLAB<sup>®</sup> R2013a. Der andere Löser basiert auf einer Implementierung in COMSOL<sup>®</sup> v. 3.5a (COMSOL, 2013). In COMSOL<sup>®</sup> wurde die Massen- und Impulserhaltung mit dem Subsurface Flow Modul gelöst und die gekoppelten Energieerhaltungen wurden mittels dem PDE Modul gelöst (Droste, 2012; Droste et al., 2013). Da die Ergebnisse aus beiden Implementierungen fast identisch sind, ist somit der Quervergleich erfolgreich. Der MATLAB<sup>®</sup> Löser implementiert das Gleichungssystem von Tab. 2.6 mit einem Zellen zentrierten Finiten Volumen Schema erster Genauigkeitsordnung. Der Vorgang der iterativen Lösung wird in Abb. 4.1 dargestellt.

Als Konvergenzkriterium wurde der quadratische Mittelwert (Residuum als RMS der relativen Differenz der Fluidtemperatur und der Temperatur der festen Phase) von weniger als  $10^{-5}$  gefordert. Bei  $nx$  Zellen mit Index  $i$ , zwischen sukzessiven Iterationen  $n$  und  $n + 1$  sollte also gelten:

$$\left( \frac{1}{2nx} \sum_i \left( \left( \frac{T_{s,i}^{n+1} - T_{s,i}^n}{T_{s,i}^n} \right)^2 + \left( \frac{T_{f,i}^{n+1} - T_{f,i}^n}{T_{f,i}^n} \right)^2 \right) \right)^{1/2} < 10^{-5}. \quad (4.7)$$

Es wurde geprüft und sichergestellt, dass dieses Kriterium einer konvergierenden Sättigungsverteilung entspricht. Unterrelaxation wird benutzt für die gekoppelte Energieerhaltung. Die Lösung der Massen- und Impulserhaltung basiert auf den Ausführungen von Kap. 3.1.1.1 mittels dem Hybrid Löser von MRST v. 2013a mit einer Erweiterung für variable Dichte. Mit anderen Worten, das treibende Potential für Fluidströmung des MRST kann ersetzt werden durch einen Mischungsdruckgradienten, falls gleichzeitig Mischungsvariablen anstatt einphasige Variablen benutzt werden. Im mathematischen Sinne ist die Formulierung von einphasiger Strömung und Strömung einer Multiphasenmischung identisch.

---

<sup>1</sup><http://www.dumux.org>

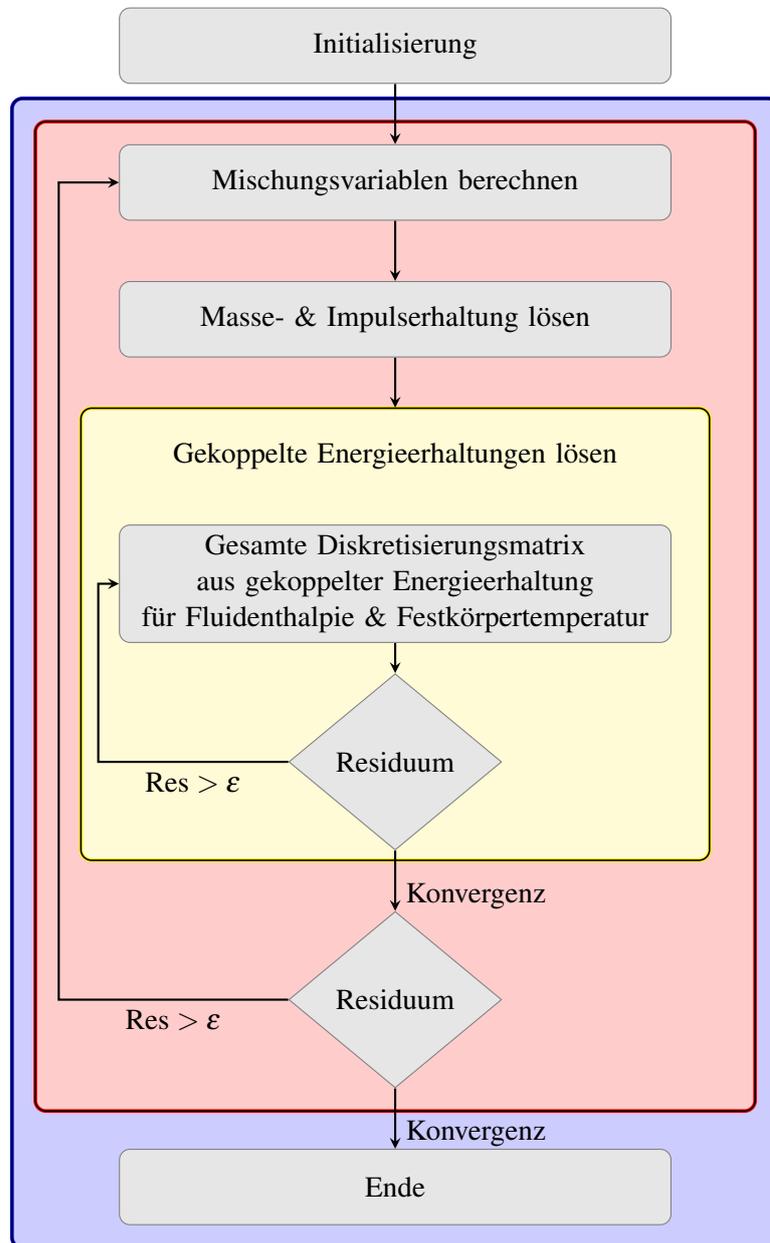


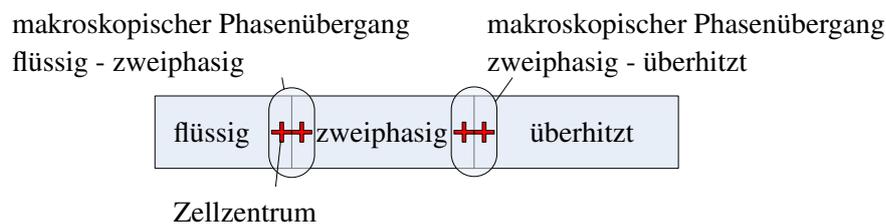
Abb. 4.1.: Flussdiagramm für den Löser für ein einkomponentiges Fluid.

#### 4. Lösung der Multiphasen Mischungsmodelle

Die konvektiven Flüsse werden an den Zellgrenzen ausgewertet und ein Power Law wird angewandt für die Behandlung der advektiven und diffusiven Flüsse (Patankar, 1980). Für große advektive Flüsse an den Zellgrenzen findet das Aufwind Verfahren Verwendung, da dies sich stabiler zeigt. Der Wechsel zwischen diesen Diskretisierungsschemata basiert auf einem Kriterium mittels der Péclet Zahl  $Pe$ , die an den Zellgrenzen definiert ist mit der Zellbreite  $\Delta x$  und der Geschwindigkeit  $v$  als:

$$Pe := \frac{\gamma_h |v|}{\Gamma_h / \Delta x}. \quad (4.8)$$

Mit dieser Definition wird Aufwind benutzt für  $Pe \geq 10$ . Es ist zu beachten, dass mit dieser Definition die advektiven und diffusiven Flüsse im mathematischen Sinne, entsprechend Tab. 2.6 herangezogen werden. Mit anderen Worten, die diffusiven Flüsse bestehen aus kapillaren und konduktiven Flüssigkeiten.



**Abb. 4.2.:** Makroskopische Phasengrenzen und Position der Zellzentren für das Finite Volumen Schema.

Um  $Pe$  an den Zellgrenzen zu berechnen, wird  $\gamma_h$  und  $\Gamma_h$  mit dem harmonischen Mittel mit arithmetischem Mittel von  $\log_{10} \gamma_h$  bzw.  $\log_{10} \Gamma_h$  an den makroskopischen Phasengrenzen approximiert. D.h. befindet sich am Interface  $i + 1/2$  eine Phasengrenze, so berechnet sich z.B.  $\gamma_h$  an diesem Interface zu:

$$\log_{10} \gamma_{h,i+1/2} = \frac{1}{2} (\log_{10} \gamma_{h,i+1} + \log_{10} \gamma_{h,i}). \quad (4.9)$$

An anderen Zellinterfaces wird  $\gamma_h$  harmonisch gemittelt. Dies hat den Vorteil von großer numerischer Stabilität und keinen großen Einfluss auf die Lösung im Vergleich zu alternativen Approximationsmethoden an den Zellgrenzen. Beim Vergleich zur harmonischen oder arithmetischen Mittelung im gesamten Rechengebiet verschiebt sich das Zweiphasengebiet lediglich wenige Zellen stromauf oder stromab. Bei der großen Anzahl an Zellen entspricht dies somit einem verschwindend geringen Einfluss in der Größenordnung von  $1 \times 10^{-6}$  m.

## 4.1.1.3. Problemstellung &amp; Randbedingungen

Die Problemstellung und Randbedingungen sind in Abb. 4.3 dargestellt. Es handelt sich hier um den Fall von Transpirationskühlung, bei dem ein Fluid im flüssigen Aggregatzustand in ein poröses Medium eingebracht wird. Durch die Wärmezufuhr in das poröse Medium auf der gegenüberliegenden Seite des Rechengebiets wird das System beheizt und Verdampfung kann stattfinden. In diesem Abschnitt wird das Fluid als reines Wasser behandelt. Die Ergebnisse der zwei Löser werden verglichen mit Daten aus Shi und Wang (2011). Die Parameter, die das poröse Medium und das Fluid beschreiben, sind in Tab. 4.1 und 4.2 aufgeführt.

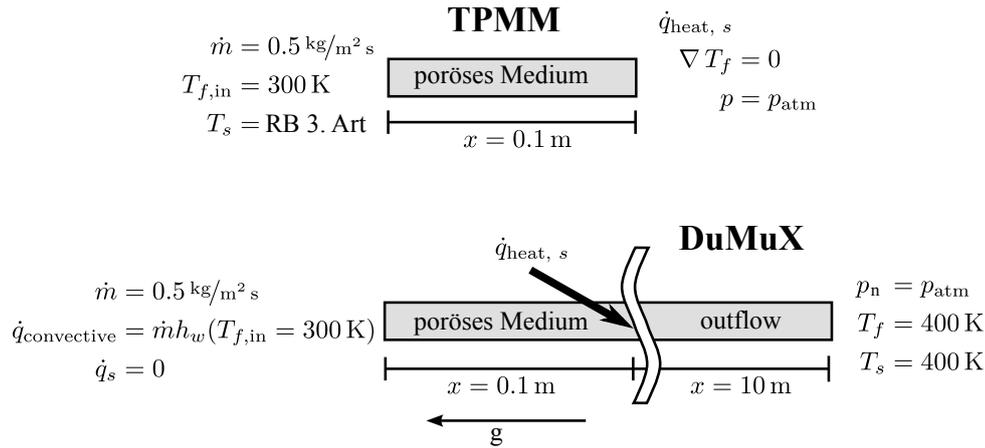


Abb. 4.3.: Problemstellung und Randbedingungen für beide Modelle.

Tab. 4.1.: Eigenschaften des porösen Mediums.

| Eigenschaft | Wert                  | Einheit              |
|-------------|-----------------------|----------------------|
| $K$         | $1.69 \cdot 10^{-10}$ | $\text{m}^2$         |
| $\phi$      | 0.35                  | -                    |
| $k_s$       | 30                    | $\text{W}/\text{mK}$ |

Der mittlere Wärmeübergangskoeffizient am Eintritt,  $\bar{h}_{in}$ , wird berechnet mit Gl. 2.82 und 2.83 in der flüssigen Phase.

$$k_{s,\text{eff}} \frac{\partial T_s}{\partial x} + \Gamma_h \frac{\partial H}{\partial x} + f \frac{K \Delta \rho h_{fg}}{v_n} g = \bar{h}_{in} (T_s - T_{f,\text{in}}). \quad (4.10)$$

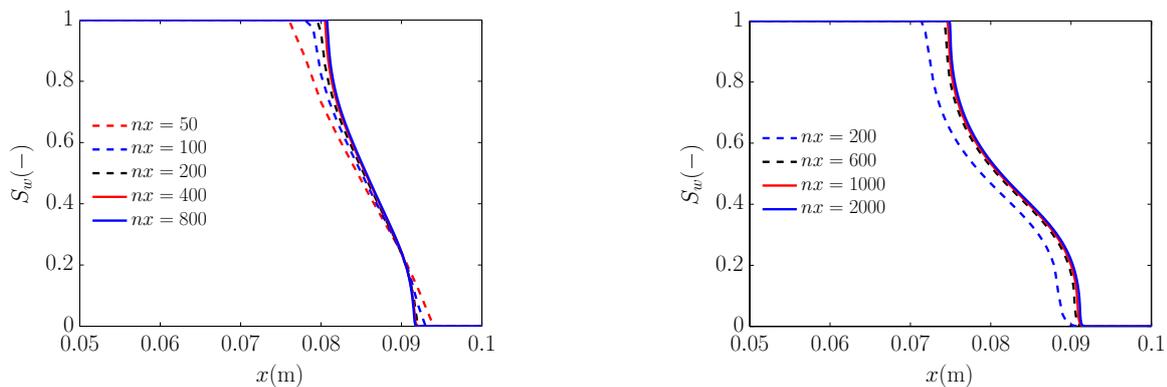
Das voll gekoppelte DuMu<sup>x</sup> Modell prägt am Eintritt einen Energiefluss mit dem entsprechenden Massenfluss und der Temperatur als Dirichlet Randbedingung ( $T = 300 \text{ K}$ ) für die Energieerhaltung des Fluids auf. Eine Neumann Randbedingung, die null gesetzt wird, wird für die feste Phase gesetzt. An der rechten Randbedingung wurden andere Ansätze benutzt. Das TPMM Modell setzt den Gradient für die Fluidtemperatur gleich null, erlaubt freien Massenaustritt und prägt einen Wärmestrom in die feste Phase auf. Da diese Umsetzung der Randbedingungen nicht direkt möglich war in DuMu<sup>x</sup>, wurde hier ein anderer Ansatz gewählt und ein Ausströmgebiet definiert, dessen Stoffwerte so gewählt wurden, dass sie die eigentliche Lösung nicht verfälschen können. Details zu dieser Vorgehensweise können Lindner et al. (2016a) entnommen werden. Alle Simulationen wurden in 1D

ausgeführt. Die stationäre Lösung der beschriebenen Modelle wird herangezogen zum Vergleich.

**Tab. 4.2.:** Fluideigenschaften, die von beiden Modellen benutzt werden.

| Eigenschaft      | Flüssigkeit           | Gas                  | Einheit           |
|------------------|-----------------------|----------------------|-------------------|
| $\rho_\alpha$    | 1044                  | 1.679                | kg/m <sup>3</sup> |
| $c_\alpha$       | $4.217 \cdot 10^3$    | $2.029 \cdot 10^3$   | J/kgK             |
| $\nu_\alpha$     | $2.694 \cdot 10^{-7}$ | $7.16 \cdot 10^{-6}$ | m <sup>2</sup> /s |
| $k_\alpha$       | 0.68                  | 0.0248               | W/mK              |
| $\sigma$         |                       | 0.0589               | N/m               |
| $h_{fg}$         |                       | $2.257 \cdot 10^6$   | J/kg              |
| $T_{\text{sat}}$ |                       | 373                  | K                 |

#### 4.1.1.4. Ergebnisse und Diskussion



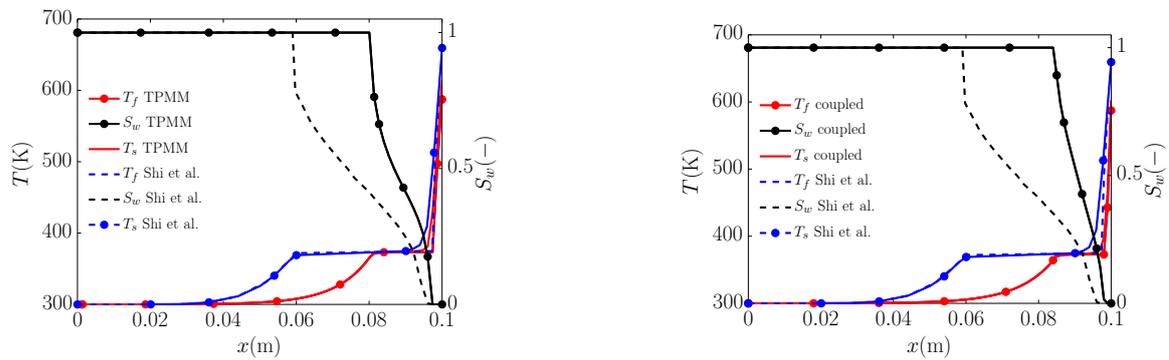
**Abb. 4.4.:** Gitterkonvergenz mit  $\dot{q}_{\text{heat},s} = 2 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$ ,  $\dot{m} = 0.5 \text{ kg/m}^2 \cdot \text{s}$ . Es wird der Einfluss der Gitterauflösung auf die Sättigung des DuMu<sup>x</sup> Modells gezeigt (**links**) und auf das TPMM (**rechts**). In dieser Notation entspricht die Sättigung  $S_w$  der Sättigung der flüssigen Phase:  $S_w = s_l = s$ .

Eine Gitterkonvergenz Studie wurde für beide Modelle durchgeführt. Abb. 4.4 zeigt, dass etwa 800 Zellen für das DuMu<sup>x</sup> Modell und 1500 Zellen für das TPMM Modell notwendig sind. Die analytische Austrittstemperaturen für diesen Fall nach der Berechnungsmethodik von Kap. 3.1.4 zeigen jeweils sehr gute Ergebnisse für den TPMM Löser aus dieser Arbeit (Übereinstimmung größer als 99.4%) und das DuMu<sup>x</sup> Modell (Übereinstimmung größer als 99.9%). Tab. 4.3 zeigt die Ergebnisse des TPMM und des DuMu<sup>x</sup> Modells, im Vergleich zu den Ergebnissen von Shi und Wang (2011). Abb. 4.5 und 4.6 zeigen den Vergleich zwischen dem TPMM und dem DuMu<sup>x</sup> Modell. Der Wärmestrom wurde gewählt als  $\dot{q}_{\text{heat},s} = 1.5 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$  (Abb. 4.5) und  $\dot{q}_{\text{heat},s} = 2 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$  (Abb. 4.6). Zusätzlich sind die Daten von Shi und Wang (2011) dargestellt.

Die Fluidtemperaturen und die Solidtemperaturen erscheinen sehr ähnlich, unterscheiden sich jedoch in der Nähe der makroskopischen Phasengrenze. Dieser Effekt wird bei Shi und Wang (2011) diskutiert und macht die Anwendung eines LTNE Modells notwendig. Ohne die Rohdaten von Shi und Wang (2011) wurden hier die Daten aus den Abbildungen, die veröffentlicht wurden, extrahiert

**Tab. 4.3.:** Vergleich der Fluidtemperaturen am Austritt zwischen Shi und Wang (2011), dem TPMM und dem DuMu<sup>x</sup> Modell.

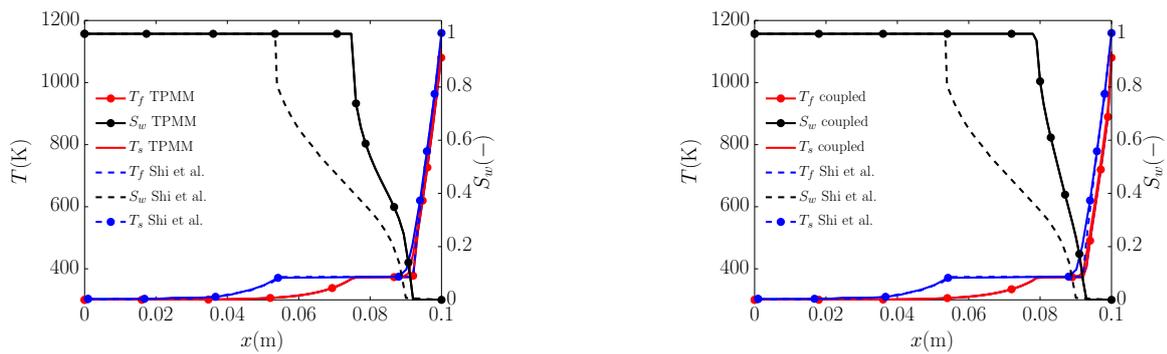
| Randbedingung   | $\frac{T_{f, \text{numerisch}} _{y=L}}{T_{f, \text{analytisch}} _{y=L}}$ |       |                          |
|---|--|-------|--------------------------|
|   | Shi  | TPMM  | DuMu <sup>x</sup> Modell |
| $\dot{m} = 0.3 \text{ kg/m}^2\cdot\text{s}, \dot{q}_{\text{heat},s} = 10^6 \text{ W/m}^2$           | 0.944  | 0.994 | 1.000                    |
| $\dot{m} = 0.5 \text{ kg/m}^2\cdot\text{s}, \dot{q}_{\text{heat},s} = 1.5 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$ | 0.992  | 1.000 | 1.000                    |
| $\dot{m} = 0.5 \text{ kg/m}^2\cdot\text{s}, \dot{q}_{\text{heat},s} = 2 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$   | 0.981  | 1.000 | 1.000                    |



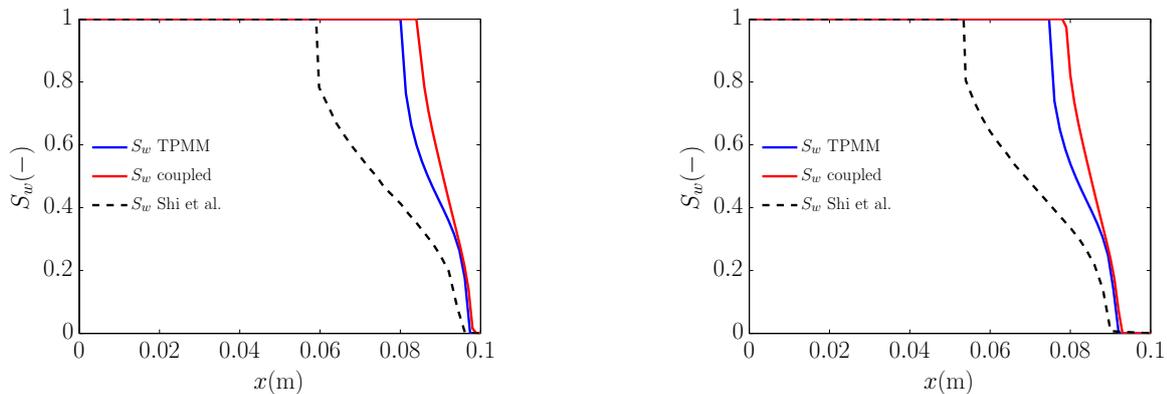
**Abb. 4.5.:** Links: Vergleich zwischen TPMM und Shi und Wang (2011), rechts: Ergebnisse des DuMu<sup>x</sup> Modells, Wärmestrom von  $\dot{q}_{\text{heat},s} = 1.5 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$ .

(mit einer Ablesegenauigkeit von 5 K). Abb. 4.7 zeigt das Sättigungsprofil der benetzenden Phase (flüssiges Wasser), das durch die Lösung des TPMM, des DuMu<sup>x</sup> Modells und der Ergebnisse von Shi und Wang (2011) für die gleichen Fälle wie in Abb. 4.5 und 4.6 erhalten wurde. Der Trend der Ableitung im Verdampfungsgebiet ist ähnlich für beide Ergebnisse, die auf dem TPMM basieren (d.h. die Ergebnisse aus dieser Arbeit und von Shi und Wang (2011)). Das DuMu<sup>x</sup> Modell zeigt einen Verlauf, der mehr einem linearen Verlauf ähnelt im Zweiphasengebiet. Vermutlich ist dies auf unterschiedliche Diskretisierungen der gekoppelten Energiegleichungen zurückzuführen, wie im weiteren Verlauf erläutert werden wird. Ein Unterschied in der Länge der Zweiphasen Region zwischen dem TPMM und dem DuMu<sup>x</sup> Modell ist erkennbar. Es ist jedoch bemerkenswert, dass trotz unterschiedlichem mathematischen Hintergrund, numerischen Verfahren und Simulationsumgebungen, die Ergebnisse sehr nahe beieinander liegen. Signifikante quantitative Abweichungen sind erkennbar zu den Ergebnissen von Shi und Wang (2011). Der Beginn des Zweiphasengebiet bei Shi und Wang (2011) liegt generell weiter stromauf. Der Einfluss der Zellanzahl  $nx$  (Abb. 4.4 (rechts)), der relativen Permeabilität (Abb. 4.8, links) und der Glättung von  $\Gamma_h$  mit der MATLAB<sup>®</sup> Funktion smooth (Filterlänge  $l_{\text{Filter}}/nx$ , Abb. 4.8, rechts) können die quantitativen Unterschiede des TPMM Modells zu Shi und Wang (2011) erklärbar machen: Bei einer kleinen Zellanzahl, einem kleinen Exponenten für die relative Permeabilität oder einer starken Glättung nähern sich die Ergebnisse des TPMM und von Shi und Wang (2011) tendenziell an. Vermutlich ist die Rechnung von Shi und Wang (2011) auf einem zu groben Netz erfolgt, der Exponent der effektiven Permeabilität nicht korrekt angegeben worden oder der effektive Diffusionskoeffizient  $\Gamma_h$  zu stark geglättet worden.

#### 4. Lösung der Multiphasen Mischungsmodelle

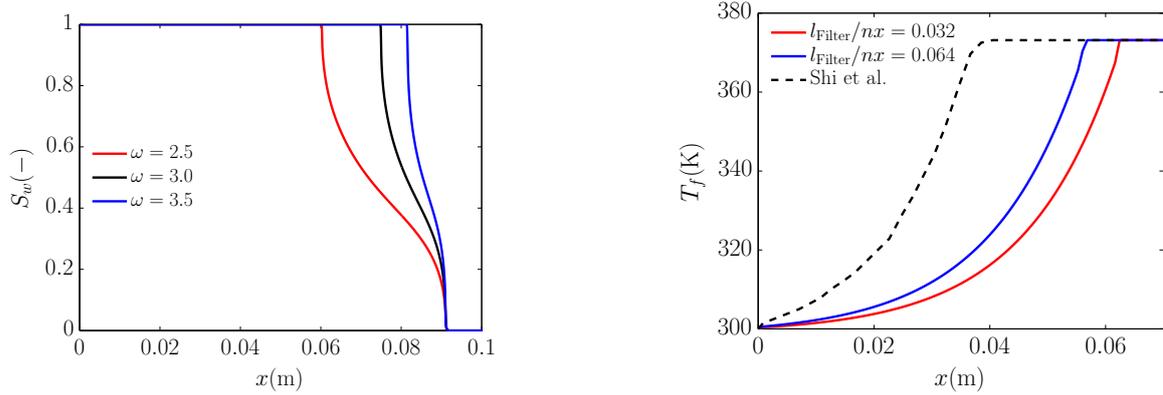


**Abb. 4.6.:** Links: Vergleich zwischen TPMM und Shi und Wang (2011), rechts: Ergebnisse des DuMu<sup>x</sup> Modells, Wärmestrom von  $\dot{q}_{\text{heat},s} = 2 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$ .

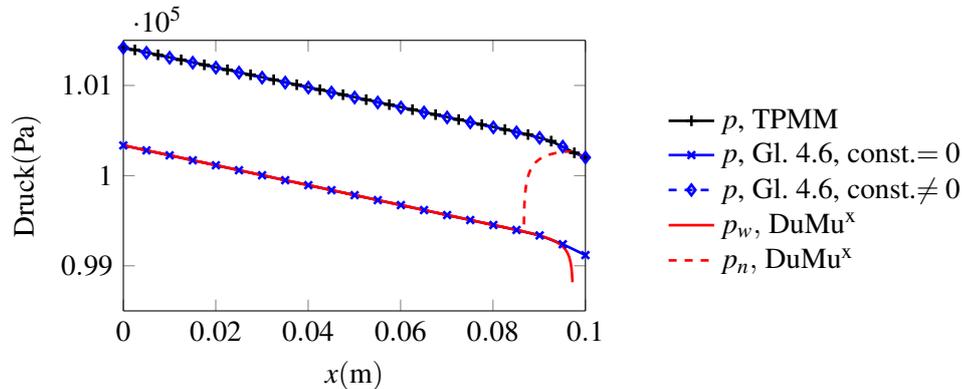


**Abb. 4.7.:** Sättigung der benetzenden Phase für einen Fall mit  $\dot{q}_{\text{heat},s} = 1.5 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$  (links) und  $\dot{q}_{\text{heat},s} = 2 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$  (rechts).

Es ist eine gute qualitative Übereinstimmung für alle Modelle im Hinblick auf die Verschiebung des Verdampfungsgebiets bei Änderung der Wärmezufuhr erkennbar. Der Effekt des lokalen thermischen Nichtgleichgewichts in Abhängigkeit der Parameter und Randbedingungen wird in Shi und Wang (2011); Lindner et al. (2014, 2015) diskutiert. Das TPMM basiert auf der Annahme, dass Gl. 4.6 gültig ist und dadurch die Lösung der Poisson Gleichung 3.1 die gleiche Lösung liefert wie die Lösung von Gl. 2.56 und Gl. 4.1 für alle Phasen. Es kann gezeigt werden, dass die Behauptungen von Wang und Beckermann (1993) zur Verwendung des Mischungskonzepts bestätigt werden können. Der Mischungsdruck der Lösung des TPMM genügt den zu Grunde liegenden Annahmen von Gl. 4.6 und entspricht in einphasigen Bereichen dem jeweiligen Phasendruck. Dies zeigt sich in Abb. 4.9: Bei identischem Temperaturprofil wird für das TPMM und für das DuMu<sup>x</sup> Modell die Massen- und Impulserhaltung gelöst.

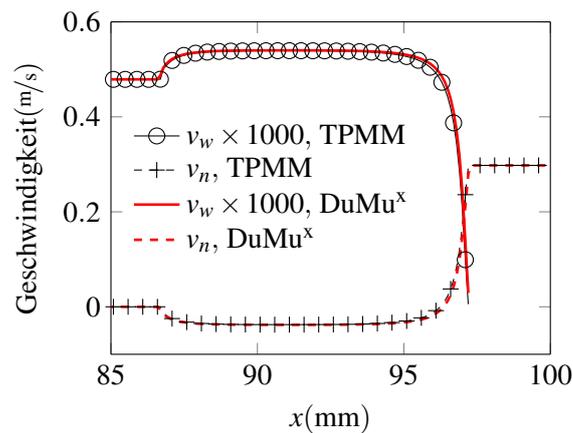


**Abb. 4.8.:** Ergebnisse des TPMM: Einfluss des Exponenten  $\omega$  der relativen Permeabilität auf das Sättigungsprofil bei einer Wärmestromzufuhr von  $2 \cdot 10^6 \text{ W/m}^2$  und einem Massenstrom von  $0.5 \text{ kg/m}^2 \text{ s}$  (**links**) und Einfluss der Glättung von  $\Gamma_h$  auf die Fluidtemperatur bei einer Wärmestromzufuhr von  $10^6 \text{ W/m}^2$  und einem Massenstrom von  $0.3 \text{ kg/m}^2 \text{ s}$  (**rechts**).



**Abb. 4.9.:** Vergleich des Mischungsdrucks aus der Lösung der Erhaltungsgleichungen ( $p$ , TPMM), mit dem Druck aus einem post-processing Schritt mittels Gl. 4.6 ( $p$ , Gl. 4.6). Außerdem sind noch Phasendrucke aus dem DuMu<sup>x</sup> Modell dargestellt ( $p_w, p_n$ ). Die Drücke ( $p$ , TPMM) und ( $p$ , Gl. 4.6) zeigen eine perfekte Übereinstimmung für einen konstanten Wert  $\neq 0$ . Es ist zu beachten, dass  $p_w$  nicht dargestellt wird in der überhitzten Region.

Der Mischungsdruck  $p$  aus dem TPMM entspricht der Lösung von Gl. 4.6, die in einem post-processing Schritt aus den Phasengeschwindigkeiten berechnet wird. Die Druckgradienten von dem TPMM entsprechen in den einphasigen Gebieten den Druckgradienten des DuMu<sup>x</sup> Modells. Die Parallelverschiebung in den Phasendrucke von Abb. 4.9 scheint mit der Integrationskonstanten von Gl. 4.6 erklärbar zu sein. Somit sind die Phasengeschwindigkeiten für beide Modelle identisch, wenn für diese feste Temperaturverteilung nur die Massen- und Impulserhaltung gelöst wird, siehe Abb. 4.10. Auch im Zweiphasengebiet sind die Phasengeschwindigkeiten für das TPMM und das DuMu<sup>x</sup> Modell identisch. Das Konzept des Mischungsdrucks und der Mischungsgeschwindigkeit führt zu gleichen Phasendruckgradienten und Phasengeschwindigkeiten und beinhaltet keine Approximationen. Die Formulierung nach Wang und Beckermann (1993) ist somit vollkommen äquivalent zu einer Lösung der Impulsgleichungen für jede Phase einzeln.



**Abb. 4.10.:** Vergleich der Phasengeschwindigkeiten aus Abb. 4.9. Die Phasengeschwindigkeiten der benetzenden Phase sind skaliert mit dem Faktor 1000 für eine bessere Lesbarkeit der Abbildung.

#### 4.1.1.5. Zusammenfassung

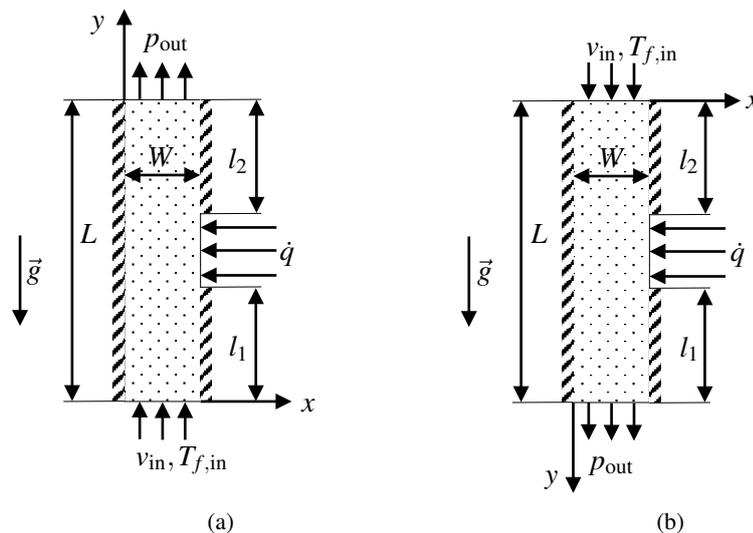
In diesem Kapitel, das auf der Veröffentlichung von Lindner et al. (2016a) basiert, wurden zwei Modelle zur Simulation von Multiphasenströmung mit Phasenwechsel im lokalen thermischen Nichtgleichgewicht an der Anwendung einer Transpirationskühlung verglichen. Es handelt sich hier einerseits um das Multiphasen Mischungsmodell aus Kap. 3.1, das in MATLAB<sup>®</sup> und COMSOL<sup>®</sup> implementiert wurde. Andererseits wurde ein Modell, das in DuMu<sup>x</sup> implementiert wurde, zum Vergleich herangezogen. Diese Modelle zeigen eine sehr gute Übereinstimmung der Austrittstemperatur mit der analytischen Lösung. Weiterhin wurde ein Abgleich der Ergebnisse mit publizierten Werten von Shi und Wang (2011) für die gleiche Problemstellung diskutiert. Das MATLAB<sup>®</sup> und das COMSOL<sup>®</sup> Modell zeigen nahezu identische Ergebnisse. Damit ist der numerische code verifiziert und Programmierfehler können weitestgehend ausgeschlossen werden. Der Vergleich zwischen dem MATLAB<sup>®</sup> Modell und DuMu<sup>x</sup> Modell zeigt die gleiche qualitative Tendenz bei Änderung der Randbedingungen. Es sind quantitative Abweichungen in der Position des Verdampfungsgebiets erkennbar. Die Abweichungen können vermutlich mit einer unterschiedlichen numerischen Handhabung der gekoppelten Energiegleichung erklärt werden. Es sind weiterhin signifikante quantitative Abweichungen zu den Ergebnissen von Shi und Wang (2011) erkennbar. Weiterhin konnte im Vergleich zum DuMu<sup>x</sup> Modell gezeigt werden, dass das Mischungskonzept im Multiphasen Mischungsmodell bei gleichen Temperaturen auch gleiche Ergebnisse für die Phasengeschwindigkeit liefert und dass das Konzept des Mischungsdrucks keine zusätzlichen Annahmen einführt und somit vollkommen physikalisch äquivalent zu Modellen ohne Verwendung eines Mischungskonzepts ist.

### 4.1.2. Testfall 2D, stationär

Im Folgenden werden die Ergebnisse aus Lindner et al. (2014, 2015) gezeigt. Die mathematische Formulierung aus Kap. 4.1.1 wird benutzt und auf eine Problemstellung mit 2D Strömung angewandt. Die numerische Methodik zur Erhaltung von konvergenten Lösungen wird in Kap. 4.1.2.3 erläutert. Abschließend werden die Ergebnisse in Kap. 4.1.2.4 gezeigt und diskutiert. Die Ergebnisse sind gegliedert nach Effekten von vier dimensionslosen Zahlen, die die Problemstellung beeinflussen: Es handelt sich um die Rayleigh Zahl  $Ra$ , die Péclet Zahl  $Pe$ , die Biot Zahl  $Bi$  und die Stanton Zahl  $St$ . Eine Erläuterung dieser Kennzahlen findet sich in Kap. 2.1.4. Für die Biot Zahl  $Bi$  wird Gl. 2.30 verwendet und für den Wärmeübergang wird  $\bar{h}_{sl,ref}$  benutzt, das mit der Randbedingung  $v_{in}$  berechnet wird. Durch die Kennzahl  $Pe$  wird  $v_{in}$  festgelegt,  $Ra$  legt  $K$  fest und  $Bi$  legt  $k_{s,eff}$  fest.  $Nu$  wird durch geometrische Parameter festgelegt und durch  $Re, Pr$ .

#### 4.1.2.1. Problembeschreibung

Ein zweidimensionaler vertikaler Kanal ( $W \times L$ ), gefüllt mit einem homogenen porösen Medium, wird von Wasser durchströmt, siehe Abb. 4.11(a) für Strömung entgegen der Schwerkraft und Abb. 4.11(b) für Strömung parallel zur Schwerkraft. An einer Seite des Kanals gibt es eine Wärmestromquelle mit konstantem Wärmestrom. Der Kanal hat die Breite  $W = 20\text{ mm}$ , die Länge  $L = 8W$ , und die Längen  $l_1$  und  $l_2$  sind beide jeweils  $3W$ . Die Porosität des Kanals ist gleichförmig und entspricht  $\phi = 0.75$ . Alle anderen Seiten des Kanals sind adiabatisch. Wasser tritt in den Kanal unterkühlt ein mit einer gegebenen Geschwindigkeit. Am Austritt wird eine Druck-Randbedingung aufgeprägt. Das Problem wird als Multiphasenströmung (unterkühlt, zweiphasig, überhitzt) mit einer Komponente (Wasser) und Phasenwechsel betrachtet. Lokales thermisches Nichtgleichgewicht zwischen der Festkörpermatrix und dem Fluid wird berücksichtigt.



**Abb. 4.11.:** Skizze der Problemstellung und Randbedingungen: 4.11(a) Strömung entgegen der Schwerkraft; 4.11(b) Strömung mit der Schwerkraft.

#### 4.1.2.2. Verwendete Gleichungen und Randbedingungen

Die Erhaltungsgleichungen von Shi und Wang (2011) aus Tab. 2.6 werden benutzt. Tab. 4.4 fasst die benutzten Randbedingungen zusammen.

|                         |       | Randbedingung   |
|-------------------------|-------|---|
| <b>Eintritt</b>         | $p$   | $\left. \frac{dp}{dy} \right _{\text{Eintritt}} = \rho_{\text{kin}} g + \frac{\mu}{K} v_{\text{Eintritt}}$  |
|                         | $H$   | $H _{\text{Eintritt}} = \rho_l (c_{p,l} T_{f,\text{Eintritt}} - 2h_{v,\text{sat}})$   |
|                         | $T_s$ | $k_{s,\text{eff}} \frac{\partial T_s}{\partial y} + \Gamma_h \frac{\partial H}{\partial y} + f \frac{\mathbf{K} \Delta \rho h_{fg}}{v_v} g = \bar{h}_{\text{Eintritt}} (T_s - T_{f,\text{in}})$ |
| <b>Austritt</b>         | $p$   | $p = p_{\text{Austritt}}$   |
|                         | $H$   | $\Gamma_h \frac{dH}{dy} = 0$  |
|                         | $T_s$ | $\frac{dT_s}{dy} = 0$   |
| <b>unbeheizte Wände</b> | $p$   | $u = 0$   |
|                         | $H$   | $\Gamma_h \frac{dH}{dy} = 0$  |
|                         | $T_s$ | $k_{s,\text{eff}} \left. \frac{dT_s}{dx} \right _{\text{Wand}} = 0$   |
| <b>beheizte Wände</b>   | $p$   | $u = 0$   |
|                         | $H$   | $\Gamma_h \frac{dH}{dy} = 0$  |
|                         | $T_s$ | $-k_{s,\text{eff}} \left. \frac{dT_s}{dx} \right _{\text{Wand}} = \dot{q}$  |

**Tab. 4.4.:** Randbedingungen für die betrachtete Strömung mit Wärmeeintrag nach Abb. 4.11.

#### 4.1.2.3. Numerische Lösung

Das Gleichungssystem von Tab. 2.6 wird iterativ in MATLAB<sup>®</sup> gelöst mit einem Finite Volumen Schema. Das Geschwindigkeitsfeld wird gelöst mit der modifizierten Toolbox MRST v. 2013a (Lie et al., 2012) mit der Erweiterung für variable Dichte. Da das Verfolgen der Phasengrenzen nicht notwendig ist, wird ein regelmäßiges Gitter mit einheitlicher Zellgröße gewählt. Gitterunabhängigkeit wurde für 1280×640 Zellen erhalten, mit einem RMS der Fluidtemperaturen zwischen verschiedenen Gittern von weniger als 0.1%. Die numerische Lösung erfolgt analog zu der Beschreibung von Kap. 4.1.1.2. Als Konvergenzkriterium wurde gewählt, dass das RMS der relativen Differenz der Temperaturen  $T_f$  und  $T_s$  zwischen aufeinanderfolgenden Iterationen kleiner als  $1 \cdot 10^{-5}$  sein sollte. Unterrelaxation (Faktor 0.3) wurde benutzt für die gekoppelte Energieerhaltung. Im Folgenden werden die Ergebnisse für Strömung entgegen der Schwerkraft zusammengefasst. Weitere Ergebnisse für Strömung mit der Schwerkraft nach Abb. 4.11(b) finden sich in Lindner et al. (2015), die hier nicht erwähnt werden.

#### 4.1.2.4. Ergebnisse und Diskussion für Strömung entgegen der Schwerkraft

**Tab. 4.5.:** Dimensionslose Parameter für die Studie zum Effekt der Stanton Zahl.

| Fall | Pe   | Bi  | Ra  | St  |
|------|------|-----|-----|-----|
| a    | 0.12 | 0.2 | 226 | 0.5 |
| b    | 0.12 | 0.2 | 226 | 1.0 |
| c    | 0.12 | 0.2 | 226 | 2.0 |
| d    | 0.12 | 0.2 | 226 | 5.0 |

Im Folgenden wird zunächst exemplarisch der Effekt der Variation der Stanton Zahl nach Kap. 2.1.4 auf die Strömung und den Wärmeübergang bei stationärer Strömung aufgegriffen. Die Effekte der Péclet Zahl und der Rayleigh Zahl werden hier ohne Abbildungen in Kürze zusammengefasst. Tab. 4.5 zeigt die Werte der Kennzahlen, die benutzt wurden.

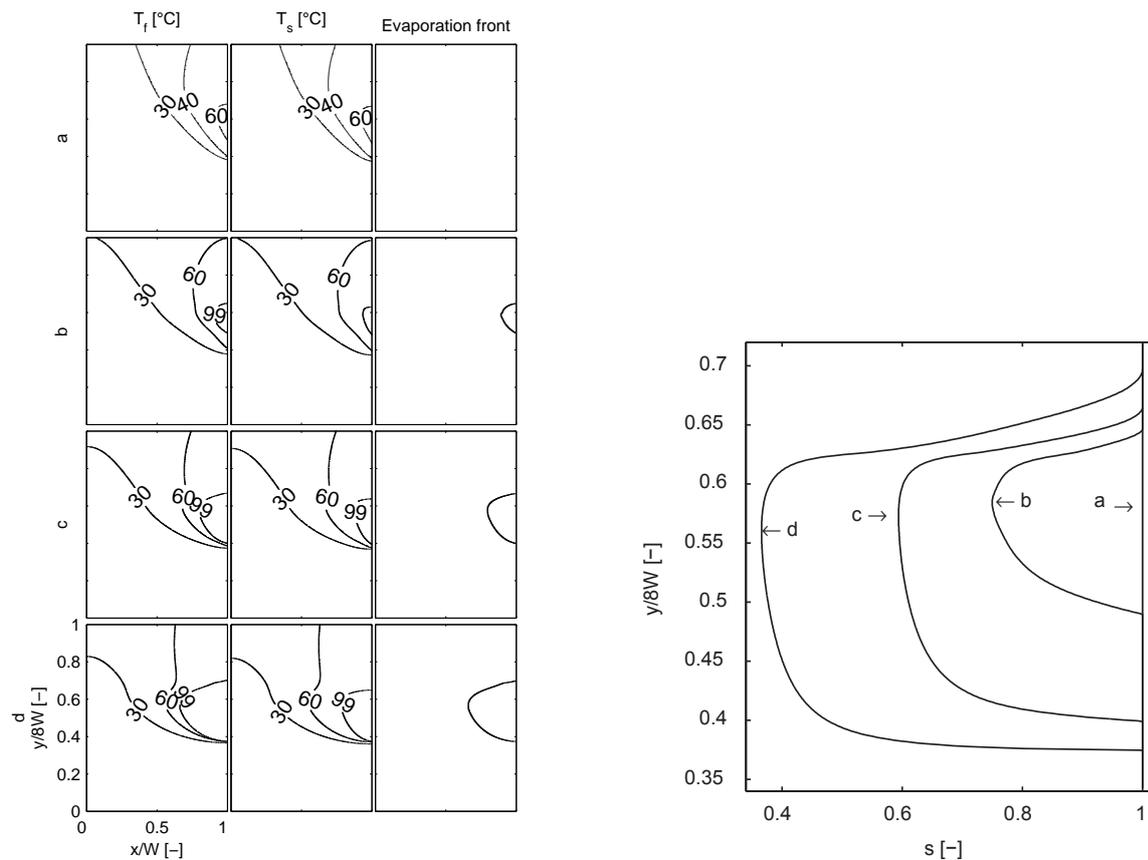
**4.1.2.4.1. Effekt der Stanton Zahl auf die Strömung und den Wärmeübergang** Da in dieser Arbeit ein qualitativer Vergleich zu Li et al. (2010b) erfolgt, sollte hier betont werden, dass in deren Publikation ein konstanter Wärmestrom eingebracht wird. Der Effekt der Variation der Stanton Zahl (abweichend zu Li et al. (2010b) jetzt mit variablem Wärmestrom) wird untersucht bei einer festgelegten Péclet Zahl von 0.12, Biot Zahl von 0.2 und Rayleigh Zahl zu 226. Eine Erhöhung der Stanton Zahl wird in Abb. 4.12 dargestellt anhand von iso-Temperaturprofilen für die Fluidtemperatur in der ersten Spalte und Temperaturen für die feste Phase in der zweiten Spalte, sowie der Abgrenzung der Verdampfungsfront in der letzten Spalte. Die Zeilen entsprechen den Fällen aus Tab. 4.5.

Der Wärmestrom an der Wand wird eingebracht in die feste Phase und weitergeleitet entlang der porösen Struktur. Weiterhin wird Wärme vom Festkörper auf das Fluid übertragen. Der Wärmestrom hängt ab von der Temperaturdifferenz, siehe Gl. 2.78 bis 2.80 und kann positiv oder negativ sein. Ein großer Wärmeübergang zwischen fester Phase und Fluid tendiert dazu, die Temperaturdifferenzen zu verringern.

In Abb. 4.12 bei  $St = 1.0$  ist eine Verdampfungsfront sichtbar. Bei dieser Stanton Zahl ist der Wärmeeintrag in das System ausreichend, um Dampf zu erzeugen. Eine weitere Erhöhung der Stanton Zahl bewirkt eine Ausweitung des Verdampfungsgebiets. Bei größeren Abständen zu der beheizten Wand sind die Fluidtemperaturen und Temperaturen im Festkörper fast identisch und Temperaturdifferenzen sind somit gering. Abb. 4.12 zeigt die Variation des Profils der Flüssigkeitssättigung  $s$  entlang der beheizten Wand für diese Fälle. Für größere Stanton Zahlen wird die Fläche unter der Kurve  $s(y)$  größer. Abb. 4.13 zeigt die Temperaturen an der Wand für die Fälle b und d.

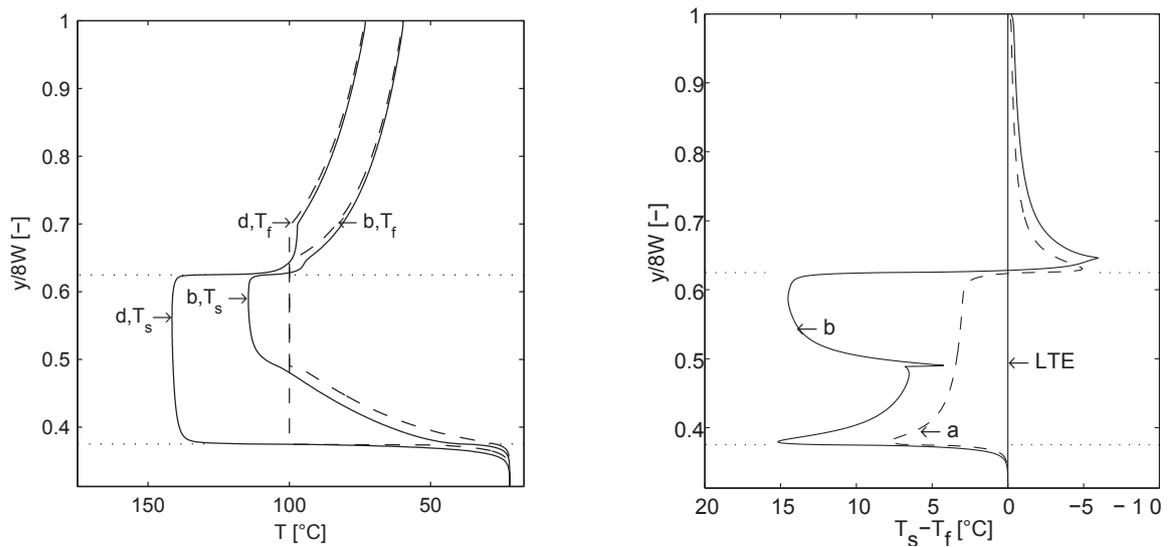
Durch die Wärmeleitung in der festen und flüssigen Phase wird eine Temperaturerhöhung stromauf von der beheizten Wand beobachtet. Die gepunkteten Linien deuten die Abgrenzung der beheizten Wand an. Abb. 4.13 zeigt ebenfalls die Temperaturdifferenz  $T_s - T_f$  an der Wand für die Fälle a und b. Die Temperaturdifferenz im Zweiphasengebiet und die lokale Überhitzung des porösen Materials belegen, dass die Annahme von lokalem thermischen Gleichgewicht einen systematischen Fehler in Form einer künstlichen thermischen Isolierung einbringen würde, vgl. auch (Li et al., 2010c; He et al., 2013). Für steigende Stanton Zahlen vergrößert sich die globale Temperaturdifferenz zwischen porösem Material und Fluid. An der Vorderkante der beheizten Wand ist  $T_s - T_f$  positiv und

#### 4. Lösung der Multiphasen Mischungsmodelle



**Abb. 4.12.:** Fluid- und Solidtemperaturen, Verdampfungsfront und Sättigungsprofile an der beheizten Wand für Strömung entgegen der Schwerkraft bei Variation von St.

an der Hinterkante ist  $T_s - T_f$  negativ. Es gibt mehrere lokale Minima und Maxima von  $T_s - T_f$ : Das Maximum befindet sich in der Nähe des Beginns der beheizten Wand bei  $y/8W = 3/8$ . Das lokale Minimum bei  $y/8W \approx 0.49$  stellt den Übergang von dem flüssigen Aggregatzustand zum Zweiphasengebiet dar. Der Gradient der Fluidtemperatur ist diskontinuierlich am Phasenübergang für diesen Fall und die Temperaturdifferenz zeigt einen Sprung. Die Festkörpertemperatur  $T_s$  zeigt keinen Sprung durch den stark diffusiven Effekt der Festkörperwärmeleitung. Das zweite lokale Maximum bei  $y/8W \approx 0.59$  ist im Bereich der Heizung und deutet an, dass stromab von dieser Stelle die Temperatur der festen Phase fällt. Die minimale Temperaturdifferenz bei  $y/8W \approx 0.65$  ist an der Stelle, an der keine Verdampfung mehr auftritt und der Effekt der Verdampfungsenthalpie keine Rolle mehr spielt. Stromab dieser Position gleichen sich die Temperaturen schließlich an. Der Fall a in Abb. 4.13 zeigt keine Sprünge im Verhalten der Temperaturdifferenz. Da kein Phasenwechsel bei dieser Stanton Zahl auftritt resultiert die Temperaturdifferenz lediglich aus einem Gleichgewicht zwischen konvektiven und konduktiven Flüssen und die latente Wärme spielt keine Rolle. Die Zellen in Bereichen hoher Temperaturgradienten, insbesondere an makroskopischen Phasenübergängen wie bei Fall b bei  $y/8W \approx 0.5$ , zeigen große Wechsel im Wärmefluss nach Gl. 2.78 und 2.79. Dies legt nahe, dass ein feines Gitter notwendig ist, um diese Vorgänge genügend auflösen zu können und um numerische Konvergenz zu erreichen.



**Abb. 4.13.:** Temperaturen und Temperaturdifferenzen an der beheizten Wand für Strömung entgegen der Schwerkraft; Variation von  $St$ .

**4.1.2.4.2. Effekt der Rayleigh Zahl auf die Strömung und den Wärmeübergang** Die Rayleigh Zahl  $Ra$ , als Maß für die Rolle der Auftriebskraft, hat einen Einfluss auf die minimale Sättigung im Rechengebiet. Eine Verschiebung der Position des Beginns der Zweiphasenzone ist fast vernachlässigbar, wie bereits bei Li et al. (2010b) beschrieben wird. Das Ende der Zweiphasenzone wird stromauf verschoben für größeres  $Ra$ , was ebenfalls in guter Übereinstimmung ist mit Li et al. (2010b). Es fällt auf, dass für kleines  $Ra$  negative Temperaturdifferenzen  $T_s - T_f$  auftreten. Dies kann durch die geringe Wärmeaufnahmefähigkeit des erzeugten Dampfes erklärt werden.

**4.1.2.4.3. Effekt der Péclet Zahl auf die Strömung und den Wärmeübergang** Der Effekt der Péclet Zahl kann unterschieden werden in drei Fälle:

- Veränderung von  $Pe$ , lasse  $St = \text{const.} \rightarrow \dot{q} \neq \text{const.}$ : Lindner et al. (2015) zeigen, dass sich für  $Pe = 0.48$  der überhitzte Dampf an der beheizten Wand in Richtung Austritt ausbreitet und die Form einer Halbellipse annimmt. Bei einer Erhöhung von  $Pe$  in dieser Konstellation, wird das Minimum der Sättigung kleiner. Die globalen Temperaturen an der beheizten Wand fallen. Darüber hinaus übersteigt bei großem  $Pe$  die Konvektion am hinteren Ende des Verdampfungsgebiets den kompensierenden Effekt des Wärmeaustauschs zwischen fester Phase und Fluid, was in großen negativen Temperaturdifferenzen  $T_s - T_f$  resultiert.
- Veränderung von  $Pe$ , lasse  $\dot{q} = \text{const.} \rightarrow St \neq \text{const.}$ : Dies bedeutet, dass das Verhältnis aus zugeführter Wärme und latenter Verdampfungswärme mit sinkendem  $\dot{q}$  abnimmt, also  $St$  abnimmt. Als Konsequenz bedeutet dies, dass das globale Temperaturniveau im Rechengebiet abnimmt und weniger Fluid verdampft wird.
- Veränderung von  $St$ , lasse  $Pe = \text{const.}$ : Dieser Fall wurde bereits im vorherigen Kapitel diskutiert.

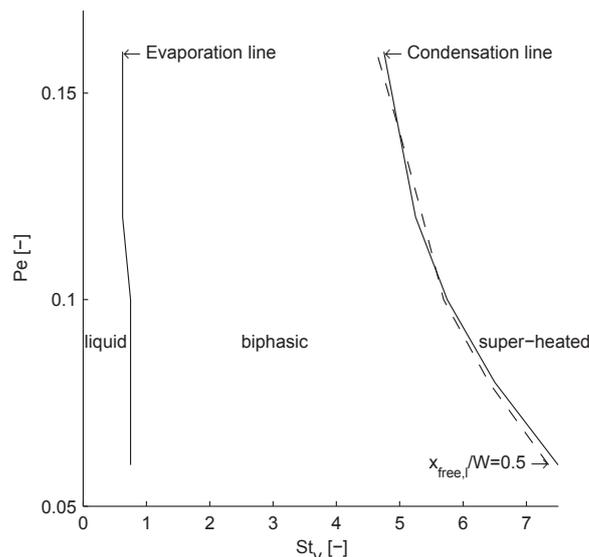
Die Abhängigkeit des Phasenwechsels von den dimensionslosen Parametern  $Pe, St$  wird abgebildet in Abb. 4.14. Es ist zu beachten, dass dieser Zusammenhang für eine konstante Kombination von  $Ra, Bi$  gewählt wurde und andere Kombinationen abweichende Ergebnisse liefern können. Die Lini-

#### 4. Lösung der Multiphasen Mischungsmodelle

en zeigen das Auftreten einer Verdampfungsfront oder Kondensationsfront. Für kleine  $Pe$  muss ein wachsendes  $St$  gewählt werden, um überhitzten Dampf zu erzeugen. Für große  $Pe$  ist Konvektion dominierend und der Wärmeübergang zwischen porösem Material und Fluid wird gestärkt, siehe Gl. 2.82 und 2.83. Das heißt, auch schon ein kleiner Wärmeeintrag genügt zur Erzeugung von überhitztem Dampf. Ähnliches gilt für die Aufheizung der Flüssigkeit auf Sättigungstemperatur. Wird der Verlauf der Verdampfungsfront betrachtet, ist die Verringerung von  $St$  für  $Pe > 0.1$  eher klein und tendiert zu einem weiteren konstanten Grenzwert. Unter dem Aspekt der Anforderung an einen Wärmetauscher, kann der Entwickler zwei sich widerstrebende Ziele verfolgen wollen. Einerseits ist die Wärmeübertragung die wichtigste Aufgabe. Das heißt, dass die größtmögliche Menge an Wärmeeintrag von großem Interesse ist. Die zweite wichtige Anforderung ist geringer Druckverlust, da dies direkt verbunden ist mit der technischen Arbeit, die im System geleistet werden muss. Die Verdampfungsfront erstreckt sich für größere Wärmezufuhr mehr und mehr lateral weg von der beheizten Wand. Dies reduziert den freien Strömungsquerschnitt für die flüssige Phase und sorgt für hohe Geschwindigkeiten. Es ist möglich, dass für manche Randbedingungen ein Zustand erreicht wird, in dem die maximale Wärmezufuhr den Betrieb des Wärmetauschers limitiert. Ein Entwicklungskriterium für Wärmetauscher wäre also die Wärmezufuhr, die durch den Verdrängungseffekt des erzeugten Dampfes eine bestimmte Querschnittfläche für die flüssige Phase frei lässt. Um diese Effekte zu untersuchen wurde die freie Querschnittfläche für die flüssige Phase berechnet. Für jede Kombination von  $Pe, St$  kann die minimale freie Querschnittfläche für die flüssige Phase bestimmt werden anhand des Minimums des  $x$ -Werts für die Verdampfungsfront:

$$x_{\text{frei,l}} := \min(x) | x \in \text{Verdampfungsfront.} \quad (4.11)$$

Die Werte für  $Pe, St$  für einen festen Wert von  $x_{\text{frei,l}}/W$  werden erhalten durch sukzessive Änderung der Randbedingungen. Für Abb. 4.14 wurde ein beliebiger Wert von  $x_{\text{frei,l}}/W = 0.5$  gewählt. Wie zu sehen ist, ist dieses Kriterium für die freie Querschnittsfläche fast identisch zu der Kondensationslinie.



**Abb. 4.14.:** Abhängigkeit des Phasenwechsels und der freien Querschnittfläche für die flüssige Phase von den dimensionslosen Parametern  $Pe, St$  für  $Ra = 226, Bi = 0.2$ .

#### 4.1.2.5. Schlussfolgerungen

Schlussfolgernd lassen sich die Ergebnisse wie folgt zusammenfassen. Die Plausibilisierung der vorgestellten Problemstellung mit einer Parametervariation ist erfolgreich. Alle Effekte lassen sich physikalisch begründen und sind in ihrer Auswirkung auf den Wärme- und Stofftransport nachvollziehbar. Es konnte darüber hinaus gezeigt werden, dass die Notwendigkeit der Anwendung eines Modells im lokalen thermischen Nichtgleichgewicht im Falle von Phasenübergang angebracht ist, um systematische Fehler zu vermeiden. Aus diesen Ergebnissen wurde anhand einer geometrischen Betrachtung des freien Querschnitts für die flüssige Phase ein Entwurfskriterium für Wärmetauscher abgeleitet, das den Druckverlust bei auftretender Verdampfung minimieren kann.



stets  $j_l > 0$ . Dies gilt, sofern nur der kapillare Faktor berücksichtigt wird und die Schwerkraft. Die Phasengeschwindigkeiten für die Phasen  $k$ ,  $u_k$ , werden im Modell nur für die Berechnung der Wärmeübergangskoeffizienten heran gezogen. Dafür sind interpolierte Werte im Zellzentrum notwendig. Der diffusive Massenstrom  $j_l$  wird bei Gl. 3.82 an mehreren Termen für die Flussberechnung nach Finite Volumen benötigt: Die advektiven und diffusiven Terme von Tab. 3.4 werden nach der Diskretisierung am Zellinterface ausgewertet.

#### 4.2.2. Mathematisches Modell

Die Erhaltungsgleichungen werden von Kap. 3.2.3 übernommen, mit der Formulierung der Energieerhaltung für das Fluid nach Gl. 3.82, 3.94 und der Vereinfachung in Gl. 3.107. Die Mischungsvariablen und konstitutiven Gleichungen werden benutzt wie in Kap. 3.2.1 erläutert. Um die Konzentrationen der Komponenten in den jeweiligen Phasen zu berechnen werden die isobaren Gleichgewichtsbeziehungen nach Kap. 2.1.3.2 benutzt. Für den Wärmestrom beim Sieden wird die Korrelation des Blasensiedens aus Gl. 3.79 benutzt. Dieses Modell benutzt die Korrelation für den Wärmeübergang analog zu Shi und Wang (2011) und den Term zur Wärmekopplung analog zu Gl. 2.78 bis 2.80. Der Wärmestrom beim Blasensieden wird vereinfacht angenommen als massengewichtete Summe der einzelnen Wärmeströme für die jeweiligen Komponenten, siehe Gl. 3.79. Wie in Lindner et al. (2015, 2016a), siehe Kap. 4.1.1, wird auch hier gewählt:  $b_{s,f} = 0.006$  für Wasser und Bronze, und der Exponent der Prandtl Zahl  $Pr$  ist  $n = 1.7$ . Für Details zur Berechnung des gemittelten Wärmeübergangskoeffizienten der Phase  $k$ ,  $\bar{h}_{s,k} = f(Nu_k)$ , der von der Phasengeschwindigkeit abhängig ist, wird auf diese Literatur verwiesen. Phasengeschwindigkeiten können aus der Mischungsgeschwindigkeit extrahiert werden, sofern der diffusive Massenstrom der flüssigen Phase in der Mischung  $\vec{j}_k$  berücksichtigt wird:

$$\vec{j}_k = \rho_k \vec{u}_k - \lambda_k \rho \vec{u}, \quad \text{mit} \quad \vec{j}_l = \rho_l (-D_c \nabla s) + \frac{\lambda_l \lambda_v \mathbf{K} (\rho_l - \rho_v)}{\nu} \vec{g}. \quad (4.12)$$

Die letzten zwei Terme von Gl. 4.12 bedeuten, dass nur kapillare Diffusion aufgrund der Meniskuskrümmung berücksichtigt wird. Weiterhin werden Phasenbewegungen aufgrund Dichteunterschieden berücksichtigt, siehe Gl. 4.13. Nicht berücksichtigt werden solutal- und thermo-kapillare Effekte, wie bei Wang und Cheng (1996b) beschrieben.

$$D_c = \frac{\mathbf{K}}{\rho_l \nu} \lambda_l \lambda_v \left( -\frac{\partial p_c}{\partial s} \right), \quad \text{mit} \quad \frac{\partial p_c}{\partial s} = \left( \frac{\phi}{\mathbf{K}} \right)^{1/2} \sigma J'. \quad (4.13)$$

Dieser Testfall beschränkt sich auf 1D Strömung. Das bedeutet, dass der Permeabilitätstensor  $\mathbf{K}$  sich vereinfacht zu einem skalaren Wert und der kapillare Diffusionskoeffizient,  $D_c$ , sowie die Ableitung des Kapillardrucks in Bezug auf die Flüssigkeitssättigung,  $\partial p_c / \partial s$ , ebenfalls skalare Werte sind. Die Leverett J-Funktion nach Gl. 2.20 wird hier verwendet. Summiert über alle Phasen ist die Gesamtkonzentration der Spezies immer konstant für 1D Strömung, siehe Gl. 3.55 bis 3.57. Es wird somit keine Differentialgleichung als Erhaltungsgleichung für die Spezies benötigt. Der Zusammenhang zwischen volumetrischer Enthalpie  $H$  und Fluidtemperatur  $T$  wird aus Kap. 3.2.3 übernommen. Die Modelle für die gemittelten Wärmeleitungskoeffizienten werden aus Gl. 2.21 und 2.22 übernommen und die Volumenänderungsarbeit und kinetische Energien werden vernachlässigt.

### 4.2.3. Problemstellung & Randbedingungen

**Tab. 4.6.:** Fluideigenschaften für n-Heptan ( $\alpha = 1$ ) und n-Dodekan ( $\alpha = 2$ ).

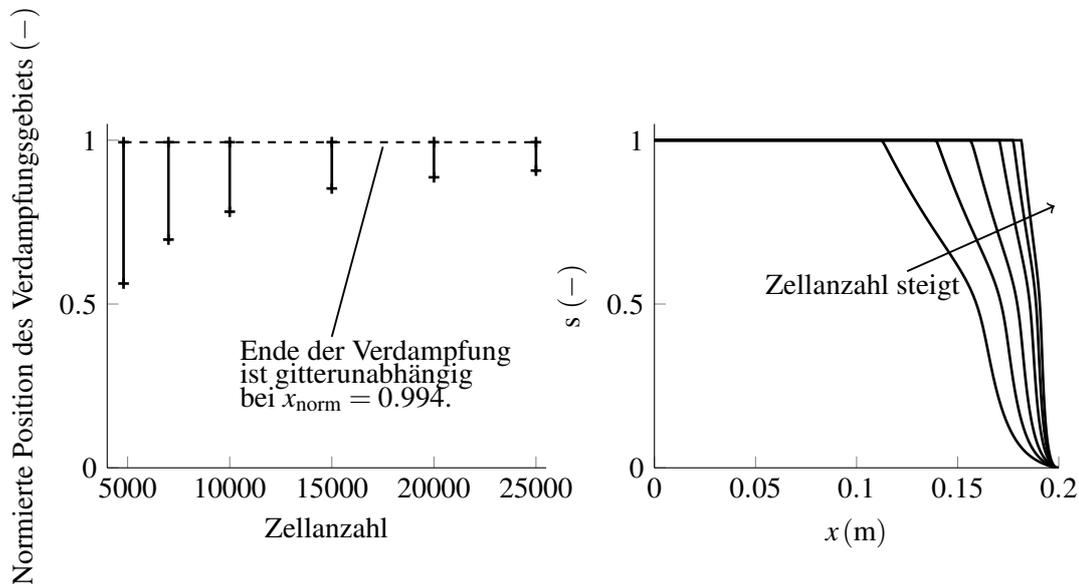
| Eigenschaft     |              | Flüssigkeit            | Gas                    | Einheit           |
|-----------------|--------------|------------------------|------------------------|-------------------|
| $\rho^\alpha$   | $\alpha = 1$ | 680                    | 3.45                   | kg/m <sup>3</sup> |
|                 | $\alpha = 2$ | 750                    | 4.35                   | kg/m <sup>3</sup> |
| $c_p^\alpha$    | $\alpha = 1$ | $2.249 \times 10^3$    | $2.772 \times 10^3$    | J/kgK             |
|                 | $\alpha = 2$ | $2.212 \times 10^3$    | $2.732 \times 10^3$    | J/kgK             |
| $\nu^\alpha$    | $\alpha = 1$ | $0.269 \times 10^{-6}$ | $7.584 \times 10^{-6}$ | m <sup>2</sup> /s |
|                 | $\alpha = 2$ | $2.027 \times 10^{-6}$ | $7.4 \times 10^{-6}$   | m <sup>2</sup> /s |
| $k^\alpha$      | $\alpha = 1$ | 0.113                  | 0.018                  | W/mK              |
|                 | $\alpha = 2$ | 0.095                  | 0.025                  | W/mK              |
| $h_{fg}^\alpha$ | $\alpha = 1$ |                        | $3.16 \times 10^5$     | J/kgK             |
|                 | $\alpha = 2$ |                        | $3.23 \times 10^5$     | J/kgK             |
| $A^\alpha$      | $\alpha = 1$ |                        | 6.89385                | —                 |
|                 | $\alpha = 2$ |                        | 6.99795                | —                 |
| $B^\alpha$      | $\alpha = 1$ |                        | 1264.37                | —                 |
|                 | $\alpha = 2$ |                        | 1639.27                | —                 |
| $C^\alpha$      | $\alpha = 1$ |                        | 216.636                | —                 |
|                 | $\alpha = 2$ |                        | 181.835                | —                 |
| $\sigma$        |              |                        | 0.025                  | N/m               |

Der Unterschied zu Kap. 4.1.1 ist hier, dass in diesem Fall ein Multikomponentenfluid benutzt wird. Als Folge dessen muss die Konzentration am Eintritt als Randbedingung angegeben werden. Es wird eine Mischung aus n-Heptan und n-Dodekan als Fluid verwendet. Die physikalische Länge beträgt 0.2 m und die Porosität ist homogen und gleich 70%, siehe Abb. 3.1. Es wird für die Permeabilität  $1 \times 10^{-12} \text{ m}^2$  benutzt, für die Wärmeleitung der Festkörpermatrix  $1.95 \text{ W/mK}$ , und  $5 \times 10^{-4} \text{ m}$  als die charakteristische Länge. Die Eigenschaften für n-Heptan und n-Dodekan sind in Tab. 4.6 zusammengefasst. Es werden temperaturunabhängige Eigenschaften benutzt, die für die jeweiligen Komponenten definiert sind. Zusätzlich dazu, wird die molare Masse  $M = 0.1 \text{ kg/mol}$  für n-Heptan und  $M = 0.17 \text{ kg/mol}$  für n-Dodekan verwendet. Der Massenstrom am Einlass ist  $\dot{m}_{\text{in}} = 0.3 \text{ kg/s m}^2$ , bei einer Temperatur von  $T_{\text{in}} = 379.15 \text{ K}$  und einer Konzentration von  $w_{l,\text{in}} = 0.5$  und einem Druck am Austritt von  $p_{\text{exit}} = 1 \text{ bar}$ . Als Wärmestrom, der in das System eingeführt wird, wird der Wert  $\dot{q}_{\text{out}} = 2.8 \times 10^5 \text{ W/m}^2$  verwendet, der direkt in das poröse Medium geleitet wird.

### 4.2.4. Ergebnisse und Diskussion

Zunächst wird eine Konvergenzstudie zur Zellanzahl durchgeführt. Mit dem so ermittelten Gitter werden anschließend Ergebnisse erörtert, die die erfolgreiche Anwendung der Modellierung und Implementierung der Zusammenhänge aus Kap. 3.2 verdeutlichen.

Eine Gitterstudie zeigt, dass feinere Gitter den Beginn der Zweiphasenzone tendenziell stromauf verschieben, siehe Abb. 4.16. Für mehr als 20000 Zellen ist die Verschiebung der Zweiphasenzone nur noch gering. Hier werden 25000 Zellen benutzt als Kompromiss zwischen Genauigkeit und Geschwindigkeit.

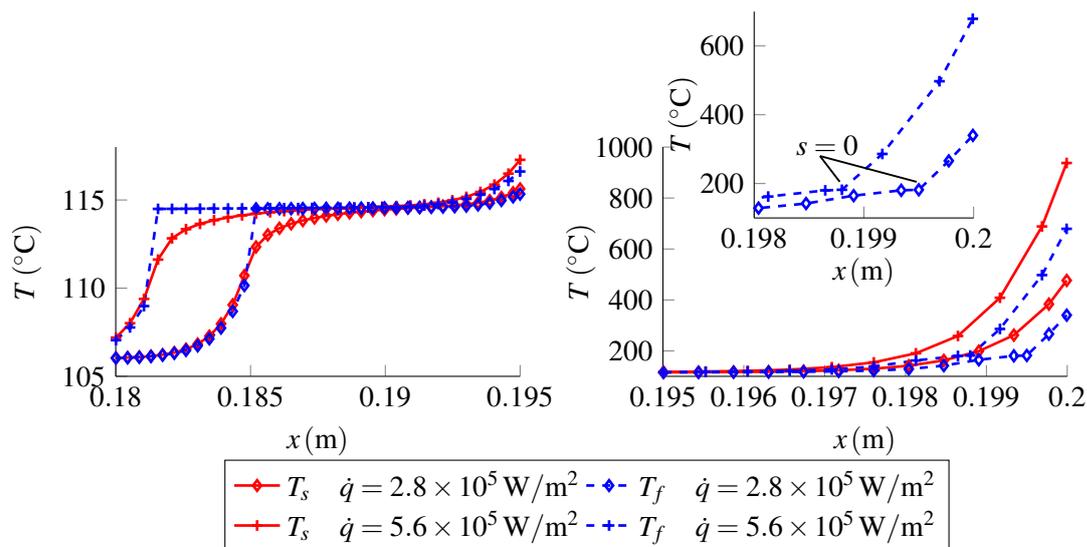


**Abb. 4.16.:** Normierte Position der Zweiphasenzone für einen generischen Testfall, um Gitterkonvergenz zu demonstrieren und Flüssigkeitssättigung für diese Gitter.

Es werden nur Ergebnisse für  $x > 0.18$  m gezeigt, da stromauf von dieser Position nur eine geringe Veränderung in der Temperatur beobachtbar ist. In den folgenden Abbildungen verschiebt sich die Position der Verdampfung nur Bruchteile von Zentimetern. Die Intention ist es, die Ergebnisse zum qualitativen Verständnis und zur Plausibilitätsprüfung der physikalischen Modellierung und numerischen Implementierung heranzuziehen. Abb. 4.17 zeigt Ergebnisse für den Testfall mit zwei verschiedenen Wärmeströmen. Dargestellt sind die Temperaturen für das Fluid und das poröse Medium zu Beginn und am Ende der Verdampfungsregion. Die Zellen, die das Ende der Verdampfung kennzeichnen, sind mit  $s = 0$  markiert. Die Fluidenthalpien am Austritt sind in sehr guter Übereinstimmung mit einer globalen Energiebetrachtung mittels des ersten Hauptsatzes der Thermodynamik nach Gl. 3.109 mit einer Abweichung von  $< 0.4\%$ .

Ein größerer Wärmestrom verschiebt den Beginn des Verdampfungsgebiets stromauf: Dies ist in guter Übereinstimmung mit den Ergebnissen von Shi und Wang (2011) und Kap. 4.1, in dem dieser Effekt bereits für ein einkomponentiges Fluid diskutiert wurde. Der Gradient der Fluidtemperatur zu Beginn der Verdampfung ist sehr klein bzw. nahe null. Dies ist der Grund, warum die Annahme von lokalem thermischen Gleichgewicht hier nicht verwendet wird.

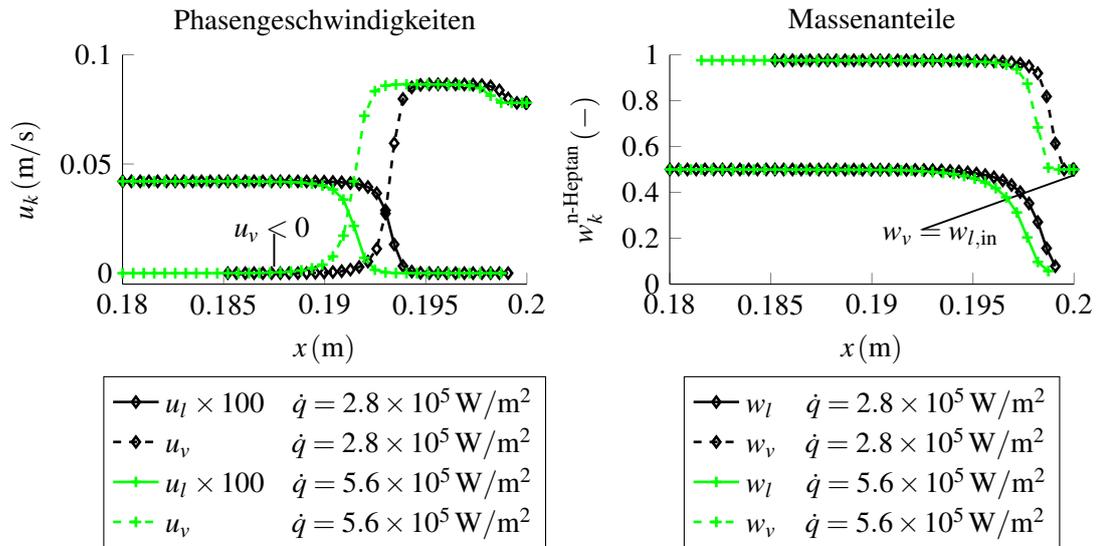
Die Annahme von lokalem thermischen Gleichgewicht würde hier eine künstliche thermische Isolierung schaffen, da die Wärmeleitung nahezu null ist. In Realität jedoch kann die feste Phase des porösen Verdampfers immer Wärme leiten, sofern ein Temperaturgradient vorliegt. Abb. 4.19 zeigt die Sättigungsprofile für diese Fälle. Weiterhin dargestellt sind die Sättigungsprofile für eine Parametervariation der Temperatur am Einlass, für den Massenstrom und für die Massenanteile des Fluids.



**Abb. 4.17.:** Temperaturen für den Beginn und das Ende der Verdampfungsregion für zwei verschiedene Wärmeströme. **Links:** Beginn der Verdampfung, **rechts:** Ende der Verdampfung.

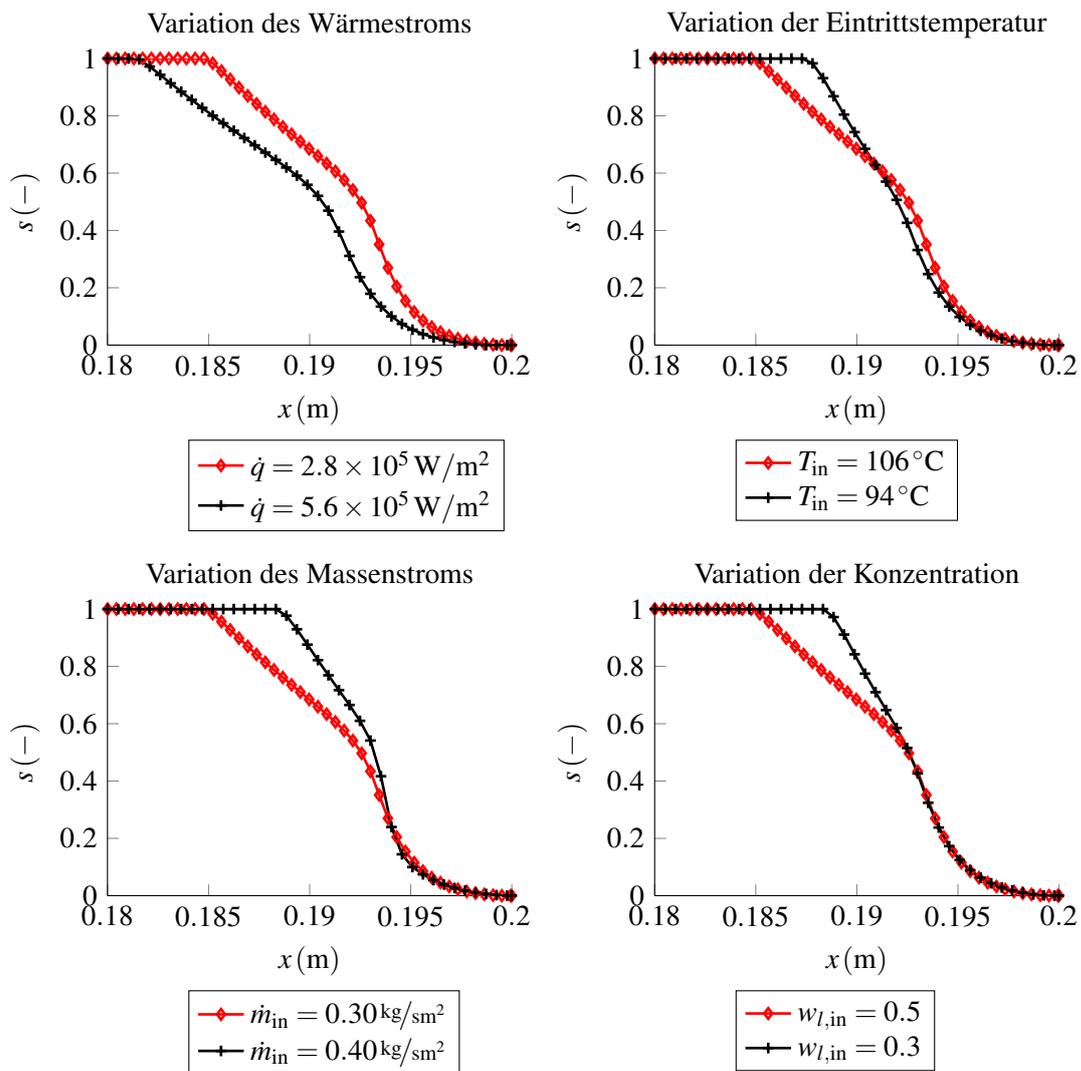
Für einen Wärmestrom von  $2.8 \times 10^5 \text{ W/m}^2$ , sinkt die analytische Austrittstemperatur von  $338.7^\circ\text{C}$  auf  $328.9^\circ\text{C}$  bei Änderung der Eintrittstemperatur von  $106^\circ\text{C}$  auf  $94^\circ\text{C}$ , vgl. Gl. 3.110. Die Wirkung auf die Positionsänderung der Verdampfungsregion ist gering: Das Ende wird nicht verschoben und der Beginn der Verdampfungsregion verschiebt sich stromab. Der sensible Wärmestrom, um das Fluid bis zum Siedepunkt zu erwärmen, wird erhöht für geringere Eintrittstemperaturen. Da der Wärmestrom gleich bleibt bei dieser Parameteränderung, muss folgerichtig die Austrittstemperatur sinken. Wird der Massenstrom am Eintritt erhöht während alle anderen Randbedingungen gleich bleiben, so verringert sich die Austrittstemperatur und die Verdampfungsregion verschiebt sich stromab.

Eine Variation der Konzentration am Eintritt verschiebt den Siede- und Kondensationspunkt der Mischung. Für kleinere Konzentrationen des Leichtsieders werden höhere Siede- und Kondensationspunkte erhalten. Da die Verdampfungsenthalpie  $h_{fg}$  des Leichtsieders geringer ist als die des Schwersieders, ist der dryout Wärmestrom kleiner für Mischungen mit großem Anteil des Leichtsieders. Als ein weiterer Effekt tritt der Einfluss der spezifischen isobaren Wärmekapazität  $c_{p,v}$  der Gasphase in Kraft. Für den Leichtsieder ist  $c_{p,v}$  höher und dadurch ist der notwendige sensible Wärmestrom in die Gasphase für eine generische Temperaturerhöhung größer bei großer Konzentration des Leichtsieders in der Mischung.



**Abb. 4.18.:** Phasengeschwindigkeiten und Massenanteile für n-Heptan für zwei Wärmeströme wie in Abb. 4.17.

Abb. 4.18 zeigt die zugehörigen Phasengeschwindigkeiten und Massenanteile für n-Heptan für die Wärmeströme von Abb. 4.17. Die Massenanteile in Abb. 4.18 werden nur dort dargestellt, wo diese Werte definiert sind. So ist z.B. der Massenanteil von n-Heptan in der flüssigen Phase nicht definiert in Zellen mit  $s = 0$ . Es gilt zu beachten, dass sich die Massenanteile im Zweiphasengebiet,  $w_k^{\text{n-Heptan}}$ , nicht zu 1 addieren, siehe Gl. 3.57. Der Massenanteil von n-Heptan sinkt in der flüssigen Phase für steigende Temperaturen im Zweiphasengebiet. Dadurch ist der Massenanteil von n-Heptan in der Gasphase zunächst nahe 100% bei Beginn der Verdampfung. Dieses Verhalten wird vom verwendeten VLE vorausgesagt. Da  $w_{l,\text{in}} = 0.5$  als Randbedingung verwendet wird, nimmt der Massenanteil von n-Heptan in der Gasphase auch diesen Wert an, d.h.  $w_v = 0.5$  für Zellen mit  $s = 0$ . Die Phasengeschwindigkeiten in Abb. 4.18 zeigen ein Maximum der Geschwindigkeit für die Gasphase in einem kleinen Abstand stromauf vom Kondensationspunkt, bei  $x \approx 0.195 \text{ m}$ . Das Minimum der Geschwindigkeit für die Gasphase ist in der Nähe des Siedepunkts bei  $x \approx 0.1875 \text{ m}$  und nimmt dort negative Werte an. Dieses Minimum ist in der Abbildung gekennzeichnet. Der erzeugte Dampf zu Beginn der Verdampfung strömt somit stromauf aufgrund des positiven Druckgradienten in der Gasphase. Dieser - zur flüssigen Phase - gegenläufige Massenstrom der Gasphase bringt den Dampf in Kontakt mit kaltem Fluid am Siedepunkt und führt an dieser Position zur Kondensation, vgl. Shi und Wang (2011); Lindner et al. (2016a).



**Abb. 4.19.:** Sättigungsprofile für eine Parametervariation. Die Linien mit der Markierung  $\diamond$  sind der selbe Referenzfall.

## 5. Experimentelle Untersuchungen und Validierung

Das Ziel der Untersuchungen ist die Validierung der Modellierung und Implementierung des Wärme- und Stofftransports mit experimentell gemessenen Daten der Verdampfung eines ein-komponentigen Fluids (Wasser) und mehrerer zweikomponentiger Fluide (Mischungen von Ethanol/Wasser in verschiedenen Konzentrationen). Dazu wird die Permeabilität für ein poröses Medium mit einem Messaufbau bestimmt und mit einer externen Arbeit verglichen. Da für die Massen- und Impulserhaltung eine Form der Sättigungsgleichung mit variabler Fluidichte gewählt wurde, wird diese Implementierung mit einer isothermen erzwungenen Imbibition experimentell validiert.

Kap. 5.1 geht zunächst auf die Präparierung des porösen Mediums ein. Anschließend werden experimentelle Ergebnisse zur Messung der Permeabilität in Kap. 5.2 vorgestellt. Die isotherme und instationäre Verteilung im porösen Material wird in Kap. 5.3 mit experimentellen und numerischen Daten diskutiert. Dazu wird in Kap. 5.3.1 die gewählte Methode in den Kontext zum Stand der Forschung gesetzt. In Kap. 5.3.2 wird der Versuchsaufbau erläutert, in Kap. 5.3.3 wird die Auswertung der Messdaten beschrieben und Bemerkungen zu der numerischen Lösung gemacht, in Kap. 5.3.4 die Randbedingungen für die numerische Simulation beschrieben und in Kap. 5.3.5 die Ergebnisse gezeigt. Die Ergebnisse zur stationären Verdampfung werden in Kap. 5.4 vorgestellt. Nach Erläuterungen zu den numerischen Randbedingungen in Kap. 5.4.1 wird auf die Verdampfung von destilliertem Wasser (Kap. 5.4.2) und von einem Ethanol/Wasser Gemisch (Kap. 5.4.3) eingegangen. Besonderer Fokus liegt hierbei auf der Vergleichbarkeit zwischen experimentellen und numerischen Randbedingungen.

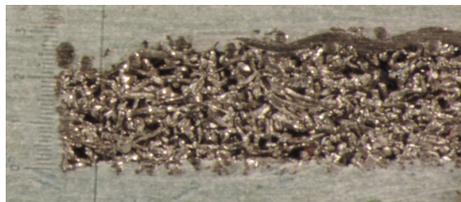
Das verwendete poröse Material besteht aus gesinterten Fasern (Werkstoff 1.4841) und wird in Matten mit einer Dicke von ca. 2 mm bezogen. Tab. 5.1 zeigt die aus der Computertomographie gemessene Faserdickenverteilung und Faserorientierung des porösen Materials. Die Dickenrichtung der Matte ist im kartesischen Koordinatensystem die  $z$ -Richtung. Es zeigt sich, dass in Breitenrichtung der Matte (Diagonalelemente  $xx$  und  $yy$  des Orientierungstensors) eine annähernd gleichmäßige Aufteilung der Fasern vorzufinden ist. In Dickenrichtung der Matte sind hingegen nur weniger als 19% der Fasern orientiert. Die nach dem Volumen gewichtete lokale Faserdickenverteilung zeigt, dass der überwiegende Teil der Fasern eine Dicke von weniger als  $70 \mu\text{m}$  hat. Weitere, makroskopische Transporteigenschaften dieses Materials werden in Kap. 5.3 erläutert.

**Tab. 5.1.:** Faserdickenverteilung und Faserorientierung des porösen Materials (Schladitz und Godehardt, 2013).

| Quantile der volumengewichteten lokalen Faserdickenverteilung |                     |                     |
|---|---------------------|---------------------|
| 10%   | 50%                 | 90%                 |
| $19.35 \mu\text{m}$   | $41.06 \mu\text{m}$ | $69.41 \mu\text{m}$ |
| Diagonalelemente des Orientierungstensors                     |                     |                     |
| $xx$  | $yy$                | $zz$                |
| 0.4556  | 0.3578              | 0.1865              |

## 5.1. Präparierung des porösen Mediums

Bei den Messungen ohne Verdampfung mit Wasser zur Ermittlung der Permeabilität (Kap. 5.2) und mit Verdampfung und Wasser bzw. Ethanol/Wasser (Kap. 5.4) wird das poröse Medium in quasi 1D durchströmt. Da nur eine Durchströmung des porösen Mediums erwünscht ist, ohne Strömung an den Außenflächen eines Probenkörpers, wurde das poröse Material mittels Laser zunächst in Streifen der Abmessungen ca.  $10\text{ mm} \times 2\text{ mm} \times 150\text{ mm}$  geschnitten. Dieser Streifen soll nur durch die Stirnflächen durchströmt werden. Das verwendete zwei Komponenten Epoxidharz (Weicon Nr. 10500400) umschließt die poröse Struktur, ohne in die Porenräume einzudringen. Auf diese Weise ist sichergestellt, dass sich das poröse Material stoffschlüssig ummanteln lässt, ohne auf die Strömung im Kern Einfluss zu nehmen. Das Epoxidharz ist temperaturbeständig bis  $200\text{ °C}$  und eignet sich damit für Wärmezufuhr. Eine Aufnahme der eingeharzten Stirnfläche unter dem Mikroskop ist in Abb. 5.1 dargestellt. Der Einfluss von Inhomogenitäten in der Querschnittsfläche wird in Kap. 5.5 erläutert.



**Abb. 5.1.:** Aufnahme unter dem Mikroskop von der eingeharzten Stirnfläche.

## 5.2. Permeabilität und Anwendbarkeit des Darcy Gesetzes

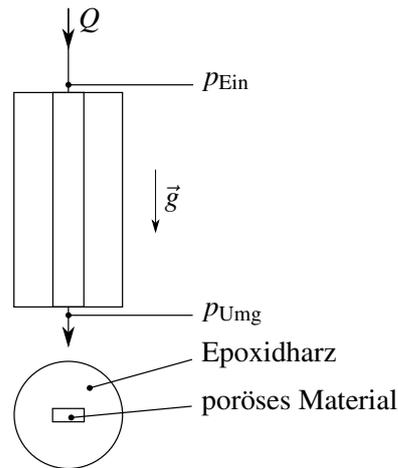
Die Ermittlung der einphasigen Permeabilität, bzw. die Ermittlung der intrinsischen Permeabilität  $K$ , dient zwei Zwecken. Zunächst ist die Permeabilität eine Stoffeigenschaft der porösen Verdampfer, die in die numerischen Simulationen und somit in die Validierung eingeht. Ohne Kenntnis dieses Parameters müsste eine Annahme getroffen werden, die einen zusätzlichen Fehler einführen kann. Des Weiteren dient die Messung der Permeabilität zur Plausibilisierung, ob überhaupt das Darcy Gesetz für diese porösen Medien gültig ist. Der eigens konstruierte Versuchsaufbau des Permeameters basiert auf dem Prinzip der konstanten Druckhöhe<sup>1</sup> (Bear, 1988), siehe Abb. 5.2. Es wird hier ein konstanter Eintrittsdruck auf den Prüfling aufgeprägt, siehe auch Löser (2012); Scharl (2013); Weisensee (2014); Mayer (2015). Das verwendete destillierte Wasser fließt durch den Prüfling und verlässt ihn als Freistrahler in die Umgebung. Aus der hydrostatischen Druckdifferenz zwischen Eintritt und Austritt und der Permeabilität ergibt sich somit ein Volumenstrom. Werden der Volumenstrom  $Q$  und der Druckgradient  $\nabla p$  gemessen, so kann mit Gl. 2.4 die Permeabilität  $K$  berechnet werden. Das Prinzip kann auch umgekehrt werden: Der Volumenstrom wird durch eine Schlauchpumpe vorgegeben. Der sich einstellende, zeitlich konstante Eintrittsdruck zusammen mit dem Umgebungsdruck wird zur Permeabilität umgerechnet. Dies hat im Versuch die gleichen Ergebnisse ergeben.

Ein ähnlicher Aufbau wurde mit Hilfe eines Permeameters und zeitlich veränderlicher Druckhöhe<sup>2</sup>

---

<sup>1</sup>constant head permeameter, CHP

<sup>2</sup>falling head permeameter, FHP



**Abb. 5.2.:** Skizze des Aufbaus zur Messung der Permeabilität.

umgesetzt. Der Unterschied ist hier, dass sich die Höhe der Wassersäule über dem Eintritt zeitlich verändert. Über den fallenden Wasserpegel kann mit dem Zeitverlauf ebenfalls die Permeabilität berechnet werden (Bear, 1988; Masoodi, 2010). Dieser Aufbau lieferte jedoch keine reproduzierbaren und verlässlichen Werte für die Permeabilität. Die Ursache kann nur in dem fehlenden Einstellen von Gleichgewichtszuständen vermutet werden. Im Folgenden werden deshalb nur Ergebnisse gezeigt, die bei konstantem hydraulischen Druck am Eintritt erhalten wurden.

Die Ergebnisse der Permeabilität werden mit dem Modell von Masoodi (2010) verglichen, der eine Abhängigkeit der Permeabilität zur Porosität  $\phi$  und zu einem Kapillarradius  $R_{\text{Kap}}$  herleitet. Als Basis dient die Annahme, dass die Hagen-Poiseuille Strömung innerhalb der Strömungskanäle gilt. Diese laminare Rohrströmung für ein Newtonsches, inkompressibles Fluid wird kombiniert mit dem Darcy Gesetz. Daraus ergibt sich ein Zusammenhang der Form:

$$K = \frac{1}{8} \phi R_{\text{Kap}}^2. \quad (5.1)$$

Es fehlt noch ein Zusammenhang zwischen Kapillarradius und Faserradius. Dieser kann über den hydraulischen Radius hergestellt werden. Somit ergibt sich:

$$R_{\text{Kap}} = R_{\text{Faser}} \frac{\phi}{1 - \phi}. \quad (5.2)$$

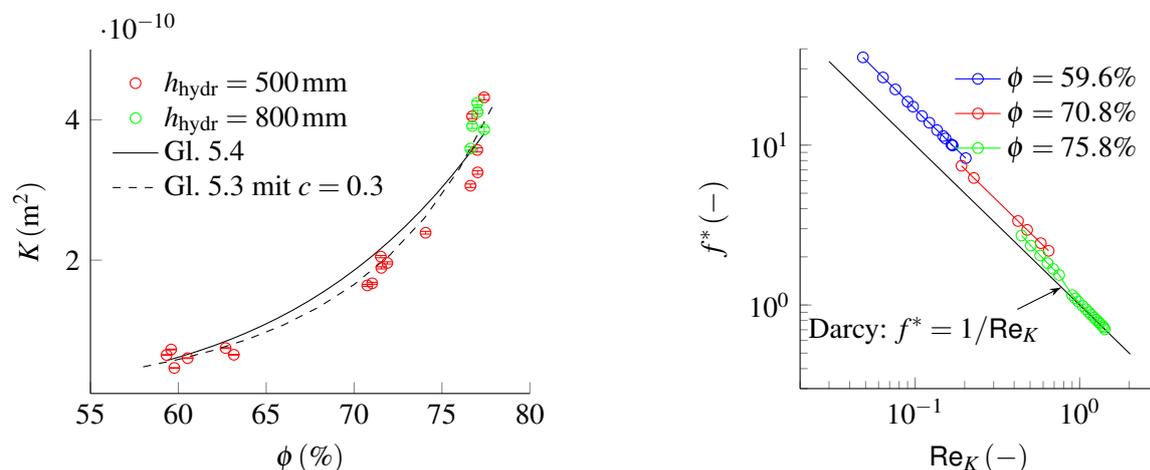
Weiterhin ist es naheliegend, einen Faktor  $c$  zur Anpassung an die Fasergeometrie zu wählen. Gl. 5.1 kann nun geschrieben werden als

$$K = c \frac{1}{8} \phi R_{\text{Faser}}^2 \left( \frac{\phi}{1 - \phi} \right)^2. \quad (5.3)$$

Das kapillare Permeabilitätsmodell nach Gl. 5.3 wird zusammen mit experimentellen Daten und einer einfachen Potenzfunktion der Form von Gl. 5.4 in Abb. 5.3 verglichen. Zu den berechneten Permeabilitäten sind die Fehlerbalken eingezeichnet, die der Standardabweichung bei einer Mittelung über einen Zeitraum von mindestens 1 Minute entsprechen,

$$K = c_1 \phi^{c_2}. \quad (5.4)$$

Der Einfluss der eingestellten Druckhöhe  $h_{\text{hydr}}$  vom CHP wurde mit zwei verschiedenen Werten ( $h_{\text{hydr}} = 500 \text{ mm}$ ,  $h_{\text{hydr}} = 800 \text{ mm}$ ) bei verschiedenen Prüflingen, die eine Porosität von  $\phi \approx 77\%$  aufweisen, untersucht. Es wurde keine Abhängigkeit bei diesen geringen Drücken ermittelt. Für Gl. 5.4 wird gewählt:  $c_1 = 1.22464 \cdot 10^{-23} \text{ m}^2$ ,  $c_2 = 7.14361$ . Abb. 5.3 zeigt weiterhin den Reibungsfaktor in Abhängigkeit von der Reynolds Zahl, siehe Kap. 2.1.1.2. Eine gute Übereinstimmung mit dem Darcy Gesetz für diese Reynolds Zahlen ist sichtbar.



**Abb. 5.3.:** Links: Permeabilität in Abhängigkeit der Porosität  $\phi$  mit gemessenen Daten vom CHP und Gl. 5.3, 5.4, rechts: Reibungsfaktor  $f^*$  in Abhängigkeit der Reynolds Zahl  $\text{Re}_K$  nach Gl. 2.12 und 2.15 für verschiedene Porositäten (Zhong et al., 2011).

Auf eine Darstellung der Fehlerbalken wurde hier verzichtet, da die Standardabweichung gering ist. Die Parallelverschiebung der Messungen zu der Korrelation nach dem Darcy Gesetz,  $f^* = 1/\text{Re}_K$  lässt sich insofern erklären, dass es eine Rolle spielt, mit welcher Permeabilität die Reynolds Zahl  $\text{Re}_K$  gebildet wird. Die gemessenen Reibungsfaktoren beruhen vielmehr auf dem Zusammenhang  $f^* \propto 1/\text{Re}_K$ . In Abb. 5.3 wird die Permeabilität für jeden gemessenen Datenpunkt bestimmt und somit die Reynolds Zahl gebildet. Wird hingegen die Permeabilität für jeden Datenpunkt, bei gleicher Porosität, fest angenommen, wird keine Parallelverschiebung beobachtet. Dann ist möglich, dass gilt:  $f^* = 1/\text{Re}_K$ . Der hier dargestellte Zusammenhang ist bewusst nach Zhong et al. (2011) so gewählt worden.

Diese Werte der Permeabilität werden herangezogen für die Berechnung der isothermen Verteilung des Fluids im folgenden Kapitel und die Validierung der Verdampfungsmodelle in Kap. 5.4. Zur Verdampfung werden deutlich kleinere Massenströme benutzt ( $< 1 \text{ g/min}$ ) als bei der Permeabilitätsmessung ( $12 \text{ g/min} \dots 40 \text{ g/min}$ ), jedoch auch bei teils niedrigeren Dichten (gasförmig  $\rho = 1.7 \text{ kg/m}^3$  vs. flüssig  $\rho = 998 \text{ kg/m}^3$ ). Wird dies mit der unterschiedlichen Viskosität in Betracht gezogen, so sind die Reynolds Zahlen im Verdampfungsversuch geringer als bei den Experimenten zur Ermittlung der Permeabilität. Eine Verwendung des Darcy Gesetzes ist somit in den folgenden Kapiteln gerechtfertigt.

### 5.3. Isotherme Verteilung mit Laser-Transmission

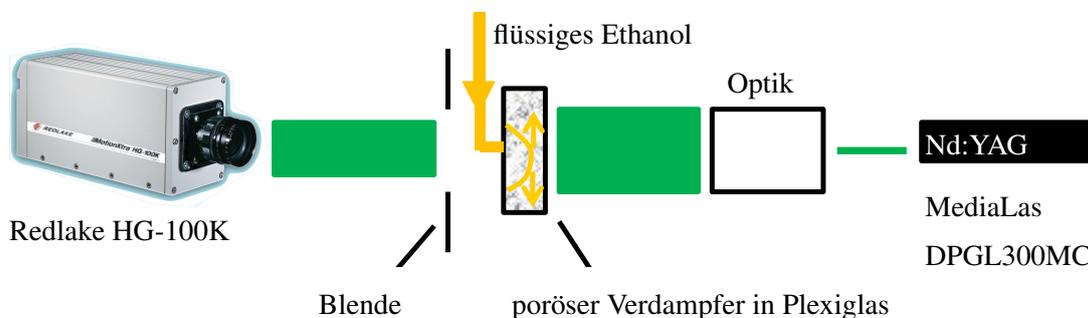
In diesem Kapitel wird der instationäre Vorgang der erzwungenen Imbibition mit einer experimentellen Methodik untersucht, die auf Laser-Transmission basiert. Die so gewonnenen experimentellen Daten werden gegenübergestellt mit numerischen Daten zur Füllung des Porenraums.

#### 5.3.1. Methoden zur Messung von Mehrphasenströmungen

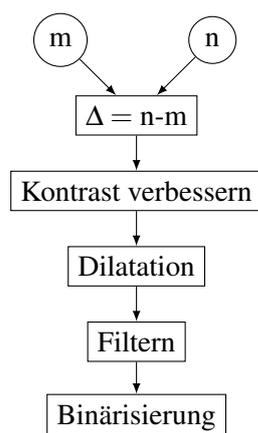
Da der Vorgang der Befüllung betrachtet werden soll, ist zu erwarten, dass sich verschiedene Sättigungen im Verdampfer beobachten lassen. Der Stand der Forschung zur Messung von Sättigungen lässt sich nach der Messmethodik unterteilen (visuell, Röntgenstrahlung, Neutronenstreuung, Mikrowellenstrahlung, Magnetresonanztomographie, Magnetische Empfindlichkeit und Dielektrische Konstante (Chen, 1976)). Zielführender für diese Arbeit ist jedoch eine Einteilung anhand der Eignung zur Messung von metallischen Proben, wie es hier der Fall ist. Hierfür kommen nur drei Methoden in Frage. Die erste Methode basiert auf visuellen Messungen: Für Zweiphasensysteme mit Luft und Wasser ist die Intensität zur Sättigung proportional (Darnault et al., 1998; Darnault et al., 2001), es gibt einfache analytische Zusammenhänge nach Niemet und Selker (2001) und die Verwendung von zusätzlichen ultravioletten Markierungsstoffen ist möglich (Huang et al., 2002). Die zweite Methode, basierend auf Neutronenstreuung, nutzt den Vorteil aus, dass Neutronen Metalle sehr gut durchdringen, hat jedoch den Nachteil eines komplexen Aufbaus. Die dritte Methode misst die relative Permittivität und basiert somit auf der magnetischen Leitfähigkeit in Abhängigkeit des Flüssigkeitsgehaltes der Poren, die für metallische poröse Medien nicht messbar ist. Aufgrund des einfachen Aufbaus und der Verfügbarkeit einer Hochgeschwindigkeitskamera wurde eine visuelle Methode gewählt, um den qualitativen Verlauf der Flüssigkeitsverteilung zu messen. Der Aufbau wird im nächsten Kapitel beschrieben.

#### 5.3.2. Aufbau des Versuchs

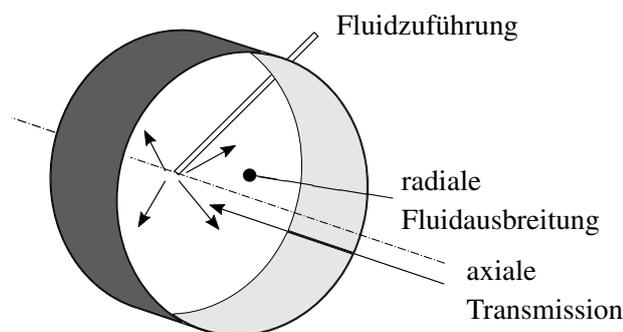
Es wurde ein Aufbau gewählt, der einen Lichtschnitt eines Lasers (MediaLas DPGL300MC, 532 nm, 350 mW) auf einen teils optisch durchlässigen Verdampfer leitet und die Transmission orts- und zeitaufgelöst mit einer Hochgeschwindigkeitskamera (Redlake HG-100K) misst. Der Laserstrahl wird mit zwei konvexen Linsen expandiert und transmittiert durch das poröse Medium. Das poröse Medium wurde mittels Laser zu Zylindern mit Durchmessern zu je 39,7 mm geschnitten. Es handelt sich um poröses Material der globalen Porosität 72,2%, gemessen mit einer kalibrierten Waage (Sartorius CP442s). Abb. 5.4 und 5.5 zeigen den experimentellen Aufbau.



**Abb. 5.4.:** Experimenteller Aufbau zur isothermen Fluidausbreitung mittels Lasertransmission.



**Abb. 5.6.:** Schema des Ablaufs der Bildverarbeitung mittels Differenzbildern und MATLAB®. Aus den zeitaufgelösten Bildern kann durch geeignete Bildbearbeitung ein Befüllungsvorgang pro Pixel berechnet werden.



**Abb. 5.5.:** Skizze der Lasertransmission durch den porösen Verdampfer in einer Plexiglasaufnahme.

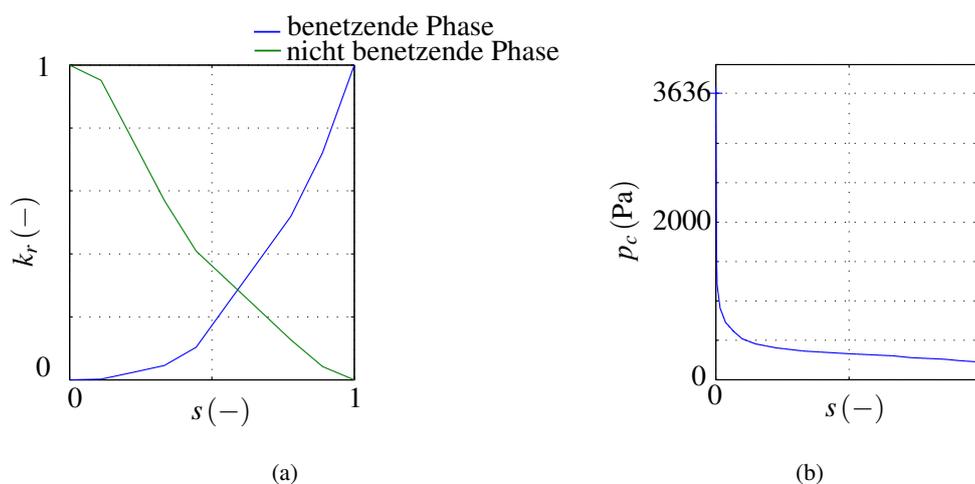
### 5.3.3. Validierung mittels numerischer Rechnungen

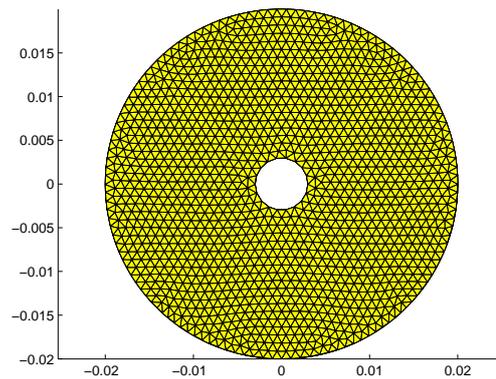
Die zeitaufgelösten Bilder werden nachbearbeitet, indem die Differenzen der Bilder zwischen zwei Zeitschritten,  $m$  und  $n$ , betrachtet werden. Für jeden Pixel und jeden Zeitschritt sind somit Intensitätswerte des CCD verfügbar. Diese Differenzbilder werden weiter ausgewertet mit Hilfe der MATLAB® Image Processing Toolbox (MATLAB, 2013). Die Differenzbilder werden im Kontrast verbessert, dilatiert, von Rauschen durch Filter befreit und konvertiert in binäre Bilder, siehe Abb. 5.6. Mit der Intensitätsdifferenz können das tatsächliche Intensitätsprofil des Lasers und der Transmissionskoeffizient pro Pixel vernachlässigt werden. Ohne die Kenntnis des Proportionalitätsfaktors,  $\text{Intensität} \propto \text{Sättigung}$ , ist es so dennoch möglich, die ersten detektierbaren Pixel zu erfassen, die in Kontakt stehen mit dem Fluid (Darnault et al., 1998; Darnault et al., 2001). Aufgrund der Inhomogenität des porösen Materials kann nur ein maskiertes Bild der Verteilung erfasst werden, da nicht jeder Pixel eine transmittierende Pore repräsentiert. Wird nun  $m$  gewählt zum Zeitpunkt  $t$  und  $n$  gewählt zum Zeitpunkt  $t + \Delta t$ , kann die Frontausbreitung während des Zeitschritts  $\Delta t$  erfasst werden. Wird  $m$  gewählt zum Zeitpunkt  $t = 0$  und  $n$  gewählt zum Zeitpunkt  $t > 0$ , kann der aktuelle Stand der Füllung zum Zeitpunkt  $t$  erfasst werden. Die experimentellen Ergebnisse werden

**Tab. 5.2.:** Makroskopische Transporteigenschaften und geometrische Informationen zum porösen Material (Rief und Printsypar, 2012).

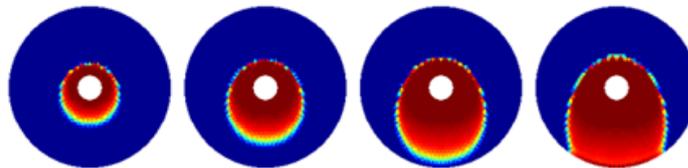
|   |  |
|---|--|
| Permeabilitätstensor $\mathbf{K} / 10^{-10} \text{ m}^2$        | $\begin{bmatrix} 2.66 & -0.026 & -0.073 \\ -0.027 & 2.22 & -0.011 \\ -0.072 & -0.011 & 2.95 \end{bmatrix}$ |
| relative Permeabilität in der $x, y$ -Ebene (radial)            | siehe Abb. 5.7(a)  |
| Kapillardruckkurve bei Imbibition in der $x, y$ -Ebene (radial) | siehe Abb. 5.7(b)  |

gegenübergestellt mit eigenen Rechnungen mit Hilfe der MATLAB<sup>®</sup> Reservoir Simulation Toolbox MRST (Lie et al., 2012) und COMSOL<sup>®</sup>. Um die numerische Simulation durchführen zu können, ist die Kenntnis der Porosität, relativen Permeabilität und der Kapillardruckkurve notwendig. Diese Daten wurden in einer externen Arbeit ermittelt, indem aufgrund eines  $\mu\text{CT}$  Scans ein exaktes Geometriemodell erstellt wurde, und damit mit einem Stokes Löser eine Mikrostruktur Simulation durchgeführt wurde (Rief und Printsypar, 2012), siehe Tab. 5.2 und Abb. 5.7. Die Werte der Permeabilität decken sich mit den selbst ermittelten Werten aus Kap. 5.2. Die Verwendung der Daten von Rief und Printsypar (2012) haben jedoch den Vorteil, dass sie die Anisotropie widerspiegeln. Die globale Porosität kann einfach gemessen werden, ist aber nicht homogen im gesamten Prüfling. Der Einfluss der lokalen Porosität kann während des Versuchs durch sprunghaftes Füllen einzelner Poren beobachtet werden. Da hier ein langer Vorgang mit unzähligen beteiligten Poren betrachtet wurde, wird der Einfluss der lokalen Porosität vernachlässigt. Für den isothermen Transport wird die Massenerhaltung berechnet mit der Sättigungsgleichung, Gl. 2.45. Die rechte Seite von Gl. 2.45 ist null, da keine Kompressibilität des porösen Mediums und keine Quellen oder Senken berücksichtigt werden. Anstatt die Fluidmasse als konservative Variable zu benutzen, wird häufig eine Formulierung verwendet, welche die Sättigung,  $s = S_l$  der benetzenden Phase verwendet. Beispielhafte Ergebnisse aus MRST sind Abb. 5.8 für Zeitschritte von  $\Delta t = 0.5 \text{ s}$  für die Füllung des Verdampfers zu entnehmen. In COMSOL<sup>®</sup> wird Gl. 2.45 mit dem PDE Modul gelöst.

**Abb. 5.7.:** (a) Relative Permeabilität der beiden Phasen; (b) Kapillardruckkurve für erzwungene Imbibition von Ethanol/Luft.



**Abb. 5.9.:** Rechennetz für die numerische Simulation in MATLAB®.



**Abb. 5.8.:** Simulation der Füllung des Verdampfers bei verschiedenen Zeitschritten mit jeweils  $\Delta t = 0.5$  s (MATLAB®).

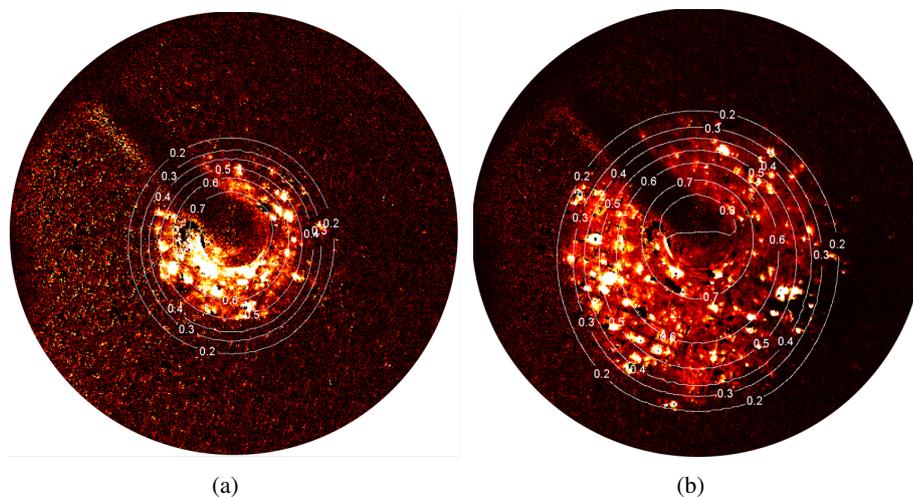
### 5.3.4. Randbedingungen für die numerische Simulation

Das Ethanol wird axial durch ein Röhrchen zugeführt ( $z$ -Richtung). Anschließend verteilt es sich radial im Verdampfer ( $x$ - bzw.  $y$ -Richtung). Eine Vereinfachung auf 2D wurde benutzt. Solange kein Fluid den Verdampfer verlässt, wird hier vereinfacht angenommen, dass die Verteilung nur 2D ist. Durch ein Anpressen des Verdampfers in eine Aufnahme aus Plexiglas wurden Hohlräume zwischen Verdampfer und dessen Aufnahme vermieden. Als Randbedingung am Austritt wird angenommen, dass der gesamte Vorgang isobar bei 1 bar abläuft. Der Druckabfall entlang des Verdampfers ist in der Realität ein ganz anderer: Da die Stirnfläche in Kontakt mit der Umgebung ist, ist entlang der radialen Verteilung auch schon 1 bar als Randbedingung anliegend. Eine Randbedingung für die Einströmung wurde im inneren Kreis gesetzt, die den zeitgemittelten eingebrachten Massenstrom durch die Dosierpumpe repräsentiert.

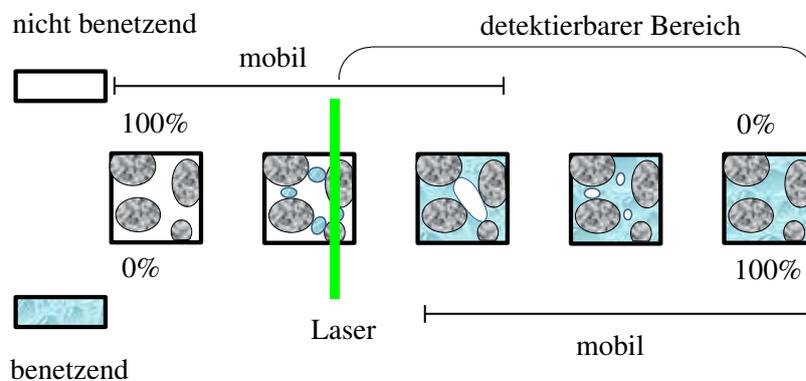
### 5.3.5. Abgleich der experimentellen Daten mit Sättigungsprofilen aus der numerischen Lösung

Die Ergebnisse sind für zwei Zeitschritte in Abb. 5.10 zusammengefasst. Der Bereich mit niedriger Intensität, von der linken oberen Bildecke zum Zentrum, stellt die Fluidzufuhr mittels eines Rohrs dar. In dieser Abbildung ist das ausgebreitete Fluid aus den Transmissionsmessungen hell markiert. Darüber liegen Konturen, die iso-Sättigungen aus der numerischen Simulation mit COMSOL® zeigen. Es ist zu erkennen, dass die iso-Sättigungslinien der Simulation mit der Form der experimentellen Differenzbilder gut übereinstimmen. Aus der gemessenen Front lässt sich ein Füllvolumen

berechnen, das innerhalb der Front eingeschlossen ist. Da der Füllgrad der Poren nicht bekannt ist, stellt dieses Füllvolumen ein maximales Volumen dar. Wird dieses maximale Volumen verglichen mit dem zugeführten Volumen aus der Pumpe zum jeweiligen Zeitraum, so wird schlussgefolgert, dass die gemessene Front größer ist als die, welche sich bei  $s = 1$  und dem zugeführten Volumen ergibt. Es wird also ein Übergangsbereich gemessen zwischen voll gesättigtem Medium und komplett ungefülltem Medium. Abb. 5.11 illustriert diese Beobachtung. Der propagierenden Front kann somit ein gewisser Wert der Sättigung zugewiesen werden, der dem minimalen detektierbaren Sättigungswert entspricht für diesen Aufbau und diesen Prüfling. Dieser experimentelle Aufbau kann eine Sättigung von ca.  $s = 0.2$  bis  $s = 0.3$  detektieren. Des Weiteren ist die sichtbare Front an der Oberfläche (ohne Lasertransmission) kleiner als zu erwarten wäre, wenn der maximale Füllgrad angenommen wird. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass sich die propagierende Front im Inneren des Mediums nicht visuell an der Oberfläche betrachten lässt.



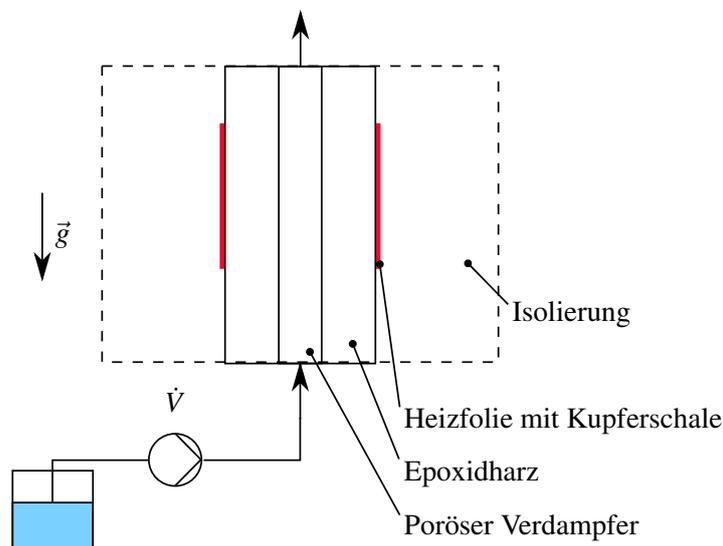
**Abb. 5.10.:** Überlagerung der numerischen Simulation mit Ergebnissen der Lasertransmission. (a)  $\Delta t = 1s$  nach dem Start der Dosierpumpe; (b)  $\Delta t = 2s$  nach dem Start der Dosierpumpe.



**Abb. 5.11.:** Messbereich der Transmissionsmessung nach Abb. 2.5.

## 5.4. Experimentelle Ergebnisse zur Verdampfung und Validierung

Dieser Abschnitt stellt den Inhalt von Lindner et al. (2016b) vor. An einem Prüfstand wurden Streifen des porösen Mediums unter Wärmezufuhr durchströmt, siehe Abb. 5.12 und 5.13. Es handelt sich um eine Erweiterung des Aufbaus aus Abb. 5.2 mit Wärmezufuhr und Wärmeisolierung.

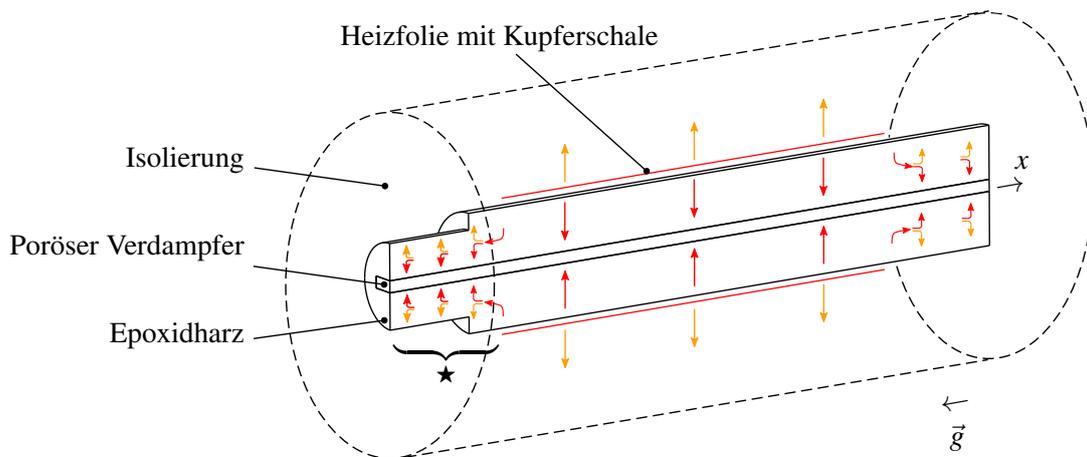


**Abb. 5.12.:** Schema der Messung zur Verdampfung im porösen Material. Erweiterung des Aufbaus aus Abb. 5.2 mit Wärmezufuhr und Isolierung.

Abb. 5.14 zeigt die Bemaßungen der porösen Verdampfer, die in Epoxidharz eingeschlossen sind. Weiterhin sind die Messstellen zur Temperaturmessung an der Heizung ( $T_{Hi}$ ) und am porösen Medium ( $T_{Vi}$ ) dargestellt. Es handelt sich hier um in regelmäßigem Abstand angepunktete (mit Punktschweißmaschine) Thermoelemente, die die Messung von Temperaturänderungen entlang der Hauptströmungsrichtung ermöglichen. Durch den Aufbau wird angenommen, dass sich eine quasi 1D Strömung im Prüfling unter stationären Bedingungen einstellt. Der Prüfling befindet sich in einem vertikalen Aufbau und wird somit von unten nach oben, entgegen der Schwerkraft, in  $x$ -Richtung durchströmt. Die Messungen mit reinem Wasser als Fluid wurden als erstes durchgeführt. Abweichend zur Abb. 5.13 handelt es sich bei der Durchströmung mit Wasser um einen zylindrischen Prüfling mit 25 mm Durchmesser. Mit den Erfahrungen dieser Messungen wurde für die zweite Messreihe mit Ethanol/Wasser Gemischen der Aufbau des Prüflings abgeändert. Der verbesserte Prüfling weist abschnittsweise zwei verschiedene Durchmesser (18 mm und 25 mm) auf. Die Intention ist, den axialen Wärmestrom stromauf, in den kleineren Durchmesser, weitestgehend zu unterbinden. Ausgehend von der Heizfolie (Minco HK5174R294L12A), die sich auf einer Kupferschale befindet (rote Linie), gibt es Wärmeströme in den Prüfling (rot) und Wärmeströme an die Umgebung (orange). Die Kupferschale gleicht etwaige Unregelmäßigkeiten in der Wärmeerzeugung der Heizfolie aus.

Da das verwendete zwei Komponenten Epoxidharz auch axial Wärme leiten kann, sind Wärmeströme stromauf und stromab der Heizfolie in dieser Isolierung möglich, z.B. im Bereich, der mit dem Symbol (★) gekennzeichnet ist. In Abb. 5.13 wird dies skizziert: Die radialen Komponenten der Wärmeströme können zur Aufheizung des Fluids dienen (rote Pfeile) oder an die Umgebung abgegeben werden (orange farbene Pfeile).

Radial nach außen wird der Aufbau mit einer weiteren Isolierung (Rockwool 800) wärmegeämmt.



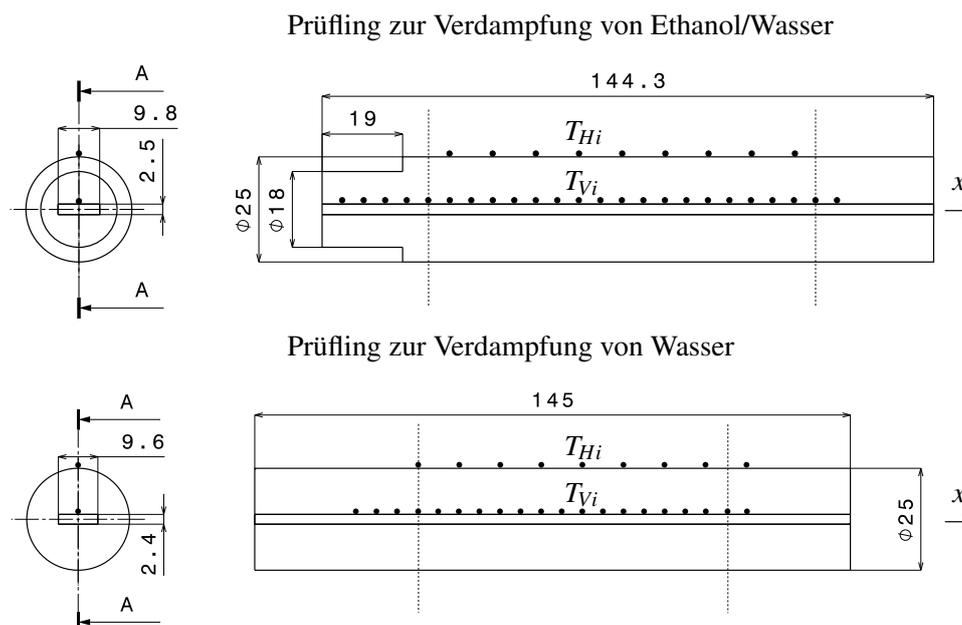
**Abb. 5.13.:** Skizze des verwendeten Prüflings für die Messung der Verdampfung aus Abb. 5.12. Die Pfade der Wärmeströme sind farblich eingezeichnet. Rote Pfeile sind Wärmeströme in den Verdampfer, die das System {Poröser Verdampfer - Fluid} aufheizen. Orange farbene Pfeile sind Verlustwärmeströme. Die roten Wärmeströme im Bereich, der mit dem Symbol (★) gekennzeichnet ist, tragen zur Aufheizung des Systems bei und werden anschließend für die numerische Rechnung durch eine Korrekturrechnung des Gesamtwärmestroms berücksichtigt.

Das Epoxidharz dient neben der Verhinderung eines ungewollten Massenstroms an der Oberfläche des Prüflings weiterhin dem Zweck, die Wärme aus der Heizfolie auf das poröse Material zu übertragen. Dies geschieht durch Wärmeleitung, die sich radial nach innen von der Heizfolie zum Prüfling ausbreitet. Der Volumenstrom wird von einer Schlauchpumpe (REGLO Digital MS-2/12 ISM 596) zur Verfügung gestellt. Die Wärmeströme in das eingeharzte poröse Medium sind in

**Tab. 5.3.:** Position der Thermoelemente für Abb. 5.14.

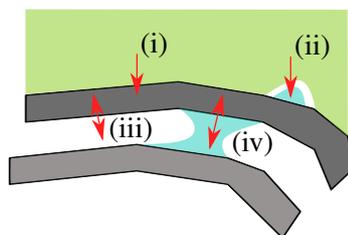
| Thermoelement                  | Abstand $x$ (mm) |
|--------------------------------|------------------|
| Wasser                         |                  |
| $T_{V1}, T_{V2} \dots T_{V20}$ | 25, 30, ... 120  |
| $T_{H1}, T_{H2} \dots T_{H9}$  | 40, 50, ... 120  |
| Ethanol/Wasser                 |                  |
| $T_{V1}, T_{V2} \dots T_{V24}$ | 5, 10, ... 120   |
| $T_{H1}, T_{H2} \dots T_{H9}$  | 30, 40, ... 110  |

Abb. 5.15 schematisch dargestellt. Der Wärmeübertragungsmechanismus (i) wirkt über einen Flächenkontakt des umhüllenden Epoxidharzes mit einer Faser. Der Wärmeübertragungsmechanismus (ii) wirkt über einen Kontakt eines Fluidtropfens im Grenzbereich zwischen Faser und Epoxidharz. Der Wärmeübertragungsmechanismus (iii) wirkt von einer Faser in einen Zwischenraum, der vom nicht benetzenden Fluid gefüllt ist. Der Wärmeübertragungsmechanismus (iv) wirkt von einer Faser in einen Zwischenraum, der vom benetzenden Fluid gefüllt ist. Nicht dargestellt ist ein weiterer



**Abb. 5.14.:** Prüflinge zur Messung von Verdampfung. Angedeutet ist die Position der Thermoelemente (●), siehe Tab. 5.3, **oben:** Verdampfung von Ethanol/Wasser; angedeutet ist die Position der Heizstrecke zwischen  $x = 25$  mm und  $x = 115$  mm, **unten:** Verdampfung von Wasser; angedeutet ist die Position der Heizstrecke zwischen  $x = 40$  mm und  $x = 115$  mm.

Wärmeübertragungsmechanismus: Bei sich berührenden bzw. bei gesinterten Fasern stellen Verbindungspunkte zwischen Fasern eine stoffschlüssige Wärmebrücke dar, durch die Wärmeleitung ermöglicht wird. Der Wärmestrom  $\dot{q}$  von der Heizung auf das mit Fluid gefüllte poröse Medium



**Abb. 5.15.:** Skizzierte Wärmeströme bei eingeharzten Fasern. Grün angedeutet ist das umgebende Epoxidharz. Dargestellt sind zwei Fasern, die nicht in direktem Kontakt miteinander stehen und vier Wärmeübertragungsmechanismen: (i) bis (iv).

wird angenommen als:

$$\dot{q} = c_1 (T_H - T_f) + c_2 (T_H - T_s). \quad (5.5)$$

In der Realität sind die Vorfaktoren zur Temperaturdifferenz  $c_1, c_2$  abhängig von der Wärmeleitfähigkeit der Epoxidisolierung. Diese Wärmeleitfähigkeit ist temperaturabhängig und dieser Zusammenhang wird weder vom Hersteller angegeben, noch ist er anderweitig bekannt. In der numerischen Simulation wird dies modelliert mit  $c_1/c_2 = \phi$  (Wang und Shi, 2008). Ein fester Wert für  $c_1$  wird angenommen, so dass sich daraus  $c_2$  ergibt. Dieser feste Wert für  $c_1$  wird beibehalten für alle numerischen Rechnungen, um die Vergleichbarkeit zu gewährleisten. Wie im weiteren Ver-

lauf erläutert wird, sind die exakten Werte von  $c_1, c_2$  nicht wichtig, da über die Stanton Zahl der Verdampfung  $St_v$  ausgewertet wird. Mit diesen Annahmen lassen sich die Wärmeströme von der Heizung in das poröse Medium anhand der gemessenen Temperaturdifferenzen zwischen Heizung und porösem Medium berechnen. Eine weitere Berechnung ist möglich, wenn nach der Berechnungsmethodik von Kap. 3.1.4 und 3.2.4 die analytische Enthalpiedifferenz zwischen zwei Ebenen 1 und 2 betrachtet wird. Als Referenzebene 1 wird hier der Umgebungszustand gewählt. Als zweite Ebene wird die Position der letzten Messstelle am porösen Medium gewählt. Anhand dieser Enthalpiedifferenz, die bei isobaren Zustandsänderungen als Wärme dem System zugeführt wird, kann analog zu Gl. 2.32 die Stanton Zahl der Verdampfung  $St_v$  berechnet werden, siehe Gl. 5.6 (Wang und Wang, 2006a). Diese Kennzahl wird zum qualitativen Abgleich mit den numerischen Rechnungen herangezogen, um die Verschiebung der Verdampfungszone zu ermitteln.

$$St_v = \frac{\dot{q}_{12}}{\dot{q}_{dryout}}. \quad (5.6)$$

Es gibt für jeden Satz an Parametern und Randbedingungen eine maximale erreichbare Temperatur des Systems {poröser Verdampfer - Fluid} bzw. eine maximale Stanton Zahl der Verdampfung  $St_{v,max}$ . Dies entspricht dem Umstand, dass das System keine zusätzliche Wärme aus der Heizung aufnehmen kann, falls die Temperatur des Systems die Heiztemperatur erreicht. In den experimentellen Ergebnissen ist nicht differenzierbar zwischen Fluidtemperatur und der Temperatur des porösen Verdampfers. In den numerischen Ergebnissen ist am hinteren Ende der Heizung kein großer Temperaturunterschied zwischen  $T_f$  und  $T_s$  zu erkennen. Wird nun davon ausgegangen, dass die maximale Stanton Zahl der Verdampfung mit der maximalen Heiztemperatur berechnet wird, so stellt dies ein Maß für den maximal dem System zuführbaren Wärmestrom dar.

Im verwendeten Aufbau wurde ein Fokus auf die Vermeidung von Verlustwärmeströmen gesetzt. Das Ziel sollte sein, die elektrische Leistung der Heizfolie innerhalb der Messstrecke an den Prüfling zu bringen und sowohl radiale (an die Umgebung) als auch axiale Verluste (stromauf oder stromab entlang des Epoxidharzes) zu vermeiden. Durch die Wahl der Epoxidisolierung ist dies nur bedingt möglich. Als verlässliches Kriterium zur Beurteilung der Verdampfung ist somit nicht die elektrische Heizleistung geeignet, da diese noch Verlustwärmeströme nach sich zieht. Analytische Berechnungen mit Gl. 5.6 sind hierfür zielführender.

Da der Prüfling in Isolierungen eingebettet ist, gibt es keinen optischen Zugang. Eine Messung mittels Thermoelementen ist die einzige Möglichkeit, auf das Verdampfungsgebiet Rückschlüsse zu ziehen. Bedingt durch die Messung mit Thermoelementen, die an den porösen Verdampfer angepunktet sind, kann nicht eindeutig bestimmt werden, was die Spitze des Thermoelements misst. Die Spitze ist anliegend an den Verdampfer, kann also eine Temperatur an einem Draht der porösen Struktur und/oder eine Fluidtemperatur messen. Je nach Strömungszustand kann die Spitze auch von flüssigem oder (teils) gasförmigem Fluid umströmt sein. Eine Aussage darüber zu treffen ist nicht möglich. Es wird hier angenommen, dass lokales thermisches Gleichgewicht insofern zutreffend ist, dass eine Messung mit Thermoelementen die Bestimmung der Position des Verdampfungsgebiets anhand der Siedetemperatur erlaubt.

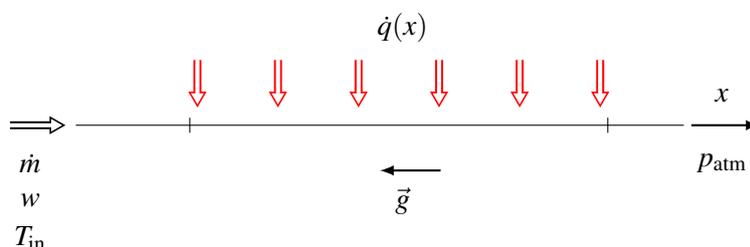
Es muss dem Umstand Rechnung getragen werden, dass die Verdampfungstemperatur abhängig vom Druck ist, und dieser während der Durchströmung ortsabhängig ist. Um dies zu berücksichtigen, werden die Siedetemperatur (für reines Wasser) und der Siedebereich (für das Ethanol/Wasser Gemisch) bei einem mittleren Druck zwischen Eintrittsdruck und Umgebungsdruck heran gezogen. Da die Druckdifferenzen zwischen Eintritt und Umgebung gering sind, ist die lokale Variation der Siedetemperatur im Prüfling auch gering. Tab. 5.4 gibt die verwendeten Randbedingungen der Versuchsreihen an.

**Tab. 5.4.:** Versuchsmatrix zur Verdampfung des Ethanol/Wasser Gemischs.

| Ethanol Konzentration<br>in Mol% | Massenstrom<br>in g/min | Elektrische Leistung<br>$P_{el} = UI$ in W |
|----------------------------------|-------------------------|--|
| 0                                | 0.50                    | 27.05                                      |
|                                  | 0.50                    | 26.10                                      |
|                                  | 0.65                    | 34.30                                      |
|                                  | 0.65                    | 33.14                                      |
|                                  | 0.65                    | 32.12                                      |
| 5                                | 0.62                    | 32.16                                      |
|                                  | 0.62                    | 31.14                                      |
|                                  | 0.62                    | 30.46                                      |
| 22.5                             | 0.50                    | 22.97                                      |
|                                  | 0.50                    | 21.90                                      |
|                                  | 0.50                    | 21.19                                      |

#### 5.4.1. Randbedingungen für die numerische Simulation

Die numerische Lösung erfolgt analog zur Beschreibung in Kap. 4.1 und 4.2. Es wird ebenfalls die Nusselt Korrelation wie in Gl. 2.83 benutzt. Abb. 5.16 zeigt die Randbedingungen für die numerische Simulation, analog zu dem Versuchsaufbau in Abb. 5.13. Für die numerischen Ergebnisse wurde die Temperatur der Heizschale als Dirichlet Randbedingung gewählt. Die Heiztemperatur  $T_{\text{Heizung}}$  ist eine Funktion des Ortes, wie z.B. in Abb. 5.18 dargestellt. Die Wärmeströme  $\dot{q}$  entlang der Heizstrecke werden mit Gl. 5.5 berechnet. Die Parameter des porösen Mediums wurden gewählt entsprechend der Ergebnissen von Kap. 5.2 und extern beauftragten Arbeiten durch Rief und Printsypar (2012) und Schladitz und Godehardt (2013). Die Stoffwerte der Fluide wurden temperaturunabhängig gewählt bei Sättigungszustand. Da in dem experimentellen Aufbau keine Temperaturmessstellen für die Heizung stromauf von  $x = 40$  mm (Wasser als Fluid) bzw.  $x = 30$  mm (Ethanol/Wasser als Fluid) vorliegen, wurde in den numerischen Rechnungen die Eintrittstemperatur mit der Temperatur am porösen Medium bei der nächstliegenden Messstelle stromauf, bei  $x = 25$  mm, initialisiert. Aufgrund der Erfahrungswerte von Kap. 4.2 wird hier mit 20000 Zellen gerechnet.

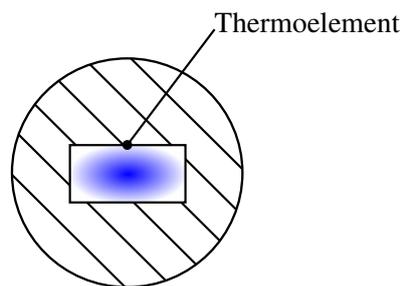
**Abb. 5.16.:** Randbedingungen und Rechengebiet für die numerischen Rechnungen zur Validierung.

## 5.4.2. Verdampfung von Wasser

Es werden nachfolgend die Ergebnisse für die Verdampfung von Wasser nach der Versuchsmatrix von Tab. 5.4 beschrieben (Scharl, 2013; Weisensee, 2014; Mayer, 2015). Abb. 5.18 zeigt die Temperaturverläufe am porösen Medium und an der Heizung für einen Massenstrom von  $0.50 \text{ g/min}$ . Die Position der Heizung ist mit vertikalen schwarzen Strichen skizziert. Weiterhin dargestellt sind die numerischen Ergebnisse, die zur Validierung herangezogen werden. In dieser Abbildung, wie in den weiteren Abbildungen, die gemessene Temperaturen zeigen, wird aus Gründen der Darstellung auf Fehlerbalken verzichtet. Eine Diskussion der Messfehler wird in Kap. 5.5 durchgeführt.

### 5.4.2.1. Vergleichbarkeit zwischen experimentellen Daten und numerischen Daten

Für die experimentellen Daten kann die Position des Verdampfungsgebiets anhand der Siedetemperatur ermittelt werden. Hier ist auffällig an den experimentellen Daten, dass es für jede Heizleistung zwei eigenständige Positionen gibt, an denen eine Unstetigkeit im Temperaturgradienten auftritt. In Abb. 5.18 ist dies bei  $27.05 \text{ W}$  zuerst der Fall bei  $x = 30 \text{ mm}$ , anschließend bei  $x = 75 \text{ mm}$  und  $x = 85 \text{ mm}$ . Dieser abknickende Temperaturverlauf ist zu Beginn der Verdampfung identisch mit der Siedetemperatur. Bei  $x = 85 \text{ mm}$  ist stromab ein größerer Temperaturgradient zu beobachten, der mit der niedrigeren spezifischen Wärmekapazität des gasförmigen Fluids zu erklären ist. Für die hintere Position des abknickenden Temperaturverlaufs, für das Ende der Verdampfung, gibt es bei diesen Randbedingungen keine eindeutige Position, da die Temperatur nach  $x = 75 \text{ mm}$  lokal wieder abnimmt. Es ist zu vermuten, dass die Messstelle des Thermoelements an der Oberfläche des Streifens nicht repräsentativ für den gesamten flüssigen Fluidgehalt im Prüfling sein muss, siehe Abb. 5.17 zur Erläuterung. Es könnte also sein, dass flüssige Reste im Kern erst verzögert verdampfen und somit gasförmige Temperaturen schon verfrüht radial an der Oberfläche gemessen werden. Eine Verschleppung der Verdampfung würde somit zu einem ungleichmäßigen Temperaturverlauf an der Oberfläche führen. Eine Anbringung der Thermoelemente im Zentrum des Querschnitts würde hier zusätzliche Informationen liefern, ist aber ohne Beeinflussung der Strömung und der Wärmeleitung im porösen Medium schwerlich möglich. Eine Verwebung des Thermoelements in die Struktur des porösen Materials ist eine wünschenswerte Verbesserung des Aufbaus.



**Abb. 5.17.:** Skizze des Querschnitts des Prüflings mit generischer Sättigungsverteilung, siehe Abb. 5.14. Eine vermutete Sättigungsverteilung ist schematisch in Schattierungen angedeutet. Die Position eines Thermoelements an der Oberfläche des Prüflings ist ebenfalls angedeutet.

Aus diesem Grund wurden beide Indizien für den Phasenübergang von zweiphasig zu gasförmig, nämlich das Überschreiten der Siedetemperatur und der Knick im Temperaturverlauf, ausgewertet.

Ersteres ist ein objektives Kriterium, dass sich anhand der Temperaturen eindeutig bestimmen lässt. Letzteres ist ein subjektives Kriterium mit einer klaren physikalischen Begründung. Natürlich ist in den numerischen Rechnungen das objektive Kriterium mit dem subjektivem Kriterium übereinstimmend.

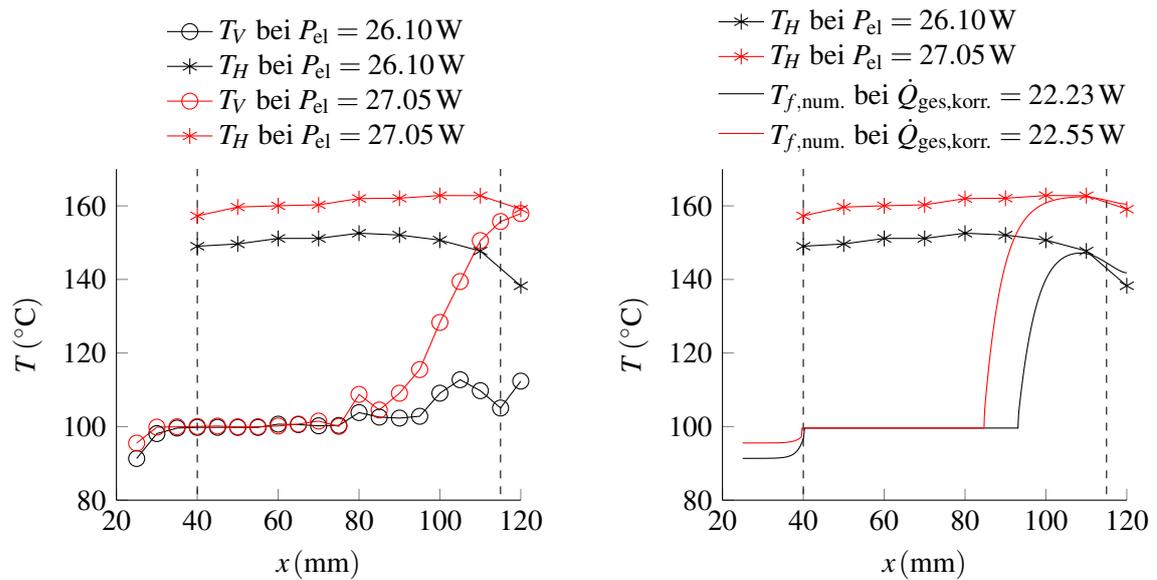
Das Rechengebiet wurde mit einer kürzeren physikalischen Länge gewählt im Vergleich zum experimentellen Aufbau, um den Fokus auf den Bereich zu legen, in dem Verdampfung auftritt. Die Strecke ( $x < 25$  mm), durch die sich Experiment und Numerik unterscheiden, ist geprägt durch einphasige Strömung und wird nicht simuliert, um Rechenzeit zu sparen. Da das Rechengebiet und der experimentelle Aufbau sich in den Abmessungen unterscheiden, ist ein Vergleich anhand der elektrischen Leistung der Heizfolie und des ermittelten Wärmestroms aus den numerischen Ergebnissen von der Heizfläche in das Fluid nicht möglich. Um nun eine Vergleichbarkeit zwischen Experiment und numerischen Lösungen anhand der dimensionslosen Kennzahl  $St_v$  herstellen zu können, wird die Enthalpiedifferenz des Fluids zwischen Umgebungstemperatur und der Temperatur bei  $x = 25$  mm zum Wärmestrom von der Heizung zum Fluid  $\dot{q}$  über dem gesamten Rechengebiet  $\Omega$ , addiert. Mit der isobaren spezifischen Wärmekapazität von flüssigem Wasser  $c_{p,l}$  wird somit der korrigierte Gesamtwärmestrom  $\dot{Q}_{\text{ges,korr.}}$  der numerischen Simulation berechnet:

$$\dot{Q}_{\text{ges,korr.}} = \sum_{\Omega} \dot{q} + \dot{m} c_{p,l} (T(x = 25 \text{ mm}) - T_{\text{umg}}). \quad (5.7)$$

Der zweite Term von Gl. 5.7 entspricht dem axial stromauf strömenden, zur Aufheizung nutzbaren Wärmestrom, der in Abb. 5.13 mit dem Symbol (★) dargestellt ist. Der so berechnete, korrigierte Gesamtwärmestrom  $\dot{Q}_{\text{ges,korr.}}$  wird in den Abbildungen dieses Kapitels in der Legende für numerische Ergebnisse angegeben. Somit beziehen sich alle Wärmeströme dieser Abbildung auf den Umgebungszustand als Referenz. Es ist zu beachten, dass gelten muss:  $P_{\text{el}} > \dot{Q}_{\text{ges,korr.}}$ . Dies lässt sich mit den Verlustwärmeströmen begründen, die den nutzbaren Wärmestrom in das System {poröser Verdampfer - Fluid} schmälern und in die Umgebung abgegeben werden.

### 5.4.2.2. Ergebnisse der Validierung

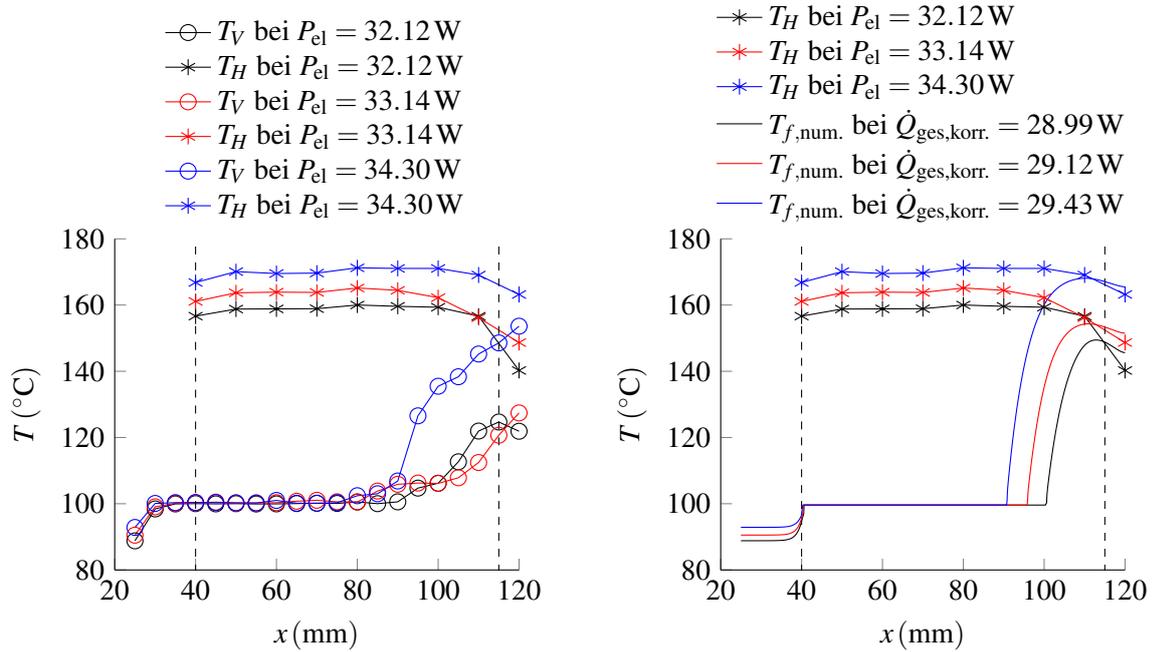
Der Vergleich der experimentell gemessenen Temperaturen mit den numerischen Ergebnissen für zwei verschiedene Massenströme und verschiedene Heizleistungen ist in den Abb. 5.18 und 5.19 dargestellt. Die qualitative Übereinstimmung in der Verschiebung des Verdampfungsgebiets kann in diesen Abbildungen gut nachvollzogen werden. Der Beginn des Verdampfungsgebiets bleibt unbeeinflusst von der eingebrachten Heizleistung und für größere Wärmezufuhr wird das Verdampfungsgebiet kürzer. Die Temperaturen in der Gasphase (überhitzter Wasserdampf) unterscheiden sich quantitativ zwischen Experiment und numerischen Ergebnissen. Dies trifft insbesondere auf die Maximaltemperaturen am Ende der Messstrecke zu. Werden die Korrekturen aus Kap. 5.4.2.1 zur Vergleichbarkeit zwischen Experiment und Numerik durchgeführt, kann die Verdampfungszone abhängig von der Stanton Zahl der Verdampfung visualisiert werden für experimentelle und numerische Daten, siehe Abb. 5.20. Die farbliche Markierung entspricht derer von Abb. 5.18 und 5.19. Eine Einhüllende der örtlichen Abgrenzungen des Verdampfungsgebiets, sowohl für experimentelle als auch numerische Daten, zeigt eine gute Übereinstimmung und damit eine positive Validierung. Weiterhin ist zu sehen, dass sich die numerischen Stanton Zahlen  $St_v$  von den experimentellen unterscheiden. Dies liegt daran, dass über den Eintritt und Austritt Wärmeströme aus dem Prüfling und aus dem Rechengebiet fließen. Die Vorfaktoren  $c_1, c_2$  aus Gl. 5.5 werden für die numerischen Rechnungen konstant gehalten. Die Abweichung in der Stanton Zahl  $St_v$  bei gleicher Heiztempera-



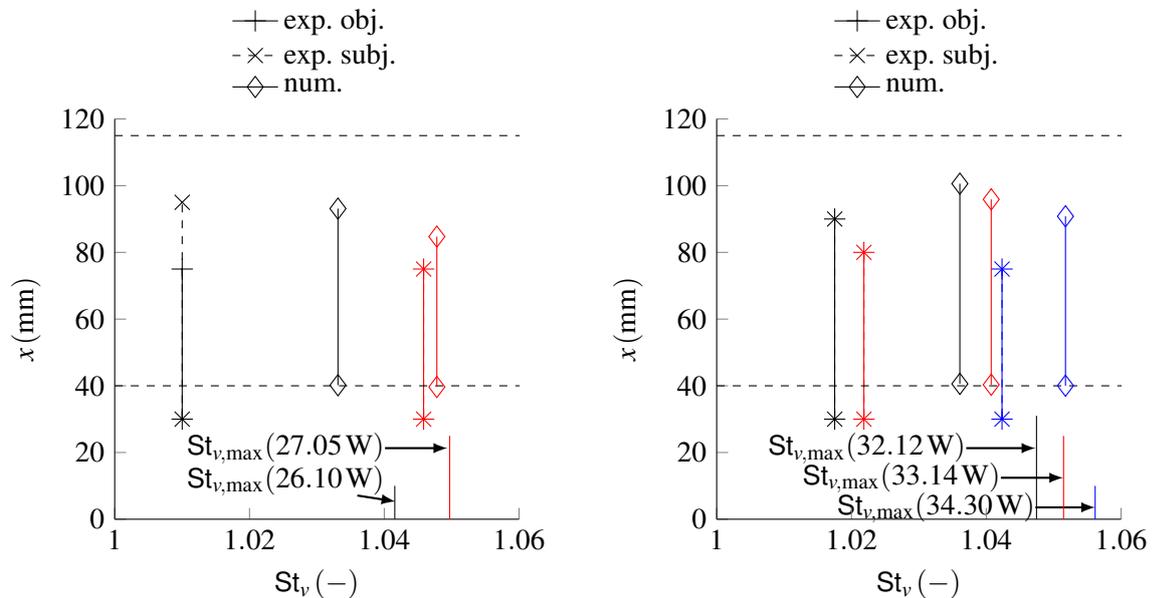
**Abb. 5.18.:** Verdampfung von Wasser bei  $0.50 \text{ g/min}$ , **links:** Temperaturen am porösen Medium  $T_V$  und an der Heizung  $T_H$ , **rechts:** Temperaturen an der Heizung  $T_H$  und Fluidtemperaturen der numerischen Simulation  $T_{f,num.}$  zum Vergleich.

tur lässt sich derart erklären, dass eine Annahme für die Vorfaktoren  $c_1, c_2$  getroffen werden musste, und diese Werte zur Vereinfachung über mehrere Rechnungen hinweg konstant gehalten wurden.

Da die quantitativen Unterschiede neben der Modellierung auch in der Unsicherheit von Modellparametern zu suchen sind, wird im Folgenden eine Sensibilitätsanalyse der Ergebnisse für Modellparameter durchgeführt.



**Abb. 5.19.:** Verdampfung von Wasser bei  $0.65\text{ g/min}$ , **links:** Temperaturen am porösen Medium  $T_V$  und an der Heizung  $T_H$ , **rechts:** Temperaturen an der Heizung  $T_H$  und Fluidtemperaturen der numerischen Simulation  $T_{f,num.}$  zum Vergleich.



**Abb. 5.20.:** Verdampfung von Wasser. Verdampfungsposition und -länge in Abhängigkeit der Stanton Zahl der Verdampfung, **links:**  $0.50\text{ g/min}$ , **rechts:**  $0.65\text{ g/min}$ .

### 5.4.2.3. Sensibilität der Ergebnisse für Modellparameter

Die Sensibilität der Position der Verdampfung wird überprüft mit einer Variation der Parameter für die relative Permeabilität  $k_r^n$  und einer Variation des Wärmeübergangs zwischen fester Phase und Fluid,  $\bar{h}_{sf}$ . Eine Variation des Exponenten  $n$  für  $k_r^n$  zeigt eine Verschiebung des Anfangs der Verdampfung stromauf, siehe Tab. 5.5. Der Wert  $n = 3$  wurde in den bisherigen Rechnungen, wie auch in der Referenz dieser Sensibilitätsanalyse, gewählt, da dieser Exponent eine gute Übereinstimmung mit den Werten aus Abb. 5.7 zeigt. Die Spreizung der verschiedenen Positionen ist gering und spielt sich bei  $n = 2.5$  und  $n = 3.5$  in einer Verschiebung von 1 mm ab. Das Ende der Verdampfung verschiebt sich unwesentlich für diese Parametervariation. Eine Variation der Nusselt Korrelation nach Gl. 2.83, mit einem Vorfaktor 0.1 oder einen Vorfaktor 1.5, zeigt eine geringe Verschiebung des Beginns der Verdampfung stromauf für kleinere Nu Zahlen. Gegenläufig dazu verschiebt sich das Ende der Verdampfung stromab, das Verdampfungsgebiet wird somit länger für geringeren Wärmeübergang zwischen Fasern und Fluid. Dies lässt sich mit einer größeren benötigten Strecke begründen, in der die benötigte Verdampfungsenthalpie an das Fluid übertragen wird.

**Tab. 5.5.:** Sensibilität der Verdampfungsposition für Modellparameter bei der Verdampfung von Wasser bei  $0.50 \text{ g/min}$ ,  $P_{el} = 27.05 \text{ W}$ .

|  | Beginn der Verdampfung $x$ (mm) | Ende der Verdampfung $x$ (mm) |
|--|---------------------------------|-------------------------------|
| Experimentelle Ergebnisse  |                                 |                               |
|  | 30                              | 75                            |
| Numerische Ergebnisse, Variation von $k_r^n$                                 |                                 |                               |
| $n = 2.5$  | 39.0                            | 84.8                          |
| Referenz $n = 3$   | 39.6                            | 84.7                          |
| $n = 3.5$  | 39.9                            | 84.7                          |
| Numerische Ergebnisse, Variation von $\bar{h}_{sf}$ mittels Nu nach Gl. 2.83 |                                 |                               |
| $0.1 \times \text{Nu}$   | 39.5                            | 84.9                          |
| Referenz Nu  | 39.6                            | 84.7                          |
| $1.5 \times \text{Nu}$   | 39.7                            | 84.8                          |

### 5.4.3. Verdampfung eines Ethanol/Wasser Gemischs

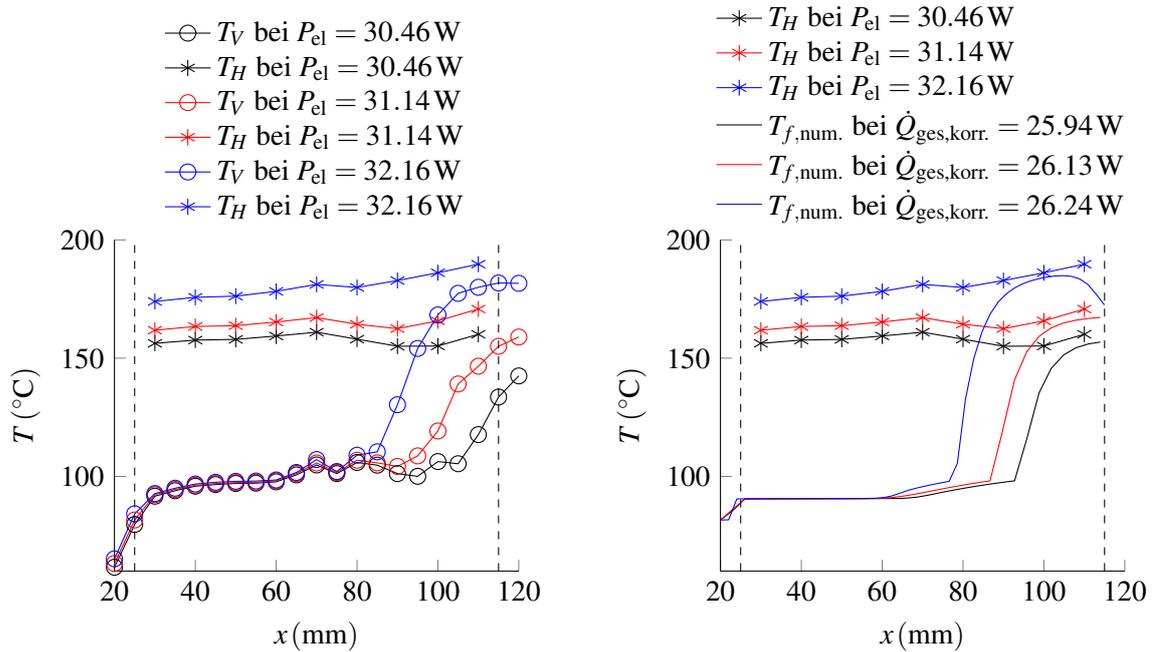
Es wurde eine Variation des Massenstroms, der elektrischen Heizleistung und der Konzentration des Gemischs nach Tab. 5.4 durchgeführt (Mayer, 2015).

#### 5.4.3.1. Vergleichbarkeit zwischen experimentellen Daten und numerischen Daten

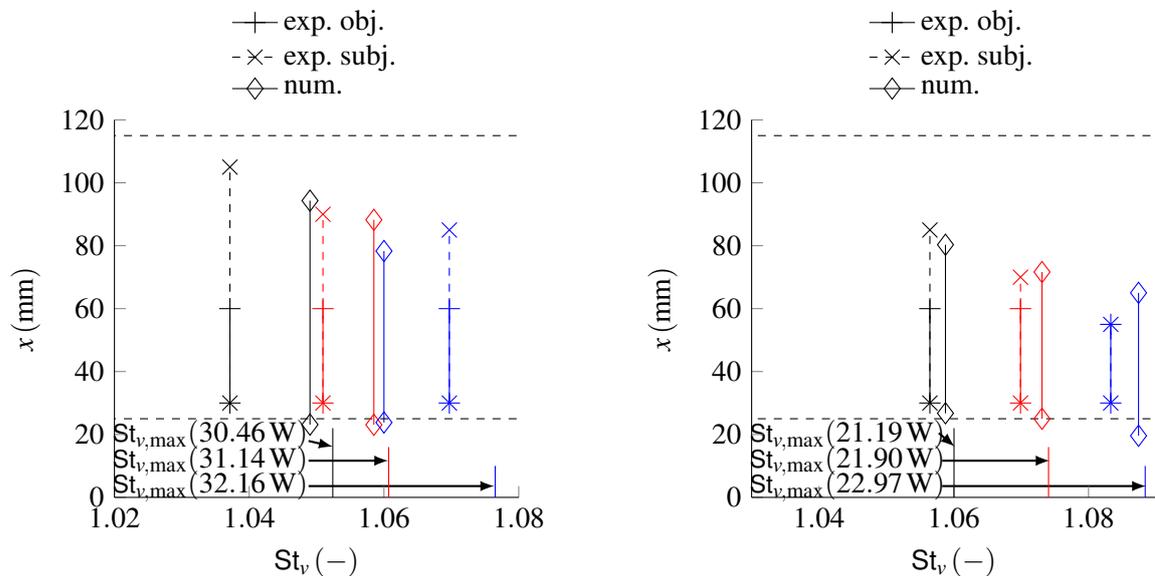
Im Folgenden wird nun für  $\dot{q}_{12}$  in Gl. 5.6 für die Ebene 1 der Umgebungszustand gewählt und für die Ebene 2 der Zustand bei  $x = 120\text{ mm}$ . Der Wärmestrom zwischen diesen Ebenen entspricht somit einer Enthalpiedifferenz, die sich analytisch berechnen lässt. Auch hier wird für die numerischen Ergebnisse der korrigierte Wärmestrom aus Gl. 5.7 herangezogen. Für die experimentellen Daten kann die Position des Verdampfungsgebiets anhand der Siede- und Kondensationstemperatur ermittelt werden, siehe Kap. 2.1.3.2. Wie bei der Verdampfung von reinem Wasser gibt es für jede Heizleistung zwei Positionen, an denen eine Unstetigkeit im Temperaturgradienten auftritt. In Abb. 5.21 (32.16 W) ist dies der Fall bei  $x = 30\text{ mm}$  und  $x = 85\text{ mm}$ . Dieser abknickende Temperaturverlauf ist zu Beginn der Verdampfung identisch mit der Siedetemperatur für die jeweilige Mischung. Bei der hinteren dieser beiden Positionen ist stromab ein größerer Temperaturgradient zu beobachten, der mit der niedrigeren spezifischen Wärmekapazität des überhitzten Fluidgemischs zu erklären ist. Für die Kondensationstemperatur (analytisch:  $T_{\text{kondens}} = 99.45^\circ\text{C}$ , experimentell bei  $x = 85\text{ mm}$ :  $T_{\text{kondens}} = 110.4^\circ\text{C}$ ) gibt es bei diesen Randbedingungen keine Übereinstimmung mit dem Knick im Temperaturverlauf. Es ist zu vermuten, dass die Messstelle des Thermoelements an der Oberfläche des Streifens nicht repräsentativ für den gesamten flüssigen Fluidgehalt im Prüfling sein muss, wie bereits erläutert für die Verdampfung von Wasser.

#### 5.4.3.2. Ergebnisse der Validierung

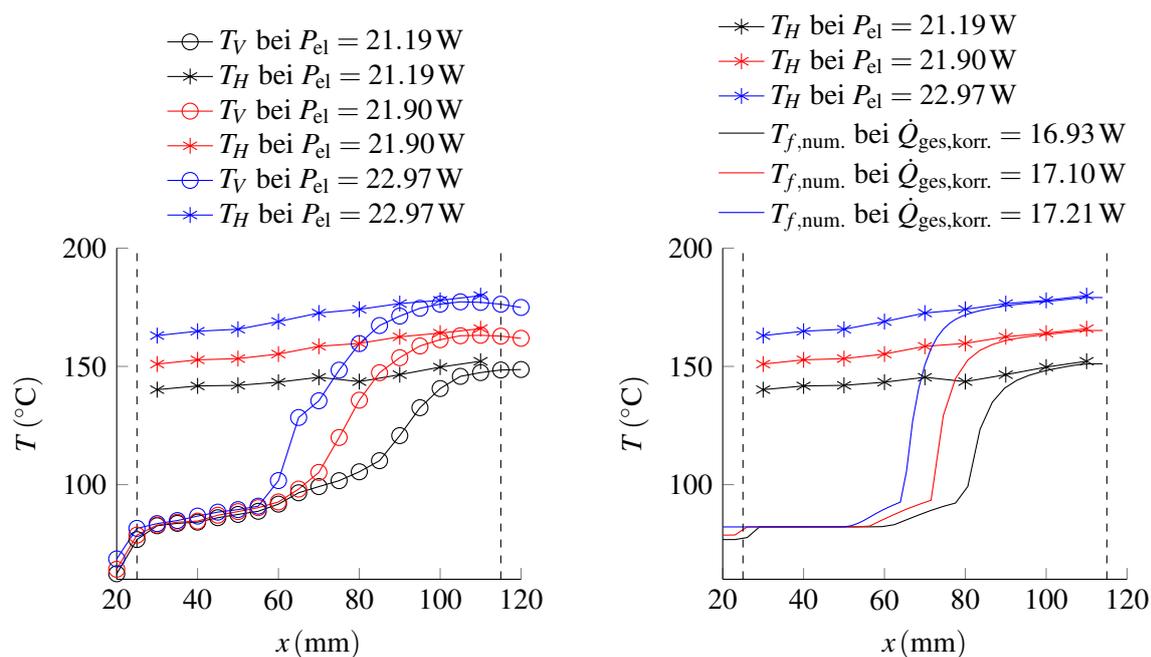
Die gemessenen Temperaturen am porösen Medium und an der Heizung bei 5 Mol% Ethanol und  $0.62\text{ g/min}$  sind in Abb. 5.21 dargestellt. Es ist in Abb. 5.22 zu sehen, dass die Validierung qualitativ erfolgreich ist. Bei einer Variation von  $P_{\text{el}}$  (und konstantem Massenstrom und Konzentration) zeigt sich, dass der Beginn der Verdampfungszone annähernd ortsfest bleibt. Das Ende der Verdampfungszone verschiebt sich stromauf für größere Wärmezufuhr. Diese Beobachtungen sind qualitativ sowohl bei den experimentellen als auch bei den numerischen Ergebnissen festzustellen. Quantitativ sind Abweichungen erkennbar sowohl im Temperaturverlauf als auch an der Position der Verdampfungszone. Die experimentellen Ergebnisse zeigen einen größeren Temperaturgradienten während der Verdampfung als die numerischen Ergebnisse. Des Weiteren ist das Verdampfungsgebiet in den numerischen Ergebnissen weiter stromauf verschoben, sogar bis vor den Beginn der Heizung. In den numerischen Rechnungen zeigt sich stets, dass zu Beginn der Verdampfung der Temperaturgradient nahe null ist. Bei der numerischen Lösung mit  $\dot{Q}_{\text{ges,korr.}} = 26.24\text{ W}$  sinkt die Fluidtemperatur nach einem Maximum bei ca.  $x = 105\text{ mm}$  auf einen niedrigeren Wert, der sich nahe der Maximaltemperatur der Lösung von  $\dot{Q}_{\text{ges,korr.}} = 26.13\text{ W}$  befindet. Bereits bei einer geringen Differenz des Wärmestroms ( $26.24\text{ W}$  vs.  $26.13\text{ W}$ , bzw.  $0.11\text{ W}$  Differenz) kann eine deutliche Verschiebung des Verdampfungsgebiets beobachtet werden. Die Sensibilität der Verdampfung bei diesen Wärmeströmen ist somit groß. Abb. 5.23 zeigt die experimentell gemessenen Temperaturen am porösen Medium und an der Heizung, sowie die Temperaturen aus der numerischen Simulation für 22.5 Mol% Ethanol und  $0.50\text{ g/min}$ . Die zugehörigen Stanton Zahlen sind ebenfalls in Abb. 5.22 abgebildet. Qualitativ stimmt die Veränderung der Position des Verdampfungsgebiets sehr gut über-



**Abb. 5.21.:** Verdampfung von Ethanol/Wasser bei 5 Mol% Ethanol und 0.62 g/min, **links:** Temperaturen am porösen Medium  $T_V$  und an der Heizung  $T_H$ , **rechts:** Temperaturen an der Heizung  $T_H$  und Fluidtemperaturen der numerischen Simulation  $T_{f,num.}$  zum Vergleich.

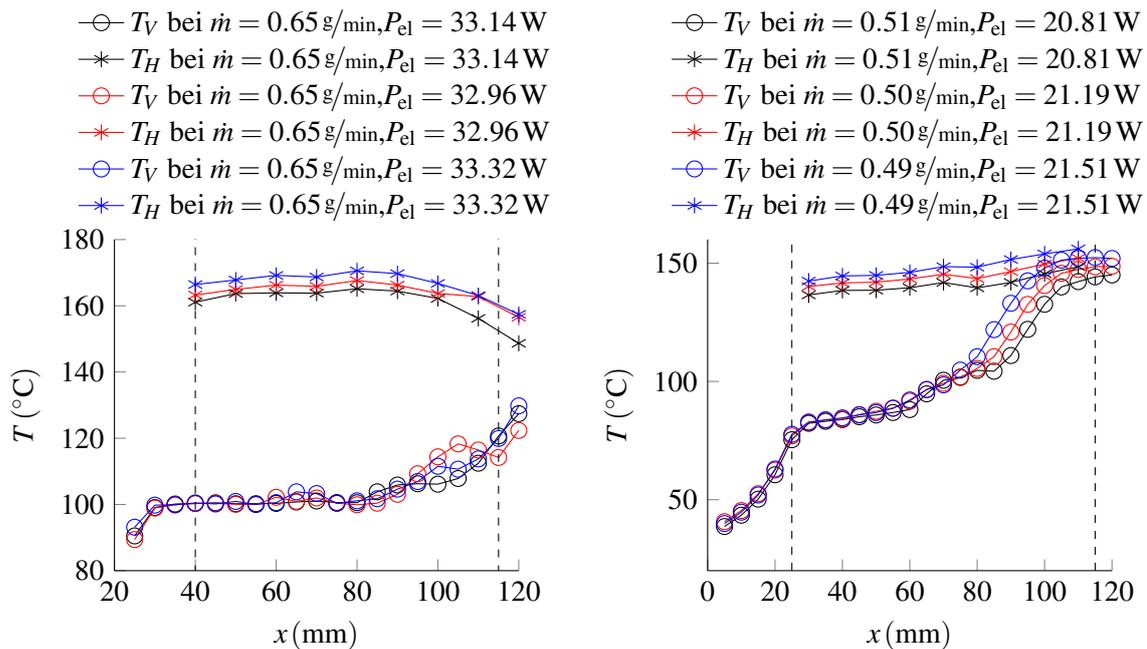


**Abb. 5.22.:** Verdampfung von Ethanol/Wasser. Verdampfungsposition und -länge in Abhängigkeit der Stanton Zahl der Verdampfung, **links:** bei 5 Mol% Ethanol und 0.62 g/min, **rechts:** bei 22.5 Mol% Ethanol und 0.50 g/min.



**Abb. 5.23.:** Verdampfung von Ethanol/Wasser bei 22.5 Mol% Ethanol und 0.50 g/min, **links:** Temperaturen am porösen Medium  $T_V$  und an der Heizung  $T_H$ , **rechts:** Temperaturen an der Heizung  $T_H$  und Fluidtemperaturen der numerischen Simulation  $T_{f,num.}$  zum Vergleich.

ein. Auffällig ist, dass der Beginn der Verdampfung bei den experimentell ermittelten Daten ortsfest bleibt, wohingegen sich der Beginn in den numerischen Ergebnissen stromauf verschiebt für größere Wärmezufuhr. Dies kann durch einen ausgeprägten konduktiven Wärmestrom der festen Phase erklärt werden, der stromauf das poröse Medium und das Fluid aufheizen kann. Die Gasphase zeigt bei den Ergebnissen bei diesen Randbedingungen keine negativen Geschwindigkeiten, d.h. der erzeugte Dampf kann sich trotz adversen Druckgradienten einfacher stromab ausbreiten. Qualitativ stimmt die Veränderung der Länge des Verdampfungsgebiets nicht überein. Die experimentell ermittelten Verdampfungslängen werden kürzer für höhere Wärmezufuhren während die numerischen Verdampfungslängen annähernd konstant bleiben. Dies kann darin begründet sein, dass der Wärmestrom pro Längeneinheit auf das Fluid größer wird bei Erhöhung der Wärmezufuhr, siehe Gl. 5.5. Die notwendige Verdampfungsenthalpie kann somit bei ortsfestem Beginn der Verdampfung in einer kürzeren Strecke aufgebracht werden. In den numerischen Ergebnissen ist dieser Effekt nicht sichtbar, stattdessen wird mehr Wärme stromauf transportiert und somit beginnt die Verdampfung weiter stromauf.



**Abb. 5.24.:** Reproduzierbarkeit der experimentellen Daten zur Verdampfung, **links:** Messung mit Wasser und  $0.65 \text{ g/min}$ , **rechts:** Messung mit  $22.5 \text{ Mol\%}$  Ethanol und  $0.50 \text{ g/min}$ .

#### 5.4.4. Reproduzierbarkeit der Ergebnisse

Abb. 5.24 zeigt die Ergebnisse der Validierung für Wasser und  $0.65 \text{ g/min}$ . Da im Versuch die elektrische Heizleistung nur schwerlich reproduzierbar auf einen erwünschten Wert steuerbar ist, haben sich verschiedene Heizleistungen eingestellt, die im Bereich zwischen ca.  $33 \text{ W}$  und  $33.5 \text{ W}$  schwanken. Die Reproduzierbarkeit der Messung mit dem Ethanol/Wasser Gemisch wird ebenfalls in Abb. 5.24 gezeigt. Vor jeder Messung wurde das Gemisch neu hergestellt. Die Messungen fanden an verschiedenen Tagen statt. Es ist nachvollziehbar, dass der kleinste Massenstrom mit der größten elektrischen Leistung die höchsten Heiztemperaturen in der Heizfolie erzeugt. Entsprechend sind auch die Temperaturen am porösen Medium am größten. Der größte Massenstrom bei der kleinsten elektrischen Leistung erzeugt die geringsten Heiztemperaturen, die Temperaturen am porösen Medium sind am kleinsten. Die mittlere Kombination aus Massenstrom und elektrischer Leistung befindet sich auch bei den Temperaturen in der Mitte. Die Spreizung der Temperaturen ist als gering zu betrachten und die Änderung der Position und Länge des Zweiphasengebiets ist bei diesen leicht abweichenden Randbedingungen nicht erheblich. Somit ist die Reproduzierbarkeit gegeben. Es konnte beobachtet werden, dass Messstellen mit Temperaturen, die auf überhitztes Fluid hindeuten, deutlich stärkere zeitliche Schwankungen aufweisen. Ein stationärer Temperaturverlauf bei diesen Messstellen war nicht immer gegeben. Dies hatte jedoch keinen Einfluss auf die Position der Verdampfung. Es bleibt offen, ob der überhitzte Bereich im Verdampfer überhaupt ein stationäres Verhalten zeigen kann oder ob hier eine Instabilität dies verhindert. Eine FFT Analyse der zeitlichen Veränderungen zeigte keine ausgeprägten Frequenzen.

### 5.4.5. Zusammenfassung der Ergebnisse der Validierung

Es konnte gezeigt werden, dass der qualitative Vergleich der experimentellen und numerischen Ergebnisse bei Variation von Randbedingungen eine gute Übereinstimmung zeigt (Kap. 5.4.2 und 5.4.3) und die Reproduzierbarkeit nachgewiesen werden kann (Kap. 5.4.4). Der quantitative Abgleich anhand der Position und Länge der Verdampfungszone zeigt Abweichungen, deren mögliche Ursachen im Folgenden erläutert werden. Zunächst sollte bei der experimentellen Validierung beachtet werden, dass die Herangehensweise zur Vergleichbarkeit anhand der Stanton Zahlen  $St_v$  bei allen Ergebnissen dazu führt, dass die numerischen Ergebnisse eine höhere Stanton Zahl aufweisen, mit der Ausnahme einer Heizleistung bei der Verdampfung von Ethanol/Wasser. Darüber hinaus ist die Erkennung des Beginns der Verdampfung bei allen gemessenen Temperaturen problemlos möglich. Die Identifikation des Endes der Verdampfung, am Übergang zum überhitzten Fluid, ist jedoch mit einer Unsicherheit verbunden, da der damit einhergehende un stetige Temperaturgradient nicht immer mit der Kondensationstemperatur übereinstimmt, wie in Kap. 5.4.3.1 erläutert wurde.

Bei den gezeigten Ergebnissen ist zu erkennen, dass die numerischen Ergebnisse den Beginn der Verdampfung für reines Wasser weiter stromab als die experimentellen Daten voraussagen. Die Tendenz in der Verschiebung der Verdampfungsposition ist die gleiche wie in Experimenten bei Variation des zugeführten Wärmestroms. Für die Ethanol/Wasser Mischung ändert sich diese Aussage insofern, dass die Verdampfung von dem Mischungsmodell weiter stromauf vorhergesagt wird. Die Tendenz in der Verschiebung der Verdampfungsposition zeigt eine sehr gute Übereinstimmung bei 5 Mol% Ethanol und  $0.62 \text{ g/min}$  und eine qualitative Abweichung bei 22.5 Mol% Ethanol und  $0.50 \text{ g/min}$ .

Die Sensibilitätsanalyse aus Kap. 5.4.2.3 zeigt, dass die Unsicherheit in der Annahme der Modellparameter in Form des Exponenten der relativen Permeabilität und der Korrelation für den Wärmeübergang eine geringe Auswirkung haben kann auf die Position der Verdampfung. Weitere Unsicherheiten der Parameter liegen im Wärmeübergang zwischen Epoxidharz und porösem Medium bzw. Fluid, siehe Abb. 5.15, sowie in der Inhomogenität des Prüflings (Porosität, Permeabilität, Struktur, Textur, makroskopische sowie mikroskopische Eigenschaften etc.).

Weitere mögliche Ursachen für die Abweichungen können in der Modellierung liegen: Dies sind beispielsweise physikalisch diffusive Flüsse, die sich zwischen den Phasen abspielen, die hervorgerufen werden durch Abhängigkeit des Kapillardrucks von der Sättigung (berücksichtigt mit einer Modellierung), durch Abhängigkeit des Kapillardrucks von der Konzentration (vernachlässigt in dieser Arbeit) und durch Abhängigkeit des Kapillardrucks von der Temperatur (ebenfalls vernachlässigt in dieser Arbeit). Diese drei Effekte werden durch den kapillaren, konzentrationsabhängigen kapillaren und thermokapillaren Diffusionskoeffizienten beschrieben. Die Wärmeströme beim Sieden, insbesondere die Unterscheidung der verschiedenen Ausprägungen wie etwa Blasensieden oder Filmsieden, können einen weiteren Einfluss haben.

Die Gründe für die Abweichungen können ebenfalls in der Numerik liegen: Die Wahl der Approximation an den Zellinterfaces an den makroskopischen Phasenübergängen könnte eine Rolle spielen, siehe Abb. 3.3 und Lindner et al. (2016a).

## 5.5. Fehlerabschätzung der experimentellen Messungen

Dieses Kapitel schätzt die Messfehler auf die Messergebnisse der Kap. 5.2 und 5.4 ab. Thermoelemente Typ K besitzen nach ihrer Genauigkeitsklasse eine Grenzabweichung in Klasse 1 in Höhe von  $\pm 1.5^\circ\text{C}$ . Die Schlauchpumpe Reglo Digital MS596 wurde vor den Messungen vom Hersteller kalibriert. Darüber hinaus wurde sie mit Daten einer Waage Sartorius CP224S gegenübergestellt. Somit ist der zu erwartende Fehler der Schlauchpumpe korrigiert durch die exakten Daten der Waage, die vom Hersteller kurz vor den Messkampagnen ebenfalls kalibriert wurde. Das Leistungsmessgerät ZES Zimmer LMG 500 besitzt laut Hersteller einen Messfehler der Wirkleistung in Höhe von  $\pm 0.015\%$  vom Messwert plus weiteren  $0.01\%$  vom Messbereichsendwertes. Bei der größten gemessenen elektrischen Leistung mit  $34.3\text{ W}$  entspricht dies einem verschwindend geringem Messfehler von  $\pm 0.0086\text{ W}$ . Die Drucksensoren BTE6005A1 mit einem Messbereich von 0 bis 5 bar Absolutdruck besitzen laut Hersteller eine Genauigkeit von  $0.1\%$  des Maximums dieses Messbereichs (Full Scale Output, FSO), d.h. der absolute Messfehler beträgt  $\pm 0.005\text{ bar}$ . Der Fehler, der bei der Berechnung der Permeabilität zu erwarten ist, wird am stärksten von der Unsicherheit bei der Bestimmung der Querschnittfläche des porösen Mediums beeinflusst. Der durchströmte Querschnitt für die Berechnung der Permeabilität wird über eine Mikroskopaufnahme eines Schliffbildes bestimmt. Die tatsächliche Dicke und die tatsächliche Breite werden in einem Schwankungsbereich mit  $\pm 0.5\text{ mm}$  liegen. Da das Schliffbild nur eine Aussage über eine Ebene liefern kann, wurde ein Mittelwert für die Eintritts- und Austrittsebene benutzt. Weiterhin hat die Messunsicherheit der Drucksensoren auf das Ergebnis der Permeabilität einen Einfluss. Bei einer maximalen Messunsicherheit von  $\pm 0.005\text{ bar}$  über den Messbereich ist die Auswirkung auf die Unsicherheit der Berechnung der Permeabilität bei geringen Massenströmen am größten. Der kleinste im Versuch gemessene Massenstrom beträgt  $5\text{ g}/\text{min}$ . Mit der kleinsten durchströmten Querschnittfläche und einem Druck, der  $0.005\text{ bar}$  größer ist als der gemessene Wert, nimmt die Permeabilität dabei einen Wert von  $1.17 \cdot 10^{-10}\text{ m}^2$  an. Die Permeabilität mit der größten Querschnittfläche und einem  $0.005\text{ bar}$  geringerem Druck als im Versuch gemessen berechnet, ergibt einen Wert von  $6.24 \cdot 10^{-11}\text{ m}^2$ . Die Messunsicherheiten aller weiterer Größen, die zur Berechnung der Permeabilität gemessen werden, sind sehr viel kleiner und werden deshalb nicht weiter betrachtet. Die wahre Permeabilität wird zwischen diesen beiden Grenzwerten liegen.

## 6. Zusammenfassung und Ausblick

Durch die Simulation von Multikomponentenströmung mit Verdampfung in porösen Medien ist die Beschreibung von einer Vielzahl von technischen Anwendungen möglich. Die Einbeziehung von einem Zweigleichungsmodell für die Energieerhaltung des Fluids und des porösen Mediums (LTNE) ermöglicht es, trotz verschwindendem Temperaturgradienten während der Verdampfung (im Falle eines einkomponentigen Fluids) oder geringem Temperaturgradienten (im Falle eines mehrkomponentigen Fluids) die Fähigkeit der Wärmeleitung des porösen Mediums zu berücksichtigen. Dessen konduktive Wärmeströme sind abhängig von den vorherrschenden Temperaturgradienten und damit dem Wärmeübergang zum durchströmenden Fluid.

Die vorliegende Arbeit behandelt die physikalische und mathematische Modellierung, Implementierung und Anwendung von mehrphasiger Strömung und Verdampfung in porösen Medien bei lokalem thermischen Nichtgleichgewicht. Das verwendete Multiphasen Mischungsmodell im LTNE für einkomponentige Fluide wurde angelehnt an eine bereits veröffentlichte Publikation (Shi und Wang, 2011). Das weitere Modell für zweikomponentige Fluide stellt eine Erweiterung dar, angelehnt an Wang und Beckermann (1993). Die Modelle wurden verifiziert mit einem DuMu<sup>x</sup> Code, der außerhalb dieser Arbeit entwickelt wurde und auf einer anderen numerischen Betrachtung fußt, und mit Ergebnissen der bereits veröffentlichten Daten von Shi und Wang (2011) (Lindner et al., 2016a).

Parameterstudien zu den verwendeten Modellen geben einen Einblick in die Plausibilität der Ergebnisse und zeigen technische Anwendungsbeispiele. Die Anwendung des Mischungsmodells für einkomponentige Fluide einer 2D Strömung stellt zum Zeitpunkt der Erstellung dieser Arbeit ein Novum im Stand der Forschung dar (Lindner et al., 2015).

Ebenfalls erweitert die Modellbildung, die zum Mischungsmodell für zweikomponentige Fluide führt, den Stand der Forschung. Die Parameterstudien zeigen die Plausibilität der Ergebnisse und die Eignung zur numerischen Berechnung von Multi-{phasen,komponenten} Strömungen (Lindner et al., 2016c).

Um die Ergebnisse der numerischen Simulation experimentellen Messdaten gegenüberzustellen, wurden Validierungen durchgeführt. Zum einen wurde die instationäre Fluidausbreitung experimentell gemessen und mit numerischen Daten abgeglichen. Die angewandte einphasige, isotherme Massen- und Impulserhaltung bei variabler Fluidichte ist vom gleichen mathematischen Typus wie die Massen- und Impulserhaltung in der Mischungsformulierung, die den Phasenwechsel abbilden kann. Zum anderen wurde Verdampfung in porösen Medien unter einer Variation von Mischungszusammensetzung, Massenstrom und Wärmezufuhr gemessen und eine experimentelle Datenbasis zum Abgleich geschaffen. Somit wurde die Eignung der verwendeten Modelle zur Berechnung von Verdampfung von einkomponentigen und zweikomponentigen Fluiden nachgewiesen (Lindner et al., 2016b).

Es wurde gezeigt, dass die vorgestellten Modelle adäquate Ergebnisse für die Beschreibung mehrphasiger Strömungen in porösen Medien mit Verdampfung liefern. Die Verifikation mit den Resultaten numerischer Berechnungen und die Validierung auf Basis experimenteller Daten zeigen, dass die in dieser Arbeit diskutierten Mischungsmodelle einen neuen Beitrag zum Stand der Forschung leisten und weitere Untersuchungs- und Anwendungsmöglichkeiten eröffnen.

Die verwendeten Annahmen, die in die Modellbildung einfließen, lassen einen Ausblick auf eine Erweiterung des bestehenden Konzepts zu. Dies betrifft den Wärmeübergang zwischen der festen

Phase und den Fluiden, für den kommende Studien detaillierte Nusselt Korrelationen, abhängig von der Fluidzusammensetzung, liefern können.

Die Wärmeströme beim Phasenübergang in Form von Blasensieden, Filmsieden und den vielfältigen Übergangsformen können ebenfalls weiterhin untersucht werden. Die hier verwendete Korrelation für das Blasensieden von Multikomponenten Fluiden basiert auf der Annahme, dass sich der Wärmestrom massengewichtet aus den einzelnen Wärmeströmen der Komponenten zusammensetzt.

Der Einfluss der konzentrationsabhängigen kapillaren und thermokapillaren Diffusionskoeffizienten auf die Multikomponenten Verdampfung bleibt weiterhin zu untersuchen und somit besteht auch die Notwendigkeit einer exakten Datenbasis zum Kapillardruck in Abhängigkeit der Fluidzusammensetzung und Temperatur.

Für die numerische Simulation der Multikomponenten Verdampfung wurden isobare Siedediagramme mittels Dalton's und Raoult's Gesetz verwendet. Bei großen Massenströmen oder niedrigen Permeabilitäten kann die Annahme von isobarem Phasenwechsel einen erheblichen Fehler einführen. Nicht-isobare Siedediagramme oder die Verwendung der freien Gibbs Energie, die für die flüssige und gasförmige Phase gleich ist, können eine weitere Verbesserung einbringen.

Eine Erweiterung der Impulsgleichung, um Trägheitseffekte abbilden zu können, z.B. in Form der Forchheimer Gleichung, kann bei großen Massenströmen angebracht sein.

Die numerische Simulation instationärer Strömung ist mit dem Multiphasen Mischungsmodell möglich, konnte in diese Arbeit aber nicht mit einfließen.

# A. Druckgleichung und Sättigungsgleichung in fractional flow Formulierung

Die kompressible Massenerhaltung einer Fluidphase  $k$  lautet nach Gl. 2.38:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\phi \rho_k s_k) + \nabla \cdot (\rho_k \vec{u}_k) = q_k.$$

Werden die Zeit- und Ortsableitungen erweitert und durch die Phasendichte  $\rho_k$  geteilt, wird erhalten:

$$s_k \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{\partial s_k}{\partial t} + \phi \frac{s_k}{\rho_k} \frac{\partial \rho_k}{\partial t} + \nabla u_k + \frac{u_k \nabla \rho_k}{\rho_k} = \frac{q_k}{\rho_k}. \quad (\text{A.1})$$

Im Folgenden werden die zwei Massenerhaltungsgleichungen für zwei Phasen in eine Druckgleichung und eine Sättigungsgleichung für den Fluidtransport umgeschrieben. Dieser Vorgang lehnt sich an den Ausführungen von Aarnes et al. (2007) an.

Zunächst wird Gl. A.1 für beide Phasen aufsummiert, und die Definition der Phasenmobilität,  $\lambda_k = k_{r,k}/\mu_k$ , benutzt. Es wird weiterhin gesetzt:  $q = q_l/\rho_l + q_v/\rho_v$  und genutzt, dass gilt:  $\sum_k s_k = 1$ . Es ergibt sich somit:

$$\nabla (u_l + u_v) + \frac{\partial \phi}{\partial t} + \phi \frac{s_l}{\rho_l} \frac{\partial \rho_l}{\partial t} + \phi \frac{s_v}{\rho_v} \frac{\partial \rho_v}{\partial t} + \frac{u_l \nabla \rho_l}{\rho_l} + \frac{u_v \nabla \rho_v}{\rho_v} = q. \quad (\text{A.2})$$

Mit der Kompressibilität der Phasen

$$c_k = \frac{1}{\rho_k} \frac{d\rho_k}{dp_k}, \quad (\text{A.3})$$

und dem Ausdruck für die Darcy Geschwindigkeiten (Gl. 2.39) und der Schreibweise  $G = -g\nabla z$  wird aus Gl. A.2:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [\mathbf{K}\lambda_l(\nabla p_l - \rho_l G) + \mathbf{K}\lambda_v(\nabla p_v - \rho_v G)] \\ - c_l [\nabla p_l \cdot \mathbf{K}\lambda_l(\nabla p_l - \rho_l G) - \phi s_l \frac{\partial p_l}{\partial t}] \\ - c_v [\nabla p_v \cdot \mathbf{K}\lambda_v(\nabla p_v - \rho_v G) - \phi s_v \frac{\partial p_v}{\partial t}] = q. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Die Kompressibilität des porösen Mediums wird hier vernachlässigt. In Gl. A.4 ist der Druck der flüssigen Phase,  $p_l$ , und der Druck der gasförmigen Phase,  $p_v$ , enthalten. Wird  $p_v$  als primäre Variable verstanden und  $p_l$  ersetzt mit  $p_l = p_v - p_c$ , so wird aus Gl. A.4 eine parabolische Gleichung, die nach  $p_v$  gelöst werden kann.

Unter der Annahme von inkompressiblen Phasen gilt  $c_l = c_v = 0$  und Gl. A.4 vereinfacht sich. Es ergibt sich mit  $\lambda = \lambda_l + \lambda_v$  für Gl. A.4:

$$\nabla \cdot \vec{u} = q, \quad \text{mit} \quad \vec{u} = -\mathbf{K}(\lambda_l(\nabla p_l - \rho_l G) + \lambda_v(\nabla p_v - \rho_v G)). \quad (\text{A.5})$$

Mit der Einführung des globalen Drucks  $p = p_v - p_{\text{komppl}}$  und des komplementären Drucks  $p_{\text{komppl}}$  nach

$$p_{\text{komppl}}(s_l) = \int_1^{s_l} \frac{\lambda_l(\xi)}{\lambda_l(\xi) + \lambda_v(\xi)} \frac{\partial p_c}{\partial s_l} d\xi, \quad (\text{A.6})$$

und  $\nabla p_c = \frac{\lambda_l}{\lambda_l + \lambda_v} \nabla p_{\text{komppl}}$ , wird nun die Druckgleichung erhalten als:

$$-\nabla \cdot (\mathbf{K}\lambda \nabla p - \mathbf{K}(\lambda_l \rho_l + \lambda_v \rho_v) G) = q. \quad (\text{A.7})$$

Die Sättigungsgleichung ist die zweite notwendige Gleichung, um das System zu lösen. Es genügt für eine Sättigung zu lösen, da sich die andere Sättigung direkt daraus ergibt ( $\sum_k s_k = 1$ , eine Fluidkomponente). Dafür muss ein Zusammenhang der Druckgleichung, Gl. A.7, mit der Massenerhaltung einer Phase hergestellt werden. Es fehlt also ein Zusammenhang zwischen der Phasengeschwindigkeit  $\vec{u}_l$  mit dem globalen Druck  $p$  und dem komplementären Druck  $p_{\text{komppl}}$ . Dies wird hergestellt, indem  $\vec{u}_l$  mit der totalen Geschwindigkeit  $\vec{u}_{\text{total}}$  und weiteren Termen, die nur von der Sättigung abhängen, in Verbindung gebracht wird. Aus Gl. 2.39 folgt:

$$\mathbf{K}\lambda_v \lambda_l \nabla p_c = \lambda_v \vec{u}_l - \lambda_l \vec{u}_v + \mathbf{K}\lambda_v \lambda_l (\rho_v - \rho_l) G. \quad (\text{A.8})$$

Teilen durch  $\lambda$  und verwenden von  $\vec{u}_v = \vec{u}_{\text{total}} - \vec{u}_l$  führt zu:

$$\vec{u}_l = \frac{\lambda_l}{\lambda_l + \lambda_v} (\vec{u}_{\text{total}} + \mathbf{K}\lambda_v \nabla p_c + \mathbf{K}\lambda_v (\rho_l - \rho_v) G). \quad (\text{A.9})$$

Mit  $\nabla p_c = \frac{dp_c}{ds_l} \nabla s_l$  wird schließlich die Sättigungsgleichung erhalten:

$$\phi \frac{\partial s_l}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \frac{\lambda_l}{\lambda_l + \lambda_v} \left( \vec{u}_{\text{total}} + \mathbf{K}\lambda_v \frac{dp_c}{ds_l} \nabla s_l + \mathbf{K}\lambda_v (\rho_l - \rho_v) G \right) \right) = \frac{q_l}{\rho_l}. \quad (\text{A.10})$$

## B. Mathematisches Modell des Zweiphasen Mischungsmodells im lokalen thermischen Gleichgewicht

Wang (1997) beschreibt den numerischen Algorithmus zur Berechnung von Wärme- und Stofftransport in Zweiphasenströmungen für lokales thermisches Gleichgewicht in einer Erweiterung der Konzeption von Wang und Beckermann (1993); Wang et al. (1994). Da die Formulierung mit der spezifischen Enthalpie  $h$  oder der bisherigen Definition der volumetrischen Enthalpie nicht zielführend war für Probleme mit vollständigem Phasenwechsel in vorherigen Publikationen, führte Wang (1997) eine alternative Definition der volumetrischen Enthalpie  $H$  ein, siehe Gl. 2.71. Es wird eine gemeinsame Energieerhaltung für das Fluid und die feste Phase verwendet und mit der volumetrischen Enthalpie aus Gl. 2.71 formuliert. Die verwendeten Gleichungen sind in Tab. B.1 zusammengefasst. Tab. 2.5 gibt die notwendigen ergänzenden Gleichungen und konstitutiven Gleichungen für die Erhaltungsgleichungen an. Zusätzlich werden noch konstitutive Gleichungen für die relativen Permeabilitäten (Gl. 2.7 und 2.8) und den Kapillardruck (Gl. 2.20) benutzt. Es ergibt sich die folgende Lösungsprozedur:

1. Erstellung eines Gitters und Initialisieren der Koeffizienten.
2. Lösung der Erhaltungsgleichungen von Tab. B.1 auf einem festen Gitter.
3. Den thermodynamischen Zustand erfassen und die Temperaturen oder die Sättigung berechnen nach Tab. 2.5.
4. Die Mischungsvariablen aktualisieren und ab Schritt 2 wiederholen bis Konvergenz eintritt.
5. Nachdem eine konvergierte Lösung erhalten ist, die Phasengeschwindigkeiten im Postprocessing mit den Relationen in Tab. 2.5 berechnen.

Es gibt zwei Möglichkeiten, die Lösung der Erhaltungsgleichungen von Schritt 2 durchzuführen. Eine Möglichkeit ist die Herangehensweise, die Impulsgleichung in die Massenerhaltungsgleichung einzusetzen und dadurch den Druck zu berechnen. Eine andere Möglichkeit ist es, die Ähnlichkeit der Gleichungen zu den Transportgleichungen für einphasige Fluide zu nutzen und mit CFD Umgebungen zu arbeiten, die einphasige Strömung berechnen können. Die Massen- und Impulserhaltung lässt sich nach einer druckbasierten Methode lösen. Aufgrund der Ähnlichkeit zu Strömungsgleichungen für einphasige Strömung pflegt Wang (1997) die Gleichungen mit den primitiven Variablen Mischungsgeschwindigkeitsvektor  $\vec{u}$  und Mischungsdruck  $p$  in den CFD-Algorithmus SIMPLE (Semi-Implicit Method for Pressure-Linked Equations) von Patankar (1980) ein. Ein Nachteil der Formulierung mittels thermischem Gleichgewicht stellt die gemeinsame Temperatur des porösen Materials und des Fluids in Gebieten mit Verdampfung dar. Da ein Einkomponentenfluid während der isobaren Verdampfung konstante Temperatur aufweist, kann hier aufgrund des verschwindenden Temperaturgradienten keine Wärme durch Wärmeleitung transportiert werden. Im thermischen Gleichgewicht kann somit in Verdampfungsgebieten ebenfalls keine Wärme vom Festkörper geleitet werden. Dies stellt eine Annahme dar, die einen Fehler einbringen kann durch die so eingeführte künstliche Wärmeisolation des porösen Mediums (He et al., 2013).

**Erhaltungsgleichungen:**

|                  |   |
|------------------|---|
| Massenerhaltung  | $\phi \frac{\partial}{\partial t} \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{u}) = 0$   |
| Impulserhaltung  | $\vec{u} = -\frac{\mathbf{K}}{\mu} (\nabla p - \rho_{\text{kin}} \vec{g})$  |
| Energieerhaltung | $\Omega \frac{\partial}{\partial t} H + \nabla \cdot (\gamma_h \vec{u} H) = \nabla \cdot (\Gamma_h \nabla H) + \nabla \cdot \left( f \frac{\mathbf{K} \Delta \rho h_{fg}}{v_v} \vec{g} \right)$ |

**Mischungsvariablen:**

|                                      |  |
|--------------------------------------|--|
| Dichte                               | $\rho = \rho_l s + \rho_v (1 - s)$   |
| Geschwindigkeit                      | $\rho \vec{u} = \rho_l \vec{u}_l + \rho_v \vec{u}_v$   |
| Enthalpie                            | $H = \rho (h - 2h_{v,\text{sat}})$ mit $\rho h = \rho_l s h_l + \rho_v (1 - s) h_v$  |
| Kinetische Dichte                    | $\rho_{\text{kin}} = \rho_l (1 - \beta_l (T - T_{\text{sat}})) \lambda_l + \rho_v (1 - \beta_v (T - T_{\text{sat}})) \lambda_v$  |
| Viskosität                           | $\mu = \frac{\rho_l s + \rho_v (1 - s)}{k_{rl}/v_l + k_{rv}/v_v}$  |
| Korrekturkoeffizient für Advektion   | $\gamma_h = \frac{((\rho_v/\rho_l)(1 - s) + s) (h_{v,\text{sat}}(1 + \lambda_l) - h_{l,\text{sat}} \lambda_l)}{(2h_{v,\text{sat}} - h_{l,\text{sat}})s + (\rho_v h_{v,\text{sat}}/\rho_l)(1 - s)}$ |
| Effektives Wärmekapazitätsverhältnis | $\Omega = \phi + \rho_s c_s (1 - \phi) \frac{dT}{dH}$  |
| Effektiver Diffusionskoeffizient     | $\Gamma_h = \frac{1}{1 + (1 - \rho_v/\rho_l) h_{v,\text{sat}}/h_{fg}} D + k_{\text{eff}} \frac{dT}{dH}$  |
| Kapillarer Diffusionskoeffizient     | $D = \frac{(\phi \mathbf{K})^{1/2} \sigma}{\mu_l} \frac{k_{rl} k_{rv}}{(v_v/v_l) k_{rl} + k_{rv}} (-J')$   |
| Relative Mobilität                   | $\lambda_l = \frac{k_{rl}/v_l}{k_{rl}/v_l + k_{rv}/v_v}, \quad \lambda_v = \frac{k_{rv}/v_v}{k_{rl}/v_l + k_{rv}/v_v}$   |
| Hindrance Funktion                   | $f = \frac{k_{rl} k_{rv}/v_l}{k_{rl}/v_l + k_{rv}/v_v}$  |

**Tab. B.1.:** Verwendete Gleichungen bei Wang (1997) für ein Multiphasen Mischungsmodell im LTE.

## C. Lösung des Systems aus der Poisson-Gleichung für den Druck

Diese weitere Umformung dient dazu, die Lösung der Massen- und Impulserhaltung innerhalb der Toolbox MRST, wie in Kap. 2.2.1.2 dargestellt, zu beschreiben. Gl. 2.55 kann in die zweite und dritte Zeile von Gl. 2.54 eingesetzt werden. Diese Reduktion mit Schur-Komplement ergibt:

$$\begin{bmatrix} -\mathbf{L} & -\mathbf{F} \\ -\mathbf{F}^T & -\mathbf{D}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{D} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} -\vec{p} \\ \vec{\pi} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \vec{q} \\ \vec{0} \end{bmatrix} \quad (\text{C.1})$$

mit  $\mathbf{L} = \mathbf{C} \mathbf{B}^{-1} \mathbf{C}$  und  $\mathbf{F} = \mathbf{C}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{D}$ . Nach einer weiteren Schur-Komplement Reduktion wird schließlich erhalten:

$$(\mathbf{D}^T \mathbf{B}^{-1} \mathbf{D} - \mathbf{F}^T \mathbf{L}^{-1} \mathbf{F}) \vec{\pi} = \mathbf{F}^T \mathbf{L}^{-1} \vec{q}, \quad \text{bzw.} \quad \mathbf{A} \vec{\pi} = \vec{b}. \quad (\text{C.2})$$

Sind die Drücke an den Zellenflächen gegeben, so lassen sich die Zellendrücke und die Flüsse berechnen durch:

$$\mathbf{L} \vec{p} = \vec{q} + \mathbf{F} \vec{\pi}, \quad \mathbf{B} \vec{u} = \mathbf{C} \vec{p} - \mathbf{D} \vec{\pi}. \quad (\text{C.3})$$

Gl. C.3 ist in MATLAB<sup>®</sup> schnell lösbar für eine große Zellanzahl und beliebige Randbedingungen. Der Rechenaufwand ist aufgrund einer effizienten Vektorisierung verhältnismäßig gering. Für ein kartesisches Gitter mit  $l$  Zellen und  $m$  Interfaces in  $\Omega$  ist  $\mathbf{B}(l \cdot m \times l \cdot m)$ ,  $\mathbf{C}(l \times l \cdot m)$  und  $\mathbf{D}(l \cdot m \times l \cdot m)$ . Entsprechend sind  $\vec{u}(m \times 1)$ ,  $\vec{p}(l \times 1)$  und  $\vec{\pi}(m \times 1)$ . Die TPFA-Methode kann geschrieben werden analog zu Gl. 2.48:

$$T_{ij} = 2 |\gamma_{ij}| \left( \frac{\Delta x_i}{\lambda_i} + \frac{\Delta x_j}{\lambda_j} \right)^{-1}, \quad (\text{C.4})$$

mit

$$\sum_j T_{ij} (p_i - p_j) = - \int_{E_i} q \, dx. \quad (\text{C.5})$$

# Literaturverzeichnis

- Aarnes, J., Gimse, T., Lie, K.A.: An Introduction to the Numerics of Flow in Porous Media using Matlab. In: Geometric Modelling, Numerical Simulation, and Optimization. Springer, S. 265–306, DOI 10.1007/978-3-540-68783-2\_9 (2007).
- Abriola, L., Pinder, G.: A Multiphase Approach to the Modeling of Porous Media Contamination by Organic Compounds 1. Equation Development. *Water Resources Research* **21**(1), S. 11–18, DOI 10.1029/WR021i001p00011 (1985).
- Adenakan, A., Patzek, T.: Modeling of Multiphase Transport of Multicomponent Organic Contaminants and Heat in the Subsurface: Numerical Model Formulation. *Water Resources Research* **29**(11), S. 3727–3740, DOI 10.1029/93WR01957 (1993).
- Adler, P., Brenner, H.: Multiphase flow in porous media. *Annual Review of Fluid Mechanics* **20**, S. 35–59, DOI 10.1007/978-94-017-2372-5 (1988).
- Aichlmayr, H., Kulacki, F.: The Effective Thermal Conductivity of Saturated Porous Media. *Advances in Heat Transfer* **39**, S. 377–460, DOI 10.1016/S0065-2717(06)39004-1 (2006).
- Alomar, O.R., Mendes, M., Trimis, D., Ray, S.: Numerical simulation of complete liquid-vapour phase change process inside porous media using smoothing of diffusion coefficient. *International Journal of Thermal Sciences* **86**, S. 408 – 420, DOI 10.1016/j.ijthermalsci.2014.08.003 (2014a).
- Alomar, O.R., Mendes, M.A.A., Trimis, D., Ray, S.: Simulation of Complete Liquid-Vapor Phase Change inside Divergent Porous Evaporator. *International Journal of Materials, Mechanics and Manufacturing* **2**(3), S. 223–229, DOI 10.7763/IJMMM.2014.V2.132 (2014b).
- Assteerawatt, N., Bastian, P., Bielinski, A., Breiting, T., Class, H., Ebigbo, A., Eichel, H., Freiboth, S., Helmig, R., Kopp, A., Niessner, J., Ochs, S., Papafotiou, A., Paul, M., Sheta, H., Werner, D., Ölmann, U.: MUFTE-UG: Structure, Applications and Numerical Methods. Techn. Rep., International Groundwater Modeling Centre, Colorado School of Mines (2006).
- Bayley, F., Turner, A.: Transpiration cooled turbines. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers* **185**(1), S. 943–951, DOI 10.1243/PIME\_PROC\_1970\_185\_107\_02 (1970).
- Bear, J.: Dynamics of fluids in porous media. Dover books on physics and chemistry, Dover, DOI 10.1017/S0022112073210662 (1988).
- Bear, J.: Modelling and Applications of Transport Phenomena in Porous Media, vol 5. Springer, DOI 10.1007/978-94-011-2632-8 (1991).
- Bear, J., Cheng, A.H.D.: Modeling Groundwater Flow and Contaminant Transport. Theory and Applications of Transport in Porous Media, Springer, DOI 10.1007/978-1-4020-6682-5 (2010).
- Bjørnarå, T., Aker, E.: Comparing Equations for Two-Phase Fluid Flow in Porous Media. In: Proceedings of the COMSOL Conference (2008).
- Boukhezar, N.: Numerical Simulation of Fluid Flow and Heat Transfer in Porous Inert Media for Applications in Combustion Technology. Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg (2004).
- Brennen, C.: Fundamentals of Multiphase Flow. Cambridge University Press (2005).
- Brooks, R., Corey, A.T.: Hydraulic properties of porous media. Hydrology Paper, Colorado State

- University **3**, S. 22–27 (1964).
- Buckley, S., Leverett, M.: Mechanism of fluid displacements in sands. *Transactions of the AIME* **146**, S. 107–116 (1942).
- Chavent, G.: A new formulation of diphasic incompressible flows in porous media. In: *Applications of methods of functional analysis to problems in mechanics*. Springer, S. 258–270, DOI 10.1007/BFb0088761 (1976).
- Chawla, T., Pedersen, D., Minkowycz, W.: Governing equations for heat and mass transfer in heat-generating porous beds - I. Coolant boiling and transient void propagation. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **28**(11), S. 2129–2136, DOI 10.1016/0017-9310(85)90107-3 (1985).
- Chen, H.K.: Measurement of water content in porous media under geothermal fluid conditions. Dissertation, Stanford University (1976).
- Chen, Z., Huan, G., Ma, Y.: *Computational Methods for Multiphase Flows in Porous Media*. Society for Industrial and Applied Mathematics, DOI 10.1137/1.9780898718942 (2006).
- Cheng, P., Wang, C.: A multiphase mixture model for multiphase, multicomponent transport in capillary porous media. - II. Numerical simulation of the transport of organic compounds in the subsurface. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **39**(17), S. 3619–3632, DOI 10.1016/0017-9310(96)00037-3 (1996).
- Clark, J., Rohsenow, W.: Local boiling heat transfer to water at low reynolds numbers and high pressures. *Trans ASME* **76**, S. 554–562 (1954).
- Class, H.: *Theorie und numerische Modellierung nichtisothermer Mehrphasenprozesse in NAPL-kontaminierten porösen Medien*. Dissertation, Universität Stuttgart (2001).
- Class, H., Helmig, R.: Numerical simulation of non-isothermal multiphase multicomponent processes in porous media. 2. Applications for the injection of steam and air. *Advances in Water Resources* **25**(5), S. 551–564, DOI 10.1016/S0309-1708(02)00015-5 (2002).
- Class, H., Helmig, R., Bastian, P.: Numerical simulation of non-isothermal multiphase multicomponent processes in porous media. 1. An efficient solution technique. *Advances in Water Resources* **25**(5), S. 533–550, DOI 10.1016/S0309-1708(02)00014-3 (2002).
- COMSOL: COMSOL Multiphysics® v. 3.5a. COMSOL AB, Stockholm, Sweden URL [www.comsol.com](http://www.comsol.com) (2013).
- Crone, S., Bergins, C., Strauss, K.: Multiphase Flow in Homogeneous Porous Media with Phase Change. Part I: Numerical Modeling. *Transport in Porous Media* **49**(3), S. 291–312, DOI 10.1023/A:1016271213503 (2002).
- Crone, S., Bergins, C., Strauss, K.: Multiphase Flow in Homogeneous Porous Media with Phase Change. Part II: Analytical Solutions and Experimental Verification for Constant Pressure Steam Injection. *Transport in Porous Media* **60**(3), S. 275–300, DOI 10.1007/s11242-004-5740-5 (2005).
- Cueto-Felgueroso, L.: Finite volume methods for one-dimensional scalar conservation laws. URL <http://juanessgroup.mit.edu/lcueto/teach?action=AttachFile&do=get&target=FV.pdf> (2009).
- Darcy, H.: *Les fontaines publiques de la ville de Dijon: Exposition et application des principes a suivre et des formules a employer dans les questions de distribution d'eau; ouvrage terminé par un appendice relatif aux fournitures d'eau de plusieurs villes au filtrage des eaux et a la fabrication*

- des tuyaux de fonte, de plomb, de tole et de bitume. Atlas. Victor Dalmont, Libraire des Corps imperiaux des ponts et chaussées et des mines (1856).
- Darnault, C.J.G., Throop, J.A., DiCarlo, D.A., Rimmer, A., Steenhuis, T.S., Parlange, J.Y.: Visualization by light transmission of oil and water contents in transient two-phase flow fields. *Journal of Contaminant Hydrology* **31**, S. 337–348, DOI 10.1016/S0169-7722(97)00068-5 (1998).
- Darnault, C.J.G., DiCarlo, D.A., Bauters, T.W.J., Jacobson, A.R., Throop, J.A., Montemagno, C.D., Parlange, J.Y., Steenhuis, T.S.: Measurement of fluid contents by light transmission in transient three-phase oil-water-air systems in sand. *Water Resources Research* **37**(7), S. 1859–1868, DOI 10.1029/2000WR900380 (2001).
- Desmyter, A., van der Waals, J.H.: Thermodynamic properties of mixtures of alkanes differing in chain length, IV: Volumes of mixing. *Recueil des Travaux Chimiques des Pays-Bas* **77**(1), S. 53–65, DOI 10.1002/recl.19580770108 (1958).
- Diezinger, S.: Mehrstofffähige Brenner auf Basis der Porenbrennertechnik für den Einsatz in Brennstoffzellensystemen. Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg (2006).
- Droste, D.: Numerische Simulation des Wärme und Stofftransports in porösen Medien unter Berücksichtigung des Phasenübergangs. Masterarbeit, Universität der Bundeswehr München (2012).
- Droste, D., Lindner, F., Mundt, C., Pfitzner, M.: Numerical Investigation of Two-Phase Flow in Porous Media. In: Proc. of the 2013 COMSOL Conference Rotterdam (2013).
- Dullien, F.: Porous Media: Fluid Transport and Pore Structure, 2. edn. Academic Press, DOI 10.1002/aic.690380819 (1992).
- Duval, F., Fichot, F., Quintard, M.: A local thermal non-equilibrium model for two-phase flows with phase-change in porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **47**(3), S. 613 – 639, DOI 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2003.07.005 (2004).
- Easterday, O., Wang, C., Cheng, P.: A numerical and experimental study of two-phase flow and heat transfer in a porous formation with localized heating from below. In: Proc. of ASME Heat Transfer and Fluid Engineering Divisions (1995).
- Eckert, E., Cho, H.: Transition from transpiration to film cooling. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **37**, S. 3 – 8, DOI 10.1016/0017-9310(94)90003-5 (1994).
- Falta, R., Pruess, K., Finsterle, S., Battistelli, A.: T2VOC User's Guide. Techn. Rep., Lawrence Berkeley National Laboratory, DOI 10.1.1.184.1931 (1995).
- Flemisch, B., Darcis, M., Ebertseder, K., Faigle, B., Lauser, A., Mostah, K., Müthing, S., Nuske, P., Tatomir, A., Wolff, M., Helmig, R.: DuMu<sup>x</sup>: DUNE for Multi-Phase, Component, Scale, Physics, ... Flow and Transport in Porous Media. *Advances in Water Resources* **34**(9), S. 1102–1112, DOI 10.1016/j.advwatres.2011.03.007 (2011).
- Foreest, A.V., Sippel, M., Gülhan, A., Esser, B., C. Ambrosius, B., Sudmeijer, K.: Transpiration cooling using liquid water. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* **23**(4), S. 693–702, DOI 10.2514/1.39070 (2009).
- Free Software Foundation: GNU general public license (1991).
- Gerstner, P., Paltakari, J., Gane, P.: A Lumped Parameter Model for Thermal Conductivity of Paper Coatings. *Transport in Porous Media* **78**(1), S. 1–9, DOI 10.1007/s11242-008-9276-y (2009).

- Gerstner, P., Veikkolainen, S., Gane, P.: Effective Thermal Conductivity of Liquid-Saturated Coatings and Their Liquid Vaporisation Behaviour. *Transport in Porous Media* **92**(3), S. 709–725, DOI 10.1007/s11242-011-9929-0 (2012).
- Ghafir, R., Lauriat, G.: Forced convection heat transfer with evaporation in a heat generating porous medium. *Journal of Porous Media* **4**(4), S. 309–322, DOI 10.1615/JPorMedia.v4.i4.40 (2001).
- Ghogomu, P., Bouroukba, M., Dellacherie, J., Balesdent, D., Dirand, M.: On the ideality of liquid mixtures of long-chain n-alkanes. *Thermochimica Acta* **306**(1), S. 69–71, DOI 10.1016/S0040-6031(97)00301-8 (1997).
- Glass, D., Dilley, A., Kelly, H.: Numerical analysis of convection/transpiration cooling. *Journal of Spacecraft and Rockets* **38**(1), S. 15–20, DOI 10.2514/2.3666 (2001).
- Goumiri, I., Prevost, J., Preisig, M.: The effect of capillary pressure on the saturation equation of two-phase flow in porous media. *International Journal for Numerical and Analytical Methods in Geomechanics* **36**(3), S. 352–361, DOI 10.1002/nag.1022 (2012).
- Gurau, V.: Response to "Comment on 'A Look at the Multiphase Mixture Model for PEM Fuel Cell Simulations'". *Electrochemical and Solid-State Letters* **12**(2), S. S4–S6, DOI 10.1149/1.3041657 (2009).
- Gurau, V., Edwards, R.V., Mann, J.A., Zawodzinski, T.A.: A look at the multiphase mixture model for PEM fuel cell simulations. *Electrochemical and Solid-State Letters* **11**(8), S. B132–B135, DOI 10.1149/1.2929658 (2008).
- Hassanizadeh, S., Gray, W.: General conservation equations for multiphase systems: 3. Constitutive theory for porous media. *Advances in Water Resources* **3**(1), S. 25–40, DOI 10.1016/0309-1708(80)90016-0 (1980).
- He, F., Wang, J.: Numerical investigation on critical heat flux and coolant volume required for transpiration cooling with phase change. *Energy Conversion and Management* **80**, S. 591 – 597, DOI 10.1016/j.enconman.2014.02.003 (2014).
- He, F., Wang, J., Xu, L., Wang, X.: Modeling and simulation of transpiration cooling with phase change. *Applied Thermal Engineering* **58**, S. 173–180, DOI 10.1016/j.applthermaleng.2013.04.017 (2013).
- Helmig, R.: *Multiphase flow and transport processes in the subsurface: a contribution to the modeling of hydrosystems*. Springer (1997).
- Huang, W.E., Smith, C.C., Lerner, D.N., Thornton, S.F., Oram, A.: Physical modelling of solute transport in porous media: evaluation of an imaging technique using UV excited fluorescent dye. *Water Research* **36**(7), S. 1843 – 1853, DOI 10.1016/S0043-1354(01)00393-1 (2002).
- Kaviany, M.: *Principles of Heat Transfer in Porous Media*, 2. edn. Springer, Berlin Heidelberg, DOI 10.1007/978-1-4612-4254-3 (1995).
- Kays, W.M., Crawford, M.E., Weigand, B.: *Convective heat and mass transfer*. Tata McGraw-Hill Education (2012).
- Kececioglu, I., Jiang, Y.: Flow Through Porous Media of Packed Spheres Saturated with Water. *Journal of Fluids Engineering* **116**(1), S. 164–170, DOI 10.1115/1.2910229 (1994).
- Koh, J., delCasal, E., Evans, R., Deriugin, V.: Investigation of fluid flow and heat transfer in porous matrices for transpiration cooling. Techn. Rep. AFFDL-TR-65-228, Boeing (1968).

- Kolditz, O., Bauer, S., Bilke, L., Böttcher, N., Delfs, J., Fischer, T., Görke, U., Kalbacher, T., Kosakowski, G., McDermott, C., Park, C., Radu, F., Rink, K., Shao, H., Shao, H., Sun, F., Sun, Y., Singh, A., Taron, J., Walther, M., Wang, W., Watanabe, N., Wu, Y., Xie, M., Xu, W., Zehner, B.: OpengEOS: an open-source initiative for numerical simulation of thermo-hydro-mechanical/chemical (THM/C) processes in porous media. *Environmental Earth Sciences* **67**(2), S. 589–599, DOI 10.1007/s12665-012-1546-x (2012).
- Krischer, O.: *Trocknungstechnik Band I. Die wissenschaftlichen Grundlagen der Trocknungstechnik*. Springer, DOI 10.1007/978-3-662-26011-1 (1978).
- Kumaran, M., Benson, G.: Excess enthalpies of n-dodecane + n-heptane, + n-octane, and + n-decane at 298.15 K. *Journal of Chemical Thermodynamics* **18**, S. 993–996, DOI 10.1016/0021-9614(86)90156-4 (1986).
- Leverett, M.: Capillary Behavior in Porous Solids. *Transactions of AIME Petroleum Engineering Division* **142**(1), S. 152–169, DOI 10.2118/941152-G (1941).
- Li, H., Leong, K., Jin, L., Chai, J.: Three-dimensional numerical simulation of fluid flow with phase change heat transfer in an asymmetrically heated porous channel. *International Journal of Thermal Sciences* **49**(12), S. 2363 – 2375, DOI 10.1016/j.ijthermalsci.2010.07.018 (2010a).
- Li, H., Leong, K., Jin, L., Chai, J.: Transient behavior of fluid flow and heat transfer with phase change in vertical porous channels. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **53**(23–24), S. 5209 – 5222, DOI 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2010.07.039 (2010b).
- Li, H., Leong, K., Jin, L., Chai, J.: Transient two-phase flow and heat transfer with localized heating in porous media. *International Journal of Thermal Sciences* **49**(7), S. 1115 – 1127, DOI 10.1016/j.ijthermalsci.2010.01.024 (2010c).
- Lie, K., Krogstad, S., Ligaarden, I., Natvig, J., Nilsen, H., Skaflestad, B.: Open-source matlab implementation of consistent discretisations on complex grids. *Computational Geosciences* **16**, S. 297–322, DOI 10.1007/s10596-011-9244-4 (2012).
- Lindner, F., Pfitzner, M., Mundt, C.: Fluid Flow with Phase Change in Vertical Porous Channels with Local Thermal Non-Equilibrium in a Two-Phase Mixture Model. In: *Proceedings of the 5th International Conference on Porous Media and its Applications in Science and Engineering, ICPM5* (2014).
- Lindner, F., Mundt, C., Pfitzner, M.: Fluid flow and heat transfer with phase change and local thermal non-equilibrium in vertical porous channels. *Transport in Porous Media* **106**(1), S. 201–220, DOI 10.1007/s11242-014-0396-2 (2015).
- Lindner, F., Nuske, P., Weishaupt, K., Helmig, R., Mundt, C., Pfitzner, M.: Transpiration cooling with local thermal non-equilibrium: Model comparison in multiphase flow in porous media. *Journal of Porous Media* **19**(2), S. 131–153, DOI 10.1615/JPorMedia.v19.i2.30 (2016a).
- Lindner, F., Pfitzner, M., Mundt, C.: Experimental and Numerical Study of Multiphase, Multicomponent Flow in Porous Media with a Multiphase Mixture Model. *Transport in Porous Media* DOI 10.1007/s11242-016-0768-x (2016b).
- Lindner, F., Pfitzner, M., Mundt, C.: Multiphase, Multicomponent Flow in Porous Media with Local Thermal Non-equilibrium in a Multiphase Mixture Model. *Transport in Porous Media* **112**(2), S. 313–332, DOI 10.1007/s11242-016-0646-6 (2016c).
- Lipinski, R.: A model for boiling and dryout in particulate beds. Sand82-0765 (nureg/cr-2646),

- Sandia Laboratories (1982).
- Löser, F.: Charakterisierung von Metfallfaserverdampfern unter Berücksichtigung der Brennstoffverteilung in Brennkammeranwendungen. Diplomarbeit, Hochschule München (2012).
- Lüdecke, D., Lüdecke, C.: Thermodynamik: Physikalisch-chemische Grundlagen der thermischen Verfahrenstechnik. Springer-Lehrbuch, Springer, DOI 10.1007/978-3-642-56988-3 (2000).
- Luikov, A.: Application of irreversible thermodynamics methods to investigation of heat and mass transfer. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **9**, S. 139–152, DOI 10.1016/0017-9310(66)90128-1 (1966a).
- Luikov, A.: Heat and mass transfer in capillary-porous bodies. Pergamon Press, DOI 10.1002/aic.690130305 (1966b).
- Luikov, A.: Systems of differential equations of heat and mass transfer in capillary-porous bodies. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **18**(1), S. 1–14, DOI 10.1016/0017-9310(75)90002-2 (1975).
- Majumdar, A., Tien, C.: Effects of Surface Tension on Film Condensation in a Porous Medium. *Journal of Heat Transfer* **112**(3), S. 751–757, DOI 10.1115/1.2910450 (1990).
- Masoodi, R.: Modeling imbibition of liquids into rigid and swelling porous media. Dissertation, University of Wisconsin-Milwaukee (2010).
- MATLAB: MATLAB Release 2013a. The MathWorks, Inc, Natick, Massachusetts, United States (2013).
- Mayer, M.: Untersuchungen zur Verdampfung von binären Gemischen in porösen Medien. Diplomarbeit, Hochschule München (2015).
- McGlashan, M.L., Morcom, K.W.: Heats of mixing of some n-alkanes. *Transactions of the Faraday Society* **57**, S. 907–913, DOI 10.1039/TF9615700907 (1961).
- McWhorter, D., Sunada, D.: Exact integral solutions for two-phase flow. *Water Resources Research* **26**(3), S. 399–413, DOI 10.1029/WR026i003p00399 (1990).
- Milly, P.C.D.: Advances in modeling of water in the unsaturated zone. *Transport in Porous Media* **3**, S. 491–514, DOI 10.1007/BF00138613 (1988).
- Miscevic, M., Topin, F., Tadriss, L.: Convective Boiling Phenomena in a Sintered Fibrous Channel: Study of Thermal Non-Equilibrium Behavior. *Journal of Porous Media* **5**(4), S. 229 – 239, DOI 10.1615/JPorMedia.v5.i4.10 (2002).
- Miscevic, M., Rahli, O., Tadriss, L., Topin, F.: Experiments on flows, boiling and heat transfer in porous media: Emphasis on bottom injection. *Nuclear Engineering and Design* **236**, S. 2084–2103, DOI 10.1016/j.nucengdes.2006.03.034 (2006).
- Morel-Seytoux, H.: Two-phase flows in porous media. *Advances in Hydroscience* **9**, S. 119–202, DOI 10.1016/B978-0-12-021809-7.50009-2 (1973).
- Mualem, Y.: A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. *Water Resources Research* **12**(3), S. 513–522, DOI 10.1029/WR012i003p00513 (1976).
- Naik, A., Dhir, V.: Forced flow evaporative cooling of a volumetrically heated porous layer. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **25**(4), S. 541–552, DOI 10.1016/0017-9310(82)90057-6 (1982).

- Najjari, M., Nasrallah, S.B.: Numerical Study of Liquid Thermal Pumping in Porous Media. *Journal of Porous Media* **8**(6), S. 599–612, DOI 10.1615/JPorMedia.v8.i6.50 (2005a).
- Najjari, M., Nasrallah, S.B.: Numerical Study of the Effects of Geometric Dimensions on Liquid-Vapor Phase Change and Free Convection in a Rectangular Porous Cavity. *Journal of Porous Media* **8**(1), S. 1–12, DOI 10.1615/JPorMedia.v8.i1.10 (2005b).
- Najjari, M., Nasrallah, S.B.: Liquid-Vapor Phase-Change and Mixed Convection in a Porous Layer Discretely Heated. *Journal of Porous Media* **9**(7), S. 671–681, DOI 10.1615/JPorMedia.v9.i7.60 (2006).
- Neuman, S.P.: Theoretical Derivation of Darcy's law. *Acta Mechanica* **25**(3), S. 153–170, DOI 10.1007/BF01376989 (1977).
- Neumann, T.: Mehrphasige Durchströmung heterogener kompressibler Medien. Dissertation, Fachbereich Bio- und Chemieingenieurwesen, Universität Dortmund (2007).
- Niemet, M.R., Selker, J.S.: A new method for quantification of liquid saturation in 2D translucent porous media systems using light transmission. *Advances in Water Resources* **24**, S. 651–666, DOI 10.1016/S0309-1708(00)00045-2 (2001).
- Nuske, P.: Beyond Local Equilibrium : Relaxing local equilibrium assumptions in multiphase flow in porous media. Dissertation, Universität Stuttgart (2014).
- Nuske, P., Joekar-Niasar, V., Helmig, R.: Non-equilibrium in multiphase multicomponent flow in porous media: An evaporation example. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **74**, S. 128 – 142, DOI 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2014.03.011 (2014).
- Nutting, P.: Physical analysis of oil sands. *Bulletin of the American Association of Petroleum Geologists* **14**, S. 1349 (1930).
- Orwoll, R.A., Flory, P.J.: Thermodynamic properties of binary mixtures of n-alkanes. *Journal of the American Chemical Society* **89**(26), S. 6822–6829, DOI 10.1021/ja01002a003 (1967).
- Patankar, S.: Numerical heat transfer and fluid flow. Series in computational methods in mechanics and thermal sciences, Taylor & Francis (1980).
- Peterson, G.P., Chang, C.S.: Heat transfer analysis and evaluation for two-phase flow in porous-channel heat sinks. *Numerical Heat Transfer, Part A: Applications* **31**(2), S. 113–130, DOI 10.1080/10407789708914028 (1997).
- Philip, J., Vries, D.D.: Moisture movement in porous materials under temperature gradient. *Eos, Transactions American Geophysical Union* **38**(2), S. 222–232, DOI 10.1029/TR038i002p00222 (1957).
- Promislow, K., Wetton, B.: PEM fuel cells: A mathematical overview. *SIAM Journal on Applied Mathematics* **70**(2), S. 369–409, DOI 10.1137/080720802 (2009).
- Pruess, K., Calore, C., Celati, R., Wu, Y.: An analytical solution for heat transfer at a boiling front moving through a porous medium. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **30**(12), S. 2595–2602, DOI 10.1016/0017-9310(87)90140-2 (1987).
- Pruzan, D., Torrance, K., Avedisian, C.: Two-phase flow and dryout in a screen wick saturated with a fluid mixture. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **33**(4), S. 673 – 681, DOI 10.1016/0017-9310(90)90166-R (1990).
- Rahli, O., Topin, F., Pantaloni, J.: Analysis of heat transfer with liquid-vapor phase change in a

- forced-flow fluid moving through porous media. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **39**(18), S. 3959–3975, DOI 10.1016/0017-9310(96)00053-1 (1996).
- Ramesh, P.S., Torrance, K.E.: Numerical algorithm for problems involving boiling and natural convection in porous materials. *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* **17**(1), S. 1–24, DOI 10.1080/10407799008961730 (1990).
- Reddy, R., Lienhard, J.: The peak boiling heat flux in saturated ethanol–water mixtures. *Journal of Heat Transfer* **111**(2), S. 480–486, DOI 10.1115/1.3250702 (1989).
- Rief, S., Printsypar, G.: Mikrostruktursimulation von gesinterten Metallfaserstrukturen. Techn. Rep., ITWM Kaiserslautern (2012).
- Roache, P.: A new direct method for the discretized Poisson equation. In: M. Holt (ed) *Proceedings of the Second International Conference on Numerical Methods in Fluid Dynamics. Lecture Notes in Physics*, vol 8, Springer Berlin Heidelberg, S. 48–53, DOI 10.1007/3-540-05407-3\_8 (1971).
- Roache, P.: *Computational fluid dynamics*. IAHR Monograph, Hermosa Publishers (1976).
- Rodriguez, A.: Steady state transpiration cooling in porous media under local, non-thermal equilibrium fluid flow. Techn. Rep., NASA (2002).
- Rohsenow, W.: A method of correlating heat transfer data for surface boiling of liquids. *Transactions of the ASME* **74**, S. 969–976 (1952).
- Rose, W.: A technical note: Theory of spontaneous versus induced capillary imbibition. *Transport in Porous Media* **44**, S. 591–598, DOI 10.1023/A:1010624030630 (2001).
- Scharl, M.: Experimentelle Untersuchungen zur Verdampfung in porösen Medien. Bachelorarbeit, Hochschule Amberg-Weiden (2013).
- Scheidegger, A.: *The physics of flow through porous media*, 3. edn. University of Toronto Press (1974).
- Schladitz, K., Godehardt, M.: Analyse der Mikrostruktur gesinterteter Metallfaserstrukturen. Techn. Rep., ITWM Fraunhofer (2013).
- Shahraeeni, E., Or, D.: Quantification of subsurface thermal regimes beneath evaporating porous surfaces. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **54**(19), S. 4193–4202, DOI 10.1016/j.ijheatmasstransfer.2011.05.024 (2011).
- Shekarriz, A., Plumb, O.: A Theoretical Study of Enhancement of Filmwise Condensation Using Porous Fins. In: ASME Paper No. 86-HT-31 (1986).
- Shi, J., Wang, J.: A Numerical Investigation of Transpiration Cooling with Liquid Coolant Phase Change. *Transport in Porous Media* **87**, S. 703–716, DOI 10.1007/s11242-010-9710-9 (2011).
- Spalding, D.: A standard formulation of the steady convective mass transfer problem. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **1**(2), S. 192–207, DOI 10.1016/0017-9310(60)90022-3 (1960).
- Starikovicius, V.: *The multiphase flow and heat transfer in porous media* (2003).
- Stephan, P., Schaber, K., Stephan, K., Mayinger, F.: *Thermodynamik. 2 Mehrstoffsysteme*, 15th edn. Springer-Lehrbuch, Springer, DOI 10.1007/978-3-540-36855-7 (2010).
- Straughan, B.: Porous convection with local thermal non-equilibrium temperatures and with cationic effects in the solid. *Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engi-*

- neering Science **469**(2157), S. 20130,187, DOI 10.1098/rspa.2013.0187 (2013).
- Tamir, A., Tamir, E., Stephan, K.: Heats of phase change of pure components and mixtures: a literature guide. Physical sciences data, Elsevier (1983).
- Terry, J., Caras, G.: Transpiration and film cooling of liquid rocket nozzles. Techn. Rep., DTIC Document (1966).
- Tsai, T.P., Catton, I.: The effect of flow from below on dryout heat flux. Journal of Heat Transfer **109**(2), S. 491–497, DOI 10.1115/1.3248109 (1987).
- Udell, K.: Heat Transfer in Porous Media Heated From Above With Evaporation, Condensation, and Capillary Effects. Journal of Heat Transfer **105**(3), S. 485–492, DOI 10.1115/1.3245611 (1983).
- Udell, K.: Heat transfer in porous media considering phase change and capillarity-the heat pipe effect. International Journal of Heat and Mass Transfer **28**(2), S. 485–495, DOI 10.1016/0017-9310(85)90082-1 (1985).
- Vafai, K.: Handbook of porous media. Taylor & Francis (2005).
- vanGenuchten, M.: A Closed-form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils. Soil Science Society of America Journal **44**(5), S. 892–898, DOI 10.2136/sssaj1980.03615995004400050002x (1980).
- vanStralen, S.: The boiling paradox in binary liquid mixtures. Chemical Engineering Science **25**(1), S. 149 – 171, DOI 10.1016/0009-2509(70)85029-1 (1970).
- Voller, V.R., Swaminathan, C.R.: Treatment of discontinuous thermal conductivity in control-volume solutions of phase-change problems. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals **24**(2), S. 161–180, DOI 10.1080/10407799308955887 (1993).
- vonWolfersdorf, J.: Effect of coolant side heat transfer on transpiration cooling. Heat Mass Transfer **41**(4), S. 327–337, DOI 10.1007/s00231-004-0549-x (2005).
- Vries, D.D.: Simultaneous transfer of heat and moisture in porous media. Transactions, American Geophysical Union **39**, S. 909–916, DOI 10.1029/TR039i005p00909 (1958).
- Vu, T.: Influence of pore size distribution on drying behaviour of porous media by a continuous model. Dissertation, Otto-von-Guericke-Universität Magdeburg (2006).
- Waite, M.: Numerical investigation of two-phase fluid flow and heat transfer in porous media heated from the side. Numerical Heat Transfer, Part A: Applications **35**(3), S. 271–290, DOI 10.1080/104077899275245 (1999).
- Wakao, N., Kaguei, S., Funazkri, T.: Effect of fluid dispersion coefficients on particle-to-fluid heat transfer coefficients in packed beds: Correlation of Nusselt numbers. Chemical Engineering Science **34**(3), S. 325–336, DOI 10.1016/0009-2509(79)85064-2 (1979).
- Wang, C.: A fixed-grid numerical algorithm for two-phase flow and heat transfer in porous media. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals **32**(1), S. 85–105, DOI 10.1080/10407799708915000 (1997).
- Wang, C., Cheng, P.: A multiphase mixture model for multiphase, multicomponent transport in capillary porous media. Part I: Model development. International Journal of Heat and Mass Transfer **39**(17), S. 3607–3618, DOI 10.1016/0017-9310(96)00036-1 (1996b).

- Wang, C., Cheng, P.: Multiphase flow and heat transfer in porous media. In: *Advances in Heat Transfer*. vol 30, S. 93–182, DOI 10.1016/S0065-2717(08)70251-X (1997).
- Wang, C., Beckermann, C., Fan, C.: Numerical study of boiling and natural convection in capillary porous media using the two-phase mixture model. *Numerical Heat Transfer* **26**(4), S. 375–398, DOI 10.1080/10407789408955999 (1994).
- Wang, C.Y.: Comment on a look at the multiphase mixture model for PEM fuel cell simulations. *IEEE-ECS Electrochemical and Solid State Letters* **12**(2), S. S2, DOI 10.1149/1.3041157 (2009).
- Wang, C.Y., Beckermann, C.: A two-phase mixture model of liquid-gas flow and heat transfer in capillary porous media - I. Formulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer* **36**(11), S. 2747–2758, DOI 10.1016/0017-9310(93)90094-M (1993).
- Wang, G., Xie, Z., Tan, Y.: Nucleate pool boiling of pure liquids and binary mixtures: Part I - Analytical model for boiling heat transfer of pure liquids on smooth tubes. *Journal of Thermal Science* **5**(2), S. 104–111, DOI 10.1007/s11630-996-0006-x (1996c).
- Wang, G., Xie, Z., Tan, Y.: Nucleate pool boiling of pure liquids and binary mixtures: Part II - Analytical model for boiling heat transfer of binary mixtures on smooth tubes and comparison of analytical models for both pure liquids and binary mixtures with experimental data. *Journal of Thermal Science* **5**(3), S. 201–209, DOI 10.1007/BF02653186 (1996d).
- Wang, J., Shi, J.: A discussion of boundary conditions of transpiration cooling problems using analytical solution of LTNE model. *ASME Journal of Heat Transfer* **130**(1), DOI 10.1115/1.2780188 (2008).
- Wang, J., Wang, H.: A discussion of transpiration cooling problems through an analytical solution of local thermal nonequilibrium model. *Journal of Heat Transfer* **128**(10), S. 1093–1098, DOI 10.1115/1.2345434 (2006a).
- Wang, Y., Wang, C.Y.: A Nonisothermal, Two-Phase Model for Polymer Electrolyte Fuel Cells. *Journal of The Electrochemical Society* **153**(6), S. A1193–A1200, DOI 10.1149/1.2193403 (2006b).
- Wang, Y., Wang, C.Y.: Two-phase Transients of Polymer Electrolyte Fuel Cells. *Journal of The Electrochemical Society* **154**(7), S. B636–B643, DOI 10.1149/1.2734076 (2007).
- Wei, K., Wang, J., Mao, M.: Model discussion of transpiration cooling with boiling. *Transport in Porous Media* **94**, S. 303–318, DOI 10.1007/s11242-012-0006-0 (2012).
- Weisensee, T.: Erweiterung und Inbetriebnahme eines experimentellen Prüfstands zur Verdampfung in porösen Materialien. Diplomarbeit, Hochschule Würzburg-Schweinfurt (2014).
- Whitaker, S.: Simultaneous heat, mass, and momentum transfer in porous media: A theory of drying. *Advances in Heat Transfer* **13**, S. 119–203, DOI 10.1016/S0065-2717(08)70223-5 (1977).
- Whitaker, S.: Heat and mass transfer in granular porous media. *Advances in Drying* **1**, S. 23–61 (1980).
- Whitaker, S.: Flow in porous media II: The governing equations for immiscible, two-phase flow. *Transport in Porous Media* **1**(2), S. 105–125, DOI 10.1007/BF00714688 (1986).
- Wormald, C., Lewis, E., Hutchings, D.: Excess enthalpies of gaseous mixtures of n-alkanes. *The Journal of Chemical Thermodynamics* **11**(1), S. 1 – 12, DOI 10.1016/0021-9614(79)90076-4 (1979).

- Wormald, C.J.: A differential-flow mixing calorimeter. The excess enthalpy of methane + benzene, methane + cyclohexane, and benzene + cyclohexane. *The Journal of Chemical Thermodynamics* **9**(9), S. 901 – 910, DOI 10.1016/0021-9614(77)90175-6 (1977).
- Wyckoff, R.D., Botset, H.: The Flow of Gas-Liquid Mixtures Through Unconsolidated Sands. *Physics* **7**, S. 325–345, DOI 10.1063/1.1745402 (1936).
- Xin, C., Rao, Z., You, X., Song, Z., Han, D.: Numerical investigation of vapor-liquid heat and mass transfer in porous media. *Energy Conversion and Management* **78**, S. 1 – 7, DOI 10.1016/j.enconman.2013.10.047 (2014).
- Xue, G.: Numerical methods for multiphysics, multiphase, and multicomponent models for fuel cells. Dissertation, The Pennsylvania State University (2008).
- Young, T.: An Essay on the Cohesion of Fluids. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London* **95**, S. 65–87, DOI 10.1098/rstl.1805.0005 (1805).
- Yuki, K., Abei, J., Hashizume, H., Toda, S.: Numerical investigation of thermofluid flow characteristics with phase change against high heat flux in porous media. *Journal of heat transfer* **130**(1), S. 012,602–1–012,602–12, DOI 10.1115/1.2780175 (2008).
- Yuki, K., Hashizume, H., Toda, S.: Key issues to enable high heat flux removal exceeding 10 MW/M<sup>2</sup> by use of metal porous media as a latent heat-transfer device. *Special Topics & Reviews in Porous Media - An International Journal* **1**(1), S. 1–13, DOI 10.1615/SpecialTopicsRevPorousMedia.v1.i1.10 (2010).
- Zhao, T., Liao, Q.: Mixed Convective Boiling Heat Transfer in a Vertical Capillary Structure Heated Asymmetrically. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* **13**(3), S. 302 – 307, DOI 10.2514/2.6459 (1999).
- Zhao, T., Cheng, P., Wang, C.: Buoyancy-induced flows and phase-change heat transfer in a vertical capillary structure with symmetric heating. *Chemical Engineering Science* **55**, S. 2653 – 2661, DOI 10.1016/S0009-2509(99)00530-8 (2000).
- Zhong, W., Tao, G., Li, X., Kawashima, K., Kagawa, T.: Determination of flow rate characteristics of porous media using charge method. *Flow Measurement and Instrumentation* **22**(3), S. 201 – 207, DOI 10.1016/j.flowmeasinst.2011.02.002 (2011).