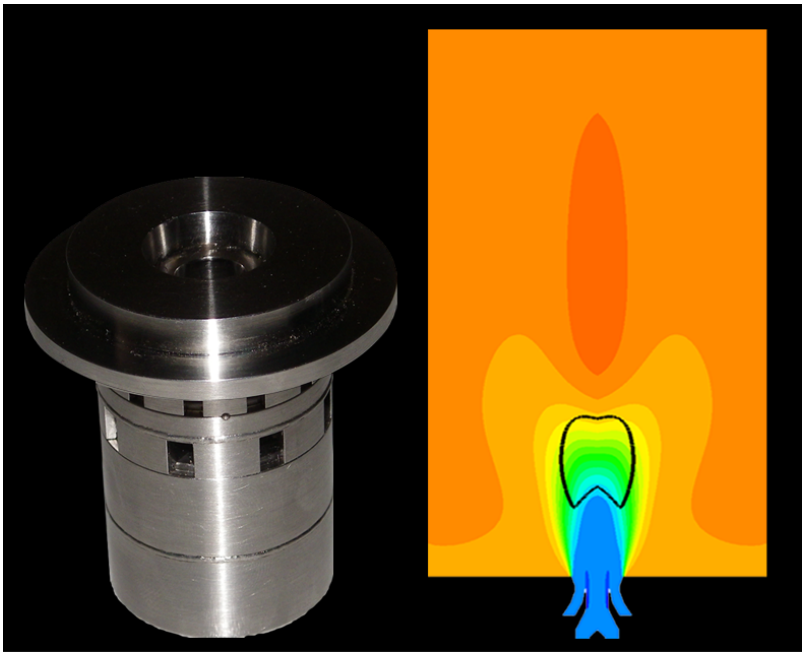
Karlsruhe Institute of Technology

Numerische Untersuchung des Brennverhaltens einer abgehobenen Flamme unter erhöhtem Druck



cand.ciw. Daniel Petrovic

Engler-Bunte-Institut
Bereich Verbrennungstechnik (EBI-VBT)

Prof. Dr.-Ing. N.Zarzalis

Betreuerin: Dipl.-Ing. Julia Sedlmaier

Karlsruhe Institute of Technology
Engler-Bunte-Institute
Division of Combustion Technology

Diplomarbeit Nr.: 496

für Herrn cand. ciw. Daniel Petrovic

Thema:

Numerische Untersuchung des Brennverhaltens einer abgehobenen Flamme unter erhöhtem Druck

Aufgabenstellung:

In Forschungsprojekten der letzten Jahre hat sich gezeigt, dass abgehobene Flammen geringe NOx-Emissionen aufweisen. Die abgehobenen Flammen zeichnen sich durch das Vorhandensein einer praktisch reaktionsfreien Zone zwischen dem Brenneraustritt und der Flamme aus. Die getrennt zugeführten Brennstoff und Oxidationsmittel haben somit in dieser Zone eine gewisse Zeit, um sich miteinander zu vermischen bevor die Verbrennungsreaktion einsetzt. Die in dieser Zeit zurückgelegte Distanz bis zur Reaktionszone wird hierbei Abhebehöhe der Flamme genannt.

Im Rahmen dieser Arbeit soll das Brennverhalten einer abgehoben brennenden Flamme unter erhöhtem Druck numerisch untersucht werden. Dabei sollen der Einfluss diverser Betriebsparameter, wie zum Beispiel Druck, Druckverlust über die Düse, Vorwärmtemperatur, Verhältnis zwischen Luft- und Brennstoffmenge (air-to-fuel-ratio, kurz: AFR) und Reaktionsmechanismen variiert werden. Ziel ist es, den Einfluss dieser Parameter auf die Position der Flamme und somit die Abhebehöhe zu bestimmen. Zur Simulation soll das nicht kommerzielle Programm OpenFOAM verwendet werden. Die Verbrennungsreaktion wird in dieser Arbeit mit Hilfe eines Verbundswahrscheinlichkeitsansatzes (joint probability density function, kurz JPDF) modelliert.

Die Ergebnisse der Arbeit sind in schriftlicher Form darzustellen und im Seminar des Engler-Bunte-Instituts – Bereich Verbrennungstechnik zu präsentiert.

Beginn:	13.06.2012
Ende:	12.12.2021
Aufgabensteller:	Prof. Dr.-Ing. Nikolaos Zarzalis
Betreuerin:	Dipl.-Ing. Julia Sedlmaier

Erklärung des Authors

Hiermit versichere ich, dass

- ich die vorliegende Arbeit selbständig angefertigt habe,
- keine andere als die angegebenen Hilfsmittel und Quellen verwendet habe.

Ich erkläre mich damit einverstanden, dass meine Arbeit in die Bibliothek eingestellt und kopiert werden darf.

Daniel Petrovic Karlsruhe, 12.12.2012

Nomenklatur

Symbol	Einheit	Bedeutung
Lateinische Symbole		
A	m^2	Fläche
c, C	–	Reaktionsfortschrittsvariable
d	m	Durchmesser
$\mathcal{D}$	m^2/s	Diffusionskoeffizient
$\dot{D}$	$N \cdot m \cdot s$	Drehimpulsstrom
Da	–	Damköhler-Zahl
E_A	J/mol	Aktivierungsenergie
E_t	J/m^3	Volumenbezogene Energie
$\vec{f}$	N/kg	Vektor der Volumenkräfte pro Masseneinheit
f, F	kg/kg	Mischungsbruch
f_{stoch}	kg/kg	Stöchiometrischer Mischungsbruch
h	J/kg	spezifische Enthalpie
H	J	Gesamtenthalpie
$\dot{I}$	$N \cdot s$	Axialimpulsstrom
j_i^k	$kg/(m^2 \cdot s)$	Diffusionsstromdichte der Komponente k in i-ter Raumrichtung, $i = 1, 2, 3$
j_i^Φ	$\frac{(\Phi)}{m^2 \cdot s}$	Fluss der skalaren Größe Φ
j_i^q	$W/(m^2 \cdot s)$	Energiestromdichte

k_x, k_y, k_z	N/m^3	Volumenkräfte in x, y und z Richtung
$\vec{k}$	N/m^3	Vektor der Volumenkräfte pro Volumeneinheit
k	m^2/s^2	Massenbezogene turbulente kinetische Energie
Ka	–	Karlovitz-Zahl
$\dot{m}$	kg/s	Massenstrom
L	m	Charakteristische Länge
L_t	m	Das turbulente integrale Längenmaß
p	N/m^2	Druck
Pr_t	–	Turbulente Prandtl-Zahl
$\mathcal{P}_\phi$	–	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion
$\vec{q}$	J/m^2	Vektor des Wärmeflusses durch die Kontrollfläche
$\dot{q_R}$	$J/(m^3 \cdot s)$	Quellterm für Energiezufuhr
Q	J/m^3	Volumenbezogene zugeführte Wärme
r	m	Radius
R	$J/(mol \cdot K)$	ideale Gaskonstante
Re	–	Reynoldszahl
s_L	m/s	Laminare Flammengeschwindigkeit
s_T	m/s	Turbulente Flammengeschwindigkeit
S	–	Drallzahl
S	J/K	Entropie
Sc_f	–	Turbulente Schmidt-Zahl der Mittelwerttransportgleichung des Mischungsbruchs f
$Sc_{f"}$	–	Turbulente Schmidt-Zahl der Varianztransportgleichung des Mischungsbruchs f
Sc_c	–	Turbulente Schmidt-Zahl der Mittelwerttransportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariable c
$Sc_{c"}$	–	Turbulente Schmidt-Zahl der Varianztransportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariable c
Sc_k	–	Schmidt-Zahl der Komponente k
S_Φ	$\frac{(\Phi) \cdot kg}{m \cdot s}$	Quellterm der allgemeinen skalaren Transportgleichung
t	s	Zeit
T	K	Temperatur

u_i	m/s	Geschwindigkeitskomponente in i-ter Raumrichtung, $i = 1, 2, 3$
u_x, u_y, u_z	m/s	Geschwindigkeitskomponenten in x, y und z Richtung
W_K	g/mol	Molare Masse der Spezies K
Y_k	kg/kg	Massenbruch der Komponente k
Z_k	kg/kg	Massenbruch des chemischen Elementes k

Griechische Symbole

Γ_t	$kg/(m \cdot s)$	Turbulente Diffusitivität
δ	m	Flammendicke
Δp	N/m^2	Druckverlust
ε	$\mathrm{m}^2/\mathrm{s}^2$	Dissipationsrate von k
η	m	Kolmogorovlänge
κ	–	Verhältnis von spezifischen Wärmekapazitäten beim konstanten Druck und bei konstanter Temperatur ($= \frac{c_p}{c_v}$). Für Luft: $\kappa = 1,4$.
λ	–	Luftzahl
μ	$kg/(m \cdot s)$	dynamische Viskosität
μ_t	$kg/(m \cdot s)$	turbulente dynamische Viskosität
ν	m^2/s	kinematische Viskosität
ρ	kg/m^3	Dichte
σ	N/m^2	Normalspannungen
σ_t	–	Proportionalitätsfaktor aus turbulentem Impulsaustausch und turbulentem Austausch eines Skalars
τ	N/m^2	Schubspannungen
Φ	$J/(m^3 \cdot s)$	Volumenbezogene Energiedissipationsrate
Φ	–	Skalare Größe
$\dot{\omega}_k$	$kg/(m^3 \cdot s)$	Produktionsgeschwindigkeit der Komponente k
$\omega(r)$	m/s	Tangentialgeschwindigkeit im Abstand r von der Rotationsachse

Operatoren

$\bar{()}$	Reynolds-Mittelwert
$()'$	Reynolds-Schwankungswert

$\widetilde{()}$	Favre-Mittelwert
$()''$	Favre-Schwankungswert
$()_l$	laminare Größe
$()_t$	turbulente Größe

Abkürzungen

A_{eff}	Effektive Fläche
AFR(LBV)	Luft/Brennstoff Verhältnis
CO	Kohlenmonoxid
CO_2	Kohlendioxid
NO_x	Stickoxid

Inhaltsverzeichnis

Erklärung des Authors

Nomenklatur

1 Einleitung **1**

2 Theoretische Grundlagen **2**
2.1 Strömungsmechanische Grundlagen . . . 2
2.1.1 Bilanzgleichungen . . . 2
2.1.2 Laminare und turbulente Strömungen . . . 7
2.1.3 Turbulenter Transport eines Skalars . . . 7
2.2 Physikalische Phänomene von Drehströmungen . . . 8
2.2.1 Drallzahl . . . 8
2.2.2 Vortex Breakdown . . . 9
2.3 Verbrennungstechnische Grundlagen . . . 10
2.3.1 Unterscheidung der Flammen nach dem Grad der Vormischung . . . 10
2.3.2 Flammenstabilisierung . . . 13
2.3.3 Die charakteristischen Kennzahlen turbulenter Flammenstrukturen . 13
2.3.4 Regime-Diagramm nach BORGHI . . . 14
2.4 Turbulenzmodelle . . . 15
2.4.1 Überblick der Turbulenzmodelle . . . 15
2.4.2 Statistische Turbulenzmodelle . . . 16
2.4.3 Standard k-ε Turbulenzmodell . . . 17
2.4.4 Standard k-ω Turbulenzmodell . . . 18
2.4.5 k-ω-SST Turbulenzmodell . . . 18
2.5 Turbulente Reaktionsmodelle . . . 19
2.5.1 Mathematische Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion . 20
2.5.2 Berechnung des Reaktionsquellterms . . . 22

3 Numerisches Setup **26**
3.1 Gitter und Geometrie . . . 26
3.1.1 Diskretisierungsansätze . . . 26
3.1.2 Auswahl des Gitters . . . 27
3.2 Brennstoffmodelle und Reaktionsmechanismen . . . 28
3.2.1 GRI3.0 . . . 28
3.2.2 Aachen . . . 29
3.2.3 Franzelli . . . 30
3.2.4 Westbrook . . . 30
3.2.5 Erweiterung der Reaktionsschema durch CH* und OH* Reaktionen 30
3.3 Festlegung der Betriebspunkte und Randbedingungen . . . 31
3.4 Erstellung der JPDF-lookup Tabellen . . . 38

4 Diskussion der Ergebnisse **40**
4.1 Einfluss der JPDF-Tabellierung 40
4.1.1 HRCT und PREMIX 40
4.1.2 Definition der Reaktionsfortschrittsvariable 43
4.1.3 Auflösung der Tabellierung 45
4.2 Vergleich der Kerosin-Mechanismen 45
4.3 Erweiterung des GRI3.0 und des Aachen Mechanismus um OH* und CH* . 46
4.4 Einfluss der turbulenten Mischungsbruch-Diffusitivität 48
4.5 Abhängigkeit der Abhebehöhe von Betriebsparametern 50
4.5.1 Variation von Betriebsdruck 50
4.5.2 Variation der Luftvorwärmtemperatur 53
4.5.3 Variation der Gemischzusammensetzung 56
4.5.4 Variation vom Druckverlust über die Düse 59

5 Zusammenfassung **62**

Literaturverzeichnis **64**

1. Einleitung

Bei den Verbrennungsprozessen entstehen aus Brennstoff und Oxidationsmittel (Verbrennungsluft) Wärme und Verbrennungsprodukte. In den letzteren befinden sich unter anderem auch für den Menschen und seine Umwelt schädliche Stoffe. Dazu zählen vor allem die Stickoxide NO_x. Die Stickoxide können sowohl bei der Umsetzung von stickstoffhaltigen Brennstoffen sowie bei hohen Temperaturen aus Verbrennungsluft entstehen. Es bestehen verschiedene Maßnahmen zur Senkung der NO_x Emissionen. Dazu zählen z.B. Wirkungsgraderhöhung, Verwendung emissionsarmer Brennstoffe, Abgasreinigung oder Verbesserung der Prozesstechnik. Eine Lösung für die Verbesserung der Prozesstechnik ist unter anderem auch die Vermeidung der Temperaturspitzen. Das kann durch verschiedene strömungstechnische Maßnahmen erreicht werden. Ein Beispiel dafür ist die Verwendung der teilvorgemischten Verbrennung, wie es am Beispiel der abgehobenen Flammen der Fall ist. Bei den teilvorgemischten Flammen werden die Temperaturspitzen und somit auch die NO_x Bildung aufgrund höherer Homogenisierung des Brennstoff/Luft Gemisches reduziert.
Diese Arbeit hat zum Ziel das Brennverhalten der abgehobenen Flammen numerisch zu untersuchen. Dabei soll vor allem der Einfluss verschiedener Parameter auf die Abhebehöhe überprüft werden. Dazu zählen vor allem der Druck, die Vorwärmtemperatur der Luft, der Druckverlust über die Düse und das Luft/Brennstoff Verhältnis (engl. air to fuel ratio - AFR). Zusätzlich zu untersuchen ist noch die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Auswahl des chemischen Mechanismus für die Reaktionskinetik des betreffenden Brennstoffs. Für die numerischen Berechnungen wird das frei verfügbare Programm OpenFOAM verwendet. Als Brennstoffe werden Methan und verdampftes Kerosin benutzt. Für Methan wird der GRI3.0 Reaktionsmechanismus verwendet, während für Kerosin eine Auswahl zwischen dem detaillierten Aachen- und den reduzierten Franzelli- und Westbrook-Mechanismen steht.

2. Theoretische Grundlagen

2.1 Strömungsmechanische Grundlagen

2.1.1 Bilanzgleichungen

Im Folgenden werden die für Fluidströmungen geltenden Erhaltungssätze für Masse, Impuls und Energie nach [OBR11] und [WL94] beschrieben.

Massenerhaltung

Die Massenerhaltung an einem Volumenelement besagt, dass:

$$\begin{gathered}\text{Die zeitliche Änderung der Masse im Volumenelement} = \\ \sum \text{der einströmenden Massenströme in das Volumenelement} - \\ \sum \text{der ausströmenden Massenströme aus dem Volumenelement}\end{gathered}$$

In koordinatenfreier Vektorschreibweise, unter der Annahme, dass das Volumenelement unendlich klein wird, lautet die Massenerhaltungsgleichung:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \cdot \vec{u}) = 0 \tag{2.1}$$

Dabei stellt $\nabla\cdot$ die Divergenz des jeweiligen Vektors, bzw. $\nabla = (\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z})^T$ dar.

Bilanz der Speziesmassen

In einem System aus k Spezies gilt je eine Bilanzgleichung für die Massen der chemischen Komponenten und ihres Massenbruchs Y_k:

$$\frac{\partial(\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i Y_k)}{\partial x_i} = -\frac{\partial j_i^k}{\partial x_i} + \dot{\omega}_k \tag{2.2}$$

Der Diffusionsstrom j_i^k kann nach dem Fick'schen Diffusionsgesetz ausgedrückt werden:

$$j_i^k = -\frac{\mu}{Sc_k} \cdot \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \tag{2.3}$$

Sc_k ist dabei die Schmidt-Zahl der Spezies k.

Erhaltung des Impulses - Navier-Stokes Gleichungen

Die Impulserhaltung besagt, dass

$$\begin{gathered}\text{Die zeitliche Änderung des Impulses im Volumenelement} = \\ \sum \text{der eintretenden Impulsströme in das Volumenelement} - \\ \sum \text{der austretenden Impulsströme aus dem Volumenelement} + \\ \sum \text{der auf das Volumenelement wirkenden Scherkräfte, Normalspannungen} + \\ \sum \text{der auf die Masse des Volumenelements wirkenden Kräfte}\end{gathered}$$

Daraus resultieren die Gleichungen für die zeitliche Änderung des Impulses in den drei Raumkoordinaten. Die Impulserhaltungsgleichung für die x Koordinate lautet:

$$\frac{\partial(\rho \cdot u_x)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot u_x \cdot u_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho \cdot u_x \cdot u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho \cdot u_x \cdot u_z)}{\partial z} = k_x + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \tag{2.4}$$

Die drei Normalspannungen können aufgeteilt werden in einen Druckanteil und einen Anteil infolge der Reibungseffekte des Fluids:

$$\tau_{xx} = \sigma_{xx} - p,\ \tau_{yy} = \sigma_{yy} - p,\ \tau_{zz} = \sigma_{zz} - p$$

Durch Einsetzen dieser Ausdrücke in die Gl. (2.4), ergibt sich die folgende Gleichung:

$$\frac{\partial(\rho \cdot u_x)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot u_x^2)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho \cdot u_x \cdot u_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho \cdot u_x \cdot u_z)}{\partial z} = k_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \tag{2.5}$$

Der Zusammenhang zwischen den Spannungen und Geschwindigkeitskomponenten kann bei den laminaren Strömungen durch den Stokes'schen Reibungsansatz beschrieben werden. Der Stokes'sche Reibungsansatz stellt eine Erweiterung des Newtonschen linearen Ansatzes $\tau = \mu \frac{du}{dz}$ dar und lautet:

$$\begin{gathered}\sigma_{xx} = 2 \cdot \mu \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{2}{3} \cdot \mu \cdot \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right) \\ \tau_{yx} = \tau_{xy} = \mu \cdot \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_y}{\partial y}\right), \tau_{zx} = \tau_{xz} = \mu \cdot \left(\frac{\partial u_x}{\partial x} + \frac{\partial u_z}{\partial z}\right)\end{gathered}$$

Durch Einsetzen des Stokesschen Reibungsansatzes in (2.5) und mit der Kontinuitätsgleichung (2.1) erhält man die Navierstokes-Gleichungen für die *laminaren kompressiblen instationären* Strömungen. Die entsprechende Navier-Stokes Gleichung in der x Richtung lautet:

$$\rho(\frac{\partial u_x}{\partial t} + u_x \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} + u_y \cdot \frac{\partial u_y}{\partial y} + u_z \cdot \frac{\partial u_z}{\partial z}) = \\ k_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}[\mu \cdot (2 \cdot \frac{\partial u_x}{\partial x} - \frac{2}{3} \cdot (\nabla \cdot \vec{u}))] + \frac{\partial}{\partial y}[\mu \cdot (\frac{\partial u_x}{\partial y} + \frac{\partial u_y}{\partial x})] + \frac{\partial}{\partial z}[\mu \cdot (\frac{\partial u_x}{\partial z} + \frac{\partial u_z}{\partial x})] \tag{2.6}$$

Auf der linken Seite der Gl.(2.6) sind die lokale und konvektive Beschleunigungen des Fluids. Auf der rechten Seite sind die Volumen-, Druck- und Reibungskräfte berücksichtigt. Während die Druckkräfte eine Verschiebung des Fluidelementes in die Kraftrichtung verursachen, bewirken die Schubkräfte die Scherung des Fluidelementes. Die Letztere ist besonders in der reibungsbehafteten Grenzschicht ausgeprägt.

Erhaltung der Energie

Durch die Bilanzierung der Energieströme an einem Volumenelement, ergibt sich die Energiebilanz (I Hauptsatz der Thermodynamik):

$$\frac{\partial E_t}{\partial t} + \nabla \cdot E_t \vec{u} = \frac{\partial Q}{\partial t} - \nabla \cdot \vec{q} + \rho \vec{f} \cdot \vec{u} + \nabla \cdot (\prod_{ij} \cdot \vec{u}) \tag{2.7}$$

Dabei sind:

$E_t = \rho(e + \frac{u^2}{2} + \text{potenzielle Energie} + ...)$= Gesamtenergie pro Volumeneinheit

e = innere Energie pro Masseneinheit

$\nabla \cdot \vec{q}$ = Wärmefluss durch die Kontrollfläche

$\vec{f}$ = Vektor der Volumenkräfte pro Masseneinheit

$\prod_{ij} = -p\delta_{ij} + \tau_{ij}$ = Spannungstensor

Die Gl. (2.7) kann mit Hilfe der Kontinuitätsgl. (2.1) umgeformt werden zu:

$$\rho \frac{de}{dt} + p \cdot (\nabla \cdot \vec{u}) = \frac{\partial Q}{\partial t} - \nabla \cdot \vec{q} + \Phi \tag{2.8}$$

mit

$$\Phi = \tau_{ij} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} = \nabla \cdot (\tau_{ij} \cdot \vec{u}) - (\nabla \cdot \tau_{ij}) \cdot \vec{u} \tag{2.9}$$

Φ ist dabei die Dissipationsfunktion und stellt die Rate dar, mit der die mechanische Energie infolge der Reibungskräfte dissipiert wird.

Mit der Definition von Enthalpie: $h = e + \frac{p}{\rho}$ bzw. $E_t = \rho H - p$ entsteht aus (2.7) die Energiegleichung für die Enthalpie:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho H) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_j H + q_j - u_i \tau_{ij}) = \frac{\partial p}{\partial t} \tag{2.10}$$

Modifizierte Navier-Stokes Gleichungen für turbulente Strömungen

Das numerische Lösen der im vorherigen Abschnitt hergeleiteten Gleichungen ist für die technischen Systeme kaum möglich. Die dafür erforderlichen Rechenleistungen und Speicherkapazitäten sind für die Mehrzahl technischer Probleme viel zu groß, so dass andere Ansätze gebraucht werden, um diese Problemstellungen praktisch zu erfassen. Außerdem sind die meisten in der Praxis betrachteten Probleme turbulent. Der übliche Weg bei der Aufstellung der Gleichungen im Fall der turbulenten Strömungen ist der zeitliche Wert einer Strömungsvariable in den Mittelwert und die Fluktation (Abweichung vom Mittelwert) aufzuteilen.

Reynolds-Mittelung

Bei der Reynoldsmittelung wird von einem zeitlichen Mittelwert in der Form [AAP97]:

$$\bar{f} = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} f dt \tag{2.11}$$

ausgegangen.

Die Strömungsvariablen werden entsprechend in Mittelwert und Fluktation (Schwankung) um den Mittelwert aufgeteilt. Im Fall des kartesischen Koordinatesystems ergibt sich damit:

$$u = \bar{u} + u', v = \bar{v} + v', w = \bar{w} + w', \rho = \bar{\rho} + \rho' \tag{2.12}$$

$$p = \bar{p} + p', T = \bar{T} + T', h = \bar{h} + h', H = \bar{H} + H' \tag{2.13}$$

Der zeitliche Mittelwert der Fluktationen ist nach Definition gleich 0:

$$\bar{f}' = \frac{1}{\Delta t} \int_{t_0}^{t_0+\Delta t} f' dt = 0 \tag{2.14}$$

Die Reynolds-gemittelte Form der Kontinuitätsgleichung lässt sich aus diesen Definitionen herleiten [AAP97] zu:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\bar{u}_j + \overline{\rho' u'_j}) = 0 \tag{2.15}$$

Die Reynolds gemittelte Impulsgleichung (in x Richtung) wird zu:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\bar{u}_i + \overline{\rho' u_i'}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\bar{u}_i\bar{u}_j + \bar{u}_i\overline{\rho' u_j'}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\tau_{ij}} - \bar{u}_j\overline{\rho' u_i'} - \bar{\rho}\overline{u_i' u_j'} - \overline{\rho' u_i' u_j'}) \quad (2.16)$$

Favre-Mittelung

Für die Behandlung von kompressiblen Strömungen, wie z.b Gasen, ist die Favre Mittelung der Strömungsvariablen besser geeigent. Dabei werden die massengemittelten Größen eingeführt:

$$\tilde{u} = \frac{\overline{\rho \cdot u}}{\bar{\rho}}, \tilde{v} = \frac{\overline{\rho \cdot v}}{\bar{\rho}}, \tilde{w} = \frac{\overline{\rho \cdot w}}{\bar{\rho}}, \quad (2.17)$$

$$\tilde{p} = \frac{\overline{\rho \cdot p}}{\bar{\rho}}, \tilde{T} = \frac{\overline{\rho \cdot T}}{\bar{\rho}}, \tilde{e} = \frac{\overline{\rho \cdot e}}{\bar{\rho}} \quad (2.18)$$

Der Mittelwert vom Produkt ist definiert als: $\overline{\rho u} = \lim_{t\to\infty} \int_0^t (\rho \cdot u) \cdot dt$

Die einzelnen Strömungsvariablen werden analog zu Reynolds-Mittelung in Mittelwert und Schwankung um den Mittelwert zerlegt:

$$u = \tilde{u} + u'', v = \tilde{v} + v'', w = \tilde{w} + w'', \rho = \tilde{\rho} + \rho'' \quad (2.19)$$

$$p = \tilde{p} + p'', T = \tilde{T} + T'', e = \tilde{e} + e'' \quad (2.20)$$

Der wichtige Unterschied zu Reynolds-Mittelung ist, dass die zeitlich gemittelte Größe von f'' nicht gleich 0 ist. Dagegen ist $\overline{\rho \cdot f''} = 0$

Die Kontinuitäts-, Impuls- und Enthalpiegleichungen erhalten dann im Falle der Favre-Mittelung die folgende Form:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u_j}) = 0 \quad (2.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\bar{\rho}\tilde{u_i}) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\rho}\tilde{u_i}\tilde{u_j}) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j}(\bar{\tau_{ij}} - \bar{\rho}\overline{u_i'' u_j''}) \quad (2.22)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u_i}\tilde{h})}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \overline{\tilde{u_i}\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}} + \overline{u_i''\frac{\partial p}{\partial x_i}} - \frac{\partial \overline{j_i^q}}{\partial x_i} + \overline{\tau_{ij,l}\frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{u_i'' h''})}{\partial x_i} + \overline{\dot{q}_R} \quad (2.23)$$

2.1.2 Laminare und turbulente Strömungen

Laminare Strömungen

Bei einer laminaren Strömung strömt das Fluid in Schichten, wobei sich die Fluidelemente zwischen einzelnen Schichten nicht vermischen, Abb. 2.1. Diese laminaren Schichten haben aufgrund der geringeren Querdiffusion deutlich kleinere Strömungsverluste als die turbulenten. Bei laminaren Strömungen bildet sich ein parabolisches Strömungsprofil aus, wobei die Geschwindigkeit der Fluidelemente von der Wand bis zur Achse hin kontinuierlich zunimmt. Sind in der Umgebung Störungen vorhanden, was praktisch immer der Fall ist, geht die geordnete Bewegung in die ungeordnete turbulente Strömung über. Der Übergang wird mit der Reynoldszahl Re beschrieben, die in der Gl. (2.24) definiert ist:

$$Re = \frac{u \cdot L}{\nu} \tag{2.24}$$

Dabei stellen u die mittlere Strömungsgeschwindigkeit, L die charakteristische Länge und ν die kinematische Viskosität dar.

Turbulente Strömungen

Bei einer turbulenten Strömung schwanken die Strömungsgrößen um die Mittelwerte. Der viskose Widerstand bei einer turbulenten Strömung ist größer als bei laminaren und deswegen ist das Geschwindigkeitsprofil mehr abgeflacht. Der erhöhte Widerstand ist bedingt durch die größere Querdiffusion zwschen den Strömungsteilchen, Abb. 2.1. Die Energieverluste bei einer turbulenten Strömung werden aus der kinetischen Energie gespeist. Die typischen Strömungsstrukturen, die bei einer turbulenten Strömung entstehen, werden die turbulenten Wirbel genannt.

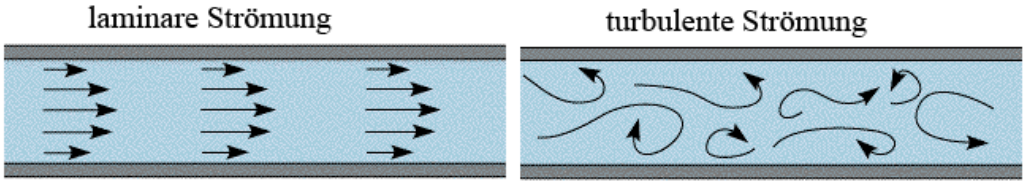


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung der laminaren und turbulenten Strömung

Energiekaskade

Bei einer turbulenten Strömung wird die turbulente Energie über die großen Wirbel zugeführt. Diese Energie wird der zeitlich-mittleren Strömung entzogen. Durch den Zerfall von großen Wirbeln in kleinere, wird diese Energie durch verschiedene Skalen (Kaskaden) transportiert und im Bereich der kleinsten Wirbel in thermische Energie dissipiert.

2.1.3 Turbulenter Transport eines Skalars

Die Gleichungen (2.21), (2.2), (2.22) und (2.23) können allgemein erfasst werden, indem der turbulente Transport einer skalaren Größe Φ eingeführt wird. Eine zeitlich gemittelte

Transportgleichung für den Transport einer skalaren Größe Φ in einer turbulenten Strömung lautet:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{\Phi})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{\Phi})}{\partial t} = -\frac{\partial\overline{j_i^{\Phi}}}{\partial x_i} - \frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{u_i''\Phi''})}{\partial x_i} + \overline{S_{\Phi}} \tag{2.25}$$

Dabei stellen $\overline{j_i^{\Phi}}$ und $\bar{\rho}\widetilde{u_i''\Phi''}$ den laminaren und turbulenten Fluss dar. In Analogie zum laminaren Gradientenansatz wird für den turbulenten Fluss der folgende Ansatz verwendet:

$$-\bar{\rho}\widetilde{u_i''\Phi''} = \Gamma_t \frac{\partial\tilde{\Phi}}{\partial x_i} \tag{2.26}$$

Hier ist Γ_t die turbulente Diffusitivität die mittels eines Proportionalitätsfaktors σ_t in Beziehung zur turbulenten Viskosität μ_t gesetzt wird:

$$\Gamma_t = \frac{\mu_t}{\sigma_t} \tag{2.27}$$

σ_t wird im Falle des Wärmeaustausches ((2.23)) als turbulente Prandtl-Zahl Pr_t und im Falle des Stoffaustausches (Gl. (2.2)) als turbulente Schmidt-Zahl Sc_t bezeichnet.

Die turbulente Viskosität μ_t beschreibt die Erhöhung der Viskosität durch die Turbulenz und ist mit der Wirbelviskosität ν_t verknüpft über die Beziehung:

$$\mu_t = \nu_t \cdot \rho \tag{2.28}$$

Die Wirbelviskosität ν_t ist über das Längen- und Geschwindigkeitsmaß der makroskopischen Wirbelstrukturen L_t und u' definiert:

$$\nu_t = u' \cdot L_t \tag{2.29}$$

2.2 Physikalische Phänomene von Drehströmungen

Da im Ramen dieser Arbeit die Drallflammen simuliert werden, werden in den nächsten Abhschnitten die wichtigsten Begriffe und Eigenschaften von Drehströmungen vorgestellt.

2.2.1 Drallzahl

Die Drallzahl ist eine dimensionslose Kennzahl mit der die Stärke der Verdrallung karakterisiert wird. Sie ist definiert als das Verhältnis vom Drehimpulsstrom zum Axialimpulsstrom, das mit einer karakteristischen Länge entdimensioniert wird:

$$S = \frac{\dot{D}}{\dot{I}R_0} \tag{2.30}$$

Der Axialimpulsstrom $\dot{I}$ hängt im allgemeinen von Druck- und Geschwindigkeitsverteilung über der Brennerquerschnittsfläche ab. Daher sind für die genaue Berechnung die umfangreichen Feldmessungen notwendig, was in der Praxis kaum gemacht wird. Unter Vernachlässigung des Druckterms lässt sich der Axialimpulsstrom vereinfacht wie folgt berechnen:

$$\dot{I} = \rho \cdot \frac{\dot{V}^2}{A} \tag{2.31}$$

2.2.2 Vortex Breakdown

Die mathematische Beschreibung der Strömungen mit überlagerter Rotationsbewegung erfordert die Betrachtungen der Axial-, Radial- und Tangentialgeschwindigkeiten. Der Potentialwirbel einer reibungsfreien, isoenergetischen Strömung besitzt eine hyperbolische Tangentialgeschwindigkeitsverteilung:

$$w(r) = C_1 \cdot \frac{1}{r} \tag{2.32}$$

Nach dem Modell des Rankine-Wirbels, können Drallströmungen im Bereich der Wirbelachse durch einen Festkörperwirbel beschrieben werden, der dann ab einem Radius r_1 in einen Potentialwirbel übergeht:

$$w(r) = w_{max} \cdot (\frac{r}{r_1})^n \text{ mit } \left\{ \begin{array}{c} n = 1 \text{ für } 0 < r < r_1 \\ -1 \leq n \leq 0 \text{ für } r \geq r_1 \end{array} \right\} \tag{2.33}$$

Durch die Kräftebilanz von Druck- und Zentrifugalkraft senkrecht zum Stromfaden unter Annahme einer rotationssymmetrischen, reibungsfreien und ebenen Wirbelströmung, ergibt sich der Zusammenhang zwischen dem Druck und der Tangentialgeschwindigkeit:

$$\frac{w^2}{r} = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial p}{\partial r} \tag{2.34}$$

Wie in der Abbildung 2.2 dargestellt ist, nimmt der statische Druck vom Minimum auf der Wirbelachse in radialer Richtung zu.

Am Düsenaustritt ergibt sich eine Querschnittserweiterung. Aufgrund der Impulserhaltung wird das Maximum der Tangentialgeschwindigkeit kleiner und verschiebt sich zu größeren Radien. Daraus entsteht ein negativer Druckgradient auf der Wirbelachse, der weiter stromab zunimmt (Abb. 2.2). Dies kann zu einem Aufplatzen der Drallströmung und zum Bilden einer inneren Rezilkulationszone führen. Das Aufplatzen geschieht ab einer kritischen Drallzahl (zwischen 0.4 und 1) und ist abhängig von Art und Geometrie des Drallerzeugers. Dieses Phänomen wird als Vortex-Breakdown bezeichnet und ist in der Abb. 2.3 schematisch dargestellt.

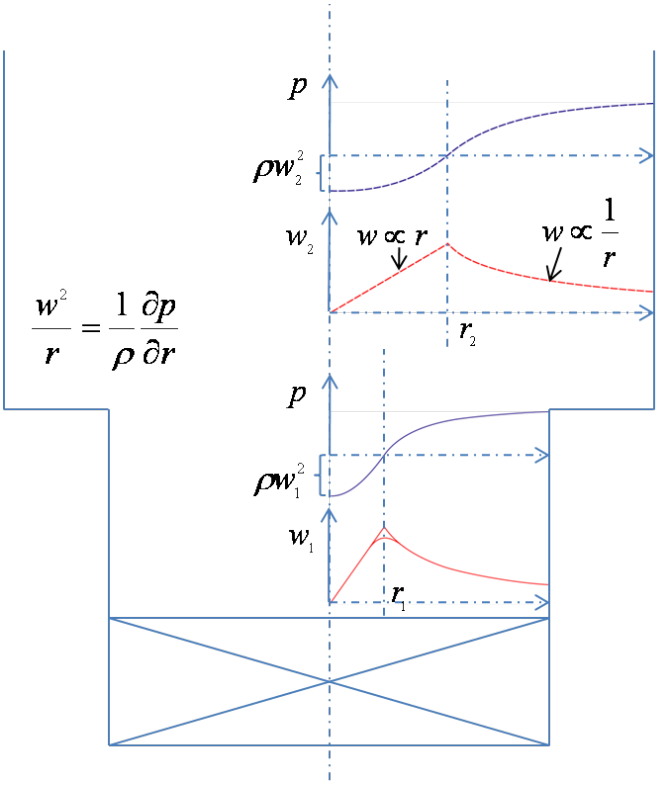


Abbildung 2.2: Vortex-Breakdown, Potential- und Starrkörperwirbel nach [Zar09]

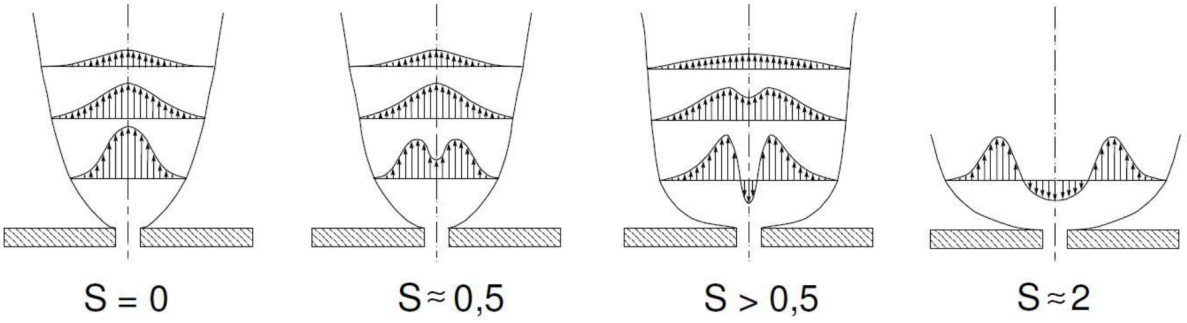


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung des Vortex-Breakdown nach [Mai67]

2.3 Verbrennungstechnische Grundlagen

Die Verbrennung ist eine Oxidationsreaktion, wobei Energie umgewandelt wird. Der Verbrennungsprozess setzt eine Mischung der Edukte der chemischen Elementarreaktionen auf molekularer Ebene voraus. Die chemische Reaktion wird dann durch molekulare Stoßvorgänge initiiert. Dabei muss die Bewegungsenergie der Stoßpartner ausreichend groß sein, was durch entsprechend hohe Temperatur erreicht wird.

2.3.1 Unterscheidung der Flammen nach dem Grad der Vormischung

Je nachdem, wie Brennstoff und Oxidator vor dem Auftreten der Reaktion vermischt sind, werden Vormisch-, Diffusions- und Teilvormischflammen unterschieden.

Vorgemischte Flammen

Bei einer vorgemischten Flamme sind Brennstoff und Oxidator auf molekularer Ebene vollkommen vermischt. Die vorgemischte Verbrennung wird immer dort eingesetzt, wo die Verbrennung im kleinen Raum stattfinden soll. Die vorgemischte Verbrennung verläuft normalerweise mit wenig Rußbildung. Nachteil dieser Verbrennung ist, dass sie unter erhöhten Sicherheitsvorkehrungen stattfinden muss, da die Flamme rückschlagen und zur Explosion führen kann. Eine klassische Einrichtung zur Erzeugung einer vorgemischten Flamme ist der Bunsenbrenner.
Die laminare vorgemischte Flamme ist durch die Ausbreitung der Flammenfront in einem homogenen Gemisch aus Brennstoff und Oxidator gekennzeichnet. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront, die sog. laminare Flammengeschwindigkeit s_L ist abhängig von Gemischzusammensetzung, Druck und Vorwärmtemperatur.
Eine anschauliche Zusammenfassung der Theorie zur Struktur der laminaren vorgemischter Flammen ist in der Arbeit von [Hof04] am Beispiel der adiabaten Methan/Luft- Verbrennung gegeben. Demnach lässt sich die Struktur der laminaren, vorgemischten Flamme, in drei Zonen (Vorwärmzone, Reaktionszone und Ausbrandzone) unterteilen, Abb. 2.4. In der Vorwärmzone werden die Edukte von der Vorwärmtemperatur auf die Zündtemperatur aufgeheizt. Die Dicke der Vorwärmzone ist von den molekularen Wärme- und Stoffprozessen bestimmt. Die Dicke der Reaktionszone, in der die eigentliche Wärmefreisetzung durch Abbau des Brennstoffes erfolgt, ist deutlich geringer als die der Vorwärmzone und wird als Flammendicke δ bezeichnet. Die Ausbrandzone schließt sich an die Reaktionszone an. In der Ausbrandzone werden die gebildeten Zwischenprodukte H_2 und CO schließlich zu den Verbrennungsprodukten CO_2 und H_2O oxidiert.

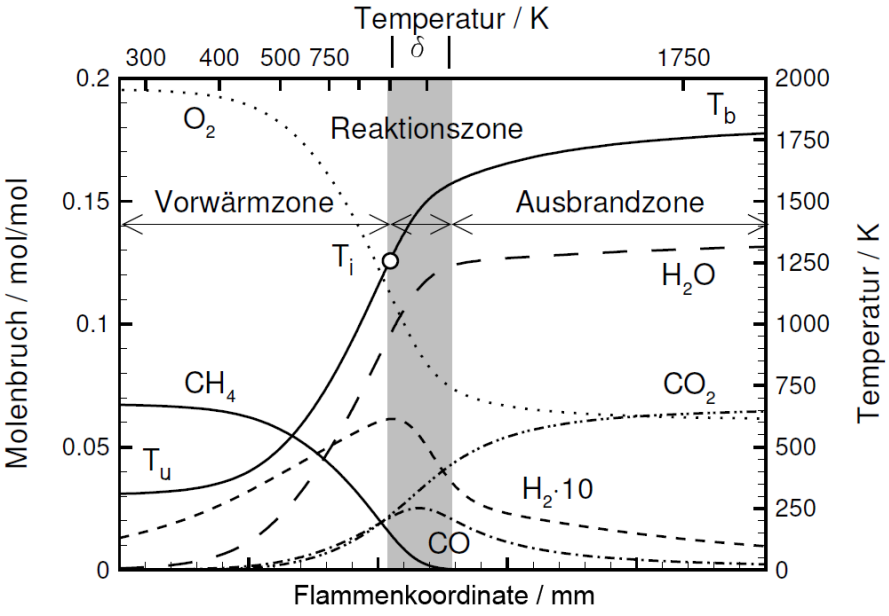


Abbildung 2.4: Struktur einer mageren CH_4/Luft Flamme. Profile der Temperatur und der stabilen Zwischenprodukte und Endprodukte. [Hof04]

Diffusionsflammen

Aus dem oben genannten Grund der Sicherheit werden in großen industriellen Feuerungen überwiegend Diffusionsflammen eingesetzt. Bei einer Diffusionsflamme treten Brennstoff und Oxidator (Luft) getrennt in den Brennraum. Der Oxidator muss erstmal in die Flamme hineindiffundieren, damit die Reaktion stattfinden kann. Die Diffusion ist in der Regel ein langsamer Prozess. Deswegen entstehen bei einer Diffusionsflamme die hohen unverbrannten Anteile unter Rußbildung. Beispiel einer reinen Diffusionsflamme ist die Kerzenflamme.

Abgehobene Flamme als Beispiel der teilvorgemischten Flammen

Teilvorgemischte Flammen stehen zwischen der beiden oben genannten Flammentypen. Abgehobene Flammen sind ein Beispiel der teilvorgemischten Verbrennung. Die schematische Darstellung einer abgehobenen Flamme ist in der Abb. 2.5 dargestellt.
Der Brennstoff- und Oxidatorstrom (Luft) treten in diesem Fall, wie bei einer Diffusionsflamme, getrennt in den Brennerraum ein. Im Gegensatz zu einer reinen Diffusionsflamme findet die Verbrennungsreaktion nicht gleich, sondern erst nach einer zurückgelegten Strecke statt. Innerhalb dieser Strecke passiert eine Teilvormischung zwischen dem Brennstoff und dem Oxidator, wodurch eine bessere Homogenisierung des Brenngemisches erreicht wird.

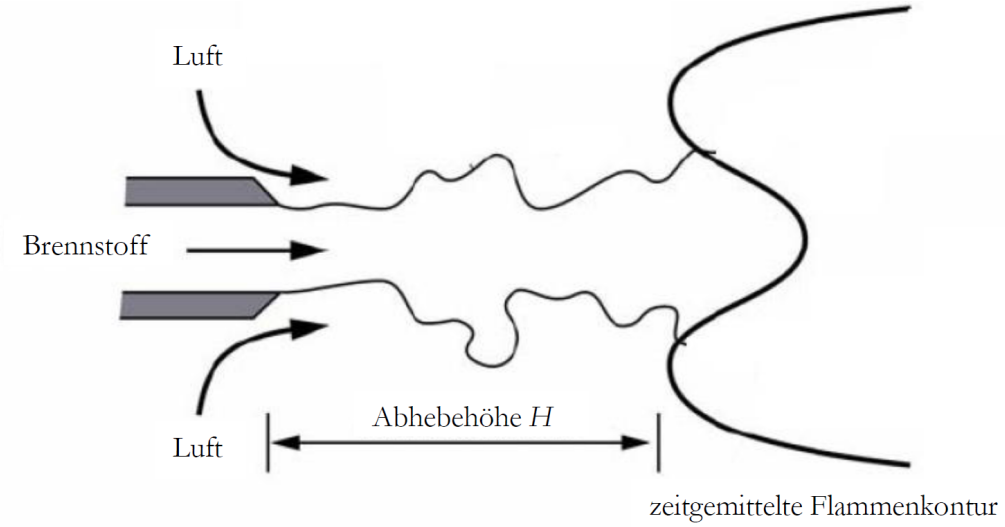


Abbildung 2.5: Schematische Darstellung einer abgehobenen Diffusionsflamme [Pet04]

Das Abheben der Flamme erfolgt erst nach dem Erreichen einer bestimmten Strömungsgeschwindigkeit. Die Strömungsgeschwindigkeit bei der die Flamme abhebt und sich innerhalb des Strahles stromab stabilisiert wird Abhebegeschwindigkeit genannt. Der Abstand zwischen dem Eintritt in Brennerraum und der Basis der Flamme wird als Abhebehöhe bezeichnet (Abb. 2.5).

2.3.2 Flammenstabilisierung

Um bei einer stationären Flamme die Reaktionszone zu stabilisieren muss genauso viel Frischgemisch zugeführt werden wie verbrannt wird. Die im Mittel zugeführte Stoffmenge muss der abreagierenden Stoffmenge entsprechen. Wenn die Strömungsgeschwindigkeit des Frischgemisches zu gering ist, führt dies zu einem Flammenrückschlag, während bei einer zu hohen Geschwindigkeit die Flamme abbläst, was auch mit magerer Verlöschgrenze benannt wird.
Die Flammenstabilisierung wird erreicht, wenn es ein Gleichgewicht zwischen Strömungs- und Flammengeschwindigkeit gibt und ist nach [Zar10] schematisch in der Abb. 2.6 dargestellt.

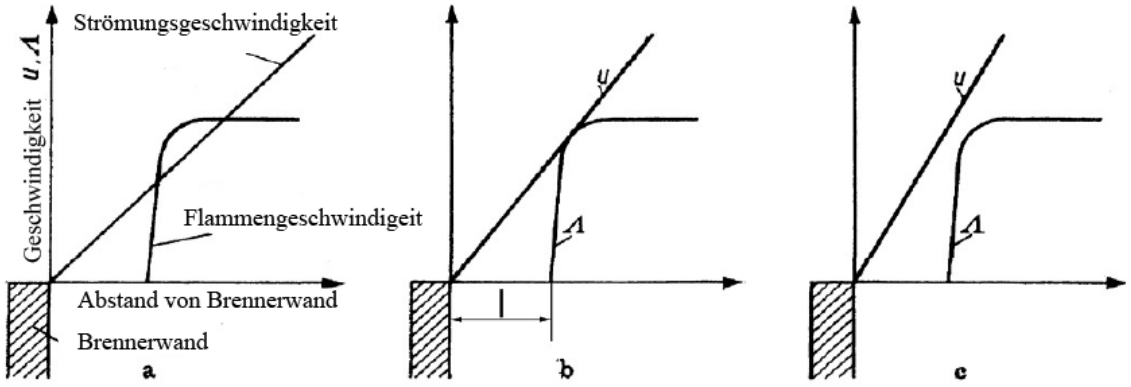


Abbildung 2.6: Flammenstabilität nach [Zar10]

Wenn die Flammengeschwindigkeit größer ist als die Strömungsgeschwindigkeit, kann die Flamme stromauf wandern und zum Rückschlagen führen. Dieser Fall entspricht dem Fall a) in Abb. 2.6.
Im Fall b) haben in einem Punkt die Flammen- und Strömungsgeschwindigkeiten gleichen Betrag aber entgegengesetzte Richtung. Die Flamme stabilisiert sich über die Brenneroberfläche.
Im Fall c) ist die Strömungsgeschwindigkeit größer als die Flammengeschwindigkeit. Je nach größe der Strömungsgeschwindigkeit stabiliesiert sich die Flamme in weiterer Entfernung vom Brenner oder wird abgeblasen, wenn die Strömungsgeschwindigkeit zu groß wird.

2.3.3 Die charakteristischen Kennzahlen turbulenter Flammenstrukturen

Die Wechselwirkungen von Wirbelelementen unterschiedlicher Abmessungen mit der Flammenfront resultieren in unterschiedliche Gestalt und Struktur der Flamme. Im Nachfolgenden werden die charakteristischen Kennzahlen der turbulenten Flammen vorgestellt.

Die turbulente Reynolds-Zahl Re_t wird definiert als:

$$Re_t = \frac{u' \cdot L_t}{\nu} \tag{2.35}$$

Dabei sind L_t und u' Längen- und Geschwindigkeitsmaß der makroskopischen Wirbelstrukturen, und ν die kinematische Viskosität.

Die Damköhler-Zahl Da stellt das Verhältnis der makroskopischen Zeitskala der turbulenten Strömung τ_t und der Zeitskala der Wärmefreisetzung τ_R:

$$Da = \frac{\tau_t}{\tau_R} \tag{2.36}$$

Die Karlovitz-Zahl Ka stellt die Verdickung der Flammenfront dar und ist in der Gleichung (2.37) dargestellt. Dabei ist δ die Flammenfrontdicke und η die Längenskala der kleinsten Wirbel (Kolmogorovlänge):

$$Ka = (\frac{\delta}{\eta})^2 \tag{2.37}$$

2.3.4 Regime-Diagramm nach BORGHI

Borghi [Bor88] hat für vorgemischte Flammen ein Regime-Diagramm erstellt, das in Abb. 2.7 dargestellt ist. Die wichtige Annahme dabei ist, dass sowohl für die turbulente Mischung, als auch für die chemische Reaktion jeweils nur ein Zeit- und Längenmaß relevant sei.

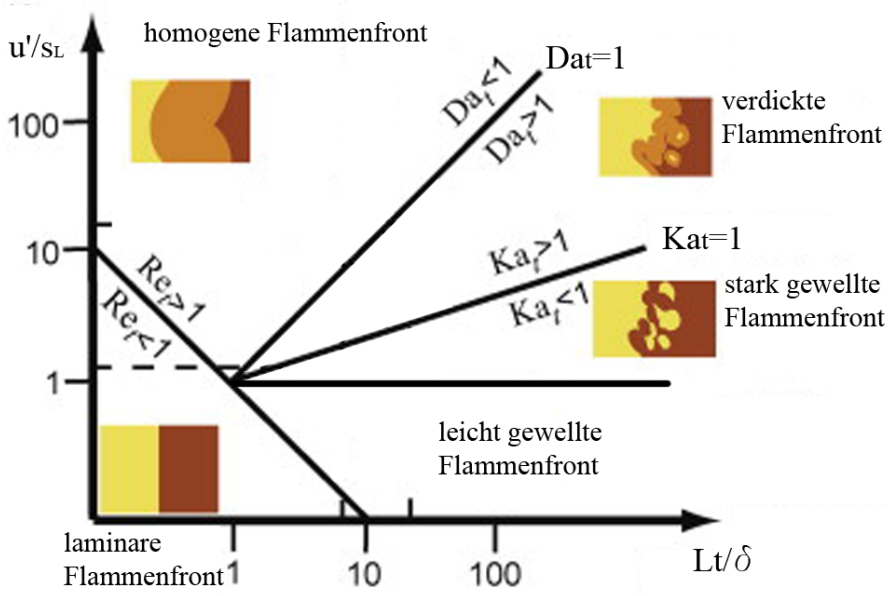


Abbildung 2.7: Borghi Diagramm

Die Fälle $Re_t < 1$ entsprechen der ungestreckten laminaren Flammenfront.

Bei $Ka > 1$ ist die Flammenfrontdicke größer als der kleinste vorkommende Wirbel. Die turbulenten Strukturen gelangen in die Flamme hinein, wodurch die Flamme noch dicker wird, was den Eintritt von noch größeren turbulenten Wirbeln ermöglicht. Es entsteht eine

verdickte Flammenfront.
Der Fall $Ka < 1$ entpricht der dünnen Flammenfront und sog. laminaren Flamelets.
Bei $Da < 1$ ist das turbulente Zeitmaß der größten Wirbel kleiner als das Zeitmaß der Wärmefreisetzung. Der turbulente Austausch führt zur Intensivierung aber nicht zur Auffaltung der Flammenfront.
Bei $Da << 1$ ist die Wärmefreisetzung viel langsamer als die turbulente Mischung, so dass von einem ideal vermischten System ausgegangen werden kann (ideal gemischter Satzreaktor).
Im Fall $Da \geq 1$ kann die Flammenfront gefaltet oder aufgerissen werden.

2.4 Turbulenzmodelle

Um die im Kapitel 2.1 eingeführten Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie für ein turbulentes Strömungsfeld zu beschreiben, kann von verschiedenen Ansätzen ausgegangen werden. Jeder Ansatz ist verbunden mit einem bestimmten Grad der Abstraktion und dem numerischen Aufwand zum Lösen des Strömungsfeldes. Die Wahl des geeigneten Ansatzes hängt außer vom numerischen Aufwand, auch von der Problemstellung selbst. Die existierenden Ansätze sind:

- Direkte Numerische Simulation - DNS
- Large Eddy Simulation - LES
- Statistische Turbulenzmodellierung - RANS

die in folgenden Abschnitten kurz vorgestellt werden.

2.4.1 Überblick der Turbulenzmodelle

Direkte Numerische Simulation - DNS

Bei der direkten numerischen Simulation werden die kleinen und großen Turbulenzenskalen (kleine und große Wirbel) direkt aus der Navier-Stokes Gleichungen gelöst. Um alle Strukturen der Turbulenz zu erfassen muss die Gitterauflösung mindestens so groß sein wie der größte vorkommende Wirbel. Das nützliche Maß dafür ist das turbulente integrale Längenmaß L_t, welches die Entfernung darstellt, über die die Fluktationen der Geschwindigkeitskomponenten korreliert bleiben. Jede Dimension des betrachteten Bereichs muss ein Vielfaches der integralen Turbulenzenskala betragen. Eine valide Simulation muss ebenfalls die Dissipation der kinetischen Energie erfassen - diese passiert in den kleinen Turbulenzskalen, wo die Viskosität eine Rolle spielt. Diese Viskositätsskala wird durch die Kolmogorovlänge bestimmt $\eta = (\frac{\nu}{\epsilon})^{\frac{1}{4}}$ und stellt die obere Grenze für die Gittergröße dar. Im Falle der homogenen isotropen Turbulenz beträgt die Mindestanzahl an Gitterpunkten in jeder Richtung $N = L_t/\eta$. Die Anzahl der Gitterpunkten ist in diesem Fall proportional zu $Re_L^{\frac{3}{4}}$, wobei die turbulente Reynoldszahl Re_L aus dem Betrag der Geschwindigkeitsfluktationen und der integralen Längenskala gebildet wird, und beträgt ungefähr ein hundertstel der makroskopischen Reynoldszahl der Strömung [FP02]. Da die Anzahl der für die Simulation benötigten Gitterpunkte mit steigender Reynoldszahl zunimmt, ist die

direkte numerische Simulation, wegen großer Anforderungen an Speicherkapazitäten und Rechnerleistungen, nur bei den Strömungen mit relativ niedriger Reynoldszahl und einfachen Geometrien praktisch anwendbar. Bei der Behandlung reaktiver Strömungen wird die Problemstellung noch komplizierter, da zusätzlich noch die Zeitskala der chemischen Reaktion aufgelöst werden muss.

Large Eddy Simulation - LES

Bei der Large Eddy Simulation werden die großen und kleinen turbulenten Skalen unterschiedlich behandelt. Da die Ersteren Hauptenergieträger sind und dem Transport der Strömungseigenschaften am meisten beitragen, werden die Grobstrukturen wie bei DNS direkt berechnet. Die kleinen Strukturen werden dagegen durch ein geeignetes Turbulenzmodell modelliert. Die Large Eddy Simulationen sind zeit- und leistungsintensiv, aber schneller als die entsprechenden DNS Simulationen. LES wird überall dort eingesetzt wo die Reynoldszahlen zu groß sind oder die Geometrie zu komplex, um die DNS Simulation durchzuführen. Bei der LES Simulation wird ein Geschwindigkeitsfeld benötigt, das die Grobstrukturen des Felds enthält. Dazu wird das Geschwindigkeitsfeld zuerst gefiltert. Das neue Feld, dass dadurch entsteht und simuliert werden soll, stellt den lokalen Mittelwert des ursprünglichen Feldes dar. Die Filterung erfolgt durch die Benutzung der sog. lokalen Kernelfunktion $G(x, x')$: $\overline{u_i}(x) = \int G(x, x')u_i(x')dx'$. Die Navier-Stokes Gleichungen, die dadurch entstehen, erfordern die Einführung einer neuen Spannungsgröße, der sog. *subgrid-scale Reynolds stress*: $\tau_{ij}^S = -\rho(\overline{u_i u_j} - \bar{u}_i\bar{u}_j)$. Die Modelle, die verwendet werden um die neue Spannung zu approximieren, gehören zu den *subfilter-scale models (SGS)*.

Statistische Turbulenzmodellierung

Bei den RANS (Reynolds Averaged Navier Stokes)-Modellen werden in Navier Stokes Gleichungen die Geschwindigkeit und Druck in einen zeitlichen Mittelwert und Schwankungsgröße geteilt, wie im Kapitel 2.1 beschrieben. Durch diese Trennung entstehen die zusätzlichen Terme, die sogenannten Reynoldsspannungen. Das neue Gleichungssystem wird wieder geschlossen, indem für die zusätzlichen Spannungsterme neue Transportgleichungen eingeführt werden (Turbulenzmodell).

2.4.2 Statistische Turbulenzmodelle

Bei den praktischen Problemen sind detaillierte Informationen über die betrachtete turbulente Strömung meistens nicht wichtig. In den meisten technischen Fällen reicht es aus nur wenige Strömungseigenschaften zu kennen, wie z.B die ausübende Kraft auf den umströmten Körper, Grad der Vermischung und ähnlich. Eine LES oder DNS Simulation in solchen Fällen durchzuführen wäre dann nicht unbedingt notwendig. Eine Methode den numerischen Aufwand zu minimieren ist die Turbulenz komplett zu modellieren, anstatt direkt zu berechnen. Dazu wird von den Reynolds- bzw. Favre- gemittelten Gleichungen aus dem Kapitel 2.1 ausgegangen. Um das Gleichungssystem zu schließen, müssen die Reynoldsspannungen $-\rho\overline{u_i' u_j'}$ modelliert werden.

Wirbelviskositätsmodelle

Die Wirbelviskositätsmodelle beruhen auf dem Boussinesq-Ansatz für die Reynolds'schen Spannungen. Hierbei wird eine Analogie zu den laminaren Spannungen gemacht, die durch die molekulare Viskosität hervogerufen werden. Nach Boussinesq-Hypothese gilt:

$$-\rho\overline{u_i'u_j'} = \mu_t(\frac{\partial\bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\bar{u}_j}{\partial x_i}) - \frac{2}{3}\rho\delta_{ij}k \tag{2.38}$$

Dabei ist μ_t die turbulente Viskosität und k die turbulente kinetische Energie.

Die turbulente kinetische Energie k ist ein Maß für die Größe der turbulenten Schwankungsbewegungen u'. Für k gilt:

$$k = \frac{1}{2}\overline{u_i'u_j'} = \frac{1}{2}(\overline{u_x'u_x'} + \overline{u_y'u_y'} + \overline{u_z'u_z'}) \tag{2.39}$$

Die Turbulenz kann im Allgemeinen durch zwei Parameter charakterisiert werden: durch die Größe der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen u' ($u' = \sqrt{2k}$) und die turbulente Längenskala L_t.
Je nach Anzahl der zusätzlichen Gleichungen für die Berechnung von u' und L_t werden die Wirbelviskositätsmodelle in Null- Ein- und Zweigleichungsmodelle unterteilt.
In folgenden Abschnitten werden die Zweigleichungsmodelle Standard k-ε, k-ω und k-ω-SST kurz vorgestellt.

2.4.3 Standard k-ε Turbulenzmodell

Das Standard k-ε Turbulenzmodell beruht, wie alle Wirbelviskositätsmodelle, auf der Boussinesq-Hypothese, Gl. (2.38). Bei diesem Modell werden die zwei zusätzlichen Gleichungen für den Transport der turbulenten kinetischen Energie k und der Dissipationsrate ε eingeführt. Die Dissipationsrate ε beschreibt die Rate der Energiedissipation im turbulenten Energiekaskadenprozess, der im Kapitel 2.1 beschrieben wurde. Für die turbulente Viskosität μ_t gilt:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{2.40}$$

Die Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie k lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial k}{\partial x_j}\right] + G_k - \rho\varepsilon \tag{2.41}$$

G_k beschreibt die Produktion der turbulenten kinetischen Energie infolge der Geschwindigkeitsgradienten:

$$G_k = -\rho\overline{u_i'u_j'}\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \tag{2.42}$$

Die Transportgleichung für die Dissipationsrate ε lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j}\right] + C_{1\varepsilon}\frac{\varepsilon}{k}G_k - C_{2\varepsilon}\rho\frac{\varepsilon^2}{k} \tag{2.43}$$

2.4.4 Standard k-ω Turbulenzmodell

Standard k-ω Turbulenzmodell ist ebenso, wie das Standard k-ε, ein empirisches Modell mit den Transportgleichungen für turbulente kinetische Energie k und spezifische Dissipationsrate ω. Die spezifische Dissipationsrate ω stellt die Dissipation per Einheit der turbulenten kinetischen Energie und kann deswegen als das Verhältnis ε/k angesehen werden. Die Transportgleichungen für k und ω in diesem Modell lauten:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j}\right) + G_k - Y_k \tag{2.44}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\omega u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j}\right) + G_\omega - Y_\omega \tag{2.45}$$

In diesen Gleichungen stellt G_k die Produktion der turbulenten kinetischen Energie k und G_ω die Produktion der spezifischen Dissipation ω.
Y_k und Y_ω beschreiben die Dissipation von k und ω.
Γ_k und Γ_ω sind die effektiven Diffusitivitäten im k-ω Modell und es gilt:

$$\Gamma_k = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \tag{2.46}$$

$$\Gamma_\omega = \mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\omega} \tag{2.47}$$

σ_k und σ_ω sind die turbulenten Prandtl-Zahlen für k und ω.

Für die Produktionsterme G_k und G_ω gilt:

$$G_k = -\rho\overline{u_i' u_j'}\frac{\partial u_j}{\partial x_i} \tag{2.48}$$

$$G_\omega = \alpha\frac{\omega}{k}G_k \tag{2.49}$$

2.4.5 k-ω-SST Turbulenzmodell

Beim k-ω-SST (engl. Shear-Stress Transport) Turbulenzmodell wird, anders als beim k-ω Modell, eine modifizierte Definition der turbulenten Viskosität verwendet. Die neue Definition der turbulenten Viskosität schließt den Transport der turbulenten Schubspannungen ein und bringt Vorteile gegenüber Standard k-ε und k-ω Modellen. Der andere Unterschied ist das Hinzufügen des neuen diffusiven Terms in der Transportgleichung für ω um das richtige Verhalten in der Nähe der Wand, sowie in großer Entfernung von der Wand

sicherzustellen.
Das k-ω-SST Modell hat die ähnliche Form wie das Standard k-ω Modell:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_k \frac{\partial k}{\partial x_j}\right) + G_k - Y_k \tag{2.50}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \omega) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \omega u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j}\left(\Gamma_\omega \frac{\partial \omega}{\partial x_j}\right) + G_\omega - Y_\omega + D_\omega \tag{2.51}$$

In diesen Gleichungen stellt G_k die Produktion der turbulenten kinetischen Energie infolge der Geschwindigkeitsgradienten und lässt sich analog Gl. (2.48) berechnen. G_ω beschreibt die Produktion von ω, wie im Abschnitt 2.4.4 dargestellt.
Γ_k und Γ_ω sind die effektiven Diffusitivitäten für k und ω und lassen sich nach Gleichungen (2.46) und (2.47) berechnen.
Y_k und Y_ω stellen die Dissipation von k und ω infolge der Turbulenz.
D_ω ist der sog. quer-diffusive Term.

Quer-diffusiver Term

Das k-ω-SST Turbulenzmodell basiert auf k-ε und k-ω Modellen. Die Kombination der Gleichungen aus diesen zwei Modellen führt zum sog. quer-diffusiven Term D_ω, der wie folgt definiert ist:

$$D_\omega = 2(1 - F_1)\rho\sigma_{\omega,2}\frac{1}{\omega}\frac{\partial k}{\partial x_j}\frac{\partial \omega}{\partial x_j} \tag{2.52}$$

F_1 ist die sog. Scheinfunktion und $\sigma_{\omega,2}$ die Modellkonstante.

2.5 Turbulente Reaktionsmodelle

Aufgabe von Reaktionsmodellen ist die Berechnung des zeitlich mittleren Reaktionquellterms aus der Gl. (2.2).
Je nach Größe der turbulenten und chemischen Zeitskalen werden prinzipiell zwei Klassen von Modellen unterschieden: die Ersten basieren auf der Annahme unendlich schneller Chemie, bei den Zweiten wird von einer finiten Chemie ausgegangen. Je nach dem verwendeten Modellierungsansatz können die Modelle auf Basis der turbulenten Flammengeschwindigkeit und die statistische Modelle voneinander unterschieden werden.
Die Reaktionsmodelle auf Basis der turbulenten Flammengeschwidigkeit setzen den gesuchten mittleren Quellterm in Bezug zur turbulenten Flammengeschwindigkeit.
Die statistischen Reaktionsmodelle basieren auf der Berechnung zeitlich mittlerer Größen mit Hilfe lokaler Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Einflussgrößen der chemischen Reaktion.

Flamelet-Modelle

Beim Flamelet-Ansatz werden die skalaren Größen als Funktion des Mischungsbruchs und Dissipationsrate erfasst. Dadurch entstehen die Flamelet-Gleichungen wobei die Position der Reaktionszone durch stöchiometrischen Mischungsbruch festgelegt ist. Die Chemie wird meistens in tabellierter Form anhand vom Modell der eindimensionalen Gegenstromdiffusionsflamme abgelegt.

Statistische Modelle

Bei der statistischen Modellierung werden die Einflussgrößen der chemischen Reaktionen in Form einer Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion gegeben. Dabei wird die Wahrscheinlichkeit des Vorkommens jeder Kombination der Einflussgrößen berechnet und der Gesamtvorgang beschrieben.

Statistische Methoden auf Basis von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF: probability density function) bzw. Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (JPDF: joint probability density function) sind im Kapitel 2.5.1 beschrieben.

2.5.1 Mathematische Grundlagen der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Die turbulente Verbrennung ist analog zur turbulenten Strömung ein stochastischer Prozess, bei dem die Feldgrößen anstatt der zeitlichen Entwicklung $\phi(x,t)$ durch ihre Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung (PDF) $\mathcal{P}_\phi(\varphi,x,t)$ in jedem Punkt der Strömung erfasst werden können. Die Wahrscheinlichkeit, dass eine Größe ϕ einen Wert im Bereich φ und $\varphi+d\varphi$ hat, ist gegeben durch:

$$\text{Wahrscheinlichkeit}(\varphi \leq \phi \leq \varphi + d\varphi) = \mathcal{P}_\phi(\varphi)d\varphi \tag{2.53}$$

Der Zusammenhang zwischen dem zeitlichen Verlauf einer Größe und deren Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion ist in der Abb. 2.8 schematisch dargestellt. Darauf sind der zeitliche Verlauf einer Funktion $\phi(t)$ und die entsprechende Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\mathcal{P}(\phi)$ dargestellt.

Aus der Normierungsbedingung, dass die Wahrscheinlichkeit einer Variable ϕ einen Wert im Wertebereich aufzunehmen, gleich eins sein muss, ergibt sich:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_\phi(\varphi) = 1 \tag{2.54}$$

Aus $\mathcal{P}_\phi(\varphi)$ können die verschiedene Momente der Verteilung von ϕ berechnet werden. Das erste Moment ist der zeitliche Mittelwert der Größe ϕ:

$$\bar{\phi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi \cdot \mathcal{P}_\phi(\varphi)d\varphi \tag{2.55}$$

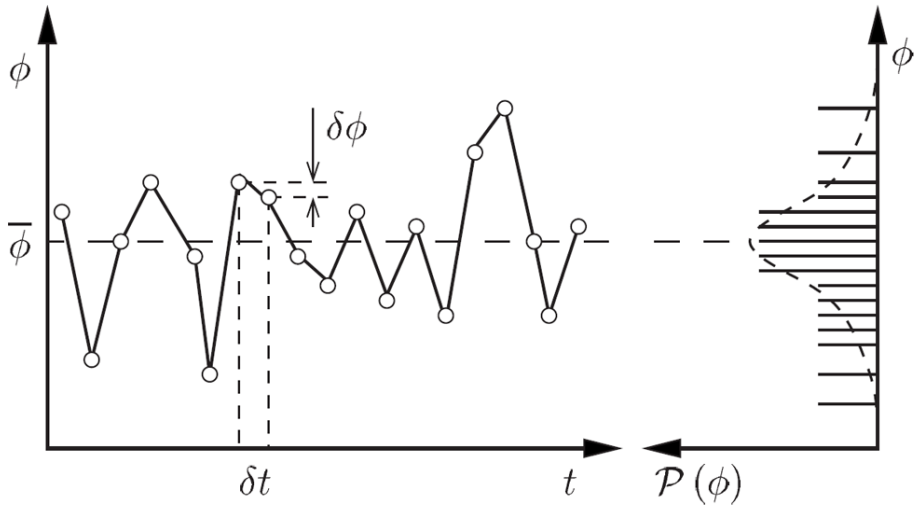


Abbildung 2.8: Schematische Darstellung des Verlaufs einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion [Hof04]

Statistische Schwankungsgrößen lassen sich als zentrale Momente um den Mittelwert berechnen. Das erste Zentrale Moment ist definitionsgemäß gleich null. Das zweite Zentralmoment wird Varianz genannt und gibt die Intensität der Schwankungsgröße wieder:

$$\overline{\phi'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (\varphi - \bar{\varphi})^2 \cdot \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi \tag{2.56}$$

Der zeitliche Mittelwert einer beliebigen Funktion $F(\phi)$ kann analog dem ersten Moment berechnet werden:

$$\overline{F(\phi)} = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\varphi) \cdot \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi \tag{2.57}$$

Die Schwankung der Funktion $F(\phi)$, bzw. Varianz lässt sich durch deren zweite Moment berechnen:

$$\overline{F(\phi)'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (F(\varphi) - \overline{F(\varphi)})^2 \cdot \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi \tag{2.58}$$

Verbundswahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Eine Funktion F, die von mehreren stochastischen Variablen abhängt, kann durch die Verbundswahrscheinlichkeitsdichtefunktion (JPDF) beschrieben werden. Im Falle von zwei Zuffalsgrößen ϕ und χ ist deren Verbundswahrscheinlichkeitsfunktion $\mathcal{P}_{\phi,\chi}(\varphi, \psi)$. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Ereignis im Bereich $d\varphi d\psi$ um den Punkt (φ, ψ) auftritt ist gegeben durch:

$$\text{Wahrscheinlichkeit}(\varphi \leq \phi \leq \varphi + d\varphi, \psi \leq \chi \leq \psi + d\psi) = \mathcal{P}_{\phi,\chi}(\varphi, \psi) d\varphi d\psi \tag{2.59}$$

Mittelwert und Varianz einer Verbundswahrscheinlichkeitsdichtefunktion von zwei Zuffalsvariablen $F(\phi, \chi)$ sind analog Gleichungen (2.57) und (2.58) gegeben durch:

$$\overline{F(\phi,\chi)} = \int_{-\infty}^{+\infty} F(\varphi,\psi) \cdot \mathcal{P}_{\phi,\chi}(\varphi,\psi) d\varphi d\psi \tag{2.60}$$

$$\overline{F(\phi,\chi)'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (F(\varphi,\psi) - \overline{F(\varphi,\psi)})^2 \cdot \mathcal{P}_{\phi,\chi}(\varphi,\psi) d\varphi d\psi \tag{2.61}$$

Falls die Zuffalsgrößen im Falle einer JPDF statistisch unabhängig sind, so kann jede JPDF als Produkt der einzelnen PDF's ausgedrückt werden. Im Falle einer JPDF von zwei Zuffalsvariablen ergibt sich in diesem Fall:

$$\mathcal{P}_{\phi,\chi}(\varphi,\psi) = \mathcal{P}_{\phi}(\varphi) \cdot \mathcal{P}_{\chi}(\psi) \tag{2.62}$$

2.5.2 Berechnung des Reaktionsquellterms

Aufgabe von Reaktionsmodellen ist, wie am Anfang des Kapitels erwähnt, die Berechnung des Reaktionquellterms $\dot{\omega}_k$. Bei der statistischen Methode werden dabei alle Zustände derjeningen Größen, welche die chemische Reaktionen beeinflußen, statistisch erfasst. Diese sind im allgemeinen die Größen, die das thermodynamische Zustand des jeweiligen Systems beschreiben, wie Druck, Temperatur und Konzentrationen der Spezies Y_k. Die JPDF ist eine Funktion dieser Größen in jedem diskreten Volumenelement des Strömungsfeldes. Mit der lokalen JPDF dieser Größen $\mathcal{P}_{p,T,Y_k}(p,T,Y_k)$ ergibt sich der zeitlich mittlere Quellterm zu:

$$\overline{\dot{\omega}_k} = \int_0^1 \cdots \int_0^1 \int_0^\infty \int_0^\infty \dot{\omega}_k(p,T,Y_k) \cdot \mathcal{P}_{p,T,Y_k}(p,T,Y_k) dY_1 \cdots dY_k dp dT \tag{2.63}$$

Um den Quellterm nach Gl. (2.63) zu berechnen, muss die multivariable JPDF $\mathcal{P}_{p,T,Y_k}(p,T,Y_k)$ in jedem Punkt des Strömungsfeldes berechnet werden. Eine Methode zum Lösen einer solchen JPDF, die sich durchgesetzt hat, ist die Methode der angenommenen JPDF Verteilungsfunktion. Unter dieser Annahme kann die JPDF aus Kenntnis der statistischen Momente rekonstruiert werden, ohne die multidimensionale Differentialgleichung auflösen zu müssen.

Die ursprungliche Form der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\mathcal{P}_{p,T,Y_k}(p,T,Y_k)$ kann sehr große Dimensinalität erreichen, wenn die Anzahl der Spezies groß wird. Es hat sich gezeigt, dass die Dimensionalität durch geeignete Wahl der stochastischen Variablen sehr stark reduziert werden kann. Als unabhängige stochastische Variablen haben sich Mischungsgrad und Reaktionsfortschritt in der Praxis bewährt. Ein adiabates System ist durch Kenntnis von Druck, Temperatur, Mischungsgrad und Reaktionsfortschritt eindeutig beschrieben.

Reaktionsfortschritt

Der Zustand eines adiabaten, isobaren Systems hängt, unter Annahme perfekt vorgemischter Verbrennung, nur vom Fortschritt der chemischen Reaktionen ab. Es gibt verschiedene Definitionen für den Reaktionsfortschritt. Im Ramen dieser Arbeit werden zwei Definitionen der Reaktionsfrotschrittsvariable c verwendet: die erste beruht auf Basis des Sauerstoffelementmassenbruchs, die zweite beruht auf Basis der Konzentrationen der Spezies CO, CO_2 und H_2O.
Die Definition der Reaktionsfrotschrittsvariable c auf Basis des Sauerstoffelementmassenbruchs ist durch die Gl. (2.64) gegeben:

$$c = \frac{Z_{O,geb}}{min(Z_{O,erf}, Z_{O,vorh})} \tag{2.64}$$

Hierin ist $Z_{O,vorh}$ der lokale Sauerstoffelementmassenbruch: $Z_{O,vorh} = Z_O$. $Z_{O,geb}$ ist der Elementmassenbruch der Bereits in Zwischen- oder Endprodukten gebundenen Sauerstoffatome: $Z_{O,geb} = Z_O - Y_{O_2}$. $Z_{O,erf}$ ist der Elementmassenbruch des Sauerstoffs, der zum vollständigen Reaktionsumsatz nötig ist: $Z_{O,erf} = 2\frac{W_O}{W_C}Z_C + \frac{1}{2}\frac{W_O}{W_H}Z_H$.

Die Definition der Reaktionsfrotschrittsvariable c auf Basis der Konzentrationen der Spezies CO, CO_2 und H_2O ist gegeben durch die Gl. (2.65):

$$c = \frac{(Y_{CO} + Y_{CO_2} + Y_{H2O}) - (Y_{CO} + Y_{CO_2} + Y_{H2O})_{unver}}{(Y_{CO} + Y_{CO_2} + Y_{H2O})_{ver} - (Y_{CO} + Y_{CO_2} + Y_{H2O})_{unver}} \tag{2.65}$$

Dabei bedeuten die Indizen *ver* und *unver* vollkommen verbrannte und unverbrannte Mischung, jeweils. Bei der Speziesauswahl in der Definition (2.65) ist es wichtig, dass sich die Summe der Spezieskonzentrationen mit dem Fortschreiten der Reaktion monoton ändert, dh. monoton steigt oder abfällt, damit der Reaktionsfortschritt eindeutig wird.

Die Reaktionsfortschrittsvariable hat im unverbrannten Gemisch den Wert $c = 0$ und in vollständig ausgebrannten Mischungen $c = 1$.

Für den Mittelwert der Reaktionsfortschrittsvariable $\tilde{c}$ ist folgende Favre-gemittelte Transportgleichung gegeben:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{c})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{c})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}((\bar{\rho}\mathcal{D} + \frac{\mu_t}{Sc_c}) \cdot \frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_i}) + \overline{\dot{\omega}_c} \tag{2.66}$$

Die Varianz des Reaktionsfortschritts ist durch die folgende Transportgleichung gegeben:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{c''^2})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{c''^2})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}((\bar{\rho}\mathcal{D} + \frac{\mu_t}{Sc_{c''}})\frac{\partial\tilde{c''^2}}{\partial x_i}) + C_{c'',1}\frac{\mu_t}{Sc_{c''}}\frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_i}\frac{\partial\tilde{c}}{\partial x_i} - 2\overline{\rho\mathcal{D}\frac{\partial c''}{\partial x_i}\frac{\partial c''}{\partial x_i}} + 2\cdot\overline{\dot{\omega}_c c''} \tag{2.67}$$

In Gleichungen (2.66) und (2.67) treten die Quellterme für Reaktionsfortschritt $\overline{\dot{\omega}_c}$ und Varianz des Reaktionsfortschritts $\overline{\dot{\omega}_c c''}$ auf, die tabelliert werden müssen.

Mischungsbruch

Die Behandlung nicht-vorgemischter Verbrennung erfordert die Charakterisierung der Mischungszusammensetzung. Unter Annahme, dass die Diffusionskoeffizienten aller Spezies gleich sind ($\mathcal{D}_k = \mathcal{D}$) und ihre Lewis-Zahl gleich eins ist, kann die Mischungszusammensetzung eindeutig durch den Mischungsbruch bestimmt werden.

Im Gegensatz zu den Spezies werden die chemischen Elemente während der chemischen Reaktion weder verbraucht noch gebildet. Damit bleiben ihre Massen und Massenbrüche unverändert. Für die Massenbrüche der chemischen Elemente Z_j gilt die folgende Bilanzgleichung:

$$\frac{\partial(\rho Z_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i Z_j)}{\partial x_i} = -\frac{\partial j_i^j}{\partial x_i} \tag{2.68}$$

Der Mischungsbruch kann als normierte Form des Elementmassenbruchs definiert werden:

$$f = \frac{Z_j - Z_{j,min}}{Z_{j,max} - Z_{j,min}} \tag{2.69}$$

Die wichtige Eigenschaft des Mischungsbruchs ist, dass er durch chemische Reaktionen nicht verändert wird.
Für eine Kohlenwasserstoff-Verbrennung mit reinen Brennstoff-(Br) und Oxidatorströmen(Ox) ist der Mischungsbruch als Summe der Elementmassenbrüche von Kohlenstoff und Wasserstoff, bezogen auf die charakteristischen Eintrittszustände definiert:

$$f = \frac{(Z_C + Z_H) - (Z_C + Z_H)_{\mathrm{Ox}}}{(Z_C + Z_H)_{\mathrm{Br}} - (Z_C + Z_H)_{\mathrm{Ox}}} \tag{2.70}$$

In reiner Verbrennungsluft ist Mischungsbruch gleich null ($f = 0$) und im reinen Brennstoff gleich eins ($f = 1$).

Die Transportgleichungen für Mischungsbruch und dessen Varianz sind gegeben durch (2.71) und (2.72):

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{f})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{f})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}((\bar{\rho}\mathcal{D} + \frac{\mu_t}{Sc_f}) \cdot \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i}) \tag{2.71}$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{f''^2})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i\tilde{f''^2})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i}((\bar{\rho}\mathcal{D} + \frac{\mu_t}{Sc_{f''}})\frac{\partial \tilde{f''^2}}{\partial x_i}) + C_{f'',1}\frac{\mu_t}{Sc_{f''}}\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i}\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i} - 2\overline{\rho\mathcal{D}\frac{\partial f''}{\partial x_i}\frac{\partial f''}{\partial x_i}} \tag{2.72}$$

Berechnung der Quellterme für Reaktionsfortschritt und Varianz des Reaktionsfortschritts

Die Quellterme $\overline{\dot{\omega}_c}$ und $\overline{\dot{\omega}_c c''}$ aus Gleichungen (2.66) und (2.67) müssen geschlossen werden. Wie schon erwähnt kann die Dimensionalität der Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion $\mathcal{P}_{p,T,Y_k}$ reduziert werden durch umformen zu $\mathcal{P}_{c,f}(c,f)$, wobei statistische Unabhängigkeit von Mischungsbruch c und Reaktionsfortschritt f vorrausgesetzt wird. Für die

Quellterme $\overline{\dot{\omega}_c}$ und $\overline{\dot{\omega}_c c''}$ ergeben sich nach Favre- und nachträglicher Reynoldsmittelung folgende Ausdrücke:

$$\overline{\dot{\omega}_c} = \bar{\rho} \int_0^1 (\int_0^1 \frac{\dot{\omega}_c}{\rho} \cdot \mathcal{P}_c(c)dc) \cdot \mathcal{P}_f(f)df \tag{2.73}$$

und

$$\overline{\dot{\omega}_c c''} = \bar{\rho} (\int_0^1 (\int_0^1 \frac{\dot{\omega}_c}{\rho} (c - \tilde{c}) \cdot \mathcal{P}_c(c)dc) \cdot \mathcal{P}_f(f)df) \tag{2.74}$$

womit sie geschlossen werden.

3. Numerisches Setup

3.1 Gitter und Geometrie

Viele Strömungen in der Praxis bestehen aus komplexen Geometrien, die nicht einfach durch die kartesischen Gitter dargestellt werden können. Von der Gitterauswahl hängen auch die Lösungsalgorithmen sowie die Tensorkomponenten ab. Bei rechteckigen oder kreisförmigen Geometrien folgen die Gitterlinien im einfachsten Fall den Koordinatenrichtungen. Bei komplexen Geometrien wird die Gitterauswahl durch die Diskretisierungsmethoden beeinflusst. Ein Algorithums, der für orthogonale Gitter aufgestellt ist, kann bei nicht-orthogonalen Gittern nicht verwendet werden.

3.1.1 Diskretisierungsansätze

Die Berechnung der konvektiven Terme ist bei einer numerischen Simulation von entscheidender Bedeutung. Um eine numerische Lösung zu erhalten, muss aber zuerst das geometrische Gebiet diskretisiert werden. Jeder Gitterpunkt, bzw. Zelle enthält unbekannte Variablenwerte und liefert dazu die algebraischen Gleichungen. Diese Gleichungen stellen die Beziehung zwischen einer Zelle und deren benachbarten Zellen her. Die algebraischen Gleichungen entstehen durch das Ersetzen der Differentialgleichungen in Gitterpunkten durch deren Finite-Differenzen-Approximationen. Dabei muss die Anzahl der Gleichungen mit der Anzahl der Unbekannten übereinstimmen, bzw. das Gleichungssystem muss geschlossen sein. In den Randpunkten, bei denen die Randbedingungen mit festen Werten gegeben sind (Dirichlet-Bedingungen), ist keine Gleichung notwendig. Wenn die Randbedingung die Ableitungen enthält (Neumann-Bedingung) muss die Randbedingung für solche Punkte diskretisiert werden, um die Gleichung zum Gleichungssystem hinzuzufügen. Je nachdem wie die Werte einer Zelle aus benachbarten Zellen berechnet werden, wird zwischen verschiedenen Diskretisierungsansätzen unterschieden.

Vorwärts-, Rückwärts- und Zentraldifferenz

Bei der Vorwärtsdifferenz wird die Ableitung in einem Gitterpunkt x_i, durch die Werte in den Punkten x_i und x_{i+1} approximiert. Durch die Taylorreihenentwicklung und Abbruch

nach dem ersten Glied, ergibt sich im einfachsten Fall: $(\frac{\partial\phi}{\partial x_i})_i = \lim_{\Delta x\to 0} \frac{\phi(x_{i+1})-\phi(x_i)}{\Delta x}$. Die Genauigkeit der Approximation hängt von der Gitterweite Δx ab. Der Abbruchfehler, der durch die Vernachlässigung höherer Terme in der Taylorreihentwicklung entsteht, ist proportional zu der Summe der Produkte aus einer Potenz der Gitterweite und Ableitung höherer Ordnung:

$$\epsilon = (\Delta x)^m \alpha_{m+1} + (\Delta x)^{m+1} \alpha_{m+2} + ... \tag{3.1}$$

Wenn der Gitterabstand Δx klein genug wird, reduziert sich der Fehler auf den ersten Term. In diesem Fall handelt es sich um eine Approximation m-ter Ordnung. Die Ordnung einer Approximation gibt an, wie schnell der Fehler mit der Gitterverfeinerung reduziert wird.

Bei der Zentraldifferenz wird die Ableitung in einem Gitterpunkt x_i, durch die Neigung der Geraden durch x_{i-1} und x_{i+1} approximiert: $(\frac{\partial\phi}{\partial x_i})_i = \lim_{\Delta x\to 0} \frac{\phi(x_{i+1})-\phi(x_{i-1})}{2\Delta x}$, während bei der Rückwärtsdifferenz die Neigung der Geraden durch x_i und x_{i-1} verwendet wird: $(\frac{\partial\phi}{\partial x_i})_i = \lim_{\Delta x\to 0} \frac{\phi(x_i)-\phi(x_{i-1})}{\Delta x}$.

Bei Vorwärts- und Rückwärtsdifferenzen überwiegt der Einfluss einer Seite auf den Wert der Ableitung am meisten. Deswegen wird, wenn das Fluid von x_{i-1} zu x_i strömt, meistens Rückwärtsdifferenz verwendet. Im anderen Fall ist die Vorwärtsdifferenz besser geeignet. Diese Methoden werden UPWIND-Differenzen genannt (engl. upwind differencing). Die UPWIND-Differenzen erster Ordnung sind in den meisten Fällen ungenau - der Abbruchfehler hat den Effekt einer falschen Diffusion (in manchen Fällen kann die falsche Diffusion größer werden, als die wirkliche Diffusion). Bei UPWIND-Differenzen höherer Ordnung wird der Fehler kleiner, jedoch kann in diesem Fall meistens die Zentraldifferenz verwendet werden, da sie einfacher zu implementieren ist, und die Strömungsrichtung dabei nicht überprüft werden muss.

3.1.2 Auswahl des Gitters

In dieser Arbeit soll die in Abb. 3.1 dargestellte Düse numerisch untersucht werden.

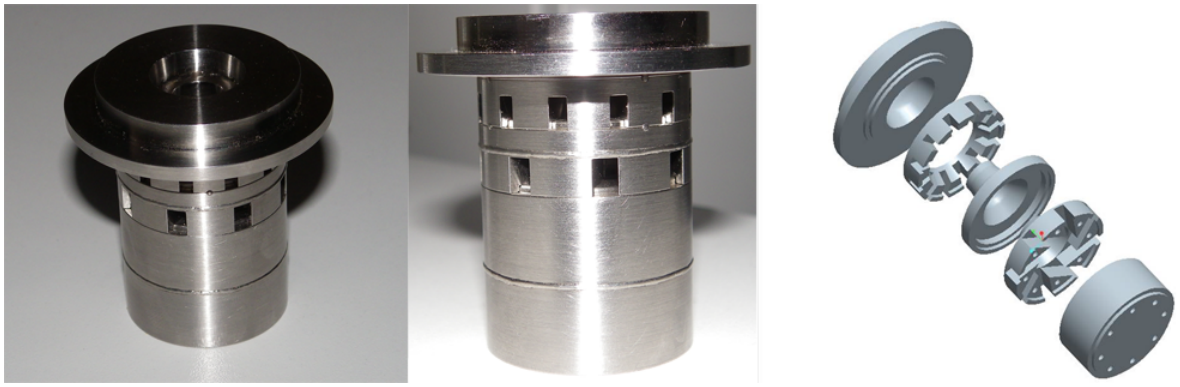


Abbildung 3.1: Gasdüse ohne Brennkammer in Echt- und Explosionsdarstellung

Zur Durchführung der numerischen Simulationen wurde aus der 3D Geometrie der Düse und Brennkammer ein Kuchenschnitt mit kleinem Winkel von 6 Grad genommen (Abb.

3.2), um die Anzahl an zu berechenden Gitterzellen zu reduzieren, und die Betriebsparameter sowie die Randbedingungen anhand der Daten aus laufenden 3D Rechnungen angepasst. Der Gittertyp ist ein unstrukturiertes achsensymmetrisches Gitter bestehend aus 85802 Zellen, wovon 84871 Hexaeder- und 971 Prismaelementen sind. Das Gitter wurde erzeugt mit Hilfe des Programms ICEM CFD der Firma Ansys [ANS09]. Die Geometrie besteht aus drei Einlässen, davon 2 für jeweils Primär- und Sekundärluft und einem Brennstoffeinlass, sowie einem Auslass. Das Verhältnis der Luftströme im primären und sekundären Kanal ist auf 0.6 bestimmt worden.

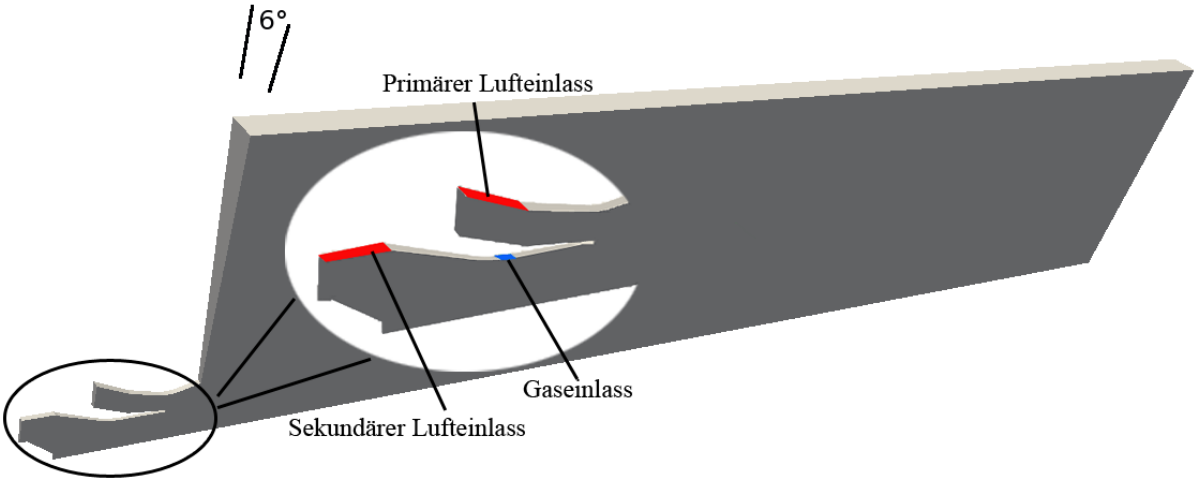


Abbildung 3.2: 6 Grad Geometrie

3.2 Brennstoffmodelle und Reaktionsmechanismen

Im Ramen der Arbeit wurden die Brennstoffmodelle für Kerosin und Methan verwendet.

3.2.1 GRI3.0

Der Reaktionsmechanismus GRI-Mech ist das chemische Model für die Beschreibung und Modellierung der Verbrennung von Methan bzw. Erdgas. Der Mechanismus wurde von der University of California, Berkeley, der Stanford University, der University of Texas at Austin, und SRI International mit Sponsoring durch das Gas Research Institute (GRI) entwickelt. Die im GRI-Mechanismus gespeicherten Daten entsprechen den für die Berechnung der Geschwindigkeitskonstanten benötigten Konstanten aus der Arrhenius-Gleichung A, E_A und n:

$$k = A \cdot e^{-\frac{E_A}{RT}} \tag{3.2}$$

Dabei sind k die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante, A der präexponentielle Faktor, E_A die Aktivierungsenergie und T die absolute thermodynamische Temperatur. Durch die Arrhenius-Gleichung (3.2) ist die Abhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeitskonstante k von der Temperatur T vollkommen beschrieben.

Die Daten in der Thermodatenbank sind im Format der NASA-Polynome mit sieben Konstanten gespeichert. Sie werden für die Berechnung der temperaturabhängigen Werte für die Wärmekapazität , die Bildungsenthalpie und die Bildungsentropie verwendet:

$$\frac{c_p}{R} = a_1 + a_2 T + a_3 T^2 + a_4 T^3 + a_5 T^5 \tag{3.3}$$

$$\frac{H}{RT} = a_1 + a_2 \frac{T}{2} + a_3 \frac{T^2}{3} + a_4 \frac{T^3}{4} + a_5 \frac{T^4}{5} + \frac{a_6}{T} \tag{3.4}$$

$$\frac{S}{R} = a_1 lnT + a_2 T + a_3 \frac{T^2}{2} + a_4 \frac{T^3}{3} + a_4 \frac{T^4}{4} + a_7 \tag{3.5}$$

Der GRI-Mechanismus hat im Laufe der Entwicklung verschiedene Optimierungsstadien erlebt, die sich in der unterschiedlichen Anzahlen der Spezies und Reaktionsgleichungen, sowie in der aktuellsten Daten für die einzelnen Reaktionskinetiken widerspiegeln. So wurde z.B die CH Kinetik, die entscheidend für die NO-Bildung ist, entsprechend der neuesten Messungen angepasst. Neue Ausdrücke für die $H + O_2$, $CH_3 + O_2$ und $CH_2O + OH$ Reaktionen, sowie den CH_2O Abbau wurden ebenso eingeführt.

Die Hauptänderungen wurden bei der Einführung der 4 zusätzlichen Spezies gemacht. Die Kinetik für die Acetaldehyd und Vinoxy Radikalen wurde eingeführt um die Oxidation von Ethylen besser zu beschreiben. Weil das Erdgas Propan enthält, sowie die höheren Hydrokarbonate die approximativ durch Propan beschrieben werden können, wurde auch die minimale Anzahl an Propankinetik hinzugefügt, um diese Spezies zu modellieren. Der verwendete Mechanismus enthält 325 Reaktionen und 53 Spezies [gri].

3.2.2 Aachen

Die heute wichtigsten gebräuchlichen Kerosine sind Jet A-1, Jet A, Avtur, JP-8, JP-5. Diese sind die Raffinierprodukte, die eine Liste an Anforderungen erfüllen müssen. Die bestehen aus dem Gemisch von hunderten aromatischen und aliphatischen Hydrokarbonaten. Die Hauptkomponenten sind geraden und cyclischen Alkane, Aromate und Alkene. Für die meisten Komponenten ist die detaillierte chemische Kinetik der Verbrennung nicht bekannt. Der sinnvolle und übliche Ansatz in solchen Fällen ist den chemisch-kinetischen Mechanismus für ein Ersatzstoff zu entwickeln. Es wurden die verschiedenen experimentellen und numerischen Studien durchgeführt mit dem Ziel ein Ersatzstoff zu entwickeln, der die chemischen und physikalischen Eigenschaften der Kerosinverbrennung nachbilden kann. Ersatzstoffe bestehen aus dem Gemisch von wenigen Hydrokarbonaten mit ähnlichen Brenneigenschaften wie die der kommerziellen Brennstoffe. Die Mischung aus 80 Massen-% n-Decane und 20 Massen-% 1,2,4-Trimethylbenzen, wurde am Institut für Technische Verbrennung an der Universität Aachen, als einer der möglichen Ersatzstoffe für Kerosin untersucht. Dabei wurde ein chemisch-kinetisches Mechanismus zur Modellierung der Verbrennung von diesem Ersatzstoff entwickelt. Dieser Mechanismus wurde zusammengefügt aus vorher bestehenden Mechanismen für die Verbrennung von n-Decane und 1,2,4-Trimethylbenzen. Der kombinierte Mechanismus wurde durch die experimentellen Daten validiert. Die Ergebnisse der experimentellen Studien zeigten, dass Aachen-Surrogat sich

für die Beschreibung der Kerosin-Verbrennung bei nicht vorgemischten Bedingungen gut eignet. Allerdings wurde die Validierung nur beim atmosphärischen Druck durchgeführt [HSNP09].

3.2.3 Franzelli

Für die Simulation der turbulenten vorgemischten Kerosin/Luft Verbrennung, wurde in der Arbeit von B.Franzelli, E.Riber, M.Sanjose und T.Poinsot ein reduzierter 2-Schritt Mechanismus vorgestellt. Der Mechanismus besteht aus 2 Reaktionen. Die erste ist die Brennstoffoxidation zu CO und H_2O, die Zweite stellt das $CO - CO_2$ Gleichgewicht dar. Dieser Mechanismus wurde anhand der detaillierten Mechanismen von Dagaut und Luche validiert, da die experimentellen Daten nicht vorlagen. Die zwei Reaktionen dieses Mechanismus sind [FRSP10]:

$$KERO + 10O_2 \rightarrow 10CO + 10H_2O \tag{3.6}$$

$$CO + 0.5O_2 \rightarrow CO_2 \tag{3.7}$$

3.2.4 Westbrook

In der Arbeit von [WD81] wurden für die Oxidation von Kohlenwasserstoffen die reduzierten Reaktionsmechanismen mit zwei und drei Reaktionsschritten untersucht. Als Kohlenwasserstoffe wurden n-Alkane mit der Anzahl der Kohlenstoffatome von C_1 bis C_10 verwendet. Die Parameter für die Reaktionsraten einzelner Reaktionen wurden bestimmt aus dem Vergleich der berechneten und bekannten laminaren Flammengeschwindigkeiten bei verschiedenen Drücken und Luftzahlen. Die Struktur der Flamme konnte aber mit keinem der gewählten Mechanismen genau beschrieben werden.
Der Westbrook-Mechanismus für n-Decane besteht im Rahmen dieser Arbeit aus folgenden drei Reaktionen:

$$2C_{10}H_{22} + 21O_2 \rightarrow 20CO + 22H_2O \tag{3.8}$$

$$2CO + O_2 \rightarrow 2CO_2 \tag{3.9}$$

$$2CO_2 \rightarrow 2CO + O_2 \tag{3.10}$$

$$\tag{3.11}$$

3.2.5 Erweiterung der Reaktionsschema durch CH* und OH* Reaktionen

In der Studie [WLTS] wurden die Profile für CH, CH* und OH* im Falle der laminaren Diffusionsflamen experimentell und numerisch untersucht. Dazu ist GRI Mech 2.11 durch die zusätzlichen Reaktionen für CH* und OH* erweitert worden. Dabei hat sich bestätigt, dass GRI Mech gute Übereinstimmungen in Bezug auf die Flammenlänge und Vorhersagen der CH Konzentrationen liefert, die berechneten Abhebehöhen lagen jedoch nach [WLTS] unter den experimentell gemessenen Werten. Im Rahmen der Arbeit ist der Einfluss der zusätzlichen Reaktionen für CH* und OH* im Falle der GRI3.0 und Aachen Mechanismen ebenfalls getestet worden. Zu diesem Zweck wurden die beiden Mechanismen erweitert und mit den Grundmechanismen verglichen.

3.3 Festlegung der Betriebspunkte und Randbedingungen

Die Betriebspunkte zum Durchführen der Simulationen werden durch vorher definierte Betriebsbedingungen festgelegt. Durch Festlegen vom gewünschten Druck, der Temperatur und dem Druckverlust über die Düse ergibt sich der Gesamtmassenstrom der Luft nach Gleichung (3.12):

$$\dot{m} = A_{eff}\frac{p_0}{\sqrt{T_0}}(\frac{p}{p_0})^{\frac{1}{\kappa}}\sqrt{\frac{2\kappa}{(\kappa-1)R}}\sqrt{1-(\frac{p}{p_0})^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}} \tag{3.12}$$

wobei $p = p_0 - \Delta p$, p der einzustellende Druck und Δp der Druckverlust sind.

Aus dem berechneten Massenstrom der Luft und dem einzustellenden Luft/Brennstoff Verhältnis (LBV oder engl. AFR - air to fuel ratio) ergibt sich der Gesamtmassenstrom des Brennstoffs. Die Simulationen für Methan bzw. Kerosin werden bei gleicher Brennleistung durchgeführt. Da das in den Simulationen benutzte Gitter einen Schnittwinkel von 6 Grad hat, werden die Gesamtmassenströme auf 6/360 - en Anteil reduziert. Durch das Verhältnis der Ströme im primären und sekundären Luftkanal von 0.6 ergeben sich die beiden Massenströme für die beiden Lufteinlässe.

Die Wahl der Randbedingungen hat auf die Ergebnisse einer numerischen Simulation starken Einfluss. Die Dissipationsrate ε und die spezifische Dissipationsrate ω nehmen in der Wandnähe stark zu. An Übergängen zwischen den laminaren Grenzschichten und turbulenten Bereichen des Strömungsfeldes zeigen die Gradienten der Strömungsvariablen oft Diskontinuitäten, die in Richtung der Grenzschicht zunehmen [Wil94]. Die Behandlung der Randbedingungen am Auslass ist einfacher, da meistens die Extrapolation angewendet werden kann, wobei die Ableitung aller Größen in Richtung der Normalen zum Rand vorgegeben werden muss; sie werden bei stationären Strömungen meistens gleich null gesetzt: $\frac{\partial \phi}{\partial n} = 0$, wobei ϕ eine beliebige Größe darstellt [FP02]. An festen Wänden können die Haftbedingungen verwendet werden.

Die Bestimmung der restlichen Randbedingungen für die Luft- und Brennstoffeinlässe, wurde anhand der Daten aus einer dreidimensionalen Simulation am großen 3D Gitter bestimmt. Dazu wurden die Randbedingungen am 6 Grad Gitter so lange variiert bis eine zufriedenstellende Übereinstimmung der strömungsrelevanten Gebiete mit der 3D isothermen Strömung passiert. Die folgenden Parameter wurden variiert:

- Geschwindigkeitsrichtung am primären Lufteinlass $\overrightarrow{PRI}$
- Geschwindigkeitsrichtung am sekundären Lufteinlass $\overrightarrow{SEK}$
- Turbulenzintensität am primären Lufteinlass
- Turbulenzintensität am sekundären Lufteinlass

Die isothermen Rechnungen wurden durchgeführt mit Verwendung vom $k-\omega-$SST Turbulenzmodell beim folgenden Betriebspunkt:

- $p = 3$ bar
- $T = 673$ K
- Annahme eines konstanten Druckverlusts von $\frac{\Delta p}{p} = 3\ \%$
- Luftmassenströme am primären und sekundären Lufteinlass: 0,000225 kg/s und 0,00015 kg/s
- Drallzahl S $\sim$ 0,3

Die Variation der Randbedingungen ist in der Tabelle 3.1 dargestellt. Dabei sind die Vektoren der Geschwindigkeitsrichtungen ($\overrightarrow{PRI}$, $\overrightarrow{SEK}$), Turbulenzintensitäten ($\left(\frac{u'}{u}\right)_{PRI}$, $\left(\frac{u'}{u}\right)_{SEK}$) und die turbulenten Längenmaße ($L_{t,PRI}$, $L_{t,SEK}$) am primären und sekundären Lufteinlass aufgetragen. Die Randbedingung, die die beste Übereinstimmung mit der 3D Strömung ergeben hat, ist durch die Graumarkierung hervorgehoben.

Tabelle 3.1: Variation der Randbedingungen für isotherme Strömungen am 2D Gitter

$\overrightarrow{PRI}$	$\overrightarrow{SEK}$	$\left(\frac{u'}{u}\right)_{PRI}[-]$	$\left(\frac{u'}{u}\right)_{SEK}[-]$	$L_{t,PRI}[m]$	$L_{t,SEK}[m]$
(0 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,17	0,32	$1,71 \cdot 10^{-4}$	$5,65 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,09	0,16	$8,45 \cdot 10^{-5}$	$2,82 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$6,03 \cdot 10^{-5}$	$1,99 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$2,41 \cdot 10^{-4}$	$7,97 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$6,03 \cdot 10^{-5}$	$6,03 \cdot 10^{-5}$
(0 1 3)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0 1 0,3)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,5 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,6 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,7 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,8 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,9 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(1 1 1,5)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,5 1 1)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1,25)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$

(0 1 2)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1,75)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0 1 2,25)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,5 1 1,25)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,5 1 0,75)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,75 1 1)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,75 1 0,75)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,75 1 1,25)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(1 1 1)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,5 1 1)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,5 1 1,5)	(0 1 0,2)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(1 1 0,75)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(1 1 1,25)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,5 1 2)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,5 0,5 2)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0,5 1,5 2)	(0 1 0,3)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1,5)	(0 1 1)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1,5)	(0 1 0,5)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$
(0 1 1,5)	(0 1 0,7)	0,12	0,22	$1,21 \cdot 10^{-4}$	$3,99 \cdot 10^{-4}$

In der Abb. 3.3 sind die Profile der axialen Geschwindigkeitskomponenten für isotherme Rechnungen an 3D und 6 Grad Gitter (für einige Randbedingungen) gegen die y Koordinate aufgetragen. Der Vergleich der beiden Strömungen wurde im Abstand 1.8cm vom Düsenaustritt gemacht. In den Abbildungen 3.4 und 3.5 sind für die gleichen Strömungen die u_y Geschwindigkeitskomponenten und die turbulenten kinetischen Energien an der gleichen axialen Position verglichen worden.

In den Abbildungen 3.6 und 3.7 sind an zwei weiteren axialen Positionen in weiterer Entfernung vom Düsenaustritt (x=2cm und x=3cm) die u_x Geschwindigkeitskomponenten und die turbulente kinetische Energie für den ausgewählten Betriebspunkt mit dem Strömungsprofil der 3D Rechnung verglichen worden.

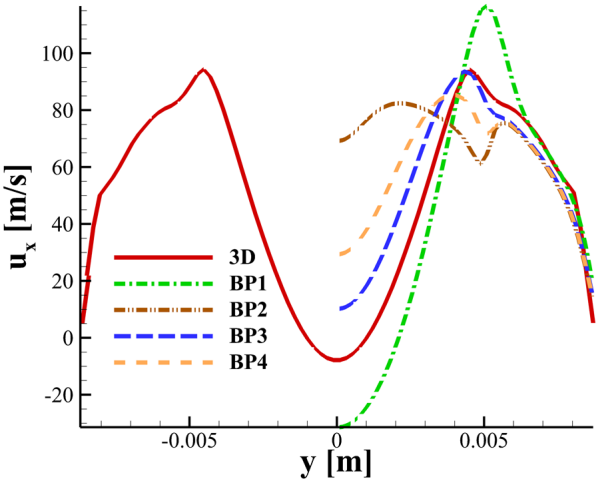


Abbildung 3.3: Radialer Verlauf der axialen Geschwindigkeitskomponenten u_x für 3D und 2D Gitter im Abstand 1.8cm vom Düsenaustritt bei verschiedenen Randbedingungen

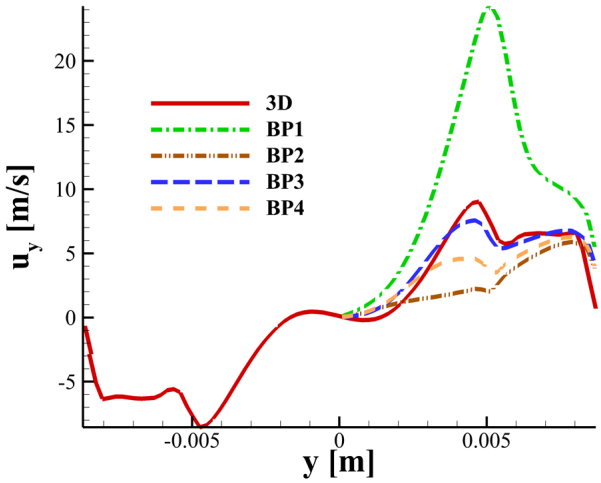


Abbildung 3.4: Radialer Verlauf der Geschwindigkeitskomponenten u_y für 3D und 2D Gitter im Abstand 1.8cm vom Düsenaustritt bei verschiedenen Randbedingungen

Das am besten übereinstimmende Strömungsprofil der 2D Rechnungen mit dem Strömungsprofil der 3D Rechnung wurde als Anhaltspunkt für die Wahl der Randbedingungen für weitere Rechnungen am 6 Grad Gitter mit überlagerter Verbrennung genommen.

Die Abbildungen 3.9 und 3.8 zeigen den Vergleich der Axialgeschwindigkeitskomponenten und turbulenten kinetischen Energien für die isothermen Strömungen an 2D und 3D Gitter. In der oberen Hälfte sind die Werte aus der 2D isothermen Rechnung bei ausgewählten Randbedingungen (in der Tabelle 3.1 durch Graumarkierung hervorgehoben)dargestellt. In der unteren Hälfte ist entsprechend das Profil aus der isothermen 3D Rechnung zu sehen. In der Abb. 3.9 sind die äußeren Rezirkulationszonen für die beiden Strömungen

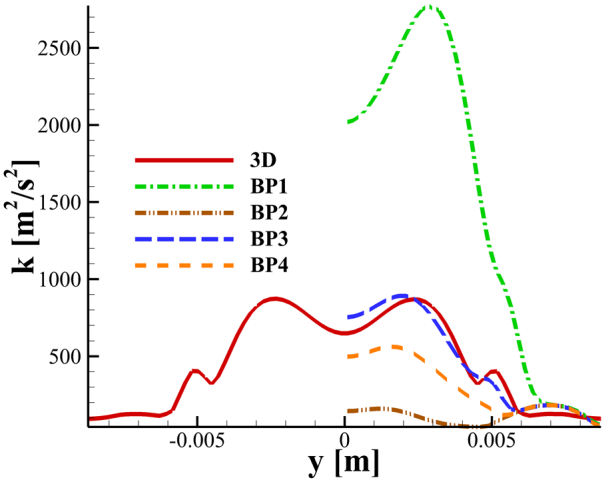


Abbildung 3.5: Radialer Verlauf der turbulenten kinetischen Energien für 3D und 2D Gitter im Abstand 1.8cm vom Düsenaustritt bei verschiedenen Randbedingungen

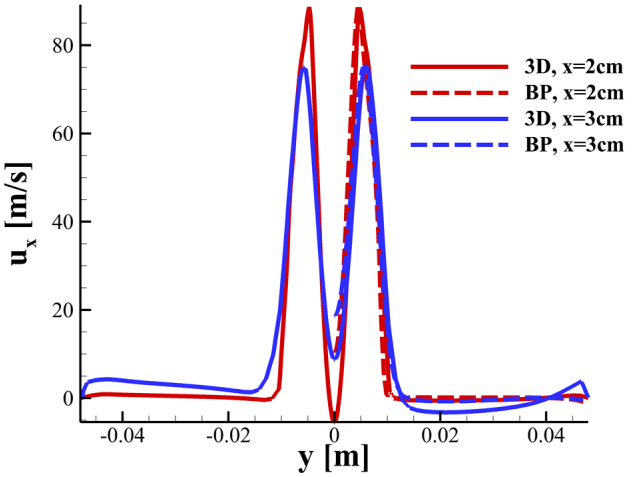


Abbildung 3.6: Radialer Verlauf der axialen Geschwindigkeitskomponenten u_x für 3D und 2D Gitter im Abstand 2cm und 3cm vom Düsenaustritt beim ausgewählten Betriebspunkt im Falle einer isothermen Strömung ($p = 3bar$, $T = 673K$, $\Delta p/p = 3\%$).

deutlich erkennbar, im Falle der 3D Rechnung ist die Rezirkulationszone jedoch etwas größer. Wegen der kleinen Drallzahl (S $\sim$ 0,3) ist die innere Rezirkulationszone nicht vorhanden.

Da die Untersuchung von vielen Betriebspunkten notwendig ist, werden die Unterschiede in Strömungsprofilen bei 3D und 2D Gitter zugunsten kürzerer Rechenzeiten in Kauf genommen.

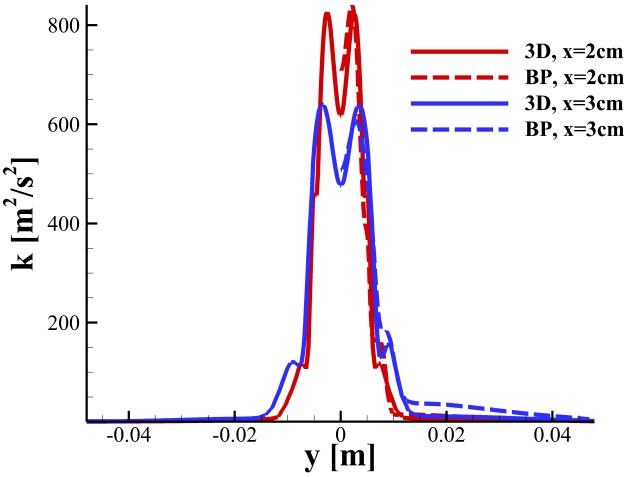


Abbildung 3.7: Radialer Verlauf der turbulenten kinetischen Energien für 3D und 2D Gitter im Abstand 2cm und 3cm vom Düsenaustritt beim ausgewählten Betriebspunkt im Falle einer isothermen Strömung ($p = 3bar$, $T = 673K$, $\Delta p/p = 3\%$).

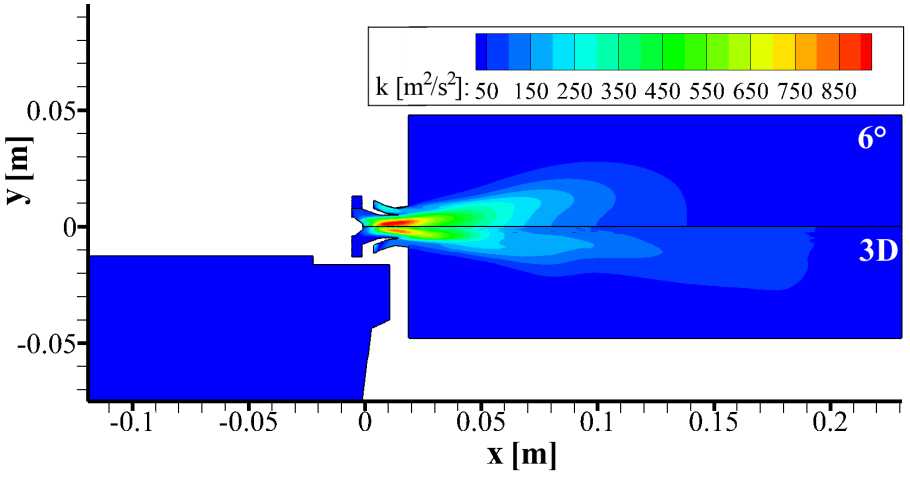


Abbildung 3.8: Vergleich der turbulenten kinetischen Energien einer isothermen Strömung für das große 3D und vereinfachte 6 Grad Gitter ($p = 3bar$, $T = 673K$, $k - \omega -$ SST Turbulenzmodell)

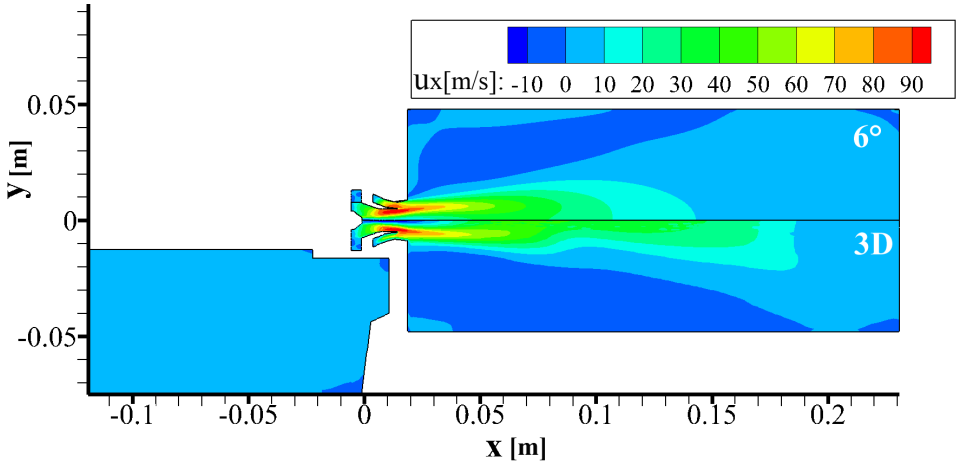


Abbildung 3.9: Vergleich der axialen Geschwindigkeiten einer isothermen Strömung für das große 3D und vereinfachte 6 Grad Gitter. ($p = 3bar$, $T = 673K$, $k - \omega -$ SST Turbulenzmodell)

3.4 Erstellung der JPDF-lookup Tabellen

Die Abbildung 3.10 zeigt die schematische Darstellung der Vorgehensweise bei der Erstellung und Anbindung der JPDF-lookup Tabellen an das CFD Code.

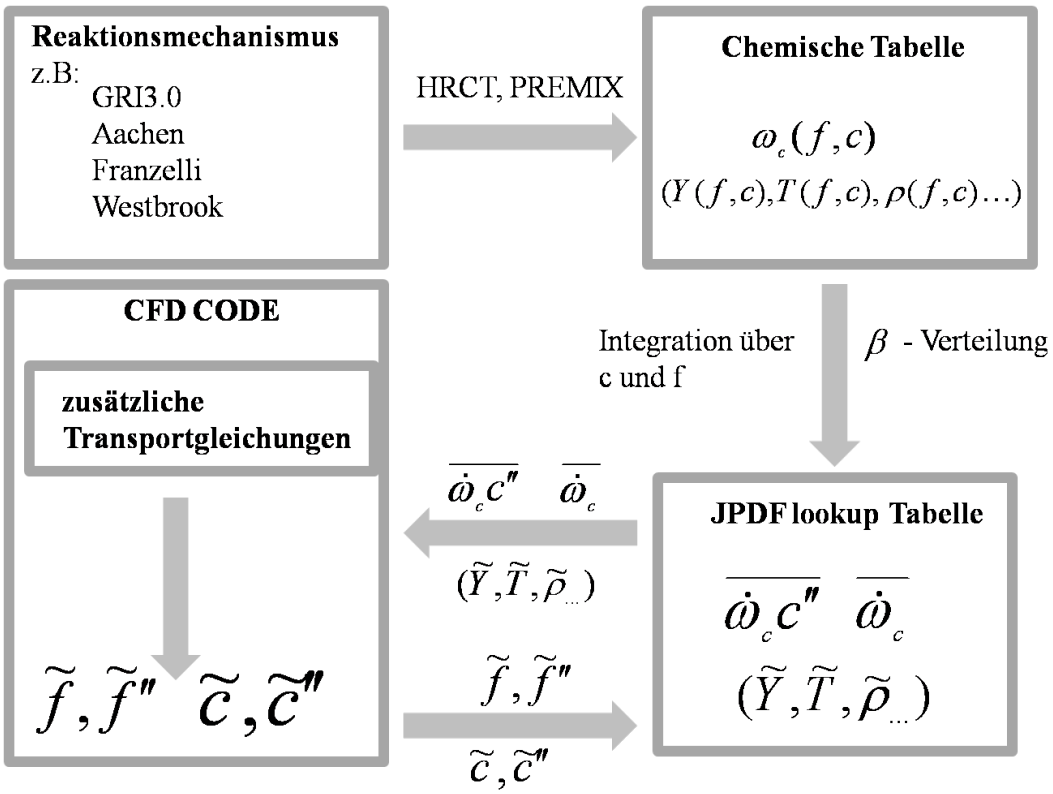


Abbildung 3.10: Schematische Darstellung der Erstellung von JPDF-lookup Tabellen und Anbindung an CFD Code

Ausgehend vom Mechanismus der Reaktionskinetik werden die Reaktionsrate, Temperatur, Massenbrüche der Spezies und andere zu berechenden Größen als Funktion von Mischungsbruch und Reaktionsfortschritt in tabellierter Form gespeichert. Die Tabellierung wird durchgeführt durch die am Institut entwickelten Programme, die auf Basis vom frei verfügbaren Programm Cantera basieren. Dabei können zwei verschiedene Reaktormodellen verwendet werden: HRCT und PREMIX.
Die HRCT-Tabellierung verwendet das Modell eines ideal gemischten Reaktors. Die Brennstoff- und Oxidatorströme festgelegter Zusammensetzung und Mischungsgrad treten in den Reaktor ein, nachdem ein zeitabhängiger Reaktionsprozess entsteht.
Bei der PREMIX-Tabellierung wird der fortschreitende ebene eindimensionale Flammenfront einer vorgemischten Luft/Brennstoff Mischung modelliert. Die berechneten Werte wie Reaktionsrate, Temperatur, Konzentrationen der Spezies und andere werden als Funktion von Mischungsgrad und Reaktionsfortschritt in der Tabelle gespeichert, die im weiteren Integrationsprozess für die PDF Integration mit der angenommenen β - Verteilung verwendet wird, wie im Kapitel 2.5.1 beschrieben wurde.
Die anschließende Verwendung der JPDF-lookup Tabelle erfolgt durch das CFD Modul, indem die gemittelten Werte (die Funktion von Mischungsbruch und Reaktionsfortschritt sind) anhand von Mischungsbruch und Reaktionsfortschritt aus Transportgleichungen

(2.66), (2.67), (2.71), (2.72) im Iterationsprozess abgefragt werden.

4. Diskussion der Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Arbeit dargestellt und diskutiert. Zunächst wird auf die numerischen Parameter eingegangen, die im Rahmen der durchgeführten Simulationen von Bedeutung sind. Dazu zählen vor allem die verschiedenen Methoden für die Erzeugung der JPDF Tabellen, sowie der Vergleich der Reaktionsmechanismen für die chemische Kinetik. Danach wird der Einfluss der Betriebsparameter wie Druck, Vorwärmtemperatur der Luft, Druckverlust über die Düse und Luft/Brennstoff Verhältnis auf die Abhebehöhe diskutiert. Die Ergebnisse der numerischen Simulationen in den Abbildungen sind als Temperaturfeld mit der eingetragenen Isolinie, auf der 50% der maximalen Reaktionsrate erreicht wird, dargestellt.

4.1 Einfluss der JPDF-Tabellierung

Der Einfluss der JPDF-Tabellierung auf die Ergebnisse der Simulation wurde anhand einiger Testsimulationen geprüft. Die Ergebnisse ermöglichen einen kurzen Einblick in das Brennverhalten bei verschiedenen JPDF-Konfigurationen bei bestimmten Betriebspunkten. Die Parameter, die bei der JPDF-Tabellierung variiert wurden sind Reaktormodell, die Definition der Reaktionsfortschrittsvariable sowie die Auflösung des Mischungsbruchs und der Anzahl der Integratorstützpunkte.
Zwei Modelle für die Erstellung der JPDF-Lookup Tabellen wurden getestet - homogener Reaktor (HRCT) und vorgemischte laminare Flamme (PREMIX).
Als verschiedene Definitionen der Reaktionsfortschrittsvariable wurden der gebundene Sauerstoff und die Summe der Konzentrationen an Spezies H_2O, CO und CO_2 verwendet, nach Gleichungen (2.64) und (2.65).

4.1.1 HRCT und PREMIX

Die HRCT und PREMIX Tabellierungen für die Erzeugung der chemischen Tabellen wurden im Kapitel 3.4 vorgestellt.

Die beiden verwendeten Tabellierungsprogramme wurden am VBT Institut der Universität Karlsruhe entwickelt und beruhen auf Basis des frei verfügbaren Programms Cantera.

In der Abb. 4.1 sind die Temperaturprofile über den Mischungsbruch und Reaktionsfortschritt für HRCT- und PREMIX-Tabellierungen aufgetragen. Die chemischen Tabellen wurden erstellt anhand vom Franzelli-Reaktionsmechanismus beim Druck $p = 3bar$ und bei der Temperatur $T = 673K$.
Es muss betont werden, dass die beiden verwendeten Tabellierungsprogramme (HRCT, PREMIX) unterschiedliches Konvergenzverhalten aufweisen. Es hängt unter anderem auch von der Wahl des maximalen Reaktionsfortschritts $c_{end,max}$ bis zu welchem die Integration durchgeführt wird. Aus diesem Grund wurde, um eine konvergierte Lösung zu bekommen, die HRCT Tabellierung nicht bis zum maximalen Reaktionsfortschritt $c_{end,max} = 1$ durchgeführt, sondern nur bis zum $c_{end,max} = 0,96$. Deswegen ergibt die PREMIX-Tabellierung etwas höhere Endtemperatur bei einem Reaktionsfortschritt $c = 1$, die bei beiden Tabellierungen aufgrund adiabater Bedingungen gleich sein müsste.

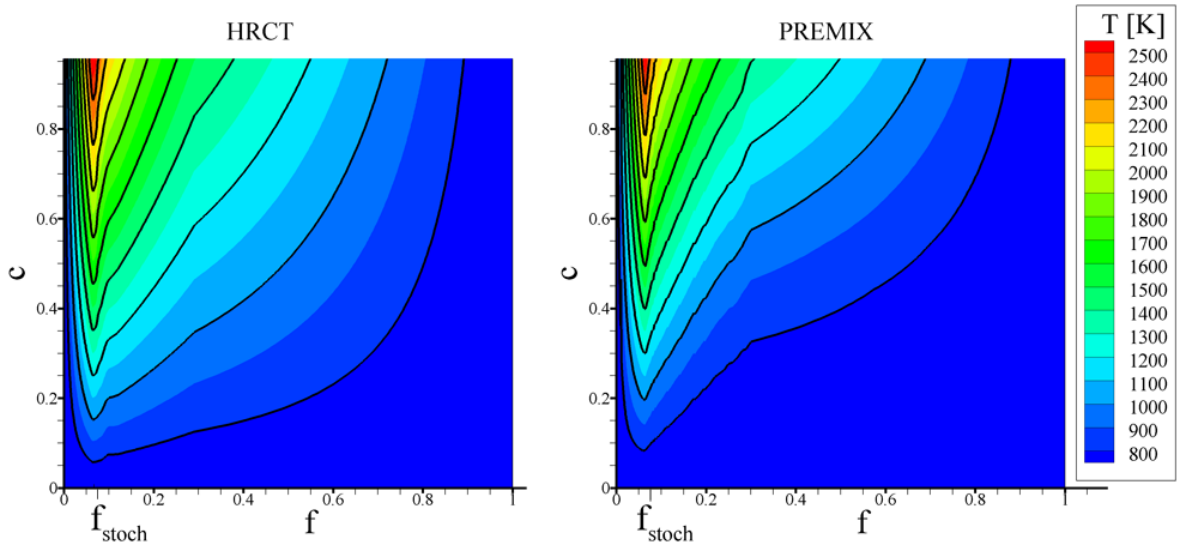


Abbildung 4.1: Vergleich der erstellten chemischen Tabellen bei HRCT- und PREMIX-Tabellierungen (Franzelli-Mech, $p = 3bar$, $T = 673K$)

In der Abb. 4.2 sind Temperaturprofile und Isolinien für 50% des Maximums der Reaktionsrate für HRCT und PREMIX Simulationen dargestellt. Die Simulationen wurden beim Druck 3bar und Luftvorwärmtemperatur 673K im mageren Bereich, mit dem Luft/Brennstoff Verhältnis von AFR=27,8, durchgeführt. Für die Reaktionskinetik wurde Franzelli-Mechanismus verwendet, der im Kapitel (3.2.3) beschrieben wurde.
Wie in der Abbildung 4.2 erkennbar ist, liefert die Simulation unter Verwendung einer, durch PREMIX erstellten chemischen Tabelle, eine etwas kleinere Abhebehöhe und schmalere Flamme im Vergleich zu HRCT.

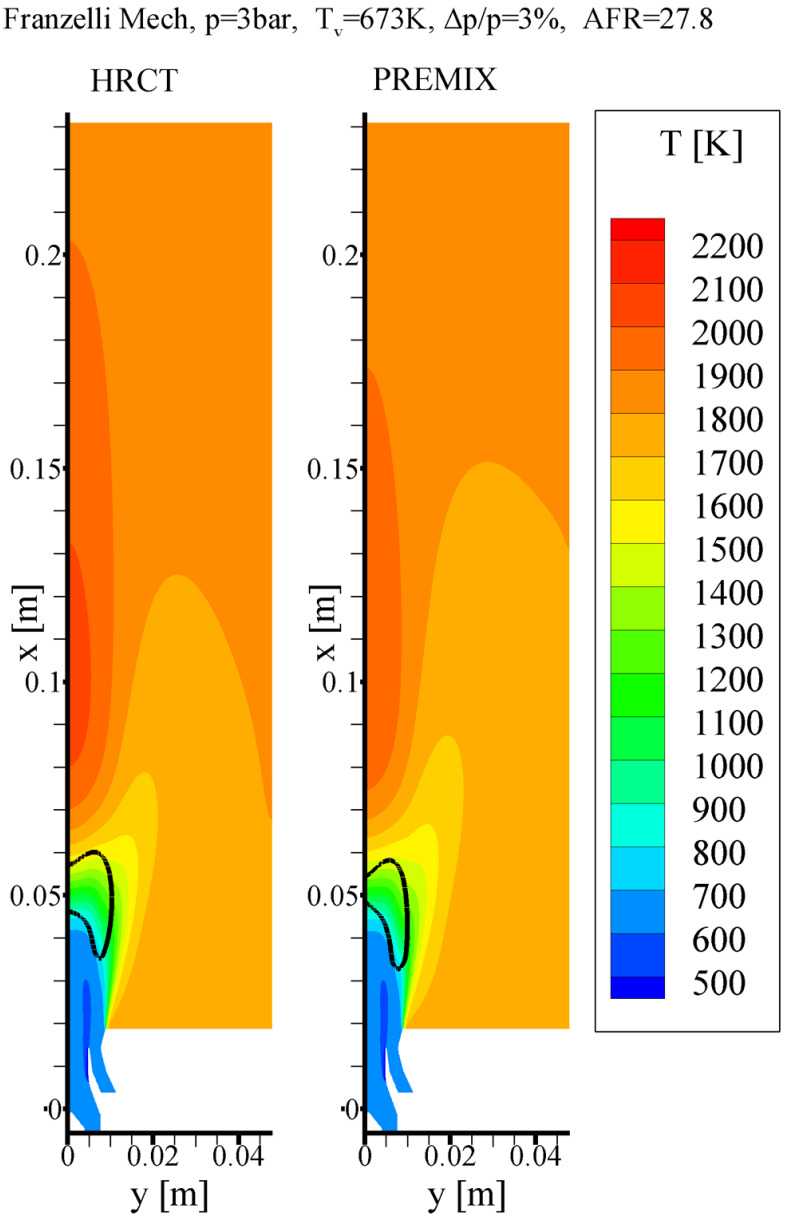


Abbildung 4.2: Vergleich der HRCT- und PREMIX-Tabellierung

4.1.2 Definition der Reaktionsfortschrittsvariable

Wie im Kapitel 2.5 erwähnt, wurden als Definitionen für die Reaktionsfortschrittsvariable der gebundene Sauerstoff und die Summe der Konzentrationen an Spezies H_2O, CO und CO_2 entsprechend Gleichungen (2.64) und (2.65), verglichen. Die JPDF-Tabellierung wurde mit dem homogenen Reaktor (HRCT) durchgeführt.

Die Abb. 4.3 zeigt die Temperaturprofile für die beiden erstellten chemischen Tabellen über den Mischungsbruch und Reaktionsfortschrittsvariable. Die Temperaturen sind in beiden Fällen ungefähr gleich, allerdings ergibt sich im Falle der Tabellierung mit der Reaktionsfortschrittsvariable nach Gl. (2.65) etwas niedrigere Reaktionsrate für den Quellterm des Reaktionsfortschritts, was zu einer entsprechend höheren Abhebehöhe führt, Abb. (4.4).

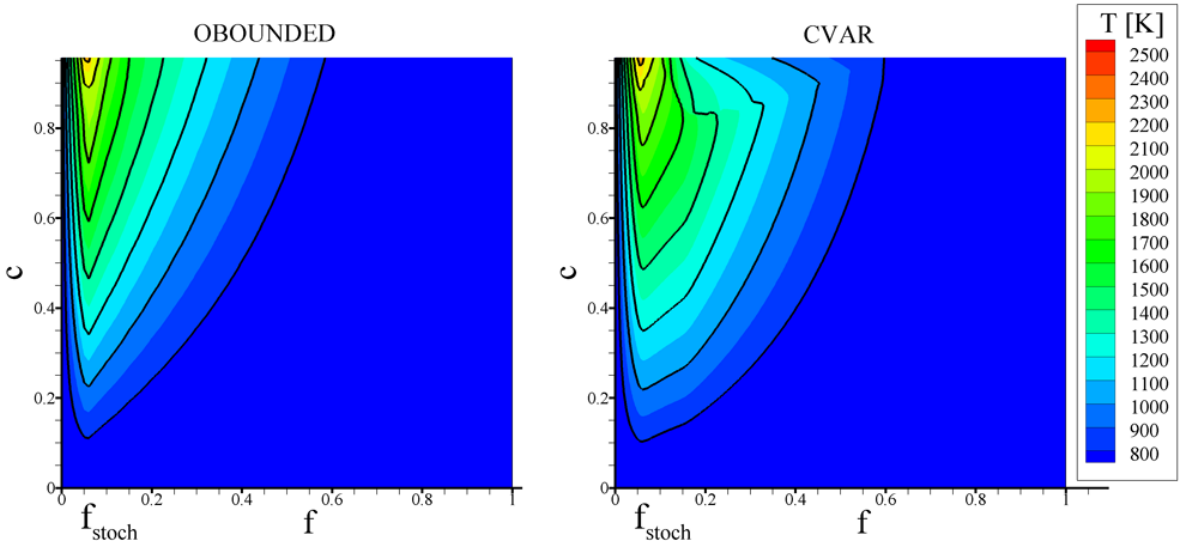


Abbildung 4.3: Vergleich von Temperaturprofilen der chemischen Tabellen für zwei verschiedene Definitionen der Reaktionsfortschrittsvariable nach Gl. (2.64) und (2.65) (GRI3.0 Mech, $p = 3bar$, $T_v = 673K$).

In der Abb. 4.4 sind Temperaturprofile und die Isolinien für 50% des Maximums der Reaktionsrate bei zwei Simulation mit verschiedenen Definitionen der Reaktionsfortschrittsvariable dargestellt. Der verwendete Mechanismus für die Reaktionskinetik ist GRI3.0. Die Simulationen wurden durchgeführt beim Druck 3bar und Luftvorwärmtemperatur 673K im mageren Bereich, mit dem Luft/Brennstoff Verhältnis von AFR=27,8.

Wie in der Abb. 4.4 zu erkennen ist, liefert die Simulation mit einer Reaktionsfortschrittsvariable nach Gl. (2.65) eine etwas größere Abhebehöhe und längere Reaktionszone bei sonst gleicher Flammenbreite.

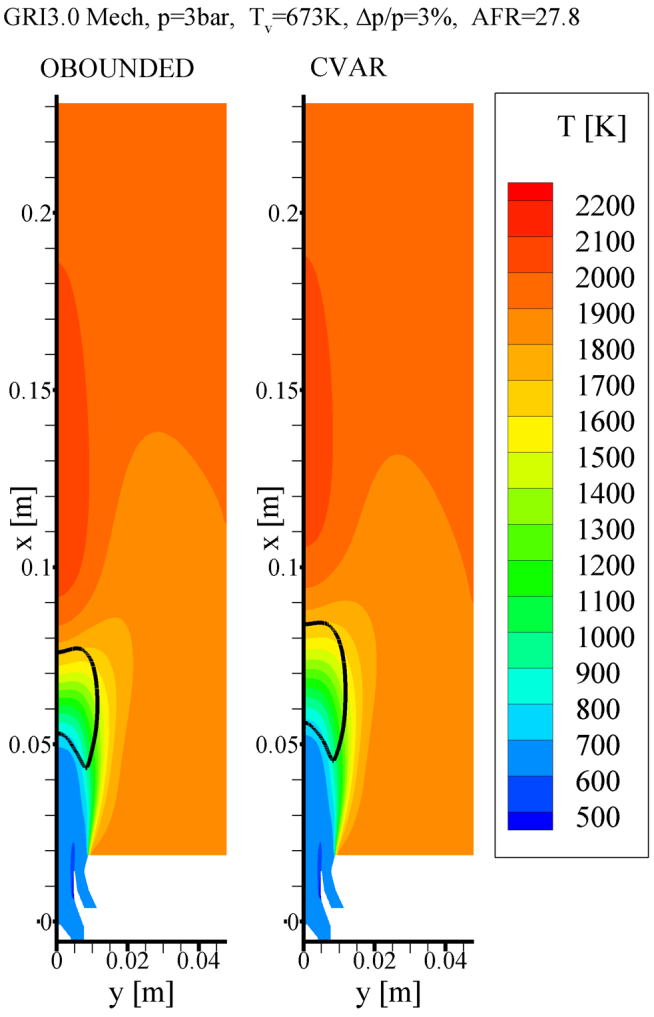


Abbildung 4.4: Simulationen mit zwei Definitionen der Reaktionsfortschrittsvariable nach Gl. (2.64) und (2.65).

4.1.3 Auflösung der Tabellierung

Die Tabellierung und erstellung der JPDF-lookup Tabellen wurde im Kapitel (3.4) beschrieben. Bei der Tabellierung wurden die Anzahl der Berechnungspunkte vom Mischungsbruch N_F sowie die Anzahl der Stützstellen für die JPDF-Integration N_G variiert. Die verwendeten Auflösungen sind in der Tabelle 4.1 zusammengefasst. Die Tabellierungen wurden durchgeführt beim Druck $p = 3bar$ und der Temperatur $T = 673K$. Als Reaktionsmechanismus bei nachträglichen Simulationen wurde GRI3.0 verwendet beim Betriebsdruck $p = 3bar$, der Luftvorwärmtemperatur $T_v = 673$ und dem Luft/Brennstoff Verhältnis $AFR = 27,8$.

Tabelle 4.1: Auflösung der Tabellierung

Fall	N_F	N_{GRID}
1	37	15
2	146	15
3	37	60
4	146	60

Außer der deutlich längeren Dauer für die Erstellung der chemischen Tabellen und die JPDF-Integrierung bei hohen Tabellierungsauflösungen, konnte im Bezug auf die Simulationsergebnisse kein Unterschied in der Flammenstruktur beobachtet werden.

4.2 Vergleich der Kerosin-Mechanismen

In der Abb. 4.5 sind die Temperaturprofile über den Mischungsbruch und Reaktionsfortschrittsvariable für die erstellten chemischen Tabellen anhand der Reaktionsmechanismen für Kerosin dargestellt. Für die Tabellierung wurde der homogene Reaktor (HRCT) verwendet. Im Falle von Westbrook-Mechanismus ergibt sich die größte Reaktionsrate. Die Auswirkung auf die Abhebehöhe ist in der Abb. 4.6 zu erkennen.

Die Temperaturprofile und die Isolinien für 50% des Maximums der Reaktionsrate für Simulationen auf Basis von Reaktionskinetiken nach Aachen-, Westbrook- und Franzelli-Mechanismus sind in der Abb. 4.6 dargestellt. Der Vergleich wurde durchgeführt bei dem Druck 3bar, der Luftvorwärmtemperatur 673K und dem Luft/Brennstoff Verhältnis AFR=27,8. Während die Simulation auf Basis von Franzelli-Mechanismus kompaktere Reaktionszone und kleinere Abhebehöhe im Vergleich zum Aachen-Mechanismus ergibt, konnte bei der Westbrook Simulation im gewählten Betriebsbereich kein Abheben beobachtet werden.

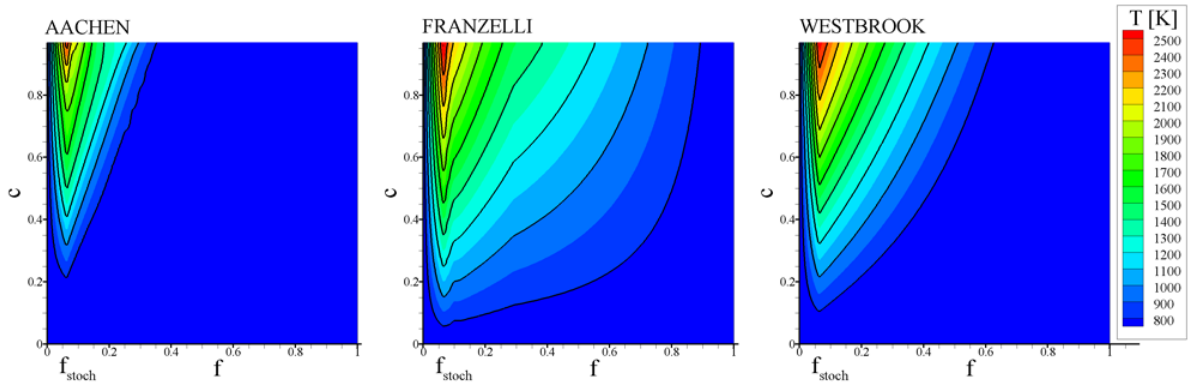


Abbildung 4.5: Vergleich von Temperaturprofilen der chemischen Tabellen für Aachen-, Franzelli- und Westbrook-Mechanismus

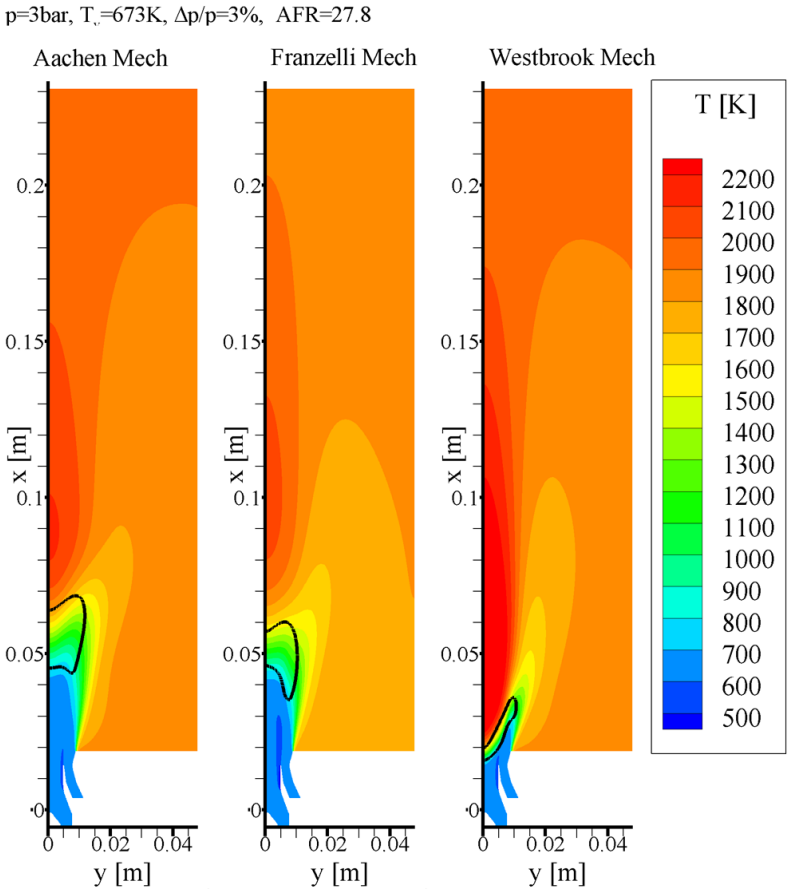


Abbildung 4.6: Vergleich von Aachen- , Franzelli- und Westbrook-Mechanismus

4.3 Erweiterung des GRI3.0 und des Aachen Mechanismus um OH* und CH*

Der Einfluss neuer Reaktionen für CH* und OH* auf das Brennverhalten wurde im Falle von GRI3.0 und Aachen Mechanismus ebenfalls untersucht. Der Betriebsdruck bei der Simulationen betrug 3bar mit einer Luftvorwärmtemperatur von 673K und dem Luft/Brennstoff Verhältnis von AFR=29,9 im Falle von GRI3.0 und AFR=27,8 im Falle des Aachen-Mechanismus. In der Abb. 4.7 sind Temperaturprofile und Isolinen für 50% der maximalen

Reaktionsrate für die entsprechenden numerischen Rechnungen dargestellt.

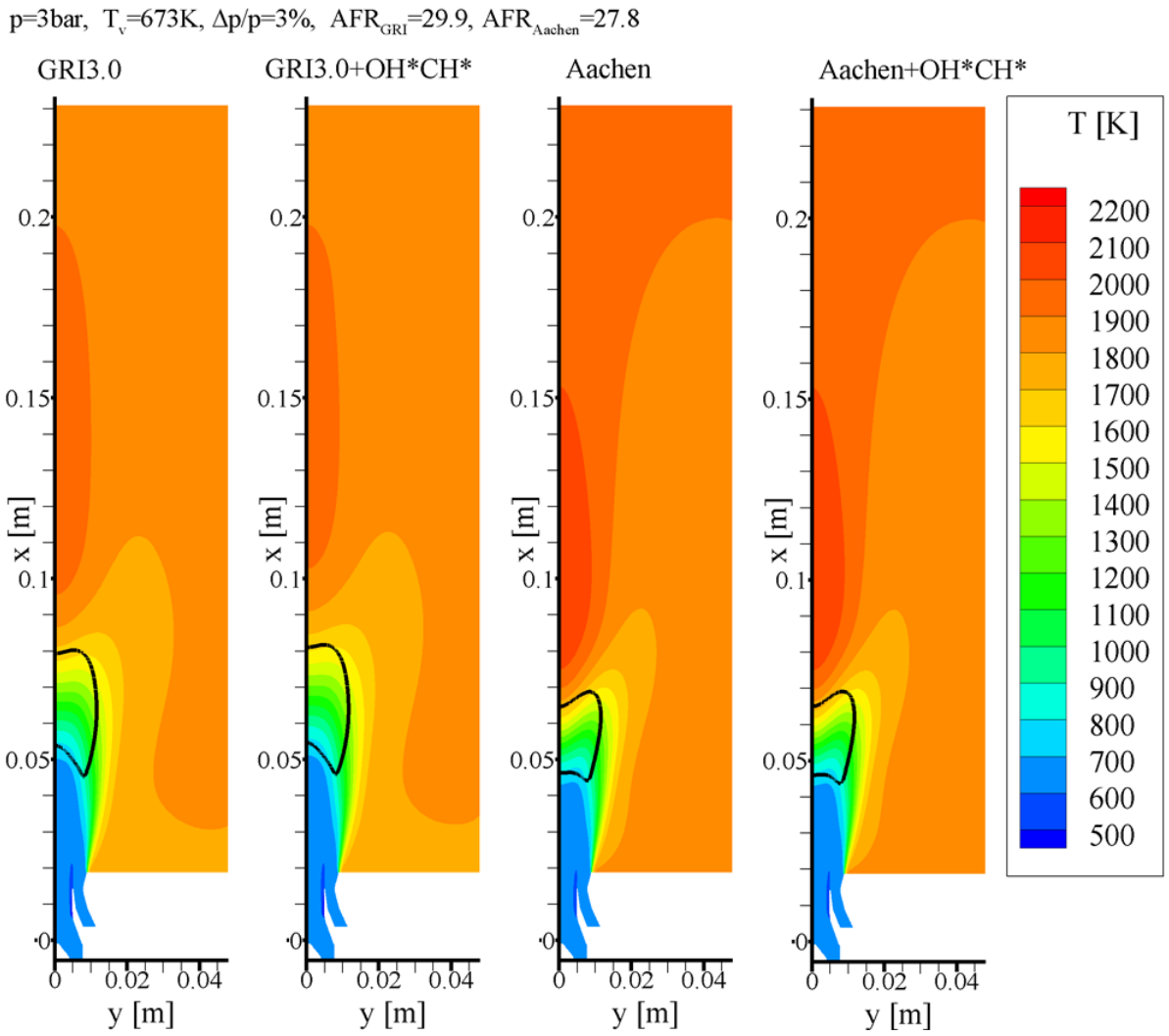


Abbildung 4.7: Einfluß neuer Reaktionen für CH* und OH* auf die GRI3.0 und Aachen Mechanismen

Wie in der Abb. 4.7 erkennbar ist, ändern sich die Temperaturprofile und Abhebehöhen bei der Einführung neuer Reaktionen für die Spezies OH* und CH* erwartungsmäßig nicht. Das ursprüngliche Ziel zur Berechnung der Abhebehöhen anhand der Messung von OH*-Konzentrationen konnte auf diese Weise allerdings nicht erreicht werden. Der Grund dafür ist, dass die Konzentration an OH* Spezies nicht von der OH-Konzentration unterschieden werden konnte. In der Abb. 4.8 sind die Konzentrationsprofile der Spezies OH und OH* für beide Reaktionsmechanismen gegen Y Achse aufgetragen. Die vollen durchgezogenen Linien stellen die OH und die gestrichelten Linien die OH*-Konzentrationen im Falle von erweitertem Mechanismus. Die Doppelpunkt-Strich-Linien stehen für die OH-Konzentration im entsprechenden Basismechanismus. Der Vergleich wurde durchgeführt an drei verschiedenen Axialpositionen (jeweils 5cm, 6cm und 7cm - entspricht der Farben rot, grün, blau in der Abb. 4.8). Aus der Abb. 4.8 ist zu erkennen, dass die OH- und OH*-Konzentrationsprofile bei erweiterten Mechanismen identisch sind.

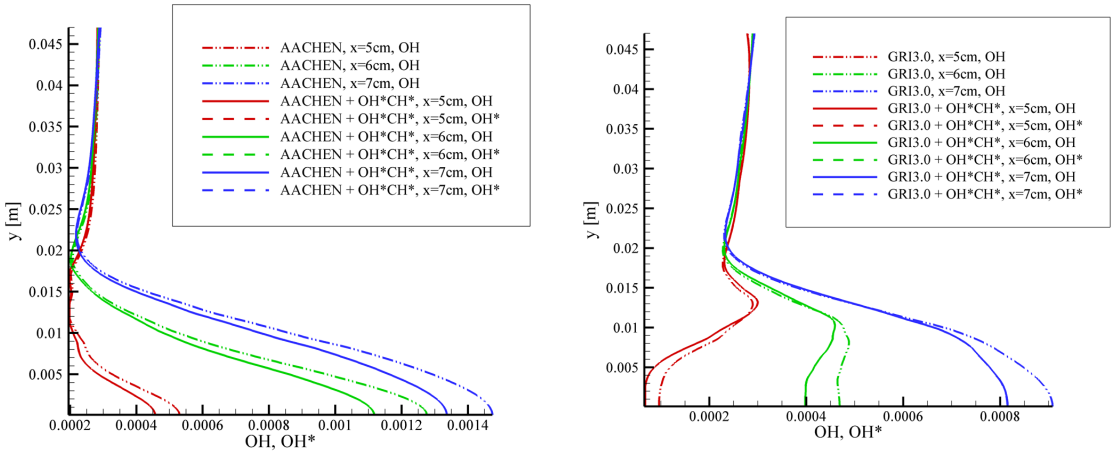


Abbildung 4.8: Vergleich der OH und OH* Konzentrationen für (Aachen und Aachen+OH*,CH*) und (GRI3.0, GRI3.0+OH*,CH*) Mechanismen ($p = 3$bar, $T_v = 673$K)

4.4 Einfluss der turbulenten Mischungsbruch-Diffusitivität

Die turbulenten Diffusitivitäten von Mittelwert und Varianz des Mischungsbruchs f aus Gleichungen (2.71) und (2.72) wurden von 0,7 bis 1,0 variiert. In der Abb. 4.9 sind die Temperaturprofile und Isolinien für 50% des Maximums der Reaktionsrate für Simulationen mit zwei turbulenten Schmidt- Zahlen (0,7 und 1,0) des Mischungsbruch dargestellt. Wie in der Abb. 4.9 zu erkennen ist, konnte mit der Änderung der turbulenten Diffusitivität des Mischungsbruchs in diesem Bereich kein Einfluss auf die Abhebehöhe beobachtet werden.

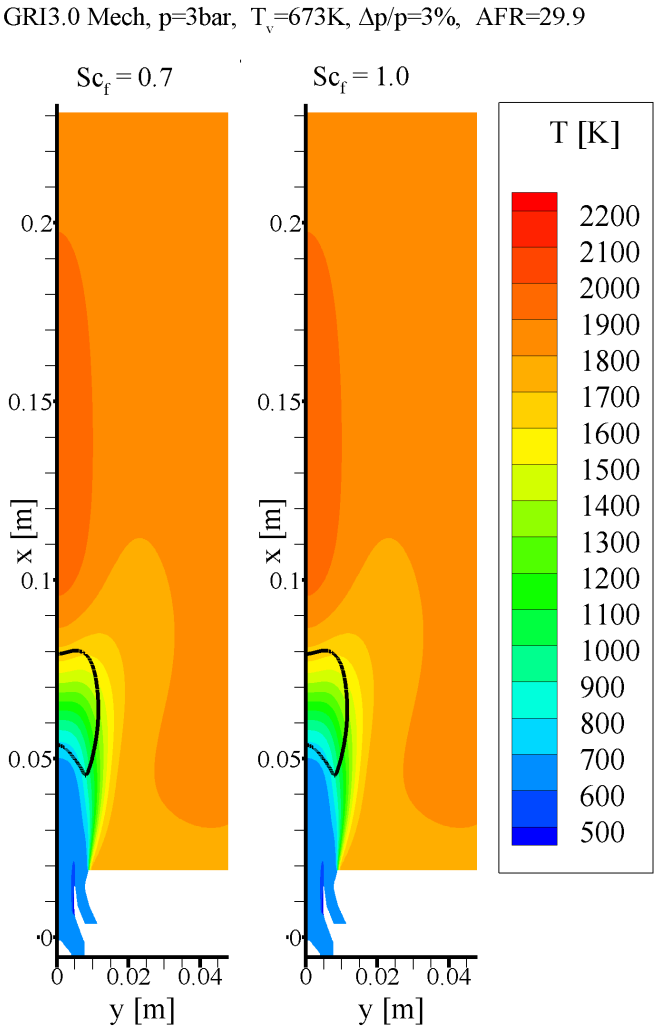


Abbildung 4.9: Einfluss der turbulenten Mischungsbruch-Diffusitivität auf das Brennverhalten

4.5 Abhängigkeit der Abhebehöhe von Betriebsparametern

4.5.1 Variation von Betriebsdruck

In der Abb. 4.10 sind Temperaturprofile und Isolinien für 50% des Maximums der Reaktionsrate einiger Simulationen für Methanverbrennung, bei Drücken von 3 bis 6 bar, dargestellt. Die Simulationen wurden im mageren Bereich mit dem Luft/Brennstoff Verhältnis von AFR=29,9, auf Basis von GRI3.0 Reaktionskinetik durchgeführt.
Die Abb. 4.11 zeigt Temperaturprofile und Isolinien für 50% des Maximums der Reaktionsrate einer Kerosinverbrennung auf Basis vom detaillierten Aachen-Mechanismus für die Drücke 3 bis 5 bar. Die Luftvorwärmtemperatur und Luft/Brennstoff Verhältnis betrugen bei Aachen-Simulationen in 4.11 jeweils $T_v = 473K$, AFR=27,8.
Die Rechnungen wurden durchgeführt unter Annahme eines konstanten Druckverlusts von $\Delta p/p = 3\%$.

Aus Ergebnissen der Variationen von Betriebsdruck geht hervor, dass sich die Reaktionszone mit steigendem Druck in Richtung des Düsenaustritts, stromauf verlagert. In dieser Richtung wird die Turbulenzintensität auch größer. In der Abb. 4.10 ist die leicht negative Abhängigkeit der Abhebehöhe mit steigendem Druck zu erkennen. Die Verlagerung der Abhebehöhe mit Drucksteigerung stromauf deutet auf eine Steigerung der Brenngeschwindigkeit hin. Da die betrachtete Strömung turbulent ist, wird der Einfluss des Drucks auf die turbulente Brenngeschwindigkeit näher diskutiert.

Nach Damköhler beeinflusst die Turbulenz den Transport zwischen der Reaktionszone und dem unverbrannten Gas. Er stellte eine Analogie zur laminaren Brenngeschwindigkeit her und schlussfolgerte dass: $s_T \sim (\frac{\mathcal{D}_t}{tc})^{\frac{1}{2}}$, wobei t_c die Zeitskala der chemischen Kinetik und $\mathcal{D}_t$ die turbulente Diffusion darstellt. Daraus ergibt sich das Verhältnis der turbulenten zur laminaren Brenngeschwindigkeit zu:

$$\frac{s_T}{s_L} \sim (\frac{\mathcal{D}_t}{\mathcal{D}})^{\frac{1}{2}} \tag{4.1}$$

Da die turbulente Diffusitivität proportional zum Produkt $u'L_t$ und die laminare Diffusitivität proportional zum Produkt aus laminaren Brenngeschwindigkeit und Flammendicke δ ist, ergibt sich

$$\frac{s_T}{s_L} \sim (\frac{u'}{s_L}\frac{L_t}{\delta})^{1/2} = (\frac{\nu_t}{\nu})^{1/2} = \sqrt{Re_t} \tag{4.2}$$

Eine Approximation für die laminare Brenngeschwindigkeit im Falle der stöchiometrischen Methan-Luft Gemische kann in [BC08] gefunden werden. Die beträgt $s_L[\frac{cm}{s}] = 43(p[atm])^{-0.5}$, d.h $s_L \sim \frac{1}{\sqrt{p}}$

Im Falle der betrachteten Simulationen können wegen konstanter Austrittsgeschwindigkeit, die Geschwindigkeitsfluktationen u' als konstant angesehen werden. Der Grund dafür ist, dass die Simulationen unter Annahme eines konstanten Druckverlustes durchgeführt

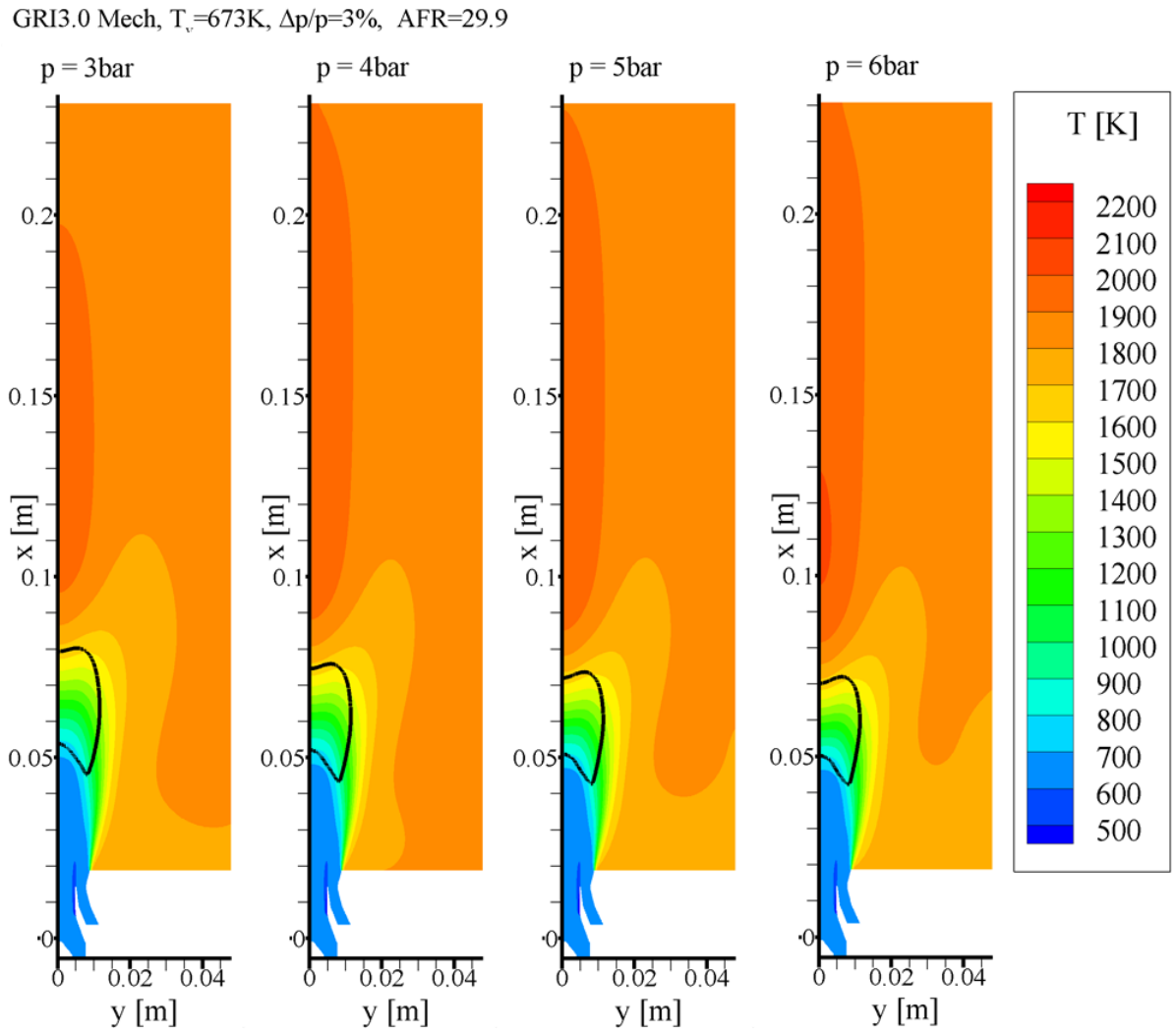


Abbildung 4.10: Druckabhängigkeit der Abhebehöhe beim GRI3.0-Mechanismus

wurden, wodurch sich konstante Luftmassenströme und Austrittsgeschwindigkeiten ergeben. Da aber die Geschwindigkeitsfluktationen u' direkt von der Strömungsgeschwindigkeit abhängen, können bei Druckvariationen die turbulenten Schwankungen als konstant angesehen werden. Im Falle eines homogenen Reaktors ($Da << 1$) gilt [Zar10]:

$$\frac{s_T}{s_L} = 1 + \sqrt{Re_t} \tag{4.3}$$

Für $Re_t >> 1$ ergibt sich die Gleichung (4.2).

Da aber bekannterweise die kinematische Viskosität bei Gasen mit steigendem Druck abnimmt, beeinflusst somit eine Drucksteigerung auch die Steigerung der turbulenten Reynoldszahl. Die Drucksteigerung hat aber auch Einfluss auf die laminare Brenngeschwindigkeit, die mit steigendem Druck abnimmt und hat somit in Gl (4.3) ein Gegeneffekt auf die Zunahme der turbulenten Brenngeschwindigkeit.

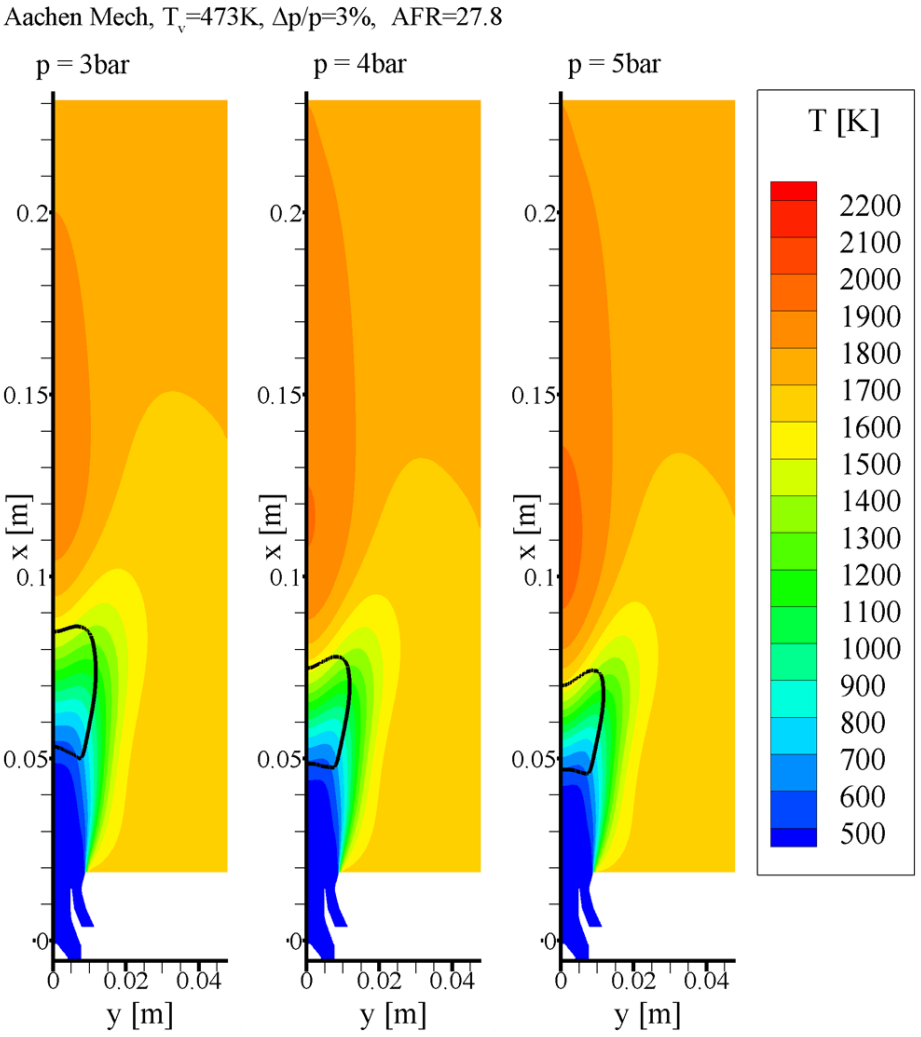


Abbildung 4.11: Druckabhängigkeit der Abhebehöhe beim Aachen-Mechanismus

4.5.2 Variation der Luftvorwärmtemperatur

In der Abb. 4.12 sind Temperaturprofile und die Isolinien für 50% des Maximums der Reaktionsrate einiger Simulationen für Methanverbrennung bei Luftvorwärmtemperaturen von 473K bis 773K dargestellt. Die Simulationen wurden durchgeführt im überstöchiometrischen Bereich mit dem Verhältnis Luft/Brennstoff AFR=29,9 und dem Druck 3bar auf Basis der GRI3.0 Reaktionskinetik.
Die Abb. 4.11 zeigt Temperaturprofile und die Isolinien für 50% des Maximums der Reaktionsrate einer Kerosinverbrennung auf Basis vom detaillierten Aachen-Mechanismums für Variationen der Luftvorwärmtemperatur von 473K bis 873K . Der Druck und das Verhältnis Luft/Brennstoff betrugen bei Aachen-Simulationen in Abb. 4.13 jeweils $p = 3bar$, AFR=27,8.
Durch Erhöhung der Lufteintrittstemperatur nimmt auch die Abgastemperatur zu. Nach Arrhenius Gleichung (3.2) steigt die Reaktionsgeschwindigkeit mit steigender Temperatur proportional zu $exp(-\frac{1}{T})$. Die experimentellen Ergebnisse von [MK80], [vA11] zeigen auch, dass die laminare Flamemngeschwindigkeit mit steigender Vorwärmtemperatur zunimmt. Die Zunahme der laminaren Flammengeschwindigkeit führt im Falle turbulenter Verbrennungen auch zur Steigerung der turbulenten Flammengeschwindigkeit, was unter Annahme einer konstanten Strömungsgeschwindigkeit bedeuten würde, dass die Abhebehöhe mit steigender Eintrittstemperatur der Frischluft abnehmen muss.

Die Verlagerung der Reaktionszone mit steigender Temperatur stromab und Abnahme der Abhebehöhe, ist bei den durchgeführten numerischen Simulationen in den Abbildungen 4.12 und 4.13 dargestellt.

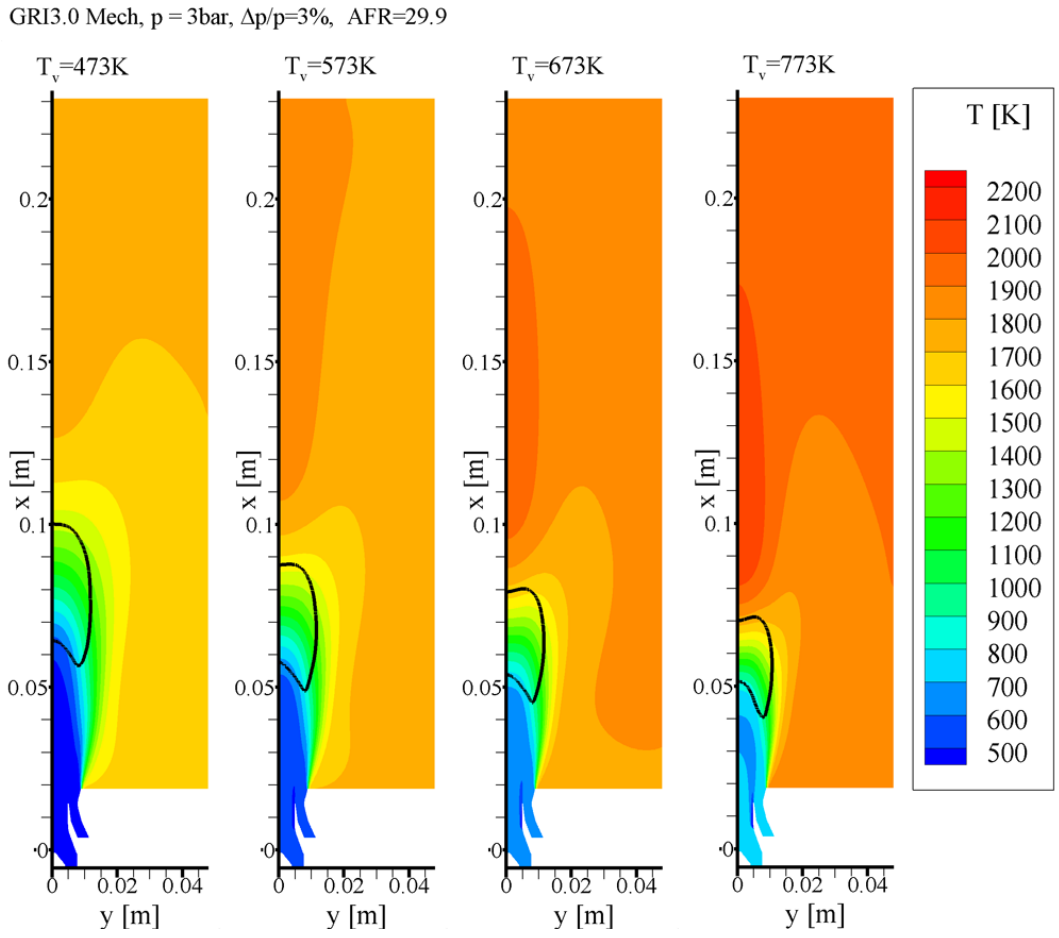


Abbildung 4.12: Temperaturabhängigkeit der Abhebehöhe beim GRI3.0-Mechanismus

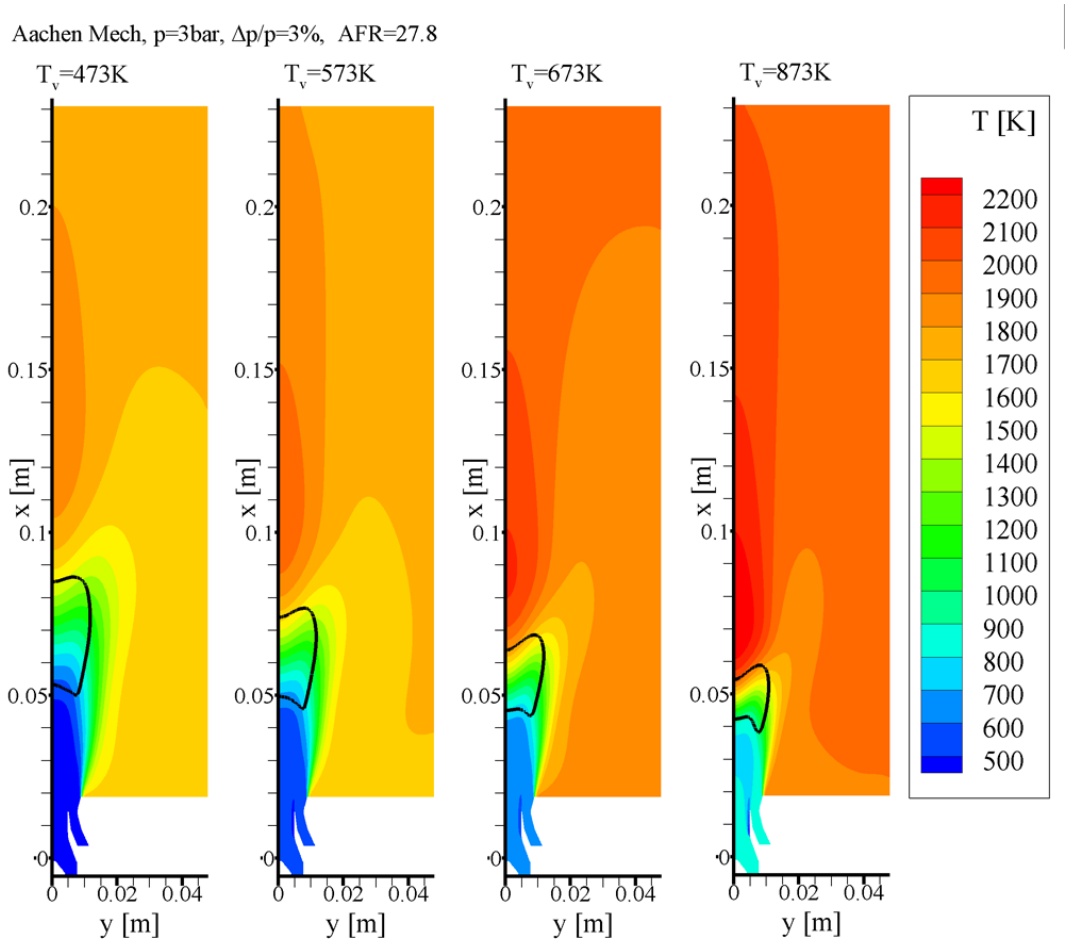


Abbildung 4.13: Temperaturabhängigkeit der Abhebehöhe beim Aachen-Mechanismus

4.5.3 Variation der Gemischzusammensetzung

Beim Erhöhen der Luftzahl im mageren Bereich nimmt die laminare Flammengeschwindigkeit ab, wie aus der experimentellen Studie von Liao und Jiang [LJC03] für Methan in der Abb. 4.14 dargestellt ist. Dabei ist die laminare Flammengeschwindigkeit gegen die Luftzahl aufgetragen.
Zum Vergleich ist in der Abb. 4.15 nach [HSNP09] experimentell bestimmte laminare Flammengeschwindigkeit von Kerosin gegen die Luftzahl aufgetragen. Auch im Falle von Kerosinverbrennung im mageren Bereich ist die negative Abhängigkeit der laminaren Flammengeschwindigket mit steigender Luftzahl zu erkennen.

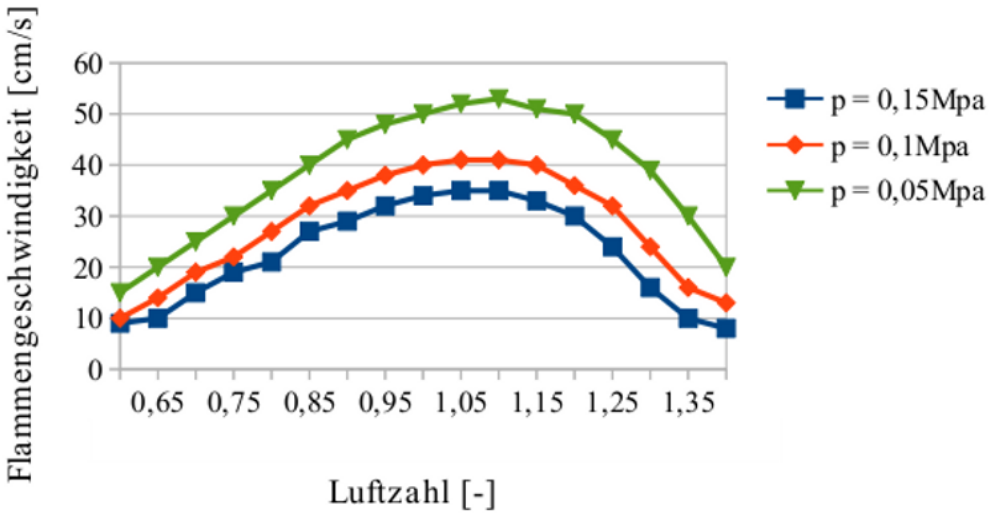


Abbildung 4.14: Laminare Flammengeschwindigkeit für Methan gegen die Luftzahl nach [LJC03] (T=300K).

In der Abb. 4.16 sind Temperaturprofile und Isolinien für 50% des Maximums der Reaktionsrate bei Simulationen für Methanverbrennung und Luft/Methan Verhältnisse von 18,8, 23,7 und 29,9 dargestellt. Der Druck beträgt $p = 3bar$ und die Luftvorwärmtemperatur $T_v = 473K$. Der Druckverlust wurde bei den Rechnungen als konstant angenommen und beträgt $\Delta p/p = 3\%$. Die unterschiedlichen Luft/Brennstoff Zahlen wurden durch die Anpassung des Brennstoffdurchsatzes an konstanten Luftstrom erreicht.

Die Abbildung 4.16 zeigt deutlich, dass eine Vergrößerung des Luft/Brennstoff Verhältnisses zur Verlagerung der Hauptreaktionszone stromab und Zunahme der Abhebehöhe führt. Da der Brennstoffdurchsatz im Vergleich zum Massenstrom der Luft viel kleiner ist, kann die Austrittsgeschwindigkeit der Gasströmung aus der Düse als konstant angenommen werden. Wie schon erwähnt, wird die Lage der Reaktionszone durch die Strömungs- und turbulenten Brenngeschwindigkeit bestimmt, die mit der laminaren Brenngeschwindigkeit eng verknüpft ist.
Durch gleiche Schlussfolgerung wie bei Variation der Luftvorwärmetemperatur ist zu erwarten, dass die turbulente Flammengeschwindigkeit mit Zunahme vom Luft/Brennstoff Verhältnis bzw. Luftzahl - abnimmt und die Abhebehöhe entprechend zunimmt.

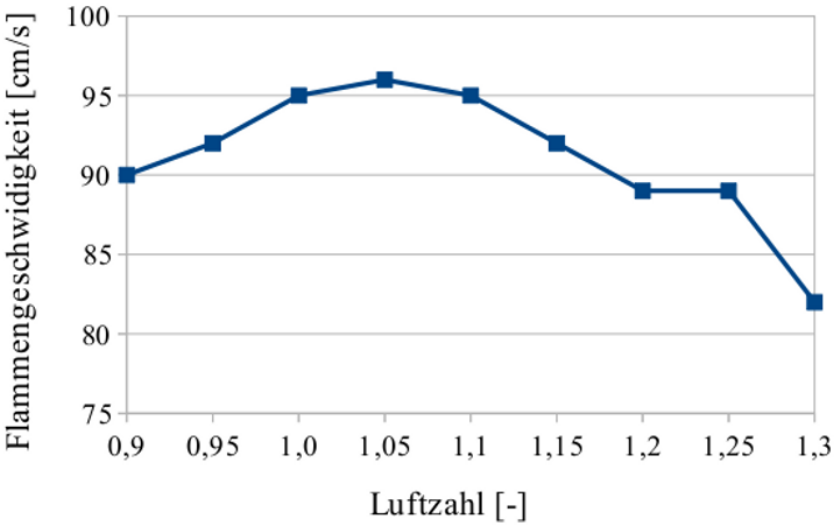


Abbildung 4.15: Laminare Flammengeschwindigkeit für Kerosin gegen die Luftzahl nach [HSNP09] (T=473K).

Die Simulationen in der Abb. 4.16 bestätigen diese Tendenz.

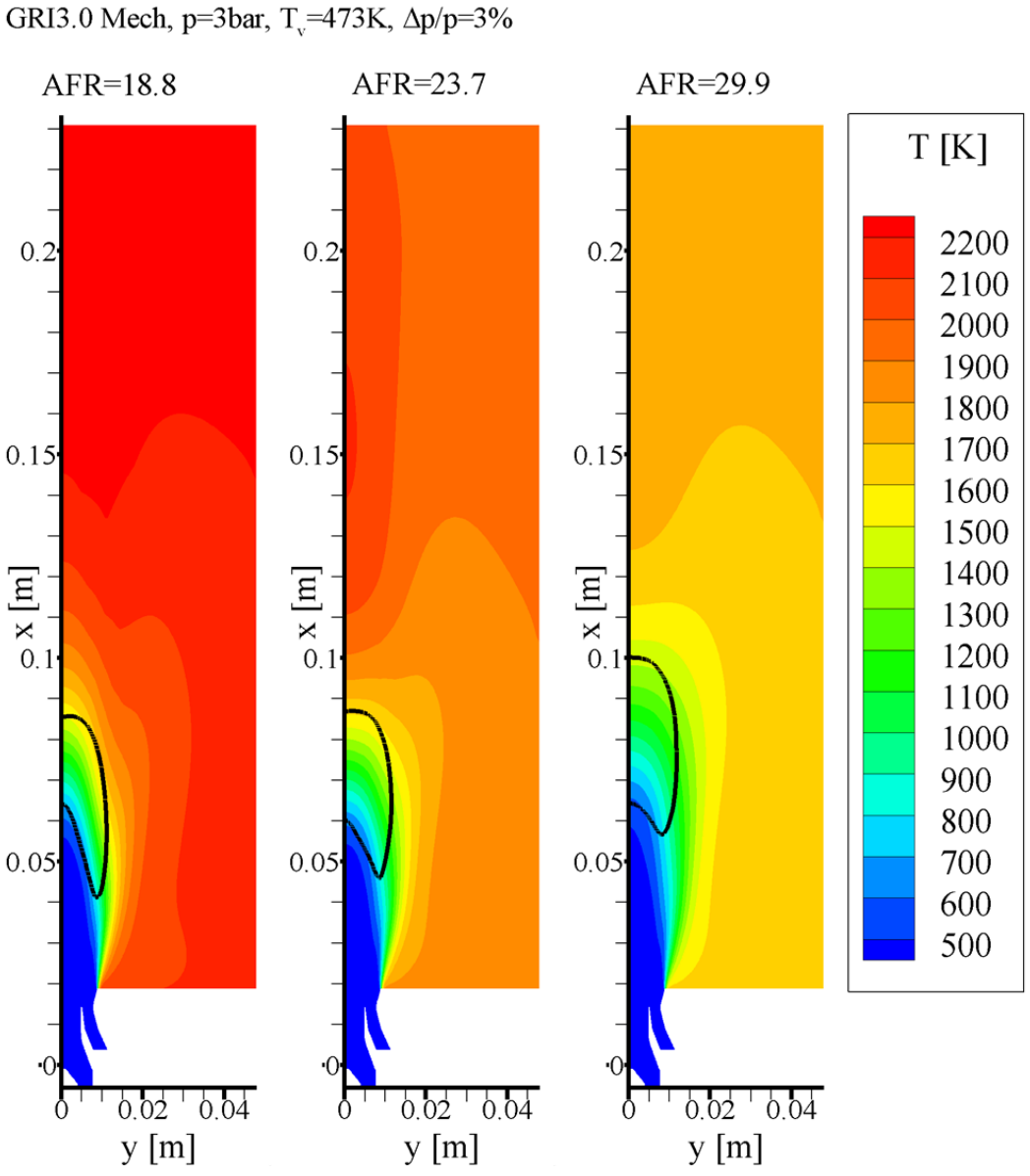


Abbildung 4.16: Abhängigkeit der Abhebehöhe vom Luft/Brennstoff Verhältnis

4.5.4 Variation vom Druckverlust über die Düse

Die Änderung vom Druckverlust bewirkt eine Änderung der Austrittsgeschwindigkeit der Gasströmung aus der Düse, welche durch die Gasdynamische Gleichung für eine reibungsbehaftete Strömung eines idealen Gases aus dem Behälter ausgedrückt werden kann:

$$U = \sqrt{\frac{2\kappa}{\kappa - 1}[1 - \frac{p}{p_0}^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}]T_0 R} \tag{4.4}$$

Dabei sind p_0 und p der Druck vor- und nach der Düse.

Bei der numerischen Simulationen im Rahmen dieser Arbeit, ergibt sich die Austrittsgeschwindigkeit aus dem Massenstrom der Luft, der wiederum durch den einzustellenden Druckverlust berechnet wird nach Gl. (3.12).

In beiden Fällen nimmt die Strömungsgeschwindigkeit mit steigendem Druckverlust zu. Wegen der Querschnittserweiterung verringert sich die Strömungsgeschwindigkeit stromab. Durch die zunehmende Austrittsgeschwindigkeit stabilisiert sich die Flamme weiter stromab in Bereichen niedrigerer Strömungsgeschwindigkeit bis sie die Brenngeschwindigkeit erreicht.
Außer dem Einfluss auf die Austrittsgeschwindigkeit wirkt sich der Druckverlust indirekt über die Austrittsgeschwindigkeit auch auf die turbulente Brenngeschwindigkeit. Die turbulente Geschwindigkeitsfluktation u' nimmt mit der Strömungsgeschwindigkeit u zu $u' \sim u$. Deswegen bewirkt der höhere Druckverlust über die zunehmende Austrittsgeschwindigkeit auch höhere turbulente Schwankungen, die nach Gleichung(4.2) auch eine höhere turbulente Brenngeschwindigkeit verursachen. Durch diesen Effekt wird der Einfluss der Austrittsgeschwindiget auf die Abhebehöhe verringert.
In der Abb. 4.17 sind die Profile der Strömungsgeschwindigkeit und der turbulenten kinetischen Energie k bei verschiedenen Druckverlusten dargestellt. Der Vergleich wurde an drei axialen Positionen in der Strömungsrichtung durchgeführt. Durch Steigerung vom Druckverlust nehmen sowohl die Strömungsgeschwindigkeit sowie die turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen zu.

In der Abb. 4.18 sind Temperaturprofile und Isolinien für 50 % des Maximums der Reaktionsrate bei Simulationen für Methanverbrennung für Druckverluste von 1%, 2% und 3% dargestellt. Der Betriebsdruck beträgt $p = 3bar$ und die Luftvorwärmtemperatur $T_v = 473K$. Dabei wird deutlich erkennbar, dass bei der Zunahme vom Druckverlust über die Düse, die Abhebehöhe fast linear zunimmt.

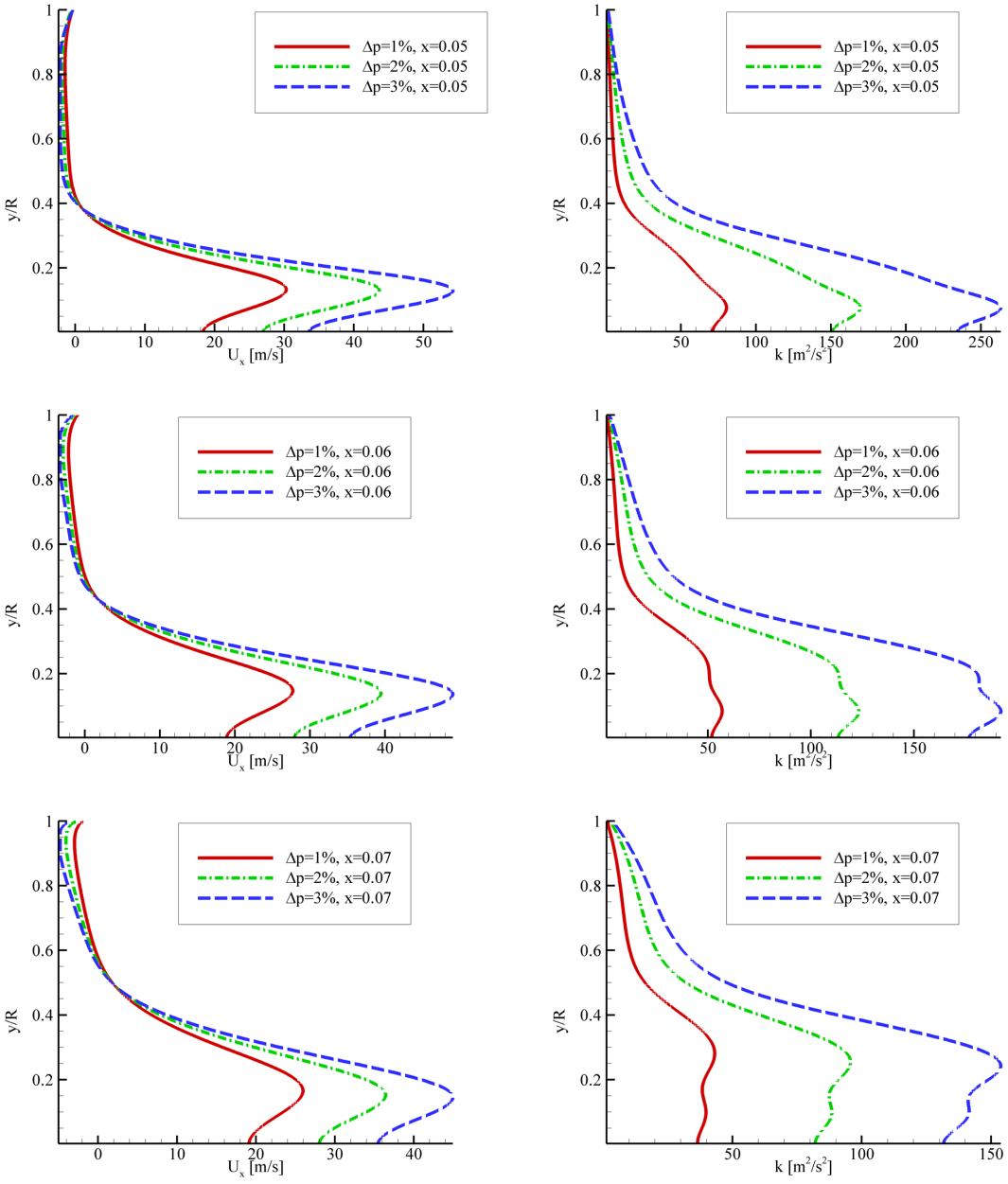


Abbildung 4.17: Radialer Verlauf der axialen Geschwindigkeit und turbulenten kinetischen Energie an drei verschiedenen x Stellen in der Strömungsrichtung für die Druckverluste von 1%, 2% und 3%

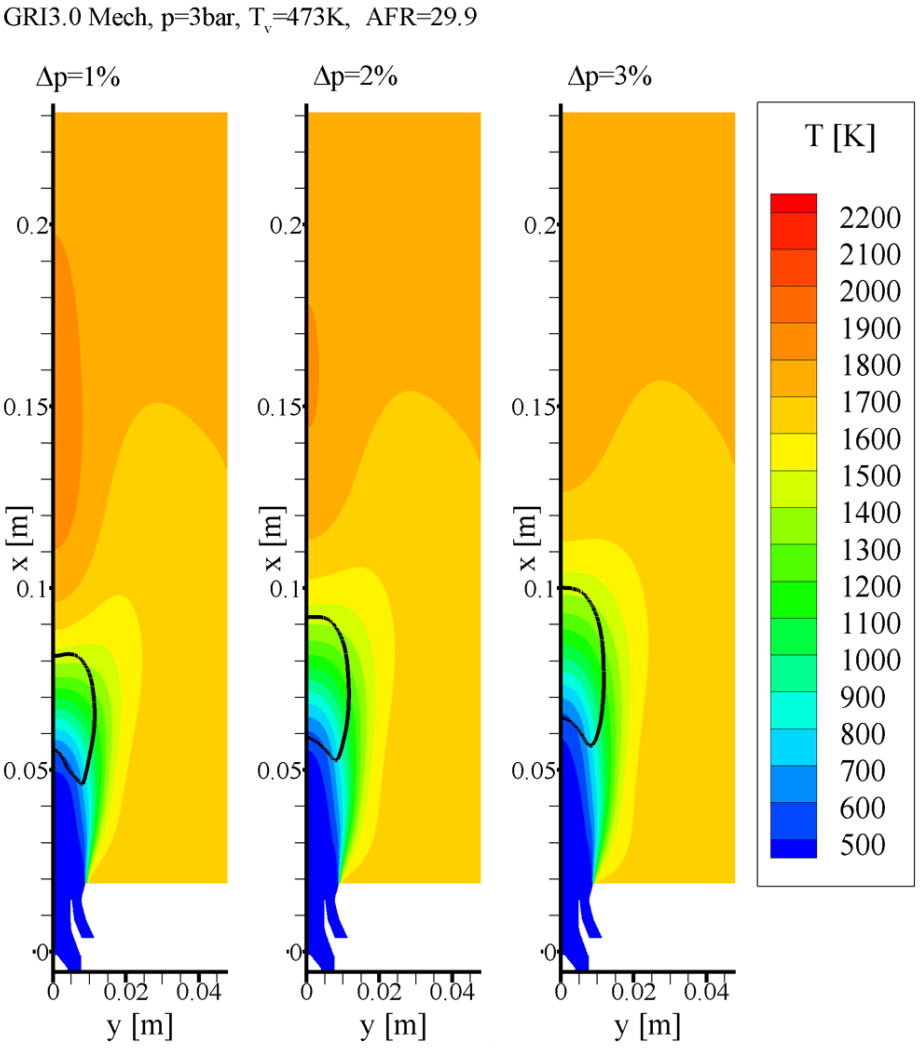


Abbildung 4.18: Abhängigkeit der Abhebehöhe vom Druckverlust

5. Zusammenfassung

Im Rahmen der Arbeit wurde die verdrallte dreidimensionale turbulente Verbrennung anhand der 2D Geometrie mit periodischen Randbedingungen numerisch untersucht. Die Randbedingungen der Verbrennungssimulationen wurden anhand der isothermen Vorberechnungen bestimmt. Dazu wurden die Feldgrößen des isothermen Strömungsfeldes der 2D- und 3D- Gitter für verschiedene Randbedingungen miteinander verglichen. Durch das am besten übereinstimmende Strömungsfeld wurden die Randgrößen festgelegt.
Für die Simulationen turbulenter Strömungen mit überlagerter Verbrennung wurde das statistische Reaktionsmodell mit Verbundswahrscheinlichkeitsdichtefunktion JPDF (joint probability density function) verwendet. Als unabhängige statistische Variablen wurden dabei die Definitionen von Mischungsbruch und Reaktionsfortschritt verwendet.
Es wurde im Rahmen der Arbeit der Einfluss verschiedener JPDF-Tabellierungsmethoden getestet. Die getesteten HRCT und PREMIX-Tabellierungen anhand des Franzelli Mechanismus zeigten eine ähnliche aber nicht gleiche Flammenstruktur. Die PREMIX Simulation ergab eine niedrigere Abhebehöhe und schmalere Flamme.
Die Simulationen mit verschiedenen Definitionen von Reaktionsfortschrittsvariable c anhand vom GRI3.0 Reaktionsmechanismus haben im Falle der Definition nach Gl. 2.65, eine höhere Abhebehöhe gezeigt.
Für Kerosinverbrennung wurden die Reaktionsmechanismen Aachen, Franzelli und Westbrook miteinander verglichen. Im Falle der Simulation mit dem Westbrook-Mechanismus konnte beim gewählten Betriebspunkt kein Abheben beobachtet werden. Die Franzelli Simulation ergab im Vergleich zu Aachen eine niedrigere Abhebehöhe.
Es wurde ebenfalls versucht die GRI3.0- und Aachen Mechanismen durch zusätzliche Reaktionen für OH* und CH* Spezies zu erweitern, um eine Abhebehöhe durch OH* Konzentration zu bestimmen. Bei den Simulationen konnten jedoch die OH und OH* Spezies voneinander nicht unterschieden werden.
Die Druck- und Temperaturvariationen ergaben sowohl bei Methan als auch bei der Kerosinsimulationen eine negative Abhängigkeit der Abhebehöhe. Durch die Steigerung des Luft/Brennstoff Verhältnisses und des Druckverlustes konnte eine positive Abhängigkeit der Abhebehöhe festgestellt werden.

Abbildungsverzeichnis

2.1 Schematische Darstellung der laminaren und turbulenten Strömung 7
2.2 Vortex-Breakdown, Potential- und Starrkörperwirbel nach [Zar09] 10
2.3 Schematische Darstellung des Vortex-Breakdown nach [Mai67] 10
2.4 Struktur einer mageren CH_4/Luft Flamme. Profile der Temperatur und der stabilen Zwischenprodukte und Endprodukte. [Hof04] 11
2.5 Schematische Darstellung einer abgehobenen Diffusionsflamme [Pet04] . . . 12
2.6 Flammenstabilität nach [Zar10] 13
2.7 Borghi Diagramm 14
2.8 Schematische Darstellung des Verlaufs einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion [Hof04] 21

3.1 Gasdüse ohne Brennkammer in Echt- und Explosionsdarstellung 27
3.2 6 Grad Geometrie 28
3.3 Radialer Verlauf der axialen Geschwindigkeitskomponenten u_x für 3D und 2D Gitter im Abstand 1.8cm vom Düsenaustritt bei verschiedenen Randbedingungen 34
3.4 Radialer Verlauf der Geschwindigkeitskomponenten u_y für 3D und 2D Gitter im Abstand 1.8cm vom Düsenaustritt bei verschiedenen Randbedingungen . 34
3.5 Radialer Verlauf der turbulenten kinetischen Energien für 3D und 2D Gitter im Abstand 1.8cm vom Düsenaustritt bei verschiedenen Randbedingungen . 35
3.6 Radialer Verlauf der axialen Geschwindigkeitskomponenten u_x für 3D und 2D Gitter im Abstand 2cm und 3cm vom Düsenaustritt beim ausgewählten Betriebspunkt im Falle einer isothermen Strömung ($p = 3bar$, $T = 673K$, $\Delta p/p = 3\%$). 35
3.7 Radialer Verlauf der turbulenten kinetischen Energien für 3D und 2D Gitter im Abstand 2cm und 3cm vom Düsenaustritt beim ausgewählten Betriebspunkt im Falle einer isothermen Strömung ($p = 3bar$, $T = 673K$, $\Delta p/p = 3\%$). 36
3.8 Vergleich der turbulenten kinetischen Energien einer isothermen Strömung für das große 3D und vereinfachte 6 Grad Gitter ($p = 3bar$, $T = 673K$, $k-\omega-$SST Turbulenzmodell) 36
3.9 Vergleich der axialen Geschwindigkeiten einer isothermen Strömung für das große 3D und vereinfachte 6 Grad Gitter. ($p = 3bar$, $T = 673K$, $k-\omega-$SST Turbulenzmodell) 37

3.10 Schematische Darstellung der Erstellung von JPDF-lookup Tabellen und Anbindung an CFD Code 38

4.1 Vergleich der erstellten chemischen Tabellen bei HRCT- und PREMIX-Tabellierungen (Franzelli-Mech, $p = 3bar$, $T = 673K$) 41
4.2 Vergleich der HRCT- und PREMIX-Tabellierung 42
4.3 Vergleich von Temperaturprofilen der chemischen Tabellen für zwei verschiedene Definitionen der Reaktionsfortschrittsvariable nach Gl. (2.64) und (2.65) (GRI3.0 Mech, $p = 3bar$, $T_v = 673K$). 43
4.4 Simulationen mit zwei Definitionen der Reaktionsfortschrittsvariable nach Gl. (2.64) und (2.65). 44
4.5 Vergleich von Temperaturprofilen der chemischen Tabellen für Aachen-, Franzelli- und Westbrook-Mechanismus 46
4.6 Vergleich von Aachen- , Franzelli- und Westbrook-Mechanismus 46
4.7 Einfluß neuer Reaktionen für CH* und OH* auf die GRI3.0 und Aachen Mechanismen 47
4.8 Vergleich der OH und OH* Konzentrationen für (Aachen und Aachen+OH*,CH*) und (GRI3.0, GRI3.0+OH*,CH*) Mechanismen ($p = 3$bar, $T_v = 673$K) . . . 48
4.9 Einfluss der turbulenten Mischungsbruch-Diffusitivität auf das Brennverhalten 49
4.10 Druckabhängigkeit der Abhebehöhe beim GRI3.0-Mechanismus 51
4.11 Druckabhängigkeit der Abhebehöhe beim Aachen-Mechanismus 52
4.12 Temperaturabhängigkeit der Abhebehöhe beim GRI3.0-Mechanismus 54
4.13 Temperaturabhängigkeit der Abhebehöhe beim Aachen-Mechanismus 55
4.14 Laminare Flammengeschwindigkeit für Methan gegen die Luftzahl nach [LJC03] (T=300K). 56
4.15 Laminare Flammengeschwindigkeit für Kerosin gegen die Luftzahl nach [HSNP09] (T=473K). 57
4.16 Abhängigkeit der Abhebehöhe vom Luft/Brennstoff Verhältnis 58
4.17 Radialer Verlauf der axialen Geschwindigkeit und turbulenten kinetischen Energie an drei verschiedenen x Stellen in der Strömungsrichtung für die Druckverluste von 1%, 2% und 3% 60
4.18 Abhängigkeit der Abhebehöhe vom Druckverlust 61

Literaturverzeichnis

[AAP97] J. C. Annehill, D. A. Anderson, and R. H. Pletcher, *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Taylor&Francis, 1997.

[ANS09] *User Manual*, ANSYS, 2009.

[BC08] J. Buffam and K. Cox, "Measurement of Laminar Burning Velocity of Methan-Air Mixtures," Worcester Polytechnic Institute, 2008.

[Bor88] R. Borghi, "Turbulent Combustion Modelling," 1988, Energy and Combustion Science.

[FP02] J. H. Ferziger and M. Peric, *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag, 2002.

[FRSP10] B. Franzelli, E. Riber, M. Sanjose, and T. Poinsot, "A two-step chemical scheme for kerosene-air premixed flames," 2010.

[gri] "GRI-Mech 3.0, The Gas Research Institute." [Online]. Available: www.me.berkeley.edu/gri_mech/

[Hof04] A. B. Hoffmann, "Modellierung turbulenter Vormischverbrennung," 2004, Ph.D Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).

[HSNP09] S. Honnet, K. Seshadri, U. Nielmann, and N. Peters, "A surrogate fuel for kerosene," 2009.

[LJC03] S. Liao, D. Jiang, and Q. Cheng, "Determination of laminar burning velocities for natural gas," 2003.

[Mai67] P. Maier, "Untersuchungen turbulenter, isothermer Drallfreistrahlen und turbulenter Drallflammen," 1967, Ph.D Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).

[MK80] M. Metghalchi and J. C. Keck, "Laminar Burning Velocity of Propane-Air Mixtures at High Temperature and Pressure," 1980, Combustion and Flame vol. 38.

[OBR11] H. Oertel, M. Böhle, and T. Reviol, *Strömungsmechanik-Grundlagen, Grundgleichungen, Lösungsmethoden, Softwarebeispiele*. Wiesbaden: Vieweg+Teubner Verlag, 2011.

[Pet04] N. Peters, *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2004.

[vA11] G. von Authoren, “Laminar flame speed measurements and modeling of alkane blends at elevated pressures with various diluents,” 2011.

[WD81] C. K. Westbrook and F. L. Dryer, “Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames,” 1981, Combustion Science and Technology, Vol. 27.

[Wil94] D. C. Wilcox, *Turbulence Modeling for CFD*. California: DCW Industries, 1994.

[WL94] F. Williams and P. Libby, *Turbulent Reacting Flows*. Harcourt Brace & Company, 1994.

[WLTS] K. Walsh, M. Long, M. Tanoff, and M. Smooke, “Experimental and Computational Study of CH, CH* and OH* in an Axisymmetric Laminar Diffusion Flame.”

[Zar09] Zarzalis, N., “Auslegung einer Gasturbinenbrennkammer,” 2009.

[Zar10] ——, “Angewandte Verbrennungstechnik,” 2010.