

TECHNISCHE
UNIVERSITÄT
WIEN
Vienna University of Technology

D I P L O M A R B E I T

Reaktionsmechanismen zur Simulation
der motorischen Verbrennung von Biogasen

Ausgeführt am Institut für
Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und technische Biowissenschaften
der Technischen Universität Wien

unter der Anleitung von Ao. Prof. Dipl.-Ing. Dr. techn. Franz Winter

durch

Robert Bardolf, BSc. (0525005)
Stegmayergasse 98
1120 Wien

Wien, 22. November 2013

Robert Bardolf

Danksagung

Zuallererst möchte ich meinen Eltern danken. Sie haben mir, gemeinsam mit meinem Bruder, jenen familiären Halt gegeben, der die Bewältigung großer Herausforderungen – und ein Studium ist definitiv eine solche Herausforderung – erst möglich macht. Ohne Euch wäre ich sicherlich nie in die Lage gekommen, studieren zu dürfen, und dieses Studium nun auch erfolgreich abzuschließen. Außerdem möchte ich meinem Vater für das genaue Korrekturlesen meiner Diplomarbeit danken.

Besonderen Dank verdient mein Bruder Martin, der mich in privaten und emotionalen Problemen stets unterstützt und gut beraten hat. Nicht vermissen möchte ich auch unsere Diskussionen über "Gott und die Welt".

Für die Betreuung der Diplomarbeit und die freundliche Aufnahme in der Arbeitsgruppe "Chemische Reaktionstechnik und Verbrennung" danke ich Professor Franz Winter. Ich danke ihm auch dafür, dass ich bereits im Rahmen der Diplomarbeit – auch aktiv – an Konferenzen teilnehmen durfte, was keine Selbstverständlichkeit ist.

Meinen Kolleginnen und Kollegen der Arbeitsgruppe und ihrem Umfeld, Elke, Kimia, Amon, Benjamin, Hessem, Petr, Saman und Stefan, danke ich für die gemeinsam verbrachte Zeit, sowohl in der Arbeitsgruppe, als auch bei diversen Freizeitaktivitäten von Laufrunden auf der Ringstraße bis zu Ausflügen nach Brno.

Ich möchte auch meinen Kolleginnen und Kollegen danken, die mich durch das Studium begleitet haben – sei es bei der Prüfungsvorbereitung, auf der Fachschaft Chemie oder der HTU, insbesondere Daniel, Thomas, René, Bianka, Peter und Ulf.

Ein ganz besonders großes Danke hat sich meine wunderbare Freundin Friederike verdient, die mich während der Diplomarbeit einerseits ertragen hat, und mich andererseits unermüdlich immer wieder aufgebaut und motiviert hat, wenn die Arbeit übermächtig schien, und ich mich allzu sehr an Douglas Adams' *The Restaurant At The End Of The Universe* erinnert fühlte:

There is a theory which states that if ever anybody discovers exactly what the Universe is for and why it is here, it will instantly disappear and be replaced by something even more bizarre and inexplicable.

There is another theory which states that this has already happened.

DANKE

Kurzfassung

Im Rahmen des FFG-Projekts "BioFlame - Numerische Optimierung der Biogas-Verbrennung in Schiffsmotoren" ist ein optimierter Großgasmotor im Magerbetrieb zu entwickeln. Die dazu notwendigen CFD-Simulationen reaktiver Strömungen benötigen einen Reaktionsmechanismus für die chemische Kinetik der Verbrennung. Um die Rechenzeit möglichst gering zu halten, wird ein reduzierter Mechanismus zu verwenden sein, der dennoch die Vorgänge der Verbrennung möglichst genau simuliert.

Die vorliegende Diplomarbeit erfasst und diskutiert publizierte Reaktionsmechanismen für die magere Verbrennung von Methan-Propan-Mischungen. Es werden Mechanismen bei relevanten Bedingungen systematisch mittels Parametervariation im Hinblick auf ihr Verhalten bei der Berechnung von Zündverzugszeit und laminarer Flammengeschwindigkeit getestet und mögliche Kandidaten zur weiteren Reduktion herausgearbeitet.

Die 25 gefundenen Reaktionsmechanismen wurden hinsichtlich der durch sie abgedeckten Spezies inklusive der NO_x -Bildung bei mageren Verbrennungsbedingungen, ihrer Auslegung für möglichst hohe Drücke bis über 100bar und der Abdeckung des Temperaturbereichs von 700-1000K vor der Zündung bewertet. Ausgehend von der Sammlung an Reaktionsmechanismen wurden Zündverzugszeiten und laminare Flammengeschwindigkeiten für die vier bzw. drei am meisten versprechenden Mechanismen NUIG NGM3 (nur Zündverzugszeiten), POLIMI C<4, SAN DIEGO+NOX und USC-II berechnet.

Für Zündverzugsimulationen wurde ein 0-dimensionaler, isochorer, adiabater homogener Batchreaktor modelliert. Der Druck wurde zwischen 70bar und 140bar in 10bar-Schritten, die Temperatur zwischen 700K und 1000K in 25K-Schritten variiert. Als Brenngas wurden zwischen reinem Methan und reinem Propan zwölf Methan-Propan-Mischungen angenommen.

Die Abhängigkeit der Zündverzugszeit von Druck, Brennstoffzusammensetzung und Temperatur wurde betrachtet. Es wurde eine Verkürzung der Zündverzugszeit mit steigendem Druck und steigendem Propangehalt berechnet. Die vier Mechanismen weisen besonders zwischen 800K und 900K eine unterschiedliche Temperaturabhängigkeit auf, sobald Propan im Brenngas vorliegt. Manche Mechanismen ergeben für hohe Propangehalte einen ausgeprägten negativen Temperaturkoeffizienten. Daraus resultieren große Unterschiede der berechneten Zündverzugszeiten bei mittleren und niedrigen Temperaturen.

Die laminare Flammengeschwindigkeit wurde mit dem Modell einer 1-dimensionalen freien Flamme berechnet. Als Umgebungsbedingungen wurden Drücke von 70bar und 100bar, Temperaturen von 700K, 850K und 1000K für Methan und drei Methan-Ethan-Propan-Mischungen angenommen. Bei der Berechnung der Flammengeschwindigkeit wurden keine besonders großen Unterschiede zwischen den Mechanismen gefunden. Die laminare Flammengeschwindigkeit nimmt bei allen getesteten Mechanismen mit steigender Temperatur zu.

Abstract

The FFG project "BioFlame - Numerical optimization of biogas combustion in marine engines" intends to supply the basic information needed in the development of an optimized large gas-fuelled lean engine. CFD simulations of reactive flows require some chemical kinetic reaction mechanism. In order to keep calculation times as short as possible, a reduced mechanism seems highly desirable. On the other hand, such a mechanism must simulate combustion as accurately as possible. This work investigates various recently published chemical kinetic reaction mechanisms and calculates the ignition delay time and laminar flame speed for relevant conditions.

This master thesis discusses published reaction mechanisms for the combustion of lean methane/propane mixtures and examines their performance under engine-relevant conditions. In an assessment a number of suitable candidates for further reduction emerge.

25 reaction mechanisms were evaluated with a view to the species covered, which included NO_x formation under lean conditions, their design for high pressures of more than 100bar and their covering of a temperature range of 700K to 1000K before ignition. The mechanisms yielding the most promising results were NUIG NGM3, POLIMI C<4, SAN DIEGO+NOX and USC-II. For this selection, a systematic parameter variation was used in calculating ignition delay times and laminar flame speeds.

The model calculating ignition delay times was a zero-dimensional isochoric adiabatic homogeneous batch reactor. The pressure was varied from 70bar to 140bar in 10bar increments. The temperature was varied between 700K and 1000K in 25K increments. Twelve binary methane-propane mixtures ranging from pure methane to pure propane were assumed as fuel gases. The dependence of ignition delay time on pressure, fuel composition and temperature was examined. Both increasing pressure and increasing the amount of propane in the mixture have been found to reduce ignition delay times. The four mechanisms have shown significantly different dependence on varying temperature, especially between 800K and 900K, as soon as the fuel contains propane. A high amount of propane in the mixture has resulted in a pronounced negative temperature coefficient with some mechanisms. This results in considerable differences in the calculated ignition delay times at medium and low temperatures.

The laminar flame speed was calculated using a one-dimensional freely propagating flame as a model. The basic conditions were pressures of 70bar and 100bar, temperatures of 700K, 850K and 1000K, and four fuel gases: methane and three methane/ethane/propane mixtures. On the whole, the results provided by the mechanisms show only little difference to each other. Laminar flame speed rises with temperature.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung.....	1
1.1	Aufgabenstellung und Zielsetzung	2
2	Grundlagen	3
2.1	Biogas	3
2.1.1	Herstellung	3
2.1.2	Verwendung	6
2.1.3	Reinigung und Aufbereitung	6
2.1.4	Netzeinspeisung	7
2.1.5	Wobbeindex	8
2.2	Verbrennungsmotoren.....	9
2.2.1	Viertaktmotor	9
2.2.2	Zweitaktmotor	10
2.2.3	Funkenzündung und Selbstzündung	11
2.2.4	Kreisprozesse	11
2.2.5	Klopfen	13
2.3	Thermodynamische und kinetische Grundlagen.....	14
2.3.1	Mischungszusammensetzung.....	14
2.3.2	Chemische Thermodynamik.....	14
2.3.3	Chemische Kinetik	18
2.4	Verbrennung.....	20
2.4.1	Allgemeines	20
2.4.2	Luftzahl und Äquivalenzverhältnis	21
2.4.3	Laminare Flammgeschwindigkeit	21
2.4.4	Zündverzugszeit.....	21
2.4.5	Reaktionsmechanismen	22
2.4.6	Analytik zur Validierung von Verbrennungsmechanismen	26
3	Simulation.....	29
3.1	Simulationssoftware.....	29
3.2	Steifheit und Lösungsverfahren	30
3.3	Beschreibung der Simulationen	30
3.3.1	Zündverzugssimulationen	33
3.3.2	Flammgeschwindigkeitssimulationen	35
4	Ergebnisse und Diskussion	37
4.1	Ergebnisse der Literaturrecherche zu Mechanismen.....	37

4.2	Zündverzugszeiten.....	41
4.2.1	Zündgrenzen und Artefakte	41
4.2.2	Abhängigkeit der Zündverzugszeit von der Luftzahl	42
4.2.3	Druckabhängigkeit der Zündverzugszeit	44
4.2.4	Abhängigkeit der Zündverzugszeit vom Propangehalt.....	51
4.2.5	Temperaturabhängigkeit der Zündverzugszeit	56
4.2.6	Zusammenfassung der Zündverzugsimulationen	62
4.3	Laminare Flammengeschwindigkeit.....	62
4.4	Bewertung der Ergebnisse	65
4.5	Vorschlag eines Mechanismus zur Anpassung und Reduktion	66
5	Zusammenfassung.....	67
6	Ausblick	69
7	Nomenklatur	71
7.1	Formelzeichen	71
7.2	Indices und Erweiterungszeichen.....	72
7.3	Abkürzungen und chemische Verbindungen	73
8	Literatur- und Quellenverzeichnis	74
9	Abbildungsverzeichnis.....	78
10	Tabellenverzeichnis	80
11	Anhang.....	81
11.1	Vorversuch Zündverzugszeit τ [s]	81
11.2	Parametervariation Zündverzugszeit τ [s].....	82
11.2.1	Abhängigkeit der Zündverzugszeit τ [s] von der Luftzahl λ [-].....	101
11.2.2	Druckabhängigkeit der Zündverzugszeit τ [s].....	103
11.2.3	Abhängigkeit der Zündverzugszeit τ [s] vom Propangehalt $X_{C_3H_8}$ [-]	113
11.2.4	Temperaturabhängigkeit der Zündverzugszeit τ [s]	117
11.3	Parametervariation laminare Flammengeschwindigkeit s_L [cm/s]	123

1 Einleitung

Bei vielen Aufgabenstellungen sind Simulationen in immer stärkerem Ausmaß anzutreffende Hilfsmittel, wenn es darum geht, im Vorfeld von Versuchen oder dem Bau von Prototypen vielversprechende Bedingungen auszuwählen. So können die Forschungs- und Entwicklungskosten so gering wie möglich gehalten werden. Darüber hinaus können Projekte mit Hilfe von Simulationen wesentlich beschleunigt werden, da weniger Experimente nötig sind, und Simulationen schneller und gut automatisierbar ablaufen. Ebenso kann der zeit- und kostenintensive Bau und die Prüfung von Prototypen auf ein Minimum reduziert werden. Weiters wird, insbesondere bei der Simulation chemischer Reaktionsmechanismen, daran gearbeitet, auf Versuche möglichst ganz zu verzichten und aussagekräftige Ergebnisse allein durch Simulation und Berechnung zu erhalten.

Die Verbrennungssimulation, also die Simulation der Kinetik chemischer Reaktionen bei der Verbrennung, hat sich in den letzten Jahrzehnten rasant entwickelt, wie man am Beispiel publizierter Reaktionsmechanismen sehen kann: Umfasste GRI-Mech 1.2 [1], entwickelt für die Erdgasverbrennung unter Berücksichtigung der C1- und C2-Chemie im Jahre 1994 38 Spezies in 190 Reaktionsgleichungen, so wuchsen publizierte Reaktionsmechanismen auf die beeindruckende Größe von 466 Spezies in 14631 Gleichungen im Jahre 2010 an. Dabei handelt es sich um einen Reaktionsmechanismus (POLIMI CRECK full) [2], der die Verbrennung und Pyrolyse von Kohlenwasserstoffen bis C16 sowie von Alkoholen, Estern und Ersatzbrennstoffen beschreibt.

Dies ist nicht nur der Entwicklung von immer leistungsfähigeren Computern zu verdanken, sondern auch dem gestiegenen Interesse am Verständnis von Verbrennungsreaktionen. Obwohl Verbrennung eine sehr alte Technologie ist – die Menschheit nutzt sie seit mehr als einer Million Jahren – ist sie immer noch immens wichtig: Ca. 90% der weltweit bereitgestellten Energie, sei es zum Kochen auf offenem Feuer, in Fahrzeugen oder zur Elektrizitätserzeugung, beruht auf Verbrennungsvorgängen [3]. Dementsprechend gravierend sind auch die Auswirkungen der Verbrennung: Kohlenstoffdioxid (CO_2), ein Endprodukt stöchiometrischer Verbrennung kohlenstoffhaltiger Brennstoffe, spielt als Treibhausgas eine wichtige Rolle beim Klimawandel. Andere Verbrennungsprodukte haben äußerst nachteilige Auswirkungen auf Mensch und Umwelt: Ruß, unter anderem aus KFZ-Abgasen, ist für einen Teil der Feinstaubemissionen verantwortlich, Stickoxide (NO_x) sind giftig und begünstigen die Bildung von Sommersmog und bodennahem Ozon, Kohlenstoffmonoxid (CO) führt zu Rauchgasvergiftungen und unverbrannte Kohlenwasserstoffe sind zumeist auch giftig. Darüber hinaus senkt die Emission von Ruß, Kohlenstoffmonoxid und unverbrannten Kohlenwasserstoffen die Effizienz der Verbrennung. Jede, auch kleine, Verbesserung der Verbrennung nützt deswegen in doppeltem Maße: Einerseits werden weniger gesundheitsschädliche Substanzen emittiert, und andererseits werden Ressourcen durch Effizienzsteigerung geschont.

Die vorliegende Arbeit entstand im Zuge der von der Österreichischen Forschungsförderungsgesellschaft (FFG) geförderten Projekts "BioFlame - Numerische Optimierung der Biogas-Verbrennung in Schiffsmotoren". Im Rahmen dieses Projekts ist ein optimierter Großgasmotor im Magerbetrieb zu entwickeln, wofür am Institut für Fahrzeugantriebe und Automobiltechnik (IFA) CFD-Simulationen reaktiver Strömungen durchgeführt werden. Um diese Simulationen durchführen zu können, wird ein Reaktionsmechanismus für die chemische Kinetik der Verbrennung benötigt, der in die CFD-Rechnungen aufgenommen wird, um die Verbrennung im Motor zu simulieren. Dieser Mechanismus ist am Institut für Verfahrenstechnik, Umwelttechnik und technische Biowissenschaften zu erstellen. Die Entwicklung dieses Mechanismus befindet sich in einem Spannungsfeld zwischen größtmöglicher

Genauigkeit und wirtschaftlicher Rechenzeit: Je detaillierter der Verbrennungsmechanismus würde, desto genauer könnten zuvor experimentell bestimmte Daten reproduziert werden. Andererseits würde die Berechnungszeit, auch auf leistungsfähigen Computern, unwirtschaftlich lange dauern, da der Reaktionsmechanismus im Zuge der CFD-Simulation in jedem Gitterpunkt und für alle Zeitschritte gelöst werden muss. Das andere Extrem ist, zugunsten der Berechnungsgeschwindigkeit auf die Modellierung der chemischen Reaktion soweit zu verzichten, dass man sich auf Einschritt-Reaktionen beschränkt. Das hat den Nachteil, dass Verbrennungsreaktionen nur unter allergrößter Vereinfachung als Einschritt-Reaktionen betrachtet werden können, und die erhaltenen Ergebnisse somit nicht aussagekräftig wären. Eine Extrapolation führt bei einem zu stark reduzierten Mechanismus ebenfalls zu nicht aussagekräftigen Ergebnissen. Es ist bekannt, dass die Reaktionspfade und die Produkte von Verbrennungsprozessen sehr stark von der Stöchiometrie und Temperatur abhängen, man denke zum Beispiel an die Lambda-Sonde im Auto, mit deren Hilfe die Stöchiometrie der Verbrennung in einem optimalen Bereich geregelt wird. Stöchiometrie und Temperatur sind im Zylinder eines Motors nicht homogen, weshalb CFD-Simulationen nötig sind.

1.1 Aufgabenstellung und Zielsetzung

Ziel der vorliegenden Diplomarbeit ist es, publizierte Reaktionsmechanismen für die magere Verbrennung von Methan-Propan-Mischungen zu erfassen und bei relevanten Bedingungen systematisch mittels Parametervariation zu testen. Auf Basis der Simulationsergebnisse sind geeignete Kandidaten für die weiterführende Entwicklung eines geeigneten Mechanismus und dessen Reduktion im Rahmen des Projekts vorzuschlagen.

Die gefundenen Reaktionsmechanismen sind hinsichtlich der durch sie abgedeckten Spezies inklusive der NO_x -Bildung bei mageren Verbrennungsbedingungen, ihrer Auslegung für möglichst hohe Drücke bis über 100bar und der Abdeckung des Temperaturbereichs von 700-1000K vor der Zündung zu bewerten.

Ausgehend von der Sammlung an Reaktionsmechanismen sind mit einigen vielversprechenden Mechanismen laminare Flammgeschwindigkeiten und Zündverzugszeiten unter relevanten Bedingungen zu berechnen, und diese miteinander zu vergleichen. Basierend auf den Simulationsergebnissen sind Mechanismen zur weiteren Entwicklung vorzuschlagen.

2 Grundlagen

2.1 Biogas

Unter Biogas versteht man ein "Brenngas, das aus Biomasse und/oder aus dem biologisch abbaubaren Teil von Abfällen hergestellt wird, durch Reinigung Erdgasqualität erreichen kann und für die Verwendung als Biokraftstoff bestimmt ist" [4].

2.1.1 Herstellung

Biogas entsteht durch anaerobe Fermentation aus organischen Substraten, die Rest- oder Abfallstoffe sein können, wie beispielsweise Gülle, organisch stark belastete Abwässer, Klärschlamm, oder eigens dafür hergestellte Substrate wie Mais- oder Grassilage.

Die Bewertung des Substrats erfolgt anhand des organischen Trockenmassegehalts (oTM), der Abbaubarkeit der Verbindungen durch Mikroorganismen, der Konzentration eventuell vorhandener Hemmstoffe wie Tenside, des Feststoffgehalts, der Temperatur und des Nährstoffangebots. Ideal ist für Nährstoffe ein C:N:P-Verhältnis von 100..200:4:1 [5]. Die Korngrößenverteilung ist ebenfalls zu berücksichtigen, da der Abbau von der Oberfläche der Partikel her erfolgt. Häufig werden mesophile Bakterien eingesetzt, die Temperaturen um 38°C bevorzugen, und thermophile Bakterien, die sich bei Temperaturen um 57°C ideal entwickeln.

Der *anaerobe Abbau* erfolgt in mehreren Stufen [5]:

1. Im Zuge der Hydrolyse wird das Ausgangsmaterial von hydrolytischen Bakterien in Monomere organischer Makromoleküle zerlegt. Dieser Schritt ist geschwindigkeitsbestimmend, insbesondere für die Hydrolyse von Cellulose und Hemicellulose.
2. Bei der Säurebildung durch fermentative Bakterien werden die Monomere zu Essigsäure, anderen organischen Säuren und weiteren kleinen Molekülen wie Alkoholen und CO₂ sowie H₂O und H₂ abgebaut.
3. Essigsäure bildende Bakterien bilden aus den höheren organischen Säuren und Alkoholen Essigsäure, CO₂ und H₂.
4. Zuletzt bauen Methan bildende Bakterien die entstandene Essigsäure zu CH₄ + CO₂ ab. Ein kleinerer Anteil (ca. 30%) des Biogases entsteht aus der Verbindung von H₂ und gelöstem CO₂.

In Biogasanlagen trachtet man danach, den oben beschriebenen Prozess möglichst kostengünstig und nahe an den Idealbedingungen für die Biogasbildung zu betreiben. Dazu muss die auf das zur Verfügung stehende Substrat abgestimmte Gärtechnik, eine geeignete Substratvorbereitung sowie eine Biogasaufbereitung und Speicherung unter Berücksichtigung der geplanten Gasnutzung gewählt werden. In Abbildung 1 ist das Blockschema einer Biogasanlage zu sehen. Auf die Bestandteile einer Biogasanlage wird im Folgenden kurz eingegangen.

Der *Fermenter* besteht prinzipiell aus einem gasdichten Behälter aus bewehrtem Beton oder Edelstahl, der oft mit einer Kunststoffolie zur Gasspeicherung, die gleichzeitig das Fermenterdach bildet, ausgestattet ist. Weitere Bestandteile des Fermenters sind eine Heizung (idealerweise Abwärme, z.B. von einem nachgeschalteten Blockheizkraftwerk), eine eingebaute Mischvorrichtung, sowie Vorrichtungen zur Substrataufbereitung, Beschickung, für den Austrag, und eventuell Rückhalt

der Bakterien. Der aus dem Betrieb resultierende Energiebedarf einer Biogasanlage wird nach [5] mit 22-30% der in Form von Biogas produzierten Bruttoenergiemenge angegeben.

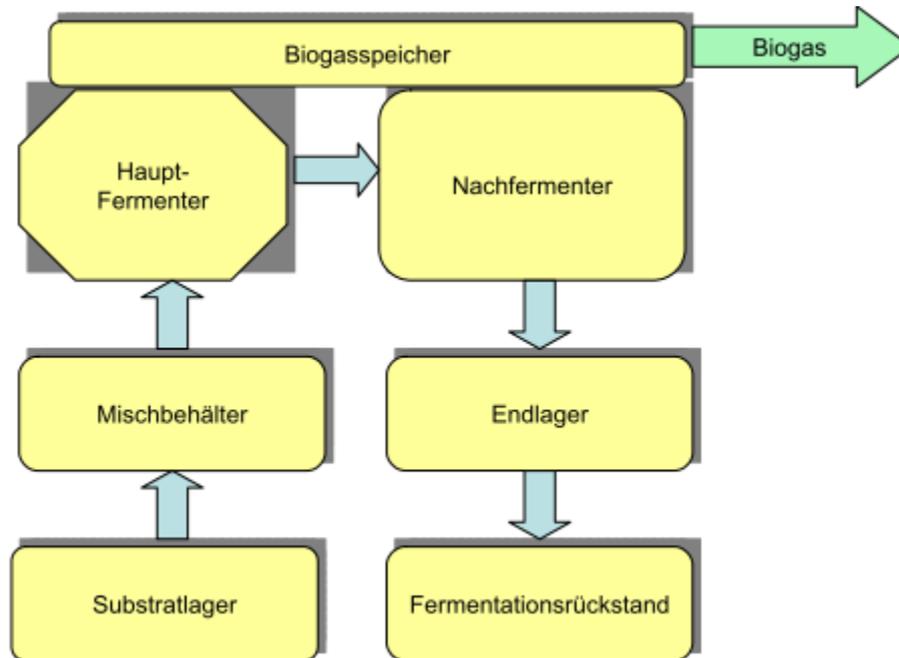


Abbildung 1: Blockschema einer Biogasanlage [6]

Neben den Gasleitungen und Speichern müssen alle Teile der Anlage, in denen Fermentation und Nachfermentation stattfinden, gasdicht sein. Damit werden Methanemissionen zu verhindern, die nicht nur ein potentiell Sicherheitsrisiko darstellen: CH_4 ist auch ein stark wirksames Treibhausgas ist.

Das Substrat wird von Störstoffen wie Steinen befreit und im Falle der Flüssigkeitsvergärung durch das sogenannte Anmischen eine pumpfähige Masse hergestellt. Bei hohem Feststoffanteil wird die Oberfläche durch Zerquetschen oder Zerfasern vergrößert. Eine eigene Hygienisierung des Substrats ist meist nicht erforderlich, da das allgemeine Milieu der Gärung, speziell die Hydrolyse, diese Aufgabe übernimmt. Kurzschlussströmungen sind deshalb, ganz besonders bei pathogenen Inhaltsstoffen des Substrats, zu vermeiden. Besonders gut eignen sich dazu die technisch schwer realisierbare Pfropfenströmung oder Reaktorkaskaden.

Häufige Gärtechniken sind Nassfermentation, Anaerobfilterverfahren, Schlammbedtrektorverfahren und der Kontaktprozess.

Die meisten Biogasanlagen sind *Nassfermenter*. Sie sind entweder voll durchmischt oder als Pfropfenstrom-Reaktoren ausgeführt. Sie können auch zur Co-Vergärung von zerkleinerten Feststoffen und Flüssigkeiten verwendet werden. Die Co-Vergärung ist der reinen Flüssigkeitsvergärung insofern überlegen, als weniger Prozesswasser erwärmt werden muss.

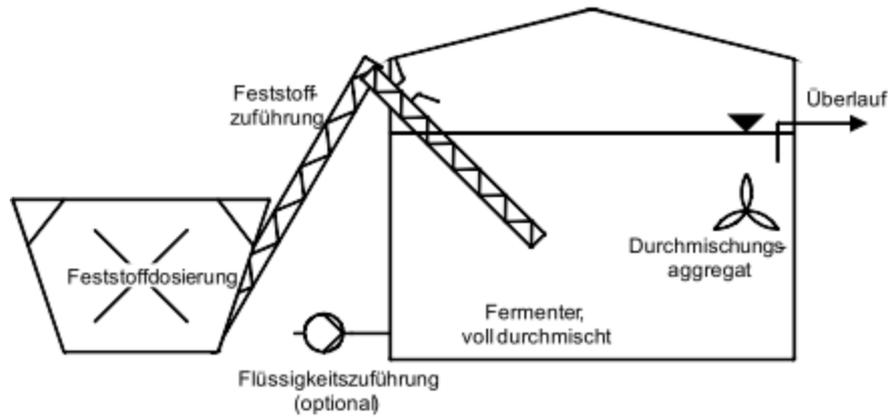


Abbildung 2: Schematische Darstellung einer Nassvergärung [5]

Bei *Anaerobfiltern* sitzen die Bakterien auf einem Trägermaterial wie Kunststoff, Holz oder einem mineralischen Träger. Das verhindert das Auswaschen der Mikroorganismen und erhöht die Artenvielfalt, was zu einer höheren Stabilität gegen schwankende Prozessparameter führt.

Beim *Kontaktprozess* findet die Vergärung in einem homogen durchmischten Reaktor statt. Die mit der Fermentationsbrühe ausgetragenen Bakterien werden von der flüssigen Phase abgetrennt und wieder in den Fermenter rückgeführt.

Schlammbedreaktoren wie der UASB-Reaktor (upstream anaerobic sludge blanket) sind besonders geeignet für stark belastete Abwässer ohne nennenswerten Feststoffanteil. Die Mikroorganismen bilden hier kleine Klumpen oder sind auf Trägerpellets fixiert und schweben in der Brühe wegen der Flüssigkeitsströmung von unten nach oben. Einbauten lenken die Strömung so, dass ein Austrag der Bakterien verhindert wird.

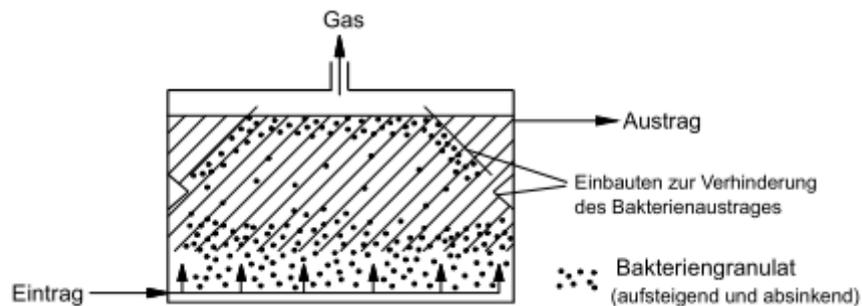


Abbildung 3: Schema eines UASB-Reaktors [5]

Das Gas gelangt aus dem Fermenter in einen *Gasspeicher*, der kurzfristige Differenzen zwischen Produktion und Nachfrage ausgleicht. Seine Kapazität beträgt in der Regel ein Volumen, das dem Gasverbrauch von 0,5-12h entspricht. Er ist oft als Foliengasspeicher, der gleichzeitig das Fermenterdach bildet, ausgeführt. Es ist auch möglich, externe Foliengasspeicher mit einer Kapazität von 100-2000m³ zu verwenden. Von der Ausführung als Nassgasometer mit Glocke und einer Kapazität von 50-500m³ wird in der Literatur abgeraten: Einerseits müssten Vorkehrungen gegen Korrosion getroffen werden, und andererseits träten sowohl Wärme- als auch Gasverluste auf. Ebenfalls möglich ist eine Speicherung in Drucktanks oder Druckgasflaschen für Fahrzeuge bei 200-300bar. Dabei werden alle anderen Gaskomponenten als CH₄ möglichst vollständig entfernt, um die Wirtschaftlichkeit und Reichweite zu erhöhen und außerdem Korrosion und Vergiftung des Abgaskatalysators zu verhindern.

2.1.2 Verwendung

Die nachstehende Abbildung zeigt typische Verwendungsmöglichkeiten von Biogas. Neben der (groben) Reinigung und Verwendung in einem Blockheizkraftwerk (BHKW) zur Erzeugung von Strom und Wärme sowie der direkten Wärmebereitstellung ist die Einspeisung in die bereits existierenden, gut ausgebauten Gasnetze nach erfolgter Feinreinigung und Konditionierung eine interessante Verwendungsmöglichkeit. "Biomethan", von allen störenden Komponenten gereinigtes Gas mit >96% CH₄, kann auch als Kraftstoff für Fahrzeuge verwendet werden.

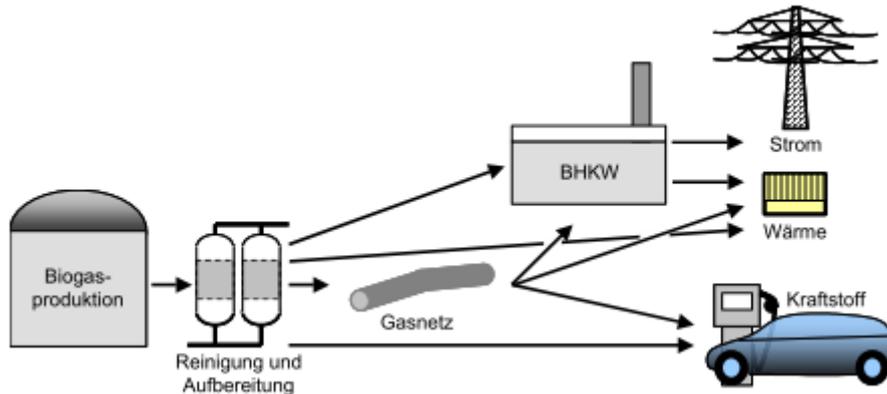


Abbildung 4: Typische Verwendungsmöglichkeiten von Biogas [5]

2.1.3 Reinigung und Aufbereitung

Die Zusammensetzung und brenntechnische Kenndaten von unaufbereitetem Biogas, bezogen auf den Normzustand von 0°C und 1013,25mbar, sind in Tabelle 1 zusammengefasst. In den meisten Fällen muss eine Gasaufbereitung und Reinigung stattfinden, um störende Komponenten abzutrennen.

Tabelle 1: Zusammensetzung und Kenndaten von unbehandeltem Biogas aus fermentativen Prozessen [7]

Symbol	Einheit	Name	Wertebereich
X_{CH_4}	[% v/v]	Methangehalt	40..80
X_{CO_2}	[% v/v]	Kohlenstoffdioxidgehalt	14..55
X_{N_2}	[% v/v]	Stickstoffgehalt	0..20
X_{O_2}	[% v/v]	Sauerstoffgehalt	0..2
X_{H_2}	[% v/v]	Wasserstoffgehalt	0..1
X_{H_2S}	[% v/v]	Schwefelwasserstoffgehalt	0..2
X_{NH_3}	[% v/v]	Ammoniakgehalt	0..1
ρ_{FCKW}	[mg/m ³]	Partialdichte fluorierter Chlorkohlenwasserstoffe	< 3
rF	[%]	relative Feuchte	100
H_{sv}	[MJ/m ³]	Volumenbezogener Brennwert	21,6..33,48
W_{sv}	[MJ/m ³]	Volumenbezogener Oberer Wobbeindex	21,6..39,96
d	[-]	relative Dichte	0,7..1,2

2.1.3.1 Entschwefelung

H₂S ist, wie sein Verbrennungsprodukt SO₂, besonders kritisch. Beide führen zu Korrosion und sind Katalysatorgifte. Daher muss H₂S vor allen Anwendungen abgeschieden werden.

Man kann H_2S unter Zumischung von wenig Luft mittels *Thiobacillus* abtrennen. Geringe Mengen H_2S lassen sich auch mittels Sulfidfällung durch Zudosieren von FeCl_2 oder FeCl_3 in die Fermenterbrühe abscheiden. Zur Feinentschwefelung werden adsorptive Verfahren an Aktivkohle eingesetzt. Darüber hinaus können die unter 2.1.3.3 beschriebenen Waschverfahren eingesetzt werden.

2.1.3.2 Entfeuchtung

Da das Rohbiogas mit 100% relativer Feuchte anfällt, ein Kondensieren von Wasser in den Gasleitungen aus Korrosionsschutzgründen aber unbedingt zu vermeiden ist, muss die Gasfeuchte zumindest unter den Taupunkt gesenkt werden. [8] schreibt deshalb einen Taupunkt von unter -8°C bei einem Druck von 40bar vor.

Zur Trocknung kommen meist Verfahren der Kältetrocknung zum Einsatz. Werden hohe Anforderungen an die Feuchteabscheidung gestellt, werden adsorptive Verfahren verwendet, bei denen das Wasser an Molekularsieben adsorbiert wird. Letztere lassen sich durch Erhitzen regenerieren.

2.1.3.3 Methananreicherung

Die in Tabelle 1 gezeigten hohen CO_2 -Anteile machen eine Anreicherung von Methan nötig, besonders dann, wenn das Biogas in das Erdgasnetz eingespeist werden soll, oder zur Verwendung als Fahrzeugtreibstoff in Gasflaschen stark verdichtet werden muss, um eine sinnvolle Reichweite der Fahrzeuge zu gewährleisten.

Als Verfahren zur Methananreicherung kommen vor allem Druckwechseladsorption, Druckwasserwäsche und Gaspermeation zum Einsatz.

Druckwechseladsorption (PSA, pressure swing absorption) findet bei 8 bis 10bar an Aktivkohle oder Molekularsieben statt. Man erhält ein Gas mit mehr als 96% CH_4 . Durch Spülen mit Luft wird das Adsorbens regeneriert, was eine zweite, parallele Kolonne notwendig macht. Bei diesem Verfahren werden neben CO_2 auch H_2S , O_2 und N_2 abgetrennt [9].

Bei der *Druckwasserwäsche* nutzt man die unterschiedliche Löslichkeit der Biogaskomponenten im Washwasser, das in einer Füllkörperkolonne bei ca. 10bar von oben nach unten im Gegenstrom geführt wird. Auf diese Art werden auch H_2S , eventuell enthaltene Stäube sowie Mikroorganismen ausgewaschen und man erhält ein Gas mit über 96% CH_4 . Durch stufenweise Entspannung wird das Washwasser regeneriert. Man kann statt Wasser auch organische Waschflüssigkeiten einsetzen, die sich besonders gut zur Entschwefelung eignen. Das Rectisol-Verfahren verwendet Methanol, im Purisol-Verfahren wird NMP eingesetzt und im Selexol-Verfahren Polyethylenglykoldimethylether. Die belastete Waschflüssigkeit wird unter Erwärmen regeneriert, womit diese Verfahren besonders dann von Interesse sind, wenn dazu z.B. die Wärme eines BHKW zur Verfügung steht.

Auch Membranprozesse (*Gaspermeation*) können eingesetzt werden. Die Trennung erfolgt auf Grund unterschiedlicher selektiver Permeabilität der Membran für verschiedene Spezies.

2.1.4 Netzeinspeisung

Das so aufbereitete Biogas kann entweder direkt an einen Brenner oder ein BHKW zur Wärme- und/oder Stromgewinnung geleitet werden, oder es wird in das Erdgasnetz eingespeist. Dazu ist die Gasqualität und somit die Wirksamkeit der Gasreinigung sowie der Brennwert und der im nächsten Abschnitt näher beschriebene Wobbeindex zu überwachen. Es kann sein, dass eine Anpassung von Brennwert und Wobbeindex durch Zumischen von Propan notwendig ist [5]. Darüber hinaus ist das

Gas auf den in der Gasleitung herrschenden Druck zu verdichten, und gegebenenfalls zu odorieren [7].

2.1.5 Wobbeindex

Um die Austauschbarkeit von Gasen beurteilen zu können, bedient man sich des volumenbezogenen, heizwert- oder brennwertbezogenen Wobbeindex W_{iv} bzw. W_{sv} [10].

Unterer (heizwertbezogener) und oberer (brennwertbezogener) Wobbeindex sind unten dargestellt.

$$W_{iv} = \frac{H_i}{\sqrt{d}} \quad W_{sv} = \frac{H_s}{\sqrt{d}} \quad (2.1)$$

Der Gedanke hinter dem Wobbeindex ist, dass Brenngase austauschbar sind, wenn der Energiestrom aus der Brennerdüse

$$\dot{Q}_i = \dot{V} H_i \quad (2.2)$$

gleich groß ist. Mit dem Volumenstrom

$$\dot{V} = v_D A_D \quad (2.3)$$

und der Gasgeschwindigkeit in der Brennerdüse aus der Durchflussgleichung

$$v_D = \alpha \sqrt{2 \frac{\Delta p}{\rho_G}} \quad (2.4)$$

erhält man durch Einsetzen in die Gleichung für den Energiestrom

$$\dot{Q}_i = \sqrt{2} \alpha A_D \sqrt{\Delta p} \frac{H_i}{\sqrt{\rho_G}} \quad (2.5)$$

Erweitern mit der Wurzel der Dichte der Luft ρ_L und Anwenden von $d = \frac{\rho_G}{\rho_L}$ liefert

$$\dot{Q}_i = \sqrt{2} \alpha A_D \sqrt{\frac{\Delta p}{\rho_L}} \frac{H_i}{\sqrt{d}} \quad (2.6)$$

Durch Entfernen von Konstanten erhält man schließlich den oben dargestellten W_{iv} . W_{sv} kann man analog aus dem Brennwert herleiten.

2.2 Verbrennungsmotoren

In einem Verbrennungsmotor wird die bei der Verbrennung von Kraftstoff im Brennraum freigesetzte Energie in mechanische Energie umgewandelt. Dies geschieht, indem ein Kolben aufgrund der Volumenausdehnung des durch die Reaktion erhitzten Gases in Bewegung gesetzt wird. Wichtige Meilensteine in der Entwicklung moderner Verbrennungsmotoren wurden Ende des 19. Jahrhunderts durch Nicolaus Otto und Rudolf Diesel gesetzt. Sie entwickelten den funkengezündeten Viertaktmotor (*Ottomotor*) und den selbstzündenden Viertaktmotor (*Dieselmotor*). Neben einer Reihe von Kriterien wie Art und Ort der Gemischbildung, Bauform, usw. werden Verbrennungsmotoren häufig nach dem Ladungswechsel (Anzahl an Takten pro Arbeitstakt) und der Art der Zündung (Fremd- oder Selbstzündung) unterschieden. Eine solche Einteilung mit Verwendungsbeispielen kann nachstehender Tabelle 2 entnommen werden. Darüber hinaus existieren weitere Motortypen wie der Wankelmotor, die nicht näher betrachtet werden.

Tabelle 2: Einteilung und Verwendungsbeispiele von gängigen Verbrennungsmotortypen nach [11]

	Funkenzündung	Selbstzündung
Viertaktmotor	KFZ, klassischer "Benzinmotor"	KFZ, klassischer "Dieselmotor"
Zweitaktmotor	kleine Maschinen, Rasenmäher, Mopeds	Großmotoren, Schiffe, Lokomotiven

2.2.1 Viertaktmotor

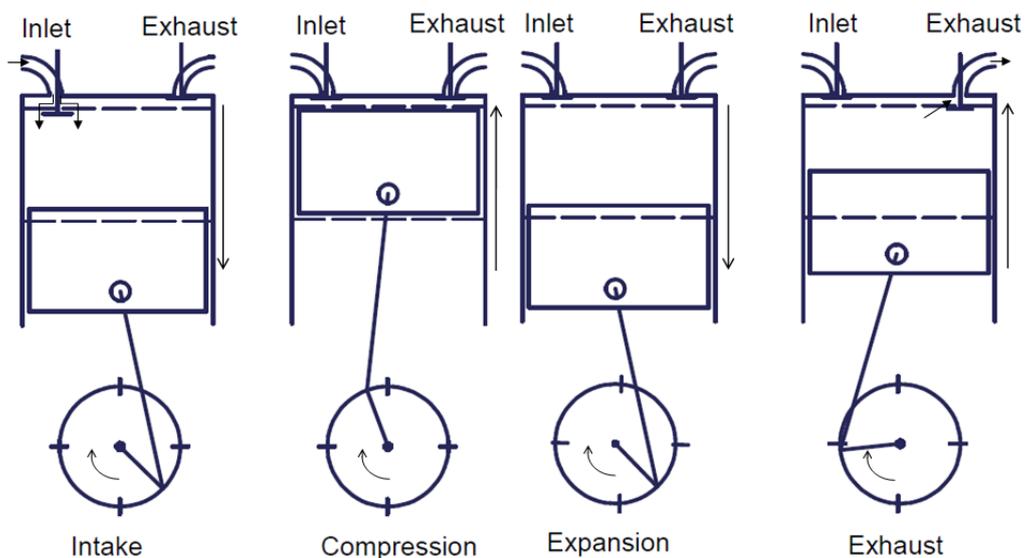


Abbildung 5: Schema der Takte eines Viertaktmotors [11]

In einem in Abbildung 5 dargestellten Viertaktmotor besteht ein Arbeitsspiel aus folgenden vier Takten:

1. Beim Ansaugen bewegt sich der Kolben vom oberen Totpunkt (OT, *top dead center, TDC*) bei geöffnetem Einlassventil nach unten zum unteren Totpunkt (UT, *bottom dead center, BDC*), wodurch die frische Ladung in den Zylinder gelangt.
2. Im nächsten Takt sind beide Ventile geschlossen und der Kolben bewegt sich wieder nach oben, es wird die Ladung auf einen durch das Verdichtungsverhältnis ε ,

$$\varepsilon = \frac{\text{max. Zylindervolumen}}{\text{min. Zylindervolumen}} = \frac{V_h + V_c}{V_c} \quad (2.7)$$

beschriebenen Bruchteil des maximalen Zylindervolumens verdichtet und kurz vor Erreichen des oberen Totpunktes gezündet. Das minimale Zylindervolumen V_c wird Kompressionsvolumen genannt, das maximale Zylindervolumen setzt sich zusammen aus V_c und dem Hubraum V_h .

3. Im Arbeitstakt wird das Gemisch verbrannt und der Kolben durch die Expansion des heißen Gases nach unten gedrückt, wobei er über die Pleuelstange die Kurbelwelle antreibt.
4. Im vierten Takt wird das Auslassventil geöffnet und der sich nach oben bewegende Kolben drückt restliches Abgas aus dem Zylinder. Am Ende dieses Taktes wird das Einlassventil bereits geöffnet. (Ventilüberschneidung)

2.2.2 Zweitaktmotor

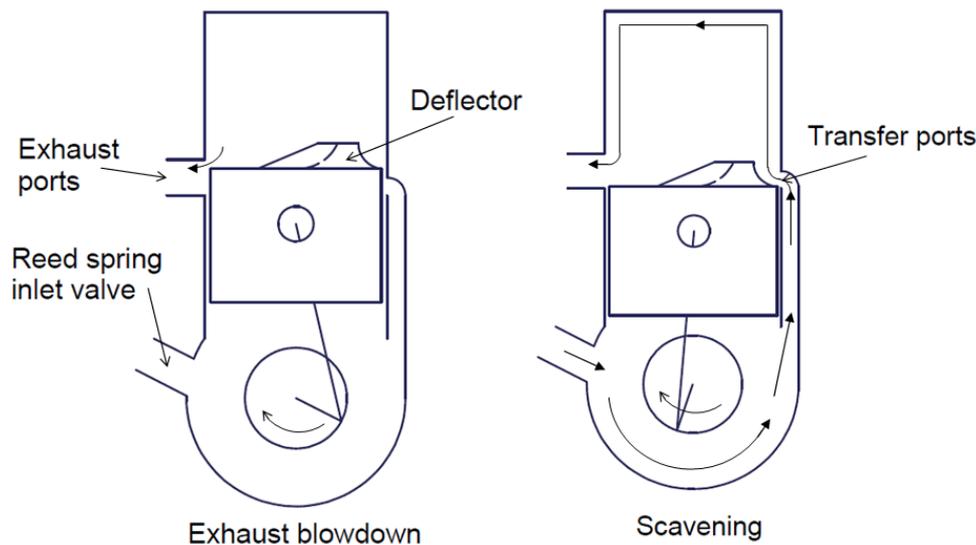


Abbildung 6: Schema eines Zweitaktmotors [11]

Zweitaktmotoren (Abbildung 6) führen einen Arbeitstakt pro Kurbelwellenumdrehung aus, wodurch sie eine höhere massenspezifische Leistung haben als Viertaktmotoren. Sie verwenden dazu den unteren Teil des Kurbelgehäuses zum Vorverdichten und haben einen schnellen Ladungswechsel über eine Schlitzsteuerung.

Während der Aufwärtsbewegung des Kolbens sind Auslass- (*exhaust ports*) und Überströmschlitze (*transfer ports*) verschlossen, die Ladung wird verdichtet und nahe OT gezündet. Durch den Unterdruck unterhalb des Kolbens wird das Einlassventil (*reed spring inlet valve*) geöffnet und die nächste Ladung angesaugt.

Bei der Abwärtsbewegung treibt das heiße Gas den Kolben nach unten und die nächste Ladung wird dabei vorverdichtet. Kurz vor Erreichen von UT werden die Auslassschlitze freigegeben und ein Teil der Abgase strömt zum Auspuff. Kurz darauf werden auch die Überströmschlitze freigegeben und die vorverdichtete frische Ladung strömt in die Brennkammer, wo sie den Großteil des verbliebenen Abgases verdrängt. Dabei verbleibt ein Teil des Abgases im Brennraum. Der besonders geformte Kolben lenkt die Strömung ab und verringert so Spülverluste.

Die bereits erwähnte im Vergleich zum Viertaktmotor höhere massenspezifische Leistung erklärt, warum sich Zweitaktmotoren mit Funkenzündung häufig in relativ kleinen Maschinen wie Rasenmähern, Laubbläsern oder Mopeds finden. Nachteilig ist bei diesen Motoren ihr hoher

Treibstoffverbrauch bedingt durch Spülverluste. Man verwendet Zweitaktmotoren auch als selbstzündende Großmotoren für z.B. Schiffe.

2.2.3 Funkenzündung und Selbstzündung

Bei der Funkenzündung, wie sie im Ottomotor vorkommt, wird das verdichtete Gemisch kurz vor Erreichen von OT von einer Zündkerze mittels eines Funken, der mehr Energie als die Mindestzündenergie zuführt, gezündet. Ein exemplarischer Druckverlauf für einen funkengezündeten Motor ist in Abbildung 7 dargestellt. In Punkt 1 wird gezündet, die Verbrennung findet aber erst nach dem Verstreichen der Zündverzugszeit ab Punkt 2 statt.

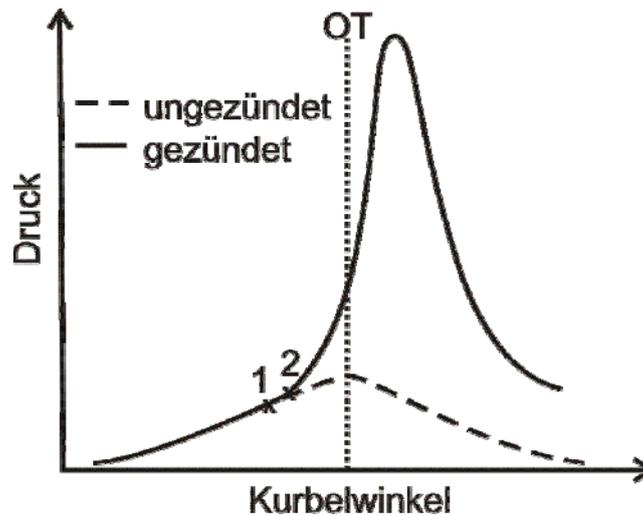


Abbildung 7: Exemplarischer Druckverlauf in Abhängigkeit vom Kurbelwinkel für einen Ottomotor, nach [12]. Bei Punkt 1 wird gezündet, aufgrund des Zündverzugs findet die Verbrennung erst ab Punkt 2 statt.

Dabei kommt dem Zündzeitpunkt eine zentrale Bedeutung zu: Wird zu früh gezündet, steigen Spitzendruck und -temperatur, was zu einer erhöhten Klopfneigung führt. Eine zu späte Zündung führt zu unvollständiger Verbrennung und hohen Abgastemperaturen, die das Auslassventil beschädigen können.

Bei selbstzündenden Verbrennungsmotoren (Dieselmotoren) wird der flüssige Treibstoff unter sehr hohem Druck am Ende der Verdichtung in den Brennraum eingespritzt. Daraus resultiert ein besseres Teillastverhalten, da nur die eingespritzte Treibstoffmasse verringert wird, die bei Vollast nur ca. 5% der Luftmasse im Zylinder ausmacht [13].

2.2.4 Kreisprozesse

Um den Wirkungsgrad von Verbrennungsmotoren zu bewerten, vergleicht man sie oft mit idealisierten, vereinfachten Kreisprozessen. Man nimmt dabei an, dass sich Luft, Treibstoff und Abgas ideal verhalten. Die Verbrennung wird durch eine Wärmezufuhr angenähert. Bei den vereinfachten Kreisprozessen handelt es sich um thermodynamische Prozesse, wohingegen Verbrennungsmotoren nach realen Motorprozessen arbeiten. Dennoch kann man ideale Kreisprozesse zur Veranschaulichung von Trends verwenden, und so verschiedene Motortypen miteinander vergleichen. Abbildung 8 zeigt exemplarisch p-V-Diagramme für einen Ottomotor und seine Idealisierung. Die von der Kurve eingeschlossene Fläche entspricht im p-V-Diagramm der geleisteten Arbeit.

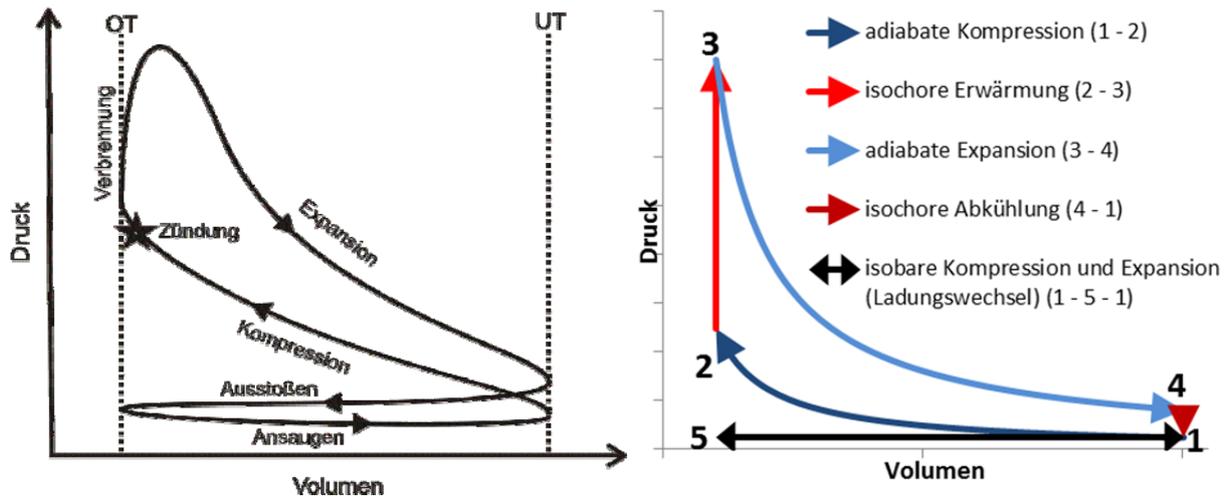


Abbildung 8: Ein realer Ottomotor und seine Idealisierung durch einen Gleichraumprozess mit Ladungswechsel nach [12]

2.2.4.1 Gleichraumprozess

Bei einem idealen Gleichraumprozess (*ideal air standard Otto cycle* [12]), dargestellt in Abbildung 9, wird die gesamte Wärmeenergie in den Schritten 2 → 3 und 4 → 1 unendlich schnell zu- bzw. abgeführt. Deswegen finden Erwärmung und Abkühlung bei gleichem Volumen statt, was dem Prozess seinen Namen gibt. Die Schritte 1 → 2 und 3 → 4 finden adiabatisch statt.

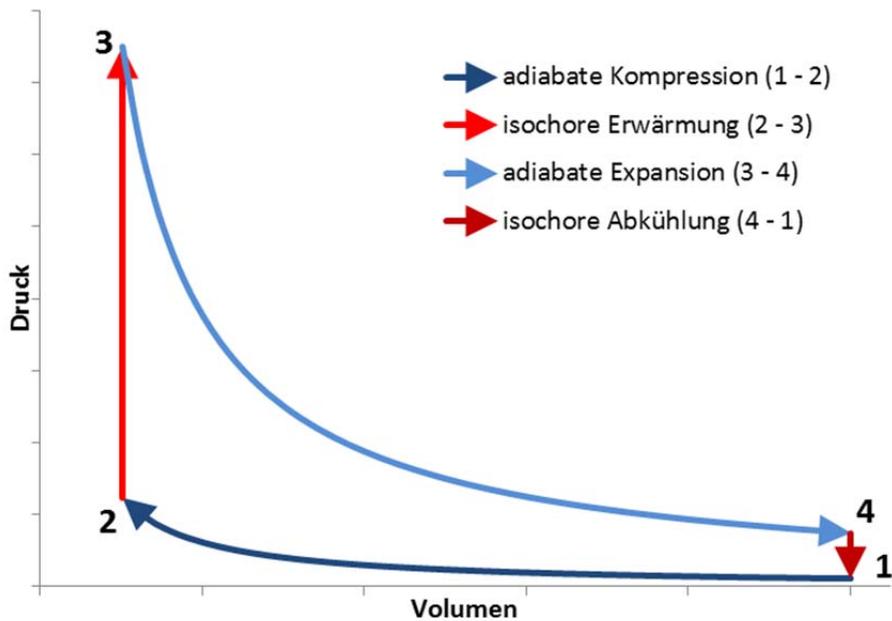


Abbildung 9: p-V-Diagramm eines idealen Gleichraumprozesses

Der thermische Wirkungsgrad η_{th} ist mit der zu- sowie abgeführten Wärmemenge Q_{zu} und Q_{ab} , dem in (2.7) definierten Verdichtungsverhältnis ϵ sowie dem Adiabatenverhältnis $\gamma = \frac{c_p}{c_v}$ gegeben als [12]

$$\eta_{th} = 1 - \frac{Q_{ab}}{Q_{zu}} = 1 - \frac{1}{\epsilon^{\gamma-1}} \quad (2.8)$$

2.2.4.2 Gleichdruckprozess

Bei einem idealen Gleichdruckprozess (*ideal air standard Diesel cycle* [12]), zu sehen in Abbildung 10, wird statt der isochoren Erwärmung eine isobare Erwärmung als Schritt 2 → 3 verwendet, um bei hohen Verdichtungen, wie sie bei selbstzündenden Motoren vorkommen, den Druck nicht noch weiter zu erhöhen.

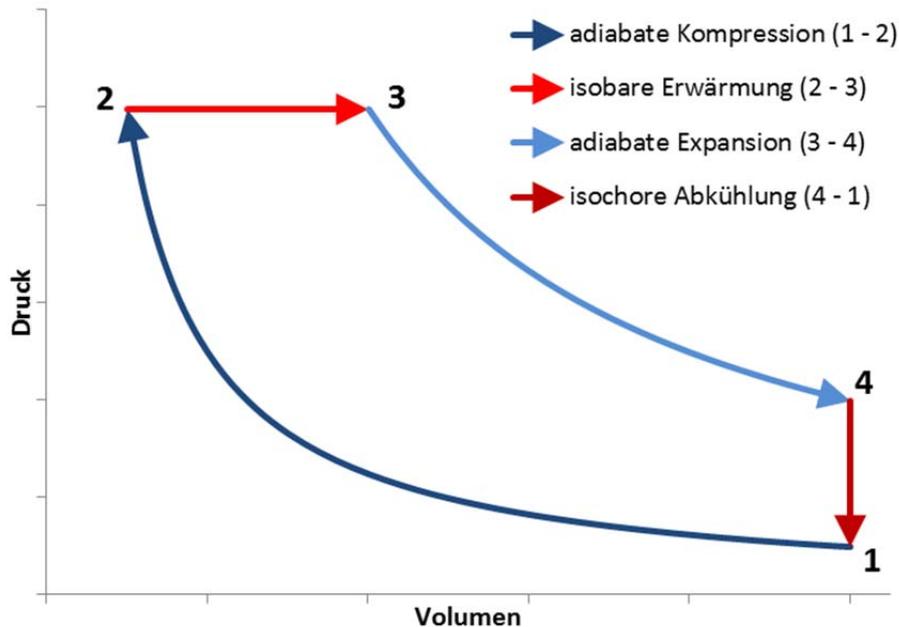


Abbildung 10: p-V-Diagramm eines idealen Gleichdruckprozesses

Man erhält nach [12] mit $\alpha = \frac{V_3}{V_2}$ für η_{th}

$$\eta_{th} = 1 - \varepsilon^{1-\gamma} \frac{\alpha^{\gamma-1}}{\gamma \cdot (\alpha - 1)} \quad (2.9)$$

Hierin sind α der Cut-off Faktor, ε das Verdichtungsverhältnis und γ das Adiabatenverhältnis.

2.2.5 Klopfen

Unter Motorklopfen versteht man Selbstzündungen beim Ottomotor. Dabei wird die Treibstoff-Luft-Mischung im Kolben, das Endgas, welches durch die Aufwärtsbewegung des Kolbens und die voranschreitende reguläre Verbrennung bereits stark komprimiert ist, spontan entzündet. Das geschieht an Orten, die eine geringfügig höhere Temperatur als das durchschnittliche Endgas aufweisen, sogenannten *hot spots*. Die Selbstzündung erfolgt so schnell, dass sich eine Druckwelle durch das Endgas ausbreitet, sodass das restliche unverbrannte Gas zündet. Die so erzeugte Druckwelle ist als klopfendes Geräusch wahrnehmbar. Durch sie wird der Motor extrem beansprucht und schnell zerstört. Somit muss der Vermeidung klopfender Verbrennung besondere Aufmerksamkeit geschenkt werden. Die Problematik wird dadurch verschärft, dass die Klopfwahrscheinlichkeit mit steigendem Verdichtungsverhältnis zunimmt, wobei ein höheres Verdichtungsverhältnis, wie oben gezeigt, den Wirkungsgrad verbessert.

Zur Simulation des Klopfens wendet man vereinfacht folgendes Modell an [3]: Man berechnet in einem Zylindermodell die Zündverzugszeit für jedes Gitterelement, sowie die sich ausbreitende Flammenfront in hoher Zeitauflösung. Für einen regulären Zyklus darf die Selbstzündung erst

eintreten, nachdem die Flammenfront das Gitterelement passiert hat. Ist die Zündverzugszeit so kurz, dass nach ihrem Verstreichen im Gitterelement noch Endgas vorhanden ist, kommt es zur Selbstzündung und der Zyklus klopft.

2.2.5.1 Oktanzahl

Wegen der Wichtigkeit, Klopfen zu vermeiden, wurde bereits in den 1930er-Jahren die Klopfneigung von Ottokraftstoffen durch das CFR (Cooperative Fuel Research Committee) experimentell bestimmt. Dazu wird bis heute ein genormter Motor verwendet, und als Referenzkraftstoffe n-Heptan (klopffreudig) und iso-Oktan (2,2,4-Trimethylpentan, klopffest) festgelegt. n-Heptan hat dabei die Oktanzahl (OZ) 0, und iso-Oktan die OZ 100. Mischungen der beiden Substanzen haben eine OZ entsprechend der Gemischzusammensetzung. Ein Treibstoff oder Treibstoffgemisch erhält jene OZ, die ein Gemisch aus den beiden Referenztreibstoffen hat, welches dieselben Klopfeneigenschaften aufweist.

2.2.5.2 Methanzahl

Für Gasmotoren ist die Oktanzahl ungeeignet, da die OZ-Skala bei 120 endet, CH₄- und CO₂-reiche Gase, wie beispielsweise Biogas, aber wesentlich klopffester sind. Es wurde deshalb die Methanzahl (MZ) als Maß für die Klopfestigkeit von Brenngasen entwickelt, die sich analog zur OZ aus Mischungen von CH₄ (MZ=100) und H₂ (MZ=0) bildet [14]. CO₂-Zumischung zu CH₄ erhöht dabei die MZ weiter, sodass Klär- und Faulgase MZ zwischen 120 und 130 haben. Die Berechnung der MZ einer Brenngasmischung erfolgt durch das Zerlegen in Teilgemische mit bekannter MZ und deren Linearkombination.

2.3 Thermodynamische und kinetische Grundlagen

In der vorliegenden Arbeit werden Größen wie Druck, Temperatur und Gaszusammensetzung aus thermodynamischen und kinetischen Daten berechnet, weswegen auf die wichtigsten Größen und Gleichungen an dieser Stelle kurz eingegangen wird.

2.3.1 Mischungszusammensetzung

Die Zusammensetzung der Gasmischung im System kann mithilfe von Massenbruch oder Molenbruch sowie unter Zugrundelegung des idealen Gasgesetzes mittels Partialdruck beschrieben werden:

$$w_j = \frac{m_j}{m}, \quad \sum_{j=1}^J w_j = 1 \quad (2.10)$$

$$X_j = \frac{n_j}{n}, \quad \sum_{j=1}^J x_j = 1 \quad (2.11)$$

$$p_j = X_j p \quad (2.12)$$

In (2.10) sind w_j der Massenbruch der Spezies j , m_j die Masse der Spezies j und m die Gesamtmasse des Systems. In (2.11) sind analog X_j der Molenbruch der Spezies j , n_j die Molzahl der Spezies j und n die Gesamtanzahl der Spezies des Systems. In (2.12) ist weiters p_j der Partialdruck der Spezies j und p der Gesamtdruck.

2.3.2 Chemische Thermodynamik

Betrachtet werden *abgeschlossene Systeme*, also Systeme ohne Transport von Masse oder Energie durch die Systemgrenzen. Im Falle der Flammengeschwindigkeitsberechnung ist das System *isobar*,

also unter konstantem Druck, bei der Zündverzugszeitberechnung *isochor*, also unter konstantem Volumen.

Mit dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik wird die Änderung der inneren Energie dU bei konstantem Volumen V und die Änderung der Enthalpie dH bei konstantem Druck p angeschrieben als

$$dU = \delta Q \text{ für } V = \text{const.} \quad (2.13)$$

$$dH = \delta Q \text{ für } p = \text{const.} \quad (2.14)$$

Unter Berücksichtigung des zweiten Hauptsatzes der Thermodynamik $dS \geq \frac{\delta Q}{T}$ kann man für den Ablauf einer chemischen Reaktion (<) und deren Gleichgewicht (=) formulieren:

$$dU + p dV - T dS \leq 0 \quad (2.15)$$

Die Gleichgewichtsbedingung $dU = 0$ für $dV = 0$ und $dS = 0$ ist wegen der schwierigen Zugänglichkeit der Entropie S unpraktisch. Deshalb werden die Zustandsgrößen Freie Enthalpie¹ G und Freie Energie² A eingeführt

$$dG = d(H - T S) = V dp - S dT \quad (2.16)$$

$$dA = d(U - T S) = -p dV - S dT \quad (2.17)$$

Mit ihnen ist die Gleichgewichtsbedingung über die relativ einfach zugänglichen Größen p , V und T zu beschreiben.

$$dG = 0 \text{ für } dV = 0; dT = 0 \quad (2.18)$$

$$dA = 0 \text{ für } dp = 0; dT = 0 \quad (2.19)$$

Gegeben sei eine chemische Reaktion i aus einem Mechanismus mit insgesamt I Reaktionen, die J Spezies j mit den stöchiometrischen Koeffizienten $\nu_{j,i}$ umfasst. Man kann für diese Reaktion die thermodynamischen Größen Reaktionsenthalpie ΔH_R und Reaktionsentropie ΔS_R sowie daraus abgeleitet die Freie Enthalpie der Reaktion ΔG_R und die Freie Energie der Reaktion ΔA_R schreiben als

$$\Delta H_{R,i} = \sum_{j=1}^J \nu_{j,i} H_j \quad (2.20)$$

$$\Delta S_{R,i} = \sum_{j=1}^J \nu_{j,i} S_j \quad (2.21)$$

$$\Delta G_{R,i} = \sum_{j=1}^J \nu_{j,i} G_j \quad (2.22)$$

$$\Delta A_{R,i} = \sum_{j=1}^J \nu_{j,i} A_j \quad (2.23)$$

¹ Die Freie Enthalpie wird häufig auch als "Gibbs-Energie" bezeichnet.

² Die Freie Energie wird auch mit F abgekürzt und auch als "Helmholtz-Energie" bezeichnet.

2 – Grundlagen

ΔG_R und ΔA_R sind notwendige Größen zur Beschreibung des chemischen Gleichgewichts, siehe (2.36) und (2.37) auf Seite 18. Auch der massebezogene Heizwert H_{im} kann aus der Reaktionsenthalpie mittels der molaren Masse des Brennstoffs M_{Br} berechnet werden:

$$H_{im} = \frac{-\Delta H_R}{M_{Br}} \quad (2.24)$$

Für den Heizwert gilt, dass das bei der Verbrennung von 1kg Brennstoff entstehende Wasser dampfförmig bei 1atm und 298K vorliegen muss. Über die Dichte des Brennstoffs kann H_{iv} leicht berechnet werden.

Bei der Verbrennungsrechnung von Interesse sind die molare Größen der inneren Energie \bar{U} (2.26), die Enthalpie der Mischung \bar{H} (2.25) sowie die Entropie \bar{S} (2.27), die über die Molenbrüche x_j zugänglich sind,

$$\bar{H} = \sum_{j=1}^J x_j H_j \quad (2.25)$$

$$\bar{U} = \sum_{j=1}^J x_j U_j \quad (2.26)$$

$$\bar{S} = \sum_{j=1}^J x_j S_j \quad (2.27)$$

wobei die H_j , U_j und S_j der einzelnen Spezies ausgehend von tabellierten Referenzwerten mittels (2.28) bis (2.31) berechnet werden.

$$H_{j,T} = H_{j,298K} + \int_{298K}^T C_{p,j}(T') dT' \quad (2.28)$$

$$U_{j,T} = U_{j,298K} + \int_{298K}^T C_{v,j}(T') dT' \quad (2.29)$$

$$S_{j,T} = S_{j,298K} + \int_{298K}^T \frac{C_{v,j}(T')}{T'} dT' \quad \text{für } V = \text{const.}, \text{ reversibel} \quad (2.30)$$

$$S_{j,T} = S_{j,298K} + \int_{298K}^T \frac{C_{p,j}(T')}{T'} dT' \quad \text{für } p = \text{const.}, \text{ reversibel} \quad (2.31)$$

Die Werte für die Wärmekapazität bei konstantem Druck C_p bzw. bei konstantem Volumen C_v , Enthalpie und Entropie sind bei der Simulation aus dem Thermodynamik-File zugänglich. Sie sind dort in Form von tabellierten Koeffizienten eines Polynoms abgelegt und können leicht berechnet werden (siehe 2.4.5.1, Seite 23).

Die Wärmekapazität C ist allgemein definiert als

$$C = \frac{\delta Q}{dT} \quad (2.32)$$

wobei C für die Randbedingung "konstanter Druck" als C_p geschrieben wird und für die Randbedingung "konstantes Volumen" als C_v . Für ideale Gase gilt der Zusammenhang $C_p - C_v = n R$, womit für 1mol ideales Gas $\overline{C_p} = \overline{C_v} + R$ gilt. Aus der kinetischen Gastheorie folgt

$$\overline{C_v} = \left(\frac{\partial \overline{U}}{\partial T} \right)_v = \frac{3}{2} R \quad (2.33)$$

Dieser Betrag entspricht bei realen Gasen dem *Beitrag der Translation* zur Wärmekapazität. Er wird deshalb nur von einatomigen Gasen wie Ar in Abbildung 11 erreicht.

Bei mehratomigen Gasen kommt ein *Beitrag der Rotation* hinzu. Er beträgt maximal R für lineare Moleküle und maximal $\frac{3}{2}R$ für gewinkelte Moleküle. Dieser Maximalbeitrag wird nur bei hohen Temperaturen erreicht. Bei niedrigen Temperaturen verringert sich dieser Beitrag bis auf null.

Im Temperaturintervall der Thermodynamik-Polynome ist der Rotationsbeitrag praktisch voll ausgeprägt: $\frac{\overline{C_v}}{R}$ beträgt für N_2 am unteren Ende des Gültigkeitsbereichs der Polynome (300K) 2,497. Dieser Betrag ist um 0,997 höher als jener für einatomige Gase. Außerdem sieht man in Abbildung 11 deutlich die noch höhere Wärmekapazität von H_2O , einem gewinkelten Molekül. Sie beträgt annähernd $3 R$ und ist somit um $\frac{3}{2}R$ höher als für einatomige Gase.

Darüber hinaus tragen *Vibrationen* in mehratomigen Molekülen zur Wärmekapazität bei. Jeder Schwingungsfreiheitsgrad leistet bei hohen Temperaturen einen Beitrag von maximal R . Lineare mehratomige Moleküle haben $3N - 5$ Schwingungsfreiheitsgrade, nichtlineare $3N - 6$. Dabei bedeutet N die Anzahl an Atomen im Molekül.

Auch dieser Beitrag ist aus Abbildung 11 ersichtlich: mit steigender Temperatur erhöht sich $\frac{\overline{C_v}}{R}$ für N_2 um R auf 3,453. Der Wert für H_2O hat bei 3000K mit 5,709 sein theoretisches Maximum von 6 noch nicht erreicht. Für CO_2 ist der Fall analog, man sieht aber in der Grafik bereits sehr deutlich die asymptotische Annäherung an 6,5. Bei dem relativ großen Molekül CH_4 ist die Sättigung der Schwingungsfreiheitsgrade im betrachteten Temperaturintervall nicht erreicht – sie läge bei 12.

Wärmekapazität verschiedener Gase

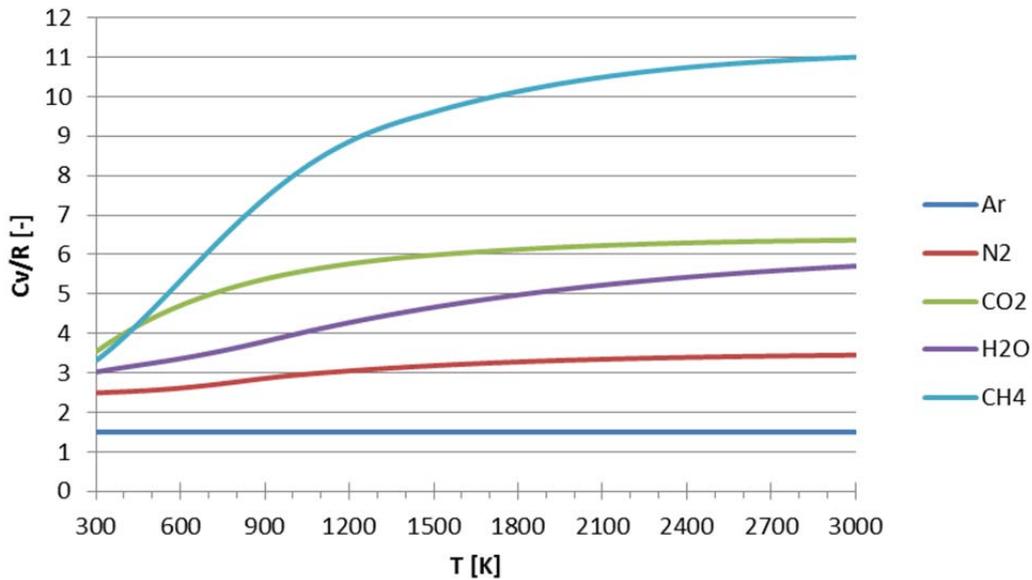


Abbildung 11: Dimensionslose Wärmekapazität $C_v(T)/R$ berechnet mit den Thermodynamik-Polynomen aus NUIG NGM 3

2.3.3 Chemische Kinetik

Betrachtet man eine allgemeine chemische Reaktion der Edukte A, B zu den Produkten C, D mit den Geschwindigkeitskoeffizienten k_f und k_r



so kann man die Reaktionsgeschwindigkeit für die Spezies A , $\frac{dc_A}{dt}$, mit den Reaktionsordnungen a, b, c, d schreiben als

$$\frac{dc_A}{dt} = -k_f c_A^a c_B^b \dots = k_r c_C^c c_D^d \dots \quad (2.35)$$

Die oben formulierte allgemeine Reaktion kann sowohl von links nach rechts mit k_f oder von rechts nach links mit k_r ablaufen. Werden dabei gleich viele Formeleinheiten durch die Hinreaktion wie durch die Rückreaktion umgesetzt, so befindet sich das System im dynamischen Gleichgewicht und die Reaktion kommt auf makroskopischer Ebene zum Erliegen.

Die Lage dieses Gleichgewichts ist gegeben durch die Gleichgewichtskonstante K_c oder ihre Formulierung über Partialdrücke, K_p [3]

$$K_c = \frac{k_f}{k_r} = \prod_j \left(\frac{c_j}{c^0} \right)^{\nu_j} = e^{-\frac{\Delta \bar{A}^0}{R \cdot T}} \quad (2.36)$$

$$K_p = \prod_j \left(\frac{p_j}{p^0} \right)^{\nu_j} = e^{-\frac{\Delta \bar{G}^0}{R \cdot T}} \quad (2.37)$$

Darin sind c_j die Konzentrationen der einzelnen Spezies, p_j die Partialdrücke der einzelnen Spezies, ν_j die stöchiometrischen Koeffizienten der Spezies, R die ideale Gaskonstante, T die absolute

2 – Grundlagen

Temperatur, $\Delta\bar{A}^0$ die molare Freie Energie bei Standardbedingungen und $\Delta\bar{G}^0$ die molare Freie Enthalpie bei Standardbedingungen.

Vernachlässigt man in (2.35) die Änderung der im Überschuss vorliegenden Spezies und fasst deren Konzentration mit dem Geschwindigkeitskoeffizienten zusammen, kann man einen Geschwindigkeitskoeffizienten k definieren, der nur von der Konzentration einer Spezies abhängig ist.

$$\frac{dc_A}{dt} = -k c_A^a \quad (2.38)$$

Für *Summenreaktionen* ist a nicht notwendigerweise ganzzahlig und kann abhängig von den Umgebungsbedingungen verschiedene Werte annehmen. Die Zeitgesetze können dabei sehr komplizierte Formen annehmen. Das macht eine exakte Berechnung der chemischen Kinetik für Summenreaktionen praktisch unmöglich.

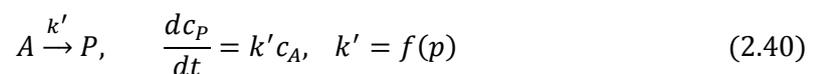
Anders verhält sich a bei *Elementarreaktionen*: Das sind Reaktionen, die exakt so ablaufen, wie sie in der Reaktionsgleichung beschrieben sind. Sie haben stets einfache Zeitgesetze und ganzzahlige Reaktionsordnungen. Es liegt somit nahe, eine komplexe Reaktion wie die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen in ein System von Elementarreaktionen zu überführen, das mittels Computern gelöst werden kann. Ist ein solcher Reaktionsmechanismus vollständig, das heißt er umfasst alle möglichen Reaktionen, und kann so für alle Umgebungsbedingungen und Gemischzusammensetzungen verwendet werden [3].

Die Reaktionsordnung von Elementarreaktionen ergibt sich aus der *Reaktionsmolekularität*. Das ist die Anzahl an Teilchen, die für die Bildung des Übergangszustands benötigt wird. Der Übergangszustand zerfällt dann in die Reaktionsprodukte. Man unterscheidet zwischen unimolekularen, bimolekularen und trimolekularen Elementarreaktionen, wobei trimolekulare Reaktionen meist Radikalrekombinationsreaktionen mit einem inerten Stoßpartner sind.

Die Geschwindigkeitskoeffizienten k chemischer Reaktionen sind stark temperaturabhängig. Ein einfacher Ansatz dafür ist die Arrhenius-Gleichung. Berücksichtigt man in der Arrhenius-Gleichung auch noch die Temperaturabhängigkeit des präexponentiellen Faktors A , indem man ihn mit T^b multipliziert, so erhält man mit der Aktivierungsenergie E_A die *erweiterte Arrhenius-Gleichung* (2.39), deren Parameter A, b, E_A bei der Simulation im Reaktionsmechanismus-File vorliegen (siehe 2.4.5.1 auf Seite 22).

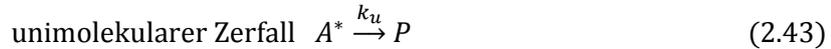
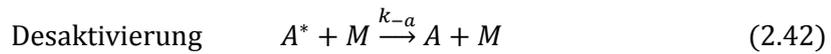
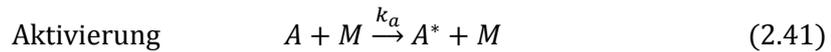
$$k = A T^b e^{\frac{-E_A}{RT}} \quad (2.39)$$

Der Betrag der Geschwindigkeitskoeffizienten ist auch vom Druck abhängig. Das gilt besonders für Dissoziations- und Rekombinationsreaktionen. Bei diesen Reaktionen handelt es sich um eine Abfolge mehrerer Schritte, wie sie beispielhaft in (2.41) bis (2.43) angegeben sind. Dennoch werden sie als Elementarreaktionen betrachtet, wodurch der Geschwindigkeitskoeffizient druckabhängig wird.



Es gibt verschiedene Modelle, die diese Druckabhängigkeit beschreiben. Das einfachste ist das *Lindemann-Modell* [3]. Es geht vom unimolekularen Zerfall eines Moleküls A in Produkte P aus, welches die dazu nötige Aktivierungsenergie über einen inerten Stoßpartner M erhält.

2 – Grundlagen



Wenn man annimmt, dass sich die Konzentration der aktivierten Spezies A^* mit der Zeit nicht wesentlich ändert, und für die Produkte P einsetzt, ist die Reaktionsgeschwindigkeit von c_{A^*} im Gleichgewicht

$$\frac{dc_{A^*}}{dt} = k_a c_A c_M - k_{-a} c_{A^*} - k_u c_{A^*} \approx 0 \quad (2.44)$$

Durch den Wegfall des Differentialausdrucks in (2.44) lässt sich c_{A^*} durch Umformen berechnen, womit man in die Reaktionsgeschwindigkeit für die Produktbildung $\frac{dc_P}{dt}$ einsetzen kann.

$$c_{A^*} = \frac{k_a c_A c_M}{k_{-a} c_M + k_u} \quad (2.45)$$

$$\frac{dc_P}{dt} = k_u c_{A^*} = k_u \frac{k_a c_A c_M}{k_{-a} c_M + k_u} \quad (2.46)$$

Bei sehr niedrigen Drücken sind nur wenige Stoßpartner M vorhanden, wodurch $k_{-a} c_M \ll k_u$ wird. (2.46) vereinfacht sich damit zu (2.47), einem Zeitgesetz 2. Ordnung. Der geschwindigkeitsbestimmende Schritt wird dabei die Aktivierung.

$$\frac{dc_P}{dt} = \frac{k_u k_a c_A c_M}{k_u} = k_a c_A c_M \quad (2.47)$$

Durch Einsetzen von (2.47) in (2.40) und Umformen ergibt sich für k' im Grenzfall für sehr niedrige Drücke den von c_M abhängigen Ausdruck

$$k' = k_a c_M \quad (2.48)$$

Bei sehr hohen Drücken sind hingegen reichlich Stoßpartner M vorhanden, wodurch $k_{-a} c_M \gg k_u$ wird. (2.46) vereinfacht sich damit zu (2.49), einem Zeitgesetz 1. Ordnung. Die Reaktionsgeschwindigkeit wird unabhängig von der Konzentration an möglichen Stoßpartnern. Der geschwindigkeitsbestimmende Schritt ist nun der Zerfall der aktivierten Spezies.

$$\frac{dc_P}{dt} = \frac{k_u k_a c_A c_M}{k_{-a} c_M} = \frac{k_u k_a}{k_{-a}} c_A = k_\infty c_A \quad (2.49)$$

Durch Einsetzen von (2.49) in (2.40) und Umformen erhält man somit für k' im Grenzfall für sehr hohe Drücke den von c_M unabhängigen Ausdruck

$$k' = k_\infty \quad (2.50)$$

2.4 Verbrennung

2.4.1 Allgemeines

Bei Verbrennungsreaktionen reagiert ein Brennstoff – im vorliegenden Fall aufbereitetes Biogas – mit einem Oxidationsmittel. Im Normalfall ist das Luft. Die Art der Verbrennung wird dabei häufig über die Strömung (laminar oder turbulent) und die Vormischung (vorgemischt oder nicht vorgemischt) eingeteilt. Beispiele dafür sind in Tabelle 3 angeführt. Darüber hinaus treten auch teilweise

vorgemischte Flammen auf, z.B. im Dieselmotor. Während der Verbrennung laufen eine Vielzahl von verschiedenen Reaktionen ab, auf die später noch eingegangen werden soll.

Tabelle 3: Beispiele für die Einteilung der Verbrennung nach Strömung und Vormischung

	laminare Strömung	turbulente Strömung
vorgemischt	Bunsenflamme	Ottomotor
nicht vorgemischt	Kerzenflamme	Industriebrenner

2.4.2 Luftzahl und Äquivalenzverhältnis

Bei vorgemischten Flammen spielt die Stöchiometrie der Verbrennung eine besondere Rolle. Man unterscheidet die stöchiometrische Verbrennung von fetter Verbrennung (Brennstoffüberschuss) und von magerer Verbrennung (Oxidationsmittelüberschuss). Tabelle 4 zeigt dazu exemplarisch Bruttoreaktionsgleichungen für die Wasserstoffverbrennung.

Bezieht man das Molenbruch-Verhältnis von Oxidationsmittel zu Brennstoff in einer vorliegenden Mischung auf jenes einer stöchiometrischen Mischung, erhält man die Luftzahl λ , deren Inverses als Äquivalenzverhältnis φ definiert ist:

$$\lambda = \frac{\frac{x_{Ox,vorliegend}}{x_{Br,vorliegend}}}{\frac{x_{Ox,stöchiometrisch}}{x_{Br,stöchiometrisch}}} = \frac{1}{\varphi} \quad (2.51)$$

Tabelle 4: Beispiele für fette, stöchiometrische und magere Verbrennung und die dazugehörigen λ und φ

Verbrennung	Beispiel	λ	φ
fett	$3 H_2 + O_2 \rightarrow 2 H_2O + H_2$	< 1	> 1
stöchiometrisch	$2 H_2 + O_2 \rightarrow 2 H_2O$	$= 1$	$= 1$
mager	$2 H_2 + 2 O_2 \rightarrow 2 H_2O + O_2$	> 1	< 1

2.4.3 Laminare Flammgeschwindigkeit

Die Ausbreitung laminarer Flammen im unverbrannten Gemisch lässt sich durch die laminare Flammgeschwindigkeit s_L beschreiben. Die Berechnung von s_L ist mathematisch aufwändig und erfolgt mittels numerischer Simulation von freien Flammen. In [3] ist als Gleichung für s_L unter Annahme einer Einschrittreaktion gegeben:

$$s_L \approx p^{\left(\frac{n}{2}-1\right)} e^{-\frac{E_A}{2RT_b}} \quad (2.52)$$

Darin ist p der Druck, n die Reaktionsordnung, E_A die Aktivierungsenergie, R die ideale Gaskonstante und T_b die Temperatur des verbrannten Gases.

2.4.4 Zündverzugszeit

Selbstzündungen, bei denen radikalische Vorreaktionen ablaufen, zünden – im Gegensatz zur thermischen Zündung – nicht sofort, sondern erst nach Ablauf von Induktionsreaktionen. Unter der Induktions- oder Zündverzugszeit τ versteht man jene Zeit, die ein zündfähiges Gasgemisch benötigt, um eines der folgenden Kriterien zu erfüllen [15]:

- Maximaler zeitlicher Temperaturanstieg: Dieser Parameter ist leicht zu simulieren, aber schwer zu messen. Weil die Methode nicht träge sein darf, scheiden klassische Thermoelemente aus.
- Maximaler zeitlicher Druckanstieg: Dieser Parameter ist auch gut zu simulieren, aber ebenfalls messtechnisch aufwändig. Eine zeitlich hoch aufgelöste Druckmessung ist aber etwas einfacher umzusetzen als eine hoch aufgelöste Temperaturmessung. Deshalb verwenden viele Messapparaturen diese Methode mit schnellen piezoelektrischen Sensoren.
- Maximale zeitliche Konzentrationsänderung einer Spezies: Bei dieser Methode kann man sich beispielsweise auf das $\cdot\text{OH}$ -Radikal beziehen, das zur Zündung ein Konzentrationsmaximum hat und durch laserinduzierte Fluoreszenz (LIF) gemessen werden kann.

In [3] wird eine Faustformel für die Zündverzugszeit τ (2.53) angegeben, die einem empirischen Arrhenius-Gesetz entspricht, worin T die Temperatur und A und B empirische Konstanten sind.

$$\tau \approx A e^{B/T} \quad (2.53)$$

2.4.5 Reaktionsmechanismen

Mit dem Fortschritt in der Computertechnik und der Verfeinerung und Entwicklung vor allem physikalischer Messmethoden ist es in den letzten Jahrzehnten möglich geworden, Verbrennungsvorgänge und zumindest einige der dabei ablaufenden Reaktionen aufzuklären. Eine große Herausforderung der Wissenschaft besteht derzeit darin, Reaktionsmechanismen zu entwickeln, die nicht nur in der Lage sind, durchgeführte Experimente nachzuvollziehen, sondern auch Vorhersagen über Bedingungen zu treffen, die nicht Teil der Mechanismen-Entwicklung waren [16].

Andererseits sind auch große, moderne Computer nicht leistungsfähig genug, CFD-Berechnungen mit komplexen Reaktionsmechanismen zur Simulation von chemischen Reaktionen in Strömungen unter wirtschaftlichem Zeitaufwand zu lösen, was deren Einsatz z.B. in der Entwicklung von Verbrennungsmotoren verhindert. Detaillierte chemische Reaktionsmechanismen müssen also für den Einsatz in CFD-Rechnungen reduziert (vereinfacht) werden. Die Entwicklung von Strategien zur Reduktion von Reaktionsmechanismen ist eine weitere Herausforderung an die Wissenschaft.

2.4.5.1 Bestandteile publizierter Reaktionsmechanismen

Chemische Reaktionsmechanismen wie GRI-Mech 3.0 [17] werden häufig im CHEMKIN-II³ Format publiziert. Sie bestehen aus dem eigentlichen Reaktionsmechanismus, erweitert um Thermodynamik- und eventuell Transportdaten. Eine detaillierte Beschreibung findet man in der Dokumentation zum CHEMKIN-II Format [18].

In unten stehender Abbildung 12 ist ein Auszug aus dem Mechanismus von GRI-Mech 3.0 zu sehen. Er beginnt mit einem Kommentar (!). Zwischen ELEMENTS und END werden die beteiligten Elemente definiert, aus denen sich die danach die zwischen SPECIES und END definierten Spezies zusammensetzen dürfen. Danach könnte ein Block mit Thermodynamikdaten folgen. In der Praxis ist dieser üblicherweise in eine eigene Datei ausgelagert. Dann folgt der REACTIONS Block, in dem die verwendeten Einheiten (standardmäßig Kalorien pro Mol) definiert werden und die einzelnen Elementarreaktionen, die hier als Gleichgewichtsreaktionen \rightleftharpoons formuliert worden sind. Nach jeder

³ CHEMKIN ist eine für Verbrennungsvorgänge entwickelte proprietäre Simulationssoftware der Firma Reaction Design. Wegen der weiten Verbreitung der mittlerweile veralteten Version II hat sich dieses Datenformat als de-facto Standard etabliert.

2 – Grundlagen

Reaktion folgen ihre Parameter des erweiterten Arrhenius-Ansatzes in der Reihenfolge A , b und E_A zur Bestimmung der jeweiligen Geschwindigkeitskoeffizienten. Darüber hinaus gibt es noch eine Reihe weiterer Konstrukte, wie z.B. eine Serie von *third body efficiencies* in der Zeile unter trimolekularen Reaktionen, an denen ein Energie zu- oder abführender Stoßpartner M beteiligt ist. Weitere Möglichkeiten sind korrigierte Parameter sowie andere erweiterte Ansätze für hohe bzw. niedrige Drücke.

```
! GRI-Mech Version 3.0 7/30/99 CHEMKIN-II format
! [...]

ELEMENTS
O H C N AR
END

SPECIES
H2 H O O2 OH H2O HO2 H2O2
! [...]
END

REACTIONS CAL/MOLE
2O+M<=>O2+M 1.200E+17 -1.000 .00
H2/ 2.40/ H2O/15.40/ CH4/ 2.00/ CO/ 1.75/ CO2/ 3.60/ C2H6/ 3.00/ AR/ .83/
O+H+M<=>OH+M 5.000E+17 -1.000 .00
H2/2.00/ H2O/6.00/ CH4/2.00/ CO/1.50/ CO2/2.00/ C2H6/3.00/ AR/ .70/
O+H2<=>H+OH 3.870E+04 2.700 6260.00
O+HO2<=>OH+O2 2.000E+13 .000 .00
O+H2O2<=>OH+HO2 9.630E+06 2.000 4000.00
! [...]
END
```

Abbildung 12: Exemplarischer Auszug aus dem Mechanismus-File von GRI-Mech 3.0 [17]

Abbildung 13 zeigt einen Auszug aus der Thermodynamik-Datei. Sie wird verwendet, um Wärmekapazitäten, Enthalpien und Entropien zu berechnen. Nach THERMO werden die Standard-Temperaturbereiche definiert, danach folgen die Daten als eine Bibliothek von Parametern in einem von den NASA Polynomials abgewandelten, strikt definierten, Format. Ein Element der Datenbank ist immer vier Zeilen lang. In der ersten Zeile stehen Speziesbezeichnung, ein Zitat (z.B. *L 1/90*), die Anzahl der Atome, der Aggregatzustand und der Temperaturbereich sowie die Temperatur, bei der vom ersten auf den zweiten Satz an Parametern übergegangen wird. Danach folgen sieben Parameter für den oberen Temperaturbereich und sieben für den unteren Temperaturbereich.

```
THERMO
300.000 1000.000 5000.000
! GRI-Mech Version 3.0 Thermodynamics released 7/30/99
! NASA Polynomial format for CHEMKIN-II
! see README file for disclaimer
O L 1/900 1 G 200.000 3500.000 1000.000 1
2.56942078E+00-8.59741137E-05 4.19484589E-08-1.00177799E-11 1.22833691E-15 2
2.92175791E+04 4.78433864E+00 3.16826710E+00-3.27931884E-03 6.64306396E-06 3
-6.12806624E-09 2.11265971E-12 2.91222592E+04 2.05193346E+00 4
O2 TPIS890 2 G 200.000 3500.000 1000.000 1
3.28253784E+00 1.48308754E-03-7.57966669E-07 2.09470555E-10-2.16717794E-14 2
-1.08845772E+03 5.45323129E+00 3.78245636E+00-2.99673416E-03 9.84730201E-06 3
-9.68129509E-09 3.24372837E-12-1.06394356E+03 3.65767573E+00 4
H L 7/88H 1 G 200.000 3500.000 1000.000 1
2.50000001E+00-2.30842973E-11 1.61561948E-14-4.73515235E-18 4.98197357E-22 2
2.54736599E+04-4.46682914E-01 2.50000000E+00 7.05332819E-13-1.99591964E-15 3
2.30081632E-18-9.27732332E-22 2.54736599E+04-4.46682853E-01 4
! [...]
END
```

Abbildung 13: Exemplarischer Auszug aus dem Thermodynamik-File von GRI-Mech 3.0 [17]

Mittels nachstehender Gleichungen werden für 1mol der Spezies j die Wärmekapazität bei konstantem Druck von 1bar $\bar{C}_{p,j}^0$, die Enthalpie \bar{H}_j^0 und die Entropie \bar{S}_j^0 aus den Parametern berechnet.

$$\frac{\bar{C}_{p,j}^0}{R} = a_{1,j} + a_{2,j}T + a_{3,j}T^2 + a_{4,j}T^3 + a_{5,j}T^4 \quad (2.54)$$

$$\frac{\bar{H}_j^0}{RT} = a_{1,j} + \frac{a_{2,j}}{2}T + \frac{a_{3,j}}{3}T^2 + \frac{a_{4,j}}{4}T^3 + \frac{a_{5,j}}{5}T^4 + \frac{a_{6,j}}{T} \quad (2.55)$$

$$\frac{\bar{S}_j^0}{R} = a_{7,j} + a_{1,j} \ln T + a_{2,j}T + \frac{a_{3,j}}{2}T^2 + \frac{a_{4,j}}{3}T^3 + \frac{a_{5,j}}{4}T^4 \quad (2.56)$$

Durch Multiplikation mit der molaren Masse der Spezies j M_j werden die massenbezogenen Größen aus (2.54) bis (2.56) berechnet. Aus ihnen werden durch Addition der j Größen für die einzelnen Spezies, gewichtet nach ihren Massenanteilen, schließlich die Größen der Mischung berechnet. Reaktionsenthalpien und -entropien werden durch Addition der Produkte aus Standardenthalpie und stöchiometrischem Koeffizienten gebildet, siehe (2.20) und (2.21) auf Seite 15.

Sind bei einer Fragestellung Transportprozesse zu berücksichtigen, ist ein Transportdaten-File hinzuzufügen. Es handelt sich dabei um Aufgabenstellungen mit mindestens einer Ortskoordinate wie freien laminaren Flammen. Dieses File, das in Abbildung 14 auszugsweise für GRI-Mech 3.0 dargestellt ist, besteht aus einer durch Leerzeichen getrennten Liste von Werten: einem Index zwischen 0 und 2 für die geometrische Form der Spezies, Tiefe des Lennard-Jones-Potentialtopfs, Stoßquerschnitt, Dipolmoment, Polarisierbarkeit und einer Rotations-Relaxions-Zahl.

AR	0	136.500	3.330	0.000	0.000	0.000
C	0	71.400	3.298	0.000	0.000	0.000 ! *
C2	1	97.530	3.621	0.000	1.760	4.000
C2O	1	232.400	3.828	0.000	0.000	1.000 ! *
CN2	1	232.400	3.828	0.000	0.000	1.000 ! OIS
C2H	1	209.000	4.100	0.000	0.000	2.500
C2H2	1	209.000	4.100	0.000	0.000	2.500
C2H2OH	2	224.700	4.162	0.000	0.000	1.000 ! *
C2H3	2	209.000	4.100	0.000	0.000	1.000 ! *
C2H4	2	280.800	3.971	0.000	0.000	1.500
C2H5	2	252.300	4.302	0.000	0.000	1.500
C2H6	2	252.300	4.302	0.000	0.000	1.500
! [...]						

Abbildung 14: Exemplarischer Auszug aus dem Transportdaten-File von GRI-Mech 3.0 [17]

2.4.5.2 Mechanismus und Hierarchie

Abbildung 15 zeigt die gängige Hierarchie von Verbrennungsmechanismen. Sie beruht darauf, dass man sich die radikalisch ablaufende Verbrennung als ein ineinander verschachteltes System vorstellen kann. Alle Alkane werden bei hohen Temperaturen (>1100K) durch H-Abstraktion mittels der Radikale $\cdot\text{H}$, $\cdot\text{OH}$, $\cdot\text{O}$ und anschließend β -Zerfall zu Methyl $\cdot\text{CH}_3$ und Ethyl $\cdot\text{C}_2\text{H}_5$ gespalten, sodass man auch die Verbrennung höherer Alkane auf die von Methan und Ethan zurückführen kann.

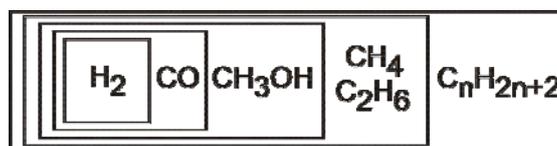


Abbildung 15: Hierarchie der Verbrennungsmechanismen von Alkanen nach [3]

Für CH_4 ist ein solcher Mechanismus in [3] grafisch wiedergegeben. Man sieht, dass es nach der ersten H-Abstraktion zum $\cdot\text{CH}_3$ -Radikal, je nach stöchiometrischen Bedingungen, zwei Möglichkeiten gibt: Im Falle einer stöchiometrischen, vorgemischten Verbrennung erfolgt hauptsächlich weitere Oxidation zu kleineren Bruchstücken, die ihrerseits über mehrere Stufen weiter abgebaut werden. Deshalb bildet auch bei Verbrennungsmechanismen von Alkanen ein H_2/CO -Mechanismus den Kern. Bei fetten Bedingungen läuft der Hauptpfad der Verbrennung jedoch über die Rekombination von zwei $\cdot\text{CH}_3$ -Radikale zum nächsthöheren Alkan Ethan, welches dann schrittweise oxidiert wird.

2.4.5.3 Detaillierungsgrad

Oft sind detaillierte Reaktionsmechanismen nicht geeignet, um in CFD-Simulationen eingesetzt zu werden. Grund dafür ist einerseits ihre große Anzahl an Gleichungen, und andererseits ihre Steifheit. Tabelle 5 zeigt eine grobe Einteilung der Mechanismen für gasförmige Brennstoffe, geordnet nach ihrem Detaillierungsgrad, in Anlehnung an [15].

Tabelle 5: Detaillierungsgrad für Verbrennungsmechanismen gasförmiger Kohlenwasserstoffe

Mechanismus	Spezies	Reaktionen	Einsatzgebiet
detailliert	> 100	> 500	Theoretische Verbrennungsforschung, kinetische Simulation
reduziert	<< 100	<< 500	kinetische Simulation und Kombination mit CFD-Simulation
Skelett	< 50	< 100	Kombination mit CFD-Simulation
global	10 – 20	< 50	Kombination mit CFD-Simulation
Ein-Schritt	< 10	1	Kombination mit CFD-Simulation, Verbrennungsrechnung

2.4.5.4 Reduktion

Mit der Reduktion eines Mechanismus geht ein Verlust an Flexibilität und kinetischer Treue einher. Der Mechanismus wird an spezielle, im Vorhinein festgelegte Bedingungen angepasst. Dabei handelt es sich um Druck- und Temperaturbereiche sowie Spezies und deren Konzentrationen.

In [19] wird beispielsweise ein systematisch reduzierter Mechanismus für die Simulation der Zündung von Methan-Propan-Mischungen bis 20% C_3H_8 im Bereich von 1-40atm und 800-2000K präsentiert, der 50 Spezies in 251 Reaktionen umfasst. Er bildet in einem sehr weiten Bereich Zündverzugszeiten mit einem Fehler von weniger als 5% im Vergleich zu einem detaillierten Mechanismus mit 229 Spezies in 1351 Reaktionen nach. Nach Angabe der Autoren resultiert daraus eine 45-fache Beschleunigung von Simulationen.

Reduktion und Beschleunigung können systematisch nach [19], [15] und [3] auf mehreren Wegen erfolgen: Durch das Weglassen von für das Gesamtergebnis unwichtigen Elementarreaktionen und Spezies, unter Annahme partieller Gleichgewichte und Quasistationarität, durch *Lumping*, und *Solution Mapping (tabellierte Lösungen)*. Von einer intuitiven, händischen Reduktion wird unter anderem in [19] abgeraten, da die Mechanismen mittlerweile zu umfangreich sind, und das händische Reduzieren eine große Fehlerquelle darstellt.

2.4.5.4.1 Weglassen unwichtiger Reaktionen und Spezies

Man kann ausgehend von Reaktionsfluss- und Sensitivitätsanalysen bestimmen, wie sehr die Elementarreaktionen einer Spezies das Gesamtergebnis einer Simulationsrechnung beeinflussen. Setzt man willkürliche Toleranzen und vergleicht die Ergebnisse des reduzierten mit jenen des ursprünglichen Mechanismus, kann man feststellen, ob es in Anbetracht der gesetzten Toleranzen zulässig ist, eine Reaktion aus dem Mechanismus zu entfernen oder nicht. Gelingt es dabei, alle

Elementarreaktionen einer Spezies aus dem Mechanismus unter Einhaltung der Toleranzen zu entfernen, so hat man den Mechanismus um eine Spezies reduziert.

2.4.5.4.2 Quasistationarität und partielle Gleichgewichte

Läuft eine Serie von zwei Reaktionen



hintereinander ab, und handelt es sich bei S_2 um eine kurzlebige, reaktive Spezies, das heißt $k_{23} \gg k_{12}$, so kann man die Konzentration von S_2 als konstant, also *quasistationär* annehmen. Aufgrund dieser Annahme kann das Zeitgesetz für S_3 unter Weglassung von S_2 und k_{23} zu (2.58) vereinfacht werden [3].

$$\frac{dc_{S_3}}{dt} = k_{12} c_{S_1,0} e^{-k_{12}t} \quad (2.58)$$

Bei *partiellen Gleichgewichten* macht man sich zu Nutze, dass besonders bei hohen Temperaturen Elementarreaktionen teilweise mit so hoher Geschwindigkeit ablaufen, dass sich praktisch sofort ein – partielles – Gleichgewicht einstellt. In diesem Fall werden die Reaktionsgeschwindigkeiten für Vor- und Rückreaktion gleich groß, sodass man das Gleichungssystem nach gut messbaren Spezies lösen kann. Wie in [3] gezeigt, liefert diese Annahme nur bei hohen Temperaturen – im gezeigten Beispiel der Wasserstoffverbrennung unter atmosphärischen Bedingungen ab 1600K – gute Ergebnisse.

2.4.5.4.3 Lumping

Die Verbrennung großer Brennstoffmoleküle läuft unter Isomerisierung ab, wie beispielsweise die Wasserstoffabstraktion am x-ten Kohlenstoffatom. Es sind dabei umso mehr Isomere möglich, je größer das ursprüngliche Brennstoffmolekül ist. Die weiteren Reaktionsschritte der so gebildeten Isomere sind in der Regel gleich oder zumindest ähnlich. In guter Näherung lassen sich so alle Isomere, die z.B. durch Wasserstoffabstraktion entstehen, zu einer Spezies mit gemittelten Eigenschaften zusammenfassen. Diese Strategie des Zusammenfassens von Isomeren wird *Lumping* genannt.

2.4.5.4.4 Tabellierte Lösungen

Komplizierte, immer wiederkehrende Berechnungen können vereinfacht werden, indem sie einmal für alle relevanten Bedingungen berechnet und in einer Tabelle abgespeichert werden. Setzt man eine effiziente Speicherung und einen guten Suchalgorithmus voraus, kann auf diese Art die Rechenzeit verkürzt werden. Ein Nachteil tabellierter Lösungen ist, dass diese Strategie nur für zu erwartende Problemstellungen angewandt werden kann.

Darüber hinaus existieren noch eine Reihe weiterer systematischer Verfahren. Eine Auflistung dieser Verfahren mit Zitaten ist in [19] zu finden.

2.4.6 Analytik zur Validierung von Verbrennungsmechanismen

Ist auf der Basis kinetischer Untersuchungen an in der Regel stationären Flammen ein Mechanismus entwickelt worden, so muss dieser an geeigneten Apparaturen für Bedingungen, die der praktischen Anwendung (im vorliegenden Fall Gasmotoren) näher kommen, validiert werden. Die kinetischen Untersuchungen finden oft unter konstanten Bedingungen in laminarer Strömung an stationären Flammen, mit Edelgasen verdünnt und unter atmosphärischem oder reduziertem Druck statt. Diese Bedingungen sind weit entfernt von jenen, wie sie in Ottomotoren herrschen: Die Zustandsvariablen Druck, Temperatur und Volumen ändern sich durch die Kolbenbewegung und die Stellung der

Ventile; darüber hinaus ist die Temperatur im Zylindervolumen nicht homogen. Im Falle einer klopfenden Verbrennung muss auch der Druck auf Grund der Schockwelle als inhomogen angenommen werden. Es liegt eine turbulente Strömung vor. Die Flamme ist instationär und statt mit Edelgasen wird mit Abgas verdünnt (*Abgasrückführung AGR* bzw. *exhaust gas recirculation EGR*) um die NO_x -Bildung hintanzuhalten. Überdies ist und der Druck stark erhöht.

Für die Validierung von Verbrennungsmechanismen unter Bedingungen, wie sie im Motor herrschen, werden vor allen zwei Apparaturen eingesetzt: Stoßrohre und Rapid Compression Machines. Auf sie wird im Folgenden genauer eingegangen. Beide messen in erster Linie den "Summenparameter" Zündverzugszeit ausgehend vom Druckverlauf. Sie können je nach Instrumentierung auch für die Analyse von Speziesprofilen verwendet werden. Stoßrohre decken dabei den Bereich hoher Temperaturen ab (1100-2000K), während Rapid Compression Machines den Niedertemperaturbereich (600-1100K) abdecken [20].

2.4.6.1 Stoßrohr

Mit Stoßrohren (*shock tubes, ST*) kann man einen Kolbenhub in einer Apparatur ohne bewegliche (Verschleiß-) Teile simulieren. Das Stoßrohr besteht dabei aus einem langen, in der Regel geraden Rohr, welches z.B. durch ein Aluminium-Diaphragma in zwei Bereiche unterteilt ist, einen Hochdruckbereich (Treiber) und einen Niederdruckbereich. Im Treiberrohr liegt ein Edelgas unter hohem Druck vor, im Niederdruckbereich befindet sich die Probe. Das Ende des getriebenen Bereichs des Stoßrohres ist mit Drucksensoren und optischen Analysemethoden wie FTIR (*Fouriertransformations-Infrarotspektroskopie*), LAS (*Laserabsorptionsspektrometrie*) und LIF (*Laserinduzierte Fluoreszenz*) ausgestattet. Es ist ebenfalls möglich, mit GC/MS (Gaschromatographie mit nachgeschalteter Massenspektrometrie) Proben zu analysieren. Abbildung 16 zeigt die Proportionen und grobe Abmessungen eines Hochdruckstoßrohres sowie die Instrumentierung am Ende des Niederdruckbereichs.

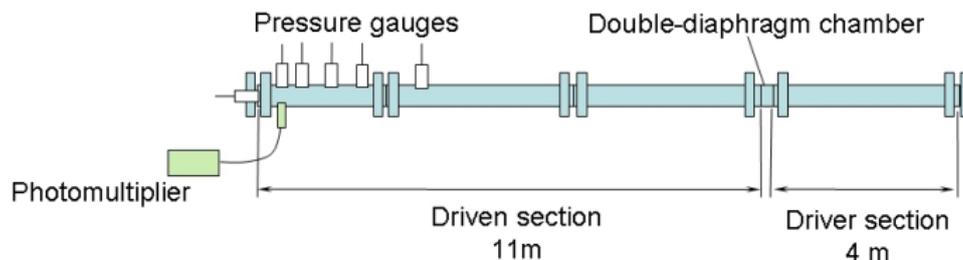


Abbildung 16: Prinzipskizze des Hochdruck-Stoßrohres TH3 des Stoßwellenlabors der RWTH Aachen [21]

Wird das Diaphragma schlagartig entfernt, breitet sich eine Schockwelle in den Niederdruckbereich aus. Sie wirkt wie ein Kolben auf die Probe, die komprimiert und erwärmt wird. Des Weiteren läuft eine Serie weiterer Wellen in die Gegenrichtung. Erreicht die Schockwelle das Ende des Stoßrohres, wird sie an ihm reflektiert und läuft noch einmal durch die verdichtete Probe, wodurch diese noch weiter komprimiert und erwärmt wird. Hinter dieser reflektierten Schockwelle können Zündungen gemessen werden. Allerdings bleibt sehr wenig Zeit (μs bis einige ms), bis die Schockwelle mit den ebenfalls reflektierten, entgegengesetzt laufenden Wellen interferiert. Temperatur und Druck werden aus der gemessenen Ausbreitungsgeschwindigkeit der Schockwelle berechnet, wobei man einen breiten Temperatur- und Druckbereich realisieren kann. Aufgrund der einschränkenden experimentellen Randbedingungen beschränkt man sich in Stoßrohren eher auf Hochtemperaturrexperimente.

2.4.6.2 Rapid Compression Machine

Rapid Compression Machines (RCM, auch *schnelle Kompressionsmaschine* oder *Einhubtriebwerk* genannt) bilden einen Kompressionshub des Verbrennungsmotors nach, wobei der Kolben das Probevolumen rasch komprimiert und am oberen Totpunkt stehen bleibt. Es gibt sie in Ein-Kolben- und Zwei-Kolben-Ausführung, wobei die Zwei-Kolben Ausführung vorteilhafter ist, da die Probe stärker komprimiert wird und eine Symmetrieebene im komprimierten Gas vorhanden ist. Die unten stehende Abbildung 17 zeigt links die Zwei-Kolben-RCM des Combustion Chemistry Centre der National University of Ireland in Galway. Ihr symmetrischer Aufbau ist deutlich zu sehen. Rechts ist in Abbildung 17 einer der beiden Kolben im Detail dargestellt. Gut zu sehen ist der Ringspalt (Pfeil), auf den im Folgenden näher eingegangen wird.



Abbildung 17: Die Zwei-Kolben-RCM in Galway und ein Detailfoto eines ihrer Kolben [22].

RCM werden mit der zu vermessenden Probe gefüllt und der Anfangsdruck sowie bei Bedarf die Anfangstemperatur eingestellt. Um die Homogenität der Probe bei der Kompression zu erhalten, kann man durch eine spezielle Ausführung der Kolben mit Ringspalt (*creviced pistons*) verhindern, dass Gas aus der thermischen Grenzschicht der Zylinderwand durch die Kolbenbewegung zur Zylindermitte hin verwirbelt wird. Die Grenzschicht wird dabei in dem dafür vorgesehenen Spalt am Rand des Kolbens aufgenommen. Die Instrumentierung einer RCM ist von den Messmethoden her mit der eines Stoßrohres vergleichbar. Auch hier finden sich neben schnellen Drucksensoren diverse optische Messmethoden sowie die Möglichkeit, Proben mittels GC/MS zu analysieren.

Die Modellierung eines RCM-Experiments ist schwierig: einerseits darf aufgrund der niedrigeren Temperaturen und daraus folgenden längeren Zündverzugszeiten (ab 1ms) der Wärmeverlust des komprimierten Gases an die Wand nicht vernachlässigt werden, andererseits befindet man sich bei RCM-Experimenten bei vielen Brennstoffen im Bereich eines negativen Temperaturkoeffizienten (NTC) der Zündverzugszeit, der aufwändig zu modellieren ist. Um störende Effekte aufgrund des Wärmeverlustes zu bestimmen, müssen nichtreaktive Experimente zu jedem Satz von Parametern durchgeführt werden [23]. Bei diesen Experimenten wird der Sauerstoff der Gasmischung durch Stickstoff ersetzt, der ungefähr die gleiche Wärmekapazität besitzt. Aus den Druckverläufen dieser Experimente wird ein Volumenprofil erstellt, wobei als Äquivalent zum Wärmeverlust eine adiabate Expansion des Gases modelliert wird. Dies hat den Vorteil, dass der gleiche Effekt erzielt wird, ohne den Wärmeübergang vom Gas auf die Zylinderwände bestimmen zu müssen. Damit kann das Modell weiterhin räumlich nulldimensional bleiben.

3 Simulation

3.1 Simulationssoftware

Die verwendete Simulationssoftware für die nachfolgend beschriebenen Berechnungen war COSILAB Version 3.3.2 6652 für Windows 32-bit bzw. 64-bit der Firma Rotexo [24]. Ein Screenshot dieser Software ist in Abbildung 18 zu sehen. Simuliert wurde auf einem 3,17 GHz Intel Core2 Duo E8500 Rechner mit 2 GB RAM unter Microsoft Windows XP 32-bit SP3 und einem 3,40 GHz Intel Pentium 4 HT Rechner mit 4 GB RAM unter Microsoft Windows 7 64-bit SP1.

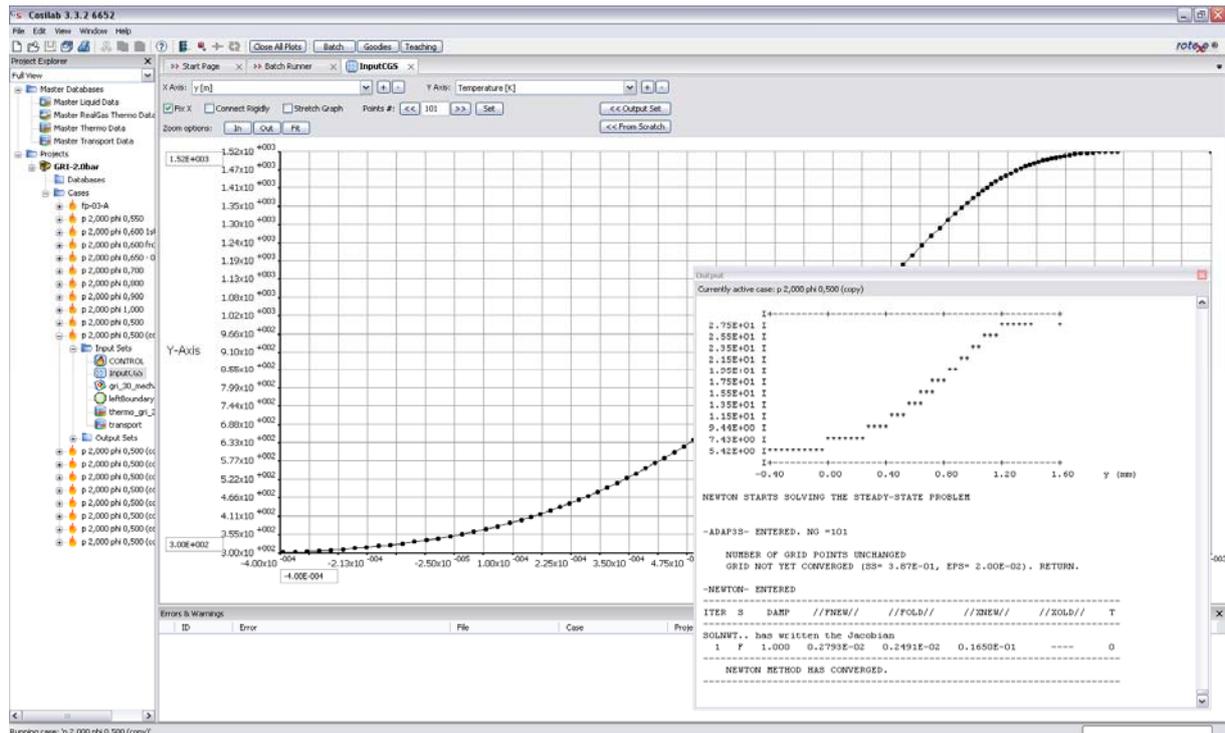


Abbildung 18: Screenshot von COSILAB 3.3.2 bei der Berechnung von s_l mittels Newton-Verfahren

COSILAB ist im Grunde eine grafische Benutzeroberfläche (GUI, *graphical user interface*) zu einer Reihe von Kommandozeilen-Programmen, die bei der Simulation im Hintergrund ablaufen. Es gibt Kommandozeilenprogramme für verschiedene Problemstellungen, wie zB RUN1DL, das die Simulation eindimensionaler laminarer Flammen behandelt. Das hat einerseits den Vorteil, dass diese Programme zumindest theoretisch auf Großrechnern laufen können und herstellerseitig ohne größeren Aufwand auf verschiedene Rechnerarchitekturen und Betriebssysteme portiert werden können, sofern ein entsprechender Compiler verfügbar ist. Andererseits hat es den Nachteil, dass sie relativ starr programmiert sind. Deshalb unterscheidet sich COSILAB trotz des GUI, das dem Benutzer weitgehend die textbasierte Arbeit mit Input- und Output-Files abnimmt, in der Bedienung erheblich von weit verbreiteten alltäglichen Computeranwendungen. In einigen Fällen kommt man nicht an der Arbeit mit Textdateien vorbei, wie beispielsweise bei der Eingabe von ganzen Mechanismen oder Thermodynamik- und Transportdatenbanken.

In COSILAB sind Daten in einer *Project*-Datei zusammengefasst, diese wird mit der Endung *.cpj gespeichert. Sie besteht aus mehreren *Cases*, den einzelnen Problemstellungen. In Abbildung 18 sind das orange Flämmchen, die freie laminare Flammen symbolisieren. Die Cases bestehen wiederum aus mehreren Elementen, die von der Art der Simulationsaufgabe abhängig sind. Im Fall von

laminaren freien Flammen und homogenen Batch-Reaktoren sind das: *Control document* (allgemeine Angaben), *Fuel document* (Zusammensetzung und Temperatur des Gasgemischs), Mechanismus-, Thermodynamik- und für freie Flammen Transportdatenbank sowie, je nach Experiment, *CGS Input profiles* (Startwerte). Das Anlegen oder Ändern von Cases oder ihren Elementen gestaltet sich bei größeren Projects sehr zeitaufwändig, da das gesamte Project als eine einzige große Textdatei organisiert ist. Suche und/oder Präprozessor (Eingabeprüfung und Aufbereitung) sind offenbar nicht darauf ausgelegt, auch umfangreichere Projects mit mehreren Cases effizient zu verarbeiten, wodurch die Wartezeit mit Anzahl und Umfang der Cases stark anwächst.

3.2 Steifheit und Lösungsverfahren

Laufen die Elementarreaktionen mit stark unterschiedlichen Geschwindigkeiten (Zeitskalen) ab, resultieren daraus Probleme für das numerische Lösen des Differentialgleichungssystems. Als *Steifheitsgrad* wird hierzu eine Kennzahl definiert, die sich aus dem Quotienten des größten und kleinsten negativen Eigenwerts der sogenannten *Jacobi-Matrix* bildet. Der Steifheitsgrad steht somit für die maximalen Unterschiede der Zeitskalen in einem System gewöhnlicher Differentialgleichungen. Selbst wenn man sich im Prinzip nur mit den geschwindigkeitsbestimmenden (und somit langsamsten) Reaktionsschritten auseinandersetzen möchte, muss numerisch das gesamte Gleichungssystem gelöst werden [3].

Abbildung 19 zeigt, wie sich chemische Zeitskalen über einen enormen Bereich von zehn Größenordnungen erstrecken, während physikalische Prozesse, wie sie in CFD-Simulationen gewöhnlich berechnet werden, einen sehr viel kleineren Bereich von ca. zwei Größenordnungen umfassen. Dieser liegt aber im Bereich von chemischen Reaktionen, sodass chemische und physikalische Prozesse gekoppelt betrachtet werden müssen.

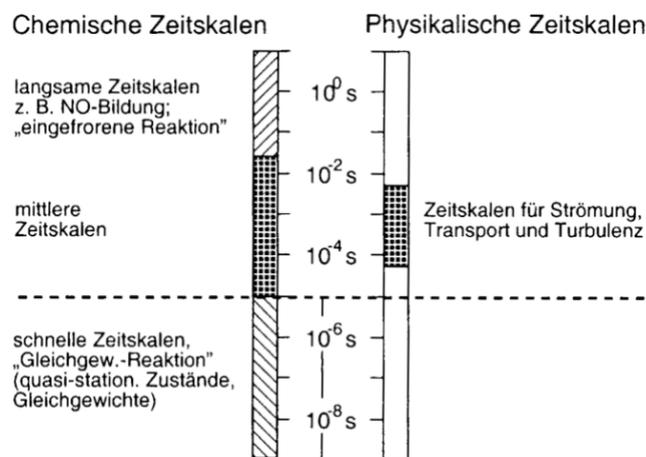


Abbildung 19: Bei chemischen Reaktionen relevante Zeitskalen [3]

Es existieren numerische Lösungsverfahren, die mit den durch die Steifheit des Gleichungssystems hervorgerufenen Instabilitäten umgehen können. Diese robusten, aber rechenaufwändigen Verfahren gehören zur Klasse der *impliziten* Lösungsverfahren.

3.3 Beschreibung der Simulationen

Es waren die laminaren Flammgeschwindigkeiten und die Zündverzugszeiten für verschiedene Drücke, Luftzahlen, Temperaturen und Gaszusammensetzungen mit einer Auswahl von Reaktionsmechanismen zu berechnen.

Die Zündverzugszeiten waren als $\max\left(\frac{dp}{dt}\right)$ relativ schnell und einfach zu bestimmen. Die Rechenzeit war je nach Computer und verwendetem Reaktionsmechanismus in der Größenordnung von zehn Sekunden pro einzelner Simulation. Als vereinfachende Annahmen wurde der Reaktor als nulldimensional, adiabatisch und ideal durchmischter Rührkessel mit konstantem Volumen betrachtet.

Die laminaren Flammgeschwindigkeiten wurden mit Hilfe des Experiments "1-dimensionale freie Flamme" berechnet. Als Vereinfachungen kamen sowohl die Betrachtung nur in einer Raumrichtung z sowie die freie Flamme zum Tragen. Das heißt, dass keine Randeffekte wie Quenching an einer Oberfläche im Brennraum oder Krümmung der Flammenfront am Brennerrand berücksichtigt wurden. Trotz dieser vereinfachenden Annahmen war die Berechnung der laminaren Flammgeschwindigkeit mit Rechenzeiten in der Größenordnung von Stunden pro einzelner Simulation um einiges aufwändiger als die Berechnung der Zündverzugszeit. Die Flamme musste im Gegensatz zum nulldimensionalen idealen Rührkessel mit Hilfe von Startwerten berechnet werden, was ein iteratives Vorgehen nötig machte: War beispielsweise die Flamme bei einem Druck von 100bar zu simulieren, so mussten die dazu nötigen Startwerte, ausgehend von einfacheren Fällen (ursprünglich für 2bar aus einem Tutorial-Beispiel), in mehreren Schritten herangeführt werden. Trotz der Robustheit von impliziten Lösungsverfahren konnten keine allzu großen Schrittweiten gewählt werden, ohne dass sich die Stabilität deutlich verschlechterte. Um falsche Ergebnisse wie unstetige Spezieskonzentrationen über den Ort zu vermeiden, mussten lange Rechenzeiten in Kauf genommen werden.

In Abbildung 20 sind $T(z)$ und $\dot{m}(z)$ für ein unbrauchbares Ergebnis zu sehen. Während dies aus der T-Kurve (oben) nicht unmittelbar hervorgeht, zeigt sich dies deutlich am nicht konstanten und in der rechten Hälfte unstetigen Massenfluss. Dieses Ergebnis zeigt weiters, dass die Ergebnisse von Simulationsrechnungen immer kritisch hinterfragt und überprüft werden müssen. Zöge man zur Bewertung des gesuchten Werts, also der laminaren Flammgeschwindigkeit, nur den Temperaturverlauf heran, fiel das unphysikalische Ergebnis gar nicht auf.

3 – Simulation

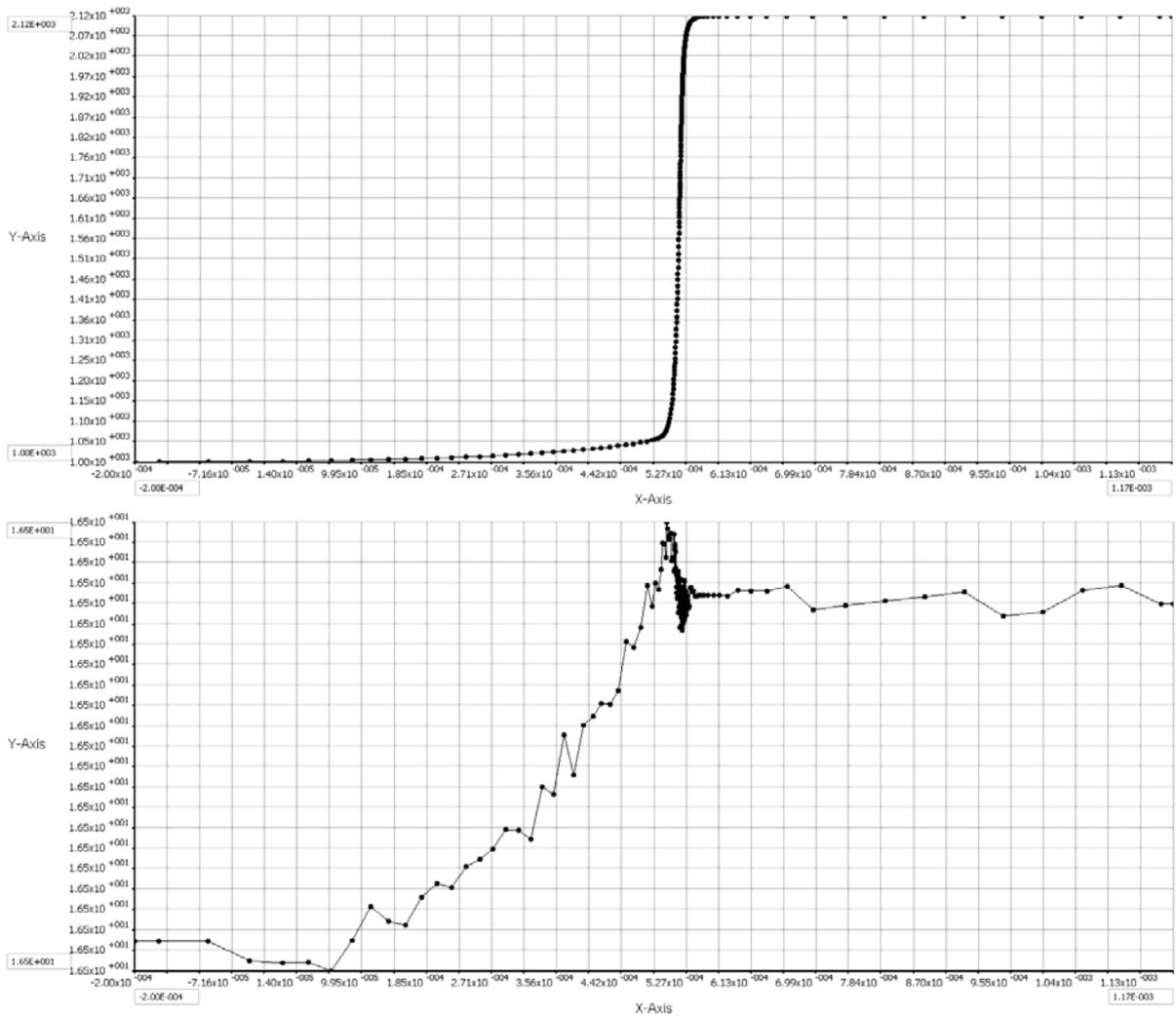


Abbildung 20: Screenshot einer unbrauchbaren Simulation einer freien Flamme. Oben sieht man den Temperaturverlauf von 1000K bis 2120K in Abhängigkeit vom Ort. Dieser entspricht den Erwartungen. Unten ist der Massenstrom [kg/(s m²)] in Abhängigkeit vom Ort zu sehen. Dieser ist – wider Erwarten – nicht konstant, was dem Massenerhalt widerspricht.

Die freie Flamme wurde mit Hilfe eines Gitters modelliert, wobei das Gitter in jenem Punkt an der Flamme "befestigt" wurde, in dem die Temperatur 100K über dem Anfangswert lag, wodurch zeitlich stationäre Bedingungen geschaffen wurden. Die Wahl des Gitterpunktes, über den dieses *flame fixing* durchgeführt wurde, hängt von der Gesamtgröße des Gitters ab. Sie wurde dem numerischen Lösungsalgorithmus (*Solver*) überlassen. Die Reaktion läuft nicht gleichmäßig über das ganze Gitter verteilt ab, sondern in einer mit steigendem Druck immer enger werdenden Zone. Für ein aussagekräftiges Ergebnis muss diese Zone jedoch so genau berechnet werden, dass man in guter Näherung stetig differenzierbare (glatte) Funktionsverläufe erhält. Deshalb werden die Gitterpunkte nicht äquidistant gesetzt, sondern verstärkt im Bereich der Reaktionszone, wobei die Positionierung und Anzahl der Gitterpunkte dem *Solver* überlassen wurden. Es wurden dem *Solver* lediglich Parameter angegeben, mit deren Hilfe das Gitter berechnet wird. Sie wurden aus einem Tutorial-Beispiel für die Berechnung einer freien Flamme bei erhöhtem Druck übernommen.

Wie bereits erwähnt, wurden die Ergebnisse der freien Flammen-Simulationen kritisch hinterfragt: Es wurden die Speziesverläufe auf Unstetigkeiten, Oszillieren und eventuell zu eng gewählte Geometrien geprüft. Zum Überprüfen der Geometrie wurde die Bedingung gewählt, dass die Konzentration einer Spezies in den drei Gitterpunkten am unteren sowie oberen Rand des Gitters

konstant sein soll. NO_x war von dieser Regel ausgenommen, da es durch die hohe Temperatur am oberen Ende des Gitters laufend gebildet wird.

Weiters war zu beachten, dass keiner der untersuchten Reaktionsmechanismen für die zu simulierenden Bedingungen entwickelt worden ist. Besonders der Druck war deutlich höher und nur NUIG NGM3 und POLIMI C<4 decken den Niedertemperaturbereich detailliert ab. Extrapolierungen sind besonders kritisch: Einerseits ist aus den verfügbaren Daten nicht bekannt, ob Druck- und Temperaturabhängigkeit der Geschwindigkeitskoeffizienten sowie ihr Verhältnis zueinander in diesem Bereich korrekt modelliert sind. Andererseits kann man davon ausgehen, dass Reaktionsmechanismen nach bestem Wissen und Gewissen entwickelt worden sind und so den Stand der Wissenschaft zum Zeitpunkt ihrer Publikation widerspiegeln. In Anbetracht dieses Dilemmas und der Tatsache, dass die Zündverzugsimulationen mit dem Ziel, Messbedingungen für RCM-Experimente aufzufinden, durchgeführt wurden, wurden die Toleranzen des Solvers etwas kleiner gewählt.

3.3.1 Zündverzugsimulationen

Bevor größere Parametervariationen berechnet wurden, ist eine nur 54 Elemente umfassende, aber einen weiten Bereich von Bedingungen abdeckende Variation als Vorversuch berechnet worden. Die vorgegebenen Daten dieses Vorversuchs sind in Tabelle 6 dargestellt.

Tabelle 6: Daten der Vorversuche und der durchgeführten Variationen

Eigenschaft und Einheit	Wert(e)
Control Document	
Volumen [m ³]	1,00E+000
Anfangsdruck [bar]	Variation: {80,00; 120,00}
Wärmefluss	adiabat
Basis der Zündverzugs-Berechnung	$\max(dp/dt)$
Start ohne Anfangswerte	Ja
Datentransfer: Einheit	Molenbruch
Startzeit [s]	0,00E+000
Endzeit [s]	5,00E+000
Maximale Anzahl Zeitschritte [-]	10000
Schrittweite erster Zeitschritt [s]	1,00E-030
Toleranz: relativ [-]	1,00E-005
Toleranz: absolut [-]	1,00E-010
Fuel Document	
Anfangstemperatur [K]	Variation: {700,00; 800,00; 900,00}
λ [-]	Variation: {1,50; 1,70; 1,90}
Verhältnis gasförmig : flüssig : fest	1,00 : 0,00 : 0,00
Brenngas Molenbruch C_3H_8 [-] (Rest: CH_4)	Variation: {0,00; 0,10; 0,30}
Oxidationsmittel Molenbruch O_2 [-]	0,210
Oxidationsmittel Molenbruch N_2 [-]	0,790
Reaktionsprodukte	$\text{CO}_2, \text{H}_2\text{O}, \text{N}_2$

Ausgehend von den Ergebnissen der Vorversuche, die sich im Anhang finden, wurden detailliertere Parametervariationen durchgeführt.

3.3.1.1 Gemeinsame Parameter

Parameter von Zündverzugs-Berechnungen, die für alle Experimente gleich waren, können Tabelle 7 entnommen werden. Die Luftzahl λ war beim überwiegenden Teil der Berechnungen konstant 1,9. Abweichungen werden gesondert angegeben.

Tabelle 7: Gemeinsame Parameter aller Zündverzugssimulationen

Eigenschaft und Einheit	Wert(e)
Control Document	
Volumen [m ³]	1,00E+000
Wärmefluss	adiabat
Basis der Zündverzugs-Berechnung	$\max(dp/dt)$
Start ohne Anfangswerte	Ja
Datentransfer: Einheit	Molenbruch
Startzeit [s]	0,00E+000
Endzeit [s]	5,00E+000
Maximale Anzahl Zeitschritte [-]	10000
Schrittweite erster Zeitschritt [s]	1,00E-030
Toleranz: relativ [-]	1,00E-005
Toleranz: absolut [-]	1,00E-010
Fuel Document	
λ [-]	1,90 (sofern nicht anders angegeben)
Verhältnis gasförmig : flüssig : fest	1,00 : 0,00 : 0,00
Oxidationsmittel Molenbruch O ₂ [-]	0,210
Oxidationsmittel Molenbruch N ₂ [-]	0,790
Reaktionsprodukte	CO ₂ , H ₂ O, N ₂

3.3.1.2 Parametervariation

Aus Tabelle 8 sind die Variationen von Anfangsdruck, Temperatur und Brenngaszusammensetzung ersichtlich. Diese Parameterstudie umfasst somit 1248 Variationen.

Tabelle 8: Daten der Parametervariation der Zündverzugssimulationen

Eigenschaft und Einheit	unterer Wert	oberer Wert	Intervall
Control Document			
Anfangsdruck [bar]	70,00	140,00	10bar äquidistant
Fuel Document			
Anfangstemperatur [K]	700,00	1000,00	25K äquidistant
Brenngas: Molenbruch C ₃ H ₈ [-] (Rest: CH ₄)	0,00	1,00	0,00; 0,01; 0,02; 0,03; 0,05; 0,10; 0,15; 0,20; 0,30; 0,50; 0,75; 1,00

Die Abhängigkeit der Zündverzugszeit von der Luftzahl λ wurde separat berechnet. Dazu wurde für die Fälle (100bar, 20% C₃H₈, 850K) und (100bar, 5% C₃H₈; 800K) λ von 1,5 bis 2,5 in Schritten von 0,1 variiert.

Alle Parametervariationsdaten finden sich in vollem Umfang im Anhang. Einzelne Serien werden im Kapitel "Ergebnisse und Diskussion" besprochen.

3.3.2 Flammgeschwindigkeitssimulationen

3.3.2.1 Gemeinsame Parameter

Parameter von Berechnungen der laminaren Flammgeschwindigkeit s_L , die für alle Experimente gleich waren, können Tabelle 9 entnommen werden. Die Luftzahl λ wurde für alle Berechnungen mit 1,9 vorgegeben.

Tabelle 9: Gemeinsame Parameter aller Berechnungen der laminaren Flammgeschwindigkeit

Eigenschaft und Einheit	Wert(e)
Control Document	
Art der Flamme	1-dimensional, frei
Flame fixing-Temperatur [K]	+100
Modellverfeinerung	Soret-Effekt
chemischer Mechanismus	detailliert
Druckberechnung	konstanter Druck vorgegeben
Temperaturberechnung	aus Energieerhaltung
Gitteranpassung	für alle Variablen, Spline-Interpolation
max. Anzahl Zeitschritte	50; von $t = 0,00E+000$ s bis $t = 1,00E+005$ s
- Schrittgrößen [s]	min. $1,00E-012$; max. $1,00E+005$; Startwert $1,00E-006$
max. Anzahl Gitterpunkte [-]	400
Toleranz: relativ [-]	$1,00E-004$
Toleranz: absolut [-]	$1,00E-008$
Fuel Document	
λ [-]	1,90
Verhältnis gasförmig : flüssig : fest	1,00 : 0,00 : 0,00
Oxidationsmittel Molenbruch O_2 [-]	0,210
Oxidationsmittel Molenbruch N_2 [-]	0,790
Reaktionsprodukte	CO_2, H_2O, N_2

3.3.2.2 Parametervariation

Aus Tabelle 10 sind die Variationen von Anfangsdruck, Temperatur und Brenngaszusammensetzung ersichtlich. Diese Parameterstudie umfasst somit 24 Variationen.

Alle Parametervariationsdaten finden sich in vollem Umfang im Anhang. Einzelne Serien werden im Kapitel "Ergebnisse und Diskussion" besprochen.

Tabelle 10: Daten der Parametervariation der Berechnungen der laminaren Flammgeschwindigkeit

Eigenschaft und Einheit	Werte	
Control Document		
Anfangsdruck [bar]	Variation {70,00; 100,00}	
Fuel Document		
Anfangstemperatur [K]	Variation {700,00; 850,00; 1000,00}	
Brenngas CH₄ (Molenbrüche) [-]	CH ₄	1,000000E+000
Brenngas Mix1 (Molenbrüche) [-]	CH ₄	9,441000E-001;
	C ₂ H ₆	3,960000E-002;
	C ₃ H ₈	1,630000E-002
Brenngas Mix2 (Molenbrüche) [-]	CH ₄	8,864000E-001;
	C ₂ H ₆	3,720000E-002;
	C ₃ H ₈	7,640000E-002
Brenngas Mix3 (Molenbrüche) [-]	CH ₄	7,320000E-001;
	C ₂ H ₆	3,060000E-002;
	C ₃ H ₈	2,374000E-001

4 Ergebnisse und Diskussion

4.1 Ergebnisse der Literaturrecherche zu Mechanismen

Es wurde eine umfangreiche Literaturrecherche nach verfügbaren Verbrennungsmechanismen für kurzkettige Alkane unternommen. Sie ist in Tabelle 11 auf Seite 39f. zusammengestellt. Jene Mechanismen, die für die Parametervariation der Zündverzugszeit verwendet wurden, wurden hervorgehoben. Angegeben sind jeweils das Jahr der Publikation, die Anzahl der Spezies und Gleichungen, die Szenarien, für welche die Mechanismen erstellt worden sind, sowie ein Literaturzitat oder die Fundstelle im Internet. Darüber hinaus ist der Tabelle zu entnehmen, ob die Mechanismen die NO_x -Bildung umfassen, neben Methan auch Ethan und Propan beinhalten, ob Transportdaten für die jeweiligen Mechanismen verfügbar sind, sowie weitere Anmerkungen.

Es wurden 25 Mechanismen gefunden, wovon sechs (GRI-Mech 1.2 und 2.11, KONNOV 0.5, NUIG NGM 1 und 2 sowie WARNATZ) als veraltet betrachtet wurden. An ihnen erkennt man die Weiterentwicklung der Simulation chemischer Kinetik (Anzahl der Spezies und Anzahl der Gleichungen).

Einige, wie die LEEDS Mechanismen, sind für die Aufgabenstellung (Verbrennung von Methan-Propan-Mischungen) zu klein, da sie die Propan-Verbrennung nicht abdecken. Auch GRI-Mech 3.0 deckt die Propanverbrennung, besonders im Hinblick auf Zündverzugszeiten, nur unzureichend ab. Der Mechanismus POLIMI CRECK full wurde nicht berechnet, da er mit 14631 Gleichungen für die im Zuge dieser Arbeit zur Verfügung stehenden Rechner zu groß war.

Vielen Mechanismen fehlt die Behandlung der NO_x -Bildung. Brennstoff- NO_x kann beim betrachteten System Methan-Propan ausgeschlossen werden. Es kann die NO_x -Chemie für thermisches und promptes NO in Form des SAN DIEGO NOX Add-On extra hinzugefügt werden. In dieser Arbeit wurde das SAN DIEGO NOX Add-On vorerst nur zum SAN DIEGO Mechanismus hinzugefügt, da das Add-On explizit für diesen Mechanismus entwickelt worden ist, und die Konsistenz somit als gewährleistet betrachtet werden kann. Vor einer Verwendung als Add-On für andere Mechanismen wären die Auswirkungen einer solchen Kombination sowohl auf den NO_x -Teil, als auch auf den Verbrennungsteil genau zu untersuchen, um die Konsistenz des Mechanismus sicherzustellen.

Transportdaten, die für die Berücksichtigung des nichtidealen Verhaltens bei Rechnungen mit mindestens einer Raumkoordinate von Bedeutung sind, waren nicht überall verfügbar. Sie können zwar ausgehend von theoretischen Überlegungen berechnet bzw. geschätzt werden, jedoch wäre dies zum Beispiel für die 293 Spezies des NUIG NGM3 Mechanismus einerseits sehr zeitaufwändig und erfordert andererseits Kenntnis, was genau unter Spezies wie TIC4H7Q2-I oder IC4KETIT zu verstehen ist. Dies ist manchmal nicht direkt dokumentiert, sondern nur über Auswertung der Thermodynamikdaten und Reaktionsflussanalysen zugänglich. Dadurch wird das Berechnen von Transportdaten erschwert.

Kein Mechanismus der nachfolgenden Tabelle ist für Alkane von Methan bis Propan und hohe Drücke von deutlich über 100bar, wie sie als Druckspitzen bei einem klopfenden Zyklus auftreten können, validiert. Die höchsten validierten Drücke für Zündverzugszeiten findet man in den NUIG NGM Mechanismen mit 30atm, was zu einer erheblichen Extrapolation selbst für den angestrebten Verdichtungsdruck von knapp 100bar führt. Zur Verteidigung dieser Strategie sei angeführt, dass nach [3] die Druckabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten mit steigendem Druck

abnimmt, und die vorhandenen Mechanismen als *state of the art*, als auf dem aktuellen Stand des Wissens in der Simulation chemischer Kinetik, zu betrachten sind.

Was die Auswahl geeigneter Mechanismen deutlich einschränkte, war der Umstand, dass sich die meisten auf die Hochtemperaturverbrennung beschränkten. Nur die Mechanismen NUIG NGM 3 und POLIMI CRECK full decken auch den Niedertemperaturbereich ab. Obwohl der SAN DIEGO Mechanismus nach Angaben seiner Quelle sich ebenfalls eher auf Hochtemperaturchemie beschränkt, wurde er aufgrund seiner Resultate bei den Zündverzugszeit-Berechnungen für Parametervariationen ausgewählt.

Da zum POLIMI CRECK full Mechanismus eine genaue Beschreibung der Spezies vorhanden war, konnte er selbst gekürzt werden. Dazu wurde angenommen, dass bei magerer Verbrennung Reaktionen, die zu Spezies mit mehr Kohlenstoffatomen als der Brennstoff führen, vernachlässigbar seien. Daraufhin wurden alle Spezies mit mehr als vier Kohlenstoffatomen aus dem Mechanismus entfernt. Der so erhaltene Mechanismus, POLIMI C<5 genannt, umfasst 185 Spezies in 4259 Reaktionen. Er wurde zur Überprüfung der oben beschriebenen Annahme verwendet.

Als nächstes wurden alle Spezies mit mehr als drei Kohlenstoffatomen entfernt. Aus diesem, POLIMI C<4 genannten, Mechanismus wurden schließlich die Spezies C_3H_6OH und C_3H_6OHO entfernt, welche durch das Kürzen nicht mehr in Verbindung mit dem restlichen Mechanismus standen. Dadurch umfasst POLIMI C<4 127 Spezies in 2000 Reaktionen.

Um die Annahme, das Kürzen würde sich nicht wesentlich auf die Zündverzugszeit τ bei mageren Bedingungen auswirken, zu überprüfen, wurden POLIMI C<5 und POLIMI C<4 für die im Kapitel "Simulation" beschriebenen Elemente der Parametervariation miteinander verglichen. POLIMI C<4 berechnet minimal kürzere τ , mit einem Minimum bei 99,6% der τ von POLIMI C<5, einem Maximum von 100% und einem Mittelwert von 99,9% der τ des deutlich umfangreicheren Mechanismus. Die größte Abweichung findet sich bei 825K und 50%-75% Propangehalt. Die beste Übereinstimmung findet sich – erwartungsgemäß – für reines Methan. Aufgrund dieser sehr guten Übereinstimmung wurde nur POLIMI C<4 für den grafischen Vergleich der Zündverzugszeiten herangezogen.

Es wurden somit vier Mechanismen für Parametervariationen, wie sie im Kapitel "Simulation" beschrieben sind, und deren grafische Darstellung ausgewählt:

- NUIG NGM 3
- POLIMI C<4
- SAN DIEGO + NOX
- USC-II

Von ihnen decken nur SAN DIEGO + NOX sowie POLIMI C<4 die NO_x -Bildung ab. Für NUIG NGM 3 und USC-II wird gegebenenfalls die NO_x -Bildung aus einem anderen Mechanismus, beispielsweise dem SAN DIEGO NOX Add-on, hinzugefügt werden müssen. Dies würde eine genaue Analyse der Auswirkungen nötig machen. Aufgrund fehlender bzw. unvollständiger Transportdaten musste auf die Berechnung der laminaren Flammgeschwindigkeit s_L beim NUIG NGM3 Mechanismus verzichtet werden.

4 – Ergebnisse und Diskussion

Tabelle 11: Ergebnis der Mechanismen-Recherche. Für die Parametervariation in der vorliegenden Arbeit ausgewählte Mechanismen sind hervorgehoben.

Mechanismus	Jahr	Spezies	Gleich.	Umfang des Mechanismus	Zitat Link	NO _x	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	Transport	Anmerkungen
ELTE RM1 (reduziert)	2011	51	251	Methan-Propan-Mischungen bei Turbinen-Bedingungen, C1-C3	[19]	nein	ja	ja	nein	systematisch reduziert
ELTE RM2 (reduziert)	2011	51	186	Methan-Propan-Mischungen bei Turbinen-Bedingungen, C1-C3	[19]	nein	ja	ja	nein	systematisch reduziert, zu stark reduziert
GRI-Mech 1.2	1994	38	190	Erdgas-Verbrennung, C1-C2	[1]	nein	ja	nein	ja	veraltet
GRI-Mech 2.11	1995	49	277	Erdgas-Verbrennung, C1-C2 und NO _x	[25]	ja	ja	nein	ja	veraltet
GRI-Mech 3.0	1999	53	325	Erdgas-Verbrennung, C1-C2 (+C3) +NO _x	[17]	ja	ja	ja	ja	alt, aber immer noch häufig verwendet
JetSurF 2.0	2010	348	2163	n-Alkane bis C12 und n-alkylierte Cyclohexane für Hochtemperaturverbrennung in Jets	[26]	nein	ja	ja	ja	Ersatzbrennstoffe für Jets, basierend auf den USC und LCG-Mechanismen. Kann durch ein- und auskommentieren im Quelltext an verschiedene Bedingungen angepasst werden.
KONNOV 0.5	2000	127	1207	Verbrennung von Alkanen bis Propan inklusive NO _x -Bildung	[27]	ja	ja	ja	ja	nicht mehr öffentlich zugänglich, sehr langsam
LEEDS CH4 V1.5	2001	37	175	Methan-Verbrennung	[28]	nein	ja	nein	nein	
LEEDS NOX V2.0	1999	43	164	Methan-Verbrennung und NO _x -Bildung	[29]	ja	nein	nein	nein	
LEEDS/ELTE CH4+NOX+SOX	2004	78	450	Methan und Ethanverbrennung sowie NO _x und SO _x -Bildung.	[30]	ja	ja	nein	nein	Automatisch erstellter Mechanismus. Eine Kombination aus anderen LEEDS/ELTE-Mechanismen.
LLNL/MARINOV	2004	126	638	Einfluss des Brennstoffs (bis Propan) auf die NO _x -Bildung unter atmosphärischen Bedingungen	[31]	ja	ja	ja	nein	
NUIG NGM 1	2007	118	663	Erdgas-Verbrennung bis Propan	[32]	nein	ja	ja	unvollst.	veraltet
NUIG NGM 2-HIGH T	2008	289	1580	Erdgas-Verbrennung (Hochtemperatur-Mechanismus) bis Pentan	[33]	nein	ja	ja	unvollst.	veraltet
NUIG NGM 2	2008	289	1580	Erdgas-Verbrennung bis Pentan	[33]	nein	ja	ja	unvollst.	veraltet
NUIG NGM 3	2010	293	1588	Erdgas-Verbrennung bis Pentan, unter Turbinen-Bedingungen	[23]	nein	ja	ja	nein	umfangreichster Erdgas-Mechanismus, validiert mit Stoßrohr und RCM, RCM-Daten verfügbar; Transportdaten fehlen. ausgewählt für Diplomarbeit.

4 – Ergebnisse und Diskussion

Mechanismus	Jahr	Spezies	Gleich.	Umfang des Mechanismus	Zitat Link	NO _x	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	Transport	Anmerkungen
POLIMI CRECK full	2012	466	14631	für Verbrennung und Pyrolyse von Kohlenwasserstoffen bis C16, Alkoholen, Estern und Ersatzbrennstoffen	[2]	ja	ja	ja	ja	zu groß für Simulationen in akzeptabler Zeit. C1-C3+NOX Subset ("POLIMI C<4") ausgewählt für Diplomarbeit.
POLIMI CRECK C1C3	2012	113	1909	C1-C3+NO _x Hochtemperatur-Subset aus POLIMI CRECK full	[2]	ja	ja	ja	ja	Hochtemperatur-Subset
PRINCETON C1+C3	1998	92	621	für Gegenstromflammen zur Bestimmung der Rußgrenzen für Methan-Luft- und Propan-Luft-Mischungen	[34]	nein	ja	ja	ja	C1+C2 wurden von GRI-Mech übernommen, die Rußbildung wurde nur für 1atm modelliert
SAN DIEGO	2012	48	244	zur Modellierung von Flammen, Zündung und Detonationen bei minimierter Rechenzeit für C1-C3	[35]	nein	ja	ja	ja	
SAN DIEGO NOX	2004	28	53	NO _x Add-On für SAN DIEGO	[35]	ja	nein	nein	ja	Add-On für SAN DIEGO Mechanismus
SAN DIEGO+NOX		63	297	Kombination aus SAN DIEGO und SAN DIEGO NO _x , C1-C3+NO _x	[35]	ja	ja	ja	ja	selbst kombiniert, ausgewählt für Diplomarbeit.
USC-C3	1999	71	469	Propen: Pyrolyse und Verbrennung mit Luft	[36]	nein	ja	ja	ja	
USC-C3 (opt.)	2000	70	463	Propanverbrennung	[37]	nein	ja	ja	ja	Rechenzeit optimiert
USC-Mech II	2007	111	784	Hochtemperatur-Verbrennung für H ₂ /CO/C1-C4	[38]	nein	ja	ja	ja	ausgewählt für Diplomarbeit.
WARNATZ	2001	34	160	Hochtemperaturverbrennung für 1bar im H ₂ -CO-C1-C2-O ₂ System	[3]	nein	ja	nein	nein	veraltet NO _x -Erweiterung verfügbar

4.2 Zündverzugszeiten

Die Zündverzugszeiten τ wurden für Parametervariationen, wie sie im Kapitel "Simulation" beschrieben sind, berechnet. Diese Simulationen bauen auf zwei eigenen Konferenzbeiträgen [39], [40] auf. Untersucht wurde die Abhängigkeit von τ vom Anfangsdruck p , von der Anfangstemperatur T , vom Propangehalt des Brenngases $X_{C_3H_8}$ und von der Luftzahl λ .

Vorversuche mit dem SAN DIEGO Mechanismus haben gezeigt, dass sich das Hinzufügen des SAN DIEGO NOX Add-ons nicht auf τ auswirkt. Das ist plausibel: Da kein Stickstoff im Brennstoff vorhanden ist, kann NO nur als thermisches und promptes NO sowie über den Zerfall von zuvor gebildetem N_2O gebildet werden. Diese Reaktionen benötigen hohe Temperaturen, um in signifikantem Maß abzulaufen. Sie finden daher erst nach der Zündung statt.

Um die relative Entwicklung der Zündverzugszeiten besser einschätzen zu können, wird mit τ_{rel} eine auf NUIG NGM3 bezogene, dimensionslose relative Zündverzugszeit eingeführt. Dieser Mechanismus wurde als Bezugspunkt gewählt, da dieser für Zündverzugszeiten bei Drücken bis zu 30atm validiert ist. [23] Sowohl die berechneten Zündverzugszeiten als auch die daraus abgeleiteten relativen Zündverzugszeiten finden sich im Anhang.

4.2.1 Zündgrenzen und Artefakte

Es wurden Simulationen bis zu einer Dauer von 5s berechnet. Bei Diskussionen im Rahmen des Projekts stellte sich heraus, dass der relevante Bereich in der Größenordnung von 1..10ms liegt. Ist $\tau < 3ms$, kann es zum Klopfen kommen, ist τ viel größer als dieser Wert werden sowohl die Zündung als auch der vollständige Ausbrand erschwert.

Besonders bei niedrigen Temperaturen und niedrigen Propangehalten kann es sein, dass τ theoretisch in der Größenordnung von Sekunden oder darüber liegt oder das Gemisch gar nicht zündet. Findet keine Zündung statt, so kann es durch Artefakte zu minimalen Druckschwankungen kommen. Diese werden von COSILAB trotzdem als $\max\left(\frac{dp}{dt}\right)$ interpretiert. Genauso verhält es sich, wenn der Zündverzug im Bereich von etwas über 5s liegt. Der Druck beginnt zu steigen, die Simulation wird aber abgebrochen, bevor der Druckanstieg abgeschlossen ist, sodass der Randwert als Maximum interpretiert wird. Deshalb wurde ein Intervall $4 \cdot 10^{-4}s < \tau < 4,99s$ festgelegt. Werte außerhalb dieses Bereichs wurden ignoriert, um sicherzustellen, dass keine Artefakte oder Randwerte verwendet werden.

10 Punkte der Parametervariation mit dem NUIG NGM3 Mechanismus wurden entfernt. Es waren dies sämtliche Werte bei 700K mit 0% Propangehalt, sowie 1% Propangehalt bei 70bar und 80bar.

Bei Rechnungen mit dem SAN DIEGO Mechanismus wurden 18 Werte verworfen. Es waren dies zunächst die Werte für reines Methan bei 700K und allen Drücken sowie bei 725K und Drücken bis 130bar. Außerdem wurde der Wert bei 700K, 1% Propangehalt und 90bar entfernt. Bei genauerer Betrachtung musste festgestellt werden, dass dieser Mechanismus bei niedrigen Temperaturen und niedrigen Propangehalten mitunter falsche Werte liefert. Dies ist in Abbildung 21 für niedrige Propangehalte und Temperaturen dargestellt. Dieser Fehler tritt bei 700K und 1% Propangehalt bei 70bar und 80bar auf. Deshalb wurden diese beiden Werte auch entfernt.

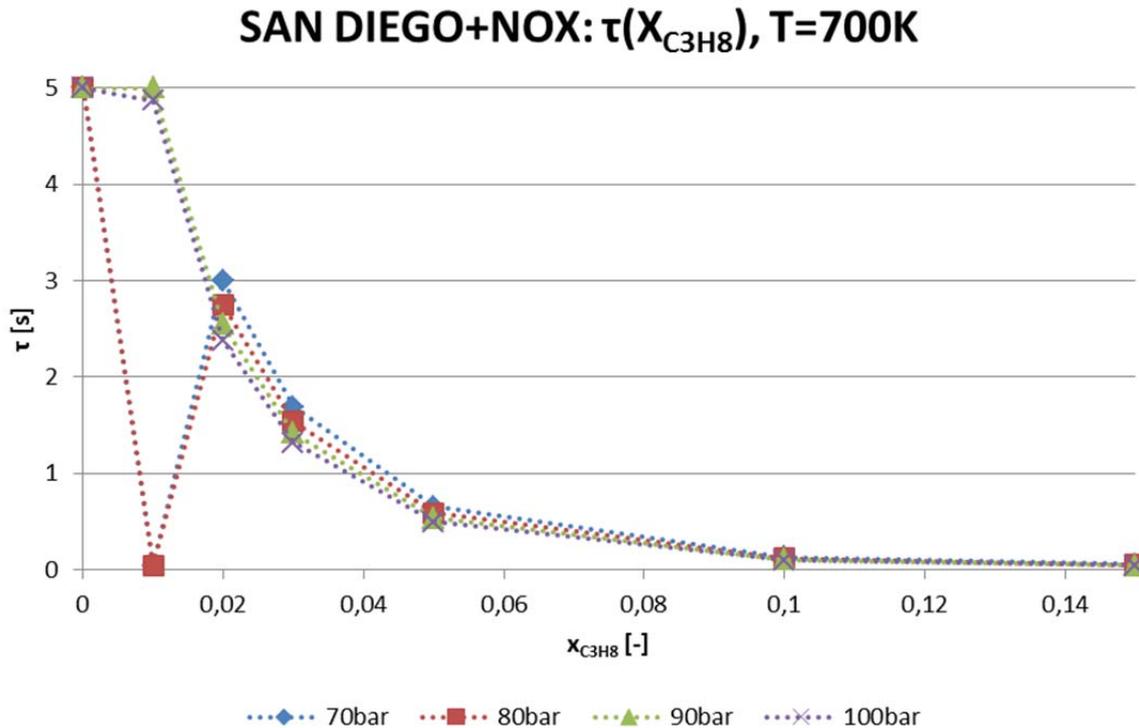


Abbildung 21: Zündverzugszeiten für niedrige Temperaturen und Propangehalte, berechnet mit dem SAN DIEGO Mechanismus. Die Linien stellen keine sinnvolle Interpolation dar, sondern sollen das Auge führen.

23 Punkte der mit dem POLIMI C<4 Mechanismus berechneten Parametervariation liefern keine brauchbare Werte für τ . Es sind dies alle Werte für Methan bei Temperaturen von 700K sowie 725K. Hinzu kommen bei 700K Werte für Brenngas mit 1% Propangehalt bei Drücken von 70bar bis 130bar.

Von den Berechnungen mit dem USC-II Mechanismus genügten 96 Werte dem oben genannten Kriterium für τ nicht. Es handelt sich dabei um alle Punkte mit 700K, unabhängig von Druck und Zusammensetzung.

4.2.2 Abhängigkeit der Zündverzugszeit von der Luftzahl

Wie aus dem Vorversuch (siehe Kapitel "Simulation" bzw. Anhang) bereits hervorgegangen war, herrscht für magere Verbrennung eine lineare Abhängigkeit der Zündverzugszeit τ von der Luftzahl λ . Deswegen, und auf Grund der ohnehin bereits großen Anzahl an Parametervariationselementen, wurde auf eine systematische Variation von λ verzichtet. Abbildung 22 zeigt dazu exemplarisch die Veränderung von τ mit steigendem λ für magere Verbrennungsbedingungen zwischen 1,5 und 2,5.

4 – Ergebnisse und Diskussion

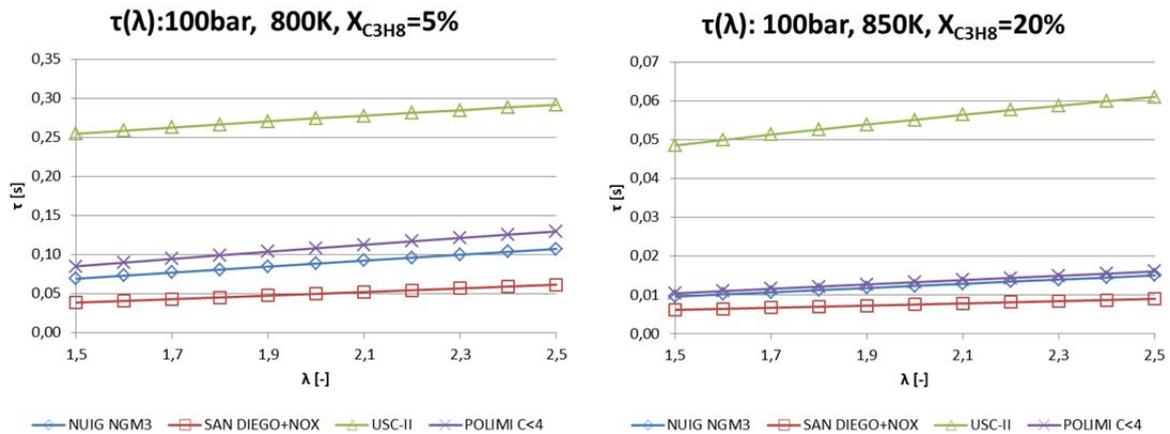


Abbildung 22: $\tau(\lambda)$ bei 100bar, 800K und 5% Propangehalt (links), sowie $\tau(\lambda)$ bei 100bar, 850K und 20% Propangehalt (rechts)

Eine Erhöhung von λ brachte eine Vergrößerung von τ , aber keine relative Änderung zwischen den Mechanismen, außer für USC-II. Die τ_{rel} Werte für USC-II verringern sich mit steigendem λ . Berechnet man Regressionsgeraden $y = kx + d$ zu Abbildung 22, erhält man ausgezeichnete Korrelationskoeffizienten. Lediglich die Werte für USC-II sind etwas schlechter. Die Daten für 100bar, 800K und 5% Propangehalt sind in Tabelle 12, jene für 100bar, 850K und 20% Propangehalt in Tabelle 13 dargestellt.

Tabelle 12: Steigung k , Ordinatenabschnitt d und Bestimmtheitsmaß R^2 der Regressionsgeraden für $\tau(\lambda)$ bei 100bar, 800K und 5% Propangehalt

$y = kx + d$	k	d	R^2
NUIG NGM3	0,0381	0,0126	0,9999
SAN DIEGO+NOX	0,0229	0,0044	0,9998
USC-II	0,0371	0,2000	0,9985
POLIMI C<4	0,0446	0,0190	0,9996

Tabelle 13: Steigung k , Ordinatenabschnitt d und Bestimmtheitsmaß R^2 der Regressionsgeraden für $\tau(\lambda)$ bei 100bar, 850K und 20% Propangehalt

$y = kx + d$	k	d	R^2
NUIG NGM3	0,0055	0,0014	0,9997
SAN DIEGO+NOX	0,0028	0,0019	0,9996
USC-II	0,0125	0,0301	0,9987
POLIMI C<4	0,0056	0,0021	0,9999

4.2.3 Druckabhängigkeit der Zündverzugszeit

Untersucht wurde die Druckabhängigkeit der Zündverzugszeit τ über einen Druckbereich von 70bar bis 140bar in 10bar-Schritten. Die Parametervariationen wurden ausgewertet für Temperaturen von 700K, 800K, 900K und 1000K. Betrachtete Brenngase waren reines Methan sowie Methan-Propan-Mischungen mit einem Propangehalt von 5%, 10%, 20% und 50% sowie reines Propan.

$T = 700K$

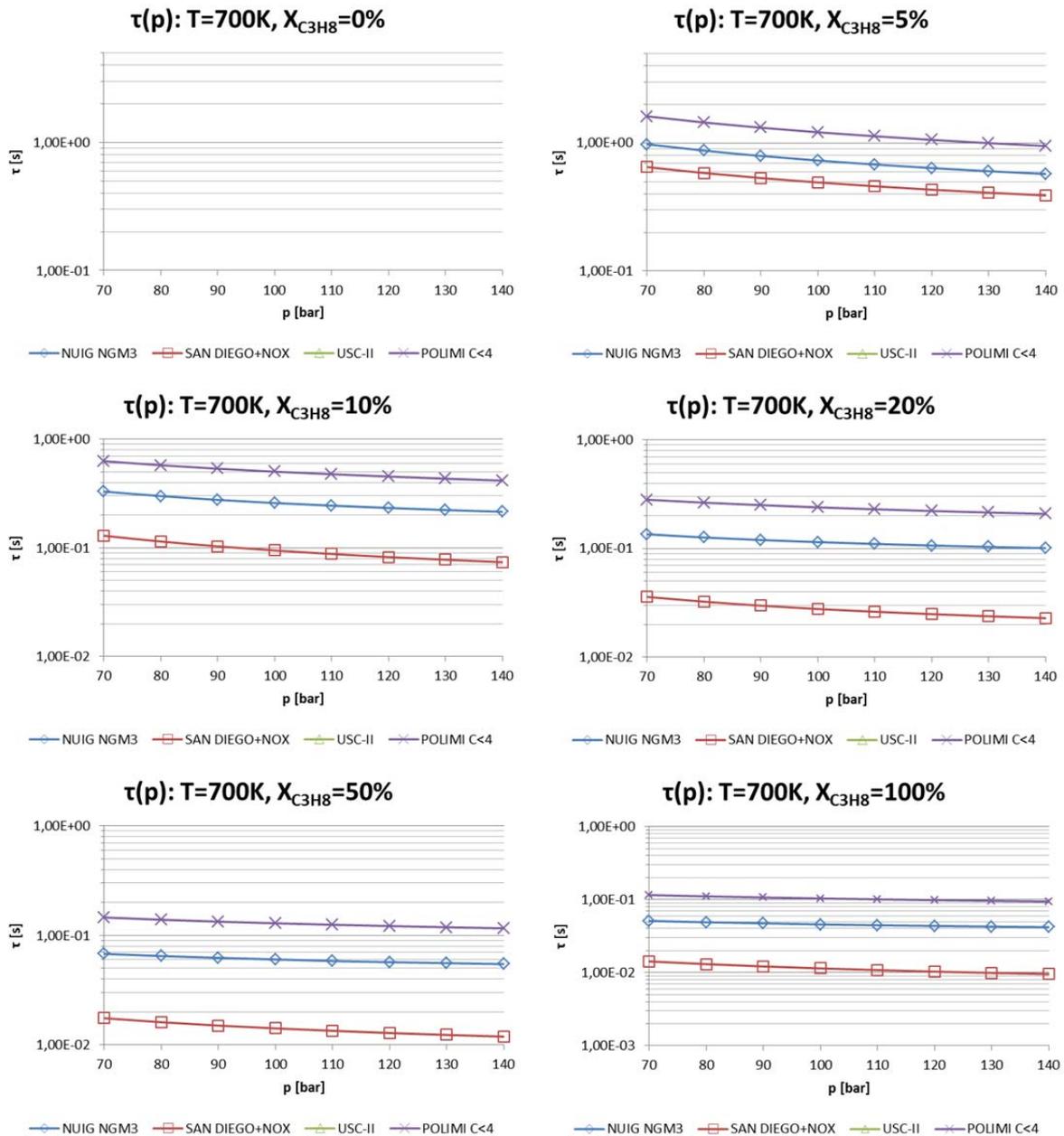


Abbildung 23: $\tau(p)$ bei $\lambda=1,9$ und 700K für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%

In Abbildung 23 ist $\tau(p)$ für verschiedene Brenngasmischungen bei 700K dargestellt. Es zünden im beobachteten Zeitintervall NUIG NGM 3, POLIMI C<4 und SAN DIEGO, sofern das Brenngas mindestens 5% Propan enthält. Bei reinem Methan kann mit keinem der vier Mechanismen eine Zündung innerhalb von 4,99s berechnet werden.

Ein streng monotoner Trend zu kürzeren τ mit steigendem Druck wird von allen betrachteten Mechanismen dargestellt. Dieser Trend ist nicht besonders stark ausgeprägt: Setzt man für 5%, 10% und 100% Propangehalt den kleinsten Wert für τ (140bar) ins Verhältnis zum größten Wert (70bar), so erhält man Verhältnisse von 0,571 für SAN DIEGO bei 10% Propangehalt bis zu 0,821 für POLIMI C<4 bei 100% Propangehalt. Es zeigt sich, dass NUIG NGM 3 und POLIMI C<4 recht ähnliche Verhältniszahlen liefern und mit steigendem Propangehalt eine schwächere Druckabhängigkeit ergeben. Die Druckabhängigkeit der Zündverzugszeit bei 700K ist beim SAN DIEGO Mechanismus uneinheitlich, am stärksten ist sie bei mittleren Propangehalten. Diese Werte sind in Tabelle 14 zusammengestellt. Die Extremwerte sind dieser Tabelle ebenfalls zu entnehmen, wobei die Maxima durchwegs bei 70bar und 5% Propangehalt und die Minima bei 140bar und 100% Propangehalt erreicht werden.

Tabelle 14: Verhältnis der Zündverzugszeiten bei 140bar zu jenen bei 70bar für Propangehalte $X_{C_3H_8}$ von 5%, 10% und 100% sowie Extremwerte der Zündverzugszeiten bei einer Temperatur von 700K. $\lambda=1,9$ für alle Werte.

	NUIG NGM3	SAN DIEGO	POLIMI C<4
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 5\% [-]$	0,586	0,600	0,586
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 10\% [-]$	0,651	0,571	0,662
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 100\% [-]$	0,821	0,670	0,814
$\tau_{min}(p = 140bar; X_{C_3H_8} = 100\%) [s]$	4,20E-02	9,55E-03	2,18E-01
$\tau_{max}(p = 70bar; X_{C_3H_8} = 5\%) [s]$	9,79E-01	6,50E-01	1,62E+00

Es zeigt sich, dass POLIMI C<4 die längsten Zündverzugszeiten liefert, SAN DIEGO die kürzesten und NUIG NGM3 zwischen den beiden genannten liegt. Bei niedrigen Propangehalten zeigen SAN DIEGO und NUIG NGM3 die beste Übereinstimmung ($\tau_{rel} \approx 0,67$ für $X_{C_3H_8} = 5\%$), bei hohen die schlechteste ($\tau_{rel} \approx 0,22$ für $X_{C_3H_8} = 50\%$ und Drücke über 120bar). Die Übereinstimmung von POLIMI C<4 und NUIG NGM3 ist praktisch unabhängig vom Druck. Die besten Werte werden bei niedrigen Propangehalten erreicht ($\tau_{rel} \approx 1,66$ für $X_{C_3H_8} = 5\%$), die schlechteste für reines Propan mit $\tau_{rel} \approx 2,26$.

Vergleicht man die Unterschiede der Zündverzugszeiten τ zwischen 5% und 10% Propangehalt mit jenen zwischen 50% und 100% Propangehalt, sieht man, dass bereits geringe Propangehalte eine sehr starke Reduktion von τ bewirken. Bei hohen Propangehalten verringert sich τ nicht mehr so stark.

4 – Ergebnisse und Diskussion

$T = 800K$

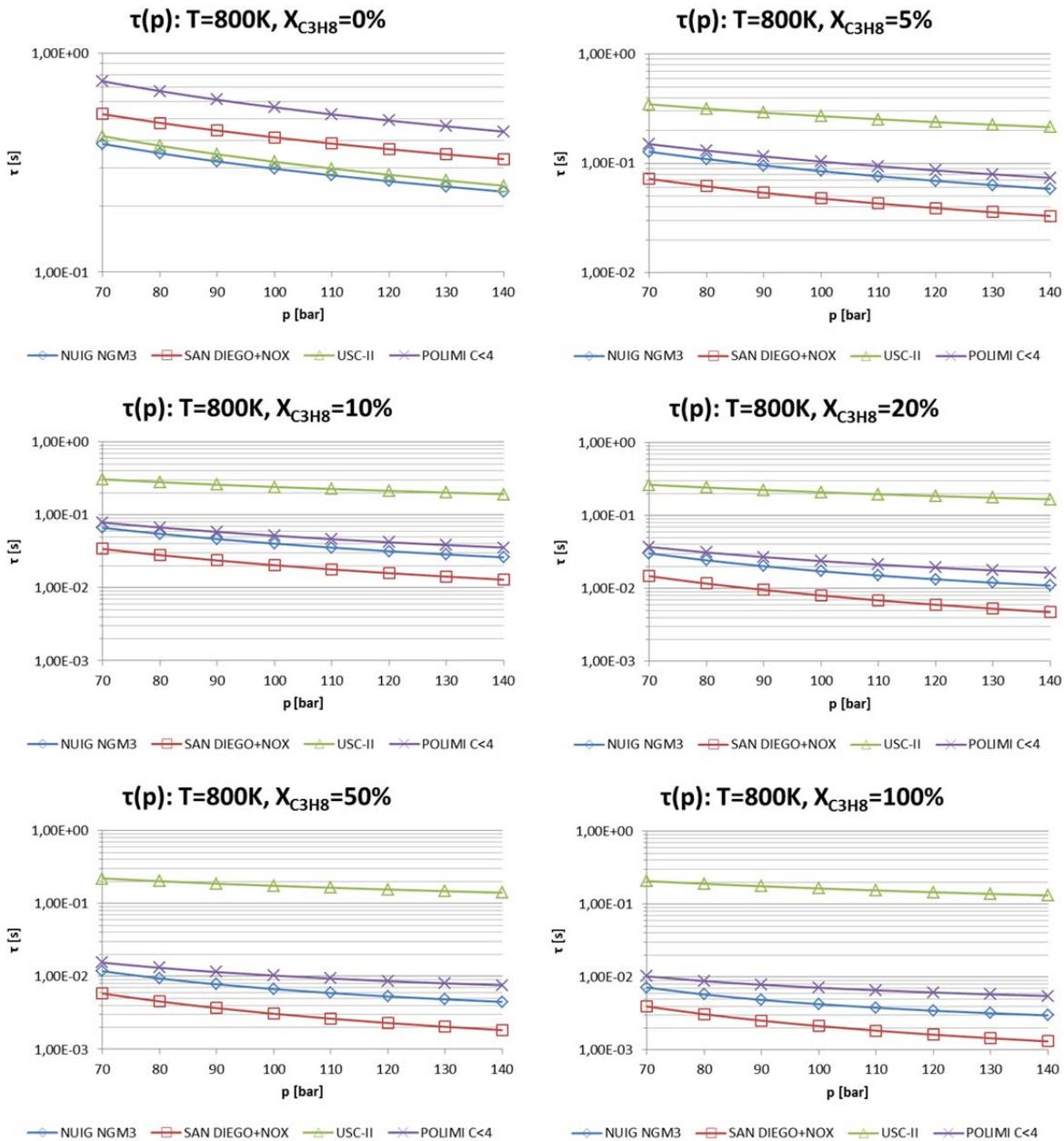


Abbildung 24: $\tau(p)$ bei $\lambda=1,9$ und $800K$ für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%

Abbildung 24 zeigt analog zu Abbildung 23 $\tau(p)$ bei $800K$. Bei dieser und höheren Temperaturen wird mit allen verwendeten Mechanismen eine Zündung innerhalb von $4,99s$ für alle Gasmischungen berechnet.

Der streng monoton fallende Trend der Zündverzugszeit mit steigendem Druck ist wie bei $700K$ beobachtbar. Er ist, verglichen mit den Werten bei $700K$, etwas stärker ausgeprägt: Setzt man für 0%, 10% und 100% Propangehalt den kleinsten Wert für τ (140bar) ins Verhältnis zum größten Wert (70bar), so erhält man Verhältnisse von 0,333 für SAN DIEGO bei 100% Propangehalt bis 0,635 für POLIMI C<4, ebenfalls bei 100% Propangehalt. Aus Tabelle 15 kann man diese Verhältnisse sowie die Extremwerte für $\tau(p)$ bei $800K$ entnehmen. Die Minima von $\tau(p)$ liegen bei 140bar und 100% Propangehalt, während die Maxima durchwegs bei 70bar und 0% Propangehalt liegen.

4 – Ergebnisse und Diskussion

Tabelle 15: Verhältnis der Zündverzugszeiten bei 140bar zu jenen bei 70bar für Propangehalte $X_{C_3H_8}$ von 0%, 10% und 100% sowie Extremwerte der Zündverzugszeiten bei einer Temperatur von 800K. $\lambda=1,9$ für alle Werte.

	NUIG NGM3	SAN DIEGO	USC-II	POLIMI C<4
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 0\% [-]$	0,605	0,623	0,594	0,589
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 10\% [-]$	0,394	0,379	0,626	0,454
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 100\% [-]$	0,415	0,333	0,635	0,539
$\tau_{min}(p = 140bar; X_{C_3H_8} = 100\%) [s]$	2,99E-03	1,32E-03	1,32E-01	5,51E-03
$\tau_{max}(p = 70bar; X_{C_3H_8} = 0\%) [s]$	3,86E-01	5,27E-01	4,18E-01	7,45E-01

Die längsten Zündverzugszeiten τ werden mit USC-II erreicht, sobald Propan im Brenngas vorliegt. Ist dies der Fall, berechnet USC-II Werte für τ , die um ca. eine Größenordnung über jenen der anderen Mechanismen liegt. Für reines Methan liefert POLIMI C<4 deutlich die größten τ , während USC-II fast identische Werte mit NUIG NGM3 ergibt. Die kleinsten τ werden mit SAN DIEGO berechnet, sobald Propan im Brenngas vorliegt, wobei SAN DIEGO im Extremfall eine τ_{rel} von 0,41 zeigt, die Abweichung also deutlich schwächer als jene von USC-II ausfällt. Lediglich bei reinem Methan liegt der Wert von SAN DIEGO über dem von NUIG NGM3.

Vergleicht man die Unterschiede zwischen 0% und 5% Propangehalt mit jenen zwischen 50% und 100% Propangehalt, sieht man bei 800K ebenso wie bei 700K, dass bereits geringe Propangehalte eine sehr starke Reduktion von τ bewirken. Bei hohen Propangehalten verringert sich τ nicht mehr stark.

Wie bereits erwähnt, liegen die mit USC-II berechneten τ um ungefähr eine Größenordnung über jenen der übrigen Mechanismen. Diese Abweichung verstärkt sich mit steigendem Druck, bis bei 140bar für reines Propan die 44-fache Zündverzugszeit angegeben wird. SAN DIEGO zeigt die beste Übereinstimmung mit NUIG NGM3 für reines Methan und niedrige Drücke, wo τ_{rel} um 1,4 liegt. Mit steigendem Druck und steigenden Propangehalten errechnen sich mit SAN DIEGO erheblich kürzere Zündverzugszeiten mit $\tau_{rel} \approx 0,45$ bei Drücken über 110bar und Propangehalten von 50% und mehr. POLIMI C<4 zeigt mit τ_{rel} -Werten zwischen 1,8 für 5% Propangehalt und 70bar und 1,93 für reines Methan und 70bar eine ebenfalls recht gute Übereinstimmung mit NUIG NGM3. Diese ist besonders gut bei niedrigen Propangehalten (5%, 10%), wobei sich auch hier die Übereinstimmung mit steigendem Druck etwas verschlechtert.

Zusammenfassend stimmen bei niedrigen Propangehalten POLIMI C<4 und NUIG NGM3 gut überein, wobei man mit POLIMI C<4 etwas größere τ als mit NUIG NGM3 erhält. Bei reinem Methan stimmen USC-II und NUIG NGM3 sehr gut überein, wobei man mit USC-II etwas größere τ als mit NUIG NGM3 erhält.

$T = 900K$

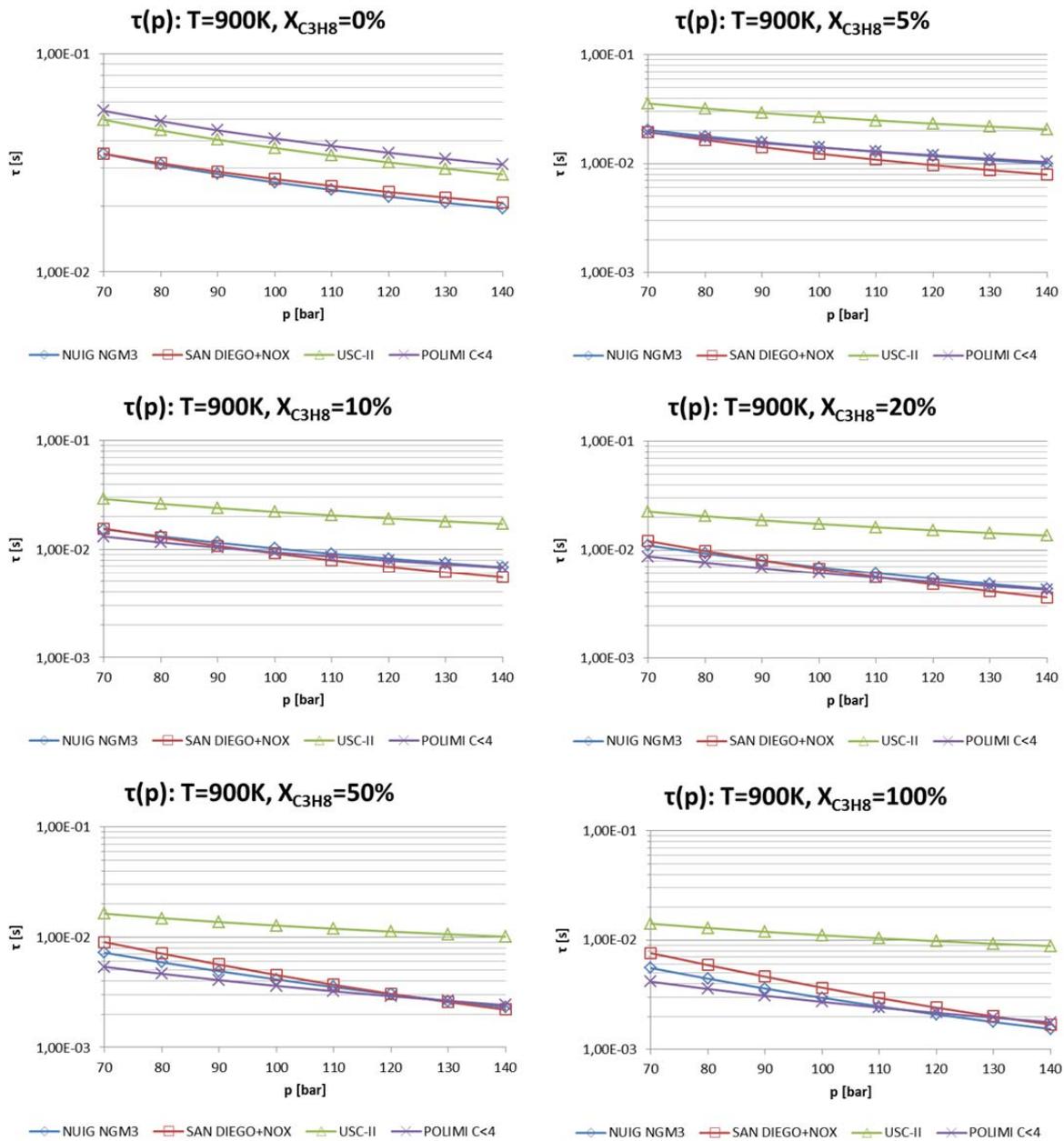


Abbildung 25: $\tau(p)$ bei $\lambda=1,9$ und $900K$ für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%

Abbildung 25 zeigt analog zu den vorherigen Abbildungen $\tau(p)$ bei $900K$. Wie schon bei $800K$, wird hier mit allen Mechanismen für alle Gasmischungen eine Zündung innerhalb von $4,99s$ berechnet.

$\tau(p)$ besitzt bei $900K$ einen mit steigendem Druck streng monoton fallenden Verlauf. Die Druckabhängigkeit ist stärker als bei niedrigeren Temperaturen. Setzt man für 0%, 10% und 100% Propangehalt den kleinsten Wert für τ (140bar) ins Verhältnis zum größten Wert (70bar), so erhält man Verhältnisse von 0,222 für SAN DIEGO bei 100% Propangehalt bis zu 0,624 für USC-II, ebenfalls bei 100% Propangehalt. USC-II zeigt eine mit steigenden Propangehalten geringer werdende Druckabhängigkeit. Im Gegensatz dazu erhält man mit den drei übrigen Mechanismen eine Verstärkung der Druckabhängigkeit mit steigendem Propangehalt, wobei dies bei POLIMI C<4 etwas schwächer ausgeprägt ist. Aus Tabelle 16 kann man diese Verhältnisse sowie die Extremwerte für

$\tau(p)$ bei 900K entnehmen. Die Minima von $\tau(p)$ liegen durchwegs bei 140bar und 100% Propangehalt, die Maxima durchwegs bei 70bar und 0% Propangehalt.

Tabelle 16: Verhältnis der Zündverzugszeiten bei 140bar zu jenen bei 70bar für Propangehalte $X_{C_3H_8}$ von 0%, 10% und 100% sowie Extremwerte der Zündverzugszeiten bei einer Temperatur von 900K. $\lambda=1,9$ für alle Werte.

	NUIG NGM3	SAN DIEGO	USC-II	POLIMI C<4
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 0\% [-]$	0,562	0,596	0,561	0,566
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 10\% [-]$	0,446	0,352	0,589	0,515
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 100\% [-]$	0,277	0,222	0,624	0,425
$\tau_{min}(p = 140bar; X_{C_3H_8} = 100\%) [s]$	1,54E-03	1,70E-03	8,83E-03	1,78E-03
$\tau_{max}(p = 70bar; X_{C_3H_8} = 0\%) [s]$	3,48E-02	3,49E-02	4,99E-02	5,49E-02

Die längsten Zündverzugszeiten τ werden mit USC-II erreicht, sobald Propan im Brenngas vorliegt. Dann berechnet dieser Mechanismus Werte für τ , die deutlich über jenen der übrigen Mechanismen liegen. Bei reinem Methan liefert POLIMI C<4 den größten Wert für τ . Die kürzesten τ errechnen sich mit NUIG NGM3 für reines Methan sowie für reines Propan bei hohen Drücken.

Dass bereits geringe Propangehalte zu einer erheblichen Verringerung von τ im Vergleich zu reinem Methan führen, während eine starke Erhöhung des Propangehalts eines Brenngases, das bereits einen hohen Propangehalt hat, sich nur schwach auf τ auswirkt, ist für 900K sowie für niedrigere Temperaturen zutreffend.

Für reines Methan ist das Verhältnis der mit verschiedenen Mechanismen berechneten τ nahezu konstant. Ist Propan im Brenngas vorhanden, so verringert sich τ_{rel} von SAN DIEGO mit steigendem Druck, während die τ_{rel} von POLIMI C<4 leicht, jene von USC-II stärker ansteigt. Dieser Effekt verstärkt sich mit steigenden Propangehalten. τ_{rel} von SAN DIEGO hat Werte zwischen 0,80 (140bar, $X_{C_3H_8}=5\%$; 10%) und 1,37 (70bar, $X_{C_3H_8}=100\%$) mit der besten Übereinstimmung für reines Methan. Darüber hinaus wird mit diesem Mechanismus eine sehr gute Übereinstimmung für niedrige Propangehalte und niedrige Drücke erreicht, die sich mit steigendem Propangehalt zu hohen Drücken verschiebt. Die aus dem USC-II Mechanismus resultierenden τ_{rel} haben Minima von 1,43 für reines Methan, wo auch die beste Übereinstimmung mit den übrigen Mechanismen herrscht. Mit steigenden Propangehalten und steigendem Druck verschlechtert sich die Übereinstimmung, bis das Maximum von τ_{rel} für USC-II von 5,73 für reines Propan τ und 140bar erreicht wird. Betrachtet man POLIMI C<4, so hat τ_{rel} Werte zwischen 0,74 (70bar, $X_{C_3H_8}=50\%$) und 1,59 ($X_{C_3H_8}=0\%$, $p>90bar$). Während für reines Methan mit POLIMI C<4 etwas größere τ berechnet werden, liefert dieser Mechanismus ausgezeichnete Übereinstimmung mit NUIG NGM3 für niedrige Propangehalte. Die Übereinstimmung verschlechtert sich mit steigendem Propangehalt, bis sich für reines Propan bei niedrigen Drücken etwas kürzere, und bei hohen Drücken etwas größere τ ergeben.

Fasst man die Ergebnisse für $\tau(p)$ bei 900K zusammen, so tritt die extreme Abweichung zu längeren τ mit USC-II nicht mehr auf. Bei reinem Methan stimmen NUIG NGM3 und SAN DIEGO gut überein, bei den übrigen Gasmischungen POLIMI C<4, SAN DIEGO und NUIG NGM3, wobei sich die gute Übereinstimmung von niedrigen Drücken bei niedrigen Propangehalten zu hohen Drücken bei hohen Propangehalten verschiebt.

$$T = 1000K$$

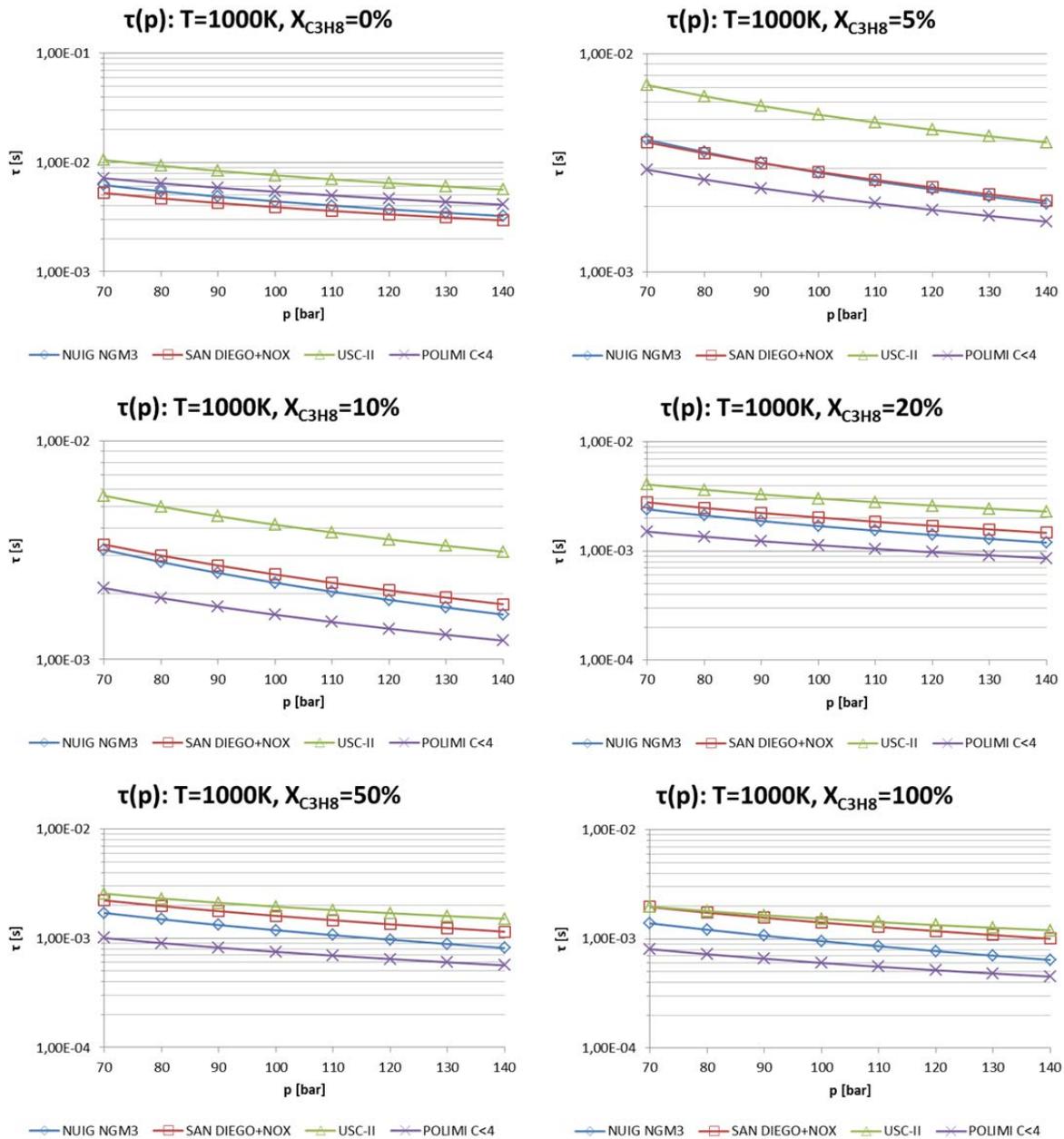


Abbildung 26: $\tau(p)$ bei $\lambda=1,9$ und 1000K für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%

Abbildung 26 zeigt analog zu den vorherigen Abbildungen $\tau(p)$ bei 1000K. Auch bei dieser Temperatur wird mit allen Mechanismen für alle Gasmischungen eine Zündung innerhalb von 4,99s berechnet.

$\tau(p)$ besitzt auch bei 1000K einen mit steigendem Druck streng monoton fallenden Verlauf. Die Druckabhängigkeit ist jedoch nicht mehr so stark wie bei 900K ausgeprägt. Setzt man für 0%, 10% und 100% Propangehalt den kleinsten Wert für τ (140bar) ins Verhältnis zum größten Wert (70bar), so erhält man Verhältnisse von 0,462 für NUIG NGM3 bei 100% Propangehalt bis zu 0,605 für USC-II bei 100% Propangehalt. USC-II zeigt eine mit steigenden Propangehalten geringer werdende Druckabhängigkeit. Im Gegensatz dazu ist die verstärkt sich die Druckabhängigkeit von NUIG NGM3 und SAN DIEGO mit steigendem Propangehalt, während jene von POLIMI C<4 sich mit dem

Propangehalt kaum verändert. Aus Tabelle 17 kann man diese Verhältnisse sowie die Extremwerte für $\tau(p)$ bei 1000K entnehmen. Die Minima von $\tau(p)$ liegen durchwegs bei 140bar und 100% Propangehalt, während die Maxima durchwegs bei 70bar und 0% Propangehalt liegen.

Tabelle 17: Verhältnis der Zündverzugszeiten bei 140bar zu jenen bei 70bar für Propangehalte $X_{C_3H_8}$ von 0%, 10% und 100% sowie Extremwerte der Zündverzugszeiten bei einer Temperatur von 1000K. $\lambda=1,9$ für alle Werte.

	NUIG NGM3	SAN DIEGO	USC-II	POLIMI C<4
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 0\% [-]$	0,522	0,562	0,537	0,572
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 10\% [-]$	0,505	0,532	0,554	0,575
$\tau(140bar)/\tau(70bar); X_{C_3H_8} = 100\% [-]$	0,462	0,513	0,605	0,561
$\tau_{min}(p = 140bar; X_{C_3H_8} = 100\%) [s]$	6,42E-04	1,01E-03	1,20E-03	4,53E-04
$\tau_{max}(p = 70bar; X_{C_3H_8} = 0\%) [s]$	6,20E-03	5,25E-03	1,05E-02	7,17E-03

Die längsten Zündverzugszeiten τ werden bei Simulationen mit USC-II erreicht, bei reinem Propan ist die mit SAN DIEGO berechnete τ für Drücke bis 80bar beinahe gleich groß. Die kürzesten τ errechnen sich mit SAN DIEGO für reines Methan. Im Allgemeinen liefert POLIMI C<4 die kürzesten τ . Im Großen und Ganzen stimmen die berechneten τ für Brenngase mit Methan-Propan-Mischungen jedoch einigermaßen gut überein.

Der bereits bei den übrigen bisher untersuchten Temperaturen beschriebene starke Effekt von geringen Propangehalten auf τ ist bei 1000K nicht so deutlich wie bei niedrigeren Temperaturen.

τ_{rel} ist bei 1000K für alle Gasmischungen mit dem Druck leicht steigend. Dies ist bei reinem Methan und niedrigen Propangehalten kaum zu sehen, verstärkt sich aber mit zunehmenden Propangehalten und ist für reines Propan recht deutlich. Der Grund dafür liegt in der größeren Druckabhängigkeit von NUIG NGM3 bei 1000K. Auf diesen Mechanismus bezieht sich τ_{rel} . Durch die mit steigendem Druck immer kleiner werdenden τ wird das Verhältnis zu den übrigen Mechanismen immer größer. τ_{rel} liegt für USC-II zwischen 1,43 (70bar, $X_{C_3H_8}=100\%$) und 1,94 (140bar, $X_{C_3H_8}=10\%$). Es liegt also eine bessere Übereinstimmung für hohe Propangehalte und niedrige Drücke vor. τ_{rel} von SAN DIEGO hat Werte zwischen 0,85 (70bar, $X_{C_3H_8}=0\%$) und 1,57 (140bar, $X_{C_3H_8}=100\%$). Die beste Übereinstimmung wird neben Methan ($\tau_{rel}\approx 0,9$) für Brenngase mit niedrigen Propangehalten von 5% ($\tau_{rel}\approx 1,0$) bis 10% ($\tau_{rel}\approx 1,1$) erreicht. Die τ_{rel} , die sich auf Basis von Simulationen mit dem POLIMI C<4 Mechanismus ergeben, decken Werte zwischen 0,58 (70bar, $X_{C_3H_8}=100\%$) und 1,27 (140bar, $X_{C_3H_8}=0\%$) ab, wobei hier die beste Übereinstimmung mit 5% Propangehalt (Werte um 0,8) sowie für hohe Drücke und Propangehalte erreicht wird.

Fasst man die Ergebnisse für $\tau(p)$ bei 1000K zusammen, so ergibt sich ein etwas einheitlicheres Bild der Zündverzugszeiten τ als bei niedrigeren Temperaturen. Die Druckabhängigkeit ist nicht so stark wie bei 900K. Für Methan liefert USC-II mit Abstand die größten und SAN DIEGO die kleinsten τ . Bei den übrigen Brenngasen sind die mit POLIMI C<4 berechneten τ deutlich am kleinsten. NUIG NGM3 zeigt mit steigendem Propangehalt eine zunehmend stärkere Druckabhängigkeit als die übrigen Mechanismen.

4.2.4 Abhängigkeit der Zündverzugszeit vom Propangehalt

Es wurde die Abhängigkeit der Zündverzugszeit vom Propangehalt des Brenngases $\tau(X_{C_3H_8})$ betrachtet. Dies wurde bei 70bar und 140bar durchgeführt. Da aus den Vorversuchen (siehe Kapitel "Simulation" sowie Anhang) vermutet wurde, dass sich die größten Änderungen bei niedrigen

Propangehalten ergeben würden, wurde dort die Schrittweite kleiner gewählt. Demnach wurden die Zündverzugszeiten bei Propangehalten von 0%, 1%, 2%, 3%, 5%, 10%, 15%, 20%, 30%, 50%, 75% und 100% zum Erstellen der Diagramme berechnet.

$p = 70\text{bar}$

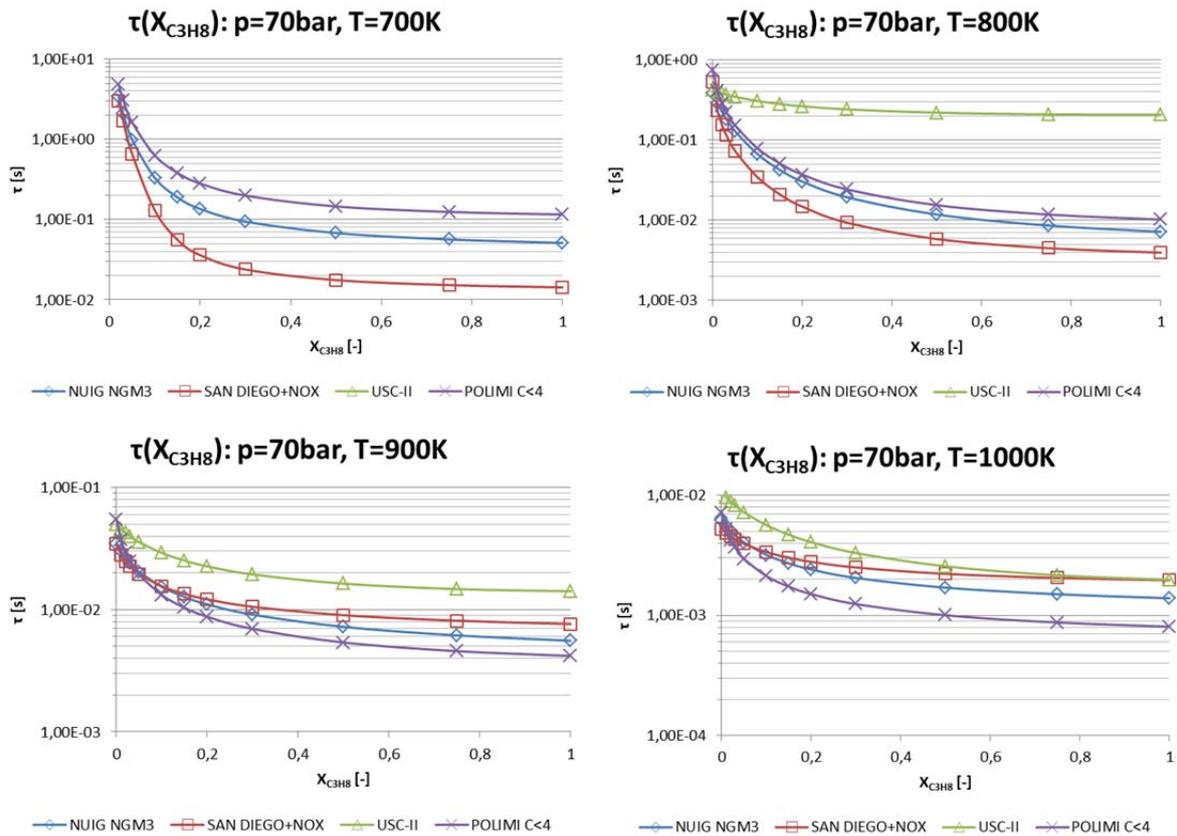


Abbildung 27: $\tau(X_{C_3H_8})$ bei $\lambda=1,9$ und einem Druck von 70bar für Temperaturen von 700K, 800K, 900K, 1000K

Abbildung 27 zeigt die Zündverzugszeit bei einem Druck von 70bar und 700K, 800K, 900K und 1000K für die oben genannten Gasmischungen, berechnet mit den vier ausgewählten Mechanismen. Bei 700K zünden nicht mehr alle Gemische innerhalb von 4,99s: Bei NUIG NGM3, SAN DIEGO und POLIMI C<4 muss dazu mindestens 2% Propan im Brenngas vorliegen. USC-II zündet bei 700K nicht innerhalb des betrachteten Zeitraums.

Ein streng monoton fallender Trend zu kürzeren $\tau(X_{C_3H_8})$ mit steigendem Propangehalt wurde bei allen vier Mechanismen dargestellt. Setzt man für 800K, 900K und 1000K den kleinsten Wert für τ (reines Propan) ins Verhältnis zum größten Wert (reines Methan), so erhält man Verhältnisse von 0,007 für SAN DIEGO bei 800K bis zu 0,496 für USC-II, ebenfalls bei 800K. Von einer Auswertung dieser Verhältnisse bei 700K sowie der Bestimmung von maximalen Zündverzugszeiten wurde abgesehen, weil bei 700K einerseits nicht mehr alle Mechanismen eine Zündung vorhersagen, und andererseits auch jene, die eine Zündung vorhersagen, dies nicht für alle Bedingungen tun. USC-II zeigt eine mit steigenden Temperaturen größer werdende Abhängigkeit vom Propangehalt. Im Gegensatz dazu verringert sich die Abhängigkeit vom Propangehalt bei den übrigen drei Mechanismen mit steigenden Temperaturen. Aus Tabelle 18 kann man diese Verhältnisse sowie die Extremwerte für $\tau(X_{C_3H_8})$ bei $p=70\text{bar}$ entnehmen. Die Minima von $\tau(X_{C_3H_8})$ liegen durchwegs bei 1000K und 100% Propangehalt, die Maxima werden für 700K und 2% Propangehalt angegeben. Da

USC-II bei diesen Bedingungen nicht zündet, wird für diesen Mechanismus in der Tabelle kein Wert angegeben. Die längste Zündverzugszeit für USC-II ist 0,481s bei 800K und 0% Propangehalt.

Tabelle 18: Verhältnis der Zündverzugszeiten von reinem Propan zu jenen von reinem Methan für Temperaturen von 800K, 900K und 1000K, sowie Extremwerte bei 70bar. $\lambda=1,9$ für alle Werte.

	NUIG NGM3	SAN DIEGO	USC-II	POLIMI C<4
$\tau(C_3H_8)/\tau(CH_4); T = 800K [-]$	0,019	0,007	0,496	0,014
$\tau(C_3H_8)/\tau(CH_4); T = 900K [-]$	0,160	0,219	0,284	0,076
$\tau(C_3H_8)/\tau(CH_4); T = 1000K [-]$	0,224	0,374	0,189	0,113
$\tau_{min} (T = 1000K; X_{C_3H_8} = 100%) [s]$	1,39E-03	1,96E-03	1,98E-03	8,08E-04
$\tau_{max} (T = 700K; X_{C_3H_8} = 2%) [s]$	3,41E+00	3,00E+00	-	4,81E+00

Bei $\tau(X_{C_3H_8})$ erkennt man sehr deutlich, dass kleine Propangehalte eine sehr große Verringerung der Zündverzugszeit τ bewirken. Beim Fortschreiten von großen zu noch größeren Propangehalten nimmt τ nur noch schwach ab. Darüber hinaus ist erkennbar, dass dieser Effekt bei niedrigeren Temperaturen stärker ausgeprägt ist als bei hohen.

Man kann anhand Abbildung 27 zwei Bereiche erkennen: einen mit niedrigen Temperaturen (700K, 800K) und einen mit hohen Temperaturen (900K, 1000K). In ersterem herrschen größere Unterschiede zwischen den einzelnen Mechanismen, besonders bei 700K, wo USC-II überhaupt nicht zündet, und bei 800K, wo USC-II um über eine Größenordnung von den übrigen Mechanismen abweicht. Ordnet man in diesem Bereich die Mechanismen anhand ihrer Zündverzugszeiten von der längsten zur kürzesten, erhält man USC-II >> POLIMI C<4 > NUIG NGM3 > SAN DIEGO. Betrachtet man den Bereich hoher Temperaturen, so sieht man eine bessere Übereinstimmung der Mechanismen mit steigender Temperatur. Ordnet man in diesem Bereich die Mechanismen anhand ihrer τ , erhält man meistens USC-II > SAN DIEGO > NUIG NGM3 > POLIMI C<4. Da POLIMI C<4 eine stärkere Abhängigkeit vom Propangehalt zeigt als die übrigen Mechanismen, liegen die mit ihm berechneten τ für sehr geringe Propangehalte bei 900K zwischen NUIG NGM3 und SAN DIEGO, für reines Methan berechnet POLIMI C<4 sogar die längste Zündverzugszeit. Bei 1000K und hohen Propangehalten sind die Werte von SAN DIEGO und USC-II praktisch gleich groß.

τ_{rel} ist für die beschriebenen Bedingungen und Mechanismen uneinheitlich. Eine Gemeinsamkeit ist, dass sich τ_{rel} für einen Mechanismus bei einer bestimmten Temperatur für Propangehalte ab 50% nicht mehr wesentlich ändert. Bei 700K gilt dies sogar für Propangehalte ab 20%.

τ_{rel} liegt für USC-II zwischen 1,08 (800K, $X_{C_3H_8}=0\%$) und 28,9 (800K, $X_{C_3H_8}=100\%$). Es liegt insgesamt für diesen Mechanismus eine bessere Übereinstimmung für niedrige Propangehalte vor, für reines Methan wird bei 800K sogar eine recht gute Übereinstimmung erreicht. Andererseits nimmt die Abweichung bei höheren Propangehalten mit niedrigerer Temperatur zu, weshalb das Maximum von τ_{rel} ebenfalls bei 800K zu finden ist. τ_{rel} von SAN DIEGO hat Werte zwischen 0,25 (700K, $X_{C_3H_8}=30\%$) und 1,41 (1000K, $X_{C_3H_8}=100\%$). Die beste Übereinstimmung wird bei 900K und 1000K für niedrige und mittlere Propangehalte erzielt. Die τ_{rel} , die sich auf Basis von Simulationen mit dem POLIMI C<4 Mechanismus ergeben, decken Werte zwischen 0,58 (1000K, $X_{C_3H_8}=100\%$) und 2,26 (700K, $X_{C_3H_8}=0\%$) ab, wobei hier die beste Übereinstimmung bei 800K und 900K für Propangehalte zwischen 2% und 10% erreicht wird.

4 – Ergebnisse und Diskussion

Fasst man die Ergebnisse für $\tau(X_{C_3H_8})$ bei 70bar zusammen, so erhält man zwar einen streng monoton fallenden Verlauf der Zündverzugszeiten mit steigendem Propangehalt, das weitere Bild ist jedoch uneinheitlich. Alle Mechanismen außer USC-II zeigen eine starke Abhängigkeit vom Propangehalt, vor allem bei niedrigen Propangehalten, die sich jedoch mit steigender Temperatur abschwächt. Man kann grob zwischen einem Niedertemperaturbereich (700K, 800K) und einem Hochtemperaturbereich (900K, 1000K) unterscheiden. Die Übereinstimmung der Mechanismen ist im Hochtemperaturbereich deutlich besser als im Niedertemperaturbereich. Bei hohen Temperaturen reagiert POLIMI C<4 am stärksten auf niedrige Propangehalte.

$p = 140\text{bar}$

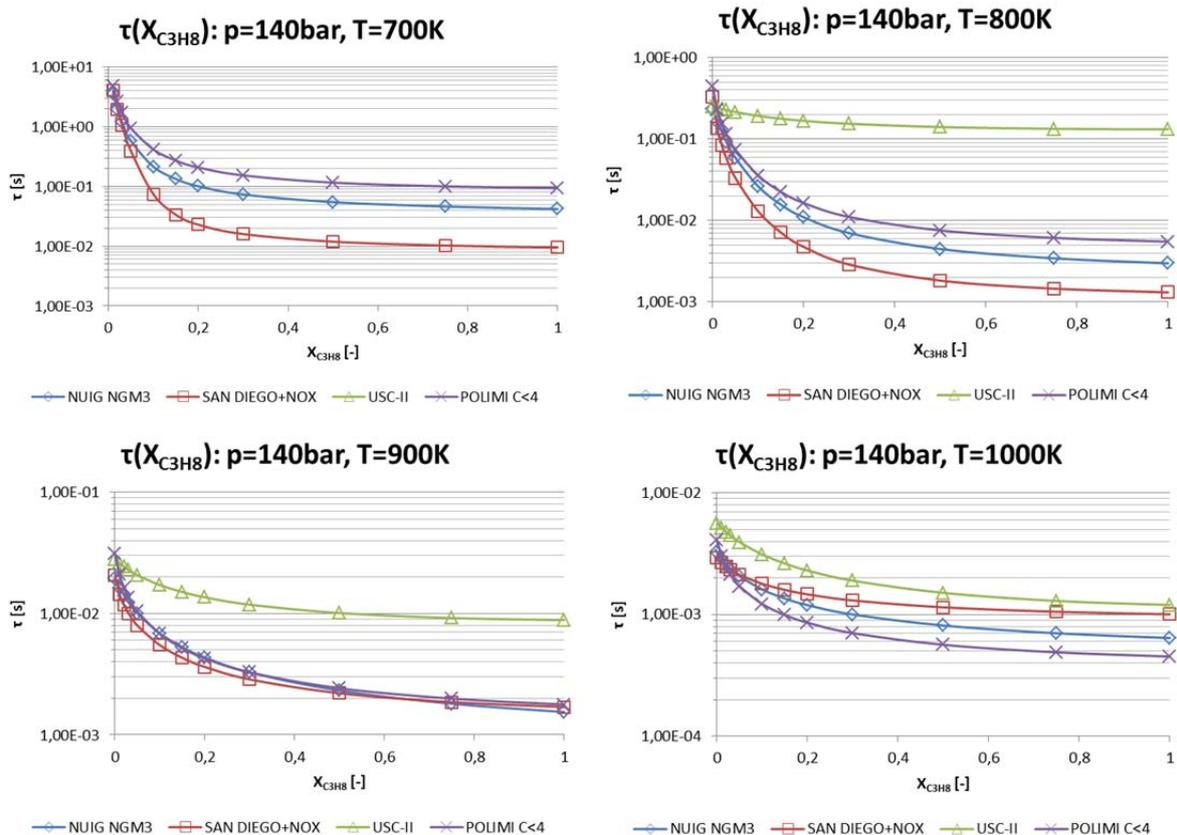


Abbildung 28: $\tau(X_{C_3H_8})$ bei $\lambda=1,9$ und einem Druck von 140bar für Temperaturen von 700K, 800K, 900K, 1000K

Abbildung 28 zeigt analog zu Abbildung 27 die Zündverzugszeit bei einem Druck von 140bar und 700K, 800K, 900K und 1000K. Es zünden ebenfalls nicht mehr alle Gemische bei 700K innerhalb von 4,99s: Es muss dazu mindestens 1% Propan im Brenngas vorliegen. USC-II zündet bei 700K überhaupt nicht innerhalb von 4,99s.

Der streng monoton fallende Trend zu kürzeren $\tau(X_{C_3H_8})$ mit steigendem Propangehalt wird wie bei 70bar von allen vier Mechanismen dargestellt. Setzt man für 800K, 900K und 1000K den kleinsten Wert für τ (reines Propan) ins Verhältnis zum größten Wert (reines Methan), so erhält man Verhältnisse von 0,004 für SAN DIEGO bei 800K bis 0,530 für USC-II, ebenfalls bei 800K. Von einer Auswertung dieser Verhältnisse bei 700K sowie der Bestimmung von maximalen Zündverzugszeiten wurde, wie bei 70bar, abgesehen. USC-II zeigt eine mit steigenden Temperaturen stärker werdende Abhängigkeit vom Propangehalt. Im Gegensatz dazu verringert sich die Abhängigkeit vom

Propangehalt bei den übrigen drei Mechanismen mit steigenden Temperaturen. Aus Tabelle 19 kann man diese Verhältnisse sowie die Extremwerte für $\tau(X_{C_3H_8})$ bei $p=140\text{bar}$ entnehmen.

Tabelle 19: Verhältnis der Zündverzugszeiten von reinem Propan zu jenen von reinem Methan für Temperaturen von 800K, 900K und 1000K, sowie Extremwerte bei 140bar. $\lambda=1,9$ für alle Werte.

	NUIG NGM3	SAN DIEGO	USC-II	POLIMI C<4
$\tau(C_3H_8)/\tau(CH_4); T = 800K [-]$	0,013	0,004	0,530	0,013
$\tau(C_3H_8)/\tau(CH_4); T = 900K [-]$	0,079	0,082	0,315	0,057
$\tau(C_3H_8)/\tau(CH_4); T = 1000K [-]$	0,199	0,341	0,213	0,110
$\tau_{min} (T = 1000K; X_{C_3H_8} = 100\%) [s]$	6,42E-04	1,01E-03	1,20E-03	4,53E-04
$\tau_{max} (T = 700K; X_{C_3H_8} = 1\%) [s]$	3,57E+00	3,98E+00	-	4,88E+00

Die Minima von $\tau(X_{C_3H_8})$ liegen durchwegs bei 1000K und 100% Propangehalt, die Maxima bei 700K und 1% Propangehalt. Die längsten Zündverzugszeiten werden mit USC-II bei 800K mit reinem Methan erreicht ($\tau=0,248\text{s}$). Dies wird jedoch nicht in der Tabelle dargestellt, da sich die Bedingungen von jenen der übrigen Mechanismen unterscheiden.

Bei $\tau(X_{C_3H_8})$ erkennt man bei 140bar – wie auch schon bei 70bar – sehr deutlich, dass kleine Propangehalte bei niedrigen Temperaturen eine sehr große Verringerung der Zündverzugszeit bewirken, während diese beim Fortschreiten von großen zu noch größeren Propangehalten nur relativ schwach abnimmt. Dieser Effekt schwächt sich mit steigender Temperatur zunehmend ab.

Die Einteilung in einen Niedertemperaturbereich (700K, 800K) mit relativ schlechter Übereinstimmung der Mechanismen und einen Hochtemperaturbereich (900K, 1000K) mit relativ guter Übereinstimmung der Mechanismen ist bei 140bar nicht so einfach: Während für 700K und 800K sinngemäß die Interpretation von 70bar gilt, stellt sich bei 900K, ein anderes Bild dar: Im Gegensatz zu den Simulationen bei 70bar, kann man bei 140bar eine ausgesprochen gute Übereinstimmung von POLIMI C<4 und NUIG, sowie eine ebenfalls gute Übereinstimmung von SAN DIEGO und NUIG NGM3 beobachten. USC-II weicht jedoch mit steigendem Propangehalt sehr stark von den übrigen drei Mechanismen ab – mit τ_{rel} bis zu 5,7. Für 1000K werden dann wieder, wie bei 70bar, einheitlichere Werte angegeben.

Ordnet man die Mechanismen anhand ihrer Zündverzugszeiten von der längsten zur kürzesten, erhält man für 700K und 800K USC-II >> POLIMI C<4 > NUIG NGM3 > SAN DIEGO. Bei 900K ist diese Anordnung USC-II >> SAN DIEGO > POLIMI C<4 \approx NUIG NGM3. Bei 1000K zeigt POLIMI C<4 eine etwas stärkere Abhängigkeit vom Propangehalt als die übrigen Mechanismen. Deshalb liegen die mit ihm berechneten τ für sehr geringe Propangehalte bei 1000K zwischen NUIG NGM3 und USC-II, bereits ab 2% Propangehalt liefert dieser Mechanismus die kürzesten Zündverzugszeiten. τ_{rel} ist für die beschriebenen Bedingungen und Mechanismen uneinheitlich und grundsätzlich etwas größer als bei 70bar. Als Gemeinsamkeit fällt auf, dass sich bei hohen Propangehalten τ_{rel} nicht mehr so stark ändert wie bei niedrigen. Bei niedrigeren Propangehalten zeigen alle Mechanismen eine etwas stärkere Reduktion der Zündverzugszeit mit dem Propangehalt des Brenngases als NUIG NGM3, weshalb τ_{rel} in diesem Bereich sinkt. Eine Ausnahme bildet USC-II bei 800K, hier ist τ_{rel} durchwegs steigend.

τ_{rel} liegt für USC-II zwischen 1,06 (800K, $X_{C_3H_8}=0\%$) und 44,1 (800K, $X_{C_3H_8}=100\%$). Die beste Übereinstimmung mit NUIG NGM3 wird somit bei niedrigen Temperaturen für reines Methan

erreicht. Generell ist die Übereinstimmung zwischen USC-II und NUIG NGM3 recht schlecht. Mit SAN DIEGO errechnen sich τ_{rel} zwischen 0,22 (700K, $X_{C_3H_8}=30\%$) und 1,57 (1000K, $X_{C_3H_8}=100\%$). Die beste Übereinstimmung wird bei 1000K und niedrigen Propangehalten erzielt. Die τ_{rel} , die sich auf Basis von Simulationen mit dem POLIMI C<4 Mechanismus ergeben, decken Werte zwischen 0,70 (1000K, $X_{C_3H_8}=30..100\%$) und 2,24 (700K, $X_{C_3H_8}=100\%$) ab, wobei hier die beste Übereinstimmung bei 900K für Propangehalte von 5% bis 50% erreicht wird. Im Allgemeinen zeigt POLIMI C<4 für die betrachteten Bedingungen generell die beste Übereinstimmung mit NUIG NGM3.

Fasst man die Ergebnisse für $\tau(X_{C_3H_8})$ bei 140bar zusammen, so erhält man ein im Großen und Ganzen ähnliches Bild wie bei 70bar, außer bei 900K. Der Verlauf ist streng monoton fallend mit einem uneinheitlichen relativen Verlauf. Alle Mechanismen außer USC-II zeigen eine starke Temperaturabhängigkeit, vor allem bei niedrigen Propangehalten, die sich bei höherer Temperatur abschwächt. Die Übereinstimmung der Mechanismen ist bei 900K bis auf USC-II sehr gut. NUIG NGM3 reagiert relativ schwach auf geringe Propangehalte, POLIMI C<4 am stärksten.

4.2.5 Temperaturabhängigkeit der Zündverzugszeit

Die Temperaturabhängigkeit der Zündverzugszeit wurde in 25K-Schritten zwischen 700K und 1000K für 70bar und für 140bar betrachtet. Dabei wurden Brenngasmischungen mit einem Propangehalt von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100% untersucht.

Zur besseren Vergleichbarkeit mit Literaturdaten wie z.B. [23], wird die Zündverzugszeit in Form von Arrhenius-Diagrammen dargestellt: Auf der Abszisse ist statt der Temperatur das Tausendfache ihres Kehrwerts, also $\frac{1000}{T}$ angegeben, wodurch hohe Temperaturen links und niedrige Temperaturen rechts zu sehen sind. Die Ordinate ist wie in den vorangegangenen Betrachtungen logarithmisch skaliert.

Da die Zündverzugszeiten nicht streng monoton temperaturabhängig sind, wurde von einer Quantifizierung der Temperaturabhängigkeit anhand der Verringerung der Zündverzugszeit Abstand genommen. Stattdessen wurde eine relative Veränderung der Zündverzugszeit $\Delta_{rel}\tau$ von einem Temperaturwert zum nächsthöheren, bezogen auf die niedrigere Temperatur für $700K \leq T \leq 975K$ berechnet:

$$\Delta_{rel}\tau = \frac{\tau(T = T_1) - \tau(T = (T_1 + 25K))}{\tau(T = T_1)} \quad (4.1)$$

Darin sind T_1 eine bestimmte Bezugstemperatur und τ die Zündverzugszeit. $\Delta_{rel}\tau$ hat den Vorteil, durch den Bezug auf die jeweilige Zündverzugszeit für alle Temperaturen Werte in derselben Größenordnung anzugeben. Darüber hinaus kann auch eine Vergrößerung der Zündverzugszeit mit steigender Temperatur sehr leicht erkannt werden: $\Delta_{rel}\tau$ ist in so einem Fall negativ. Diagramme, die $\Delta_{rel}\tau$ für die betrachteten Bedingungen darstellen, finden sich im Anhang.

$p = 70\text{bar}$

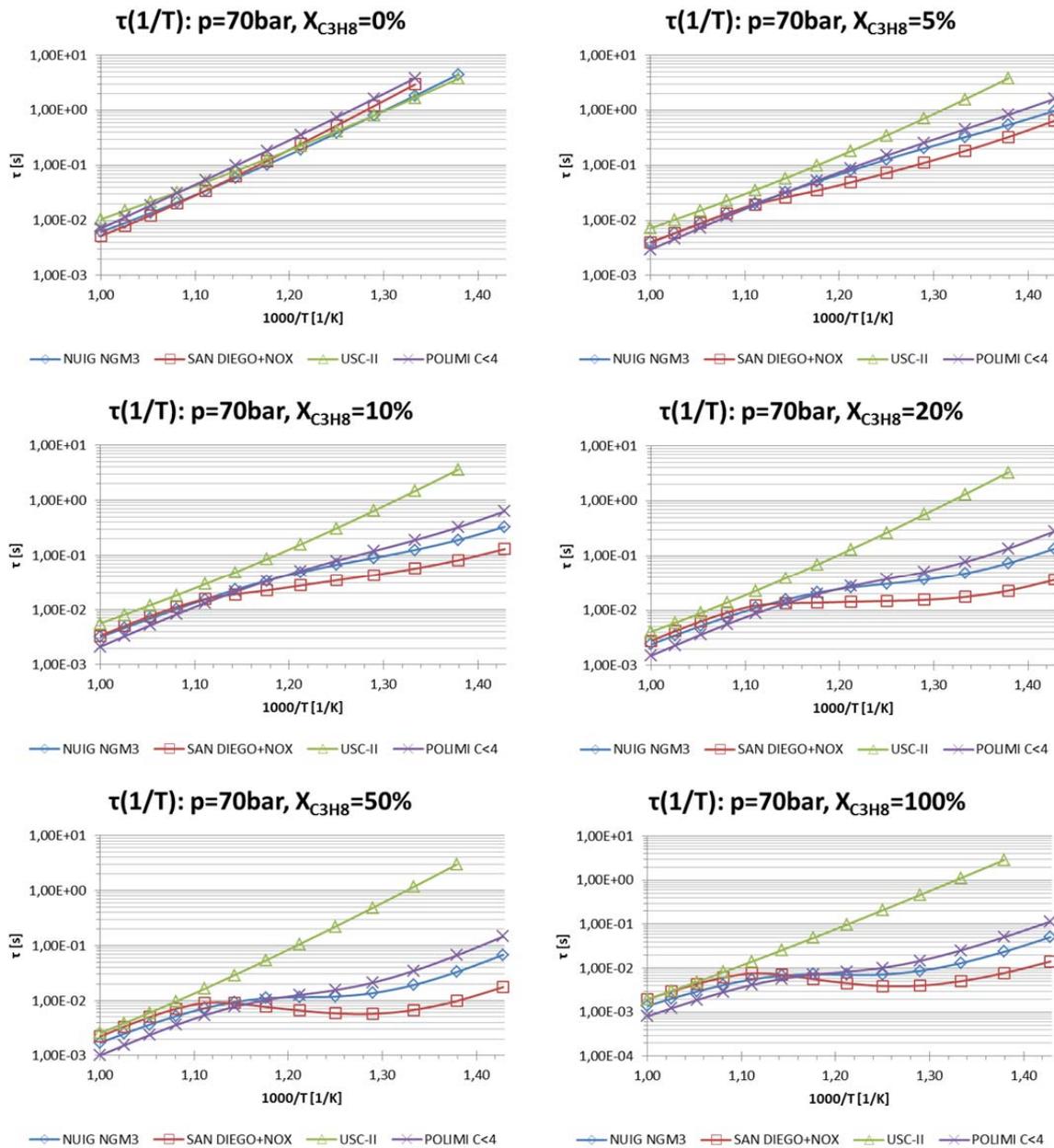


Abbildung 29: $\tau(1/T)$ bei $\lambda=1,9$ und 70bar für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%

In Abbildung 29 ist $\tau(1/T)$ für die weiter oben genannten Gasmischungen bei einem Anfangsdruck von 70bar dargestellt. Ein Trend zu kürzeren τ mit steigender Temperatur ist bei allen Mechanismen für Propangehalte bis 20% beobachtbar, bei höheren Propangehalten ist das Verhalten uneinheitlich und wird weiter unten besprochen. Aus Tabelle 20 auf Seite 58 kann man das Minimum von $\Delta_{rel}\tau$ für die oben dargestellten Bedingungen sowie die Temperatur, bei der das Minimum auftritt, entnehmen. Das Minimum für reines Methan und 5% Propan wird einheitlich bei allen Mechanismen bei 975K gefunden. Weiters ist zu sehen, dass sich für USC-II daran auch bei höheren Propangehalten nichts ändert und sich der Wert von $\Delta_{rel}\tau$ minimal vergrößert. Bei den drei übrigen Mechanismen ist das Gegenteil der Fall: ab 10% Propangehalt wird das Minimum von $\Delta_{rel}\tau$ zwischen 775K und 850K gefunden. Der Wert des Minimums verringert sich dabei stetig mit steigendem Propangehalt.

4 – Ergebnisse und Diskussion

Tabelle 20: relative Veränderung der Zündverzugszeiten $\Delta_{rel}\tau$ nach Gleichung (4.1) bei 70bar für Brenngase mit 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100% Propangehalt sowie die dazugehörige Bezugstemperatur T_1 . $\lambda=1,9$ für alle Werte, negative Werte sind fett gedruckt.

$min(\Delta_{rel}\tau) [-]$	NUIG NGM3	SAN DIEGO	USC-II	POLIMI C<4
$X_{C_3H_8} = 0\%$	0,32 (975K)	0,34 (975K)	0,30 (975K)	0,37 (975K)
$X_{C_3H_8} = 5\%$	0,31 (975K)	0,25 (850K)	0,30 (975K)	0,36 (975K)
$X_{C_3H_8} = 10\%$	0,26 (775K)	0,15 (850K)	0,31 (975K)	0,34 (775K)
$X_{C_3H_8} = 20\%$	0,14 (800K)	0,02 (850K)	0,31 (975K)	0,26 (800K)
$X_{C_3H_8} = 50\%$	0,03 (800K)	-0,16 (850K)	0,33 (975K)	0,18 (800K)
$X_{C_3H_8} = 100\%$	-0,04 (825K)	-0,26 (850K)	0,35 (975K)	0,14 (825K)

Während für Methan alle vier Mechanismen relativ gut übereinstimmen, ergibt sich bereits bei geringen Propangehalten eine Auffächerung der berechneten Zündverzugszeiten zu niedrigen Temperaturen hin. Betrachtet man zunehmend höhere Propangehalte, verstärkt sich diese Auffächerung, die vor allem durch eine unterschiedlich starke Temperaturabhängigkeit im Bereich zwischen 800K (Abszissenwert 1,25) und 900K (Abszissenwert 1,11) stattfindet. Während es bei POLIMI C<4 zu einer Abschwächung der Temperaturabhängigkeit im mittleren Temperaturbereich kommt, ist diese bei NUIG NGM3 und besonders bei SAN DIEGO so stark, dass ein Bereich mit negativer Temperaturabhängigkeit entsteht. Das heißt, dass in diesem Bereich eine Erhöhung der Temperatur eine Vergrößerung der Zündverzugszeit bewirkt. Dieser sogenannte Bereich eines negativen Temperaturkoeffizienten (*negative temperature coefficient*, NTC) ist offensichtlich auch für die bereits gezeigten große Unterschiede zwischen USC-II und den übrigen Mechanismen bei niedrigen Temperaturen verantwortlich, da dieses Verhalten in USC-II nicht modelliert ist.

τ_{rel} liegt für USC-II zwischen 0,84 (725K, $X_{C_3H_8}=0\%$) und 121,5 (725K, $X_{C_3H_8}=100\%$). Während für Temperaturen zwischen 1000K und 900K τ_{rel} Werte zwischen 1 und 2 hat, kommt es bei niedrigeren Temperaturen zu immer größeren Abweichungen. Die Qualität der Übereinstimmung nimmt außerdem mit steigendem Propangehalt ab. Zu erklären ist dies damit, dass USC-II ein reiner Hochtemperaturmechanismus ist. τ_{rel} von SAN DIEGO hat Werte zwischen 0,26 (700K, $X_{C_3H_8}=50\%$) und 1,60 (750K, $X_{C_3H_8}=0\%$). Auch hier wird die beste Übereinstimmung zwischen 1000K und 900K erreicht. Zu niedrigeren Temperaturen hin verringert sich τ_{rel} besonders bei hohen Propangehalten. Dies ist darauf zurückzuführen, dass dieser Mechanismus ein stärker ausgeprägtes NTC-Verhalten zeigt, als NUIG NGM3. Die τ_{rel} , die sich auf Basis von Simulationen mit dem POLIMI C<4 Mechanismus ergeben, decken Werte zwischen 0,58 (1000K, $X_{C_3H_8}=100\%$) und 2,26 (700K, $X_{C_3H_8}=100\%$) ab, wobei mit diesem Mechanismus die beste Übereinstimmung bei 800K und 900K sowie niedrigen Propangehalten (5%, 10%) erreicht wird.

Fasst man die Ergebnisse für $\tau(1/T)$ bei 70bar zusammen, so sieht man bei Temperaturen über 900K eine relativ gute Übereinstimmung der vier Mechanismen. Zwischen 800K und 900K kommt es bei hohen Propangehalten zu einer Verlangsamung der Verringerung von τ mit steigender Temperatur, die sich im Extremfall bis zur Vergrößerung von τ mit steigender Temperatur verstärken kann (NTC-Effekt). Dieser Effekt ist am stärksten bei SAN DIEGO ausgeprägt, gefolgt von NUIG NGM3. POLIMI C<4 zeigt lediglich eine verringerte Verkürzung von τ in diesem Bereich. Bei USC-II ist dieses Verhalten gar nicht modelliert. Daraus resultieren die enormen Unterschiede zwischen diesem Mechanismus und den drei anderen bei niedrigen Temperaturen.

$p = 140\text{bar}$

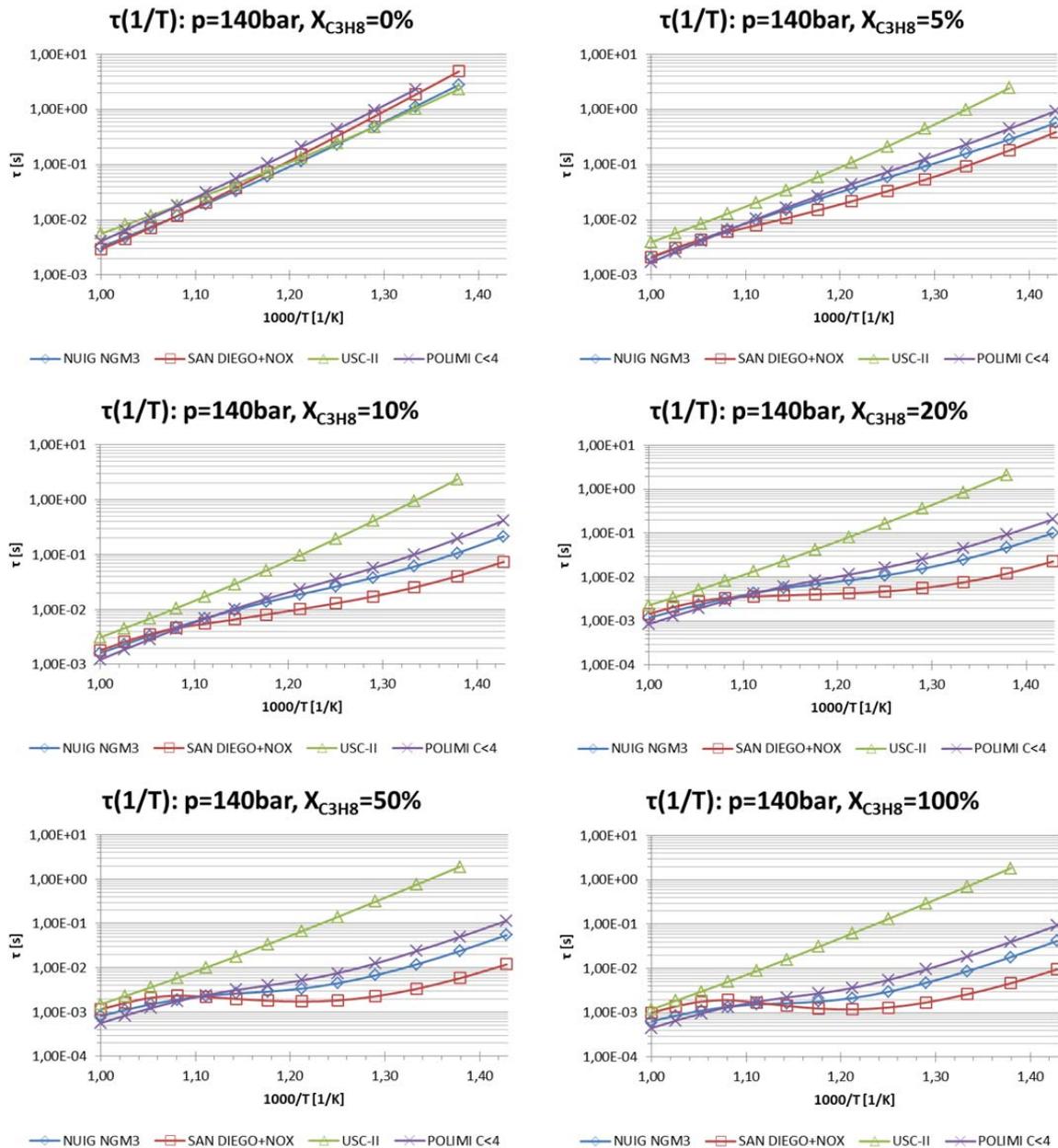


Abbildung 30: $\tau(1/T)$ bei $\lambda=1,9$ und 140bar für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%

Abbildung 30 zeigt analog zu Abbildung 29 $\tau(1/T)$ bei einem Anfangsdruck von 140bar . Die erhaltenen Werte verhalten sich ähnlich wie jene bei 70bar , jedoch zu etwas kürzeren Zündverzugszeiten verschoben. Aus Tabelle 21 kann man das Minimum von $\Delta_{rel}\tau$ für die oben dargestellten Bedingungen sowie die Temperatur, bei der das Minimum auftritt, entnehmen. Man erkennt, dass das Minimum für reines Methan einheitlich bei allen Mechanismen bei 975K gefunden wird. Bei USC-II ändert sich auch bei höheren Propangehalten nichts daran und $\Delta_{rel}\tau$ wird minimal vergrößert. Bei den drei übrigen Mechanismen ist das Gegenteil der Fall: ab 10% Propangehalt wird das Minimum von $\Delta_{rel}\tau$ zwischen 825K und 900K gefunden. Der Wert des Minimums verringert sich dabei stetig mit steigendem Propangehalt.

4 – Ergebnisse und Diskussion

Tabelle 21: relative Veränderung der Zündverzugszeiten $\Delta_{rel}\tau$ nach Gleichung (4.1) bei 140bar für Brenngase mit 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100% Propangehalt sowie die dazugehörige Bezugstemperatur T_1 . $\lambda=1,9$ für alle Werte, negative Werte sind fett gedruckt.

$min(\Delta_{rel}\tau) [-]$	NUIG NGM3	SAN DIEGO	USC-II	POLIMI C<4
$X_{C_3H_8} = 0\%$	0,33 (975K)	0,35 (975K)	0,30 (975K)	0,37 (975K)
$X_{C_3H_8} = 5\%$	0,31 (975K)	0,24(900K)	0,31 (975K)	0,35 (975K)
$X_{C_3H_8} = 10\%$	0,28 (825K)	0,16 (900K)	0,31 (975K)	0,33 (825K)
$X_{C_3H_8} = 20\%$	0,19 (825K)	0,05 (875K)	0,32 (975K)	0,27 (825K)
$X_{C_3H_8} = 50\%$	0,10 (850K)	-0,11 (875K)	0,34 (975K)	0,21 (850K)
$X_{C_3H_8} = 100\%$	0,06 (875K)	-0,18 (875K)	0,36 (975K)	0,19 (850K)

Während für Methan alle vier Mechanismen relativ gut übereinstimmen, bemerkt man bereits bei geringen Propangehalten eine Auffächerung der jeweils berechneten Zündverzugszeiten zu niedrigen Temperaturen hin. Mit zunehmend höheren Propangehalten verstärkt sich diese Auffächerung, die vor allem durch eine unterschiedlich starke Temperaturabhängigkeit gekennzeichnet ist. Vor allem im Bereich zwischen 800K (Abszissenwert 1,25) und 925K (Abszissenwert 1,08) ist dies auffallend. Während es bei POLIMI C<4 und auch bei NUIG NGM3 zu einer Abschwächung der Temperaturabhängigkeit im mittleren Temperaturbereich kommt, ist diese bei SAN DIEGO so stark, dass ein Bereich mit negativer Temperaturabhängigkeit entsteht. USC-II liefert weiterhin deutlich von den übrigen Mechanismen abweichende Werte bei niedrigen Temperaturen. Bei Gegenüberstellung mit Tabelle 20 geht aus Tabelle 21 hervor, dass sich der NTC-Effekt mit steigendem Druck abschwächt.

τ_{rel} liegt für USC-II zwischen 0,84 (725K, $X_{C_3H_8}=0\%$) und 101,3 (725K, $X_{C_3H_8}=100\%$). Während für Temperaturen zwischen 900K und 1000K τ_{rel} Werte zwischen eins und zwei annimmt, kommt es bei niedrigeren Temperaturen zu immer größeren Abweichungen. Die Qualität der Übereinstimmung sinkt mit steigendem Propangehalt. Zu erklären ist dies damit, dass USC-II ein reiner Hochtemperaturmechanismus ist. τ_{rel} von SAN DIEGO hat Werte zwischen 0,22 (700K, $X_{C_3H_8}=50\%$) und 1,76 (750K, $X_{C_3H_8}=0\%$). Auch hier wird die beste Übereinstimmung zwischen 900K und 1000K erreicht. Zu niedrigeren Temperaturen hin verringert sich τ_{rel} besonders bei hohen Propangehalten. Dies ist darauf zurückzuführen, dass dieser Mechanismus ein stärker ausgeprägtes NTC-Verhalten zeigt, als es bei NUIG NGM3 der Fall ist. Die τ_{rel} , die sich auf Basis von Simulationen mit dem POLIMI C<4 Mechanismus ergeben, decken Werte zwischen 0,69 (1000K, $X_{C_3H_8}=50\%$) und 2,24 (700K, $X_{C_3H_8}=100\%$) ab, wobei hier die beste Übereinstimmung bei 800K und 900K sowie niedrigen Propangehalten (5%, 10%) erreicht wird.

Stellt man die beiden untersuchten Drücke für dieselbe Gasmischung nebeneinander (Abbildung 31), so ist keine große Veränderung der Verhältnisse auf Grund des Drucks feststellbar. Sehr wohl kommt es bei einer Verdoppelung des Drucks von 70bar auf 140bar zu einer Verringerung der Absolutwerte von τ , diese verändert jedoch die Verhältnisse der mit verschiedenen Mechanismen berechneten τ kaum. Darüber hinaus berechnet SAN DIEGO für reines Methan bei 70bar erst ab 750K eine Zündung innerhalb von 4,99s, während bei 140bar bereits ab 725K eine Zündung innerhalb dieser Zeit berechnet wird.

4 – Ergebnisse und Diskussion

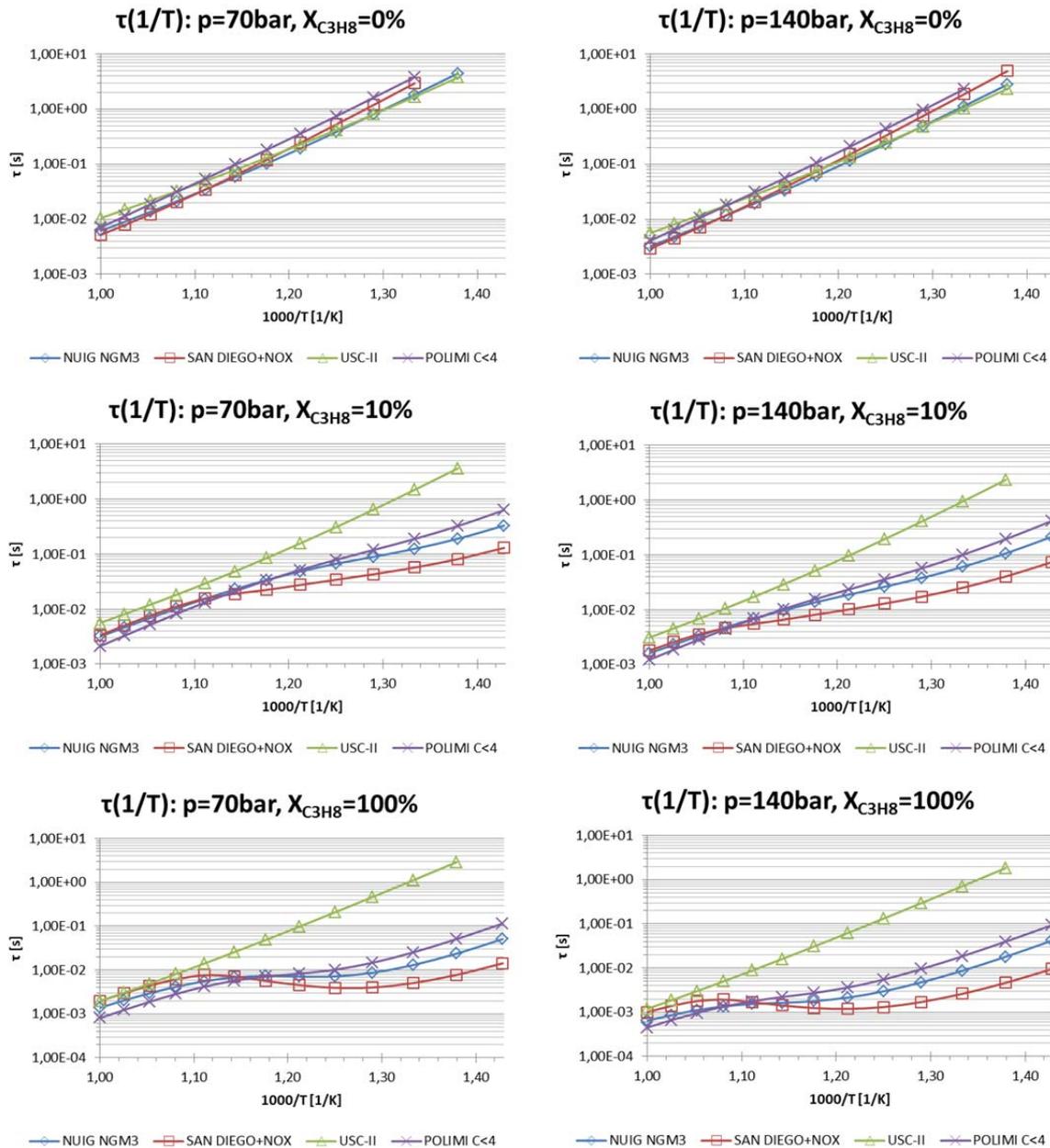


Abbildung 31: $\tau(1/T)$ für $\lambda=1,9$ und Brenngas-Propangehalte von 0%, 10% und 100% bei 70bar (links) sowie 140bar (rechts)

Zusammenfassend gilt für die Ergebnisse für $\tau(1/T)$ bei 140bar sinngemäß dasselbe wie für jene bei 70bar: Bei Temperaturen über 900K ergibt sich eine relativ gute Übereinstimmung der vier Mechanismen. Zwischen 800K und 900K kommt es bei hohen Propangehalten zu einer Verlangsamung der Verringerung von τ mit steigender Temperatur, die sich im Extremfall bis zur Vergrößerung von τ mit steigender Temperatur steigern kann (NTC-Effekt). Dieser Effekt ist am stärksten bei SAN DIEGO ausgeprägt, gefolgt von NUIG NGM3. POLIMI C<4 zeigt in diesem Bereich lediglich eine verringerte Verkürzung von τ . Bei USC-II ist dieses Verhalten gar nicht modelliert. Daraus resultieren die enormen Unterschiede zwischen diesem Mechanismus und den drei anderen bei niedrigen Temperaturen.

4.2.6 Zusammenfassung der Zündverzugsimulationen

Für Zündverzugsimulationen wurde ein 0-dimensionaler, isochorer, adiabater homogener Batchreaktor modelliert. Der Druck wurde zwischen 70bar und 140bar in 10bar-Schritten, die Temperatur zwischen 700K und 1000K in 25K-Schritten und Propangehalte von 0%, 1%, 2%, 3%, 5%, 10%, 15%, 20%, 30%, 50%, 75% und 100% berechnet.

Die Auswertung erfolgte hinsichtlich der Abhängigkeit der Zündverzugszeit von der Luftzahl (für zwei Bedingungen), vom Druck, vom Propangehalt und von der Temperatur. Die Luftzahl führt zu einer linearen Vergrößerung von τ , was bereits aus den Vorversuchen hervorgegangen war. Eine Erhöhung des Drucks bewirkt eine Verringerung von τ , wobei die Druckabhängigkeit schwach ist. Bei der Abhängigkeit vom Propangehalt fällt auf, dass bei einigen Mechanismen bereits geringe Propangehalte im Brenngas zu einer deutlichen Reduktion der Zündverzugszeit gegenüber jener von reinem Methan führen, während die Verringerung von großen Propangehalten zu noch größeren trotz viel größerer Veränderung in der Zusammensetzung des Brenngases nicht sehr stark ausfällt. Dies wird durch die Auswertung der Abhängigkeit der Zündverzugszeit vom Propangehalt des Brenngases untermauert. Was die Temperaturabhängigkeit betrifft, verkürzt sich die Zündverzugszeit meist mit steigender Temperatur. Es gibt jedoch eine Ausnahme: zwischen ungefähr 800K und 900K verringert sich die Zündverzugszeit weniger stark als in den benachbarten Temperaturbereichen, bei einigen Mechanismen vergrößert sie sich in diesem Temperaturbereich sogar, wenn Brenngase mit hohem Propangehalt simuliert werden. Dieses Phänomen wird negativer Temperaturkoeffizient (NTC) der Zündverzugszeit genannt. Die Parametervariationen zeigen, dass der NTC-Effekt unterschiedlich stark in den Mechanismen implementiert ist. Am stärksten ist er in SAN DIEGO, wobei Berechnungen der Projektpartner zeigten, dass dieser Mechanismus den NTC-Effekt zu stark modelliert. Etwas weniger stark wird der NTC-Effekt von NUIG NGM3 dargestellt. Mit diesem Mechanismus wurde von den Projektpartnern eine realistische Klopfnegung berechnet. Noch schwächer als in NUIG NGM3 ist der NTC-Effekt bei POLIMI C<4 ausgeprägt, und in USC-II ist er überhaupt nicht modelliert, da es sich bei diesem Mechanismus um ein Modell der Hochtemperaturverbrennung handelt. Dies erklärt auch die bei Temperaturen bis 900K starken Abweichungen dieses Mechanismus von den übrigen.

4.3 Laminare Flammengeschwindigkeit

Im Folgenden werden die Berechnungen der laminaren Flammengeschwindigkeit s_L präsentiert. Details zu der dazu durchgeführten Parametervariation sind im Kapitel "Simulation" beschrieben. Wegen des sehr hohen Rechenaufwandes ist die Parametervariation mit lediglich 24 Elementen pro Mechanismus deutlich kleiner ausgefallen als jene der Zündverzugszeiten. Das liegt daran, dass im Gegensatz zu den Zündverzugszeiten mit Startwerten gearbeitet werden musste. Dadurch wurden die Umgebungsbedingungen der Flamme in vielen Schritten iterativ an die präsentierten Werte herangeführt. Zusätzlich war es trotz impliziter Lösungsverfahren sehr schwierig, Lösungen der Gleichungssysteme zu erhalten. Bei POLIMI C<4 war es nicht möglich, für 1000K und 100bar eine Lösung für s_L zu erhalten, da das Gleichungssystem bei so hohen Drücken trotz sehr kleiner Schrittweiten nicht mehr konvergierte. Da für den Mechanismus NUIG NGM3 keine Transportdaten verfügbar sind, musste auf eine Simulation der laminaren Flammengeschwindigkeit mit Hilfe dieses Mechanismus verzichtet werden. Die Werte der einzelnen Simulationen finden sich in vollem Umfang im Anhang. In den folgenden Abbildungen stellen die gepunkteten Linien keine sinnvolle Interpolation dar, sondern sollen nur das Auge führen, um Trends zu verdeutlichen.

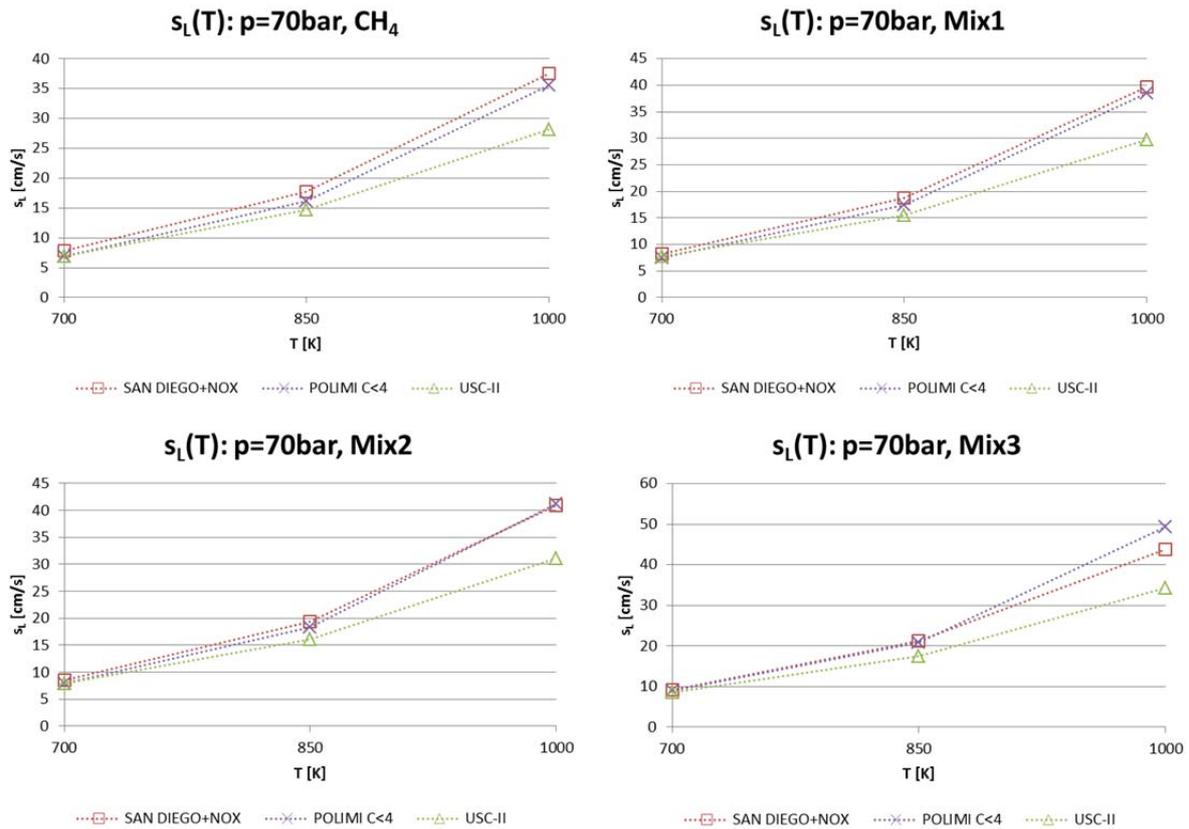


Abbildung 32: $s_L(T)$ bei $\lambda=1,9$ und einem Druck von 70bar für Methan sowie drei Gasmischungen mit steigendem Propangehalt

In Abbildung 32 sieht man, wie sich die mit den verschiedenen Mechanismen berechnete laminare Flammgeschwindigkeit mit steigender Temperatur erhöht. Dies ist für Methan (links oben) sowie für Brenngasmischungen mit Propangehalten von 1,63% (rechts oben), 7,64% (links unten) und 23,06% (rechts unten) dargestellt. Es ist zu sehen, dass bei 700K alle drei Mechanismen gut übereinstimmen. Erhöht man jedoch die Temperatur, so wird die Übereinstimmung der Mechanismen schlechter. Es ist auch zu sehen, dass USC-II bei 1000K deutlich von den anderen beiden Mechanismen abweicht. Dies ist insofern interessant, als USC-II bei den Zündverzugszeiten bei hohen Temperaturen (900K bis 1000K) eine bessere Übereinstimmung mit den übrigen Mechanismen zeigte als bei niedrigen Temperaturen. Allgemein ist die Temperaturabhängigkeit dieses Mechanismus die geringste.

Betrachtet man die Serie der Graphen von reinem Methan bis zu einer Brenngasmischung mit gut 23% Propangehalt, so fällt auf, dass POLIMI C<4 bei hohen Temperaturen stärker auf eine Erhöhung des Propangehalts reagiert. Während dieser Mechanismus Flammgeschwindigkeiten liefert, die bei 700K und 850K für alle Brenngasmischungen zwischen jenen von USC-II und SAN DIEGO liegen, so ist dies bei 1000K nur für reines Methan und Mix1 der Fall. Bei Mix2 ist die mit POLIMI C<4 berechnete Flammgeschwindigkeit bereits die größte (siehe auch Abbildung 34), und bei Mix3 sogar mit etwas Abstand.

4 – Ergebnisse und Diskussion

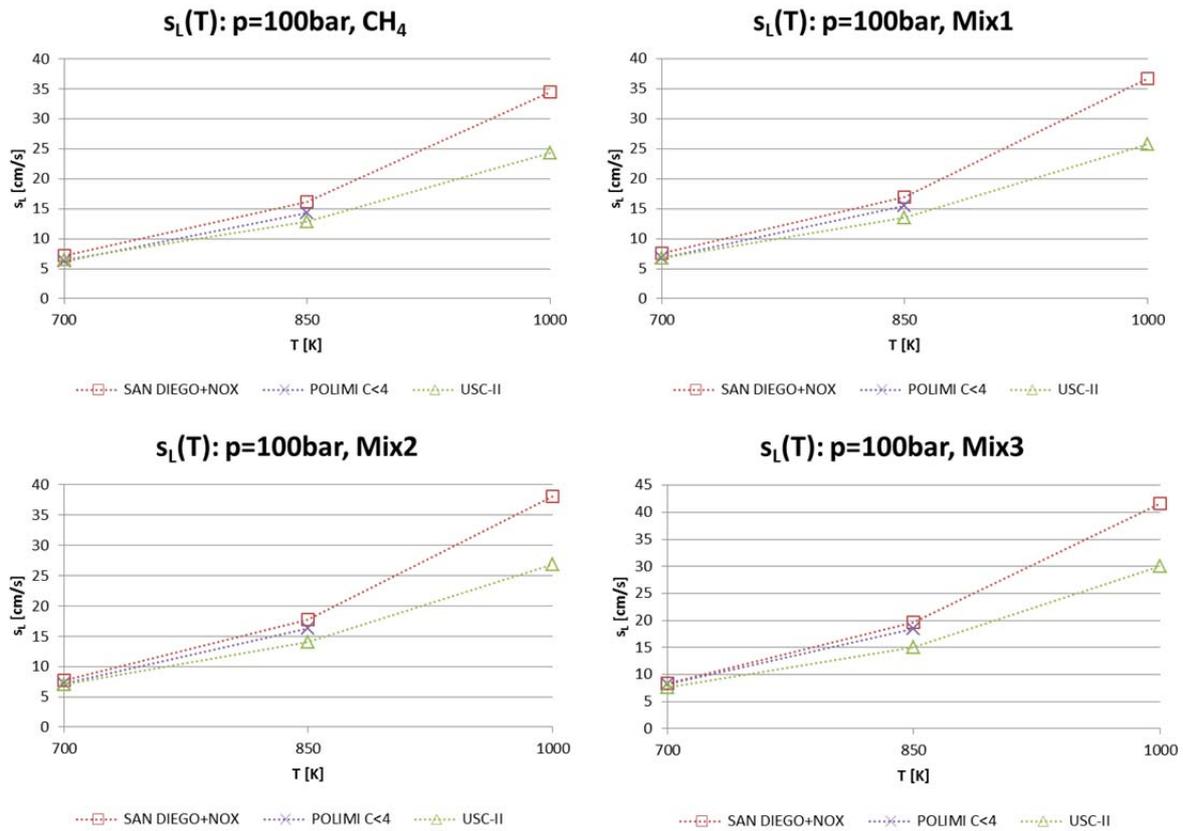


Abbildung 33: $s_L(T)$ bei $\lambda=1,9$ und einem Druck von 100bar für Methan sowie drei Gasmischungen mit steigendem Propangehalt

Abbildung 33 zeigt analog zu Abbildung 32 die Temperaturabhängigkeit der laminaren Flammgeschwindigkeit bei einem Druck von 100bar. Unter diesen Bedingungen konnte mit POLIMI C<4 für 1000K keine Lösung erhalten werden. Die Erhöhung von 70bar auf 100bar führt bei allen Mechanismen zu einer geringen Reduktion der Flammgeschwindigkeit um rund ein Zehntel des ursprünglichen Wertes.

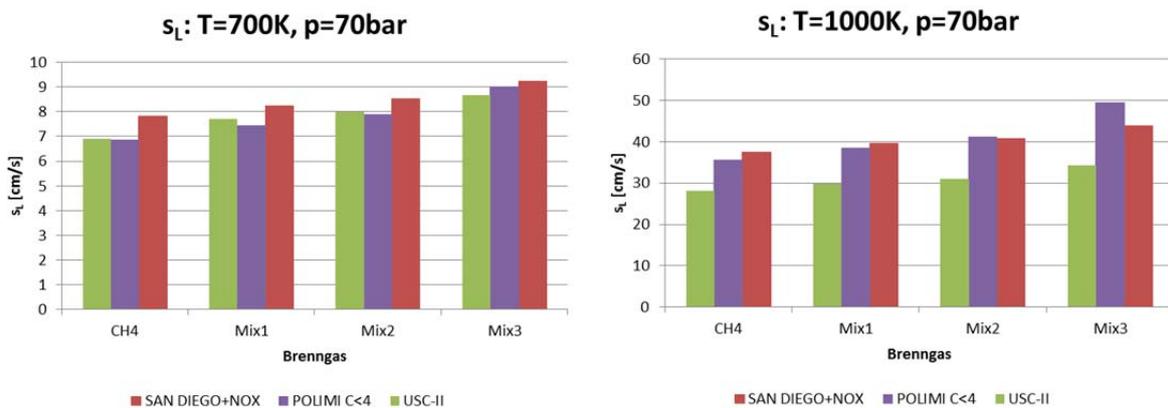


Abbildung 34: s_L bei $\lambda=1,9$ und einem Druck von 70bar für bei 700K (links) und 1000K (rechts) für Methan sowie drei Gasmischungen mit steigendem Propangehalt

In Abbildung 34 sind die laminaren Flammgeschwindigkeiten von Methan sowie drei Gasmischungen mit steigendem Propangehalt bei einem Druck von 70bar und 700K (links) sowie 1000K (rechts) zu sehen. Bei 700K sind alle drei Mechanismen in relativ guter Übereinstimmung. Bei

1000K ist die Übereinstimmung generell schlechter, wobei sie sich mit steigendem Propangehalt im Brenngas weiter verschlechtert: Man sieht, dass POLIMI C<4 bei hohem Propangehalt einen stärkeren Anstieg der Flammgeschwindigkeit berechnet als die anderen beiden Mechanismen.

4.4 Bewertung der Ergebnisse

Es wurden Zündverzugszeiten und laminare Flammgeschwindigkeiten für magere Verbrennung bei stark erhöhten Drücken für Brenngase, die sich aus Methan und Propan (Zündverzugszeiten) bzw. Methan, Ethan und Propan (Flammgeschwindigkeiten) zusammensetzen, berechnet. Diese Gase sind bereits öfter und detailliert untersucht worden, wie anhand der zahlreichen publizierten Verbrennungsmechanismen zu sehen ist (vgl. Tabelle 11 auf Seite 39). Dennoch fehlen bis dato Untersuchungen zur Verbrennung dieser Gase unter Bedingungen, wie sie in einem Großgasmotor im Magerbetrieb auftreten. Dies gilt sowohl für Zündverzugszeiten, als auch für Flammgeschwindigkeiten.

Während die Messung von Zündverzugszeiten bei diesen Bedingungen in einer RCM oder einem Stoßrohr grundsätzlich kein großes Problem darstellt, so ist die Situation bei den laminaren Flammgeschwindigkeiten deutlich schwieriger: Hier fehlen publizierte Daten, und die Messung unter Druck ist eine sehr große Herausforderung, worauf im Kapitel "Ausblick" noch eingegangen wird. Dennoch ist im Motorenbau die laminare Flammgeschwindigkeit eine wichtige Größe, da über sie die turbulente Flammgeschwindigkeit berechnet wird. Dabei muss darauf hingewiesen werden, dass die im vorigen Abschnitt berechneten Flammgeschwindigkeiten extrem weit extrapoliert sind. In [2] findet man eine ausführliche Liste mit Literatur zur Bestimmung von laminaren Flammgeschwindigkeiten. Darin findet man für Propan keine weiterführende Literatur für höhere Drücke als 5atm bei 298K Frischgastemperatur. Für Methan ist die Lage etwas besser, hierzu wird Literatur für bis zu 60atm Druck, jedoch ebenfalls nur bei 298K Frischgastemperatur genannt. Unter diesem Gesichtspunkt, auch unter Berücksichtigung der Tatsache, dass bei Drücken gegen 100bar Flammgeschwindigkeitsprobleme ziemlich schlechtes Konvergenzverhalten zeigen, müssen die erhaltenen Werte für laminare Flammgeschwindigkeiten sehr kritisch betrachtet werden. Außerdem ist zu bemerken, dass der POLIMI CRECK full Mechanismus, aus welchem POLIMI C<4 abgeleitet wurde, anhand von laminaren Flammgeschwindigkeiten validiert worden ist. Dennoch war es nicht möglich, mit diesem Mechanismus Werte für s_L bei 100bar zu erhalten.

Die berechneten Werte für Zündverzugszeiten sind, so wie jene der laminaren Flammgeschwindigkeiten, stark extrapoliert. Allerdings ist diese Extrapolation – im Vergleich zu s_L – nicht ganz so stark. In [23] werden Gasmischungen die jenen, für die Berechnung der Zündverzugszeiten in dieser Arbeit ähnlich sind, in einer RCM bei Drücken bis zu 30atm vermessen. Unter Berücksichtigung des Umstandes, dass die Berechnungen von τ durchgeführt worden sind, um Messbedingungen für eigens beauftragte RCM-Experimente aufzufinden, erscheint dieses Vorgehen als haltbar. Schließlich sind Simulationen deutlich billiger als RCM-Experimente, und die erhaltenen Daten werden der Verbesserung des Verbrennungsmodells dienen. Außerdem werden sie bei der Reduktion des Verbrennungsmechanismus eine wichtige Hilfe sein.

Neben Messwerten muss auch der Simulationssoftware, ihren Input-Files und den Mechanismus-Files selbst Aufmerksamkeit bei der Bewertung geschenkt werden: Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass Fehler in der Software vorhanden sind: Beim Arbeiten mit COSILAB im Rahmen dieser Arbeit wurden einige Bugs gefunden, und der Rotexo-Support davon in Kenntnis gesetzt. Die meisten dürften im Zusammenhang mit der grafischen Benutzeroberfläche stehen. So kam es mehrmals bei

Kopiervorgängen innerhalb von COSILAB-Projekten zu Abstürzen. Jedoch wurden in COSILAB auch Input-Files erstellt, welche reproduzierbar zu Abstürzen geführt haben, ohne dass die Ursache des Fehlers zu finden gewesen wäre. Fehler gab es überdies beim Einlesen der Mechanismus-Files. Dabei handelte es sich zum Beispiel um Formatierungsfehler in den publizierten Mechanismen, wie in USC-Mech II, wo im Kinetik-File in Zeile 1657 Zahlen durch Kommata statt Leerzeichen getrennt sind. Bemerkenswert scheint, dass die Daten von Argon im Thermodynamik-File der POLIMI Mechanismen in COSILAB einen Fehler verursachen, der sich negativen Wärmekapazitäten manifestiert. In der vorliegenden Arbeit wurde dieser Fehler behoben, indem die Daten für Argon aus NUIG NGM3 übernommen wurden. Außerdem spielte Argon bei den vorgestellten Rechnungen keine Rolle.

Sowohl Software, als auch publizierte Mechanismen sind nicht absolut fehlerfrei, wobei diese Fehler nicht quantifizierbar sind. Es kann nicht ausgeschlossen werden, dass ein Fehler in Software oder Mechanismus zu fehlerhaften Daten führt. Ebenso kann – auch in Anbetracht des Umfangs der zu bearbeitenden Daten – nicht mit absoluter Sicherheit garantiert werden, dass die vom Verfasser dieser Arbeit erstellten Input-Files frei von Fehlern sind. Man kann das reibungslose Durchlaufen von Parametervariationen und die Abwesenheit von unerwarteten Ergebnissen (Oszillieren, unphysikalische Werte, etc.) als Indiz werten, dass zumindest keine groben Fehler gemacht worden sind.

4.5 Vorschlag eines Mechanismus zur Anpassung und Reduktion

Es wird vorgeschlagen, den **NUIG NGM3** Mechanismus oder den bereits reduzierten Mechanismus **POLIMI C<4** zur weiteren Anpassung und Reduktion heranzuziehen. Von einer Verwendung von SAN DIEGO+NOX ist Abstand zu nehmen, da er durch die starke Modellierung des NTC-Bereichs bei niedrigen Temperaturen bereits sehr kurze Zündverzugszeiten ergibt. Daraus resultiert eine übermäßige Klopfneigung, wie aus Simulationen der Projektpartner hervorgegangen ist. Ebenfalls für die gegebene Problemstellung nicht geeignet ist der USC-II Mechanismus, da in ihm kein NTC-Bereich der Zündverzugszeit modelliert ist. Dies ist jedoch für die Problemstellung eine wichtige Voraussetzung. Hinsichtlich der Simulationen der laminaren Flammgeschwindigkeit wären für NUIG NGM3 Transportdaten zu berechnen, und das Konvergenzverhalten von POLIMI C<4 genauer zu betrachten.

5 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurden die Grundlagen der Biogaserzeugung und Biogasaufbereitung sowie wichtige Aspekte der Modellierung chemischer Kinetik zusammengefasst. Weiters wurden im CHEMKIN-II Format publizierte Reaktionsmechanismen für die magere Verbrennung von Methan-Propan-Mischungen recherchiert. Von den 25 gefundenen Mechanismen, welche tabellarisch zusammengestellt worden sind, wurden vier für systematische Parametervariationen ausgewählt: NUIG NGM3, SAN DIEGO+NOX, POLIMI C<4 und USC-II.

Einer der ausgewählten Mechanismen, POLIMI C<4 wurde in eigener Arbeit reduziert. Bei ihm handelt es sich um ein 127 Spezies in 2000 Reaktionen umfassendes CO-C3 sowie NO_x-Subset von POLIMI CRECK full (466 Spezies, 14631 Reaktionen). Validiert wurde dieser Mechanismus mit Zündverzugs-Simulationen und dem 185 Spezies in 4259 Reaktionen umfassenden CO-C4 sowie NO_x-Subset von POLIMI CRECK full. Er zeigte ausgezeichnete Übereinstimmung.

Die vier ausgewählten Mechanismen wurden hinsichtlich zweier Summenparameter bewertet: der Zündverzugszeit τ und der laminaren Flammgeschwindigkeit s_L . Sie wurden dazu systematischen Parametervariationen unterzogen. Es wurden Druck, Temperatur und Propangehalt variiert, um unterschiedliches Verhalten der Mechanismen darzustellen.

Für Zündverzugsimulationen wurde ein 0-dimensionaler, isochorer, adiabater homogener Batchreaktor modelliert. Der Druck wurde zwischen 70bar und 140bar in 10bar-Schritten, die Temperatur zwischen 700K und 1000K in 25K-Schritten und Propangehalte von 0%, 1%, 2%, 3%, 5%, 10%, 15%, 20%, 30%, 50%, 75% und 100% berechnet.

Zwischen ungefähr 800K und 900K verkürzt sich die Zündverzugszeit weniger stark als in den benachbarten Temperaturbereichen. Sie vergrößert sich bei einigen Mechanismen in diesem Temperaturbereich unter bestimmten Bedingungen sogar. Dieses Phänomen wird negativer Temperaturkoeffizient (NTC) der Zündverzugszeit genannt. Die Parametervariationen zeigten, dass der NTC-Effekt unterschiedlich stark in den Mechanismen implementiert ist. Am stärksten ist er in SAN DIEGO abgebildet, wobei Berechnungen der Projektpartner zeigten, dass dieser Mechanismus den NTC-Effekt übergewichtet. Etwas weniger stark wird der NTC-Effekt von NUIG NGM3 dargestellt. Mit diesem Mechanismus wurde von den Projektpartnern eine realistische Klopfneigung berechnet. Noch schwächer als in NUIG NGM3 ist der NTC-Effekt bei POLIMI C<4 ausgeprägt, und in USC-II ist er überhaupt nicht modelliert, da es sich bei diesem Mechanismus um ein Modell der Hochtemperaturverbrennung handelt. Dies erklärt auch die bei Temperaturen bis 900K starken Abweichungen dieses Mechanismus von den übrigen.

Die Druckabhängigkeit ist bei allen Mechanismen nicht besonders stark ausgeprägt. Sie vergrößert sich mit dem Propangehalt des Brenngases und mit der Temperatur bis 900K; bei 1000K ist sie dann wieder etwas schwächer. Bei der Abhängigkeit vom Propangehalt fällt auf, dass bei jenen Mechanismen, welche den NTC-Effekt berücksichtigten, bereits geringe Propangehalte im Brenngas zu einer deutlichen Reduktion der Zündverzugszeit gegenüber jener von reinem Methan führen. Die Verringerung von großen Propangehalten zu noch größeren ist jedoch trotz der viel größerer Veränderung in der Zusammensetzung des Brenngases nicht so groß.

5 – Zusammenfassung

Die laminaren Flammgeschwindigkeiten stimmen besonders bei niedrigen Temperaturen gut überein. Sie steigt mit der Temperatur und mit dem Propangehalt der Brenngasmischung. Die laminare Flammgeschwindigkeit sinkt jedoch mit steigendem Druck.

6 Ausblick

Es wurden verschiedene publizierte Reaktionsmechanismen an Hand der Summenparameter Zündverzugszeit und laminarer Flammengeschwindigkeit verglichen. Um die berechneten Daten besser bewerten zu können, sind gemessene Daten nötig. Unter Berücksichtigung der finanziellen Rahmenbedingungen sind Zündverzugszeit-Messungen an einer RCM in Auftrag gegeben worden. Ihre Auswertung wird in Zukunft erfolgen. Eine sorgfältige Modellierung des Experiments ist dabei unbedingt nötig, weshalb zu jedem Zündverzugs-Experiment ein nicht-reaktives Experiment durchgeführt werden wird. Es muss ausgeschlossen sein, dass eventuelle Differenzen zwischen Experiment und Simulation, welche Änderungen am Mechanismus nach sich ziehen könnten, durch ungenaue Modellierung verursacht worden sind.

Für die Messung von laminaren Flammengeschwindigkeiten unter den gesuchten Bedingungen existiert derzeit keine ausgereifte Methode. Mit steigendem Druck wird die Flammendicke, und somit die Reaktionszone, immer dünner. Dadurch wird es zunehmend schwieriger, stabile Flammen zu erhalten. Dies ist jedoch eine Notwendigkeit zur Bestimmung der laminaren Flammengeschwindigkeit. Eine weitere Herausforderung an Messmethoden, die unter erhöhtem Druck arbeiten, ist es, die Messbedingungen konstant zu halten und das Abgas abzuleiten. Besondere Aufmerksamkeit muss dabei auf die mögliche Kondensation des bei der Verbrennung gebildeten Wassers gerichtet werden. Die Messung der laminaren Flammengeschwindigkeit unter erhöhtem Druck ist noch Gegenstand der Forschung. Sie konnte jedoch noch nicht für Drücke im Bereich von 100bar, wie sie in Großgasmotoren vorkommen können, umgesetzt werden.

Bei den bisherigen Berechnungen wurden die Mechanismen so verwendet, wie sie publiziert worden sind. Es wurde nicht darauf geachtet, welchen Einfluss eventuell unterschiedliche Thermodynamik- und Transportdaten für ein und dieselbe Spezies in verschiedenen Mechanismen haben. Dieser Einfluss kann jedoch beträchtlich sein, wie in [41] für Thermodynamik-Daten gezeigt wird. Ein nächster Schritt zu einem verfeinerten wissenschaftlichen Vergleich wäre somit eine Analyse der Bestandteile der betrachteten Mechanismen. Um ausschließlich den Einfluss der Kinetik-Daten zu bestimmen, müssten Thermodynamik- und Transportdaten für alle Mechanismen vereinheitlicht werden.

Vom im Rahmen des Projekts zu erstellenden Reaktionsmechanismus wird gefordert, die NO_x -Bildung abzudecken. Es sind Mechanismen wie SAN DIEGO NOX oder GRI-Mech 3.0, die NO_x beinhalten, publiziert. Es ist jedoch nicht ohne weiteres möglich, Teile verschiedener Mechanismen zu verschmelzen, da damit die Konsistenz des Mechanismus gestört wird. Dementsprechend ist die Auswirkung einer Erweiterung der vorgeschlagenen Mechanismen zu untersuchen. Davon ausgenommen ist die Kombination SAN DIEGO und SAN DIEGO NOX, da hier explizit der NO_x -Mechanismus als Add-On zum SAN DIEGO Mechanismus publiziert worden ist. Die Konsistenz der Daten kann daher als sichergestellt betrachtet werden.

Da für CFD-Simulationen nur reduzierte Mechanismen in Frage kommen, werden Reduktionsstrategien benötigt. Durch die Reduktion wird das ursprüngliche Gleichungssystem in eines mit weniger Variablen überführt. Daraus folgt, dass der vereinfachte, reduzierte Mechanismus einen geringeren Gültigkeitsbereich und eine geringere Genauigkeit hat als der detaillierte Mechanismus. Deswegen muss der Gültigkeitsbereich festgelegt werden, in dem der reduzierte Mechanismus gegen den detaillierten Mechanismus und Messwerte validiert werden muss.

Es existieren mehrere Reduktionsstrategien, von denen einige in [19] und [42] beschrieben sind. Da die verwendete Software COSILAB über keine automatische Reduktion in ihrem Funktionsumfang verfügt, wird Software zur Reduktion zu suchen sein. Auf Basis der zu diesem Thema bisher recherchierten Literatur und Software erscheint es möglich, dass eine oder mehrere publizierte Reduktionsstrategien selbst zu programmieren sein werden. Der so erhaltene reduzierte Mechanismus wird in Zusammenarbeit mit den Projektpartnern zu testen und hinsichtlich seiner Eignung für CFD-Simulationen zu bewerten sein.

Ist ein reduzierter Mechanismus entwickelt, der die Balance zwischen rechnerischer Komplexität und Treue gegenüber den chemischen Vorgängen bei Zündung und Verbrennung des Gasgemischs hält, wird das Projekt von den Projektpartnern im Maschinenbau fortgeführt. Sie können dann den angestrebten Großgasmotor für Biogase entwickeln.

7 Nomenklatur

7.1 Formelzeichen

Formelzeichen	Name	Einheit, sofern nicht anders angegeben
$\Delta_{rel}\tau$	relative Differenz der Zündverzugszeit	[-]
A_D	Querschnitt der Brennerdüse	[m ²]
C_p	Wärmekapazität bei konstantem Druck	[J/K]
C_v	Wärmekapazität bei konstantem Volumen	[J/K]
E_A	Aktivierungsenergie	[J/mol]
H_{im}	massebezogener Heizwert	[MJ/kg]
H_{iv}	volumenbezogener Heizwert	[MJ/m ³]
H_{sv}	volumenbezogener Brennwert	[MJ/m ³]
K_c	Gleichgewichtskonstante	[-]
K_p	Gleichgewichtskonstante	[-]
Q_i	Heizwertbezogene Wärmeenergie	[MJ]
T_b	Temperatur des verbrannten Gases	[K]
V_h	Hubraum	[m ³]
V_c	Kompressionsvolumen	[m ³]
W_{iv}	unterer Wobbeindex	[MJ/m ³]
W_{sv}	oberer Wobbeindex	[MJ/m ³]
k_f	Geschwindigkeitskoeffizient der Hinreaktion	(verschiedene)
k_r	Geschwindigkeitskoeffizient der Rückreaktion	(verschiedene)
s_L	laminare Flammgeschwindigkeit	[cm/s]
v_D	Gasgeschwindigkeit in der Brennerdüse	[m/s]
η_{th}	thermischer Wirkungsgrad	[-]
σ_{rel}	relative Standardabweichung	[-]
τ_{rel}	relative Zündverzugszeit	[-]
A	Arrhenius-Stoßfaktor	[-]
A	Freie Energie	[J]
G	Freie Enthalpie	[J]
H	Enthalpie	[J]
J	Anzahl aller Spezies	[-]
M	Molare Masse	[g/mol]
N	Anzahl der Atome in einem Molekül	[-]
Q	Wärme	[J]
R	ideale Gaskonstante	[J/(mol·K)]
S	Entropie	[J/K]
T	Temperatur	[K]
U	innere Energie	[J]
V	Volumen	[m ³]
X	Stoffmengenanteil	[-]
a	polynomischer Parameter im Thermodynamik-File	[-]
b	erweiterter Arrhenius-Temperaturkoeffizient	[-]
d	relative Dichte	[-]
k	Geschwindigkeitskoeffizient	(verschiedene)
m	Masse	[kg]
max	Maximum	(verschiedene)
min	Minimum	(verschiedene)
n	Stoffmenge	[mol]

Formelzeichen	Name	Einheit, sofern nicht anders angegeben
p	Druck	[Pa]
rF	relative Feuchte	[%]
w	Massenanteil	[-]
z	Ortskoordinate	[m]
α	Ausflusszahl (Wobbe-Index)	[-]
α	cut-off Faktor (Gleichdruckprozess)	[-]
γ	Adiabatexponent	[-]
ε	Verdichtungsverhältnis	[-]
λ	Luftzahl	[-]
μ	arithmetischer Mittelwert	(verschiedene)
ν	stöchiometrischer Koeffizient	[-]
ρ	Dichte	[kg/m ³]
σ	Standardabweichung	(verschiedene)
τ	Zündverzugszeit	[s]
φ	Äquivalenzverhältnis	[-]

7.2 Indices und Erweiterungszeichen

siehe auch: 7.3 Abkürzungen und chemische Verbindungen

Index	Name
—	bezogen auf $n = 1 \text{ mol}$
.	Fluss, $\partial/\partial t$
⁰	bezogen auf $p = 1 \text{ bar}$
°	bezogen auf Standardbedingungen: $p = 1 \text{ bar}$; $T = 273,15 \text{ K}$
0	Anfangswert
<i>Br</i>	Brennstoff
<i>G</i>	Gas
<i>L</i>	Luft
<i>Ox</i>	Oxidationsmittel
<i>R</i>	Reaktion
<i>ab</i>	abgeführt
<i>i</i>	Zählindex Reaktion
<i>j</i>	Zählindex Spezies
<i>n</i>	Zählindex
<i>ref</i>	Referenz
<i>zu</i>	zugeführt
Δ	Differenz

7.3 Abkürzungen und chemische Verbindungen

Abkürzung	Name
Ar	Argon
BHKW	Blockheizkraftwerk
CFD	Computational Fluid Dynamics
CH ₄	Methan
CO ₂	Kohlenstoffdioxid
EGR	exhaust gas recirculation
AGR	<i>Abgasrückführung</i>
FCKW	fluorierte Chlorkohlenwasserstoffe
FTIR	Fourier-Transformation Infrarotspektroskopie
GC	Gaschromatographie
GUI	graphical user interface <i>grafische Benutzeroberfläche</i>
H ₂	Wasserstoff
H ₂ O	Wasser
H ₂ S	Schwefelwasserstoff
KFZ	Kraftfahrzeug
LAS	Laserabsorptionsspektrometrie
LIF	Laserinduzierte Fluoreszenz
MS	Massenspektrometrie
MZ	Methanzahl
N ₂	Stickstoff
NH ₃	Ammoniak
NMP	<i>N-Methyl-2-pyrrolidon</i>
NTC	negative temperature coefficient, <i>negativer Temperaturkoeffizient</i>
NUIG NGM 3	National University Of Ireland In Galway, Natural Gas Mechanism Version 3 nc5_49
O ₂	Sauerstoff
OT	oberer Totpunkt
oTM	Organischer Trockenmassegehalt
OZ	Oktanzahl
PSA	pressure swing absorption <i>Druckwechselabsorption</i>
RCM	Rapid Compression Machine <i>schnelle Kompressionsmaschine, Einhubtriebwerk</i>
UASB	upstream anaerobic sludge blanket <i>ein Schlammbettreaktor</i>
UT	unterer Totpunkt

8 Literatur- und Quellenverzeichnis

- [1] M. Frenklach, et al.: GRI-Mech 1.2, 1994.
<http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/> Abgerufen am 12.03.2013
- [2] E. Ranzi, et al.: Hierarchical and comparative kinetic modeling of laminar flame speeds of hydrocarbon and oxygenated fuels, *Progress in Energy and Combustion Science*, **38**, 468-501, 2012. DOI: 10.1016/j.pecs.2012.03.004
- [3] J. Warnatz, U. Maas, R. W. Dibble: Verbrennung - Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung, 3. Aufl., Springer, Berlin, Heidelberg, u.a., 2001. ISBN: 3-540-42128-9
- [4] Richtlinie 2003/30/EG des Europäischen Parlaments und des Rates vom 8. Mai 2003 zur Förderung der Verwendung von Biokraftstoffen oder anderen erneuerbaren Kraftstoffen im Verkehrssektor, 2003.
<http://eur-lex.europa.eu/LexUriServ/LexUriServ.do?uri=OJ:L:2003:123:0042:0042:DE:PDF>
Abgerufen am 03.04.2013
- [5] F. Scholwin, J. Liebetreu, W. Edelmann, M. Ritzkowski, I. Körner: Biogaserzeugung und -nutzung, in: M. Kaltschmitt, H. Hartmann, H. Hofbauer [Hrsg]: *Energie aus Biomasse - Grundlagen, Techniken und Verfahren*, Springer, Berlin, Heidelberg u.a., 2009, 851-931. ISBN: 978-3-540-85094-6 (Print), 978-3-540-85095-3 (Online)
- [6] W. Pölz, S. Salchenegger: Biogas im Verkehrssektor - Technische Möglichkeiten, Potenzial und Klimarelevanz, *Umweltbundesamt-Bericht 283*, Wien, 2005. ISBN: 3-85457-799-0
<http://www.umweltbundesamt.at/fileadmin/site/publikationen/BE283.pdf>
Abgerufen am 22.11.2012
- [7] ÖVGW G33, regenerative Gase – Biogas, Österreichischer Verband für das Gas- und Wasserfach, 2006.
- [8] ÖVGW G31, Erdgas in Österreich – Gasbeschaffenheit, Österreichischer Verband für das Gas- und Wasserfach, 2006.
- [9] H. Zellmann: Gaseinspeisung - Anforderungen, Möglichkeiten und Grenzen, in: *Biogas - Energieträger der Zukunft*, VDI-Berichte 1751, VDI-Verlag, Düsseldorf, 2003. ISBN: 3-18-091751-2
- [10] DIN 51857:1997, Berechnung von Brennwert, Heizwert, Dichte, relativer Dichte und Wobbeindex von Gasen und Gasgemischen, DIN Deutsches Institut für Normung, 1997.
- [11] M. Lackner, Á. Palotás, F. Winter: Combustion - from Basics to Applications, Wiley-VCH, Weinheim, 2013. ISBN: 978-3-527-33351-6
- [12] R. Stone, Introduction to Internal Combustion Engines, 4. Aufl., Palgrave-Macmillan, New York, u.a., 2012. ISBN: 978-0768020847

- [13] J. B. Heywood, *Internal Combustion Engine Fundamentals*, McGraw-Hill, New York, 1988. ISBN: 978-0070286375
- [14] K. Christoph, W. Cartellieri, U. Pfeifer: Die Bewertung der Klopffestigkeit von Kraftgasen mittels der Methanzahl und deren praktische Anwendung bei Gasmotoren, *MTZ Motortechnische Zeitschrift*, 10 (Sonderdruck), 1-13, 1972.
- [15] S. Voglsam: Globale Verbrennungsmechanismen zur Simulation von Selbstzündung von Benzin und Kerosin für den Einsatz in CFD-Simulationen, Dissertation, TU Wien, 2012.
- [16] F. Battin-Leclerc, et al.: Towards cleaner combustion engines through groundbreaking detailed chemical kinetic models, *Chemical Society Reviews*, 40, 4762-4782, 2011. DOI: 10.1039/c0cs00207k
- [17] G. P. Smith, et al.: GRI-Mech 3.0, 1999. <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/> Abgerufen am 01.02.2013
- [18] Reaction Design: CHEMKIN - A Software Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical and Plasma Kinetics [Benutzerhandbuch Version 3.6], 2000. <http://www.dipic.unipd.it/faculty/canu/files/Comb/Docs/chemkinCK.pdf> Abgerufen am 16.11.2013
- [19] I. Zsély, T. Nagy, J. M. Simmie, H. J. Curran: Reduction of a detailed kinetic model for the ignition of methane/propane mixtures at gas turbine conditions using simulation error minimization methods, *Combustion and Flame*, 158, 1469-1479, 2011. DOI: 10.1016/j.combustflame.2010.12.011
- [20] H. J. Curran: ST and RCM contribution to mechanism generation and validation, 2013. http://creckmodeling.chem.polimi.it/images/COST-School/presentations/5_Exptl_contribution_Curran.pdf Abgerufen am 15.07.2013
- [21] Stoßwellenlabor der RWTH Aachen, 2013. http://www.swl.rwth-aachen.de/graphics/get.php?file=TH3_Prinzipskizze_gross.jpg Abgerufen am 23.07.2013
- [22] NUIG Combustion Chemistry Centre, 2013. <http://c3.nuigalway.ie/facilities.html> Abgerufen am 23.07.2013
- [23] D. Healy, et al.: Oxidation of C1-C5 Alkane Quaternary Natural Gas Mixtures at High Pressures, *Energy & Fuels*, 24, 1521-1528, 2010. DOI: 10.1021/ef9011005
Mechanismus: <http://c3.nuigalway.ie/naturalgas3.html> Abgerufen am 14.07.2013
- [24] Rotexo GmbH & Co. KG: COSILAB 3.3.2 6652, Bochum, 2012. <http://www.rotexo.com/> Abgerufen am 27.11.2012
- [25] C. T. Bowman, et al.: GRI-Mech 2.11, 1995. <http://www.me.berkeley.edu/gri-mech/> Abgerufen am 12.03.2013

- [26] H. Wang, et al.: JetSurF version 2.0, A high-temperature chemical kinetic model of n-alkane (up to n-dodecane), cyclohexane, and methyl-, ethyl-, n-propyl and n-butyl-cyclohexane oxidation at high temperatures, 2010. <http://melchior.usc.edu/JetSurF/JetSurF2.0> Abgerufen am 14.03.2013
- [27] A. Konnov: A.KONNOV's detailed reaction mechanism VER 0.5, 2000. <http://homepages.vub.ac.be/~akonnov> [offline]. Mechanismus erhalten aus privater Kommunikation.
- [28] K. J. Hughes, T. Turányi, A. Clague, M. J. Pilling: Development and testing of a comprehensive chemical mechanism for the oxidation of methane, *International Journal of Chemical Kinetics*, **33**, 513-538, 2001. Mechanismus: <http://garfield.chem.elte.hu/Combustion/methane.htm> Abgerufen am 07.03.2013
- [29] The Leeds NOx Mechanism, 1999. <http://garfield.chem.elte.hu/Combustion/nox.htm> Abgerufen am 07.03.2013
- [30] Combined LEEDS/ELTE Mechanism, 2004. <http://garfield.chem.elte.hu/Combustion/combine.htm> Abgerufen am 07.03.2013
- [31] N. M. Marinov, W. Pitz, C. Westbrook, M. Hori, N. Matsunaga, 2004. https://www-pls.llnl.gov/?url=science_and_technology-chemistry-combustion-nox Abgerufen am 09.04.2013
- [32] E. L. Petersen, et al.: Methane/Propane Oxidation at High Pressures: Experimental and Detailed Chemical Kinetic Modelling, *Proceedings of the Combustion Institute*, **31**, 447-454, 2007. Mechanismus: http://c3.nuigalway.ie/natural_gas.html Abgerufen am 10.04.2013
- [33] G. Bourque, et al.: Ignition and Flame Speed Kinetics of Two Natural Gas Blends With High Levels of Heavier Hydrocarbons, in: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2008: Power for Land, Sea and Air*, 3:1051-1066, 2008. Mechanismus: <http://c3.nuigalway.ie/naturalgas2.html> Abgerufen am 10.04.2013
- [34] C. J. Sung, B. Li, H. Wang, C. K. Law: Structure and Sooting Limits in Counterflow Methane/Air and Propane/Air Diffusion Flames from 1 to 5 Atmospheres, in: *Twenty-Seventh Symposium (International) on Combustion*, 1523-1529, 1998. Mechanismus: <http://lcg.princeton.edu/research/chemical-kinetic-mechanisms/mechanism-for-high-pressure-ch4-and-c3h8-oxidation.aspx> Abgerufen am 28.02.2013
- [35] Mechanical and Aerospace Engineering (Combustion Research), University of California at San Diego: Chemical-Kinetic Mechanisms for Combustion Applications, 2012. Mechanismus: <http://combustion.ucsd.edu> Abgerufen am 13.07.2013
- [36] S. G. Davis, C. K. Law, H. Wang: Propene Pyrolysis and Oxidation Kinetics in a Flow Reactor and Laminar Flames, *Combustion and Flame*, **119**, 375-399, 1999. Mechanismus <http://ignis.usc.edu/Mechanisms/C3/c3.html> Abgerufen am 28.02.2013

- [37] Z. Qin, et al.: Combustion Chemistry of Propane: A Case Study of Detailed Reaction Mechanism Optimization, *Proceedings of the Combustion Institute*, **28**, 1663-1669, 2000. Mechanismus: <http://ignis.usc.edu/Mechanisms/C3-opt/C3-opt.html> Abgerufen am 28.02.2013
- [38] H. Wang, et al.: USC Mech Version II, High-Temperature Combustion Reaction Model of H₂/CO/C₁-C₄ Compounds, 2007. http://ignis.usc.edu/USC_Mech_II.htm Abgerufen am 28.02.2013
- [39] R. Bardolf, F. Winter: Comparison of Chemical Kinetic Mechanisms for Combustion Simulation of Treated Biogas, in: *ERIN 2013 - Education, Research INnovation - Proceedings of Abstracts*, 2013. ISBN: 978-80-227-3934-4
- [40] R. Bardolf, F. Winter: Comparison of Chemical Kinetic Mechanisms for Lean Methane/Propane Mixture Ignition at High Pressures, *Virt&I-Comm, Special Issue*, **84**, 2013.
- [41] L. Léon, et al.: Evaluation of the Influence of Thermodynamic Data for Propane and Propene Ignition Delay Time, in: *Proceedings of the European Combustion Meeting 2013*, P5-13, 2013. ISBN: 978-91-637-2151-9
- [42] A. S. Tomlin, *Reduction Methods*, 2013. http://creckmodeling.chem.polimi.it/images/COST-School/presentations/6_Reduction_Tomlin.pdf Abgerufen am 15.07.2013

9 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1: Blockschema einer Biogasanlage [6].....	4
Abbildung 2: Schematische Darstellung einer Nassvergärung [5]	5
Abbildung 3: Schema eines UASB-Reaktors [5].....	5
Abbildung 4: Typische Verwendungsmöglichkeiten von Biogas [5].....	6
Abbildung 5: Schema der Takte eines Viertaktmotors [11]	9
Abbildung 6: Schema eines Zweitaktmotors [11]	10
Abbildung 7: Exemplarischer Druckverlauf in Abhängigkeit vom Kurbelwinkel für einen Ottomotor, nach [12]. Bei Punkt 1 wird gezündet, aufgrund des Zündverzugs findet die Verbrennung erst ab Punkt 2 statt.	11
Abbildung 8: Ein realer Ottomotor und seine Idealisierung durch einen Gleichraumprozess mit Ladungswechsel nach [12]	12
Abbildung 9: p-V-Diagramm eines idealen Gleichraumprozesses	12
Abbildung 10: p-V-Diagramm eines Idealen Gleichdruckprozesses.....	13
Abbildung 11: Dimensionslose Wärmekapazität $C_v(T)/R$ berechnet mit den Thermodynamik-Polynomen aus NUIG NGM 3	18
Abbildung 12: Exemplarischer Auszug aus dem Mechanismus-File von GRI-Mech 3.0 [17]	23
Abbildung 13: Exemplarischer Auszug aus dem Thermodynamik-File von GRI-Mech 3.0 [17]	23
Abbildung 14: Exemplarischer Auszug aus dem Transportdaten-File von GRI-Mech 3.0 [17]	24
Abbildung 15: Hierarchie der Verbrennungsmechanismen von Alkanen nach [3]	24
Abbildung 16: Prinzipskizze des Hochdruck-Stoßrohres TH3 des Stoßwellenlabors der RWTH Aachen [21]	27
Abbildung 17: Die Zwei-Kolben-RCM in Galway und ein Detailfoto eines ihrer Kolben [22].....	28
Abbildung 18: Screenshot von COSILAB 3.3.2 bei der Berechnung von s_L mittels Newton-Verfahren	29
Abbildung 19: Bei chemischen Reaktionen relevante Zeitskalen [3]	30
Abbildung 20: Screenshot einer unbrauchbaren Simulation einer freien Flamme. Oben sieht man den Temperaturverlauf von 1000K bis 2120K in Abhängigkeit vom Ort. Dieser entspricht den Erwartungen. Unten ist der Massenstrom [$\text{kg}/(\text{s m}^2)$] in Abhängigkeit vom Ort zu sehen. Dieser ist – wider Erwarten – nicht konstant, was dem Massenerhalt widerspricht.	32
Abbildung 21: Zündverzugszeiten für niedrige Temperaturen und Propangehalte, berechnet mit dem SAN DIEGO Mechanismus. Die Linien stellen keine sinnvolle Interpolation dar, sondern sollen das Auge führen.....	42
Abbildung 22: $\tau(\lambda)$ bei 100bar, 800K und 5% Propangehalt (links), sowie $\tau(\lambda)$ bei 100bar, 850K und 20% Propangehalt (rechts)	43
Abbildung 23: $\tau(p)$ bei $\lambda=1,9$ und 700K für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%	44
Abbildung 24: $\tau(p)$ bei $\lambda=1,9$ und 800K für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%	46
Abbildung 25: $\tau(p)$ bei $\lambda=1,9$ und 900K für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%	48
Abbildung 26: $\tau(p)$ bei $\lambda=1,9$ und 1000K für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%	50
Abbildung 27: $\tau(X_{\text{C}_3\text{H}_8})$ bei $\lambda=1,9$ und einem Druck von 70bar für Temperaturen von 700K, 800K, 900K, 1000K.....	52

9 – Abbildungsverzeichnis

Abbildung 28: $\tau(X_{\text{C}_3\text{H}_8})$ bei $\lambda=1,9$ und einem Druck von 140bar für Temperaturen von 700K, 800K, 900K, 1000K.....	54
Abbildung 29: $\tau(1/T)$ bei $\lambda=1,9$ und 70bar für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%.....	57
Abbildung 30: $\tau(1/T)$ bei $\lambda=1,9$ und 140bar für Brenngas-Propangehalte von 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100%.....	59
Abbildung 31: $\tau(1/T)$ für $\lambda=1,9$ und Brenngas-Propangehalte von 0%, 10% und 100% bei 70bar (links) sowie 140bar (rechts).....	61
Abbildung 32: $s_L(T)$ bei $\lambda=1,9$ und einem Druck von 70bar für Methan sowie drei Gasmischungen mit steigendem Propangehalt	63
Abbildung 33: $s_L(T)$ bei $\lambda=1,9$ und einem Druck von 100bar für Methan sowie drei Gasmischungen mit steigendem Propangehalt	64
Abbildung 34: s_L bei $\lambda=1,9$ und einem Druck von 70bar für bei 700K (links) und 1000K (rechts) für Methan sowie drei Gasmischungen mit steigendem Propangehalt	64

10 Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: Zusammensetzung und Kenndaten von unbehandeltem Biogas aus fermentativen Prozessen [7]	6
Tabelle 2: Einteilung und Verwendungsbeispiele von gängigen Verbrennungsmotortypen nach [11]..	9
Tabelle 3: Beispiele für die Einteilung der Verbrennung nach Strömung und Vormischung.....	21
Tabelle 4: Beispiele für fette, stöchiometrische und magere Verbrennung und die dazugehörigen λ und φ	21
Tabelle 5: Detaillierungsgrad für Verbrennungsmechanismen gasförmiger Kohlenwasserstoffe	25
Tabelle 6: Daten der Vorversuche und der durchgeführten Variationen	33
Tabelle 7: Gemeinsame Parameter aller Zündverzugsimulationen	34
Tabelle 8: Daten der Parametervariation der Zündverzugsimulationen.....	34
Tabelle 9: Gemeinsame Parameter aller Berechnungen der laminaren Flammgeschwindigkeit.....	35
Tabelle 10: Daten der Parametervariation der Berechnungen der laminaren Flammgeschwindigkeit	36
Tabelle 11: Ergebnis der Mechanismen-Recherche. Für die Parametervariation in der vorliegenden Arbeit ausgewählte Mechanismen sind hervorgehoben.	39
Tabelle 12: Steigung k, Ordinatenabschnitt d und Bestimmtheitsmaß R^2 der Regressionsgeraden für $\tau(\lambda)$ bei 100bar, 800K und 5% Propangehalt	43
Tabelle 13: Steigung k, Ordinatenabschnitt d und Bestimmtheitsmaß R^2 der Regressionsgeraden für $\tau(\lambda)$ bei 100bar, 850K und 20% Propangehalt	43
Tabelle 14: Verhältnis der Zündverzugszeiten bei 140bar zu jenen bei 70bar für Propangehalte $X_{C_3H_8}$ von 5%, 10% und 100% sowie Extremwerte der Zündverzugszeiten bei einer Temperatur von 700K. $\lambda=1,9$ für alle Werte.....	45
Tabelle 15: Verhältnis der Zündverzugszeiten bei 140bar zu jenen bei 70bar für Propangehalte $X_{C_3H_8}$ von 0%, 10% und 100% sowie Extremwerte der Zündverzugszeiten bei einer Temperatur von 800K. $\lambda=1,9$ für alle Werte.....	47
Tabelle 16: Verhältnis der Zündverzugszeiten bei 140bar zu jenen bei 70bar für Propangehalte $X_{C_3H_8}$ von 0%, 10% und 100% sowie Extremwerte der Zündverzugszeiten bei einer Temperatur von 900K. $\lambda=1,9$ für alle Werte.....	49
Tabelle 17: Verhältnis der Zündverzugszeiten bei 140bar zu jenen bei 70bar für Propangehalte $X_{C_3H_8}$ von 0%, 10% und 100% sowie Extremwerte der Zündverzugszeiten bei einer Temperatur von 1000K. $\lambda=1,9$ für alle Werte.....	51
Tabelle 18: Verhältnis der Zündverzugszeiten von reinem Propan zu jenen von reinem Methan für Temperaturen von 800K, 900K und 1000K, sowie Extremwerte bei 70bar. $\lambda=1,9$ für alle Werte.....	53
Tabelle 19: Verhältnis der Zündverzugszeiten von reinem Propan zu jenen von reinem Methan für Temperaturen von 800K, 900K und 1000K, sowie Extremwerte bei 140bar. $\lambda=1,9$ für alle Werte.....	55
Tabelle 20: relative Veränderung der Zündverzugszeiten $\Delta_{rel\tau}$ nach Gleichung (4.1) bei 70bar für Brenngase mit 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100% Propangehalt sowie die dazugehörige Bezugstemperatur T_1 . $\lambda=1,9$ für alle Werte, negative Werte sind fett gedruckt.	58
Tabelle 21: relative Veränderung der Zündverzugszeiten $\Delta_{rel\tau}$ nach Gleichung (4.1) bei 140bar für Brenngase mit 0%, 5%, 10%, 20%, 50% und 100% Propangehalt sowie die dazugehörige Bezugstemperatur T_1 . $\lambda=1,9$ für alle Werte, negative Werte sind fett gedruckt.	60

11 Anhang

11.1 Vorversuch Zündverzugszeit τ [s]

Run	p [bar]	T [K]	λ [-]	$X_{C_3H_8}$	X_{CH_4}	POLIMI	SAN DIEGO	GRI-Mech	NUIG	USC-II	NUIG
						C1C3	+NOX	3.0	NGM2	USC-II	NGM3
1	80	700	1,5	0	1	5,00E+00	5,00E+00	3,87E-07	1,05E-09	5,00E+00	5,00E+00
2	80	700	1,5	0,1	0,9	5,00E+00	7,98E-02	3,87E-07	1,05E-09	5,00E+00	2,49E-01
3	80	700	1,5	0,3	0,7	5,00E+00	1,98E-02	3,87E-07	1,05E-09	5,00E+00	7,93E-02
4	80	700	1,7	0	1	5,00E+00	5,00E+00	3,87E-07	1,05E-09	5,00E+00	5,00E+00
5	80	700	1,7	0,1	0,9	5,00E+00	9,56E-02	3,87E-07	1,05E-09	5,00E+00	2,74E-01
6	80	700	1,7	0,3	0,7	5,00E+00	2,07E-02	3,87E-07	1,05E-09	5,00E+00	8,41E-02
7	80	700	1,9	0	1	5,00E+00	5,00E+00	3,87E-07	1,05E-09	5,00E+00	5,00E+00
8	80	700	1,9	0,1	0,9	5,00E+00	1,14E-01	3,87E-07	1,05E-09	5,00E+00	3,00E-01
9	80	700	1,9	0,3	0,7	5,00E+00	2,18E-02	3,87E-07	1,05E-09	5,00E+00	8,93E-02
10	80	800	1,5	0	1	6,35E-01	4,26E-01	1,44E+00	1,31E+00	3,71E-01	2,96E-01
11	80	800	1,5	0,1	0,9	2,16E-01	2,28E-02	1,28E+00	1,40E+00	2,60E-01	4,45E-02
12	80	800	1,5	0,3	0,7	1,61E-01	6,01E-03	1,18E+00	1,15E+00	1,99E-01	1,24E-02
13	80	800	1,7	0	1	6,82E-01	4,54E-01	1,45E+00	1,34E+00	3,74E-01	3,23E-01
14	80	800	1,7	0,1	0,9	2,33E-01	2,54E-02	1,27E+00	1,42E+00	2,71E-01	4,97E-02
15	80	800	1,7	0,3	0,7	1,73E-01	6,62E-03	1,18E+00	1,17E+00	2,11E-01	1,39E-02
16	80	800	1,9	0	1	7,27E-01	4,81E-01	1,46E+00	1,36E+00	3,78E-01	3,49E-01
17	80	800	1,9	0,1	0,9	2,49E-01	2,81E-02	1,27E+00	1,44E+00	2,81E-01	5,49E-02
18	80	800	1,9	0,3	0,7	1,85E-01	7,29E-03	1,18E+00	1,20E+00	2,22E-01	1,54E-02
19	80	900	1,5	0	1	4,46E-02	2,87E-02	8,74E-02	1,34E-01	4,41E-02	2,66E-02
20	80	900	1,5	0,1	0,9	1,53E-02	1,14E-02	8,08E-02	7,43E-02	2,39E-02	1,12E-02
21	80	900	1,5	0,3	0,7	1,05E-02	7,42E-03	7,68E-02	5,22E-02	1,56E-02	6,31E-03
22	80	900	1,7	0	1	4,78E-02	3,01E-02	8,75E-02	1,36E-01	4,43E-02	2,89E-02
23	80	900	1,7	0,1	0,9	1,65E-02	1,22E-02	8,03E-02	7,65E-02	2,51E-02	1,22E-02
24	80	900	1,7	0,3	0,7	1,13E-02	7,94E-03	7,62E-02	5,39E-02	1,66E-02	6,96E-03
25	80	900	1,9	0	1	5,07E-02	3,15E-02	8,78E-02	1,38E-01	4,46E-02	3,11E-02
26	80	900	1,9	0,1	0,9	1,76E-02	1,29E-02	8,00E-02	7,85E-02	2,63E-02	1,32E-02
27	80	900	1,9	0,3	0,7	1,21E-02	8,44E-03	7,57E-02	5,54E-02	1,77E-02	7,57E-03
28	120	700	1,5	0	1	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	1,05E-09	5,00E+00	5,00E+00
29	120	700	1,5	0,1	0,9	5,00E+00	5,78E-02	5,00E+00	1,05E-09	5,00E+00	1,98E-01
30	120	700	1,5	0,3	0,7	4,67E+00	1,57E-02	3,90E-08	3,90E-09	5,00E+00	6,90E-02
31	120	700	1,7	0	1	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	1,05E-09	5,00E+00	5,00E+00
32	120	700	1,7	0,1	0,9	5,00E+00	6,89E-02	5,00E+00	1,05E-09	5,00E+00	2,15E-01
33	120	700	1,7	0,3	0,7	5,00E+00	1,65E-02	3,90E-08	3,90E-09	5,00E+00	7,31E-02
34	120	700	1,9	0	1	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	1,05E-09	5,00E+00	4,83E+00
35	120	700	1,9	0,1	0,9	5,00E+00	8,23E-02	5,00E+00	1,05E-09	5,00E+00	2,33E-01
36	120	700	1,9	0,3	0,7	5,00E+00	1,72E-02	3,90E-08	3,90E-09	5,00E+00	7,71E-02
37	120	800	1,5	0	1	4,71E-01	3,22E-01	1,04E+00	9,51E-01	2,72E-01	2,20E-01
38	120	800	1,5	0,1	0,9	1,62E-01	1,26E-02	9,00E-01	1,20E+00	1,97E-01	2,56E-02
39	120	800	1,5	0,3	0,7	1,22E-01	3,04E-03	8,16E-01	1,00E+00	1,53E-01	6,94E-03
40	120	800	1,7	0	1	5,07E-01	3,44E-01	1,05E+00	9,73E-01	2,75E-01	2,41E-01
41	120	800	1,7	0,1	0,9	1,75E-01	1,42E-02	9,02E-01	1,21E+00	2,06E-01	2,87E-02
42	120	800	1,7	0,3	0,7	1,32E-01	3,33E-03	8,19E-01	1,02E+00	1,62E-01	7,69E-03
43	120	800	1,9	0	1	5,41E-01	3,65E-01	1,06E+00	9,95E-01	2,79E-01	2,60E-01
44	120	800	1,9	0,1	0,9	1,88E-01	1,59E-02	9,04E-01	1,22E+00	2,13E-01	3,18E-02
45	120	800	1,9	0,3	0,7	1,41E-01	3,65E-03	8,22E-01	1,04E+00	1,70E-01	8,46E-03
46	120	900	1,5	0	1	3,22E-02	2,11E-02	6,20E-02	9,37E-02	3,14E-02	1,90E-02
47	120	900	1,5	0,1	0,9	1,14E-02	6,14E-03	5,66E-02	5,93E-02	1,76E-02	6,91E-03
48	120	900	1,5	0,3	0,7	7,92E-03	3,40E-03	5,31E-02	4,34E-02	1,17E-02	3,41E-03
49	120	900	1,7	0	1	3,45E-02	2,22E-02	6,22E-02	9,53E-02	3,16E-02	2,06E-02
50	120	900	1,7	0,1	0,9	1,23E-02	6,54E-03	5,63E-02	6,08E-02	1,85E-02	7,58E-03
51	120	900	1,7	0,3	0,7	8,53E-03	3,64E-03	5,28E-02	4,47E-02	1,25E-02	3,79E-03
52	120	900	1,9	0	1	3,67E-02	2,33E-02	6,25E-02	9,70E-02	3,18E-02	2,22E-02
53	120	900	1,9	0,1	0,9	1,31E-02	6,93E-03	5,63E-02	6,22E-02	1,93E-02	8,24E-03
54	120	900	1,9	0,3	0,7	9,11E-03	3,88E-03	5,26E-02	4,59E-02	1,32E-02	4,16E-03

11.2 Parametervariation Zündverzugszeit τ [s]

Run	p [bar]	T [K]	X _{C3H8}	X _{CH4}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
1	70	700	0	1	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
2	70	700	0,01	0,99	1,05E-11	4,42E-02	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
3	70	700	0,02	0,98	3,41E+00	3,00E+00	5,00E+00	4,81E+00	4,81E+00
4	70	700	0,03	0,97	2,09E+00	1,69E+00	5,00E+00	3,10E+00	3,10E+00
5	70	700	0,05	0,95	9,79E-01	6,50E-01	5,00E+00	1,62E+00	1,62E+00
6	70	700	0,1	0,9	3,30E-01	1,29E-01	5,00E+00	6,29E-01	6,28E-01
7	70	700	0,15	0,85	1,89E-01	5,57E-02	5,00E+00	3,82E-01	3,81E-01
8	70	700	0,2	0,8	1,36E-01	3,60E-02	5,00E+00	2,82E-01	2,82E-01
9	70	700	0,3	0,7	9,44E-02	2,38E-02	5,00E+00	1,99E-01	1,99E-01
10	70	700	0,5	0,5	6,79E-02	1,76E-02	5,00E+00	1,46E-01	1,46E-01
11	70	700	0,75	0,25	5,65E-02	1,52E-02	5,00E+00	1,24E-01	1,24E-01
12	70	700	1	0	5,11E-02	1,43E-02	5,00E+00	1,15E-01	1,15E-01
13	70	725	0	1	4,47E+00	5,00E+00	3,76E+00	5,00E+00	5,00E+00
14	70	725	0,01	0,99	2,61E+00	2,36E+00	3,92E+00	3,81E+00	3,81E+00
15	70	725	0,02	0,98	1,63E+00	1,24E+00	3,93E+00	2,25E+00	2,25E+00
16	70	725	0,03	0,97	1,07E+00	7,47E-01	3,90E+00	1,51E+00	1,51E+00
17	70	725	0,05	0,95	5,44E-01	3,27E-01	3,81E+00	8,29E-01	8,28E-01
18	70	725	0,1	0,9	1,90E-01	8,09E-02	3,60E+00	3,23E-01	3,22E-01
19	70	725	0,15	0,85	1,06E-01	3,64E-02	3,44E+00	1,90E-01	1,90E-01
20	70	725	0,2	0,8	7,35E-02	2,28E-02	3,32E+00	1,37E-01	1,36E-01
21	70	725	0,3	0,7	4,84E-02	1,41E-02	3,15E+00	9,34E-02	9,32E-02
22	70	725	0,5	0,5	3,31E-02	9,82E-03	2,97E+00	6,63E-02	6,62E-02
23	70	725	0,75	0,25	2,65E-02	8,35E-03	2,89E+00	5,55E-02	5,54E-02
24	70	725	1	0	2,37E-02	7,77E-03	2,88E+00	5,09E-02	5,09E-02
25	70	750	0	1	1,84E+00	2,96E+00	1,68E+00	3,85E+00	3,84E+00
26	70	750	0,01	0,99	1,19E+00	1,00E+00	1,70E+00	1,73E+00	1,73E+00
27	70	750	0,02	0,98	8,13E-01	5,69E-01	1,67E+00	1,10E+00	1,09E+00
28	70	750	0,03	0,97	5,79E-01	3,66E-01	1,64E+00	7,74E-01	7,74E-01
29	70	750	0,05	0,95	3,27E-01	1,83E-01	1,58E+00	4,54E-01	4,53E-01
30	70	750	0,1	0,9	1,24E-01	5,68E-02	1,46E+00	1,88E-01	1,87E-01
31	70	750	0,15	0,85	6,94E-02	2,77E-02	1,38E+00	1,10E-01	1,09E-01
32	70	750	0,2	0,8	4,73E-02	1,75E-02	1,32E+00	7,72E-02	7,70E-02
33	70	750	0,3	0,7	2,97E-02	1,04E-02	1,24E+00	5,08E-02	5,07E-02
34	70	750	0,5	0,5	1,91E-02	6,74E-03	1,16E+00	3,46E-02	3,45E-02
35	70	750	0,75	0,25	1,49E-02	5,53E-03	1,12E+00	2,82E-02	2,81E-02
36	70	750	1	0	1,30E-02	5,07E-03	1,12E+00	2,54E-02	2,54E-02
37	70	775	0	1	8,16E-01	1,21E+00	8,11E-01	1,64E+00	1,64E+00
38	70	775	0,01	0,99	5,71E-01	4,64E-01	7,96E-01	8,24E-01	8,23E-01
39	70	775	0,02	0,98	4,21E-01	2,85E-01	7,74E-01	5,52E-01	5,52E-01
40	70	775	0,03	0,97	3,22E-01	1,97E-01	7,53E-01	4,09E-01	4,08E-01
41	70	775	0,05	0,95	2,04E-01	1,11E-01	7,15E-01	2,58E-01	2,58E-01
42	70	775	0,1	0,9	8,94E-02	4,31E-02	6,47E-01	1,20E-01	1,19E-01
43	70	775	0,15	0,85	5,23E-02	2,35E-02	6,02E-01	7,23E-02	7,20E-02
44	70	775	0,2	0,8	3,61E-02	1,55E-02	5,70E-01	5,09E-02	5,07E-02
45	70	775	0,3	0,7	2,23E-02	9,24E-03	5,29E-01	3,27E-02	3,26E-02
46	70	775	0,5	0,5	1,37E-02	5,73E-03	4,89E-01	2,12E-02	2,12E-02
47	70	775	0,75	0,25	1,02E-02	4,51E-03	4,70E-01	1,67E-02	1,67E-02
48	70	775	1	0	8,73E-03	4,03E-03	4,67E-01	1,48E-02	1,47E-02
49	70	800	0	1	3,86E-01	5,27E-01	4,18E-01	7,45E-01	7,45E-01
50	70	800	0,01	0,99	2,88E-01	2,33E-01	4,01E-01	4,10E-01	4,10E-01
51	70	800	0,02	0,98	2,26E-01	1,55E-01	3,85E-01	2,89E-01	2,89E-01
52	70	800	0,03	0,97	1,83E-01	1,14E-01	3,71E-01	2,23E-01	2,23E-01
53	70	800	0,05	0,95	1,28E-01	7,23E-02	3,48E-01	1,50E-01	1,50E-01
54	70	800	0,1	0,9	6,64E-02	3,41E-02	3,07E-01	7,86E-02	7,85E-02
55	70	800	0,15	0,85	4,22E-02	2,09E-02	2,82E-01	5,11E-02	5,09E-02
56	70	800	0,2	0,8	3,04E-02	1,48E-02	2,65E-01	3,73E-02	3,71E-02
57	70	800	0,3	0,7	1,94E-02	9,32E-03	2,42E-01	2,44E-02	2,43E-02
58	70	800	0,5	0,5	1,18E-02	5,84E-03	2,20E-01	1,55E-02	1,54E-02
59	70	800	0,75	0,25	8,61E-03	4,50E-03	2,10E-01	1,19E-02	1,18E-02
60	70	800	1	0	7,19E-03	3,95E-03	2,07E-01	1,03E-02	1,02E-02
61	70	825	0	1	1,94E-01	2,45E-01	2,29E-01	3,60E-01	3,60E-01
62	70	825	0,01	0,99	1,53E-01	1,26E-01	2,16E-01	2,14E-01	2,14E-01

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
63	70	825	0,02	0,98	1,26E-01	9,02E-02	2,05E-01	1,57E-01	1,57E-01
64	70	825	0,03	0,97	1,06E-01	7,06E-02	1,96E-01	1,25E-01	1,25E-01
65	70	825	0,05	0,95	8,02E-02	4,91E-02	1,81E-01	8,91E-02	8,90E-02
66	70	825	0,1	0,9	4,82E-02	2,74E-02	1,56E-01	5,15E-02	5,15E-02
67	70	825	0,15	0,85	3,39E-02	1,88E-02	1,41E-01	3,60E-02	3,59E-02
68	70	825	0,2	0,8	2,60E-02	1,43E-02	1,31E-01	2,77E-02	2,76E-02
69	70	825	0,3	0,7	1,79E-02	9,87E-03	1,18E-01	1,92E-02	1,91E-02
70	70	825	0,5	0,5	1,15E-02	6,59E-03	1,06E-01	1,27E-02	1,26E-02
71	70	825	0,75	0,25	8,49E-03	5,18E-03	9,95E-02	9,71E-03	9,67E-03
72	70	825	1	0	7,07E-03	4,56E-03	9,79E-02	8,36E-03	8,33E-03
73	70	850	0	1	1,04E-01	1,21E-01	1,32E-01	1,84E-01	1,84E-01
74	70	850	0,01	0,99	8,54E-02	7,28E-02	1,23E-01	1,16E-01	1,16E-01
75	70	850	0,02	0,98	7,26E-02	5,60E-02	1,15E-01	8,79E-02	8,79E-02
76	70	850	0,03	0,97	6,32E-02	4,62E-02	1,09E-01	7,18E-02	7,18E-02
77	70	850	0,05	0,95	5,04E-02	3,49E-02	9,99E-02	5,33E-02	5,32E-02
78	70	850	0,1	0,9	3,37E-02	2,24E-02	8,46E-02	3,32E-02	3,32E-02
79	70	850	0,15	0,85	2,56E-02	1,68E-02	7,54E-02	2,46E-02	2,45E-02
80	70	850	0,2	0,8	2,09E-02	1,37E-02	6,92E-02	1,97E-02	1,97E-02
81	70	850	0,3	0,7	1,56E-02	1,04E-02	6,14E-02	1,46E-02	1,45E-02
82	70	850	0,5	0,5	1,10E-02	7,65E-03	5,38E-02	1,03E-02	1,02E-02
83	70	850	0,75	0,25	8,58E-03	6,31E-03	5,00E-02	8,16E-03	8,14E-03
84	70	850	1	0	7,35E-03	5,67E-03	4,89E-02	7,16E-03	7,14E-03
85	70	875	0	1	5,87E-02	6,31E-02	7,94E-02	9,85E-02	9,85E-02
86	70	875	0,01	0,99	4,97E-02	4,47E-02	7,33E-02	6,49E-02	6,48E-02
87	70	875	0,02	0,98	4,33E-02	3,70E-02	6,85E-02	5,04E-02	5,04E-02
88	70	875	0,03	0,97	3,86E-02	3,22E-02	6,45E-02	4,19E-02	4,19E-02
89	70	875	0,05	0,95	3,19E-02	2,62E-02	5,83E-02	3,20E-02	3,20E-02
90	70	875	0,1	0,9	2,29E-02	1,90E-02	4,84E-02	2,11E-02	2,10E-02
91	70	875	0,15	0,85	1,84E-02	1,55E-02	4,25E-02	1,62E-02	1,61E-02
92	70	875	0,2	0,8	1,56E-02	1,34E-02	3,86E-02	1,34E-02	1,34E-02
93	70	875	0,3	0,7	1,24E-02	1,11E-02	3,37E-02	1,03E-02	1,03E-02
94	70	875	0,5	0,5	9,39E-03	8,91E-03	2,89E-02	7,72E-03	7,70E-03
95	70	875	0,75	0,25	7,72E-03	7,74E-03	2,65E-02	6,38E-03	6,37E-03
96	70	875	1	0	6,83E-03	7,14E-03	2,57E-02	5,73E-03	5,72E-03
97	70	900	0	1	3,48E-02	3,49E-02	4,99E-02	5,49E-02	5,49E-02
98	70	900	0,01	0,99	3,01E-02	2,81E-02	4,58E-02	3,73E-02	3,73E-02
99	70	900	0,02	0,98	2,67E-02	2,48E-02	4,25E-02	2,95E-02	2,95E-02
100	70	900	0,03	0,97	2,41E-02	2,25E-02	3,99E-02	2,48E-02	2,48E-02
101	70	900	0,05	0,95	2,04E-02	1,95E-02	3,57E-02	1,93E-02	1,93E-02
102	70	900	0,1	0,9	1,54E-02	1,55E-02	2,91E-02	1,32E-02	1,32E-02
103	70	900	0,15	0,85	1,27E-02	1,35E-02	2,52E-02	1,04E-02	1,04E-02
104	70	900	0,2	0,8	1,11E-02	1,22E-02	2,26E-02	8,77E-03	8,75E-03
105	70	900	0,3	0,7	9,10E-03	1,06E-02	1,94E-02	6,97E-03	6,96E-03
106	70	900	0,5	0,5	7,24E-03	9,02E-03	1,63E-02	5,40E-03	5,39E-03
107	70	900	0,75	0,25	6,16E-03	8,12E-03	1,47E-02	4,59E-03	4,58E-03
108	70	900	1	0	5,57E-03	7,63E-03	1,42E-02	4,19E-03	4,18E-03
109	70	925	0	1	2,14E-02	2,03E-02	3,25E-02	3,16E-02	3,16E-02
110	70	925	0,01	0,99	1,88E-02	1,77E-02	2,97E-02	2,20E-02	2,20E-02
111	70	925	0,02	0,98	1,69E-02	1,61E-02	2,75E-02	1,76E-02	1,76E-02
112	70	925	0,03	0,97	1,54E-02	1,50E-02	2,57E-02	1,49E-02	1,49E-02
113	70	925	0,05	0,95	1,33E-02	1,34E-02	2,28E-02	1,18E-02	1,18E-02
114	70	925	0,1	0,9	1,02E-02	1,12E-02	1,83E-02	8,22E-03	8,21E-03
115	70	925	0,15	0,85	8,63E-03	9,94E-03	1,57E-02	6,58E-03	6,57E-03
116	70	925	0,2	0,8	7,62E-03	9,13E-03	1,39E-02	5,63E-03	5,62E-03
117	70	925	0,3	0,7	6,41E-03	8,12E-03	1,18E-02	4,56E-03	4,55E-03
118	70	925	0,5	0,5	5,23E-03	7,11E-03	9,68E-03	3,61E-03	3,60E-03
119	70	925	0,75	0,25	4,55E-03	6,51E-03	8,59E-03	3,11E-03	3,10E-03
120	70	925	1	0	4,16E-03	6,18E-03	8,16E-03	2,87E-03	2,86E-03
121	70	950	0	1	1,37E-02	1,24E-02	2,18E-02	1,88E-02	1,88E-02
122	70	950	0,01	0,99	1,21E-02	1,12E-02	1,99E-02	1,33E-02	1,33E-02
123	70	950	0,02	0,98	1,10E-02	1,04E-02	1,84E-02	1,07E-02	1,07E-02
124	70	950	0,03	0,97	1,01E-02	9,81E-03	1,71E-02	9,15E-03	9,15E-03
125	70	950	0,05	0,95	8,74E-03	8,91E-03	1,51E-02	7,30E-03	7,29E-03
126	70	950	0,1	0,9	6,85E-03	7,56E-03	1,20E-02	5,16E-03	5,16E-03

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
127	70	950	0,15	0,85	5,83E-03	6,79E-03	1,01E-02	4,18E-03	4,17E-03
128	70	950	0,2	0,8	5,18E-03	6,28E-03	8,92E-03	3,60E-03	3,59E-03
129	70	950	0,3	0,7	4,40E-03	5,64E-03	7,43E-03	2,94E-03	2,94E-03
130	70	950	0,5	0,5	3,65E-03	5,00E-03	5,99E-03	2,36E-03	2,35E-03
131	70	950	0,75	0,25	3,20E-03	4,61E-03	5,22E-03	2,05E-03	2,04E-03
132	70	950	1	0	2,96E-03	4,40E-03	4,91E-03	1,89E-03	1,89E-03
133	70	975	0	1	9,06E-03	7,91E-03	1,50E-02	1,15E-02	1,15E-02
134	70	975	0,01	0,99	8,06E-03	7,30E-03	1,37E-02	8,21E-03	8,21E-03
135	70	975	0,02	0,98	7,32E-03	6,82E-03	1,26E-02	6,67E-03	6,67E-03
136	70	975	0,03	0,97	6,74E-03	6,45E-03	1,17E-02	5,73E-03	5,72E-03
137	70	975	0,05	0,95	5,88E-03	5,89E-03	1,03E-02	4,59E-03	4,59E-03
138	70	975	0,1	0,9	4,63E-03	5,03E-03	8,10E-03	3,28E-03	3,28E-03
139	70	975	0,15	0,85	3,95E-03	4,53E-03	6,79E-03	2,67E-03	2,67E-03
140	70	975	0,2	0,8	3,52E-03	4,20E-03	5,93E-03	2,31E-03	2,31E-03
141	70	975	0,3	0,7	3,00E-03	3,78E-03	4,87E-03	1,90E-03	1,90E-03
142	70	975	0,5	0,5	2,50E-03	3,35E-03	3,85E-03	1,53E-03	1,53E-03
143	70	975	0,75	0,25	2,20E-03	3,10E-03	3,30E-03	1,33E-03	1,33E-03
144	70	975	1	0	2,04E-03	2,97E-03	3,06E-03	1,23E-03	1,23E-03
145	70	1000	0	1	6,20E-03	5,25E-03	1,05E-02	7,17E-03	7,17E-03
146	70	1000	0,01	0,99	5,54E-03	4,87E-03	9,58E-03	5,20E-03	5,20E-03
147	70	1000	0,02	0,98	5,03E-03	4,56E-03	8,82E-03	4,25E-03	4,25E-03
148	70	1000	0,03	0,97	4,64E-03	4,31E-03	8,20E-03	3,66E-03	3,66E-03
149	70	1000	0,05	0,95	4,05E-03	3,94E-03	7,21E-03	2,95E-03	2,95E-03
150	70	1000	0,1	0,9	3,18E-03	3,36E-03	5,63E-03	2,13E-03	2,12E-03
151	70	1000	0,15	0,85	2,71E-03	3,02E-03	4,69E-03	1,74E-03	1,74E-03
152	70	1000	0,2	0,8	2,41E-03	2,80E-03	4,07E-03	1,51E-03	1,51E-03
153	70	1000	0,3	0,7	2,05E-03	2,51E-03	3,31E-03	1,25E-03	1,24E-03
154	70	1000	0,5	0,5	1,70E-03	2,22E-03	2,56E-03	1,01E-03	1,00E-03
155	70	1000	0,75	0,25	1,50E-03	2,05E-03	2,16E-03	8,76E-04	8,74E-04
156	70	1000	1	0	1,39E-03	1,96E-03	1,98E-03	8,09E-04	8,08E-04
157	80	700	0	1	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
158	80	700	0,01	0,99	1,05E-11	4,29E-02	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
159	80	700	0,02	0,98	3,04E+00	2,75E+00	5,00E+00	4,27E+00	4,27E+00
160	80	700	0,03	0,97	1,86E+00	1,53E+00	5,00E+00	2,75E+00	2,75E+00
161	80	700	0,05	0,95	8,74E-01	5,84E-01	5,00E+00	1,45E+00	1,45E+00
162	80	700	0,1	0,9	3,00E-01	1,14E-01	5,00E+00	5,76E-01	5,76E-01
163	80	700	0,15	0,85	1,74E-01	4,97E-02	5,00E+00	3,55E-01	3,55E-01
164	80	700	0,2	0,8	1,27E-01	3,25E-02	5,00E+00	2,65E-01	2,64E-01
165	80	700	0,3	0,7	8,93E-02	2,18E-02	5,00E+00	1,89E-01	1,88E-01
166	80	700	0,5	0,5	6,48E-02	1,61E-02	5,00E+00	1,39E-01	1,39E-01
167	80	700	0,75	0,25	5,41E-02	1,40E-02	5,00E+00	1,19E-01	1,19E-01
168	80	700	1	0	4,90E-02	1,31E-02	5,00E+00	1,11E-01	1,11E-01
169	80	725	0	1	4,08E+00	5,00E+00	3,43E+00	5,00E+00	5,00E+00
170	80	725	0,01	0,99	2,34E+00	2,16E+00	3,58E+00	3,40E+00	3,40E+00
171	80	725	0,02	0,98	1,44E+00	1,13E+00	3,60E+00	1,99E+00	1,99E+00
172	80	725	0,03	0,97	9,43E-01	6,72E-01	3,58E+00	1,34E+00	1,33E+00
173	80	725	0,05	0,95	4,76E-01	2,90E-01	3,50E+00	7,31E-01	7,30E-01
174	80	725	0,1	0,9	1,67E-01	6,97E-02	3,31E+00	2,89E-01	2,89E-01
175	80	725	0,15	0,85	9,38E-02	3,13E-02	3,16E+00	1,73E-01	1,73E-01
176	80	725	0,2	0,8	6,59E-02	1,98E-02	3,05E+00	1,26E-01	1,25E-01
177	80	725	0,3	0,7	4,40E-02	1,24E-02	2,90E+00	8,68E-02	8,67E-02
178	80	725	0,5	0,5	3,05E-02	8,75E-03	2,74E+00	6,23E-02	6,22E-02
179	80	725	0,75	0,25	2,48E-02	7,47E-03	2,65E+00	5,25E-02	5,24E-02
180	80	725	1	0	2,23E-02	6,96E-03	2,64E+00	4,83E-02	4,83E-02
181	80	750	0	1	1,68E+00	2,71E+00	1,53E+00	3,48E+00	3,48E+00
182	80	750	0,01	0,99	1,07E+00	9,10E-01	1,55E+00	1,55E+00	1,55E+00
183	80	750	0,02	0,98	7,20E-01	5,11E-01	1,53E+00	9,70E-01	9,69E-01
184	80	750	0,03	0,97	5,07E-01	3,26E-01	1,50E+00	6,81E-01	6,80E-01
185	80	750	0,05	0,95	2,82E-01	1,60E-01	1,45E+00	3,96E-01	3,95E-01
186	80	750	0,1	0,9	1,06E-01	4,79E-02	1,34E+00	1,64E-01	1,64E-01
187	80	750	0,15	0,85	5,95E-02	2,31E-02	1,27E+00	9,67E-02	9,65E-02
188	80	750	0,2	0,8	4,09E-02	1,46E-02	1,22E+00	6,88E-02	6,87E-02
189	80	750	0,3	0,7	2,60E-02	8,74E-03	1,14E+00	4,60E-02	4,59E-02
190	80	750	0,5	0,5	1,70E-02	5,77E-03	1,07E+00	3,17E-02	3,17E-02

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
191	80	750	0,75	0,25	1,34E-02	4,77E-03	1,03E+00	2,61E-02	2,61E-02
192	80	750	1	0	1,18E-02	4,39E-03	1,03E+00	2,37E-02	2,37E-02
193	80	775	0	1	7,41E-01	1,10E+00	7,35E-01	1,48E+00	1,48E+00
194	80	775	0,01	0,99	5,11E-01	4,19E-01	7,23E-01	7,35E-01	7,35E-01
195	80	775	0,02	0,98	3,73E-01	2,54E-01	7,05E-01	4,89E-01	4,89E-01
196	80	775	0,03	0,97	2,82E-01	1,73E-01	6,86E-01	3,60E-01	3,59E-01
197	80	775	0,05	0,95	1,75E-01	9,60E-02	6,53E-01	2,25E-01	2,25E-01
198	80	775	0,1	0,9	7,46E-02	3,57E-02	5,92E-01	1,02E-01	1,02E-01
199	80	775	0,15	0,85	4,33E-02	1,91E-02	5,52E-01	6,19E-02	6,17E-02
200	80	775	0,2	0,8	2,98E-02	1,25E-02	5,23E-01	4,38E-02	4,37E-02
201	80	775	0,3	0,7	1,85E-02	7,44E-03	4,86E-01	2,85E-02	2,84E-02
202	80	775	0,5	0,5	1,15E-02	4,66E-03	4,49E-01	1,88E-02	1,87E-02
203	80	775	0,75	0,25	8,74E-03	3,71E-03	4,31E-01	1,50E-02	1,49E-02
204	80	775	1	0	7,51E-03	3,33E-03	4,28E-01	1,33E-02	1,33E-02
205	80	800	0	1	3,49E-01	4,81E-01	3,78E-01	6,72E-01	6,72E-01
206	80	800	0,01	0,99	2,58E-01	2,09E-01	3,64E-01	3,66E-01	3,66E-01
207	80	800	0,02	0,98	2,00E-01	1,37E-01	3,50E-01	2,56E-01	2,56E-01
208	80	800	0,03	0,97	1,60E-01	9,97E-02	3,37E-01	1,96E-01	1,96E-01
209	80	800	0,05	0,95	1,10E-01	6,18E-02	3,17E-01	1,31E-01	1,31E-01
210	80	800	0,1	0,9	5,49E-02	2,81E-02	2,81E-01	6,72E-02	6,71E-02
211	80	800	0,15	0,85	3,43E-02	1,68E-02	2,58E-01	4,32E-02	4,30E-02
212	80	800	0,2	0,8	2,43E-02	1,17E-02	2,42E-01	3,14E-02	3,13E-02
213	80	800	0,3	0,7	1,54E-02	7,29E-03	2,22E-01	2,05E-02	2,04E-02
214	80	800	0,5	0,5	9,37E-03	4,54E-03	2,02E-01	1,32E-02	1,31E-02
215	80	800	0,75	0,25	6,88E-03	3,51E-03	1,92E-01	1,02E-02	1,01E-02
216	80	800	1	0	5,78E-03	3,10E-03	1,90E-01	8,87E-03	8,84E-03
217	80	825	0	1	1,75E-01	2,23E-01	2,06E-01	3,24E-01	3,24E-01
218	80	825	0,01	0,99	1,37E-01	1,12E-01	1,95E-01	1,91E-01	1,91E-01
219	80	825	0,02	0,98	1,11E-01	7,91E-02	1,85E-01	1,39E-01	1,39E-01
220	80	825	0,03	0,97	9,30E-02	6,12E-02	1,77E-01	1,10E-01	1,10E-01
221	80	825	0,05	0,95	6,90E-02	4,18E-02	1,64E-01	7,79E-02	7,78E-02
222	80	825	0,1	0,9	4,01E-02	2,25E-02	1,42E-01	4,43E-02	4,42E-02
223	80	825	0,15	0,85	2,75E-02	1,51E-02	1,29E-01	3,06E-02	3,05E-02
224	80	825	0,2	0,8	2,07E-02	1,13E-02	1,20E-01	2,33E-02	2,32E-02
225	80	825	0,3	0,7	1,39E-02	7,61E-03	1,08E-01	1,60E-02	1,59E-02
226	80	825	0,5	0,5	8,75E-03	4,99E-03	9,68E-02	1,05E-02	1,04E-02
227	80	825	0,75	0,25	6,41E-03	3,89E-03	9,12E-02	8,04E-03	8,00E-03
228	80	825	1	0	5,34E-03	3,42E-03	8,97E-02	6,94E-03	6,91E-03
229	80	850	0	1	9,35E-02	1,10E-01	1,18E-01	1,65E-01	1,65E-01
230	80	850	0,01	0,99	7,60E-02	6,42E-02	1,10E-01	1,03E-01	1,03E-01
231	80	850	0,02	0,98	6,41E-02	4,87E-02	1,04E-01	7,81E-02	7,81E-02
232	80	850	0,03	0,97	5,54E-02	3,97E-02	9,88E-02	6,35E-02	6,35E-02
233	80	850	0,05	0,95	4,36E-02	2,94E-02	9,04E-02	4,68E-02	4,68E-02
234	80	850	0,1	0,9	2,84E-02	1,83E-02	7,68E-02	2,88E-02	2,88E-02
235	80	850	0,15	0,85	2,11E-02	1,35E-02	6,86E-02	2,11E-02	2,10E-02
236	80	850	0,2	0,8	1,69E-02	1,08E-02	6,30E-02	1,68E-02	1,68E-02
237	80	850	0,3	0,7	1,23E-02	7,99E-03	5,60E-02	1,23E-02	1,22E-02
238	80	850	0,5	0,5	8,42E-03	5,72E-03	4,92E-02	8,54E-03	8,51E-03
239	80	850	0,75	0,25	6,43E-03	4,65E-03	4,58E-02	6,74E-03	6,71E-03
240	80	850	1	0	5,44E-03	4,16E-03	4,47E-02	5,88E-03	5,86E-03
241	80	875	0	1	5,26E-02	5,72E-02	7,12E-02	8,83E-02	8,83E-02
242	80	875	0,01	0,99	4,42E-02	3,92E-02	6,58E-02	5,80E-02	5,79E-02
243	80	875	0,02	0,98	3,83E-02	3,18E-02	6,16E-02	4,49E-02	4,49E-02
244	80	875	0,03	0,97	3,39E-02	2,73E-02	5,81E-02	3,72E-02	3,72E-02
245	80	875	0,05	0,95	2,77E-02	2,18E-02	5,26E-02	2,83E-02	2,83E-02
246	80	875	0,1	0,9	1,95E-02	1,53E-02	4,38E-02	1,84E-02	1,84E-02
247	80	875	0,15	0,85	1,54E-02	1,22E-02	3,86E-02	1,41E-02	1,40E-02
248	80	875	0,2	0,8	1,29E-02	1,04E-02	3,51E-02	1,16E-02	1,16E-02
249	80	875	0,3	0,7	1,00E-02	8,40E-03	3,07E-02	8,86E-03	8,84E-03
250	80	875	0,5	0,5	7,43E-03	6,60E-03	2,64E-02	6,54E-03	6,53E-03
251	80	875	0,75	0,25	6,00E-03	5,65E-03	2,42E-02	5,37E-03	5,35E-03
252	80	875	1	0	5,24E-03	5,17E-03	2,35E-02	4,79E-03	4,78E-03
253	80	900	0	1	3,11E-02	3,15E-02	4,46E-02	4,92E-02	4,92E-02
254	80	900	0,01	0,99	2,67E-02	2,48E-02	4,10E-02	3,34E-02	3,34E-02

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
255	80	900	0,02	0,98	2,36E-02	2,15E-02	3,81E-02	2,63E-02	2,63E-02
256	80	900	0,03	0,97	2,12E-02	1,93E-02	3,58E-02	2,22E-02	2,21E-02
257	80	900	0,05	0,95	1,78E-02	1,65E-02	3,21E-02	1,72E-02	1,72E-02
258	80	900	0,1	0,9	1,32E-02	1,29E-02	2,63E-02	1,16E-02	1,16E-02
259	80	900	0,15	0,85	1,08E-02	1,10E-02	2,28E-02	9,13E-03	9,12E-03
260	80	900	0,2	0,8	9,32E-03	9,84E-03	2,05E-02	7,68E-03	7,67E-03
261	80	900	0,3	0,7	7,57E-03	8,44E-03	1,77E-02	6,07E-03	6,06E-03
262	80	900	0,5	0,5	5,92E-03	7,10E-03	1,49E-02	4,67E-03	4,66E-03
263	80	900	0,75	0,25	4,97E-03	6,34E-03	1,35E-02	3,94E-03	3,93E-03
264	80	900	1	0	4,45E-03	5,93E-03	1,29E-02	3,59E-03	3,58E-03
265	80	925	0	1	1,91E-02	1,83E-02	2,90E-02	2,84E-02	2,84E-02
266	80	925	0,01	0,99	1,67E-02	1,57E-02	2,65E-02	1,97E-02	1,97E-02
267	80	925	0,02	0,98	1,49E-02	1,42E-02	2,46E-02	1,58E-02	1,58E-02
268	80	925	0,03	0,97	1,36E-02	1,31E-02	2,30E-02	1,34E-02	1,34E-02
269	80	925	0,05	0,95	1,16E-02	1,17E-02	2,04E-02	1,05E-02	1,05E-02
270	80	925	0,1	0,9	8,88E-03	9,60E-03	1,65E-02	7,32E-03	7,31E-03
271	80	925	0,15	0,85	7,43E-03	8,47E-03	1,41E-02	5,84E-03	5,84E-03
272	80	925	0,2	0,8	6,52E-03	7,74E-03	1,26E-02	4,98E-03	4,98E-03
273	80	925	0,3	0,7	5,43E-03	6,85E-03	1,07E-02	4,02E-03	4,01E-03
274	80	925	0,5	0,5	4,39E-03	5,95E-03	8,80E-03	3,17E-03	3,16E-03
275	80	925	0,75	0,25	3,77E-03	5,42E-03	7,82E-03	2,72E-03	2,71E-03
276	80	925	1	0	3,44E-03	5,13E-03	7,44E-03	2,50E-03	2,50E-03
277	80	950	0	1	1,22E-02	1,11E-02	1,94E-02	1,68E-02	1,68E-02
278	80	950	0,01	0,99	1,07E-02	1,00E-02	1,77E-02	1,19E-02	1,19E-02
279	80	950	0,02	0,98	9,68E-03	9,25E-03	1,64E-02	9,62E-03	9,62E-03
280	80	950	0,03	0,97	8,86E-03	8,68E-03	1,53E-02	8,22E-03	8,22E-03
281	80	950	0,05	0,95	7,67E-03	7,84E-03	1,35E-02	6,55E-03	6,54E-03
282	80	950	0,1	0,9	5,98E-03	6,62E-03	1,07E-02	4,62E-03	4,62E-03
283	80	950	0,15	0,85	5,06E-03	5,93E-03	9,11E-03	3,73E-03	3,73E-03
284	80	950	0,2	0,8	4,49E-03	5,47E-03	8,04E-03	3,21E-03	3,20E-03
285	80	950	0,3	0,7	3,79E-03	4,89E-03	6,71E-03	2,62E-03	2,61E-03
286	80	950	0,5	0,5	3,12E-03	4,31E-03	5,43E-03	2,09E-03	2,09E-03
287	80	950	0,75	0,25	2,72E-03	3,97E-03	4,74E-03	1,81E-03	1,81E-03
288	80	950	1	0	2,50E-03	3,78E-03	4,46E-03	1,67E-03	1,67E-03
289	80	975	0	1	8,00E-03	7,10E-03	1,33E-02	1,03E-02	1,03E-02
290	80	975	0,01	0,99	7,12E-03	6,52E-03	1,21E-02	7,39E-03	7,39E-03
291	80	975	0,02	0,98	6,45E-03	6,08E-03	1,12E-02	6,00E-03	6,00E-03
292	80	975	0,03	0,97	5,93E-03	5,74E-03	1,04E-02	5,16E-03	5,15E-03
293	80	975	0,05	0,95	5,17E-03	5,23E-03	9,19E-03	4,13E-03	4,13E-03
294	80	975	0,1	0,9	4,06E-03	4,45E-03	7,24E-03	2,95E-03	2,95E-03
295	80	975	0,15	0,85	3,46E-03	4,00E-03	6,09E-03	2,40E-03	2,40E-03
296	80	975	0,2	0,8	3,07E-03	3,70E-03	5,33E-03	2,07E-03	2,07E-03
297	80	975	0,3	0,7	2,61E-03	3,33E-03	4,39E-03	1,71E-03	1,70E-03
298	80	975	0,5	0,5	2,17E-03	2,95E-03	3,48E-03	1,37E-03	1,37E-03
299	80	975	0,75	0,25	1,90E-03	2,72E-03	2,99E-03	1,19E-03	1,19E-03
300	80	975	1	0	1,76E-03	2,60E-03	2,78E-03	1,10E-03	1,10E-03
301	80	1000	0	1	5,45E-03	4,70E-03	9,33E-03	6,45E-03	6,45E-03
302	80	1000	0,01	0,99	4,86E-03	4,34E-03	8,50E-03	4,69E-03	4,69E-03
303	80	1000	0,02	0,98	4,42E-03	4,07E-03	7,83E-03	3,83E-03	3,83E-03
304	80	1000	0,03	0,97	4,07E-03	3,85E-03	7,28E-03	3,30E-03	3,30E-03
305	80	1000	0,05	0,95	3,55E-03	3,51E-03	6,41E-03	2,66E-03	2,66E-03
306	80	1000	0,1	0,9	2,80E-03	2,99E-03	5,02E-03	1,92E-03	1,91E-03
307	80	1000	0,15	0,85	2,38E-03	2,69E-03	4,19E-03	1,57E-03	1,56E-03
308	80	1000	0,2	0,8	2,12E-03	2,49E-03	3,64E-03	1,36E-03	1,36E-03
309	80	1000	0,3	0,7	1,80E-03	2,23E-03	2,97E-03	1,12E-03	1,12E-03
310	80	1000	0,5	0,5	1,49E-03	1,97E-03	2,31E-03	9,04E-04	9,03E-04
311	80	1000	0,75	0,25	1,31E-03	1,82E-03	1,96E-03	7,86E-04	7,85E-04
312	80	1000	1	0	1,21E-03	1,74E-03	1,80E-03	7,26E-04	7,25E-04
313	90	700	0	1	1,50E-09	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
314	90	700	0,01	0,99	4,97E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
315	90	700	0,02	0,98	2,77E+00	2,54E+00	5,00E+00	3,86E+00	3,85E+00
316	90	700	0,03	0,97	1,68E+00	1,42E+00	5,00E+00	2,49E+00	2,49E+00
317	90	700	0,05	0,95	7,94E-01	5,34E-01	5,00E+00	1,32E+00	1,32E+00
318	90	700	0,1	0,9	2,77E-01	1,03E-01	5,00E+00	5,36E-01	5,35E-01

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
319	90	700	0,15	0,85	1,63E-01	4,52E-02	5,00E+00	3,35E-01	3,34E-01
320	90	700	0,2	0,8	1,20E-01	2,99E-02	5,00E+00	2,51E-01	2,51E-01
321	90	700	0,3	0,7	8,50E-02	2,02E-02	5,00E+00	1,80E-01	1,80E-01
322	90	700	0,5	0,5	6,24E-02	1,51E-02	5,00E+00	1,34E-01	1,34E-01
323	90	700	0,75	0,25	5,22E-02	1,30E-02	5,00E+00	1,15E-01	1,15E-01
324	90	700	1	0	4,74E-02	1,22E-02	5,00E+00	1,07E-01	1,07E-01
325	90	725	0	1	3,76E+00	5,00E+00	3,16E+00	5,00E+00	5,00E+00
326	90	725	0,01	0,99	2,13E+00	1,99E+00	3,31E+00	3,07E+00	3,07E+00
327	90	725	0,02	0,98	1,30E+00	1,04E+00	3,33E+00	1,79E+00	1,79E+00
328	90	725	0,03	0,97	8,45E-01	6,14E-01	3,32E+00	1,20E+00	1,20E+00
329	90	725	0,05	0,95	4,26E-01	2,61E-01	3,25E+00	6,56E-01	6,56E-01
330	90	725	0,1	0,9	1,50E-01	6,15E-02	3,07E+00	2,64E-01	2,63E-01
331	90	725	0,15	0,85	8,55E-02	2,76E-02	2,94E+00	1,60E-01	1,60E-01
332	90	725	0,2	0,8	6,07E-02	1,76E-02	2,84E+00	1,17E-01	1,17E-01
333	90	725	0,3	0,7	4,10E-02	1,12E-02	2,69E+00	8,18E-02	8,17E-02
334	90	725	0,5	0,5	2,87E-02	7,96E-03	2,54E+00	5,92E-02	5,91E-02
335	90	725	0,75	0,25	2,36E-02	6,80E-03	2,46E+00	5,01E-02	5,00E-02
336	90	725	1	0	2,12E-02	6,34E-03	2,44E+00	4,62E-02	4,62E-02
337	90	750	0	1	1,55E+00	2,50E+00	1,41E+00	3,19E+00	3,20E+00
338	90	750	0,01	0,99	9,70E-01	8,37E-01	1,42E+00	1,40E+00	1,40E+00
339	90	750	0,02	0,98	6,47E-01	4,67E-01	1,41E+00	8,71E-01	8,70E-01
340	90	750	0,03	0,97	4,51E-01	2,95E-01	1,39E+00	6,08E-01	6,08E-01
341	90	750	0,05	0,95	2,48E-01	1,42E-01	1,34E+00	3,52E-01	3,51E-01
342	90	750	0,1	0,9	9,30E-02	4,14E-02	1,25E+00	1,46E-01	1,46E-01
343	90	750	0,15	0,85	5,25E-02	1,98E-02	1,18E+00	8,72E-02	8,70E-02
344	90	750	0,2	0,8	3,63E-02	1,25E-02	1,13E+00	6,27E-02	6,25E-02
345	90	750	0,3	0,7	2,34E-02	7,58E-03	1,06E+00	4,23E-02	4,23E-02
346	90	750	0,5	0,5	1,56E-02	5,07E-03	9,91E-01	2,96E-02	2,96E-02
347	90	750	0,75	0,25	1,24E-02	4,22E-03	9,57E-01	2,45E-02	2,45E-02
348	90	750	1	0	1,10E-02	3,89E-03	9,50E-01	2,23E-02	2,23E-02
349	90	775	0	1	6,82E-01	1,02E+00	6,74E-01	1,35E+00	1,35E+00
350	90	775	0,01	0,99	4,64E-01	3,83E-01	6,65E-01	6,66E-01	6,65E-01
351	90	775	0,02	0,98	3,35E-01	2,30E-01	6,49E-01	4,39E-01	4,39E-01
352	90	775	0,03	0,97	2,50E-01	1,55E-01	6,33E-01	3,21E-01	3,21E-01
353	90	775	0,05	0,95	1,53E-01	8,45E-02	6,03E-01	1,99E-01	1,99E-01
354	90	775	0,1	0,9	6,40E-02	3,04E-02	5,48E-01	8,98E-02	8,96E-02
355	90	775	0,15	0,85	3,70E-02	1,60E-02	5,11E-01	5,43E-02	5,42E-02
356	90	775	0,2	0,8	2,55E-02	1,04E-02	4,85E-01	3,87E-02	3,86E-02
357	90	775	0,3	0,7	1,60E-02	6,22E-03	4,51E-01	2,54E-02	2,54E-02
358	90	775	0,5	0,5	1,01E-02	3,94E-03	4,16E-01	1,71E-02	1,70E-02
359	90	775	0,75	0,25	7,73E-03	3,15E-03	3,99E-01	1,37E-02	1,37E-02
360	90	775	1	0	6,69E-03	2,85E-03	3,96E-01	1,23E-02	1,23E-02
361	90	800	0	1	3,20E-01	4,44E-01	3,46E-01	6,14E-01	6,14E-01
362	90	800	0,01	0,99	2,34E-01	1,90E-01	3,34E-01	3,31E-01	3,31E-01
363	90	800	0,02	0,98	1,79E-01	1,23E-01	3,21E-01	2,30E-01	2,30E-01
364	90	800	0,03	0,97	1,42E-01	8,86E-02	3,10E-01	1,75E-01	1,75E-01
365	90	800	0,05	0,95	9,59E-02	5,40E-02	2,92E-01	1,16E-01	1,16E-01
366	90	800	0,1	0,9	4,66E-02	2,37E-02	2,59E-01	5,86E-02	5,85E-02
367	90	800	0,15	0,85	2,87E-02	1,39E-02	2,39E-01	3,73E-02	3,72E-02
368	90	800	0,2	0,8	2,02E-02	9,57E-03	2,24E-01	2,71E-02	2,70E-02
369	90	800	0,3	0,7	1,27E-02	5,91E-03	2,06E-01	1,77E-02	1,77E-02
370	90	800	0,5	0,5	7,79E-03	3,68E-03	1,87E-01	1,15E-02	1,15E-02
371	90	800	0,75	0,25	5,77E-03	2,86E-03	1,78E-01	8,98E-03	8,95E-03
372	90	800	1	0	4,88E-03	2,53E-03	1,76E-01	7,89E-03	7,86E-03
373	90	825	0	1	1,60E-01	2,05E-01	1,88E-01	2,95E-01	2,95E-01
374	90	825	0,01	0,99	1,24E-01	1,01E-01	1,78E-01	1,72E-01	1,72E-01
375	90	825	0,02	0,98	9,97E-02	7,05E-02	1,70E-01	1,25E-01	1,25E-01
376	90	825	0,03	0,97	8,27E-02	5,40E-02	1,63E-01	9,87E-02	9,86E-02
377	90	825	0,05	0,95	6,05E-02	3,63E-02	1,51E-01	6,91E-02	6,91E-02
378	90	825	0,1	0,9	3,41E-02	1,90E-02	1,31E-01	3,87E-02	3,86E-02
379	90	825	0,15	0,85	2,29E-02	1,24E-02	1,19E-01	2,64E-02	2,64E-02
380	90	825	0,2	0,8	1,70E-02	9,16E-03	1,11E-01	2,00E-02	1,99E-02
381	90	825	0,3	0,7	1,12E-02	6,07E-03	1,00E-01	1,36E-02	1,36E-02
382	90	825	0,5	0,5	6,97E-03	3,93E-03	8,96E-02	8,92E-03	8,88E-03

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
383	90	825	0,75	0,25	5,10E-03	3,05E-03	8,44E-02	6,86E-03	6,83E-03
384	90	825	1	0	4,25E-03	2,69E-03	8,30E-02	5,94E-03	5,92E-03
385	90	850	0	1	8,53E-02	1,01E-01	1,08E-01	1,50E-01	1,50E-01
386	90	850	0,01	0,99	6,87E-02	5,76E-02	1,01E-01	9,35E-02	9,35E-02
387	90	850	0,02	0,98	5,75E-02	4,31E-02	9,51E-02	7,03E-02	7,03E-02
388	90	850	0,03	0,97	4,94E-02	3,48E-02	9,04E-02	5,70E-02	5,69E-02
389	90	850	0,05	0,95	3,83E-02	2,54E-02	8,28E-02	4,17E-02	4,17E-02
390	90	850	0,1	0,9	2,43E-02	1,54E-02	7,06E-02	2,54E-02	2,53E-02
391	90	850	0,15	0,85	1,78E-02	1,11E-02	6,31E-02	1,84E-02	1,84E-02
392	90	850	0,2	0,8	1,40E-02	8,77E-03	5,81E-02	1,46E-02	1,45E-02
393	90	850	0,3	0,7	9,99E-03	6,35E-03	5,17E-02	1,05E-02	1,05E-02
394	90	850	0,5	0,5	6,65E-03	4,45E-03	4,55E-02	7,25E-03	7,22E-03
395	90	850	0,75	0,25	4,99E-03	3,57E-03	4,23E-02	5,69E-03	5,67E-03
396	90	850	1	0	4,19E-03	3,18E-03	4,14E-02	4,96E-03	4,94E-03
397	90	875	0	1	4,78E-02	5,25E-02	6,46E-02	8,02E-02	8,02E-02
398	90	875	0,01	0,99	3,98E-02	3,49E-02	5,99E-02	5,25E-02	5,24E-02
399	90	875	0,02	0,98	3,43E-02	2,80E-02	5,61E-02	4,05E-02	4,05E-02
400	90	875	0,03	0,97	3,02E-02	2,37E-02	5,30E-02	3,35E-02	3,35E-02
401	90	875	0,05	0,95	2,45E-02	1,87E-02	4,81E-02	2,54E-02	2,53E-02
402	90	875	0,1	0,9	1,69E-02	1,27E-02	4,01E-02	1,64E-02	1,64E-02
403	90	875	0,15	0,85	1,31E-02	9,98E-03	3,54E-02	1,24E-02	1,24E-02
404	90	875	0,2	0,8	1,09E-02	8,39E-03	3,22E-02	1,02E-02	1,01E-02
405	90	875	0,3	0,7	8,31E-03	6,62E-03	2,82E-02	7,71E-03	7,69E-03
406	90	875	0,5	0,5	6,00E-03	5,08E-03	2,44E-02	5,64E-03	5,62E-03
407	90	875	0,75	0,25	4,76E-03	4,29E-03	2,24E-02	4,59E-03	4,58E-03
408	90	875	1	0	4,11E-03	3,91E-03	2,17E-02	4,08E-03	4,07E-03
409	90	900	0	1	2,81E-02	2,88E-02	4,04E-02	4,46E-02	4,46E-02
410	90	900	0,01	0,99	2,40E-02	2,21E-02	3,72E-02	3,03E-02	3,03E-02
411	90	900	0,02	0,98	2,11E-02	1,89E-02	3,47E-02	2,38E-02	2,38E-02
412	90	900	0,03	0,97	1,89E-02	1,69E-02	3,25E-02	2,00E-02	2,00E-02
413	90	900	0,05	0,95	1,58E-02	1,42E-02	2,93E-02	1,55E-02	1,55E-02
414	90	900	0,1	0,9	1,15E-02	1,08E-02	2,40E-02	1,04E-02	1,04E-02
415	90	900	0,15	0,85	9,34E-03	9,10E-03	2,09E-02	8,14E-03	8,13E-03
416	90	900	0,2	0,8	7,99E-03	8,05E-03	1,88E-02	6,82E-03	6,81E-03
417	90	900	0,3	0,7	6,40E-03	6,81E-03	1,62E-02	5,36E-03	5,35E-03
418	90	900	0,5	0,5	4,91E-03	5,64E-03	1,37E-02	4,09E-03	4,08E-03
419	90	900	0,75	0,25	4,07E-03	4,99E-03	1,24E-02	3,43E-03	3,43E-03
420	90	900	1	0	3,61E-03	4,64E-03	1,19E-02	3,11E-03	3,11E-03
421	90	925	0	1	1,72E-02	1,67E-02	2,62E-02	2,57E-02	2,57E-02
422	90	925	0,01	0,99	1,50E-02	1,41E-02	2,40E-02	1,79E-02	1,79E-02
423	90	925	0,02	0,98	1,34E-02	1,26E-02	2,23E-02	1,43E-02	1,43E-02
424	90	925	0,03	0,97	1,21E-02	1,16E-02	2,08E-02	1,21E-02	1,21E-02
425	90	925	0,05	0,95	1,03E-02	1,02E-02	1,86E-02	9,55E-03	9,54E-03
426	90	925	0,1	0,9	7,82E-03	8,33E-03	1,50E-02	6,60E-03	6,59E-03
427	90	925	0,15	0,85	6,49E-03	7,30E-03	1,29E-02	5,25E-03	5,24E-03
428	90	925	0,2	0,8	5,66E-03	6,64E-03	1,15E-02	4,47E-03	4,46E-03
429	90	925	0,3	0,7	4,68E-03	5,83E-03	9,77E-03	3,59E-03	3,58E-03
430	90	925	0,5	0,5	3,73E-03	5,03E-03	8,09E-03	2,81E-03	2,81E-03
431	90	925	0,75	0,25	3,18E-03	4,56E-03	7,21E-03	2,41E-03	2,40E-03
432	90	925	1	0	2,87E-03	4,30E-03	6,86E-03	2,21E-03	2,21E-03
433	90	950	0	1	1,10E-02	1,02E-02	1,75E-02	1,53E-02	1,53E-02
434	90	950	0,01	0,99	9,64E-03	9,04E-03	1,60E-02	1,08E-02	1,08E-02
435	90	950	0,02	0,98	8,67E-03	8,31E-03	1,48E-02	8,75E-03	8,75E-03
436	90	950	0,03	0,97	7,93E-03	7,77E-03	1,38E-02	7,48E-03	7,47E-03
437	90	950	0,05	0,95	6,84E-03	6,99E-03	1,22E-02	5,95E-03	5,94E-03
438	90	950	0,1	0,9	5,29E-03	5,87E-03	9,76E-03	4,19E-03	4,18E-03
439	90	950	0,15	0,85	4,46E-03	5,23E-03	8,30E-03	3,37E-03	3,37E-03
440	90	950	0,2	0,8	3,94E-03	4,81E-03	7,33E-03	2,90E-03	2,89E-03
441	90	950	0,3	0,7	3,31E-03	4,29E-03	6,14E-03	2,36E-03	2,36E-03
442	90	950	0,5	0,5	2,70E-03	3,76E-03	4,98E-03	1,88E-03	1,87E-03
443	90	950	0,75	0,25	2,34E-03	3,45E-03	4,36E-03	1,62E-03	1,62E-03
444	90	950	1	0	2,14E-03	3,29E-03	4,11E-03	1,50E-03	1,50E-03
445	90	975	0	1	7,18E-03	6,45E-03	1,20E-02	9,36E-03	9,36E-03
446	90	975	0,01	0,99	6,38E-03	5,89E-03	1,10E-02	6,73E-03	6,73E-03

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
447	90	975	0,02	0,98	5,77E-03	5,48E-03	1,01E-02	5,47E-03	5,47E-03
448	90	975	0,03	0,97	5,30E-03	5,17E-03	9,41E-03	4,70E-03	4,70E-03
449	90	975	0,05	0,95	4,61E-03	4,70E-03	8,31E-03	3,76E-03	3,76E-03
450	90	975	0,1	0,9	3,61E-03	3,99E-03	6,56E-03	2,68E-03	2,68E-03
451	90	975	0,15	0,85	3,07E-03	3,58E-03	5,53E-03	2,18E-03	2,18E-03
452	90	975	0,2	0,8	2,72E-03	3,31E-03	4,85E-03	1,88E-03	1,88E-03
453	90	975	0,3	0,7	2,31E-03	2,96E-03	4,00E-03	1,55E-03	1,54E-03
454	90	975	0,5	0,5	1,90E-03	2,62E-03	3,19E-03	1,24E-03	1,24E-03
455	90	975	0,75	0,25	1,66E-03	2,42E-03	2,75E-03	1,08E-03	1,08E-03
456	90	975	1	0	1,53E-03	2,31E-03	2,56E-03	9,95E-04	9,94E-04
457	90	1000	0	1	4,87E-03	4,26E-03	8,39E-03	5,87E-03	5,87E-03
458	90	1000	0,01	0,99	4,34E-03	3,93E-03	7,65E-03	4,28E-03	4,28E-03
459	90	1000	0,02	0,98	3,95E-03	3,68E-03	7,06E-03	3,50E-03	3,50E-03
460	90	1000	0,03	0,97	3,63E-03	3,47E-03	6,56E-03	3,01E-03	3,01E-03
461	90	1000	0,05	0,95	3,17E-03	3,17E-03	5,78E-03	2,43E-03	2,43E-03
462	90	1000	0,1	0,9	2,49E-03	2,70E-03	4,54E-03	1,75E-03	1,74E-03
463	90	1000	0,15	0,85	2,12E-03	2,42E-03	3,80E-03	1,43E-03	1,42E-03
464	90	1000	0,2	0,8	1,89E-03	2,24E-03	3,31E-03	1,24E-03	1,23E-03
465	90	1000	0,3	0,7	1,60E-03	2,00E-03	2,70E-03	1,02E-03	1,02E-03
466	90	1000	0,5	0,5	1,32E-03	1,77E-03	2,11E-03	8,22E-04	8,20E-04
467	90	1000	0,75	0,25	1,16E-03	1,64E-03	1,79E-03	7,14E-04	7,13E-04
468	90	1000	1	0	1,07E-03	1,56E-03	1,65E-03	6,60E-04	6,59E-04
469	100	700	0	1	9,04E-10	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
470	100	700	0,01	0,99	4,59E+00	4,87E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
471	100	700	0,02	0,98	2,54E+00	2,38E+00	5,00E+00	3,52E+00	3,52E+00
472	100	700	0,03	0,97	1,54E+00	1,32E+00	5,00E+00	2,28E+00	2,28E+00
473	100	700	0,05	0,95	7,31E-01	4,93E-01	5,00E+00	1,22E+00	1,22E+00
474	100	700	0,1	0,9	2,58E-01	9,47E-02	5,00E+00	5,03E-01	5,03E-01
475	100	700	0,15	0,85	1,55E-01	4,18E-02	5,00E+00	3,18E-01	3,17E-01
476	100	700	0,2	0,8	1,15E-01	2,78E-02	5,00E+00	2,40E-01	2,39E-01
477	100	700	0,3	0,7	8,19E-02	1,90E-02	5,00E+00	1,73E-01	1,73E-01
478	100	700	0,5	0,5	6,04E-02	1,42E-02	5,00E+00	1,29E-01	1,29E-01
479	100	700	0,75	0,25	5,07E-02	1,23E-02	5,00E+00	1,11E-01	1,11E-01
480	100	700	1	0	4,58E-02	1,14E-02	5,00E+00	1,04E-01	1,04E-01
481	100	725	0	1	3,50E+00	5,00E+00	2,94E+00	5,00E+00	5,00E+00
482	100	725	0,01	0,99	1,96E+00	1,86E+00	3,09E+00	2,81E+00	2,81E+00
483	100	725	0,02	0,98	1,19E+00	9,64E-01	3,11E+00	1,63E+00	1,63E+00
484	100	725	0,03	0,97	7,68E-01	5,67E-01	3,10E+00	1,09E+00	1,09E+00
485	100	725	0,05	0,95	3,86E-01	2,38E-01	3,04E+00	5,98E-01	5,97E-01
486	100	725	0,1	0,9	1,37E-01	5,53E-02	2,88E+00	2,44E-01	2,44E-01
487	100	725	0,15	0,85	7,91E-02	2,48E-02	2,75E+00	1,50E-01	1,49E-01
488	100	725	0,2	0,8	5,67E-02	1,59E-02	2,66E+00	1,10E-01	1,10E-01
489	100	725	0,3	0,7	3,88E-02	1,03E-02	2,52E+00	7,78E-02	7,77E-02
490	100	725	0,5	0,5	2,74E-02	7,35E-03	2,38E+00	5,67E-02	5,66E-02
491	100	725	0,75	0,25	2,26E-02	6,29E-03	2,30E+00	4,81E-02	4,81E-02
492	100	725	1	0	2,03E-02	5,86E-03	2,28E+00	4,45E-02	4,45E-02
493	100	750	0	1	1,44E+00	2,33E+00	1,30E+00	2,95E+00	2,96E+00
494	100	750	0,01	0,99	8,92E-01	7,78E-01	1,32E+00	1,28E+00	1,28E+00
495	100	750	0,02	0,98	5,88E-01	4,31E-01	1,31E+00	7,91E-01	7,91E-01
496	100	750	0,03	0,97	4,08E-01	2,70E-01	1,30E+00	5,50E-01	5,50E-01
497	100	750	0,05	0,95	2,22E-01	1,28E-01	1,25E+00	3,17E-01	3,17E-01
498	100	750	0,1	0,9	8,32E-02	3,65E-02	1,17E+00	1,33E-01	1,32E-01
499	100	750	0,15	0,85	4,72E-02	1,74E-02	1,10E+00	8,00E-02	7,98E-02
500	100	750	0,2	0,8	3,29E-02	1,10E-02	1,06E+00	5,79E-02	5,78E-02
501	100	750	0,3	0,7	2,15E-02	6,73E-03	9,92E-01	3,95E-02	3,95E-02
502	100	750	0,5	0,5	1,45E-02	4,55E-03	9,27E-01	2,79E-02	2,79E-02
503	100	750	0,75	0,25	1,16E-02	3,81E-03	8,94E-01	2,33E-02	2,32E-02
504	100	750	1	0	1,03E-02	3,52E-03	8,87E-01	2,13E-02	2,13E-02
505	100	775	0	1	6,33E-01	9,50E-01	6,24E-01	1,25E+00	1,25E+00
506	100	775	0,01	0,99	4,26E-01	3,54E-01	6,17E-01	6,09E-01	6,09E-01
507	100	775	0,02	0,98	3,04E-01	2,10E-01	6,03E-01	3,99E-01	3,99E-01
508	100	775	0,03	0,97	2,25E-01	1,41E-01	5,89E-01	2,90E-01	2,90E-01
509	100	775	0,05	0,95	1,36E-01	7,55E-02	5,62E-01	1,79E-01	1,78E-01
510	100	775	0,1	0,9	5,61E-02	2,65E-02	5,11E-01	8,01E-02	8,00E-02

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
511	100	775	0,15	0,85	3,24E-02	1,38E-02	4,77E-01	4,87E-02	4,85E-02
512	100	775	0,2	0,8	2,24E-02	8,92E-03	4,53E-01	3,48E-02	3,48E-02
513	100	775	0,3	0,7	1,41E-02	5,33E-03	4,21E-01	2,32E-02	2,31E-02
514	100	775	0,5	0,5	9,06E-03	3,41E-03	3,89E-01	1,57E-02	1,57E-02
515	100	775	0,75	0,25	7,00E-03	2,76E-03	3,73E-01	1,28E-02	1,27E-02
516	100	775	1	0	6,10E-03	2,50E-03	3,70E-01	1,15E-02	1,15E-02
517	100	800	0	1	2,97E-01	4,13E-01	3,20E-01	5,66E-01	5,66E-01
518	100	800	0,01	0,99	2,14E-01	1,74E-01	3,09E-01	3,03E-01	3,03E-01
519	100	800	0,02	0,98	1,63E-01	1,12E-01	2,98E-01	2,09E-01	2,09E-01
520	100	800	0,03	0,97	1,28E-01	7,99E-02	2,88E-01	1,59E-01	1,58E-01
521	100	800	0,05	0,95	8,51E-02	4,79E-02	2,71E-01	1,04E-01	1,04E-01
522	100	800	0,1	0,9	4,04E-02	2,04E-02	2,41E-01	5,19E-02	5,18E-02
523	100	800	0,15	0,85	2,46E-02	1,18E-02	2,22E-01	3,29E-02	3,28E-02
524	100	800	0,2	0,8	1,73E-02	8,03E-03	2,09E-01	2,38E-02	2,38E-02
525	100	800	0,3	0,7	1,09E-02	4,93E-03	1,92E-01	1,57E-02	1,56E-02
526	100	800	0,5	0,5	6,70E-03	3,08E-03	1,75E-01	1,03E-02	1,03E-02
527	100	800	0,75	0,25	5,00E-03	2,40E-03	1,66E-01	8,11E-03	8,08E-03
528	100	800	1	0	4,26E-03	2,14E-03	1,64E-01	7,16E-03	7,14E-03
529	100	825	0	1	1,48E-01	1,91E-01	1,73E-01	2,72E-01	2,72E-01
530	100	825	0,01	0,99	1,13E-01	9,24E-02	1,65E-01	1,58E-01	1,58E-01
531	100	825	0,02	0,98	9,05E-02	6,37E-02	1,57E-01	1,14E-01	1,14E-01
532	100	825	0,03	0,97	7,45E-02	4,84E-02	1,51E-01	8,93E-02	8,93E-02
533	100	825	0,05	0,95	5,38E-02	3,20E-02	1,40E-01	6,21E-02	6,21E-02
534	100	825	0,1	0,9	2,96E-02	1,63E-02	1,22E-01	3,43E-02	3,43E-02
535	100	825	0,15	0,85	1,95E-02	1,05E-02	1,11E-01	2,32E-02	2,32E-02
536	100	825	0,2	0,8	1,43E-02	7,62E-03	1,03E-01	1,75E-02	1,74E-02
537	100	825	0,3	0,7	9,33E-03	4,98E-03	9,33E-02	1,19E-02	1,18E-02
538	100	825	0,5	0,5	5,76E-03	3,19E-03	8,36E-02	7,77E-03	7,74E-03
539	100	825	0,75	0,25	4,22E-03	2,48E-03	7,88E-02	6,00E-03	5,98E-03
540	100	825	1	0	3,53E-03	2,18E-03	7,74E-02	5,22E-03	5,20E-03
541	100	850	0	1	7,85E-02	9,36E-02	9,91E-02	1,38E-01	1,38E-01
542	100	850	0,01	0,99	6,28E-02	5,24E-02	9,29E-02	8,55E-02	8,55E-02
543	100	850	0,02	0,98	5,22E-02	3,87E-02	8,78E-02	6,40E-02	6,40E-02
544	100	850	0,03	0,97	4,45E-02	3,10E-02	8,35E-02	5,17E-02	5,16E-02
545	100	850	0,05	0,95	3,42E-02	2,23E-02	7,66E-02	3,76E-02	3,76E-02
546	100	850	0,1	0,9	2,12E-02	1,32E-02	6,54E-02	2,26E-02	2,26E-02
547	100	850	0,15	0,85	1,52E-02	9,34E-03	5,86E-02	1,63E-02	1,62E-02
548	100	850	0,2	0,8	1,18E-02	7,28E-03	5,40E-02	1,28E-02	1,28E-02
549	100	850	0,3	0,7	8,27E-03	5,18E-03	4,81E-02	9,16E-03	9,13E-03
550	100	850	0,5	0,5	5,39E-03	3,56E-03	4,24E-02	6,27E-03	6,24E-03
551	100	850	0,75	0,25	4,01E-03	2,84E-03	3,95E-02	4,90E-03	4,89E-03
552	100	850	1	0	3,35E-03	2,52E-03	3,85E-02	4,27E-03	4,25E-03
553	100	875	0	1	4,39E-02	4,86E-02	5,93E-02	7,36E-02	7,36E-02
554	100	875	0,01	0,99	3,63E-02	3,16E-02	5,51E-02	4,80E-02	4,80E-02
555	100	875	0,02	0,98	3,11E-02	2,50E-02	5,17E-02	3,70E-02	3,69E-02
556	100	875	0,03	0,97	2,72E-02	2,10E-02	4,88E-02	3,05E-02	3,05E-02
557	100	875	0,05	0,95	2,19E-02	1,63E-02	4,43E-02	2,30E-02	2,30E-02
558	100	875	0,1	0,9	1,48E-02	1,08E-02	3,71E-02	1,47E-02	1,47E-02
559	100	875	0,15	0,85	1,14E-02	8,35E-03	3,28E-02	1,11E-02	1,10E-02
560	100	875	0,2	0,8	9,31E-03	6,93E-03	2,99E-02	9,02E-03	9,00E-03
561	100	875	0,3	0,7	6,99E-03	5,37E-03	2,62E-02	6,80E-03	6,78E-03
562	100	875	0,5	0,5	4,94E-03	4,04E-03	2,27E-02	4,92E-03	4,91E-03
563	100	875	0,75	0,25	3,85E-03	3,37E-03	2,08E-02	3,98E-03	3,97E-03
564	100	875	1	0	3,29E-03	3,05E-03	2,02E-02	3,53E-03	3,52E-03
565	100	900	0	1	2,58E-02	2,67E-02	3,70E-02	4,09E-02	4,09E-02
566	100	900	0,01	0,99	2,19E-02	2,00E-02	3,41E-02	2,77E-02	2,77E-02
567	100	900	0,02	0,98	1,91E-02	1,69E-02	3,18E-02	2,18E-02	2,18E-02
568	100	900	0,03	0,97	1,71E-02	1,49E-02	2,99E-02	1,83E-02	1,83E-02
569	100	900	0,05	0,95	1,42E-02	1,24E-02	2,69E-02	1,41E-02	1,41E-02
570	100	900	0,1	0,9	1,02E-02	9,20E-03	2,22E-02	9,43E-03	9,42E-03
571	100	900	0,15	0,85	8,18E-03	7,63E-03	1,93E-02	7,33E-03	7,32E-03
572	100	900	0,2	0,8	6,94E-03	6,67E-03	1,74E-02	6,12E-03	6,11E-03
573	100	900	0,3	0,7	5,49E-03	5,56E-03	1,51E-02	4,79E-03	4,77E-03
574	100	900	0,5	0,5	4,14E-03	4,54E-03	1,28E-02	3,63E-03	3,62E-03

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
575	100	900	0,75	0,25	3,38E-03	3,97E-03	1,15E-02	3,03E-03	3,02E-03
576	100	900	1	0	2,97E-03	3,68E-03	1,11E-02	2,74E-03	2,73E-03
577	100	925	0	1	1,58E-02	1,54E-02	2,40E-02	2,36E-02	2,36E-02
578	100	925	0,01	0,99	1,36E-02	1,28E-02	2,20E-02	1,64E-02	1,64E-02
579	100	925	0,02	0,98	1,21E-02	1,14E-02	2,04E-02	1,31E-02	1,31E-02
580	100	925	0,03	0,97	1,10E-02	1,04E-02	1,91E-02	1,11E-02	1,11E-02
581	100	925	0,05	0,95	9,29E-03	9,09E-03	1,71E-02	8,72E-03	8,72E-03
582	100	925	0,1	0,9	6,97E-03	7,30E-03	1,38E-02	6,01E-03	6,00E-03
583	100	925	0,15	0,85	5,74E-03	6,35E-03	1,19E-02	4,77E-03	4,76E-03
584	100	925	0,2	0,8	4,98E-03	5,74E-03	1,06E-02	4,05E-03	4,04E-03
585	100	925	0,3	0,7	4,07E-03	5,00E-03	9,04E-03	3,24E-03	3,23E-03
586	100	925	0,5	0,5	3,21E-03	4,28E-03	7,51E-03	2,53E-03	2,52E-03
587	100	925	0,75	0,25	2,71E-03	3,86E-03	6,70E-03	2,15E-03	2,15E-03
588	100	925	1	0	2,43E-03	3,63E-03	6,38E-03	1,97E-03	1,97E-03
589	100	950	0	1	9,98E-03	9,34E-03	1,60E-02	1,40E-02	1,40E-02
590	100	950	0,01	0,99	8,76E-03	8,24E-03	1,46E-02	9,96E-03	9,96E-03
591	100	950	0,02	0,98	7,86E-03	7,54E-03	1,35E-02	8,04E-03	8,03E-03
592	100	950	0,03	0,97	7,17E-03	7,03E-03	1,26E-02	6,86E-03	6,86E-03
593	100	950	0,05	0,95	6,17E-03	6,30E-03	1,12E-02	5,45E-03	5,45E-03
594	100	950	0,1	0,9	4,74E-03	5,24E-03	8,96E-03	3,83E-03	3,82E-03
595	100	950	0,15	0,85	3,98E-03	4,65E-03	7,63E-03	3,08E-03	3,07E-03
596	100	950	0,2	0,8	3,50E-03	4,27E-03	6,75E-03	2,64E-03	2,64E-03
597	100	950	0,3	0,7	2,92E-03	3,79E-03	5,67E-03	2,15E-03	2,14E-03
598	100	950	0,5	0,5	2,36E-03	3,31E-03	4,61E-03	1,70E-03	1,70E-03
599	100	950	0,75	0,25	2,03E-03	3,03E-03	4,05E-03	1,47E-03	1,47E-03
600	100	950	1	0	1,85E-03	2,88E-03	3,82E-03	1,35E-03	1,35E-03
601	100	975	0	1	6,53E-03	5,92E-03	1,09E-02	8,59E-03	8,59E-03
602	100	975	0,01	0,99	5,79E-03	5,38E-03	9,98E-03	6,19E-03	6,19E-03
603	100	975	0,02	0,98	5,23E-03	5,00E-03	9,22E-03	5,03E-03	5,03E-03
604	100	975	0,03	0,97	4,80E-03	4,70E-03	8,59E-03	4,32E-03	4,32E-03
605	100	975	0,05	0,95	4,16E-03	4,26E-03	7,59E-03	3,46E-03	3,46E-03
606	100	975	0,1	0,9	3,25E-03	3,60E-03	6,01E-03	2,46E-03	2,46E-03
607	100	975	0,15	0,85	2,75E-03	3,23E-03	5,07E-03	2,00E-03	1,99E-03
608	100	975	0,2	0,8	2,43E-03	2,98E-03	4,45E-03	1,72E-03	1,72E-03
609	100	975	0,3	0,7	2,05E-03	2,66E-03	3,69E-03	1,41E-03	1,41E-03
610	100	975	0,5	0,5	1,68E-03	2,35E-03	2,95E-03	1,13E-03	1,13E-03
611	100	975	0,75	0,25	1,47E-03	2,16E-03	2,55E-03	9,82E-04	9,80E-04
612	100	975	1	0	1,35E-03	2,06E-03	2,37E-03	9,07E-04	9,06E-04
613	100	1000	0	1	4,41E-03	3,90E-03	7,63E-03	5,39E-03	5,39E-03
614	100	1000	0,01	0,99	3,93E-03	3,59E-03	6,97E-03	3,93E-03	3,93E-03
615	100	1000	0,02	0,98	3,57E-03	3,35E-03	6,43E-03	3,22E-03	3,22E-03
616	100	1000	0,03	0,97	3,29E-03	3,17E-03	5,98E-03	2,78E-03	2,77E-03
617	100	1000	0,05	0,95	2,86E-03	2,89E-03	5,27E-03	2,24E-03	2,23E-03
618	100	1000	0,1	0,9	2,25E-03	2,45E-03	4,15E-03	1,61E-03	1,60E-03
619	100	1000	0,15	0,85	1,91E-03	2,20E-03	3,48E-03	1,31E-03	1,31E-03
620	100	1000	0,2	0,8	1,70E-03	2,03E-03	3,03E-03	1,14E-03	1,13E-03
621	100	1000	0,3	0,7	1,44E-03	1,82E-03	2,48E-03	9,36E-04	9,34E-04
622	100	1000	0,5	0,5	1,18E-03	1,60E-03	1,95E-03	7,53E-04	7,52E-04
623	100	1000	0,75	0,25	1,04E-03	1,48E-03	1,66E-03	6,54E-04	6,53E-04
624	100	1000	1	0	9,55E-04	1,41E-03	1,53E-03	6,04E-04	6,04E-04
625	110	700	0	1	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
626	110	700	0,01	0,99	4,27E+00	4,59E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
627	110	700	0,02	0,98	2,35E+00	2,24E+00	5,00E+00	3,25E+00	3,25E+00
628	110	700	0,03	0,97	1,43E+00	1,24E+00	5,00E+00	2,10E+00	2,10E+00
629	110	700	0,05	0,95	6,81E-01	4,60E-01	5,00E+00	1,13E+00	1,13E+00
630	110	700	0,1	0,9	2,45E-01	8,79E-02	5,00E+00	4,76E-01	4,76E-01
631	110	700	0,15	0,85	1,48E-01	3,91E-02	5,00E+00	3,03E-01	3,03E-01
632	110	700	0,2	0,8	1,10E-01	2,63E-02	5,00E+00	2,30E-01	2,30E-01
633	110	700	0,3	0,7	7,92E-02	1,81E-02	5,00E+00	1,67E-01	1,67E-01
634	110	700	0,5	0,5	5,84E-02	1,35E-02	5,00E+00	1,25E-01	1,25E-01
635	110	700	0,75	0,25	4,91E-02	1,16E-02	5,00E+00	1,08E-01	1,08E-01
636	110	700	1	0	4,46E-02	1,08E-02	5,00E+00	1,01E-01	1,01E-01
637	110	725	0	1	3,28E+00	5,00E+00	2,76E+00	5,00E+00	5,00E+00
638	110	725	0,01	0,99	1,82E+00	1,75E+00	2,90E+00	2,59E+00	2,59E+00

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
639	110	725	0,02	0,98	1,10E+00	9,04E-01	2,92E+00	1,50E+00	1,50E+00
640	110	725	0,03	0,97	7,07E-01	5,29E-01	2,91E+00	1,00E+00	1,00E+00
641	110	725	0,05	0,95	3,54E-01	2,20E-01	2,86E+00	5,51E-01	5,51E-01
642	110	725	0,1	0,9	1,27E-01	5,04E-02	2,71E+00	2,28E-01	2,28E-01
643	110	725	0,15	0,85	7,41E-02	2,27E-02	2,60E+00	1,41E-01	1,41E-01
644	110	725	0,2	0,8	5,35E-02	1,47E-02	2,51E+00	1,05E-01	1,05E-01
645	110	725	0,3	0,7	3,69E-02	9,52E-03	2,38E+00	7,44E-02	7,44E-02
646	110	725	0,5	0,5	2,63E-02	6,86E-03	2,24E+00	5,45E-02	5,45E-02
647	110	725	0,75	0,25	2,18E-02	5,87E-03	2,16E+00	4,65E-02	4,65E-02
648	110	725	1	0	1,96E-02	5,47E-03	2,14E+00	4,31E-02	4,31E-02
649	110	750	0	1	1,35E+00	2,19E+00	1,22E+00	2,76E+00	2,76E+00
650	110	750	0,01	0,99	8,26E-01	7,29E-01	1,24E+00	1,18E+00	1,18E+00
651	110	750	0,02	0,98	5,41E-01	4,01E-01	1,23E+00	7,26E-01	7,26E-01
652	110	750	0,03	0,97	3,72E-01	2,50E-01	1,22E+00	5,03E-01	5,03E-01
653	110	750	0,05	0,95	2,01E-01	1,17E-01	1,18E+00	2,90E-01	2,89E-01
654	110	750	0,1	0,9	7,55E-02	3,27E-02	1,10E+00	1,22E-01	1,22E-01
655	110	750	0,15	0,85	4,32E-02	1,55E-02	1,04E+00	7,42E-02	7,41E-02
656	110	750	0,2	0,8	3,03E-02	9,86E-03	9,94E-01	5,41E-02	5,40E-02
657	110	750	0,3	0,7	2,00E-02	6,08E-03	9,34E-01	3,73E-02	3,72E-02
658	110	750	0,5	0,5	1,36E-02	4,15E-03	8,72E-01	2,66E-02	2,65E-02
659	110	750	0,75	0,25	1,10E-02	3,48E-03	8,41E-01	2,23E-02	2,22E-02
660	110	750	1	0	9,77E-03	3,22E-03	8,33E-01	2,04E-02	2,04E-02
661	110	775	0	1	5,92E-01	8,91E-01	5,82E-01	1,17E+00	1,17E+00
662	110	775	0,01	0,99	3,95E-01	3,30E-01	5,77E-01	5,62E-01	5,62E-01
663	110	775	0,02	0,98	2,79E-01	1,95E-01	5,65E-01	3,66E-01	3,66E-01
664	110	775	0,03	0,97	2,05E-01	1,29E-01	5,51E-01	2,65E-01	2,65E-01
665	110	775	0,05	0,95	1,22E-01	6,84E-02	5,27E-01	1,62E-01	1,62E-01
666	110	775	0,1	0,9	5,00E-02	2,34E-02	4,80E-01	7,25E-02	7,24E-02
667	110	775	0,15	0,85	2,89E-02	1,20E-02	4,49E-01	4,42E-02	4,41E-02
668	110	775	0,2	0,8	2,00E-02	7,78E-03	4,26E-01	3,19E-02	3,18E-02
669	110	775	0,3	0,7	1,28E-02	4,67E-03	3,96E-01	2,14E-02	2,13E-02
670	110	775	0,5	0,5	8,28E-03	3,02E-03	3,66E-01	1,47E-02	1,47E-02
671	110	775	0,75	0,25	6,46E-03	2,45E-03	3,51E-01	1,20E-02	1,20E-02
672	110	775	1	0	5,65E-03	2,23E-03	3,47E-01	1,08E-02	1,08E-02
673	110	800	0	1	2,77E-01	3,87E-01	2,97E-01	5,26E-01	5,26E-01
674	110	800	0,01	0,99	1,98E-01	1,62E-01	2,88E-01	2,80E-01	2,79E-01
675	110	800	0,02	0,98	1,49E-01	1,03E-01	2,78E-01	1,92E-01	1,92E-01
676	110	800	0,03	0,97	1,17E-01	7,29E-02	2,69E-01	1,45E-01	1,45E-01
677	110	800	0,05	0,95	7,64E-02	4,30E-02	2,54E-01	9,45E-02	9,44E-02
678	110	800	0,1	0,9	3,56E-02	1,79E-02	2,26E-01	4,65E-02	4,64E-02
679	110	800	0,15	0,85	2,15E-02	1,02E-02	2,09E-01	2,94E-02	2,93E-02
680	110	800	0,2	0,8	1,51E-02	6,88E-03	1,96E-01	2,13E-02	2,13E-02
681	110	800	0,3	0,7	9,50E-03	4,20E-03	1,80E-01	1,41E-02	1,41E-02
682	110	800	0,5	0,5	5,91E-03	2,63E-03	1,64E-01	9,38E-03	9,34E-03
683	110	800	0,75	0,25	4,45E-03	2,07E-03	1,56E-01	7,44E-03	7,42E-03
684	110	800	1	0	3,81E-03	1,84E-03	1,54E-01	6,61E-03	6,59E-03
685	110	825	0	1	1,38E-01	1,79E-01	1,61E-01	2,52E-01	2,52E-01
686	110	825	0,01	0,99	1,05E-01	8,53E-02	1,53E-01	1,45E-01	1,45E-01
687	110	825	0,02	0,98	8,30E-02	5,83E-02	1,46E-01	1,04E-01	1,04E-01
688	110	825	0,03	0,97	6,79E-02	4,39E-02	1,40E-01	8,17E-02	8,16E-02
689	110	825	0,05	0,95	4,84E-02	2,86E-02	1,31E-01	5,64E-02	5,64E-02
690	110	825	0,1	0,9	2,60E-02	1,42E-02	1,14E-01	3,08E-02	3,07E-02
691	110	825	0,15	0,85	1,69E-02	8,98E-03	1,04E-01	2,07E-02	2,06E-02
692	110	825	0,2	0,8	1,23E-02	6,47E-03	9,66E-02	1,55E-02	1,54E-02
693	110	825	0,3	0,7	7,94E-03	4,18E-03	8,75E-02	1,05E-02	1,04E-02
694	110	825	0,5	0,5	4,90E-03	2,66E-03	7,85E-02	6,89E-03	6,86E-03
695	110	825	0,75	0,25	3,60E-03	2,07E-03	7,40E-02	5,36E-03	5,34E-03
696	110	825	1	0	3,02E-03	1,82E-03	7,27E-02	4,68E-03	4,66E-03
697	110	850	0	1	7,29E-02	8,75E-02	9,19E-02	1,28E-01	1,28E-01
698	110	850	0,01	0,99	5,79E-02	4,81E-02	8,63E-02	7,88E-02	7,88E-02
699	110	850	0,02	0,98	4,78E-02	3,52E-02	8,16E-02	5,88E-02	5,88E-02
700	110	850	0,03	0,97	4,05E-02	2,80E-02	7,77E-02	4,73E-02	4,73E-02
701	110	850	0,05	0,95	3,08E-02	1,99E-02	7,14E-02	3,42E-02	3,42E-02
702	110	850	0,1	0,9	1,87E-02	1,15E-02	6,11E-02	2,04E-02	2,03E-02

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
703	110	850	0,15	0,85	1,32E-02	8,00E-03	5,48E-02	1,45E-02	1,45E-02
704	110	850	0,2	0,8	1,02E-02	6,16E-03	5,05E-02	1,14E-02	1,13E-02
705	110	850	0,3	0,7	6,98E-03	4,32E-03	4,51E-02	8,09E-03	8,06E-03
706	110	850	0,5	0,5	4,48E-03	2,93E-03	3,98E-02	5,50E-03	5,48E-03
707	110	850	0,75	0,25	3,31E-03	2,32E-03	3,70E-02	4,30E-03	4,28E-03
708	110	850	1	0	2,76E-03	2,05E-03	3,62E-02	3,74E-03	3,73E-03
709	110	875	0	1	4,07E-02	4,53E-02	5,49E-02	6,81E-02	6,81E-02
710	110	875	0,01	0,99	3,35E-02	2,88E-02	5,11E-02	4,42E-02	4,42E-02
711	110	875	0,02	0,98	2,85E-02	2,26E-02	4,79E-02	3,40E-02	3,40E-02
712	110	875	0,03	0,97	2,48E-02	1,88E-02	4,53E-02	2,80E-02	2,80E-02
713	110	875	0,05	0,95	1,98E-02	1,44E-02	4,12E-02	2,10E-02	2,10E-02
714	110	875	0,1	0,9	1,32E-02	9,38E-03	3,46E-02	1,33E-02	1,33E-02
715	110	875	0,15	0,85	9,96E-03	7,13E-03	3,06E-02	9,97E-03	9,95E-03
716	110	875	0,2	0,8	8,07E-03	5,85E-03	2,79E-02	8,09E-03	8,07E-03
717	110	875	0,3	0,7	5,96E-03	4,46E-03	2,46E-02	6,05E-03	6,04E-03
718	110	875	0,5	0,5	4,12E-03	3,29E-03	2,12E-02	4,35E-03	4,34E-03
719	110	875	0,75	0,25	3,17E-03	2,72E-03	1,95E-02	3,50E-03	3,49E-03
720	110	875	1	0	2,69E-03	2,45E-03	1,89E-02	3,09E-03	3,09E-03
721	110	900	0	1	2,38E-02	2,48E-02	3,42E-02	3,79E-02	3,79E-02
722	110	900	0,01	0,99	2,01E-02	1,82E-02	3,16E-02	2,56E-02	2,56E-02
723	110	900	0,02	0,98	1,75E-02	1,52E-02	2,95E-02	2,01E-02	2,01E-02
724	110	900	0,03	0,97	1,56E-02	1,33E-02	2,77E-02	1,68E-02	1,68E-02
725	110	900	0,05	0,95	1,28E-02	1,09E-02	2,50E-02	1,29E-02	1,29E-02
726	110	900	0,1	0,9	9,13E-03	7,93E-03	2,06E-02	8,60E-03	8,59E-03
727	110	900	0,15	0,85	7,24E-03	6,48E-03	1,80E-02	6,66E-03	6,64E-03
728	110	900	0,2	0,8	6,09E-03	5,61E-03	1,62E-02	5,54E-03	5,53E-03
729	110	900	0,3	0,7	4,76E-03	4,61E-03	1,41E-02	4,31E-03	4,30E-03
730	110	900	0,5	0,5	3,53E-03	3,70E-03	1,19E-02	3,24E-03	3,23E-03
731	110	900	0,75	0,25	2,84E-03	3,21E-03	1,08E-02	2,70E-03	2,69E-03
732	110	900	1	0	2,48E-03	2,96E-03	1,04E-02	2,43E-03	2,42E-03
733	110	925	0	1	1,45E-02	1,43E-02	2,21E-02	2,18E-02	2,18E-02
734	110	925	0,01	0,99	1,25E-02	1,17E-02	2,03E-02	1,52E-02	1,52E-02
735	110	925	0,02	0,98	1,11E-02	1,03E-02	1,88E-02	1,21E-02	1,21E-02
736	110	925	0,03	0,97	1,00E-02	9,39E-03	1,77E-02	1,02E-02	1,02E-02
737	110	925	0,05	0,95	8,44E-03	8,13E-03	1,58E-02	8,03E-03	8,03E-03
738	110	925	0,1	0,9	6,27E-03	6,45E-03	1,28E-02	5,51E-03	5,50E-03
739	110	925	0,15	0,85	5,13E-03	5,56E-03	1,11E-02	4,36E-03	4,35E-03
740	110	925	0,2	0,8	4,42E-03	4,99E-03	9,89E-03	3,69E-03	3,68E-03
741	110	925	0,3	0,7	3,58E-03	4,32E-03	8,43E-03	2,95E-03	2,94E-03
742	110	925	0,5	0,5	2,79E-03	3,66E-03	7,02E-03	2,29E-03	2,28E-03
743	110	925	0,75	0,25	2,33E-03	3,28E-03	6,27E-03	1,94E-03	1,94E-03
744	110	925	1	0	2,08E-03	3,08E-03	5,97E-03	1,78E-03	1,77E-03
745	110	950	0	1	9,18E-03	8,66E-03	1,47E-02	1,30E-02	1,30E-02
746	110	950	0,01	0,99	8,04E-03	7,57E-03	1,35E-02	9,22E-03	9,22E-03
747	110	950	0,02	0,98	7,20E-03	6,89E-03	1,25E-02	7,44E-03	7,43E-03
748	110	950	0,03	0,97	6,55E-03	6,40E-03	1,16E-02	6,34E-03	6,34E-03
749	110	950	0,05	0,95	5,62E-03	5,71E-03	1,04E-02	5,04E-03	5,03E-03
750	110	950	0,1	0,9	4,29E-03	4,72E-03	8,30E-03	3,53E-03	3,52E-03
751	110	950	0,15	0,85	3,58E-03	4,17E-03	7,08E-03	2,83E-03	2,83E-03
752	110	950	0,2	0,8	3,13E-03	3,82E-03	6,27E-03	2,43E-03	2,42E-03
753	110	950	0,3	0,7	2,60E-03	3,37E-03	5,27E-03	1,97E-03	1,96E-03
754	110	950	0,5	0,5	2,08E-03	2,94E-03	4,31E-03	1,56E-03	1,55E-03
755	110	950	0,75	0,25	1,78E-03	2,68E-03	3,79E-03	1,34E-03	1,34E-03
756	110	950	1	0	1,61E-03	2,54E-03	3,57E-03	1,23E-03	1,23E-03
757	110	975	0	1	5,99E-03	5,48E-03	1,00E-02	7,95E-03	7,95E-03
758	110	975	0,01	0,99	5,30E-03	4,95E-03	9,18E-03	5,73E-03	5,73E-03
759	110	975	0,02	0,98	4,78E-03	4,59E-03	8,49E-03	4,66E-03	4,66E-03
760	110	975	0,03	0,97	4,38E-03	4,31E-03	7,91E-03	4,00E-03	4,00E-03
761	110	975	0,05	0,95	3,79E-03	3,90E-03	7,00E-03	3,20E-03	3,20E-03
762	110	975	0,1	0,9	2,95E-03	3,28E-03	5,55E-03	2,28E-03	2,27E-03
763	110	975	0,15	0,85	2,49E-03	2,93E-03	4,69E-03	1,84E-03	1,84E-03
764	110	975	0,2	0,8	2,20E-03	2,70E-03	4,13E-03	1,59E-03	1,59E-03
765	110	975	0,3	0,7	1,85E-03	2,41E-03	3,43E-03	1,30E-03	1,30E-03
766	110	975	0,5	0,5	1,51E-03	2,12E-03	2,75E-03	1,04E-03	1,04E-03

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
767	110	975	0,75	0,25	1,30E-03	1,95E-03	2,38E-03	9,02E-04	9,01E-04
768	110	975	1	0	1,19E-03	1,86E-03	2,22E-03	8,33E-04	8,32E-04
769	110	1000	0	1	4,03E-03	3,60E-03	7,01E-03	4,99E-03	4,99E-03
770	110	1000	0,01	0,99	3,59E-03	3,31E-03	6,40E-03	3,65E-03	3,65E-03
771	110	1000	0,02	0,98	3,26E-03	3,09E-03	5,91E-03	2,99E-03	2,98E-03
772	110	1000	0,03	0,97	3,00E-03	2,91E-03	5,50E-03	2,57E-03	2,57E-03
773	110	1000	0,05	0,95	2,61E-03	2,65E-03	4,85E-03	2,07E-03	2,07E-03
774	110	1000	0,1	0,9	2,05E-03	2,25E-03	3,82E-03	1,49E-03	1,49E-03
775	110	1000	0,15	0,85	1,74E-03	2,01E-03	3,21E-03	1,21E-03	1,21E-03
776	110	1000	0,2	0,8	1,54E-03	1,86E-03	2,80E-03	1,05E-03	1,05E-03
777	110	1000	0,3	0,7	1,30E-03	1,66E-03	2,30E-03	8,65E-04	8,63E-04
778	110	1000	0,5	0,5	1,07E-03	1,46E-03	1,81E-03	6,96E-04	6,94E-04
779	110	1000	0,75	0,25	9,33E-04	1,35E-03	1,55E-03	6,04E-04	6,03E-04
780	110	1000	1	0	8,58E-04	1,29E-03	1,43E-03	5,58E-04	5,57E-04
781	120	700	0	1	4,99E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
782	120	700	0,01	0,99	4,00E+00	4,36E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
783	120	700	0,02	0,98	2,20E+00	2,12E+00	5,00E+00	3,03E+00	3,02E+00
784	120	700	0,03	0,97	1,34E+00	1,17E+00	5,00E+00	1,96E+00	1,96E+00
785	120	700	0,05	0,95	6,39E-01	4,33E-01	5,00E+00	1,06E+00	1,06E+00
786	120	700	0,1	0,9	2,33E-01	8,23E-02	5,00E+00	4,53E-01	4,53E-01
787	120	700	0,15	0,85	1,42E-01	3,69E-02	5,00E+00	2,91E-01	2,91E-01
788	120	700	0,2	0,8	1,07E-01	2,50E-02	5,00E+00	2,22E-01	2,22E-01
789	120	700	0,3	0,7	7,71E-02	1,72E-02	5,00E+00	1,62E-01	1,62E-01
790	120	700	0,5	0,5	5,71E-02	1,29E-02	5,00E+00	1,22E-01	1,22E-01
791	120	700	0,75	0,25	4,80E-02	1,11E-02	5,00E+00	1,05E-01	1,05E-01
792	120	700	1	0	4,36E-02	1,03E-02	5,00E+00	9,83E-02	9,83E-02
793	120	725	0	1	3,10E+00	5,00E+00	2,60E+00	5,00E+00	5,00E+00
794	120	725	0,01	0,99	1,70E+00	1,66E+00	2,74E+00	2,41E+00	2,41E+00
795	120	725	0,02	0,98	1,02E+00	8,52E-01	2,76E+00	1,39E+00	1,39E+00
796	120	725	0,03	0,97	6,55E-01	4,97E-01	2,76E+00	9,27E-01	9,27E-01
797	120	725	0,05	0,95	3,28E-01	2,05E-01	2,71E+00	5,12E-01	5,12E-01
798	120	725	0,1	0,9	1,19E-01	4,64E-02	2,57E+00	2,15E-01	2,15E-01
799	120	725	0,15	0,85	7,00E-02	2,10E-02	2,46E+00	1,34E-01	1,34E-01
800	120	725	0,2	0,8	5,09E-02	1,36E-02	2,38E+00	1,00E-01	1,00E-01
801	120	725	0,3	0,7	3,54E-02	8,94E-03	2,25E+00	7,16E-02	7,15E-02
802	120	725	0,5	0,5	2,54E-02	6,46E-03	2,12E+00	5,27E-02	5,27E-02
803	120	725	0,75	0,25	2,11E-02	5,52E-03	2,05E+00	4,51E-02	4,51E-02
804	120	725	1	0	1,90E-02	5,14E-03	2,02E+00	4,19E-02	4,18E-02
805	120	750	0	1	1,27E+00	2,07E+00	1,15E+00	2,59E+00	2,59E+00
806	120	750	0,01	0,99	7,72E-01	6,88E-01	1,17E+00	1,10E+00	1,10E+00
807	120	750	0,02	0,98	5,01E-01	3,76E-01	1,16E+00	6,72E-01	6,72E-01
808	120	750	0,03	0,97	3,43E-01	2,33E-01	1,15E+00	4,65E-01	4,64E-01
809	120	750	0,05	0,95	1,85E-01	1,08E-01	1,11E+00	2,67E-01	2,67E-01
810	120	750	0,1	0,9	6,94E-02	2,97E-02	1,04E+00	1,13E-01	1,13E-01
811	120	750	0,15	0,85	3,99E-02	1,40E-02	9,82E-01	6,95E-02	6,94E-02
812	120	750	0,2	0,8	2,82E-02	8,95E-03	9,41E-01	5,10E-02	5,09E-02
813	120	750	0,3	0,7	1,89E-02	5,56E-03	8,85E-01	3,55E-02	3,54E-02
814	120	750	0,5	0,5	1,30E-02	3,83E-03	8,26E-01	2,54E-02	2,54E-02
815	120	750	0,75	0,25	1,05E-02	3,22E-03	7,95E-01	2,14E-02	2,14E-02
816	120	750	1	0	9,35E-03	2,98E-03	7,87E-01	1,97E-02	1,97E-02
817	120	775	0	1	5,57E-01	8,41E-01	5,47E-01	1,09E+00	1,09E+00
818	120	775	0,01	0,99	3,68E-01	3,10E-01	5,42E-01	5,23E-01	5,22E-01
819	120	775	0,02	0,98	2,58E-01	1,82E-01	5,31E-01	3,39E-01	3,39E-01
820	120	775	0,03	0,97	1,89E-01	1,20E-01	5,19E-01	2,44E-01	2,44E-01
821	120	775	0,05	0,95	1,11E-01	6,26E-02	4,97E-01	1,49E-01	1,48E-01
822	120	775	0,1	0,9	4,52E-02	2,09E-02	4,54E-01	6,64E-02	6,63E-02
823	120	775	0,15	0,85	2,62E-02	1,07E-02	4,24E-01	4,07E-02	4,06E-02
824	120	775	0,2	0,8	1,82E-02	6,90E-03	4,03E-01	2,95E-02	2,94E-02
825	120	775	0,3	0,7	1,17E-02	4,16E-03	3,75E-01	2,00E-02	1,99E-02
826	120	775	0,5	0,5	7,68E-03	2,71E-03	3,46E-01	1,39E-02	1,38E-02
827	120	775	0,75	0,25	6,03E-03	2,22E-03	3,32E-01	1,14E-02	1,14E-02
828	120	775	1	0	5,30E-03	2,02E-03	3,28E-01	1,03E-02	1,03E-02
829	120	800	0	1	2,60E-01	3,65E-01	2,79E-01	4,93E-01	4,93E-01
830	120	800	0,01	0,99	1,85E-01	1,51E-01	2,70E-01	2,60E-01	2,60E-01

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
831	120	800	0,02	0,98	1,38E-01	9,52E-02	2,61E-01	1,78E-01	1,77E-01
832	120	800	0,03	0,97	1,07E-01	6,71E-02	2,53E-01	1,33E-01	1,33E-01
833	120	800	0,05	0,95	6,93E-02	3,91E-02	2,39E-01	8,64E-02	8,63E-02
834	120	800	0,1	0,9	3,18E-02	1,59E-02	2,13E-01	4,22E-02	4,21E-02
835	120	800	0,15	0,85	1,91E-02	8,92E-03	1,97E-01	2,66E-02	2,66E-02
836	120	800	0,2	0,8	1,34E-02	6,00E-03	1,85E-01	1,94E-02	1,93E-02
837	120	800	0,3	0,7	8,46E-03	3,65E-03	1,70E-01	1,29E-02	1,29E-02
838	120	800	0,5	0,5	5,31E-03	2,30E-03	1,55E-01	8,65E-03	8,62E-03
839	120	800	0,75	0,25	4,03E-03	1,81E-03	1,48E-01	6,92E-03	6,90E-03
840	120	800	1	0	3,46E-03	1,62E-03	1,46E-01	6,17E-03	6,15E-03
841	120	825	0	1	1,29E-01	1,68E-01	1,51E-01	2,36E-01	2,36E-01
842	120	825	0,01	0,99	9,73E-02	7,93E-02	1,44E-01	1,35E-01	1,35E-01
843	120	825	0,02	0,98	7,67E-02	5,37E-02	1,37E-01	9,66E-02	9,65E-02
844	120	825	0,03	0,97	6,23E-02	4,02E-02	1,32E-01	7,52E-02	7,52E-02
845	120	825	0,05	0,95	4,39E-02	2,59E-02	1,23E-01	5,17E-02	5,16E-02
846	120	825	0,1	0,9	2,31E-02	1,25E-02	1,07E-01	2,79E-02	2,78E-02
847	120	825	0,15	0,85	1,48E-02	7,82E-03	9,78E-02	1,86E-02	1,86E-02
848	120	825	0,2	0,8	1,07E-02	5,58E-03	9,11E-02	1,39E-02	1,39E-02
849	120	825	0,3	0,7	6,90E-03	3,57E-03	8,26E-02	9,40E-03	9,36E-03
850	120	825	0,5	0,5	4,26E-03	2,27E-03	7,41E-02	6,21E-03	6,18E-03
851	120	825	0,75	0,25	3,15E-03	1,76E-03	6,99E-02	4,85E-03	4,84E-03
852	120	825	1	0	2,65E-03	1,55E-03	6,86E-02	4,26E-03	4,24E-03
853	120	850	0	1	6,82E-02	8,23E-02	8,58E-02	1,19E-01	1,19E-01
854	120	850	0,01	0,99	5,37E-02	4,45E-02	8,07E-02	7,32E-02	7,31E-02
855	120	850	0,02	0,98	4,41E-02	3,23E-02	7,64E-02	5,44E-02	5,44E-02
856	120	850	0,03	0,97	3,72E-02	2,55E-02	7,28E-02	4,36E-02	4,36E-02
857	120	850	0,05	0,95	2,80E-02	1,79E-02	6,70E-02	3,14E-02	3,14E-02
858	120	850	0,1	0,9	1,67E-02	1,01E-02	5,74E-02	1,85E-02	1,85E-02
859	120	850	0,15	0,85	1,16E-02	6,95E-03	5,16E-02	1,31E-02	1,31E-02
860	120	850	0,2	0,8	8,83E-03	5,30E-03	4,76E-02	1,02E-02	1,02E-02
861	120	850	0,3	0,7	6,00E-03	3,66E-03	4,25E-02	7,22E-03	7,19E-03
862	120	850	0,5	0,5	3,81E-03	2,45E-03	3,75E-02	4,89E-03	4,88E-03
863	120	850	0,75	0,25	2,81E-03	1,93E-03	3,50E-02	3,83E-03	3,81E-03
864	120	850	1	0	2,34E-03	1,71E-03	3,41E-02	3,34E-03	3,32E-03
865	120	875	0	1	3,80E-02	4,26E-02	5,12E-02	6,34E-02	6,34E-02
866	120	875	0,01	0,99	3,10E-02	2,66E-02	4,76E-02	4,11E-02	4,11E-02
867	120	875	0,02	0,98	2,63E-02	2,06E-02	4,48E-02	3,15E-02	3,15E-02
868	120	875	0,03	0,97	2,28E-02	1,71E-02	4,24E-02	2,58E-02	2,58E-02
869	120	875	0,05	0,95	1,80E-02	1,29E-02	3,86E-02	1,93E-02	1,93E-02
870	120	875	0,1	0,9	1,18E-02	8,25E-03	3,25E-02	1,22E-02	1,22E-02
871	120	875	0,15	0,85	8,82E-03	6,18E-03	2,88E-02	9,06E-03	9,04E-03
872	120	875	0,2	0,8	7,07E-03	5,02E-03	2,63E-02	7,31E-03	7,29E-03
873	120	875	0,3	0,7	5,15E-03	3,77E-03	2,31E-02	5,44E-03	5,42E-03
874	120	875	0,5	0,5	3,50E-03	2,74E-03	2,00E-02	3,88E-03	3,87E-03
875	120	875	0,75	0,25	2,66E-03	2,24E-03	1,84E-02	3,11E-03	3,10E-03
876	120	875	1	0	2,24E-03	2,01E-03	1,79E-02	2,75E-03	2,74E-03
877	120	900	0	1	2,22E-02	2,33E-02	3,18E-02	3,52E-02	3,52E-02
878	120	900	0,01	0,99	1,86E-02	1,67E-02	2,94E-02	2,38E-02	2,38E-02
879	120	900	0,02	0,98	1,62E-02	1,38E-02	2,75E-02	1,86E-02	1,86E-02
880	120	900	0,03	0,97	1,43E-02	1,20E-02	2,59E-02	1,56E-02	1,56E-02
881	120	900	0,05	0,95	1,17E-02	9,71E-03	2,33E-02	1,20E-02	1,19E-02
882	120	900	0,1	0,9	8,24E-03	6,93E-03	1,93E-02	7,90E-03	7,89E-03
883	120	900	0,15	0,85	6,47E-03	5,59E-03	1,69E-02	6,09E-03	6,08E-03
884	120	900	0,2	0,8	5,40E-03	4,79E-03	1,52E-02	5,05E-03	5,04E-03
885	120	900	0,3	0,7	4,16E-03	3,88E-03	1,32E-02	3,91E-03	3,90E-03
886	120	900	0,5	0,5	3,04E-03	3,06E-03	1,12E-02	2,93E-03	2,92E-03
887	120	900	0,75	0,25	2,42E-03	2,63E-03	1,02E-02	2,42E-03	2,41E-03
888	120	900	1	0	2,09E-03	2,42E-03	9,81E-03	2,17E-03	2,17E-03
889	120	925	0	1	1,35E-02	1,34E-02	2,05E-02	2,03E-02	2,03E-02
890	120	925	0,01	0,99	1,16E-02	1,08E-02	1,89E-02	1,41E-02	1,41E-02
891	120	925	0,02	0,98	1,02E-02	9,45E-03	1,75E-02	1,12E-02	1,12E-02
892	120	925	0,03	0,97	9,20E-03	8,53E-03	1,64E-02	9,51E-03	9,51E-03
893	120	925	0,05	0,95	7,72E-03	7,33E-03	1,47E-02	7,44E-03	7,44E-03
894	120	925	0,1	0,9	5,69E-03	5,73E-03	1,20E-02	5,09E-03	5,08E-03

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
895	120	925	0,15	0,85	4,62E-03	4,89E-03	1,03E-02	4,02E-03	4,01E-03
896	120	925	0,2	0,8	3,96E-03	4,37E-03	9,26E-03	3,39E-03	3,39E-03
897	120	925	0,3	0,7	3,18E-03	3,75E-03	7,91E-03	2,70E-03	2,69E-03
898	120	925	0,5	0,5	2,44E-03	3,15E-03	6,60E-03	2,09E-03	2,08E-03
899	120	925	0,75	0,25	2,02E-03	2,81E-03	5,90E-03	1,77E-03	1,76E-03
900	120	925	1	0	1,79E-03	2,63E-03	5,63E-03	1,61E-03	1,61E-03
901	120	950	0	1	8,51E-03	8,09E-03	1,36E-02	1,21E-02	1,21E-02
902	120	950	0,01	0,99	7,43E-03	7,00E-03	1,25E-02	8,59E-03	8,59E-03
903	120	950	0,02	0,98	6,64E-03	6,35E-03	1,16E-02	6,92E-03	6,92E-03
904	120	950	0,03	0,97	6,03E-03	5,87E-03	1,08E-02	5,90E-03	5,90E-03
905	120	950	0,05	0,95	5,15E-03	5,21E-03	9,63E-03	4,68E-03	4,68E-03
906	120	950	0,1	0,9	3,91E-03	4,28E-03	7,73E-03	3,27E-03	3,27E-03
907	120	950	0,15	0,85	3,25E-03	3,76E-03	6,61E-03	2,62E-03	2,62E-03
908	120	950	0,2	0,8	2,83E-03	3,43E-03	5,86E-03	2,24E-03	2,24E-03
909	120	950	0,3	0,7	2,33E-03	3,02E-03	4,94E-03	1,81E-03	1,81E-03
910	120	950	0,5	0,5	1,85E-03	2,61E-03	4,04E-03	1,43E-03	1,43E-03
911	120	950	0,75	0,25	1,57E-03	2,38E-03	3,56E-03	1,23E-03	1,23E-03
912	120	950	1	0	1,42E-03	2,25E-03	3,36E-03	1,13E-03	1,13E-03
913	120	975	0	1	5,55E-03	5,10E-03	9,31E-03	7,40E-03	7,40E-03
914	120	975	0,01	0,99	4,89E-03	4,59E-03	8,51E-03	5,34E-03	5,34E-03
915	120	975	0,02	0,98	4,41E-03	4,24E-03	7,87E-03	4,35E-03	4,35E-03
916	120	975	0,03	0,97	4,04E-03	3,97E-03	7,34E-03	3,73E-03	3,73E-03
917	120	975	0,05	0,95	3,49E-03	3,59E-03	6,50E-03	2,98E-03	2,98E-03
918	120	975	0,1	0,9	2,70E-03	3,01E-03	5,17E-03	2,12E-03	2,12E-03
919	120	975	0,15	0,85	2,27E-03	2,68E-03	4,37E-03	1,71E-03	1,71E-03
920	120	975	0,2	0,8	2,00E-03	2,46E-03	3,85E-03	1,48E-03	1,47E-03
921	120	975	0,3	0,7	1,67E-03	2,19E-03	3,20E-03	1,21E-03	1,20E-03
922	120	975	0,5	0,5	1,35E-03	1,92E-03	2,57E-03	9,64E-04	9,62E-04
923	120	975	0,75	0,25	1,17E-03	1,77E-03	2,23E-03	8,34E-04	8,32E-04
924	120	975	1	0	1,07E-03	1,68E-03	2,09E-03	7,69E-04	7,68E-04
925	120	1000	0	1	3,72E-03	3,35E-03	6,48E-03	4,65E-03	4,65E-03
926	120	1000	0,01	0,99	3,31E-03	3,07E-03	5,92E-03	3,40E-03	3,40E-03
927	120	1000	0,02	0,98	3,00E-03	2,86E-03	5,47E-03	2,79E-03	2,79E-03
928	120	1000	0,03	0,97	2,76E-03	2,70E-03	5,09E-03	2,40E-03	2,40E-03
929	120	1000	0,05	0,95	2,40E-03	2,45E-03	4,50E-03	1,93E-03	1,93E-03
930	120	1000	0,1	0,9	1,88E-03	2,07E-03	3,55E-03	1,39E-03	1,39E-03
931	120	1000	0,15	0,85	1,59E-03	1,85E-03	2,99E-03	1,13E-03	1,13E-03
932	120	1000	0,2	0,8	1,41E-03	1,71E-03	2,61E-03	9,78E-04	9,76E-04
933	120	1000	0,3	0,7	1,19E-03	1,53E-03	2,15E-03	8,05E-04	8,03E-04
934	120	1000	0,5	0,5	9,71E-04	1,34E-03	1,70E-03	6,47E-04	6,45E-04
935	120	1000	0,75	0,25	8,44E-04	1,24E-03	1,45E-03	5,61E-04	5,60E-04
936	120	1000	1	0	7,75E-04	1,18E-03	1,34E-03	5,18E-04	5,17E-04
937	130	700	0	1	5,00E+00	5,00E+00	3,87E-07	5,00E+00	5,00E+00
938	130	700	0,01	0,99	3,77E+00	4,16E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
939	130	700	0,02	0,98	2,07E+00	2,02E+00	5,00E+00	2,83E+00	2,83E+00
940	130	700	0,03	0,97	1,26E+00	1,11E+00	5,00E+00	1,84E+00	1,84E+00
941	130	700	0,05	0,95	6,04E-01	4,10E-01	5,00E+00	1,00E+00	1,00E+00
942	130	700	0,1	0,9	2,23E-01	7,77E-02	5,00E+00	4,33E-01	4,33E-01
943	130	700	0,15	0,85	1,38E-01	3,51E-02	5,00E+00	2,81E-01	2,80E-01
944	130	700	0,2	0,8	1,04E-01	2,38E-02	5,00E+00	2,15E-01	2,15E-01
945	130	700	0,3	0,7	7,52E-02	1,66E-02	5,00E+00	1,58E-01	1,57E-01
946	130	700	0,5	0,5	5,59E-02	1,24E-02	5,00E+00	1,19E-01	1,19E-01
947	130	700	0,75	0,25	4,70E-02	1,06E-02	5,00E+00	1,03E-01	1,03E-01
948	130	700	1	0	4,28E-02	9,91E-03	5,00E+00	9,61E-02	9,61E-02
949	130	725	0	1	2,94E+00	5,00E+00	2,47E+00	5,00E+00	5,00E+00
950	130	725	0,01	0,99	1,60E+00	1,58E+00	2,59E+00	2,26E+00	2,25E+00
951	130	725	0,02	0,98	9,54E-01	8,09E-01	2,62E+00	1,30E+00	1,30E+00
952	130	725	0,03	0,97	6,12E-01	4,70E-01	2,62E+00	8,66E-01	8,65E-01
953	130	725	0,05	0,95	3,07E-01	1,93E-01	2,57E+00	4,80E-01	4,80E-01
954	130	725	0,1	0,9	1,12E-01	4,32E-02	2,45E+00	2,04E-01	2,03E-01
955	130	725	0,15	0,85	6,67E-02	1,96E-02	2,34E+00	1,28E-01	1,28E-01
956	130	725	0,2	0,8	4,88E-02	1,28E-02	2,26E+00	9,65E-02	9,64E-02
957	130	725	0,3	0,7	3,42E-02	8,45E-03	2,15E+00	6,92E-02	6,91E-02
958	130	725	0,5	0,5	2,47E-02	6,12E-03	2,02E+00	5,12E-02	5,11E-02

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
959	130	725	0,75	0,25	2,05E-02	5,23E-03	1,94E+00	4,38E-02	4,38E-02
960	130	725	1	0	1,85E-02	4,87E-03	1,92E+00	4,08E-02	4,07E-02
961	130	750	0	1	1,20E+00	1,96E+00	1,08E+00	2,45E+00	2,45E+00
962	130	750	0,01	0,99	7,24E-01	6,52E-01	1,11E+00	1,03E+00	1,03E+00
963	130	750	0,02	0,98	4,67E-01	3,55E-01	1,10E+00	6,26E-01	6,25E-01
964	130	750	0,03	0,97	3,18E-01	2,19E-01	1,09E+00	4,32E-01	4,32E-01
965	130	750	0,05	0,95	1,71E-01	1,01E-01	1,06E+00	2,48E-01	2,48E-01
966	130	750	0,1	0,9	6,44E-02	2,72E-02	9,86E-01	1,06E-01	1,06E-01
967	130	750	0,15	0,85	3,73E-02	1,28E-02	9,34E-01	6,57E-02	6,55E-02
968	130	750	0,2	0,8	2,66E-02	8,22E-03	8,95E-01	4,85E-02	4,84E-02
969	130	750	0,3	0,7	1,79E-02	5,15E-03	8,41E-01	3,39E-02	3,39E-02
970	130	750	0,5	0,5	1,24E-02	3,57E-03	7,85E-01	2,45E-02	2,45E-02
971	130	750	0,75	0,25	1,01E-02	3,00E-03	7,56E-01	2,07E-02	2,07E-02
972	130	750	1	0	9,00E-03	2,78E-03	7,47E-01	1,90E-02	1,90E-02
973	130	775	0	1	5,27E-01	7,97E-01	5,16E-01	1,03E+00	1,03E+00
974	130	775	0,01	0,99	3,45E-01	2,93E-01	5,12E-01	4,89E-01	4,89E-01
975	130	775	0,02	0,98	2,40E-01	1,71E-01	5,03E-01	3,15E-01	3,15E-01
976	130	775	0,03	0,97	1,75E-01	1,12E-01	4,92E-01	2,27E-01	2,26E-01
977	130	775	0,05	0,95	1,02E-01	5,77E-02	4,71E-01	1,37E-01	1,37E-01
978	130	775	0,1	0,9	4,13E-02	1,90E-02	4,30E-01	6,14E-02	6,13E-02
979	130	775	0,15	0,85	2,40E-02	9,61E-03	4,03E-01	3,78E-02	3,78E-02
980	130	775	0,2	0,8	1,68E-02	6,20E-03	3,83E-01	2,76E-02	2,75E-02
981	130	775	0,3	0,7	1,09E-02	3,76E-03	3,56E-01	1,88E-02	1,88E-02
982	130	775	0,5	0,5	7,20E-03	2,47E-03	3,29E-01	1,32E-02	1,31E-02
983	130	775	0,75	0,25	5,69E-03	2,03E-03	3,15E-01	1,09E-02	1,09E-02
984	130	775	1	0	5,01E-03	1,85E-03	3,11E-01	9,90E-03	9,89E-03
985	130	800	0	1	2,46E-01	3,46E-01	2,63E-01	4,64E-01	4,64E-01
986	130	800	0,01	0,99	1,73E-01	1,42E-01	2,55E-01	2,43E-01	2,43E-01
987	130	800	0,02	0,98	1,29E-01	8,89E-02	2,47E-01	1,65E-01	1,65E-01
988	130	800	0,03	0,97	9,90E-02	6,22E-02	2,39E-01	1,24E-01	1,24E-01
989	130	800	0,05	0,95	6,35E-02	3,58E-02	2,26E-01	7,97E-02	7,96E-02
990	130	800	0,1	0,9	2,87E-02	1,43E-02	2,02E-01	3,86E-02	3,86E-02
991	130	800	0,15	0,85	1,72E-02	7,92E-03	1,87E-01	2,44E-02	2,43E-02
992	130	800	0,2	0,8	1,20E-02	5,30E-03	1,76E-01	1,78E-02	1,77E-02
993	130	800	0,3	0,7	7,65E-03	3,23E-03	1,62E-01	1,19E-02	1,19E-02
994	130	800	0,5	0,5	4,85E-03	2,04E-03	1,47E-01	8,06E-03	8,04E-03
995	130	800	0,75	0,25	3,70E-03	1,62E-03	1,40E-01	6,49E-03	6,48E-03
996	130	800	1	0	3,20E-03	1,45E-03	1,38E-01	5,81E-03	5,80E-03
997	130	825	0	1	1,22E-01	1,59E-01	1,42E-01	2,22E-01	2,22E-01
998	130	825	0,01	0,99	9,11E-02	7,43E-02	1,35E-01	1,26E-01	1,26E-01
999	130	825	0,02	0,98	7,13E-02	4,99E-02	1,29E-01	8,99E-02	8,98E-02
1000	130	825	0,03	0,97	5,76E-02	3,71E-02	1,24E-01	6,98E-02	6,97E-02
1001	130	825	0,05	0,95	4,02E-02	2,36E-02	1,16E-01	4,76E-02	4,76E-02
1002	130	825	0,1	0,9	2,07E-02	1,12E-02	1,02E-01	2,55E-02	2,54E-02
1003	130	825	0,15	0,85	1,32E-02	6,90E-03	9,26E-02	1,69E-02	1,69E-02
1004	130	825	0,2	0,8	9,49E-03	4,88E-03	8,64E-02	1,26E-02	1,26E-02
1005	130	825	0,3	0,7	6,09E-03	3,10E-03	7,83E-02	8,53E-03	8,50E-03
1006	130	825	0,5	0,5	3,78E-03	1,96E-03	7,03E-02	5,67E-03	5,64E-03
1007	130	825	0,75	0,25	2,80E-03	1,53E-03	6,63E-02	4,45E-03	4,44E-03
1008	130	825	1	0	2,37E-03	1,35E-03	6,51E-02	3,92E-03	3,91E-03
1009	130	850	0	1	6,42E-02	7,78E-02	8,05E-02	1,12E-01	1,12E-01
1010	130	850	0,01	0,99	5,02E-02	4,15E-02	7,58E-02	6,83E-02	6,83E-02
1011	130	850	0,02	0,98	4,10E-02	2,99E-02	7,19E-02	5,06E-02	5,06E-02
1012	130	850	0,03	0,97	3,44E-02	2,35E-02	6,85E-02	4,05E-02	4,05E-02
1013	130	850	0,05	0,95	2,57E-02	1,63E-02	6,32E-02	2,90E-02	2,90E-02
1014	130	850	0,1	0,9	1,50E-02	9,01E-03	5,43E-02	1,69E-02	1,69E-02
1015	130	850	0,15	0,85	1,03E-02	6,12E-03	4,88E-02	1,19E-02	1,19E-02
1016	130	850	0,2	0,8	7,78E-03	4,62E-03	4,50E-02	9,25E-03	9,22E-03
1017	130	850	0,3	0,7	5,23E-03	3,15E-03	4,03E-02	6,51E-03	6,49E-03
1018	130	850	0,5	0,5	3,30E-03	2,09E-03	3,56E-02	4,40E-03	4,39E-03
1019	130	850	0,75	0,25	2,43E-03	1,64E-03	3,32E-02	3,45E-03	3,43E-03
1020	130	850	1	0	2,03E-03	1,45E-03	3,24E-02	3,01E-03	3,00E-03
1021	130	875	0	1	3,56E-02	4,02E-02	4,80E-02	5,95E-02	5,95E-02
1022	130	875	0,01	0,99	2,90E-02	2,47E-02	4,47E-02	3,84E-02	3,84E-02

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
1023	130	875	0,02	0,98	2,44E-02	1,90E-02	4,21E-02	2,93E-02	2,93E-02
1024	130	875	0,03	0,97	2,11E-02	1,56E-02	3,98E-02	2,40E-02	2,40E-02
1025	130	875	0,05	0,95	1,65E-02	1,17E-02	3,63E-02	1,79E-02	1,79E-02
1026	130	875	0,1	0,9	1,07E-02	7,34E-03	3,06E-02	1,12E-02	1,12E-02
1027	130	875	0,15	0,85	7,89E-03	5,43E-03	2,71E-02	8,28E-03	8,27E-03
1028	130	875	0,2	0,8	6,26E-03	4,36E-03	2,48E-02	6,66E-03	6,64E-03
1029	130	875	0,3	0,7	4,49E-03	3,23E-03	2,19E-02	4,93E-03	4,91E-03
1030	130	875	0,5	0,5	3,01E-03	2,32E-03	1,90E-02	3,50E-03	3,48E-03
1031	130	875	0,75	0,25	2,27E-03	1,88E-03	1,75E-02	2,80E-03	2,79E-03
1032	130	875	1	0	1,90E-03	1,68E-03	1,69E-02	2,46E-03	2,45E-03
1033	130	900	0	1	2,08E-02	2,19E-02	2,98E-02	3,30E-02	3,30E-02
1034	130	900	0,01	0,99	1,74E-02	1,55E-02	2,76E-02	2,22E-02	2,22E-02
1035	130	900	0,02	0,98	1,50E-02	1,27E-02	2,58E-02	1,74E-02	1,74E-02
1036	130	900	0,03	0,97	1,33E-02	1,09E-02	2,43E-02	1,45E-02	1,45E-02
1037	130	900	0,05	0,95	1,08E-02	8,74E-03	2,19E-02	1,11E-02	1,11E-02
1038	130	900	0,1	0,9	7,49E-03	6,13E-03	1,81E-02	7,31E-03	7,29E-03
1039	130	900	0,15	0,85	5,83E-03	4,88E-03	1,59E-02	5,61E-03	5,60E-03
1040	130	900	0,2	0,8	4,82E-03	4,14E-03	1,44E-02	4,64E-03	4,63E-03
1041	130	900	0,3	0,7	3,68E-03	3,31E-03	1,25E-02	3,57E-03	3,56E-03
1042	130	900	0,5	0,5	2,64E-03	2,58E-03	1,06E-02	2,66E-03	2,65E-03
1043	130	900	0,75	0,25	2,08E-03	2,20E-03	9,65E-03	2,19E-03	2,18E-03
1044	130	900	1	0	1,79E-03	2,01E-03	9,29E-03	1,96E-03	1,96E-03
1045	130	925	0	1	1,26E-02	1,26E-02	1,92E-02	1,90E-02	1,90E-02
1046	130	925	0,01	0,99	1,08E-02	1,00E-02	1,76E-02	1,32E-02	1,32E-02
1047	130	925	0,02	0,98	9,50E-03	8,69E-03	1,64E-02	1,05E-02	1,05E-02
1048	130	925	0,03	0,97	8,52E-03	7,80E-03	1,54E-02	8,88E-03	8,88E-03
1049	130	925	0,05	0,95	7,12E-03	6,64E-03	1,38E-02	6,94E-03	6,93E-03
1050	130	925	0,1	0,9	5,19E-03	5,12E-03	1,12E-02	4,73E-03	4,72E-03
1051	130	925	0,15	0,85	4,19E-03	4,33E-03	9,73E-03	3,72E-03	3,71E-03
1052	130	925	0,2	0,8	3,57E-03	3,85E-03	8,72E-03	3,14E-03	3,13E-03
1053	130	925	0,3	0,7	2,84E-03	3,27E-03	7,46E-03	2,48E-03	2,48E-03
1054	130	925	0,5	0,5	2,16E-03	2,72E-03	6,23E-03	1,91E-03	1,91E-03
1055	130	925	0,75	0,25	1,77E-03	2,41E-03	5,58E-03	1,62E-03	1,61E-03
1056	130	925	1	0	1,56E-03	2,25E-03	5,32E-03	1,47E-03	1,47E-03
1057	130	950	0	1	7,94E-03	7,59E-03	1,27E-02	1,13E-02	1,13E-02
1058	130	950	0,01	0,99	6,91E-03	6,51E-03	1,17E-02	8,04E-03	8,04E-03
1059	130	950	0,02	0,98	6,16E-03	5,88E-03	1,08E-02	6,48E-03	6,48E-03
1060	130	950	0,03	0,97	5,59E-03	5,42E-03	1,01E-02	5,52E-03	5,52E-03
1061	130	950	0,05	0,95	4,76E-03	4,79E-03	9,01E-03	4,38E-03	4,37E-03
1062	130	950	0,1	0,9	3,59E-03	3,90E-03	7,25E-03	3,05E-03	3,05E-03
1063	130	950	0,15	0,85	2,96E-03	3,41E-03	6,21E-03	2,44E-03	2,44E-03
1064	130	950	0,2	0,8	2,57E-03	3,10E-03	5,51E-03	2,08E-03	2,08E-03
1065	130	950	0,3	0,7	2,11E-03	2,72E-03	4,65E-03	1,68E-03	1,68E-03
1066	130	950	0,5	0,5	1,66E-03	2,34E-03	3,82E-03	1,32E-03	1,32E-03
1067	130	950	0,75	0,25	1,40E-03	2,12E-03	3,37E-03	1,13E-03	1,13E-03
1068	130	950	1	0	1,26E-03	2,00E-03	3,18E-03	1,04E-03	1,04E-03
1069	130	975	0	1	5,17E-03	4,78E-03	8,67E-03	6,93E-03	6,93E-03
1070	130	975	0,01	0,99	4,55E-03	4,28E-03	7,94E-03	5,01E-03	5,01E-03
1071	130	975	0,02	0,98	4,09E-03	3,94E-03	7,34E-03	4,07E-03	4,07E-03
1072	130	975	0,03	0,97	3,74E-03	3,69E-03	6,85E-03	3,50E-03	3,49E-03
1073	130	975	0,05	0,95	3,22E-03	3,32E-03	6,07E-03	2,80E-03	2,79E-03
1074	130	975	0,1	0,9	2,48E-03	2,77E-03	4,84E-03	1,98E-03	1,98E-03
1075	130	975	0,15	0,85	2,08E-03	2,46E-03	4,10E-03	1,60E-03	1,60E-03
1076	130	975	0,2	0,8	1,83E-03	2,26E-03	3,61E-03	1,38E-03	1,38E-03
1077	130	975	0,3	0,7	1,52E-03	2,01E-03	3,01E-03	1,12E-03	1,12E-03
1078	130	975	0,5	0,5	1,23E-03	1,76E-03	2,43E-03	8,97E-04	8,95E-04
1079	130	975	0,75	0,25	1,05E-03	1,61E-03	2,11E-03	7,75E-04	7,74E-04
1080	130	975	1	0	9,57E-04	1,53E-03	1,97E-03	7,14E-04	7,13E-04
1081	130	1000	0	1	3,46E-03	3,14E-03	6,03E-03	4,36E-03	4,36E-03
1082	130	1000	0,01	0,99	3,08E-03	2,87E-03	5,52E-03	3,19E-03	3,19E-03
1083	130	1000	0,02	0,98	2,79E-03	2,67E-03	5,10E-03	2,61E-03	2,61E-03
1084	130	1000	0,03	0,97	2,56E-03	2,51E-03	4,75E-03	2,25E-03	2,25E-03
1085	130	1000	0,05	0,95	2,22E-03	2,28E-03	4,20E-03	1,81E-03	1,81E-03
1086	130	1000	0,1	0,9	1,73E-03	1,92E-03	3,32E-03	1,30E-03	1,30E-03

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
1087	130	1000	0,15	0,85	1,46E-03	1,72E-03	2,79E-03	1,06E-03	1,06E-03
1088	130	1000	0,2	0,8	1,29E-03	1,58E-03	2,45E-03	9,16E-04	9,14E-04
1089	130	1000	0,3	0,7	1,09E-03	1,41E-03	2,02E-03	7,52E-04	7,51E-04
1090	130	1000	0,5	0,5	8,87E-04	1,24E-03	1,60E-03	6,04E-04	6,03E-04
1091	130	1000	0,75	0,25	7,69E-04	1,14E-03	1,37E-03	5,24E-04	5,23E-04
1092	130	1000	1	0	7,04E-04	1,09E-03	1,27E-03	4,84E-04	4,83E-04
1093	140	700	0	1	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00	5,00E+00
1094	140	700	0,01	0,99	3,57E+00	3,98E+00	5,00E+00	4,89E+00	4,88E+00
1095	140	700	0,02	0,98	1,95E+00	1,93E+00	5,00E+00	2,67E+00	2,67E+00
1096	140	700	0,03	0,97	1,19E+00	1,06E+00	5,00E+00	1,73E+00	1,73E+00
1097	140	700	0,05	0,95	5,74E-01	3,90E-01	5,00E+00	9,50E-01	9,49E-01
1098	140	700	0,1	0,9	2,15E-01	7,39E-02	5,00E+00	4,16E-01	4,16E-01
1099	140	700	0,15	0,85	1,33E-01	3,36E-02	5,00E+00	2,71E-01	2,71E-01
1100	140	700	0,2	0,8	1,01E-01	2,29E-02	5,00E+00	2,09E-01	2,08E-01
1101	140	700	0,3	0,7	7,36E-02	1,60E-02	5,00E+00	1,53E-01	1,53E-01
1102	140	700	0,5	0,5	5,48E-02	1,19E-02	5,00E+00	1,16E-01	1,16E-01
1103	140	700	0,75	0,25	4,62E-02	1,03E-02	5,00E+00	1,01E-01	1,00E-01
1104	140	700	1	0	4,20E-02	9,55E-03	5,00E+00	9,40E-02	9,40E-02
1105	140	725	0	1	2,80E+00	4,92E+00	2,35E+00	5,00E+00	5,00E+00
1106	140	725	0,01	0,99	1,52E+00	1,51E+00	2,47E+00	2,12E+00	2,12E+00
1107	140	725	0,02	0,98	8,99E-01	7,71E-01	2,50E+00	1,22E+00	1,22E+00
1108	140	725	0,03	0,97	5,75E-01	4,47E-01	2,50E+00	8,13E-01	8,12E-01
1109	140	725	0,05	0,95	2,89E-01	1,82E-01	2,46E+00	4,52E-01	4,52E-01
1110	140	725	0,1	0,9	1,07E-01	4,05E-02	2,34E+00	1,94E-01	1,94E-01
1111	140	725	0,15	0,85	6,38E-02	1,84E-02	2,24E+00	1,23E-01	1,23E-01
1112	140	725	0,2	0,8	4,70E-02	1,21E-02	2,16E+00	9,30E-02	9,30E-02
1113	140	725	0,3	0,7	3,31E-02	8,04E-03	2,05E+00	6,70E-02	6,70E-02
1114	140	725	0,5	0,5	2,40E-02	5,84E-03	1,92E+00	4,98E-02	4,98E-02
1115	140	725	0,75	0,25	2,00E-02	4,99E-03	1,85E+00	4,27E-02	4,27E-02
1116	140	725	1	0	1,81E-02	4,64E-03	1,83E+00	3,98E-02	3,98E-02
1117	140	750	0	1	1,14E+00	1,87E+00	1,03E+00	2,32E+00	2,32E+00
1118	140	750	0,01	0,99	6,84E-01	6,21E-01	1,05E+00	9,66E-01	9,66E-01
1119	140	750	0,02	0,98	4,39E-01	3,37E-01	1,05E+00	5,86E-01	5,86E-01
1120	140	750	0,03	0,97	2,98E-01	2,07E-01	1,04E+00	4,04E-01	4,04E-01
1121	140	750	0,05	0,95	1,59E-01	9,43E-02	1,01E+00	2,32E-01	2,32E-01
1122	140	750	0,1	0,9	6,03E-02	2,51E-02	9,41E-01	1,00E-01	9,99E-02
1123	140	750	0,15	0,85	3,52E-02	1,18E-02	8,91E-01	6,24E-02	6,23E-02
1124	140	750	0,2	0,8	2,52E-02	7,62E-03	8,54E-01	4,63E-02	4,62E-02
1125	140	750	0,3	0,7	1,71E-02	4,81E-03	8,03E-01	3,26E-02	3,26E-02
1126	140	750	0,5	0,5	1,19E-02	3,35E-03	7,49E-01	2,37E-02	2,36E-02
1127	140	750	0,75	0,25	9,71E-03	2,82E-03	7,21E-01	2,00E-02	2,00E-02
1128	140	750	1	0	8,70E-03	2,61E-03	7,12E-01	1,85E-02	1,85E-02
1129	140	775	0	1	5,01E-01	7,59E-01	4,89E-01	9,78E-01	9,78E-01
1130	140	775	0,01	0,99	3,26E-01	2,78E-01	4,86E-01	4,60E-01	4,59E-01
1131	140	775	0,02	0,98	2,25E-01	1,61E-01	4,78E-01	2,95E-01	2,95E-01
1132	140	775	0,03	0,97	1,63E-01	1,05E-01	4,68E-01	2,12E-01	2,11E-01
1133	140	775	0,05	0,95	9,44E-02	5,37E-02	4,48E-01	1,28E-01	1,28E-01
1134	140	775	0,1	0,9	3,81E-02	1,73E-02	4,10E-01	5,72E-02	5,71E-02
1135	140	775	0,15	0,85	2,22E-02	8,74E-03	3,84E-01	3,55E-02	3,54E-02
1136	140	775	0,2	0,8	1,56E-02	5,64E-03	3,65E-01	2,60E-02	2,59E-02
1137	140	775	0,3	0,7	1,02E-02	3,44E-03	3,40E-01	1,78E-02	1,78E-02
1138	140	775	0,5	0,5	6,81E-03	2,27E-03	3,14E-01	1,26E-02	1,26E-02
1139	140	775	0,75	0,25	5,41E-03	1,87E-03	3,00E-01	1,04E-02	1,04E-02
1140	140	775	1	0	4,78E-03	1,71E-03	2,97E-01	9,53E-03	9,52E-03
1141	140	800	0	1	2,33E-01	3,29E-01	2,48E-01	4,39E-01	4,39E-01
1142	140	800	0,01	0,99	1,63E-01	1,34E-01	2,42E-01	2,28E-01	2,28E-01
1143	140	800	0,02	0,98	1,20E-01	8,36E-02	2,34E-01	1,55E-01	1,55E-01
1144	140	800	0,03	0,97	9,21E-02	5,81E-02	2,27E-01	1,15E-01	1,15E-01
1145	140	800	0,05	0,95	5,85E-02	3,31E-02	2,15E-01	7,39E-02	7,38E-02
1146	140	800	0,1	0,9	2,62E-02	1,29E-02	1,92E-01	3,57E-02	3,56E-02
1147	140	800	0,15	0,85	1,56E-02	7,12E-03	1,78E-01	2,25E-02	2,25E-02
1148	140	800	0,2	0,8	1,10E-02	4,74E-03	1,68E-01	1,65E-02	1,64E-02
1149	140	800	0,3	0,7	7,00E-03	2,88E-03	1,54E-01	1,11E-02	1,11E-02
1150	140	800	0,5	0,5	4,48E-03	1,83E-03	1,41E-01	7,58E-03	7,56E-03

11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
1151	140	800	0,75	0,25	3,44E-03	1,46E-03	1,34E-01	6,14E-03	6,13E-03
1152	140	800	1	0	2,99E-03	1,32E-03	1,32E-01	5,52E-03	5,51E-03
1153	140	825	0	1	1,16E-01	1,51E-01	1,34E-01	2,09E-01	2,09E-01
1154	140	825	0,01	0,99	8,57E-02	6,99E-02	1,28E-01	1,19E-01	1,18E-01
1155	140	825	0,02	0,98	6,67E-02	4,67E-02	1,23E-01	8,41E-02	8,41E-02
1156	140	825	0,03	0,97	5,36E-02	3,45E-02	1,18E-01	6,51E-02	6,50E-02
1157	140	825	0,05	0,95	3,70E-02	2,17E-02	1,10E-01	4,42E-02	4,41E-02
1158	140	825	0,1	0,9	1,88E-02	1,01E-02	9,66E-02	2,34E-02	2,34E-02
1159	140	825	0,15	0,85	1,19E-02	6,15E-03	8,80E-02	1,55E-02	1,54E-02
1160	140	825	0,2	0,8	8,51E-03	4,32E-03	8,22E-02	1,15E-02	1,15E-02
1161	140	825	0,3	0,7	5,46E-03	2,73E-03	7,46E-02	7,82E-03	7,79E-03
1162	140	825	0,5	0,5	3,40E-03	1,73E-03	6,70E-02	5,22E-03	5,20E-03
1163	140	825	0,75	0,25	2,54E-03	1,34E-03	6,32E-02	4,13E-03	4,12E-03
1164	140	825	1	0	2,16E-03	1,19E-03	6,20E-02	3,65E-03	3,64E-03
1165	140	850	0	1	6,07E-02	7,38E-02	7,60E-02	1,06E-01	1,06E-01
1166	140	850	0,01	0,99	4,72E-02	3,90E-02	7,16E-02	6,42E-02	6,42E-02
1167	140	850	0,02	0,98	3,83E-02	2,79E-02	6,80E-02	4,74E-02	4,74E-02
1168	140	850	0,03	0,97	3,20E-02	2,17E-02	6,49E-02	3,78E-02	3,78E-02
1169	140	850	0,05	0,95	2,37E-02	1,49E-02	5,98E-02	2,70E-02	2,69E-02
1170	140	850	0,1	0,9	1,36E-02	8,11E-03	5,15E-02	1,56E-02	1,56E-02
1171	140	850	0,15	0,85	9,26E-03	5,44E-03	4,63E-02	1,09E-02	1,09E-02
1172	140	850	0,2	0,8	6,93E-03	4,07E-03	4,28E-02	8,44E-03	8,41E-03
1173	140	850	0,3	0,7	4,62E-03	2,75E-03	3,83E-02	5,92E-03	5,90E-03
1174	140	850	0,5	0,5	2,90E-03	1,81E-03	3,38E-02	4,00E-03	3,99E-03
1175	140	850	0,75	0,25	2,14E-03	1,42E-03	3,16E-02	3,14E-03	3,13E-03
1176	140	850	1	0	1,79E-03	1,25E-03	3,08E-02	2,75E-03	2,74E-03
1177	140	875	0	1	3,36E-02	3,81E-02	4,52E-02	5,60E-02	5,60E-02
1178	140	875	0,01	0,99	2,72E-02	2,31E-02	4,22E-02	3,60E-02	3,60E-02
1179	140	875	0,02	0,98	2,28E-02	1,76E-02	3,97E-02	2,75E-02	2,75E-02
1180	140	875	0,03	0,97	1,96E-02	1,44E-02	3,76E-02	2,25E-02	2,24E-02
1181	140	875	0,05	0,95	1,53E-02	1,07E-02	3,43E-02	1,67E-02	1,66E-02
1182	140	875	0,1	0,9	9,74E-03	6,59E-03	2,90E-02	1,04E-02	1,03E-02
1183	140	875	0,15	0,85	7,10E-03	4,82E-03	2,57E-02	7,62E-03	7,60E-03
1184	140	875	0,2	0,8	5,59E-03	3,84E-03	2,35E-02	6,11E-03	6,09E-03
1185	140	875	0,3	0,7	3,97E-03	2,81E-03	2,08E-02	4,49E-03	4,48E-03
1186	140	875	0,5	0,5	2,62E-03	1,99E-03	1,80E-02	3,17E-03	3,16E-03
1187	140	875	0,75	0,25	1,96E-03	1,61E-03	1,66E-02	2,53E-03	2,52E-03
1188	140	875	1	0	1,64E-03	1,43E-03	1,61E-02	2,23E-03	2,22E-03
1189	140	900	0	1	1,95E-02	2,08E-02	2,80E-02	3,11E-02	3,11E-02
1190	140	900	0,01	0,99	1,63E-02	1,44E-02	2,59E-02	2,09E-02	2,09E-02
1191	140	900	0,02	0,98	1,40E-02	1,17E-02	2,43E-02	1,63E-02	1,63E-02
1192	140	900	0,03	0,97	1,23E-02	1,00E-02	2,29E-02	1,36E-02	1,36E-02
1193	140	900	0,05	0,95	9,99E-03	7,94E-03	2,07E-02	1,04E-02	1,04E-02
1194	140	900	0,1	0,9	6,85E-03	5,48E-03	1,72E-02	6,79E-03	6,78E-03
1195	140	900	0,15	0,85	5,28E-03	4,31E-03	1,50E-02	5,19E-03	5,18E-03
1196	140	900	0,2	0,8	4,34E-03	3,63E-03	1,36E-02	4,28E-03	4,27E-03
1197	140	900	0,3	0,7	3,27E-03	2,87E-03	1,18E-02	3,28E-03	3,27E-03
1198	140	900	0,5	0,5	2,32E-03	2,20E-03	1,01E-02	2,43E-03	2,42E-03
1199	140	900	0,75	0,25	1,81E-03	1,86E-03	9,18E-03	2,00E-03	1,99E-03
1200	140	900	1	0	1,54E-03	1,70E-03	8,83E-03	1,78E-03	1,78E-03
1201	140	925	0	1	1,18E-02	1,19E-02	1,80E-02	1,79E-02	1,79E-02
1202	140	925	0,01	0,99	1,01E-02	9,33E-03	1,66E-02	1,24E-02	1,24E-02
1203	140	925	0,02	0,98	8,87E-03	8,04E-03	1,54E-02	9,88E-03	9,87E-03
1204	140	925	0,03	0,97	7,93E-03	7,17E-03	1,45E-02	8,34E-03	8,33E-03
1205	140	925	0,05	0,95	6,60E-03	6,05E-03	1,30E-02	6,50E-03	6,49E-03
1206	140	925	0,1	0,9	4,77E-03	4,60E-03	1,06E-02	4,41E-03	4,41E-03
1207	140	925	0,15	0,85	3,83E-03	3,86E-03	9,20E-03	3,46E-03	3,46E-03
1208	140	925	0,2	0,8	3,24E-03	3,40E-03	8,25E-03	2,91E-03	2,91E-03
1209	140	925	0,3	0,7	2,56E-03	2,86E-03	7,07E-03	2,30E-03	2,29E-03
1210	140	925	0,5	0,5	1,92E-03	2,36E-03	5,91E-03	1,76E-03	1,76E-03
1211	140	925	0,75	0,25	1,56E-03	2,08E-03	5,30E-03	1,49E-03	1,48E-03
1212	140	925	1	0	1,36E-03	1,93E-03	5,06E-03	1,35E-03	1,35E-03
1213	140	950	0	1	7,45E-03	7,17E-03	1,19E-02	1,07E-02	1,07E-02
1214	140	950	0,01	0,99	6,47E-03	6,09E-03	1,10E-02	7,57E-03	7,57E-03

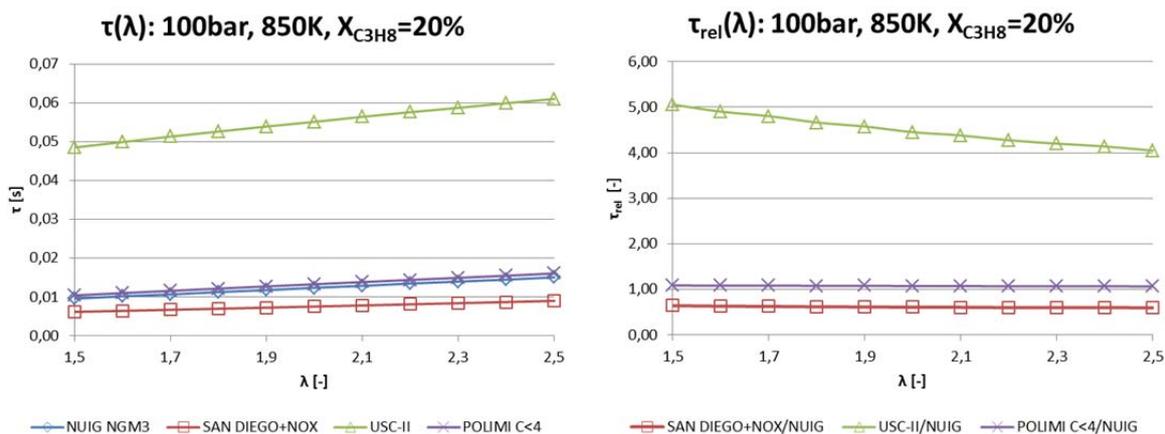
11 – Anhang

Run	p [bar]	T [K]	X _{C₃H₈}	X _{CH₄}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<5	POLIMI C<4
1215	140	950	0,02	0,98	5,75E-03	5,47E-03	1,02E-02	6,10E-03	6,09E-03
1216	140	950	0,03	0,97	5,21E-03	5,02E-03	9,51E-03	5,19E-03	5,19E-03
1217	140	950	0,05	0,95	4,42E-03	4,41E-03	8,48E-03	4,11E-03	4,11E-03
1218	140	950	0,1	0,9	3,31E-03	3,57E-03	6,83E-03	2,86E-03	2,86E-03
1219	140	950	0,15	0,85	2,72E-03	3,11E-03	5,86E-03	2,28E-03	2,28E-03
1220	140	950	0,2	0,8	2,35E-03	2,81E-03	5,21E-03	1,95E-03	1,94E-03
1221	140	950	0,3	0,7	1,92E-03	2,45E-03	4,40E-03	1,57E-03	1,56E-03
1222	140	950	0,5	0,5	1,49E-03	2,10E-03	3,61E-03	1,23E-03	1,23E-03
1223	140	950	0,75	0,25	1,25E-03	1,90E-03	3,19E-03	1,05E-03	1,05E-03
1224	140	950	1	0	1,12E-03	1,79E-03	3,02E-03	9,65E-04	9,63E-04
1225	140	975	0	1	4,84E-03	4,51E-03	8,12E-03	6,53E-03	6,53E-03
1226	140	975	0,01	0,99	4,25E-03	4,01E-03	7,44E-03	4,72E-03	4,72E-03
1227	140	975	0,02	0,98	3,82E-03	3,68E-03	6,89E-03	3,84E-03	3,84E-03
1228	140	975	0,03	0,97	3,49E-03	3,44E-03	6,43E-03	3,29E-03	3,29E-03
1229	140	975	0,05	0,95	3,00E-03	3,08E-03	5,70E-03	2,63E-03	2,63E-03
1230	140	975	0,1	0,9	2,30E-03	2,57E-03	4,55E-03	1,86E-03	1,86E-03
1231	140	975	0,15	0,85	1,92E-03	2,27E-03	3,86E-03	1,50E-03	1,50E-03
1232	140	975	0,2	0,8	1,68E-03	2,08E-03	3,41E-03	1,29E-03	1,29E-03
1233	140	975	0,3	0,7	1,40E-03	1,84E-03	2,85E-03	1,05E-03	1,05E-03
1234	140	975	0,5	0,5	1,12E-03	1,61E-03	2,30E-03	8,38E-04	8,36E-04
1235	140	975	0,75	0,25	9,54E-04	1,47E-03	2,00E-03	7,24E-04	7,22E-04
1236	140	975	1	0	8,64E-04	1,40E-03	1,87E-03	6,66E-04	6,65E-04
1237	140	1000	0	1	3,24E-03	2,95E-03	5,65E-03	4,10E-03	4,10E-03
1238	140	1000	0,01	0,99	2,87E-03	2,69E-03	5,17E-03	3,01E-03	3,01E-03
1239	140	1000	0,02	0,98	2,60E-03	2,50E-03	4,78E-03	2,46E-03	2,46E-03
1240	140	1000	0,03	0,97	2,38E-03	2,35E-03	4,45E-03	2,12E-03	2,12E-03
1241	140	1000	0,05	0,95	2,07E-03	2,13E-03	3,94E-03	1,71E-03	1,71E-03
1242	140	1000	0,1	0,9	1,61E-03	1,79E-03	3,12E-03	1,22E-03	1,22E-03
1243	140	1000	0,15	0,85	1,36E-03	1,60E-03	2,63E-03	9,96E-04	9,94E-04
1244	140	1000	0,2	0,8	1,20E-03	1,47E-03	2,30E-03	8,61E-04	8,59E-04
1245	140	1000	0,3	0,7	1,00E-03	1,31E-03	1,90E-03	7,07E-04	7,05E-04
1246	140	1000	0,5	0,5	8,14E-04	1,15E-03	1,51E-03	5,67E-04	5,66E-04
1247	140	1000	0,75	0,25	7,03E-04	1,06E-03	1,30E-03	4,91E-04	4,91E-04
1248	140	1000	1	0	6,42E-04	1,01E-03	1,20E-03	4,53E-04	4,53E-04

11.2.1 Abhängigkeit der Zündverzugszeit τ [s] von der Luftzahl λ [-]

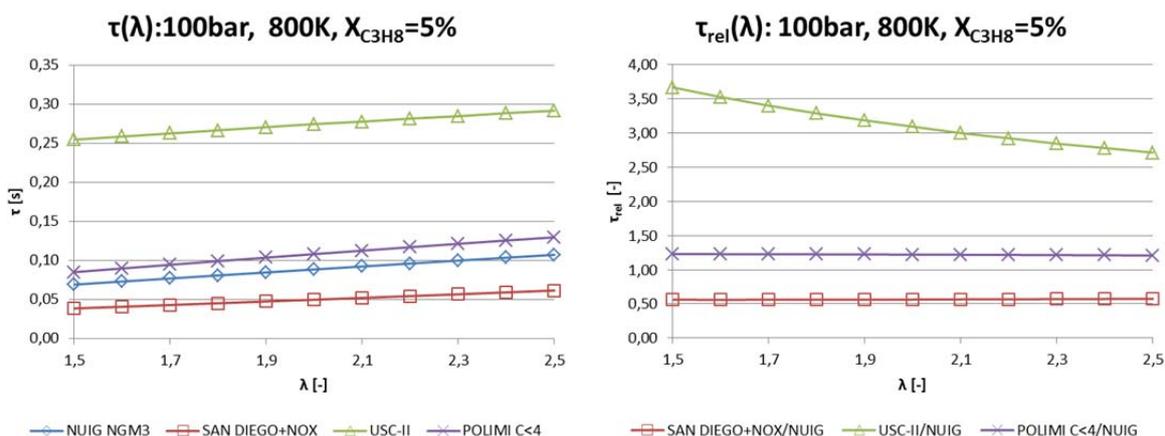
100bar, 850K, X_{C₃H₈}=20%

λ					SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4
	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4	/ NUIG	/ NUIG	/ NUIG
1,5	9,61E-03	6,19E-03	4,86E-02	1,04E-02	0,64	5,06	1,09
1,6	1,02E-02	6,46E-03	5,00E-02	1,10E-02	0,63	4,90	1,08
1,7	1,07E-02	6,73E-03	5,14E-02	1,16E-02	0,63	4,80	1,09
1,8	1,13E-02	7,00E-03	5,27E-02	1,22E-02	0,62	4,66	1,08
1,9	1,18E-02	7,28E-03	5,40E-02	1,28E-02	0,62	4,58	1,08
2,0	1,24E-02	7,56E-03	5,52E-02	1,33E-02	0,61	4,45	1,07
2,1	1,29E-02	7,85E-03	5,65E-02	1,39E-02	0,61	4,38	1,08
2,2	1,35E-02	8,14E-03	5,77E-02	1,44E-02	0,60	4,27	1,07
2,3	1,40E-02	8,43E-03	5,88E-02	1,50E-02	0,60	4,20	1,07
2,4	1,45E-02	8,73E-03	6,00E-02	1,55E-02	0,60	4,14	1,07
2,5	1,51E-02	9,03E-03	6,11E-02	1,61E-02	0,60	4,05	1,07



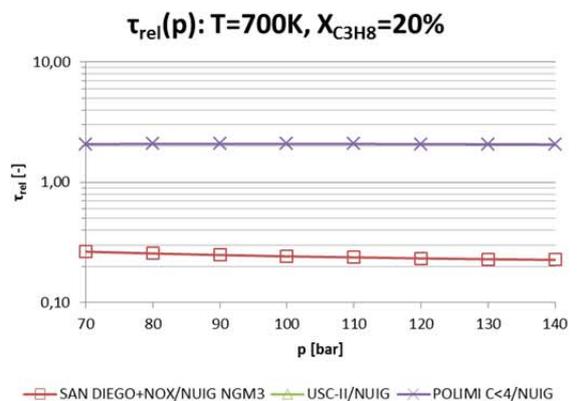
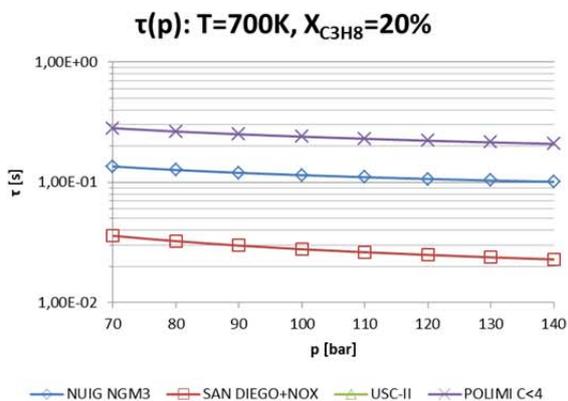
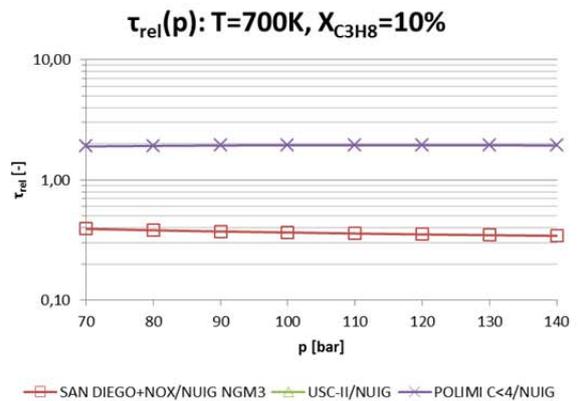
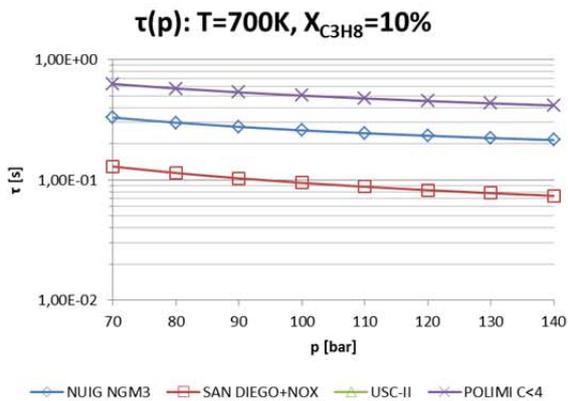
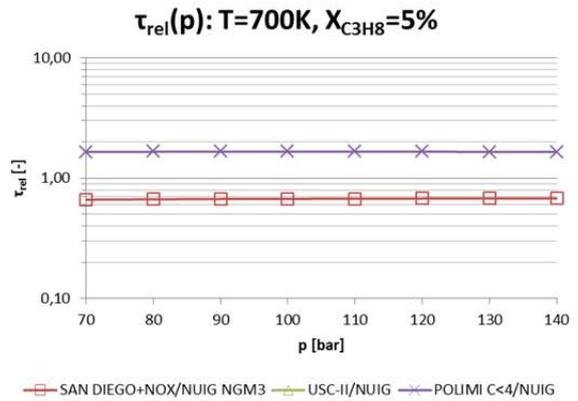
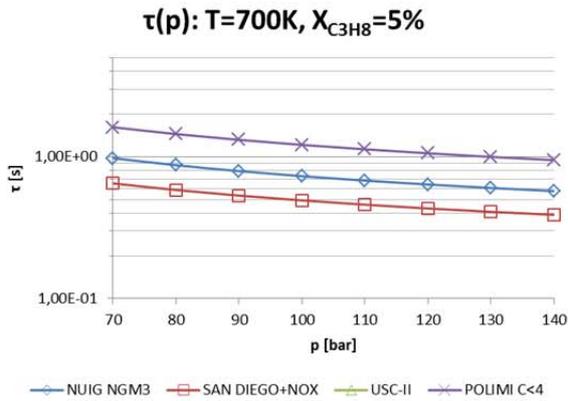
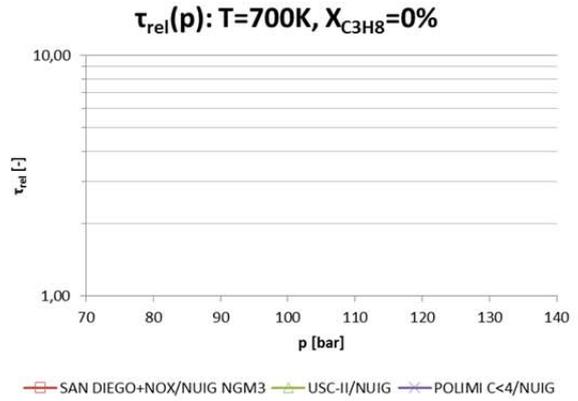
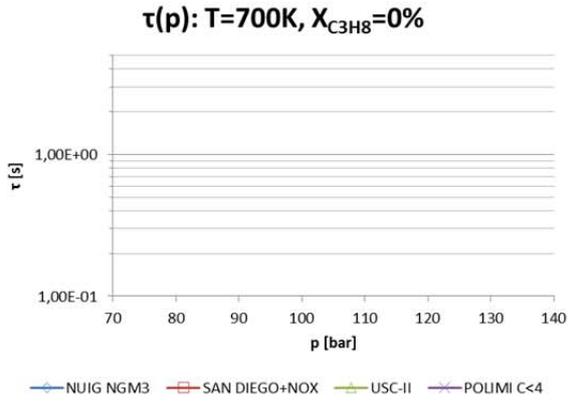
100bar, 800K, $X_{\text{C}_3\text{H}_8}=5\%$

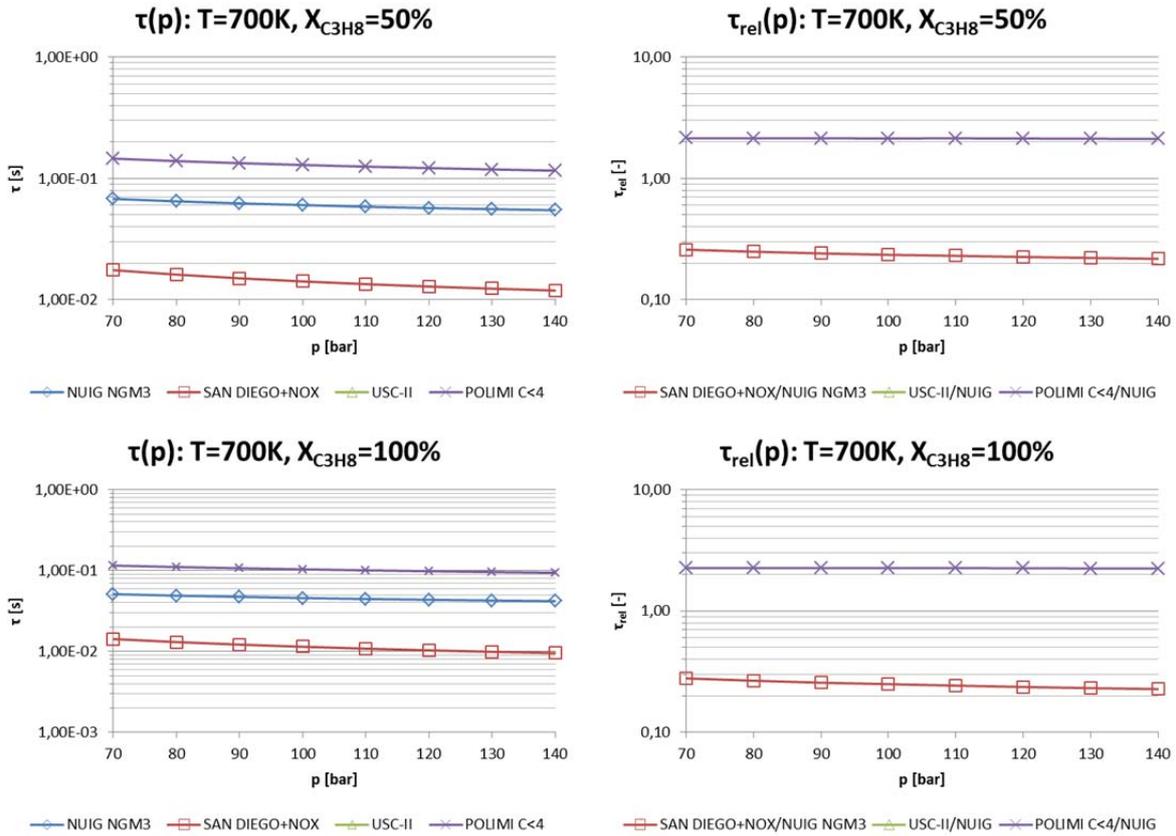
λ	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX		USC-II	POLIMI C<4		SAN DIEGO+NOX / NUIG		USC-II / NUIG		POLIMI C<4 / NUIG	
1,5	6,95E-02		3,90E-02	2,55E-01		8,54E-02		0,56		3,67		1,23
1,6	7,35E-02		4,11E-02	2,59E-01		9,02E-02		0,56		3,53		1,23
1,7	7,74E-02		4,34E-02	2,63E-01		9,49E-02		0,56		3,40		1,23
1,8	8,12E-02		4,56E-02	2,67E-01		9,95E-02		0,56		3,29		1,22
1,9	8,51E-02		4,79E-02	2,71E-01		1,04E-01		0,56		3,19		1,22
2,0	8,89E-02		5,01E-02	2,75E-01		1,09E-01		0,56		3,09		1,22
2,1	9,27E-02		5,25E-02	2,78E-01		1,13E-01		0,57		3,00		1,22
2,2	9,65E-02		5,48E-02	2,82E-01		1,17E-01		0,57		2,92		1,22
2,3	1,00E-01		5,71E-02	2,85E-01		1,22E-01		0,57		2,84		1,21
2,4	1,04E-01		5,95E-02	2,89E-01		1,26E-01		0,57		2,78		1,21
2,5	1,08E-01		6,19E-02	2,92E-01		1,30E-01		0,58		2,71		1,21



11.2.2 Druckabhängigkeit der Zündverzugszeit τ [s] $T = 700K$

p [bar]	X _{C₃H₈}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4	SAN DIEGO+NOX / NUIG	USC-II / NUIG	POLIMI C<4 / NUIG
70	0							
80	0							
90	0							
100	0							
110	0							
120	0							
130	0							
140	0							
70	0,05	9,79E-01	6,50E-01		1,62E+00	0,66		1,65
80	0,05	8,74E-01	5,84E-01		1,45E+00	0,67		1,66
90	0,05	7,94E-01	5,34E-01		1,32E+00	0,67		1,66
100	0,05	7,31E-01	4,93E-01		1,22E+00	0,67		1,66
110	0,05	6,81E-01	4,60E-01		1,13E+00	0,68		1,66
120	0,05	6,39E-01	4,33E-01		1,06E+00	0,68		1,66
130	0,05	6,04E-01	4,10E-01		1,00E+00	0,68		1,66
140	0,05	5,74E-01	3,90E-01		9,49E-01	0,68		1,65
70	0,1	3,30E-01	1,29E-01		6,28E-01	0,39		1,90
80	0,1	3,00E-01	1,14E-01		5,76E-01	0,38		1,92
90	0,1	2,77E-01	1,03E-01		5,35E-01	0,37		1,94
100	0,1	2,58E-01	9,47E-02		5,03E-01	0,37		1,94
110	0,1	2,45E-01	8,79E-02		4,76E-01	0,36		1,94
120	0,1	2,33E-01	8,23E-02		4,53E-01	0,35		1,94
130	0,1	2,23E-01	7,77E-02		4,33E-01	0,35		1,94
140	0,1	2,15E-01	7,39E-02		4,16E-01	0,34		1,94
70	0,2	1,36E-01	3,60E-02		2,82E-01	0,27		2,08
80	0,2	1,27E-01	3,25E-02		2,64E-01	0,26		2,09
90	0,2	1,20E-01	2,99E-02		2,51E-01	0,25		2,09
100	0,2	1,15E-01	2,78E-02		2,39E-01	0,24		2,09
110	0,2	1,10E-01	2,63E-02		2,30E-01	0,24		2,09
120	0,2	1,07E-01	2,50E-02		2,22E-01	0,23		2,08
130	0,2	1,04E-01	2,38E-02		2,15E-01	0,23		2,07
140	0,2	1,01E-01	2,29E-02		2,08E-01	0,23		2,06
70	0,5	6,79E-02	1,76E-02		1,46E-01	0,26		2,15
80	0,5	6,48E-02	1,61E-02		1,39E-01	0,25		2,15
90	0,5	6,24E-02	1,51E-02		1,34E-01	0,24		2,14
100	0,5	6,04E-02	1,42E-02		1,29E-01	0,23		2,14
110	0,5	5,84E-02	1,35E-02		1,25E-01	0,23		2,14
120	0,5	5,71E-02	1,29E-02		1,22E-01	0,23		2,13
130	0,5	5,59E-02	1,24E-02		1,19E-01	0,22		2,13
140	0,5	5,48E-02	1,19E-02		1,16E-01	0,22		2,12
70	1	5,11E-02	1,43E-02		1,15E-01	0,28		2,26
80	1	4,90E-02	1,31E-02		1,11E-01	0,27		2,26
90	1	4,74E-02	1,22E-02		1,07E-01	0,26		2,26
100	1	4,58E-02	1,14E-02		1,04E-01	0,25		2,26
110	1	4,46E-02	1,08E-02		1,01E-01	0,24		2,26
120	1	4,36E-02	1,03E-02		9,83E-02	0,24		2,25
130	1	4,28E-02	9,91E-03		9,61E-02	0,23		2,25
140	1	4,20E-02	9,55E-03		9,40E-02	0,23		2,24



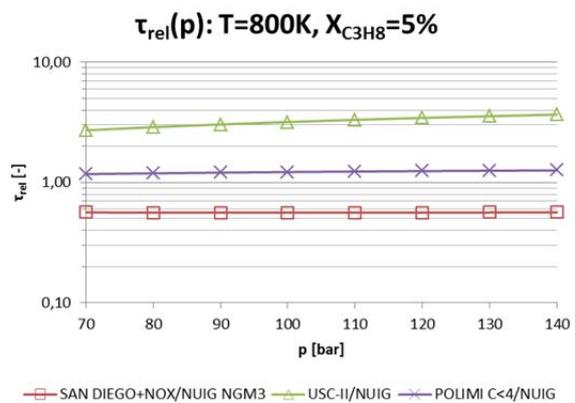
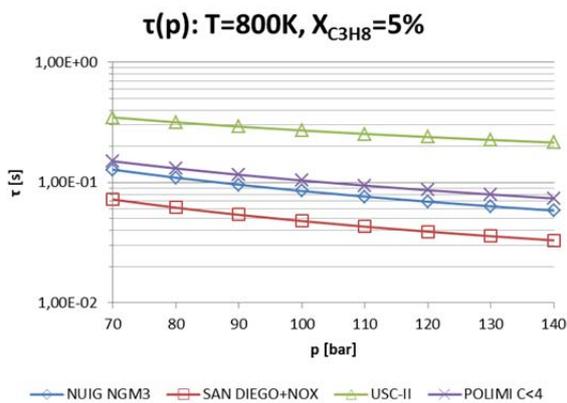
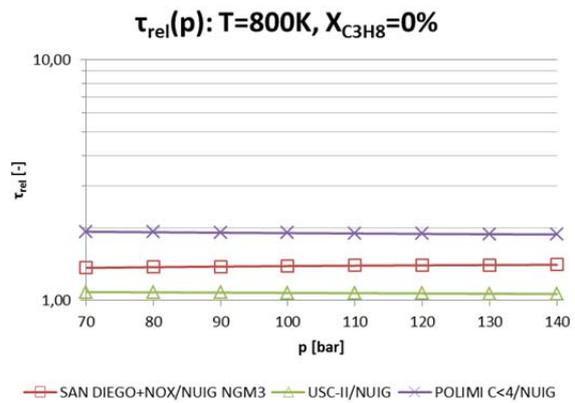
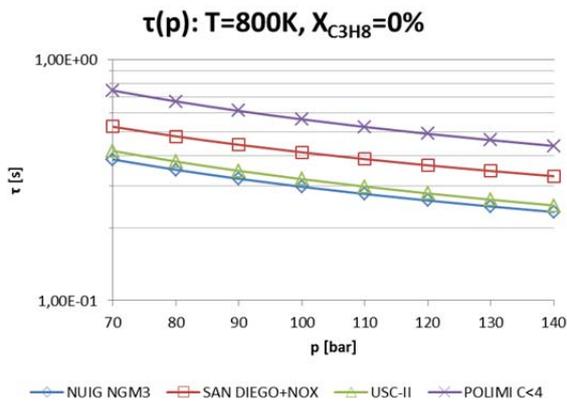


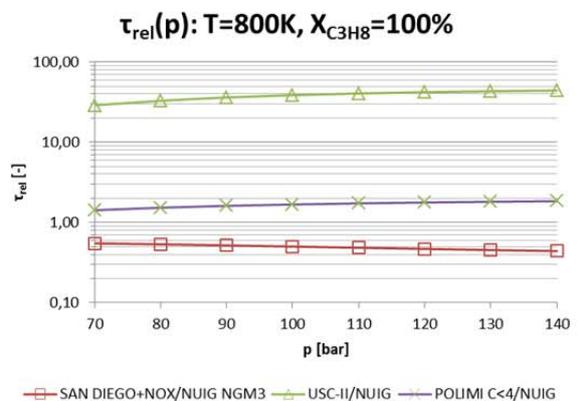
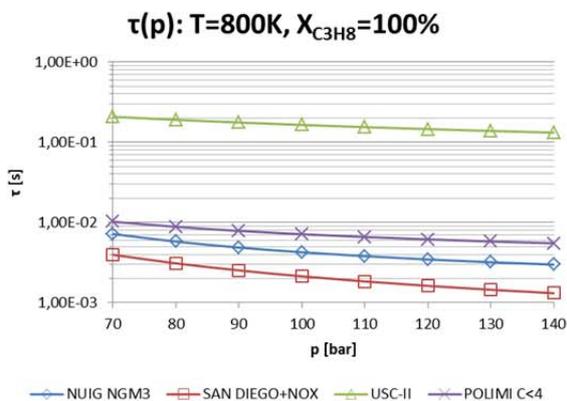
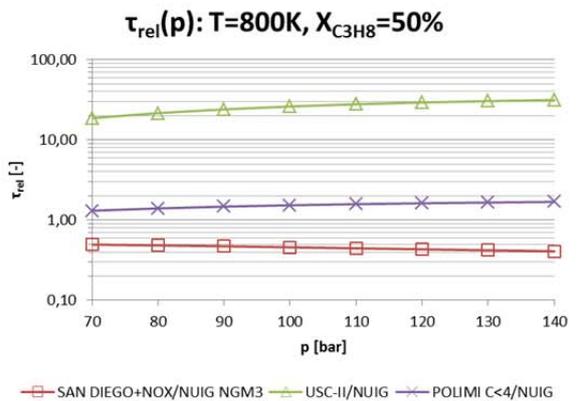
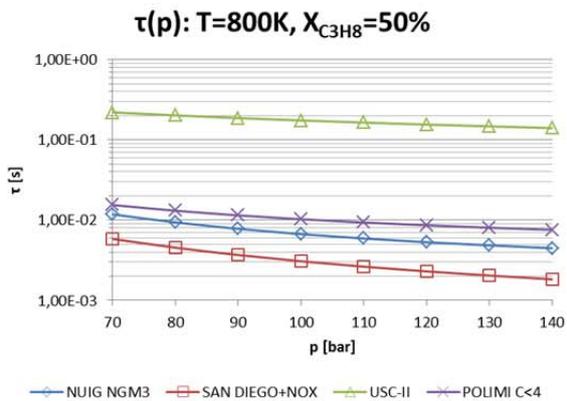
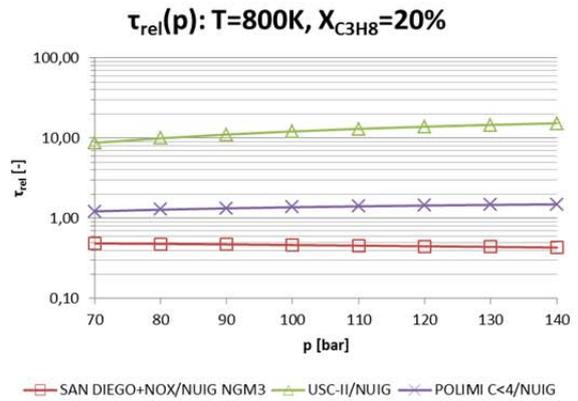
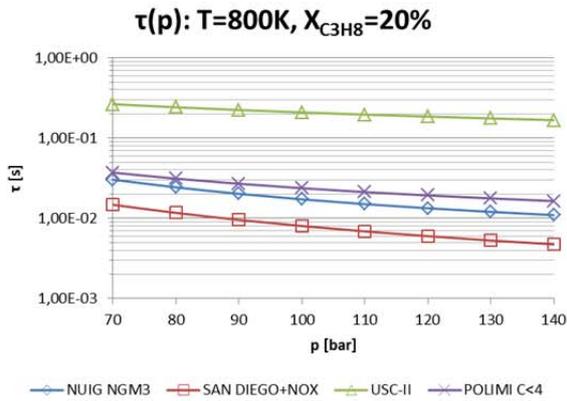
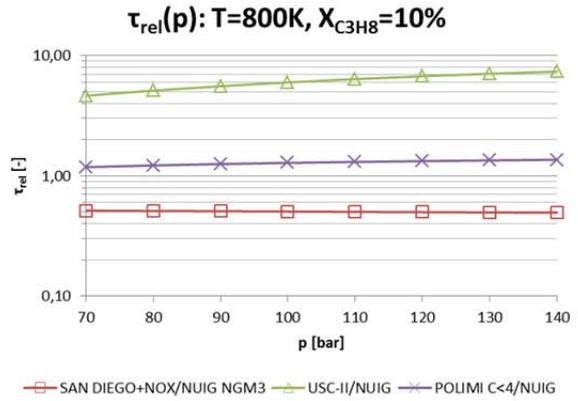
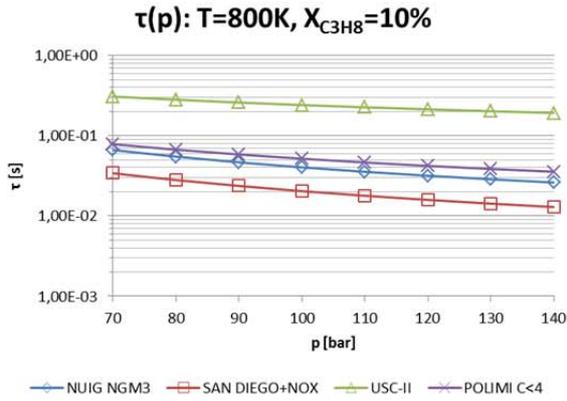
$T = 800K$

p [bar]	$X_{C_3H_8}$	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4	SAN DIEGO+NOX / NUIG	USC-II / NUIG	POLIMI C<4 / NUIG
70	0	3,86E-01	5,27E-01	4,18E-01	7,45E-01	1,37	1,08	1,93
80	0	3,49E-01	4,81E-01	3,78E-01	6,72E-01	1,38	1,08	1,92
90	0	3,20E-01	4,44E-01	3,46E-01	6,14E-01	1,38	1,08	1,91
100	0	2,97E-01	4,13E-01	3,20E-01	5,66E-01	1,39	1,08	1,91
110	0	2,77E-01	3,87E-01	2,97E-01	5,26E-01	1,40	1,07	1,90
120	0	2,60E-01	3,65E-01	2,79E-01	4,93E-01	1,40	1,07	1,89
130	0	2,46E-01	3,46E-01	2,63E-01	4,64E-01	1,41	1,07	1,89
140	0	2,33E-01	3,29E-01	2,48E-01	4,39E-01	1,41	1,06	1,88
70	0,05	1,28E-01	7,23E-02	3,48E-01	1,50E-01	0,57	2,72	1,18
80	0,05	1,10E-01	6,18E-02	3,17E-01	1,31E-01	0,56	2,88	1,19
90	0,05	9,59E-02	5,40E-02	2,92E-01	1,16E-01	0,56	3,04	1,21
100	0,05	8,51E-02	4,79E-02	2,71E-01	1,04E-01	0,56	3,18	1,22
110	0,05	7,64E-02	4,30E-02	2,54E-01	9,44E-02	0,56	3,32	1,23
120	0,05	6,93E-02	3,91E-02	2,39E-01	8,63E-02	0,56	3,44	1,25
130	0,05	6,35E-02	3,58E-02	2,26E-01	7,96E-02	0,56	3,56	1,25
140	0,05	5,85E-02	3,31E-02	2,15E-01	7,38E-02	0,57	3,67	1,26
70	0,1	6,64E-02	3,41E-02	3,07E-01	7,85E-02	0,51	4,63	1,18
80	0,1	5,49E-02	2,81E-02	2,81E-01	6,71E-02	0,51	5,11	1,22
90	0,1	4,66E-02	2,37E-02	2,59E-01	5,85E-02	0,51	5,56	1,25
100	0,1	4,04E-02	2,04E-02	2,41E-01	5,18E-02	0,51	5,98	1,28
110	0,1	3,56E-02	1,79E-02	2,26E-01	4,64E-02	0,50	6,36	1,31
120	0,1	3,18E-02	1,59E-02	2,13E-01	4,21E-02	0,50	6,72	1,33
130	0,1	2,87E-02	1,43E-02	2,02E-01	3,86E-02	0,50	7,05	1,34
140	0,1	2,62E-02	1,29E-02	1,92E-01	3,56E-02	0,49	7,36	1,36
70	0,2	3,04E-02	1,48E-02	2,65E-01	3,71E-02	0,49	8,72	1,22
80	0,2	2,43E-02	1,17E-02	2,42E-01	3,13E-02	0,48	9,95	1,28
90	0,2	2,02E-02	9,57E-03	2,24E-01	2,70E-02	0,47	11,08	1,33

11 – Anhang

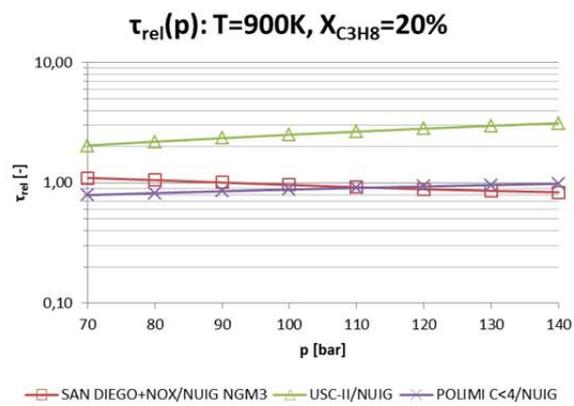
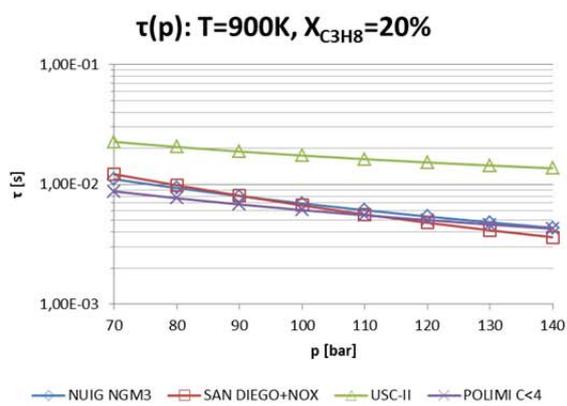
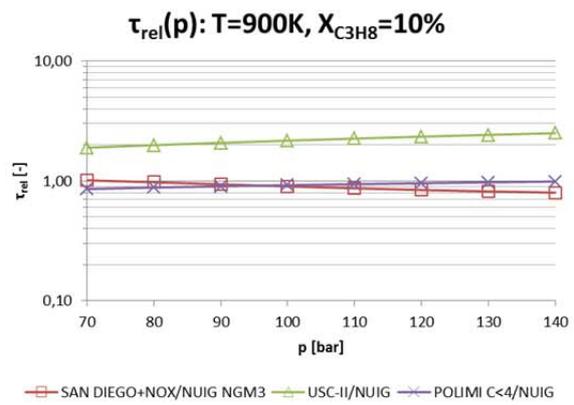
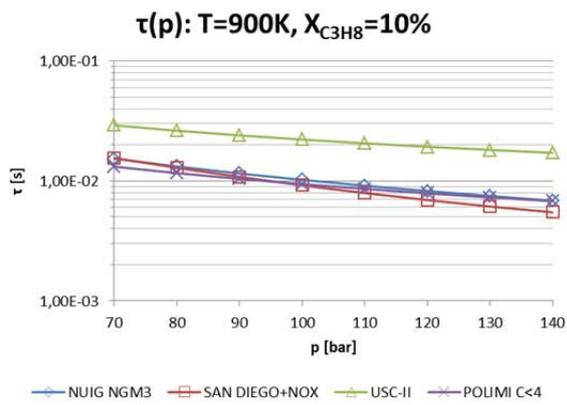
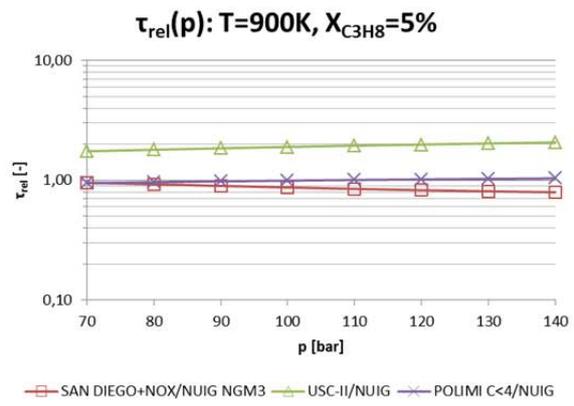
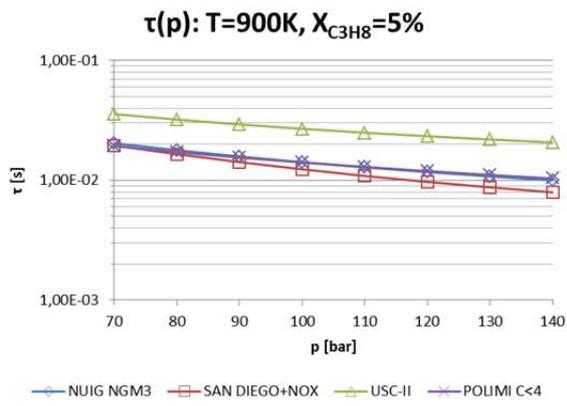
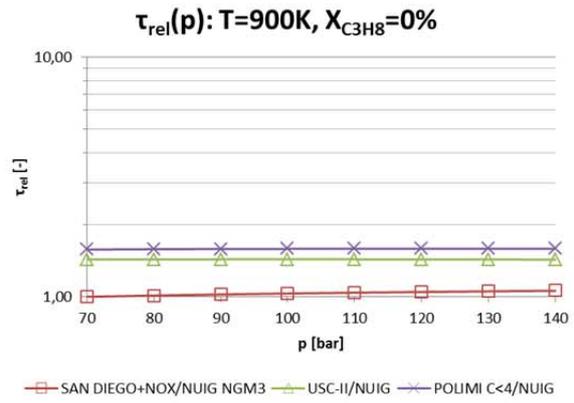
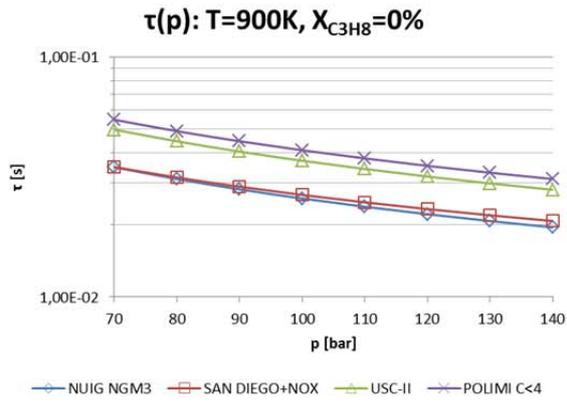
p [bar]	X _{C₃H₈}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4
						/ NUIG	/ NUIG	/ NUIG
100	0,2	1,73E-02	8,03E-03	2,09E-01	2,38E-02	0,47	12,11	1,38
110	0,2	1,51E-02	6,88E-03	1,96E-01	2,13E-02	0,46	13,04	1,41
120	0,2	1,34E-02	6,00E-03	1,85E-01	1,93E-02	0,45	13,87	1,44
130	0,2	1,20E-02	5,30E-03	1,76E-01	1,77E-02	0,44	14,61	1,47
140	0,2	1,10E-02	4,74E-03	1,68E-01	1,64E-02	0,43	15,28	1,50
70	0,5	1,18E-02	5,84E-03	2,20E-01	1,54E-02	0,49	18,66	1,31
80	0,5	9,37E-03	4,54E-03	2,02E-01	1,31E-02	0,48	21,55	1,40
90	0,5	7,79E-03	3,68E-03	1,87E-01	1,15E-02	0,47	24,01	1,47
100	0,5	6,70E-03	3,08E-03	1,75E-01	1,03E-02	0,46	26,09	1,53
110	0,5	5,91E-03	2,63E-03	1,64E-01	9,34E-03	0,45	27,81	1,58
120	0,5	5,31E-03	2,30E-03	1,55E-01	8,62E-03	0,43	29,24	1,62
130	0,5	4,85E-03	2,04E-03	1,47E-01	8,04E-03	0,42	30,42	1,66
140	0,5	4,48E-03	1,83E-03	1,41E-01	7,56E-03	0,41	31,40	1,69
70	1	7,19E-03	3,95E-03	2,07E-01	1,02E-02	0,55	28,86	1,42
80	1	5,78E-03	3,10E-03	1,90E-01	8,84E-03	0,54	32,88	1,53
90	1	4,88E-03	2,53E-03	1,76E-01	7,86E-03	0,52	36,09	1,61
100	1	4,26E-03	2,14E-03	1,64E-01	7,14E-03	0,50	38,59	1,68
110	1	3,81E-03	1,84E-03	1,54E-01	6,59E-03	0,48	40,54	1,73
120	1	3,46E-03	1,62E-03	1,46E-01	6,15E-03	0,47	42,06	1,78
130	1	3,20E-03	1,45E-03	1,38E-01	5,80E-03	0,45	43,23	1,81
140	1	2,99E-03	1,32E-03	1,32E-01	5,51E-03	0,44	44,12	1,84

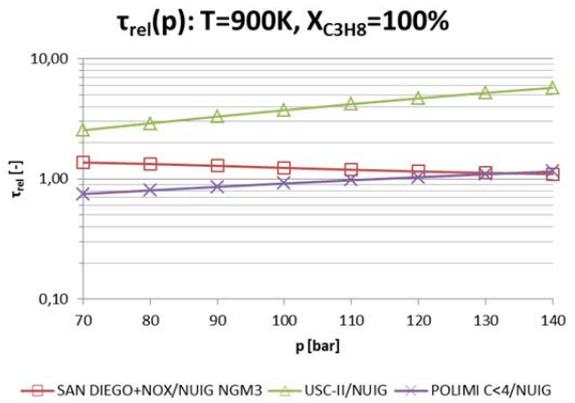
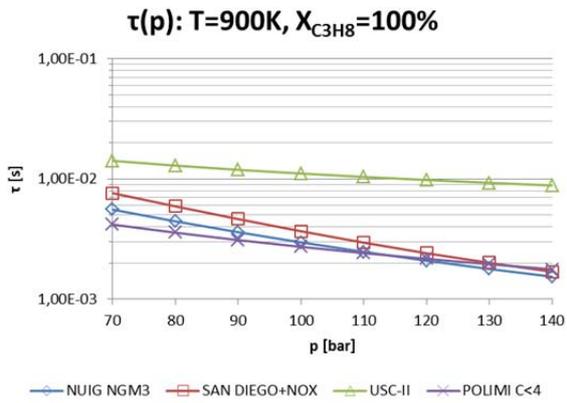
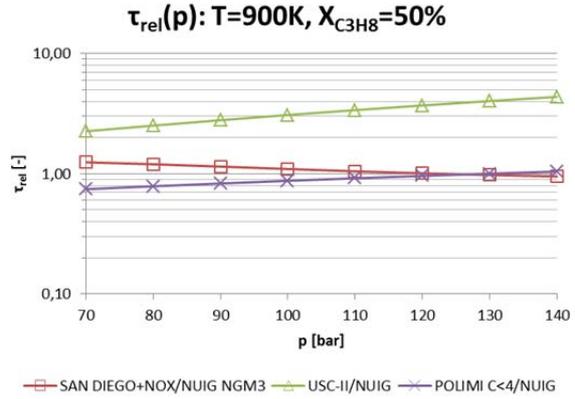
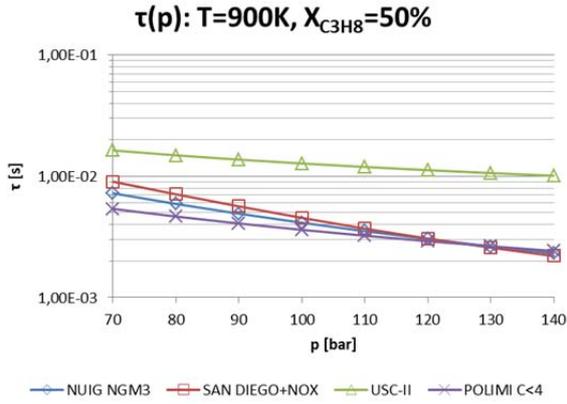




$T = 900K$

p [bar]	X _{C₃H₈}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4	SAN DIEGO+NOX / NUIG	USC-II / NUIG	POLIMI C<4 / NUIG
70	0	3,48E-02	3,49E-02	4,99E-02	5,49E-02	1,00	1,43	1,58
80	0	3,11E-02	3,15E-02	4,46E-02	4,92E-02	1,01	1,44	1,58
90	0	2,81E-02	2,88E-02	4,04E-02	4,46E-02	1,03	1,44	1,59
100	0	2,58E-02	2,67E-02	3,70E-02	4,09E-02	1,03	1,44	1,59
110	0	2,38E-02	2,48E-02	3,42E-02	3,79E-02	1,04	1,44	1,59
120	0	2,22E-02	2,33E-02	3,18E-02	3,52E-02	1,05	1,44	1,59
130	0	2,08E-02	2,19E-02	2,98E-02	3,30E-02	1,06	1,43	1,59
140	0	1,95E-02	2,08E-02	2,80E-02	3,11E-02	1,06	1,43	1,59
70	0,05	2,04E-02	1,95E-02	3,57E-02	1,93E-02	0,95	1,75	0,95
80	0,05	1,78E-02	1,65E-02	3,21E-02	1,72E-02	0,93	1,80	0,96
90	0,05	1,58E-02	1,42E-02	2,93E-02	1,55E-02	0,90	1,85	0,98
100	0,05	1,42E-02	1,24E-02	2,69E-02	1,41E-02	0,87	1,90	0,99
110	0,05	1,28E-02	1,09E-02	2,50E-02	1,29E-02	0,85	1,95	1,01
120	0,05	1,17E-02	9,71E-03	2,33E-02	1,19E-02	0,83	1,99	1,02
130	0,05	1,08E-02	8,74E-03	2,19E-02	1,11E-02	0,81	2,03	1,03
140	0,05	9,99E-03	7,94E-03	2,07E-02	1,04E-02	0,80	2,07	1,04
70	0,1	1,54E-02	1,55E-02	2,91E-02	1,32E-02	1,01	1,90	0,86
80	0,1	1,32E-02	1,29E-02	2,63E-02	1,16E-02	0,98	1,99	0,88
90	0,1	1,15E-02	1,08E-02	2,40E-02	1,04E-02	0,94	2,08	0,90
100	0,1	1,02E-02	9,20E-03	2,22E-02	9,42E-03	0,90	2,17	0,92
110	0,1	9,13E-03	7,93E-03	2,06E-02	8,59E-03	0,87	2,26	0,94
120	0,1	8,24E-03	6,93E-03	1,93E-02	7,89E-03	0,84	2,34	0,96
130	0,1	7,49E-03	6,13E-03	1,81E-02	7,29E-03	0,82	2,42	0,97
140	0,1	6,85E-03	5,48E-03	1,72E-02	6,78E-03	0,80	2,50	0,99
70	0,2	1,11E-02	1,22E-02	2,26E-02	8,75E-03	1,10	2,05	0,79
80	0,2	9,32E-03	9,84E-03	2,05E-02	7,67E-03	1,06	2,20	0,82
90	0,2	7,99E-03	8,05E-03	1,88E-02	6,81E-03	1,01	2,35	0,85
100	0,2	6,94E-03	6,67E-03	1,74E-02	6,11E-03	0,96	2,51	0,88
110	0,2	6,09E-03	5,61E-03	1,62E-02	5,53E-03	0,92	2,67	0,91
120	0,2	5,40E-03	4,79E-03	1,52E-02	5,04E-03	0,89	2,82	0,93
130	0,2	4,82E-03	4,14E-03	1,44E-02	4,63E-03	0,86	2,98	0,96
140	0,2	4,34E-03	3,63E-03	1,36E-02	4,27E-03	0,84	3,14	0,98
70	0,5	7,24E-03	9,02E-03	1,63E-02	5,39E-03	1,25	2,26	0,74
80	0,5	5,92E-03	7,10E-03	1,49E-02	4,66E-03	1,20	2,52	0,79
90	0,5	4,91E-03	5,64E-03	1,37E-02	4,08E-03	1,15	2,79	0,83
100	0,5	4,14E-03	4,54E-03	1,28E-02	3,62E-03	1,10	3,08	0,87
110	0,5	3,53E-03	3,70E-03	1,19E-02	3,23E-03	1,05	3,38	0,92
120	0,5	3,04E-03	3,06E-03	1,12E-02	2,92E-03	1,01	3,70	0,96
130	0,5	2,64E-03	2,58E-03	1,06E-02	2,65E-03	0,98	4,02	1,00
140	0,5	2,32E-03	2,20E-03	1,01E-02	2,42E-03	0,95	4,36	1,05
70	1	5,57E-03	7,63E-03	1,42E-02	4,18E-03	1,37	2,54	0,75
80	1	4,45E-03	5,93E-03	1,29E-02	3,58E-03	1,33	2,90	0,80
90	1	3,61E-03	4,64E-03	1,19E-02	3,11E-03	1,29	3,30	0,86
100	1	2,97E-03	3,68E-03	1,11E-02	2,73E-03	1,24	3,73	0,92
110	1	2,48E-03	2,96E-03	1,04E-02	2,42E-03	1,19	4,19	0,98
120	1	2,09E-03	2,42E-03	9,81E-03	2,17E-03	1,15	4,68	1,04
130	1	1,79E-03	2,01E-03	9,29E-03	1,96E-03	1,12	5,20	1,09
140	1	1,54E-03	1,70E-03	8,83E-03	1,78E-03	1,10	5,73	1,15

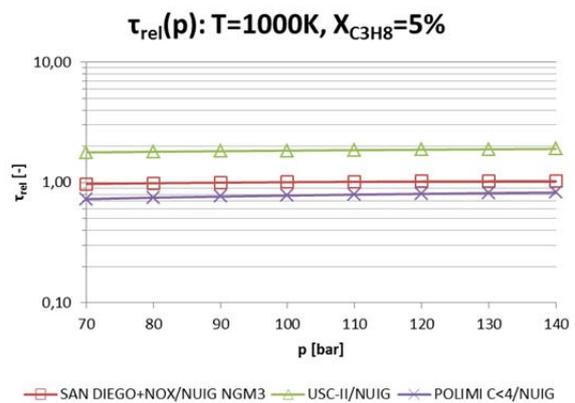
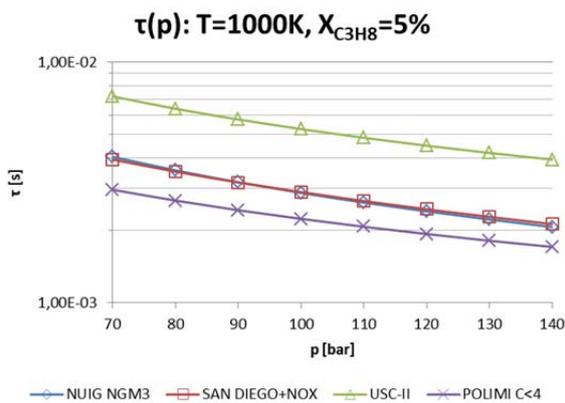
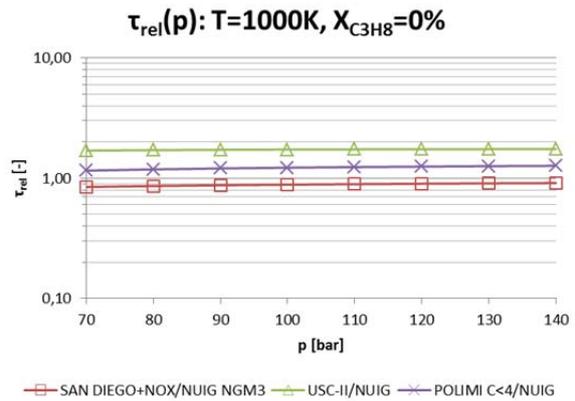
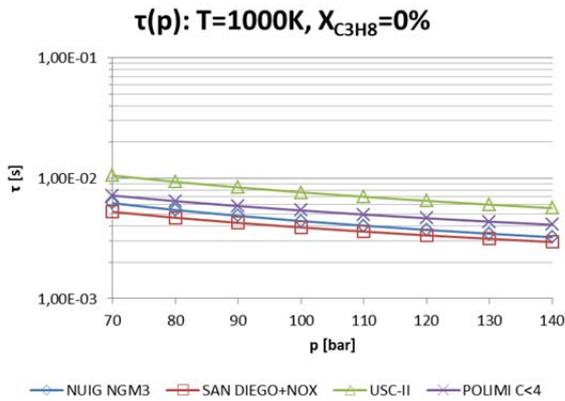


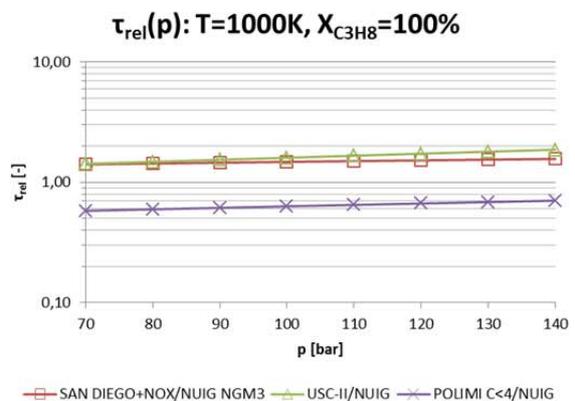
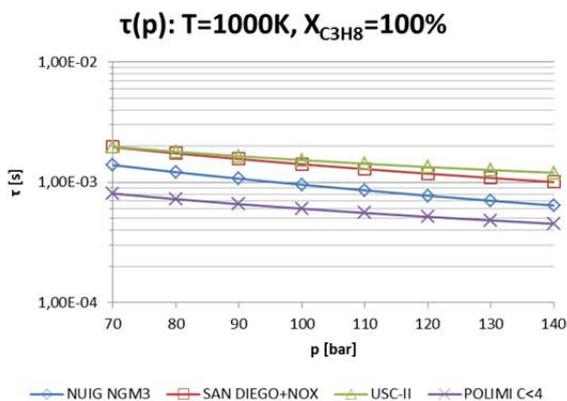
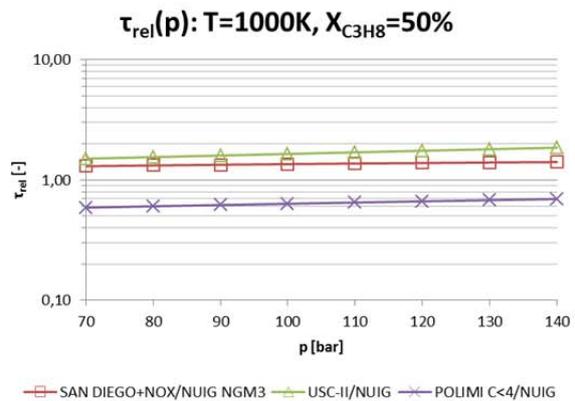
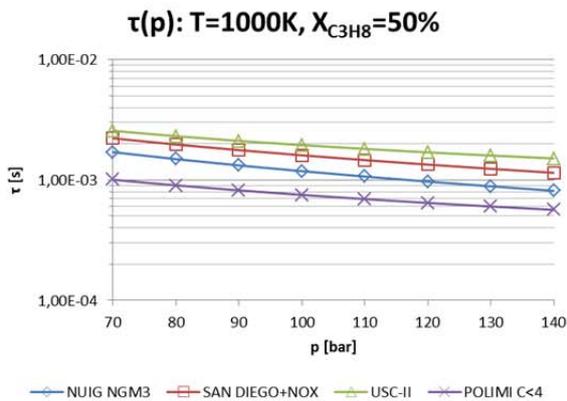
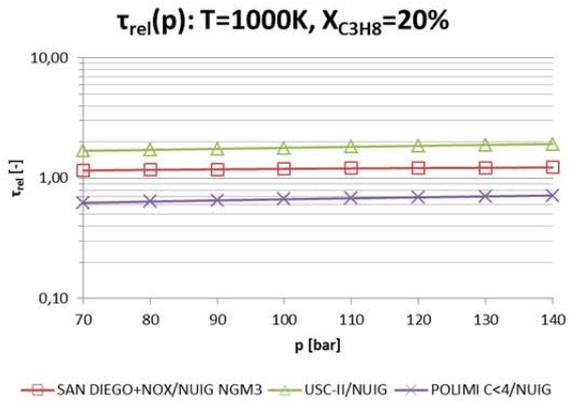
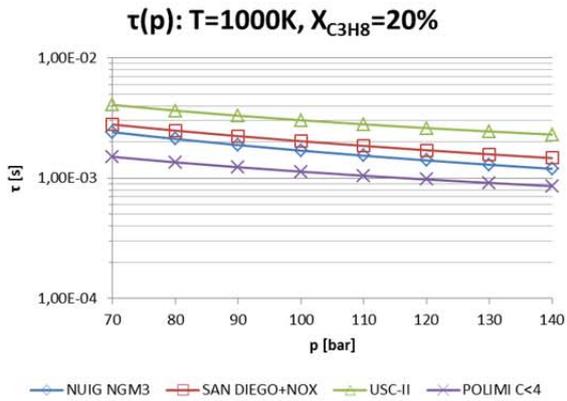
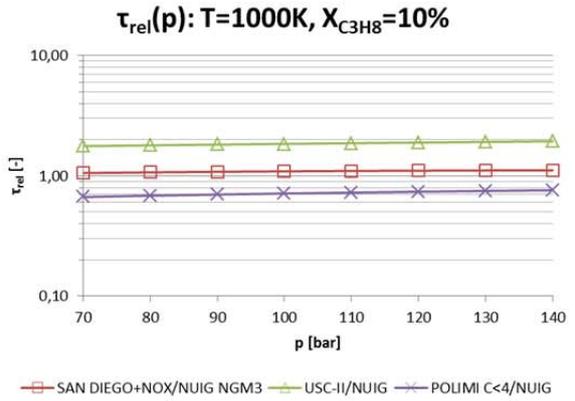
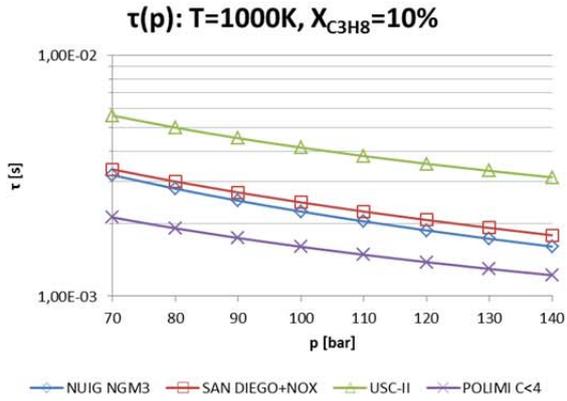


T = 1000K

p [bar]	X _{C3H8}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4	SAN DIEGO+NOX / NUIG	USC-II / NUIG	POLIMI C<4 / NUIG
70	0	6,20E-03	5,25E-03	1,05E-02	7,17E-03	0,85	1,70	1,16
80	0	5,45E-03	4,70E-03	9,33E-03	6,45E-03	0,86	1,71	1,18
90	0	4,87E-03	4,26E-03	8,39E-03	5,87E-03	0,87	1,72	1,21
100	0	4,41E-03	3,90E-03	7,63E-03	5,39E-03	0,88	1,73	1,22
110	0	4,03E-03	3,60E-03	7,01E-03	4,99E-03	0,89	1,74	1,24
120	0	3,72E-03	3,35E-03	6,48E-03	4,65E-03	0,90	1,74	1,25
130	0	3,46E-03	3,14E-03	6,03E-03	4,36E-03	0,91	1,74	1,26
140	0	3,24E-03	2,95E-03	5,65E-03	4,10E-03	0,91	1,75	1,27
70	0,05	4,05E-03	3,94E-03	7,21E-03	2,95E-03	0,97	1,78	0,73
80	0,05	3,55E-03	3,51E-03	6,41E-03	2,66E-03	0,99	1,80	0,75
90	0,05	3,17E-03	3,17E-03	5,78E-03	2,43E-03	1,00	1,82	0,77
100	0,05	2,86E-03	2,89E-03	5,27E-03	2,23E-03	1,01	1,84	0,78
110	0,05	2,61E-03	2,65E-03	4,85E-03	2,07E-03	1,01	1,86	0,79
120	0,05	2,40E-03	2,45E-03	4,50E-03	1,93E-03	1,02	1,87	0,81
130	0,05	2,22E-03	2,28E-03	4,20E-03	1,81E-03	1,02	1,89	0,82
140	0,05	2,07E-03	2,13E-03	3,94E-03	1,71E-03	1,03	1,90	0,83
70	0,1	3,18E-03	3,36E-03	5,63E-03	2,12E-03	1,06	1,77	0,67
80	0,1	2,80E-03	2,99E-03	5,02E-03	1,91E-03	1,07	1,79	0,68
90	0,1	2,49E-03	2,70E-03	4,54E-03	1,74E-03	1,08	1,82	0,70
100	0,1	2,25E-03	2,45E-03	4,15E-03	1,60E-03	1,09	1,84	0,71
110	0,1	2,05E-03	2,25E-03	3,82E-03	1,49E-03	1,10	1,87	0,73
120	0,1	1,88E-03	2,07E-03	3,55E-03	1,39E-03	1,10	1,89	0,74
130	0,1	1,73E-03	1,92E-03	3,32E-03	1,30E-03	1,11	1,91	0,75
140	0,1	1,61E-03	1,79E-03	3,12E-03	1,22E-03	1,11	1,94	0,76
70	0,2	2,41E-03	2,80E-03	4,07E-03	1,51E-03	1,16	1,69	0,62
80	0,2	2,12E-03	2,49E-03	3,64E-03	1,36E-03	1,17	1,72	0,64
90	0,2	1,89E-03	2,24E-03	3,31E-03	1,23E-03	1,19	1,75	0,65

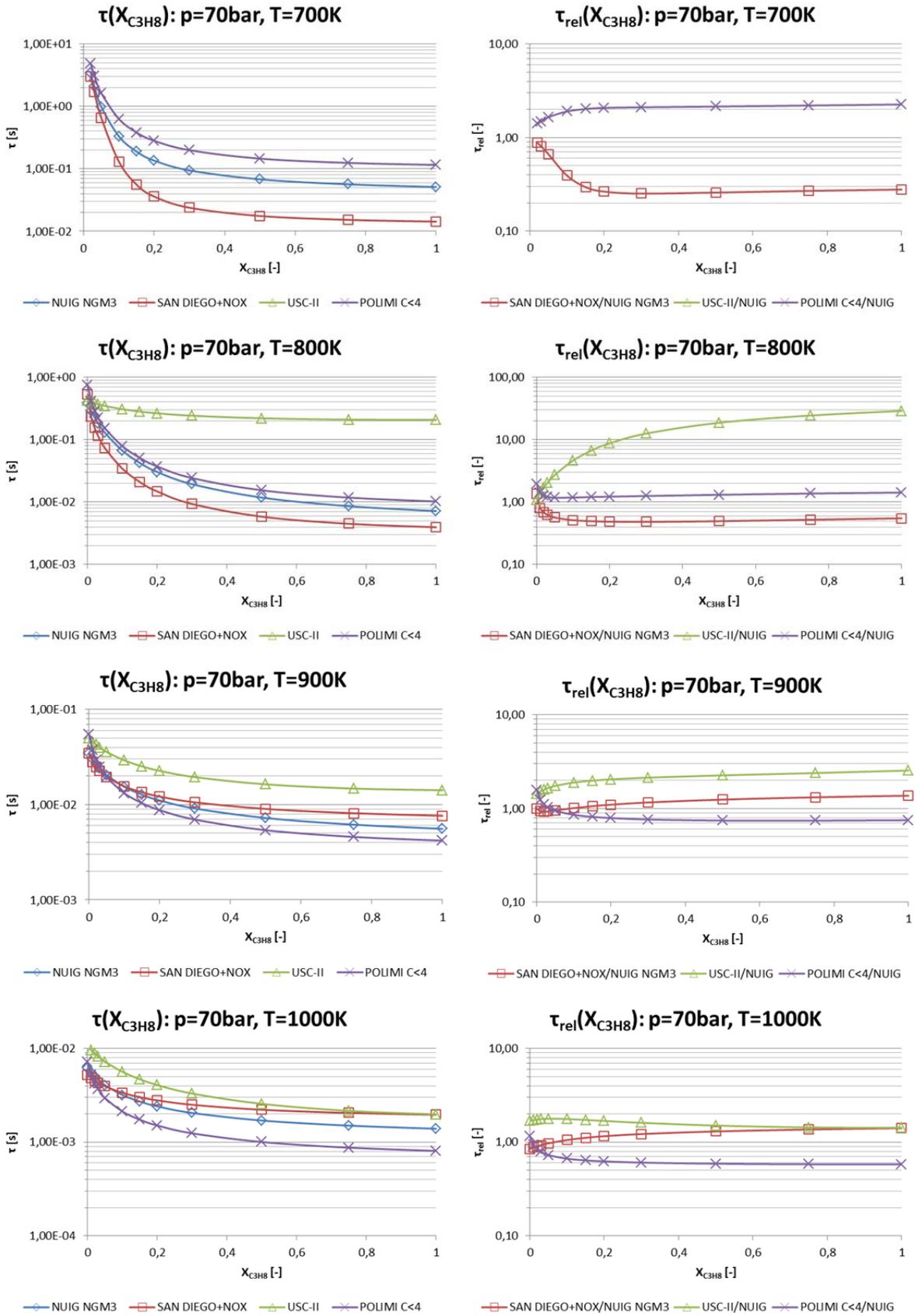
p [bar]	X _{C₃H₈}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4
						/ NUIG	/ NUIG	/ NUIG
100	0,2	1,70E-03	2,03E-03	3,03E-03	1,13E-03	1,20	1,79	0,67
110	0,2	1,54E-03	1,86E-03	2,80E-03	1,05E-03	1,21	1,82	0,68
120	0,2	1,41E-03	1,71E-03	2,61E-03	9,76E-04	1,21	1,86	0,69
130	0,2	1,29E-03	1,58E-03	2,45E-03	9,14E-04	1,22	1,89	0,71
140	0,2	1,20E-03	1,47E-03	2,30E-03	8,59E-04	1,23	1,93	0,72
70	0,5	1,70E-03	2,22E-03	2,56E-03	1,00E-03	1,30	1,50	0,59
80	0,5	1,49E-03	1,97E-03	2,31E-03	9,03E-04	1,32	1,55	0,60
90	0,5	1,32E-03	1,77E-03	2,11E-03	8,20E-04	1,34	1,60	0,62
100	0,5	1,18E-03	1,60E-03	1,95E-03	7,52E-04	1,36	1,65	0,64
110	0,5	1,07E-03	1,46E-03	1,81E-03	6,94E-04	1,37	1,70	0,65
120	0,5	9,71E-04	1,34E-03	1,70E-03	6,45E-04	1,38	1,75	0,66
130	0,5	8,87E-04	1,24E-03	1,60E-03	6,03E-04	1,40	1,80	0,68
140	0,5	8,14E-04	1,15E-03	1,51E-03	5,66E-04	1,41	1,86	0,69
70	1	1,39E-03	1,96E-03	1,98E-03	8,08E-04	1,41	1,43	0,58
80	1	1,21E-03	1,74E-03	1,80E-03	7,25E-04	1,43	1,48	0,60
90	1	1,07E-03	1,56E-03	1,65E-03	6,59E-04	1,46	1,54	0,61
100	1	9,55E-04	1,41E-03	1,53E-03	6,04E-04	1,48	1,60	0,63
110	1	8,58E-04	1,29E-03	1,43E-03	5,57E-04	1,50	1,66	0,65
120	1	7,75E-04	1,18E-03	1,34E-03	5,17E-04	1,52	1,73	0,67
130	1	7,04E-04	1,09E-03	1,27E-03	4,83E-04	1,54	1,80	0,69
140	1	6,42E-04	1,01E-03	1,20E-03	4,53E-04	1,57	1,87	0,70





11.2.3 Abhängigkeit der Zündverzugszeit τ [s] vom Propangehalt $X_{C_3H_8}$ [-] $p = 70\text{bar}$

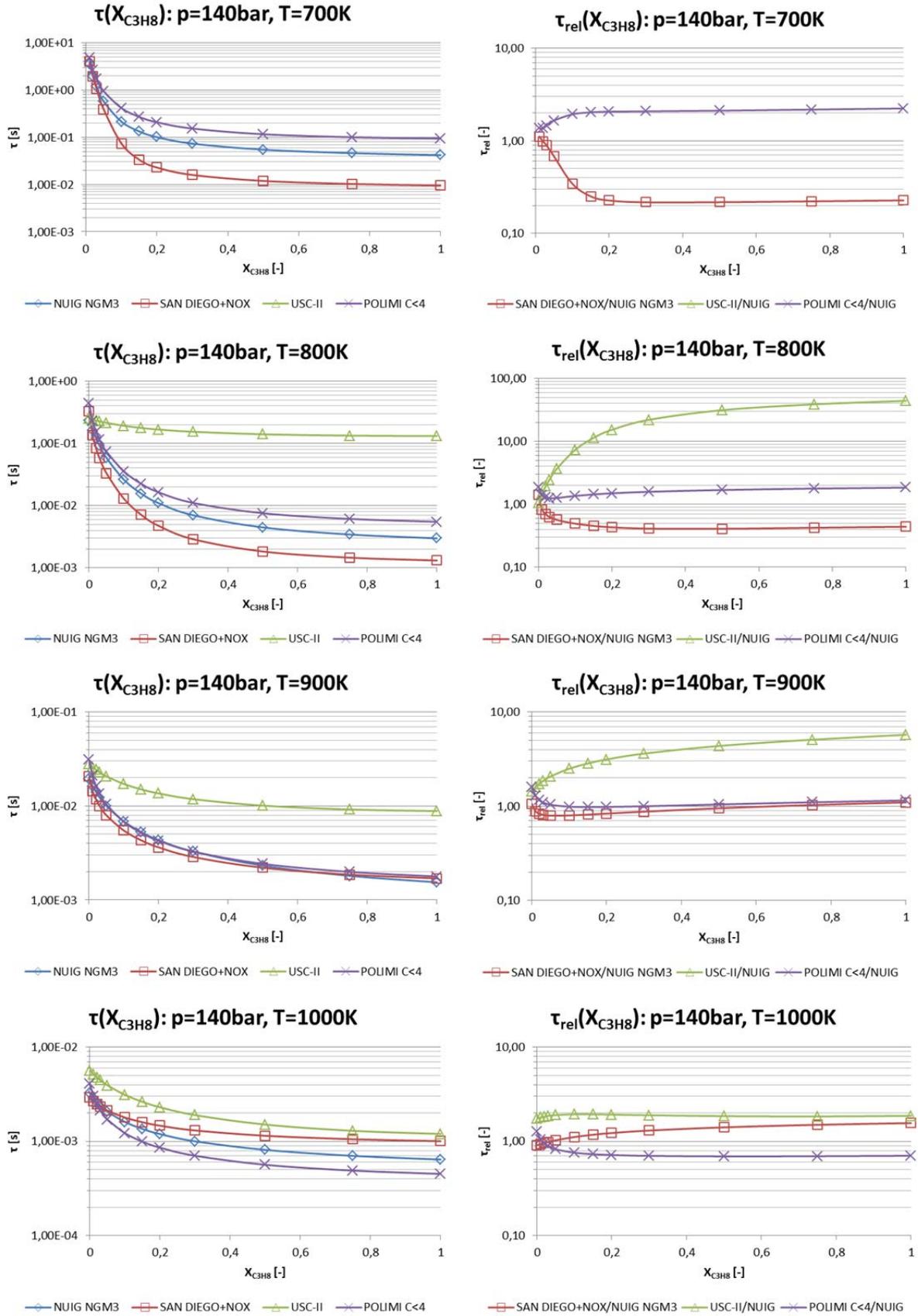
T [K]	$X_{C_3H_8}$	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4	SAN DIEGO+NOX / NUIG NGM3	USC-II / NUIG	POLIMI C<4 / NUIG
700	0							
700	0,01							
700	0,02	3,41E+00	3,00E+00		4,81E+00	0,88		1,41
700	0,03	2,09E+00	1,69E+00		3,10E+00	0,81		1,48
700	0,05	9,79E-01	6,50E-01		1,62E+00	0,66		1,65
700	0,1	3,30E-01	1,29E-01		6,28E-01	0,39		1,90
700	0,15	1,89E-01	5,57E-02		3,81E-01	0,30		2,02
700	0,2	1,36E-01	3,60E-02		2,82E-01	0,27		2,08
700	0,3	9,44E-02	2,38E-02		1,99E-01	0,25		2,11
700	0,5	6,79E-02	1,76E-02		1,46E-01	0,26		2,15
700	0,75	5,65E-02	1,52E-02		1,24E-01	0,27		2,20
700	1	5,11E-02	1,43E-02		1,15E-01	0,28		2,26
800	0	3,86E-01	5,27E-01	4,18E-01	7,45E-01	1,37	1,08	1,93
800	0,01	2,88E-01	2,33E-01	4,01E-01	4,10E-01	0,81	1,39	1,42
800	0,02	2,26E-01	1,55E-01	3,85E-01	2,89E-01	0,69	1,71	1,28
800	0,03	1,83E-01	1,14E-01	3,71E-01	2,23E-01	0,62	2,03	1,22
800	0,05	1,28E-01	7,23E-02	3,48E-01	1,50E-01	0,57	2,72	1,18
800	0,1	6,64E-02	3,41E-02	3,07E-01	7,85E-02	0,51	4,63	1,18
800	0,15	4,22E-02	2,09E-02	2,82E-01	5,09E-02	0,50	6,68	1,21
800	0,2	3,04E-02	1,48E-02	2,65E-01	3,71E-02	0,49	8,72	1,22
800	0,3	1,94E-02	9,32E-03	2,42E-01	2,43E-02	0,48	12,51	1,25
800	0,5	1,18E-02	5,84E-03	2,20E-01	1,54E-02	0,49	18,66	1,31
800	0,75	8,61E-03	4,50E-03	2,10E-01	1,18E-02	0,52	24,36	1,37
800	1	7,19E-03	3,95E-03	2,07E-01	1,02E-02	0,55	28,86	1,42
900	0	3,48E-02	3,49E-02	4,99E-02	5,49E-02	1,00	1,43	1,58
900	0,01	3,01E-02	2,81E-02	4,58E-02	3,73E-02	0,94	1,52	1,24
900	0,02	2,67E-02	2,48E-02	4,25E-02	2,95E-02	0,93	1,59	1,10
900	0,03	2,41E-02	2,25E-02	3,99E-02	2,48E-02	0,93	1,65	1,03
900	0,05	2,04E-02	1,95E-02	3,57E-02	1,93E-02	0,95	1,75	0,95
900	0,1	1,54E-02	1,55E-02	2,91E-02	1,32E-02	1,01	1,90	0,86
900	0,15	1,27E-02	1,35E-02	2,52E-02	1,04E-02	1,06	1,99	0,82
900	0,2	1,11E-02	1,22E-02	2,26E-02	8,75E-03	1,10	2,05	0,79
900	0,3	9,10E-03	1,06E-02	1,94E-02	6,96E-03	1,16	2,14	0,76
900	0,5	7,24E-03	9,02E-03	1,63E-02	5,39E-03	1,25	2,26	0,74
900	0,75	6,16E-03	8,12E-03	1,47E-02	4,58E-03	1,32	2,39	0,74
900	1	5,57E-03	7,63E-03	1,42E-02	4,18E-03	1,37	2,54	0,75
1000	0	6,20E-03	5,25E-03	1,05E-02	7,17E-03	0,85	1,70	1,16
1000	0,01	5,54E-03	4,87E-03	9,58E-03	5,20E-03	0,88	1,73	0,94
1000	0,02	5,03E-03	4,56E-03	8,82E-03	4,25E-03	0,91	1,75	0,84
1000	0,03	4,64E-03	4,31E-03	8,20E-03	3,66E-03	0,93	1,77	0,79
1000	0,05	4,05E-03	3,94E-03	7,21E-03	2,95E-03	0,97	1,78	0,73
1000	0,1	3,18E-03	3,36E-03	5,63E-03	2,12E-03	1,06	1,77	0,67
1000	0,15	2,71E-03	3,02E-03	4,69E-03	1,74E-03	1,11	1,73	0,64
1000	0,2	2,41E-03	2,80E-03	4,07E-03	1,51E-03	1,16	1,69	0,62
1000	0,3	2,05E-03	2,51E-03	3,31E-03	1,24E-03	1,22	1,61	0,61
1000	0,5	1,70E-03	2,22E-03	2,56E-03	1,00E-03	1,30	1,50	0,59
1000	0,75	1,50E-03	2,05E-03	2,16E-03	8,74E-04	1,37	1,44	0,58
1000	1	1,39E-03	1,96E-03	1,98E-03	8,08E-04	1,41	1,43	0,58



11 – Anhang

p = 140bar

T [K]	X _{C₃H₈}	NUIG NGM3	SAN DIEGO+NOX	USC-II	POLIMI C<4	SAN DIEGO+NOX / NUIG NGM3	USC-II / NUIG	POLIMI C<4 / NUIG
700	0							
700	0,01	3,57E+00	3,98E+00		4,88E+00	1,11		1,37
700	0,02	1,95E+00	1,93E+00		2,67E+00	0,99		1,36
700	0,03	1,19E+00	1,06E+00		1,73E+00	0,89		1,46
700	0,05	5,74E-01	3,90E-01		9,49E-01	0,68		1,65
700	0,1	2,15E-01	7,39E-02		4,16E-01	0,34		1,94
700	0,15	1,33E-01	3,36E-02		2,71E-01	0,25		2,03
700	0,2	1,01E-01	2,29E-02		2,08E-01	0,23		2,06
700	0,3	7,36E-02	1,60E-02		1,53E-01	0,22		2,08
700	0,5	5,48E-02	1,19E-02		1,16E-01	0,22		2,12
700	0,75	4,62E-02	1,03E-02		1,00E-01	0,22		2,18
700	1	4,20E-02	9,55E-03		9,40E-02	0,23		2,24
800	0	2,33E-01	3,29E-01	2,48E-01	4,39E-01	1,41	1,06	1,88
800	0,01	1,63E-01	1,34E-01	2,42E-01	2,28E-01	0,82	1,48	1,40
800	0,02	1,20E-01	8,36E-02	2,34E-01	1,55E-01	0,69	1,95	1,28
800	0,03	9,21E-02	5,81E-02	2,27E-01	1,15E-01	0,63	2,47	1,25
800	0,05	5,85E-02	3,31E-02	2,15E-01	7,38E-02	0,57	3,67	1,26
800	0,1	2,62E-02	1,29E-02	1,92E-01	3,56E-02	0,49	7,36	1,36
800	0,15	1,56E-02	7,12E-03	1,78E-01	2,25E-02	0,46	11,38	1,44
800	0,2	1,10E-02	4,74E-03	1,68E-01	1,64E-02	0,43	15,28	1,50
800	0,3	7,00E-03	2,88E-03	1,54E-01	1,11E-02	0,41	22,01	1,58
800	0,5	4,48E-03	1,83E-03	1,41E-01	7,56E-03	0,41	31,40	1,69
800	0,75	3,44E-03	1,46E-03	1,34E-01	6,13E-03	0,42	38,81	1,78
800	1	2,99E-03	1,32E-03	1,32E-01	5,51E-03	0,44	44,12	1,84
900	0	1,95E-02	2,08E-02	2,80E-02	3,11E-02	1,06	1,43	1,59
900	0,01	1,63E-02	1,44E-02	2,59E-02	2,09E-02	0,89	1,59	1,28
900	0,02	1,40E-02	1,17E-02	2,43E-02	1,63E-02	0,83	1,73	1,16
900	0,03	1,23E-02	1,00E-02	2,29E-02	1,36E-02	0,81	1,85	1,10
900	0,05	9,99E-03	7,94E-03	2,07E-02	1,04E-02	0,80	2,07	1,04
900	0,1	6,85E-03	5,48E-03	1,72E-02	6,78E-03	0,80	2,50	0,99
900	0,15	5,28E-03	4,31E-03	1,50E-02	5,18E-03	0,82	2,85	0,98
900	0,2	4,34E-03	3,63E-03	1,36E-02	4,27E-03	0,84	3,14	0,98
900	0,3	3,27E-03	2,87E-03	1,18E-02	3,27E-03	0,88	3,62	1,00
900	0,5	2,32E-03	2,20E-03	1,01E-02	2,42E-03	0,95	4,36	1,05
900	0,75	1,81E-03	1,86E-03	9,18E-03	1,99E-03	1,03	5,08	1,10
900	1	1,54E-03	1,70E-03	8,83E-03	1,78E-03	1,10	5,73	1,15
1000	0	3,24E-03	2,95E-03	5,65E-03	4,10E-03	0,91	1,75	1,27
1000	0,01	2,87E-03	2,69E-03	5,17E-03	3,01E-03	0,94	1,80	1,05
1000	0,02	2,60E-03	2,50E-03	4,78E-03	2,46E-03	0,96	1,84	0,95
1000	0,03	2,38E-03	2,35E-03	4,45E-03	2,12E-03	0,98	1,87	0,89
1000	0,05	2,07E-03	2,13E-03	3,94E-03	1,71E-03	1,03	1,90	0,83
1000	0,1	1,61E-03	1,79E-03	3,12E-03	1,22E-03	1,11	1,94	0,76
1000	0,15	1,36E-03	1,60E-03	2,63E-03	9,94E-04	1,18	1,94	0,73
1000	0,2	1,20E-03	1,47E-03	2,30E-03	8,59E-04	1,23	1,93	0,72
1000	0,3	1,00E-03	1,31E-03	1,90E-03	7,05E-04	1,30	1,90	0,70
1000	0,5	8,14E-04	1,15E-03	1,51E-03	5,66E-04	1,41	1,86	0,69
1000	0,75	7,03E-04	1,06E-03	1,30E-03	4,91E-04	1,50	1,84	0,70
1000	1	6,42E-04	1,01E-03	1,20E-03	4,53E-04	1,57	1,87	0,70

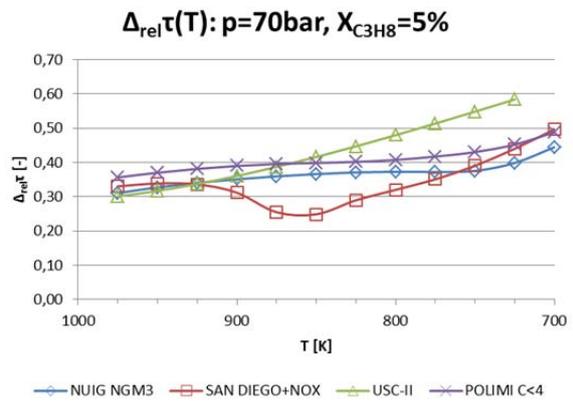
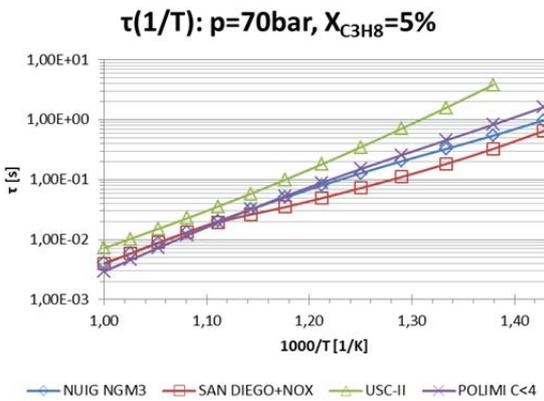
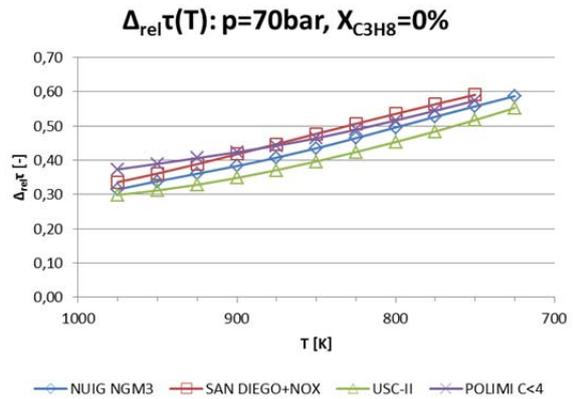
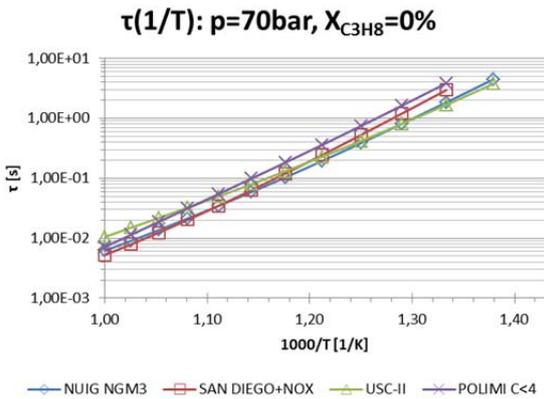


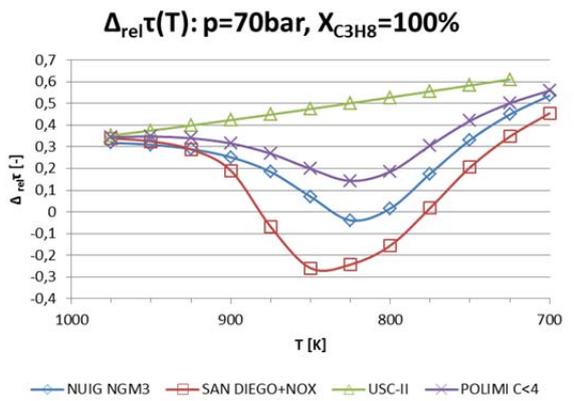
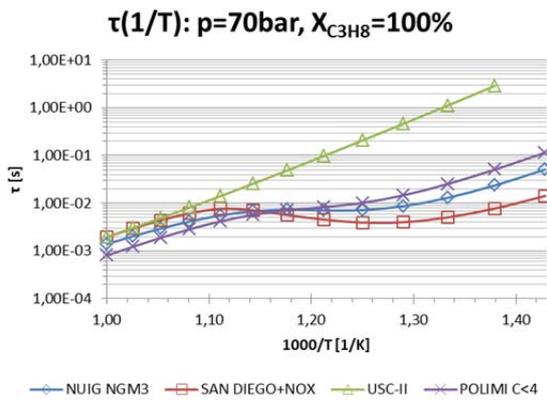
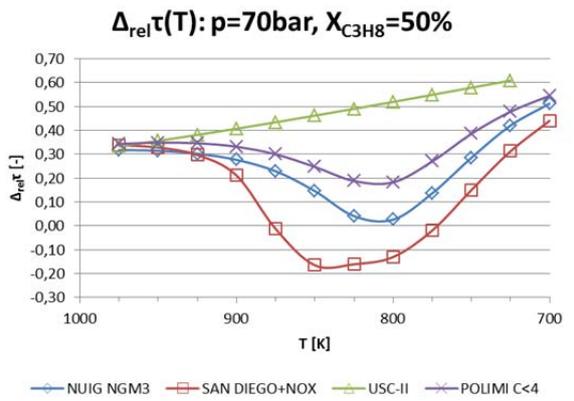
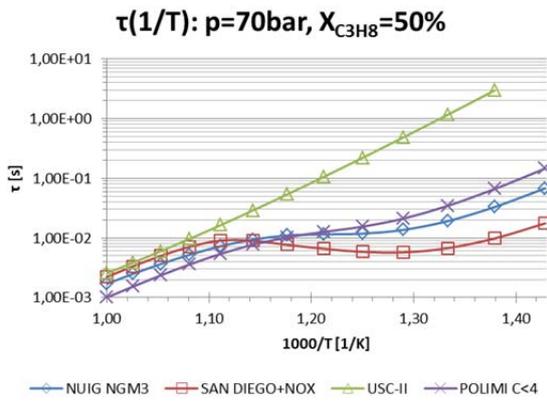
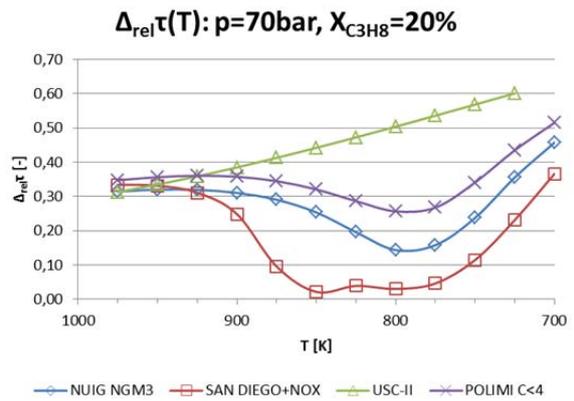
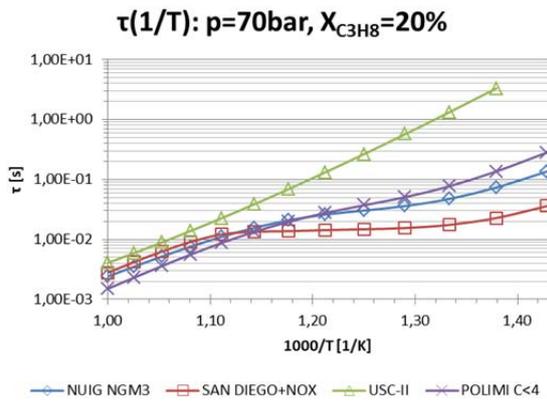
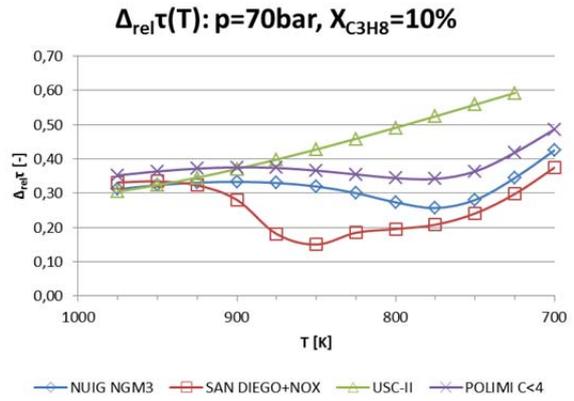
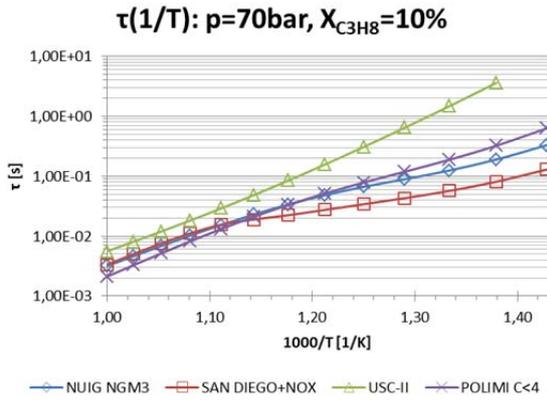
11.2.4 Temperaturabhängigkeit der Zündverzugszeit τ [s] $p = 70\text{bar}$

1000/T			NUIG	SAN DIEGO	POLIMI		$\Delta_{\text{rel}}\tau$ NUIG	$\Delta_{\text{rel}}\tau$ SAN	$\Delta_{\text{rel}}\tau$ USC-II	$\Delta_{\text{rel}}\tau$ POLIMI
T [K]	[1/K]	$X_{\text{C}_3\text{H}_8}$	NGM3	+NOX	USC-II	C<4	NGM3	DIEGO+NOX	USC-II	C<4
1000	1,000	0	6,20E-03	5,25E-03	1,05E-02	7,17E-03				
975	1,026	0	9,06E-03	7,91E-03	1,50E-02	1,15E-02	0,315	0,337	0,299	0,374
950	1,053	0	1,37E-02	1,24E-02	2,18E-02	1,88E-02	0,339	0,362	0,312	0,390
925	1,081	0	2,14E-02	2,03E-02	3,25E-02	3,16E-02	0,361	0,389	0,329	0,406
900	1,111	0	3,48E-02	3,49E-02	4,99E-02	5,49E-02	0,383	0,418	0,349	0,424
875	1,143	0	5,87E-02	6,31E-02	7,94E-02	9,85E-02	0,408	0,448	0,371	0,443
850	1,176	0	1,04E-01	1,21E-01	1,32E-01	1,84E-01	0,435	0,477	0,397	0,465
825	1,212	0	1,94E-01	2,45E-01	2,29E-01	3,60E-01	0,465	0,507	0,424	0,489
800	1,250	0	3,86E-01	5,27E-01	4,18E-01	7,45E-01	0,496	0,536	0,453	0,516
775	1,290	0	8,16E-01	1,21E+00	8,11E-01	1,64E+00	0,527	0,564	0,484	0,545
750	1,333	0	1,84E+00	2,96E+00	1,68E+00	3,84E+00	0,558	0,591	0,517	0,574
725	1,379	0	4,47E+00		3,76E+00		0,587		0,553	
700	1,429	0								
1000	1,000	0,05	4,05E-03	3,94E-03	7,21E-03	2,95E-03				
975	1,026	0,05	5,88E-03	5,89E-03	1,03E-02	4,59E-03	0,311	0,331	0,301	0,357
950	1,053	0,05	8,74E-03	8,91E-03	1,51E-02	7,29E-03	0,328	0,339	0,318	0,370
925	1,081	0,05	1,33E-02	1,34E-02	2,28E-02	1,18E-02	0,341	0,336	0,338	0,382
900	1,111	0,05	2,04E-02	1,95E-02	3,57E-02	1,93E-02	0,351	0,312	0,361	0,390
875	1,143	0,05	3,19E-02	2,62E-02	5,83E-02	3,20E-02	0,360	0,255	0,387	0,396
850	1,176	0,05	5,04E-02	3,49E-02	9,99E-02	5,32E-02	0,367	0,249	0,416	0,399
825	1,212	0,05	8,02E-02	4,91E-02	1,81E-01	8,90E-02	0,371	0,290	0,447	0,402
800	1,250	0,05	1,28E-01	7,23E-02	3,48E-01	1,50E-01	0,373	0,321	0,480	0,408
775	1,290	0,05	2,04E-01	1,11E-01	7,15E-01	2,58E-01	0,373	0,351	0,514	0,418
750	1,333	0,05	3,27E-01	1,83E-01	1,58E+00	4,53E-01	0,376	0,391	0,549	0,431
725	1,379	0,05	5,44E-01	3,27E-01	3,81E+00	8,28E-01	0,399	0,441	0,584	0,453
700	1,429	0,05	9,79E-01	6,50E-01		1,62E+00	0,445	0,497		0,489
1000	1,000	0,1	3,18E-03	3,36E-03	5,63E-03	2,12E-03				
975	1,026	0,1	4,63E-03	5,03E-03	8,10E-03	3,28E-03	0,312	0,332	0,305	0,352
950	1,053	0,1	6,85E-03	7,56E-03	1,20E-02	5,16E-03	0,324	0,335	0,324	0,364
925	1,081	0,1	1,02E-02	1,12E-02	1,83E-02	8,21E-03	0,331	0,323	0,346	0,372
900	1,111	0,1	1,54E-02	1,55E-02	2,91E-02	1,32E-02	0,333	0,281	0,371	0,376
875	1,143	0,1	2,29E-02	1,90E-02	4,84E-02	2,10E-02	0,330	0,181	0,398	0,374
850	1,176	0,1	3,37E-02	2,24E-02	8,46E-02	3,32E-02	0,320	0,151	0,428	0,366
825	1,212	0,1	4,82E-02	2,74E-02	1,56E-01	5,15E-02	0,301	0,185	0,459	0,355
800	1,250	0,1	6,64E-02	3,41E-02	3,07E-01	7,85E-02	0,274	0,196	0,491	0,344
775	1,290	0,1	8,94E-02	4,31E-02	6,47E-01	1,19E-01	0,257	0,208	0,525	0,342
750	1,333	0,1	1,24E-01	5,68E-02	1,46E+00	1,87E-01	0,281	0,241	0,558	0,364
725	1,379	0,1	1,90E-01	8,09E-02	3,60E+00	3,22E-01	0,345	0,298	0,593	0,419
700	1,429	0,1	3,30E-01	1,29E-01		6,28E-01	0,425	0,375		0,487
1000	1,000	0,2	2,41E-03	2,80E-03	4,07E-03	1,51E-03				
975	1,026	0,2	3,52E-03	4,20E-03	5,93E-03	2,31E-03	0,315	0,334	0,314	0,348
950	1,053	0,2	5,18E-03	6,28E-03	8,92E-03	3,59E-03	0,320	0,332	0,335	0,357
925	1,081	0,2	7,62E-03	9,13E-03	1,39E-02	5,62E-03	0,320	0,311	0,359	0,361
900	1,111	0,2	1,11E-02	1,22E-02	2,26E-02	8,75E-03	0,311	0,249	0,385	0,358
875	1,143	0,2	1,56E-02	1,34E-02	3,86E-02	1,34E-02	0,291	0,096	0,413	0,345
850	1,176	0,2	2,09E-02	1,37E-02	6,92E-02	1,97E-02	0,254	0,022	0,442	0,321
825	1,212	0,2	2,60E-02	1,43E-02	1,31E-01	2,76E-02	0,196	0,039	0,473	0,287
800	1,250	0,2	3,04E-02	1,48E-02	2,65E-01	3,71E-02	0,144	0,031	0,504	0,257
775	1,290	0,2	3,61E-02	1,55E-02	5,70E-01	5,07E-02	0,158	0,047	0,536	0,268
750	1,333	0,2	4,73E-02	1,75E-02	1,32E+00	7,70E-02	0,238	0,115	0,569	0,341
725	1,379	0,2	7,35E-02	2,28E-02	3,32E+00	1,36E-01	0,356	0,232	0,601	0,435
700	1,429	0,2	1,36E-01	3,60E-02		2,82E-01	0,458	0,367		0,515
1000	1,000	0,5	1,70E-03	2,22E-03	2,56E-03	1,00E-03				
975	1,026	0,5	2,50E-03	3,35E-03	3,85E-03	1,53E-03	0,318	0,338	0,334	0,344
950	1,053	0,5	3,65E-03	5,00E-03	5,99E-03	2,35E-03	0,315	0,329	0,357	0,349
925	1,081	0,5	5,23E-03	7,11E-03	9,68E-03	3,60E-03	0,303	0,298	0,382	0,347
900	1,111	0,5	7,24E-03	9,02E-03	1,63E-02	5,39E-03	0,277	0,212	0,408	0,332

11 – Anhang

T [K]	1000/T		NUIG			SAN DIEGO		POLIMI		$\Delta_{rel}\tau$	$\Delta_{rel}\tau$	$\Delta_{rel}\tau$	$\Delta_{rel}\tau$
	[K]	[1/K]	NGM3	+NOX	USC-II	C<4	NGM3	DIEGO+NOX	USC-II	C<4	NGM3	DIEGO+NOX	USC-II
875	1,143	0,5	9,39E-03	8,91E-03	2,89E-02	7,70E-03	0,229	-0,012	0,435	0,300			
850	1,176	0,5	1,10E-02	7,65E-03	5,38E-02	1,02E-02	0,146	-0,165	0,462	0,248			
825	1,212	0,5	1,15E-02	6,59E-03	1,06E-01	1,26E-02	0,041	-0,160	0,491	0,188			
800	1,250	0,5	1,18E-02	5,84E-03	2,20E-01	1,54E-02	0,027	-0,130	0,520	0,183			
775	1,290	0,5	1,37E-02	5,73E-03	4,89E-01	2,12E-02	0,137	-0,019	0,549	0,271			
750	1,333	0,5	1,91E-02	6,74E-03	1,16E+00	3,45E-02	0,286	0,151	0,579	0,386			
725	1,379	0,5	3,31E-02	9,82E-03	2,97E+00	6,62E-02	0,421	0,313	0,609	0,479			
700	1,429	0,5	6,79E-02	1,76E-02		1,46E-01	0,513	0,441		0,546			
1000	1,000	1	1,39E-03	1,96E-03	1,98E-03	8,08E-04							
975	1,026	1	2,04E-03	2,97E-03	3,06E-03	1,23E-03	0,318	0,339	0,353	0,345			
950	1,053	1	2,96E-03	4,40E-03	4,91E-03	1,89E-03	0,310	0,325	0,375	0,347			
925	1,081	1	4,16E-03	6,18E-03	8,16E-03	2,86E-03	0,290	0,288	0,399	0,340			
900	1,111	1	5,57E-03	7,63E-03	1,42E-02	4,18E-03	0,252	0,190	0,423	0,316			
875	1,143	1	6,83E-03	7,14E-03	2,57E-02	5,72E-03	0,185	-0,069	0,449	0,269			
850	1,176	1	7,35E-03	5,67E-03	4,89E-02	7,14E-03	0,070	-0,259	0,475	0,198			
825	1,212	1	7,07E-03	4,56E-03	9,79E-02	8,33E-03	-0,038	-0,242	0,501	0,143			
800	1,250	1	7,19E-03	3,95E-03	2,07E-01	1,02E-02	0,016	-0,155	0,528	0,185			
775	1,290	1	8,73E-03	4,03E-03	4,67E-01	1,47E-02	0,176	0,018	0,555	0,306			
750	1,333	1	1,30E-02	5,07E-03	1,12E+00	2,54E-02	0,331	0,206	0,583	0,420			
725	1,379	1	2,37E-02	7,77E-03	2,88E+00	5,09E-02	0,449	0,347	0,611	0,501			
700	1,429	1	5,11E-02	1,43E-02		1,15E-01	0,537	0,455		0,559			

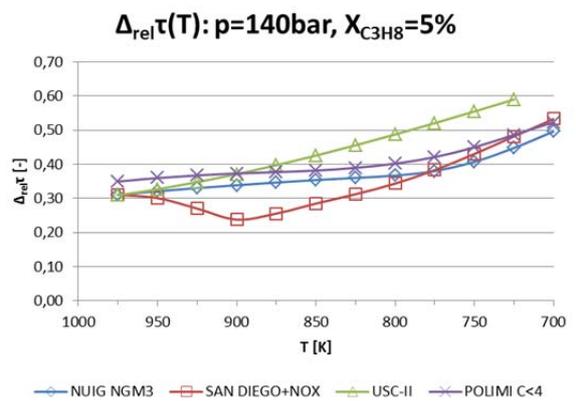
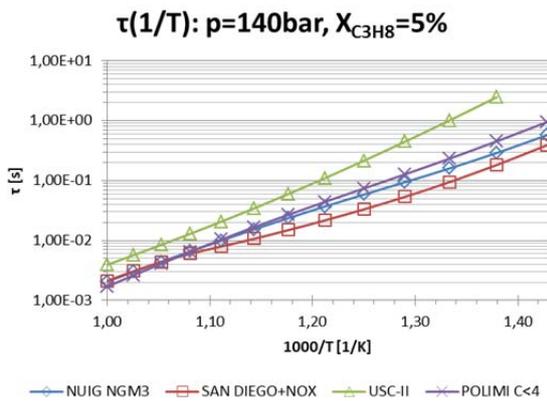
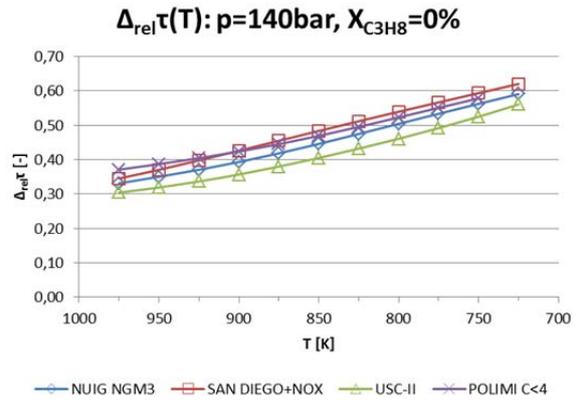
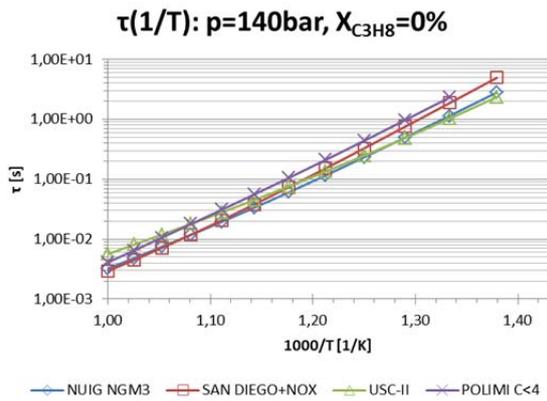


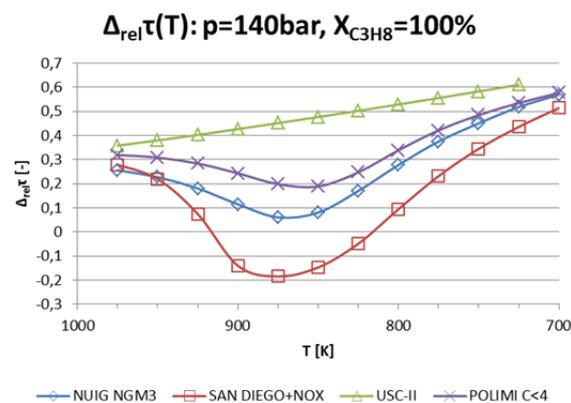
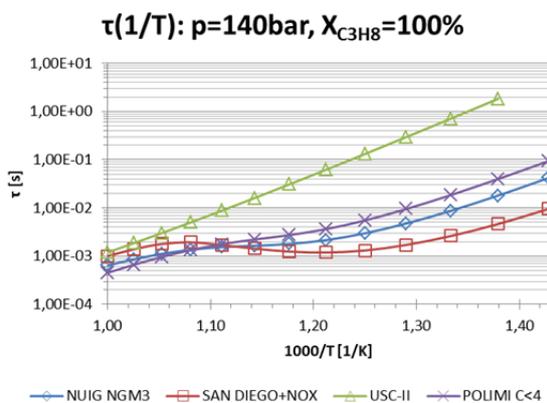
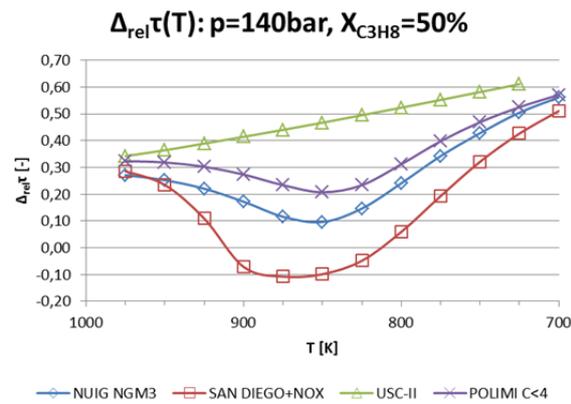
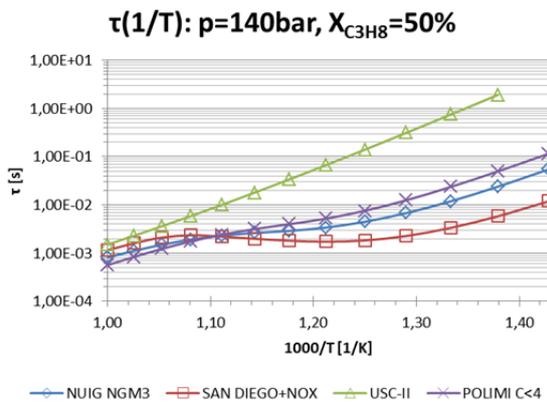
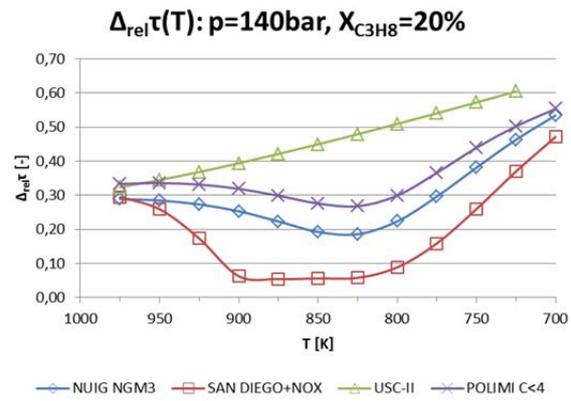
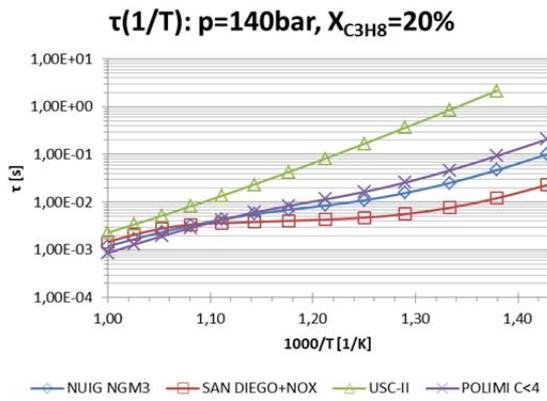
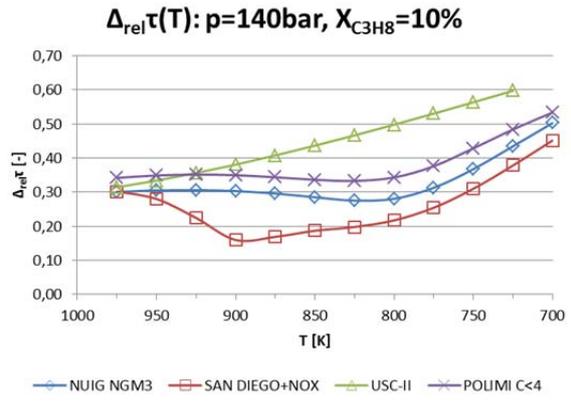
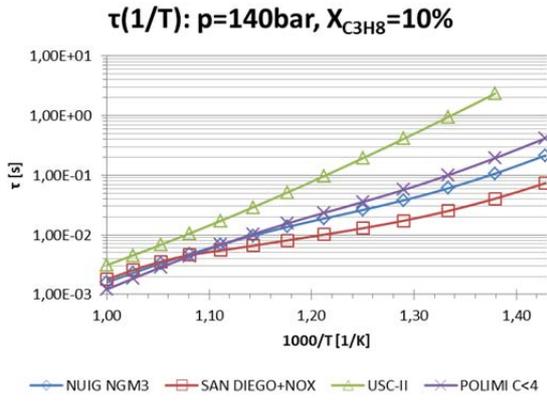


$p = 140\text{bar}$

1000/T			NUIG	SAN DIEGO	POLIMI		$\Delta_{rel}T$ NUIG	$\Delta_{rel}T$ SAN	$\Delta_{rel}T$	$\Delta_{rel}T$ POLIMI
T [K]	[1/K]	X_{C3H8}	NGM3	+NOX	USC-II	C<4	NGM3	DIEGO+NOX	USC-II	C<4
1000	1,000	0	3,24E-03	2,95E-03	5,65E-03	4,10E-03				
975	1,026	0	4,84E-03	4,51E-03	8,12E-03	6,53E-03	0,331	0,346	0,305	0,371
950	1,053	0	7,45E-03	7,17E-03	1,19E-02	1,07E-02	0,351	0,371	0,319	0,387
925	1,081	0	1,18E-02	1,19E-02	1,80E-02	1,79E-02	0,371	0,398	0,337	0,405
900	1,111	0	1,95E-02	2,08E-02	2,80E-02	3,11E-02	0,394	0,426	0,357	0,424
875	1,143	0	3,36E-02	3,81E-02	4,52E-02	5,60E-02	0,419	0,455	0,380	0,445
850	1,176	0	6,07E-02	7,38E-02	7,60E-02	1,06E-01	0,446	0,484	0,405	0,469
825	1,212	0	1,16E-01	1,51E-01	1,34E-01	2,09E-01	0,475	0,512	0,432	0,496
800	1,250	0	2,33E-01	3,29E-01	2,48E-01	4,39E-01	0,505	0,540	0,461	0,523
775	1,290	0	5,01E-01	7,59E-01	4,89E-01	9,78E-01	0,534	0,567	0,492	0,551
750	1,333	0	1,14E+00	1,87E+00	1,03E+00	2,32E+00	0,563	0,594	0,525	0,579
725	1,379	0	2,80E+00	4,92E+00	2,35E+00		0,591	0,621	0,561	
700	1,429	0								
1000	1,000	0,05	2,07E-03	2,13E-03	3,94E-03	1,71E-03				
975	1,026	0,05	3,00E-03	3,08E-03	5,70E-03	2,63E-03	0,311	0,311	0,310	0,350
950	1,053	0,05	4,42E-03	4,41E-03	8,48E-03	4,11E-03	0,321	0,301	0,327	0,360
925	1,081	0,05	6,60E-03	6,05E-03	1,30E-02	6,49E-03	0,331	0,271	0,348	0,368
900	1,111	0,05	9,99E-03	7,94E-03	2,07E-02	1,04E-02	0,339	0,238	0,371	0,373
875	1,143	0,05	1,53E-02	1,07E-02	3,43E-02	1,66E-02	0,347	0,256	0,398	0,377
850	1,176	0,05	2,37E-02	1,49E-02	5,98E-02	2,69E-02	0,354	0,285	0,426	0,382
825	1,212	0,05	3,70E-02	2,17E-02	1,10E-01	4,41E-02	0,360	0,313	0,456	0,390
800	1,250	0,05	5,85E-02	3,31E-02	2,15E-01	7,38E-02	0,367	0,344	0,488	0,402
775	1,290	0,05	9,44E-02	5,37E-02	4,48E-01	1,28E-01	0,380	0,383	0,521	0,421
750	1,333	0,05	1,59E-01	9,43E-02	1,01E+00	2,32E-01	0,408	0,431	0,555	0,450
725	1,379	0,05	2,89E-01	1,82E-01	2,46E+00	4,52E-01	0,448	0,482	0,590	0,486
700	1,429	0,05	5,74E-01	3,90E-01		9,49E-01	0,497	0,533		0,524
1000	1,000	0,1	1,61E-03	1,79E-03	3,12E-03	1,22E-03				
975	1,026	0,1	2,30E-03	2,57E-03	4,55E-03	1,86E-03	0,301	0,302	0,315	0,342
950	1,053	0,1	3,31E-03	3,57E-03	6,83E-03	2,86E-03	0,305	0,280	0,334	0,349
925	1,081	0,1	4,77E-03	4,60E-03	1,06E-02	4,41E-03	0,306	0,225	0,357	0,352
900	1,111	0,1	6,85E-03	5,48E-03	1,72E-02	6,78E-03	0,303	0,160	0,381	0,350
875	1,143	0,1	9,74E-03	6,59E-03	2,90E-02	1,03E-02	0,296	0,169	0,408	0,344
850	1,176	0,1	1,36E-02	8,11E-03	5,15E-02	1,56E-02	0,285	0,187	0,437	0,337
825	1,212	0,1	1,88E-02	1,01E-02	9,66E-02	2,34E-02	0,276	0,198	0,467	0,333
800	1,250	0,1	2,62E-02	1,29E-02	1,92E-01	3,56E-02	0,281	0,218	0,498	0,343
775	1,290	0,1	3,81E-02	1,73E-02	4,10E-01	5,71E-02	0,313	0,255	0,531	0,376
750	1,333	0,1	6,03E-02	2,51E-02	9,41E-01	9,99E-02	0,368	0,310	0,564	0,429
725	1,379	0,1	1,07E-01	4,05E-02	2,34E+00	1,94E-01	0,435	0,379	0,598	0,484
700	1,429	0,1	2,15E-01	7,39E-02		4,16E-01	0,503	0,452		0,534
1000	1,000	0,2	1,20E-03	1,47E-03	2,30E-03	8,59E-04				
975	1,026	0,2	1,68E-03	2,08E-03	3,41E-03	1,29E-03	0,289	0,294	0,324	0,334
950	1,053	0,2	2,35E-03	2,81E-03	5,21E-03	1,94E-03	0,285	0,259	0,345	0,336
925	1,081	0,2	3,24E-03	3,40E-03	8,25E-03	2,91E-03	0,274	0,174	0,369	0,332
900	1,111	0,2	4,34E-03	3,63E-03	1,36E-02	4,27E-03	0,253	0,063	0,394	0,319
875	1,143	0,2	5,59E-03	3,84E-03	2,35E-02	6,09E-03	0,224	0,055	0,421	0,299
850	1,176	0,2	6,93E-03	4,07E-03	4,28E-02	8,41E-03	0,193	0,056	0,450	0,276
825	1,212	0,2	8,51E-03	4,32E-03	8,22E-02	1,15E-02	0,186	0,058	0,479	0,268
800	1,250	0,2	1,10E-02	4,74E-03	1,68E-01	1,64E-02	0,224	0,089	0,510	0,299
775	1,290	0,2	1,56E-02	5,64E-03	3,65E-01	2,59E-02	0,297	0,159	0,541	0,366
750	1,333	0,2	2,52E-02	7,62E-03	8,54E-01	4,62E-02	0,381	0,260	0,573	0,440
725	1,379	0,2	4,70E-02	1,21E-02	2,16E+00	9,30E-02	0,463	0,370	0,605	0,503
700	1,429	0,2	1,01E-01	2,29E-02		2,08E-01	0,535	0,472		0,554
1000	1,000	0,5	8,14E-04	1,15E-03	1,51E-03	5,66E-04				
975	1,026	0,5	1,12E-03	1,61E-03	2,30E-03	8,36E-04	0,271	0,286	0,342	0,323
950	1,053	0,5	1,49E-03	2,10E-03	3,61E-03	1,23E-03	0,252	0,235	0,364	0,318
925	1,081	0,5	1,92E-03	2,36E-03	5,91E-03	1,76E-03	0,221	0,109	0,389	0,303
900	1,111	0,5	2,32E-03	2,20E-03	1,01E-02	2,42E-03	0,172	-0,071	0,414	0,273
875	1,143	0,5	2,62E-03	1,99E-03	1,80E-02	3,16E-03	0,116	-0,108	0,440	0,234

T [K]	1000/T		X _{C₃H₈}	NUIG SAN DIEGO			POLIMI		$\Delta_{rel}\tau$ NUIG	$\Delta_{rel}\tau$ SAN	$\Delta_{rel}\tau$ USC-II	$\Delta_{rel}\tau$ POLIMI
	[1/K]			NGM3	+NOX	USC-II	C<4	C<4				
850	1,176	0,5	2,90E-03	1,81E-03	3,38E-02	3,99E-03	0,096	-0,099	0,467	0,207		
825	1,212	0,5	3,40E-03	1,73E-03	6,70E-02	5,20E-03	0,146	-0,048	0,495	0,234		
800	1,250	0,5	4,48E-03	1,83E-03	1,41E-01	7,56E-03	0,241	0,059	0,523	0,312		
775	1,290	0,5	6,81E-03	2,27E-03	3,14E-01	1,26E-02	0,342	0,193	0,552	0,398		
750	1,333	0,5	1,19E-02	3,35E-03	7,49E-01	2,36E-02	0,428	0,321	0,581	0,469		
725	1,379	0,5	2,40E-02	5,84E-03	1,92E+00	4,98E-02	0,505	0,426	0,611	0,525		
700	1,429	0,5	5,48E-02	1,19E-02		1,16E-01	0,562	0,511		0,571		
1000	1,000	1	6,42E-04	1,01E-03	1,20E-03	4,53E-04						
975	1,026	1	8,64E-04	1,40E-03	1,87E-03	6,65E-04	0,256	0,279	0,358	0,320		
950	1,053	1	1,12E-03	1,79E-03	3,02E-03	9,63E-04	0,227	0,220	0,380	0,309		
925	1,081	1	1,36E-03	1,93E-03	5,06E-03	1,35E-03	0,181	0,075	0,403	0,284		
900	1,111	1	1,54E-03	1,70E-03	8,83E-03	1,78E-03	0,115	-0,140	0,427	0,244		
875	1,143	1	1,64E-03	1,43E-03	1,61E-02	2,22E-03	0,061	-0,184	0,452	0,199		
850	1,176	1	1,79E-03	1,25E-03	3,08E-02	2,74E-03	0,081	-0,147	0,477	0,189		
825	1,212	1	2,16E-03	1,19E-03	6,20E-02	3,64E-03	0,171	-0,048	0,503	0,248		
800	1,250	1	2,99E-03	1,32E-03	1,32E-01	5,51E-03	0,278	0,095	0,529	0,339		
775	1,290	1	4,78E-03	1,71E-03	2,97E-01	9,52E-03	0,375	0,232	0,556	0,422		
750	1,333	1	8,70E-03	2,61E-03	7,12E-01	1,85E-02	0,451	0,345	0,583	0,485		
725	1,379	1	1,81E-02	4,64E-03	1,83E+00	3,98E-02	0,519	0,436	0,611	0,535		
700	1,429	1	4,20E-02	9,55E-03		9,40E-02	0,569	0,514		0,577		





11.3 Parametervariation laminare Flammgeschwindigkeit s_L [cm/s]

Run	p [bar]	T [K]	Gas	USC-II	POLIMI C<4	SAN DIEGO+NOX
1	70	700	CH4	6,90	6,85	7,80
2	70	700	Mix1	7,72	7,44	8,25
3	70	700	Mix2	7,99	7,88	8,52
4	70	700	Mix3	8,68	9,00	9,23
5	100	700	CH4	6,47	6,25	7,14
6	100	700	Mix1	6,81	6,76	7,53
7	100	700	Mix2	7,03	7,15	7,77
8	100	700	Mix3	7,60	8,16	8,44
9	70	850	CH4	14,68	16,16	17,75
10	70	850	Mix1	15,48	17,37	18,74
11	70	850	Mix2	16,06	18,33	19,42
12	70	850	Mix3	17,54	20,81	21,23
13	100	850	CH4	12,85	14,36	16,10
14	100	850	Mix1	13,51	15,43	16,99
15	100	850	Mix2	13,98	16,30	17,72
16	100	850	Mix3	15,10	18,53	19,63
17	70	1000	CH4	28,13	35,55	37,53
18	70	1000	Mix1	29,76	38,46	39,61
19	70	1000	Mix2	31,03	41,17	40,80
20	70	1000	Mix3	34,37	49,44	43,86
21	100	1000	CH4	24,28		34,44
22	100	1000	Mix1	25,75		36,69
23	100	1000	Mix2	26,88		38,02
24	100	1000	Mix3	30,04		41,61

