Elmar Riesmeier

# Numerische Simulation der Verbrennungsprozesse in Gasturbinen- und MILD-Brennkammern





# Numerische Simulation der Verbrennungsprozesse in Gasturbinen- und MILD-Brennkammern

Von der Fakultät für Maschinenwesen der Rheinisch-Westfälischen Technischen Hochschule Aachen zur Erlangung des akademischen Grades eines Doktors der Ingenieurwissenschaften genehmigte Dissertation

vorgelegt von

Diplom-Ingenieur Elmar Riesmeier

aus

## Lippstadt

Berichter: Universitäts-Professor Dr.-Ing. Dr. h. c. Dr.-Ing. E. h. N. Peters Universitäts-Professor Dr.-Ing. U. Renz

Tag der mündlichen Prüfung: 13. Juli 2004

D 82 (Diss. RWTH Aachen)

### **Bibliografische Information Der Deutschen Bibliothek**

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <u>http://dnb.ddb.de</u> abrufbar.

1. Aufl. - Göttingen : Cuvillier, 2004 Zugl.: (TH) Aachen, Univ., Diss., 2004 ISBN 3-86537-239-2

 CUVILLIER VERLAG, Göttingen 2004 Nonnenstieg 8, 37075 Göttingen Telefon: 0551-54724-0 Telefax: 0551-54724-21 www.cuvillier.de

Alle Rechte vorbehalten. Ohne ausdrückliche Genehmigung des Verlages ist es nicht gestattet, das Buch oder Teile daraus auf fotomechanischem Weg (Fotokopie, Mikrokopie) zu vervielfältigen. 1. Auflage, 2004 Gedruckt auf säurefreiem Papier

ISBN 3-86537-239-2

## Vorwort

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Mechanik der Rheinisch Westfälischen Technischen Hochschule Aachen.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr.-Ing. Dr. h. c. Dr.-Ing. E. h. N. Peters, der diese Arbeit ermöglicht und durch zahlreiche Ideen und Ratschläge dazu beigetragen hat. Herrn Prof. Dr.-Ing. U. Renz danke ich für sein Interesse an dieser Arbeit und seine Tätigkeit als weiterer Berichter. Herrn Prof. Dr.-Ing. Klaus Lucas danke ich für die Übernahme des Vorsitzes der Prüfungskommmission.

Weiterhin möchte ich allen jetzigen und ehemaligen Mitarbeitern des Instituts für Technische Mechanik danken, die mich bei der Durchführung dieser Arbeit unterstützt haben. Heinz Pitsch danke ich für die detaillierte Einführung in die Flamelet-Theorie und die fortwährende Unterstützung. Carl Hergart und Hardo Barths gilt mein besonderer Dank für die Bereitschaft zu fachlichen Diskussionen und Anregungen.

Hervorheben möchte ich die mir entgegen gebrachte außerordentliche Unterstützung durch Christian Hasse und Günter Paczko, die mir mit ihrem reichen Erfahrungsschatz, ihrer Zusammenarbeit und ihre Kollegialität sehr geholfen haben.

Die enge Zusammenarbeit auf dem Gebiet der MILD Combustion mit Dr. Bassam Dally von der University of Adelaide hat wesentlich zu dieser Arbeit beigetragen. Auch die Unterstützung durch Leif Rackwitz und Ruud Eggels von Rolls Royce Deutschland war mir eine große Hilfe.

Ein besonderer Dank gilt meiner Familie für die geduldige Unterstützung, auf die ich mich stets verlassen konnte.

Aachen, im August 2004

Elmar Riesmeier

Meinen Eltern

# Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung				
2 Mathematische Modelle					
	2.1	Erhaltu	Ingsgleichungen	7	
	2.2 Turbulenzmodellierung			10	
		2.2.1	Mittelwerte in turbulenten Strömungen	12	
		2.2.2	Turbulenzmodelle	14	
	2.3 Laminare Flamelets		are Flamelets	16	
		2.3.1	Definition des Mischungsbruchs	17	
		2.3.2	Flamelet-Gleichungen	19	
		2.3.3	Flamelet-Parameter	22	
	2.4 Das Representative Interactive Flamelet (RIF) Modell				
		2.4.1	Presumed Shape Pdf Ansatz	25	
		2.4.2	Zeitliche Änderung der Flamelet-Parameter	27	
3	Nun	nerische	e Implementation	29	
3.1 CFD-Code		CFD-C	Code	29	
		3.1.1	Pdf-Mischungsbruch-Ansatz	30	
		3.1.2	Burke-Schumann Lösung	31	
		3.1.3	Chemisches Gleichgewicht	32	
	3.2 Kopplung des CFD- und des RIF-Codes		ung des CFD- und des RIF-Codes	33	
		3.2.1	Bereitstellung der Flamelet-Parameter	35	
	3.3	Wandv	värmeverluste	37	

	3.4	1    Das Eulerian Particle Flamelet Modell					
		3.4.1	Flamelet-Initialisierung	43			
		3.4.2	Zeitliche Entwicklung der Flameletparameter	43			
		3.4.3	Zeitliche Entwicklung der Flamelet-Profile	45			
4	Che	mische	Mechanismen	51			
	4.1	$C_1 - C_4$	-Kinetik	51			
	4.2	Kerosin-Modellbrennstoff					
	4.3	NO <sub>x</sub> -N	NO <sub>x</sub> -Modell				
	4.4	Rußmo	odell	58			
		4.4.1	Benzolbildung	59			
		4.4.2	PAH-Wachstum	60			
		4.4.3	Bildung, Wachstum und Oxidation von Rußpartikeln	60			
5	Gast	turbine	n-Brennkammer	65			
	5.1	Experi	menteller Aufbau	66			
	5.2	Gitter für die Gasturbinen-Brennkammer					
	5.3	Ergebnisse für die Gasturbinen-Brennkammer					
		5.3.1	Temperaturverteilungen und Stickoxide	75			
		5.3.2	Rußemissionen	76			
		5.3.3	Vergleich zu experimentellen Daten	77			
		5.3.4	Strahlungseinfluss	80			
6	MIL	D-Bren	inkammer	83			
	6.1	Experimenteller Aufbau					
	6.2	Gitter der MILD-Brennkammer					
	6.3	Ergebnisse für die MILD-Brennkammer					
		6.3.1	Strömungsfeld	89			
		6.3.2	Einfluss der skalaren Dissipationsrate	90			
		6.3.3	Axiale Temperaturprofile	96			
		6.3.4	Temperatur und Stickoxide	97			

7	Zusammenfassung	105
Li	iteratur	108
A	Symbolverzeichnis	119

# Kapitel 1

## Einleitung

In der Entwicklung unserer technisierten Gesellschaft spielt die individuelle Mobilität eine entscheidende Rolle. Zur Sicherung und Erweiterung der Mobilität ist die Verfügbarkeit und vor allem die effektive Nutzung von Rohstoffen von großter Bedeutung. Sowohl für den Transport von Gütern als auch für den Individualverkehr werden auch bei der Verwendung alternativer Konzepte wie z.B. Brennstoffzellen überwiegend fossile Brennstoffe eingesetzt. Diese im wesentlichen aus Kohlenwasserstoffen bestehenden Brennstoffe werden auch in anderen technischen Anwendungen eingesetzt und sind nach wie vor eine der wichtigsten Quellen für Energiewandlungsprozesse, ohne die der in großen Teilen der Welt erreichte hohe Lebensstandard nicht aufrecht zu erhalten wäre.

Die weltweiten Vorkommen der verschiedenen Brennstoffe werden anhand bekannter Vorkommen und Schätzungen ermittelt und sind abgesehen von nachwachsenden Rohstoffen limitiert. Durch Umweltschutzgesetze wie das Bundesimissionsschutzgesetz und entsprechende EU-Richtlinien werden die Grenzwerte für die bei der Nutzung der Brennstoffe freigesetzten Schadstoff-Emissionen in der Zukunft weiter herabgesetzt. Des weiteren steigen die Kosten für die Bereitstellung der Brennstoffe und die Mineralölsteuern. Daraus ergibt sich die Forderung, die Effizienz der Energiewandlungsmaschinen fortlaufend zu erhöhen sowie zur Einhaltung der restriktiven Normen den Ausstoß an Schadstoffen zu reduzieren.

Bei der vollständigen Verbrennung von reinen Kohlenwasserstoffen entstehen im Idealfall Kohlendioxid und Wasser. Eine wichtige Voraussetzung dafür ist, dass exakt die Mengen an Brennstoff und Oxidator vorliegen, die zur vollständigen Umsetzung benötigt werden. Dies wird auch als stöchiometrisches Verhältnis bezeichnet. Obwohl Kohlendioxid und Wasser ungiftig sind, ist die Reduzierung der Kohlendioxidemissionen im Zuge der Diskussion um den sogenannten Treibhauseffekt und die damit verbundene Zunahme der globalen Erderwärmung ein wichtiges Ziel. Neben fossil gefeuerten Kraftwerken und Hausbrand gehören Verbrennungskraftmaschinen zu den Hauptverursachern von CO<sub>2</sub>-Emissionen. Die Erhöhung des Wirkungsgrades dieser Anlagen ist daher ein wichtiges Ziel bei der Entwicklung neuer Verbrennungskonzepte. Des weiteren entstehen bei der Verbrennung unerwünschte Produkte, die als Schadstoffe identifiziert werden. Neben zusätzlichen Bestandteilen im fossilen Brennstoff wie z.B. Schwefel sind dies im wesentlichen Stickoxide, Ruß und unverbrannte Kohlenwasserstoffe. Die Bildung dieser Schadstoffe hängt maßgeblich von den Bedingungen ab, unter denen die Verbrennung abläuft.

Stickoxide entstehen meist bei hohen Temperaturen in Verbindung mit Luftüberschuss. Sie haben schädliche Auswirkungen in der Atmosphäre, wie z.B. die Bildung von Ozon in der Nähe der Erdoberfläche vor allem in Ballungszentren, die Vergrösserung des Ozonlochs oder sauren Regen. Stickstoffmonoxid ist zudem giftig und sehr reaktiv. Stickoxidemissionen lassen sich unter anderem durch die Verminderung der Brennraumtemperatur (Wassereinspritzung, gekühlte Abgasrückfuhrung), gestufte Verbrennung, möglichst kurze Verweilzeiten der Verbrennungsprodukte in den heißen Regionen der Brennkammer sowie die Vermeidung hoher lokaler Sauerstoff-Konzentrationen z.B. durch Zumischung von Inertgasen im Oxidatorstrom verringern.

In technischen Anwendungen wird die nicht vorgemischte oder diffusive Verbrennung häufig den vorgemischten Brennverfahren vorgezogen, weil sie aus sicherheitstechnischer Sicht einfacher zu handhaben ist [69]. Da sich Brennstoff und Oxidator erst in der Reaktionszone mischen, entstehen durch Inhomogenitäten lokal brennstoffarme und brennstoffreiche Gebiete. Letztere werden auch als fette Gebiete bezeichnet. Diese Gebiete fetter Mischung sind vor allem in der Nähe der Brennstoffzufuhr lokalisiert. Ruß wird in solchen Flammenzonen gebildet, in denen Brennstoffüberschuss vorliegt. Die Rußpartikel entstehen durch die Koagulation polyzyklischer aromatischer Kohlenwasserstoffe (engl. polycyclic aromatic hydrocarbons, PAH). Diese bilden dreidimensionale Strukturen aus, deren Koagulation zur Entstehung erster Rußpartikel führt.

In Gasturbinen-Brennkammern und Dieselmotoren läuft die Verbrennung unter hohen Drücken ab. Mit zunehmendem Druck im Brennraum steigt auch die Rußbildung an [110]. Neben der Auswirkungen auf die Umwelt steht Ruß im Verdacht, Allergien zu verstärken und die Atemwege anzugreifen. Des weiteren gelangen Rußpartikel über die Lunge in den Blutkreislauf und stehen im Verdacht, Krebs auszulösen. Daher sind geeignete Maßnahmen zu treffen, um die Rußbildung gering zu halten und bereits gebildete Rußpartikel durch Oxidation abzubauen.

Trotz der verstärkt eingesetzten Partikelfilter werden nach wie vor Rußpartikel im PKW- und Nutzfahrzeugbereich in großen Mengen freigesetzt. Die Reduzierung der Rußemissionen vor der Filterung erfolgt über eine möglichst große Verweilzeit der Partikel in Zonen hoher Temperatur und Sauerstoffkonzentration. Dies wird durch geeignete Gestaltung der Brennraumgeometrie sowie der Verbrennungsluft- und Brennstoffzufuhr erreicht und führt zu einer Verminderung der bereits gebildeten Rußmenge um mehrere Größenordnungen. Durch ähnliche Maßnahmen lassen sich auch die unverbrannten Kohlenwasserstoffe minimieren, die neben einer Absenkung des Wirkungsgrades aufgrund ihrer vielfältig unterschiedlichen chemischen Eigenschaften ebenfalls als Schadstoffe einzustufen sind.

Die Maßnahmen zur Rußemissionsverminderung und zur Stickoxid-Reduktion lassen sich nur bedingt kombinieren. Die Forderung nach hohen Verweilzeiten der Rußpartikel in Zonen hoher Temperatur und hoher Sauerstoffkonzentration bewirkt beispielsweise gleichzeitig eine erhöhte Stickoxidbildung, während eine Absenkung der Brennraumtemperatur unter Umständen verminderten Rußabbrand und damit höheren Rußausstoß zur Folge hat. Diese vor allem bei der dieselmotorischen Verbrennung beobachtete sogenannte Ruß-NO<sub>x</sub>-Schere stellt eine große Herausforderung bei der Konzipierung des Verbrennungsprozesses dar.

Die Absenkung der Brennraumtemperatur in Gasturbinenbrennkammern und Öfen steht zum Beispiel der Forderung nach einem erhöhten thermischen Wirkungsgrad gegenüber, welcher unter anderem durch starke Verbrennungsluftvorwärmung erreicht wird. Dies bewirkt bei konventionellen Brennerkonzepten in der Regel eine Erhöhung der Stickoxid-Emissionen. Abbildung 1.1 zeigt als Beispiel die Entwicklung der Stickoxide und der Brennkammer-Temperatur als Funktion der Luftvorwärmung für Propan.



Abbildung 1.1: Stickoxide und Brennkammer-Temperatur als Funktion der Luftvorwärm-Temperatur [29]

Choi et al. [21] beobachteten die Reduzierung der Stickoxidemissionen aufgrund niedriger Sauerstoffkonzentration in der Brennkammer sowie verstärkt rückwärts ablaufender Reaktion zum Prompt NO. Al-Halbouni et al. [1] überprüften die Anwendbarkeit eines FLOX<sup>®</sup>-Brenners [109] für die Verbrennung schwachkaloriger Gase in Mikrogasturbinen und konnten so trotz stark vorgewärmter Verbrennungsluft extrem niedrige NO<sub>x</sub>-Emissionen erzielen.

Durch Rückgewinnung der Abgaswärme in nachgeschalteten Wärmeaustauschern ist es möglich, die Verbrennungsluft ohne zusätzlichen Energieaufwand vorzuwärmen [43, 59]. Die in diesem Zusammenhang entwickelten neuen Konzepte zur Verbrennungsführung in sogenannten Moderate or Intense Low oxygen Dilution oder kurz MILD Brennkammern sind Gegenstand verschiedener Arbeiten [20, 30, 31]. Bei diesem Verfahren wird der Oxidatorstrom, in der Regel Luft, mit Inertgas z.B. durch innere Abgasrückführung verdünnt, sodass bei der Verbrennung eine verringerte Sauerstoffkonzentration im Oxidatorstrom vorliegt. Oberlack et al. [74] identifizierten die Damköhler-Zahl als wichtiges Kriterium für MILD Verbrennung und für das Fehlen von Zünd- und Löscherscheinungen. Die geforderten Kriterien für die Stabilität der Verbrennungsprozesse in MILD Brennkammern und die charakteristischen Eigenschaften der Strömungs- und Verbrennungsprozesse werden in dieser Arbeit eingehend betrachtet.

Bei der Untersuchung von Verbrennungsprozessen werden die chemischen Vorgänge der Selbstzündung, des chemischen Umsatzes und damit der Wärmefreisetzung, gegebenenfalls des Verlöschens sowie der Bildung von Schadstoffen betrachtet. Bei der Untersuchung von Verbrennungsprozessen anhand numerischer Simulationsrechnungen werden meist kommerzielle Computational Fluid Dynamics oder kurz CFD-Codes verwendet, in denen in der Regel einfache, halb-empirische Modelle zur Beschreibung dieser chemischen Vorgänge eingesetzt werden. Diese Modelle sind häufig voneinander entkoppelt. Die gebräuchlichsten Verbrennungsmodelle basieren auf der Annahme schneller Chemie. Der chemische Umsatz wird dabei durch die turbulente Mischung bestimmt und beschreibt die Wärmefreisetzung unter der Annahme kompletten chemischen Umsatzes nach  $CO_2$  und  $H_2O$  durch globale Einschrittreaktionen.

Rußbildung und -oxidation werden in der Regel ebenfalls durch vereinfachte Modelle beschrieben, welche beispielsweise die Partikelbildung proportional zum Brennstoffmassenbruch und deren Oxidation proportional zur Konzentration molekularen Sauerstoffs annehmen. In experimentellen Untersuchungen wurde hingegen die Oxidation von Ruß über OH-Radikale identifiziert. Stickoxidbildung wird meist durch Berücksichtigung der thermischen NO-Bildung modelliert. Die Konzentrationen der beteiligten chemischen Komponenten werden aber aus Gleichgewichtsbeziehungen ermittelt, weshalb die berechneten NO<sub>x</sub>-Emissionen meist zu hoch sind. Komplexere NO<sub>x</sub>-Bildungsmechanismen können durch diese stark vereinfachten Modelle nicht beschrieben werden.

Die bei der Simulation des Verbrennungsprozesses in Gasturbinen-Brennkammern eingesetzten Modelle reichen von Kombinationen aus homogenen Reaktoren und Plug Flow-Reaktoren zu dreidimensionalen CFD-Simulationen, welche sämtliche physikalischen Prozesse berücksichtigen (Brennstoffzufuhr, Zerstäubung, Verdampfung, turbulente Verbrennung und Bildung von Schadstoffen). Erstere wurden von Swithenbank et al. [101] zur qualitativen Erfassung von Trends in Verbrennungssystemen entwickelt und von Steele et al. [99] und Mongia et al. [73] angewendet. Die Aufenthaltszeit für jeden Reaktor wird dabei mit experimentellen Daten für eine bestimmte Konfiguration und definierte Randbedingungen kalibriert. Mit Hilfe dieses Betriebspunktes können dann Trends für Änderungen einer einzelnen Randbedingung ermittelt werden. Diese Vorgehensweise ist jedoch nicht zu detaillierten Vorhersagen in der Lage und kann daher nicht zur Auslegung neuer Brennkammern im Vorfeld von Experimenten herangezogen werden.

Die Hersteller von Flugzeug-Gasturbinen nutzen CFD-Methoden bei der Auslegung neuer Brennkammern [24–27, 44]. Balthasar et al. [4] verwendeten ein neues Rußmodell [3] bei der Simulation der Emissionen einer Flugzeuggasturbinen-Brennkammer. Zur Optimierung einer gestuften Brennkammer hinsichtlich verringerter Schadstoffemissionen setzten Brehm et al. [16] numerische Simulationsrechnungen unter Verwendung eines dreidimensionalen CFD Codes ein. Basierend auf dem berechneten Strömungs- und Mischungsfeld ermittelten Barths et al. [7] die Schadstoffemissionen aus Flameletrechnungen.

In der vorliegenden Arbeit wird ein Modell zur Berechnung dreidimensionaler Verbrennungsvorgänge verwendet. Es basiert auf dem Flamelet-Modell, welches die chemische Reaktionskinetik isoliert von der Strömungsdynamik betrachtet. Dies wird möglich durch die Annahme der Existenz einer sehr dünnen Flammenschicht, in der die chemischen Prozesse ablaufen. Diese in der turbulenten Strömung eingebetteten laminaren dünnen Flammenschichten werden als Flamelets bezeichnet. Der Flamelet-Ansatz erlaubt die Berechnung der Zündung, der Wärmefreisetzung sowie der Ruß- und Stickoxid-Bildung unter Berücksichtigung detaillierter chemischer Reaktionskinetik. Dabei ist die Betrachtung der Verbrennung als instationärer Prozess von besonderer Bedeutung. Dies wird durch die Verwendung instationärer Flamelets erreicht. Die Flamelets werden interaktiv mit dem Strömungslöser und jeweils repräsentativ für einen bestimmten Weg von Partikeln durch die Brennkammer berechnet. Daher werden die Flamelets als Representative Interactive Flamelets bezeichnet. Der statistische Weg der Fluid-Partikel durch die Brennkammer wird mit Euler'schen Transportgleichungen beschrieben.

Die verwendeten chemischen Reaktionsmechanismen zur Beschreibung der detaillierten Reaktionskinetik von Kerosin und Methan basieren auf 1171 Elementarreaktionen zwischen 132 chemischen Komponenten für einen Kerosin-Modellbrennstoff beziehungsweise auf 523 Elementarreaktionen zwischen 58 chemischen Komponenten für Kohlenwasserstoffe mit bis zu 4 C-Atomen. Die Mechanismen enthalten neben Reaktionen zur Beschreibung des Zerfalls von Brennstoff zu kleineren Komponenten und der Brennstoffoxidation eine detaillierte Beschreibung zur Bildung von Schadstoffen. So wird beim Kerosin die Bildung von Rußvorläufern über Benzol und polyzyklische aromatische Kohlenwasserstoffe beschrieben und die weitere Bildung und Oxidation von Ruß über ein statistisches Modell berücksichtigt. In beiden Mechanismen ist die Bildung von NO<sub>x</sub> über thermisches und Prompt-NO enthalten. Ebenso wird die Bildung von NO über N<sub>2</sub>O sowie der Abbau von NO über den sogenannten NO-Reburn-Pfad beschrieben. Weiterhin ist die Oxidation von NO zu NO<sub>2</sub> enthalten. Zur Validierung der vorgestellten Modelle werden die Ergebnisse aus Simulationen der Verbrennung und Schadstoffbildung in einer axial gestuften Flugzeuggasturbinen-Brennkammer mit von der Firma Rolls-Royce Deutschland zur Verfügung gestellten experimentellen Daten verglichen. Die Experimente wurden an einem Testrig durchgeführt, welcher einen 90° Sektor der Brennkammer, bestehend aus 5 Segmenten mit je einem Pilot- und Hauptbrennstoffeinlass, umfasst. Bei den Versuchen wurden reduzierte Takeoff-Bedingungen betrachtet. Desweiteren werden zur Ermittlung der Schadstoffbildungsmechanismen und der Stabilitätskriterien der Verbrennung von Methan in einer MILD Brennkammer numerische Simulationsrechnungen einer zuvor experimentell untersuchten Konfiguration mit hoher interner Abgasrückführung durchgeführt. Dabei werden die Brennstoffzusammensetzung variiert sowie die Auswirkung auf das Strömungsfeld und die Wandwärmeverluste betrachtet. Die Ergebnisse werden Messwerten gegenübergestellt.

# **Kapitel 2**

## **Mathematische Modelle**

In diesem Kapitel werden die mathematischen Modelle eingeführt, welche den numerischen Simulationsrechnungen zur Ermittlung der dargestellten Ergebnisse zu Grunde liegen. Die Gleichungen zur Beschreibung des Strömungs- und Mischungsfeldes werden vorgestellt und anhand turbulenter Mittelung erweitert. Die Modellierung der Turbulenzparameter anhand des verwendeten Turbulenzmodells wird in Abschnitt 2.2.2 beschrieben. Die Modelle für die nicht vorgemischte Verbrennung und darauf aufbauend die sogenannten Flamelet-Gleichungen werden in Abschnitt 2.3 vorgestellt.

## 2.1 Erhaltungsgleichungen

Das Strömungsfeld wird durch ein System gekoppelter, nicht linearer partieller Differentialgleichungen für Masse, Impuls und Energie beschrieben. Im Falle reaktiver Strömungen sind dies die Navier-Stokes-Gleichungen, die Erhaltungsgleichungen für die chemischen Spezies sowie für die Energie. In Strömungen veränderlicher Dichte lassen sich die Navier-Stokes-Gleichungen in konservativer Form wie folgt für die Kontinuität zu

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

und für Impulserhaltung zu

$$\frac{\partial \rho \boldsymbol{v}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\rho \boldsymbol{v} \boldsymbol{v}) = -\boldsymbol{\nabla} p + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{\tau} + \rho \boldsymbol{g}$$
(2.2)

formulieren. In Gleichung (2.2) beschreiben die beiden Terme auf der linken Seite die lokale zeitliche Änderung und die Konvektion, während sich auf der rechten Seite der Druckgradient,

der Term für den molekularen Transport aufgrund der Viskosität und der Term zur Berücksichtigung von Auftriebskräften finden. Im zweiten Term auf der rechten Seite dieser Gleichung beschreibt  $\tau$  den Schubspannungstensor, welcher durch

$$\boldsymbol{\tau} = \mu \left[ 2 \, \boldsymbol{S} - \frac{2}{3} \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{v} \right] \tag{2.3}$$

gegeben ist. Der darin enthaltene Deformations-Gradienten-Tensor

$$\boldsymbol{S} = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v} + \boldsymbol{\nabla} \boldsymbol{v}^T) \tag{2.4}$$

enthält die Transponierte des Geschwindigkeitsgradienten  $\nabla v^T$ . Die dynamische Viskosität  $\mu$  ist über die Beziehung

$$\mu = \rho \nu \tag{2.5}$$

mit der kinematischen Viskosität  $\nu$  verknüpft.

Neben den Navier-Stokes-Gleichungen für die Kontinuität und den Impuls werden weitere Erhaltungsgleichungen zur Simulation turbulenter Verbrennungsprozesse benötigt. Dies sind im wesentlichen die Erhaltungsgleichungen für die chemischen Spezies und die Energie (vgl. Williams [107]).

Die Massenerhaltung wird über die Massenbrüche der chemischen Spezies  $Y_i$  wie folgt beschrieben:

$$\frac{\partial \rho Y_i}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v} Y_i) = -\nabla \cdot \boldsymbol{j}_i + \dot{m}_i, \quad i = 1, 2, \dots, n_s.$$
(2.6)

Hierin bezeichnet  $n_s$  die Gesamtzahl der chemischen Spezies,  $j_i$  beschreibt die molekulare Diffusion und  $\dot{m}_i$  die chemischen Quellterme. Die molekulare Diffusion kann in turbulenten Strömungen mit hoher Reynoldszahl üblicherweise gegenüber dem turbulenten Transport vernachlässigt werden, weshalb die diffusiven Flüsse in der Regel vereinfacht betrachtet werden. Unter der Annahme binärer Diffusion einer Spezies *i* in eine andere, in hoher Konzentration vorliegende Spezies (z.B. Stickstoff), lässt sich der diffusive Fluss gemäß dem ersten Fickschen Gesetz für binäre Diffusion anhand des binären Diffusionskoeffizienten  $D_i$  der Spezies *i* beschreiben:

$$\boldsymbol{j}_i = -\rho D_i \nabla Y_i \,. \tag{2.7}$$

Die Energieerhaltungsgleichung ist gegeben durch

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v} h) = \frac{Dp}{Dt} - \nabla \cdot \boldsymbol{j}_q + \dot{q}_r \,. \tag{2.8}$$

Darin bezeichnet h die massengewichtete Summe der spezifischen Enthalpien  $h_i$  der Spezies i gemäß

$$h = \sum_{i=1}^{n_s} Y_i h_i \,. \tag{2.9}$$

Die spezifischen Enthalpien berechnen sich gemäß

$$h_i = \Delta h_{f,i}^0 + \int_{T^0}^T c_{p_i} \, dT \tag{2.10}$$

als Summe der Standardbildungsenthalpien  $\Delta h_{f,i}^0$  bezogen auf die Referenztemperatur  $T^0$  und der thermischen Enthalpien. Über den Wärmeflussvektor  $j_q$  werden thermische Diffusion aufgrund von Temperaturgradienten und Enthalpietransport durch Speziesdiffusion berücksichtigt:

$$\boldsymbol{j}_{q} = -\lambda \nabla T + \sum_{i=1}^{n_{s}} h_{i} \boldsymbol{j}_{i} \,. \tag{2.11}$$

Hierin beschreibt  $\lambda$  die Wärmeleitfähigkeit. Der letzte Term  $\dot{q}_r$  auf der rechten Seite von Gleichung (2.8) repräsentiert Wärmeverluste aufgrund von Strahlung. Mit der Definition der Enthalpie aus Gleichung (2.9) lässt sich eine alternative Formulierung für die Energieerhaltung angeben. Mit der Beziehung

$$dh = \frac{\partial h}{\partial T}dT + \sum_{i=1}^{n_s} \frac{\partial h}{\partial Y_i}dY_i = c_p dT + \sum_{i=1}^{n_s} h_i dY_i$$
(2.12)

lautet diese in Form einer mit Temperaturen formulierten Energiegleichung:

$$\frac{\partial(\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \boldsymbol{v}T) = \nabla (\frac{\lambda}{c_p} \nabla T) + \rho \frac{\lambda}{c_p^2} \left[ \sum_{i=1}^{n_s} \frac{c_{p_i}}{\operatorname{Le}_i} \nabla Y_i + \nabla c_p \right] \nabla T - \frac{1}{c_p} \left[ \sum_{i}^{n_s} \dot{m}_i h_i - \frac{Dp}{Dt} - \dot{q}_R \right].$$
(2.13)

Darin ist  $c_p$  die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck. Die Lewis-Zahlen Le<sub>i</sub> sind durch

$$Le_i = \frac{\lambda}{\rho D_i c_p} \tag{2.14}$$

definiert und beschreiben das Verhältnis von thermischer Diffusion  $a = \lambda/(\rho c_p)$  zu stofflicher Diffusion.  $D_i$  bezeichnet den Diffusionskoeffizienten der Komponente *i*. Zur Berücksichtigung der Effekte differentieller Diffusion, wie sie zum Beispiel in Wasserstoff-Luft-Flammen auftritt, wurden von Pitsch et al. [89] Flamelet-Gleichungen mit zusätzlichen Korrekturtermen für differentielle Diffusionsgeschwindigkeiten hergeleitet. Bei den hier betrachteten Fällen wird differentielle Diffusion vernachlässigt, und für die Lewis-Zahlen der Komponenten *i* gilt

$$\operatorname{Le}_i = 1. \tag{2.15}$$

Das System von Gleichungen wird mit Hilfe der Zustandsgleichung für ein ideales Gasgemisch geschlossen

$$\frac{p}{\rho} = R_{\text{Gas}} \sum_{i=1}^{n_s} \frac{Y_i}{W_i} T , \qquad (2.16)$$

wobei  $R_{\text{Gas}}$  die universelle Gaskonstante und  $W_i$  die Molmasse der jeweiligen Spezies *i* bezeichnen.

### 2.2 Turbulenzmodellierung

Die Betrachtung turbulenter reaktiver Strömungen erfordert die Berücksichtigung der charakteristischen Eigenschaften der Turbulenz in den Gleichungen, welche die physikalischen Zusammenhänge beschreiben. Die Navier-Stokes-Gleichungen für Impuls und Kontinuität oder die Enthalpiegleichung können aufgrund ihrer Komplexität durch die stochastische Natur der Turbulenz und die damit verbundene Unterteilung in mehrere Zeit- und Längenskalen nicht direkt gelöst werden, um turbulente, nicht vorgemischte Verbrennungsprozesse in realen Geometrien zu simulieren. Daher werden solche Verbrennungsprozesse durch statistische Modelle beschrieben.

Eine wesentliche Eigenschaft turbulenter Strömungen ist das Auftreten von Wirbeln unterschiedlicher Größenordnungen oder Längenskalen. Die Wirbel auf den großen Längenskalen werden von der Geometrie des betrachteten Problems bestimmt. Die Größe dieser Wirbel wird als integrales Längenmaß bezeichnet, welches durch die turbulente kinetische Energie k und die Dissipation der kinetischen Energie  $\varepsilon$  ausgedrückt werden kann:

$$l_0 = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \tag{2.17}$$

Die entsprechende integrale Zeitskala ist definiert durch

$$\tau_0 = \frac{k}{\varepsilon} \,, \tag{2.18}$$

und kann als Umdrehungszeit eines Wirbels mit der Größe  $l_0$  und der Geschwindigkeit  $v_0$ interpretiert werden. Dabei ist die Geschwindigkeit  $v_0$  von der gleichen Größenordnung wie die mittlere Geschwindigkeitsfluktuation v'.

Das integrale Längenmaß ist von der Größenordnung der Geometrie des betrachteten Problems. Die auf dieser Ebene durch Umwandlung kinetischer Energie in Scherungsturbulenz gebildeten turbulenten Wirbel zerfallen nach der sogenannten Wirbelkaskaden-Theorie [57] unter Abgabe von Energie in kleinere Wirbel bis zur kleinsten Skala, der sogenannten Kolmogorov-Länge, welche mehrere Größenordnungen kleiner als das integrale Längenmaß ist. Demnach ist die statistische Beschreibung der Bewegung auf den kleinen Skalen bei genügend hoher Reynolds-Zahl über die laminare kinematische Viskosität  $\nu$  und die Dissipationsrate  $\varepsilon$  möglich, und die Kolmogorov-Länge ist definiert als

$$\eta = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{1/4} \tag{2.19}$$

mit der entsprechenden Zeitskala

$$\tau_{\eta} = \left(\frac{\nu}{\varepsilon}\right)^{1/2} \,. \tag{2.20}$$

Auf den kleinsten Skalen werden die Wirbel aufgrund molekularer Diffusion zerstört, und die Energie dissipiert in viskose Reibung bzw. thermische Energie. Daher werden die kleinsten Skalen auch als dissipative Skalen bezeichnet. Die Dissipationsrate skaliert nach [102] mit

$$\varepsilon = \frac{v'}{l_0}, \qquad (2.21)$$

wobei v' und  $l_0$  die mittleren Geschwindigkeitsfluktuationen und das integrale Längenmaß bezeichnen. Nach Einführung der turbulenten Reynolds-Zahl

$$\operatorname{Re} = \frac{v' l_0}{\nu} \tag{2.22}$$

kann mit Hilfe der Gleichungen (2.19) und (2.21) das Verhältnis von Kolmogorov- zu integralem Längenmaß als Funktion der Reynolds-Zahl angegeben werden:

$$\frac{\eta}{l_0} \sim \text{Re}^{-3/4}$$
. (2.23)

Entsprechend folgt nach [94] für die Geschwindigkeiten

$$\frac{v_n}{v_0} \sim \operatorname{Re}^{-1/4} \tag{2.24}$$

und für die Zeitskalen

$$\frac{\tau_{\eta}}{\tau_0} \sim \operatorname{Re}^{-1/2}.$$
(2.25)

Die Lösung der Gleichungen zur Beschreibung der turbulenten Strömung erfordert das Auflösen der kleinsten Zeit-und Längenskalen durch Verwendung sowohl hochauflösender Gitter als auch sehr kleiner Zeitschritte in den numerischen Simulationen. Diese sogenannten Direkten Numerischen Simulationen (DNS) sind trotz ständig effizienter werdender Computersysteme derzeit nur für einfache Geometrien und mittlere Reynolds-Zahlen möglich. Aus den Gleichungen (2.23), (2.24) und (2.25) wird deutlich, dass bei hohen Reynolds-Zahlen die Längen-, Geschwindigkeits- und Zeitskalen in turbulenten Strömungen einen großen Bereich umfassen, welcher die Möglichkeiten zur Auflösung selbst der kleinsten Skalen übersteigt. In technischen Strömungen mit hoher Reynolds-Zahl werden daher sogenannte statistische Turbulenzmodelle zur Modellierung der Phänomene auf den kleinen Skalen eingesetzt. Hierzu sind für die Variablen geeignete Mittelungen durchzuführen, welche in Abschnitt 2.2.1 erläutert werden.

#### 2.2.1 Mittelwerte in turbulenten Strömungen

In turbulenten Strömungen mit veränderlicher Dichte, wie sie in Verbrennungsprozessen auftreten, ist die Einführung einer Dichte-gewichteteten Mittelung gebräuchlich. Diese Mittelung  $\tilde{\phi}$  wird als Favre Mittelung bezeichnet und basiert auf der Unterteilung von  $\phi(\boldsymbol{x},t)$  in den Mittelwert  $\tilde{\phi}(\boldsymbol{x},t)$  und die Fluktuation  $\phi''(\boldsymbol{x},t)$  gemäß

$$\phi(\boldsymbol{x},t) = \tilde{\phi}(\boldsymbol{x},t) + \phi''(\boldsymbol{x},t) . \qquad (2.26)$$

Die Favre Mittelung setzt voraus, dass das Mittel des Produkts aus  $\phi''$  und der Dichte  $\rho$ , nicht der Fluktuation  $\phi''$  selbst, zu Null wird

$$\overline{\rho\phi''} = 0. \tag{2.27}$$

Die Definition für  $\tilde{\phi}$  kann dann durch Multiplizieren der Gleichung (2.26) mit der Dichte  $\rho$  und anschließende Mittelung gemäß

$$\overline{\rho\phi} = \overline{\rho\tilde{\phi}} + \overline{\rho\phi''} = \bar{\rho}\tilde{\phi}$$
(2.28)

abgeleitet werden. Das Mittel des Produkts  $\rho \tilde{\phi}$  ist gleich dem Produkt aus den Mittelwerten  $\bar{\rho}$  und  $\tilde{\phi}$ , da  $\tilde{\phi}$  bereits ein durch

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} \tag{2.29}$$

definierter Mittelwert ist. Die fluktuierende Komponente der Größe  $\phi$  folgt zu

$$\phi'' = \frac{(\rho\phi)'}{\bar{\rho}}.$$
(2.30)

Aus gleichzeitigen Messungen von  $\rho$  und  $\phi$ , Mittelung des Produkts  $\rho\phi$  und Division durch den Mittelwert der Dichte lässt sich dann  $\tilde{\phi}$  ermitteln. Die Durchführung solcher Messungen ist nicht trivial, allerdings ermöglicht die Favre Mittelung die Vereinfachung der gemittelten Navier-Stokes Gleichungen.

Durch Favre Mittelung der Gleichungen (2.1) und (2.2) ergeben sich die Navier-Stokes Gleichungen zu

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\bar{\rho} \tilde{\boldsymbol{v}}) = 0 \tag{2.31}$$

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{\boldsymbol{v}}}{\partial t} + \boldsymbol{\nabla} \cdot (\bar{\rho} \tilde{\boldsymbol{v}} \tilde{\boldsymbol{v}}) = -\boldsymbol{\nabla} \bar{p} + \boldsymbol{\nabla} \cdot \bar{\boldsymbol{\tau}} - \boldsymbol{\nabla} \cdot (\bar{\rho} \widetilde{\boldsymbol{v}'' \boldsymbol{v}''}) + \bar{\rho} \boldsymbol{g} .$$
(2.32)

Letztere unterscheidet sich von Gleichung (2.2) lediglich durch den dritten Term auf der rechten Seite. Dieser enthält den Ausdruck  $-\bar{\rho}v''v''$ , welcher als Reynolds'scher Spannungstensor bezeichnet wird. Dieser unbekannte Term repäsentiert das erste Schließungsproblem in der Turbulenzmodellierung. Obwohl es möglich ist, Transportgleichungen für die sechs Komponenten des Reynolds'schen Spannungstensors aufzustellen, enthalten diese Gleichungen erneut diverse nicht geschlossene Terme. Die daraus abgeleiteten so genannten Reynolds Stress Modelle für variable Dichte wurden unter anderen von Jones [53] und Jones und Kakhi [55] vorgestellt. Trotz der vollständigeren Beschreibung der physikalischen Verhältnisse werden diese Modelle kaum bei der Simulation turbulenter Verbrennungsprozesse eingesetzt.

#### 2.2.2 Turbulenzmodelle

Industrielle Codes verwenden in der Regel das k- $\varepsilon$  Modell zur Beschreibung der Turbulenz. Dieses Modell basiert auf der Annahme, den Reynolds'schen Spannungstensor über die turbulente Scheinviskosität auszudrücken und beschreibt Strömungen isotroper Turbulenz. Da das  $k - \varepsilon$  Modell auf Gleichungen basiert, welche den turbulenten Transport als diffusiven Prozess beschreiben, lässt es sich durch numerisch einfacher zu handhabende Methoden umsetzen als die Reynolds Stress Gleichungen.

Durch Einführung der turbulenten Scheinviskosität oder Wirbelviskosität  $\nu_t$  und Modellierung der turbulenten Scherspannungen anhand des Produkts der turbulenten Viskosität und der mittleren Geschwindigkeitsgradienten nach dem Gradientenflussansatz [14] lässt sich der Ausdruck für den Reynolds'schen Spannungstensor stark vereinfachen:

$$-\bar{\rho}\,\widetilde{\boldsymbol{v}''\boldsymbol{v}''} = \bar{\rho}\nu_t \,\left[2\widetilde{\boldsymbol{S}} - \frac{2}{3}\delta_{ij}\boldsymbol{\nabla}\cdot\tilde{\boldsymbol{v}}\right] - \frac{2}{3}\delta_{ij}\bar{\rho}\,\tilde{k}\,.$$
(2.33)

Darin ist  $\nu_t$  die kinematische turbulente Scheinviskosität. Diese Größe ist keine Stoffeigenschaft. Sie ist vielmehr von den lokalen Turbulenzgrößen abhängig und kann als das Produkt aus einer Geschwindigkeitsskala und einem Längenmaß aufgefasst werden. Die Bestimmung dieser Größen erfolgt mit Hilfe des verwendeten Turbulenzmodells. Anhand der zusätzlich benötigten Gleichungen zur Bestimmung der turbulenten Scheinviskosität werden die verwendeten Modelle unterteilt. Prandtl [95] ermittelte die turbulente Scheinviskosität über den nach ihm benannten Mischungswegansatz. Das Längenmaß entspricht dabei dem Mischungsweg  $l_m$ und die Geschwindigkeitsskala dem Betrag des Gradienten der Mittelwerte der Geschwindigkeit im Strömungsfeld multipliziert mit dem Mischungsweg:

$$\nu_t = l_m^2 \left| \frac{\partial \bar{\boldsymbol{u}}}{\partial \boldsymbol{x}} \right| \,. \tag{2.34}$$

Da hierzu keine zusätzlichen Gleichungen gelöst werden müssen, handelt es sich um ein Null-Gleichungs-Modell für die Ermittlung der Scheinviskosität. Daraus folgt, dass die turbulente Scheinviskosität zu Null wird, sobald der Gradient der gemittelten Geschwindigkeit verschwindet. Im Inneren eines turbulenten Freistrahls jedoch werden durch direkte Messungen hohe Werte für  $\nu_t$  ermittelt, obwohl der Gradient der gemittelten Geschwindigkeit Null wird. Daher wurde von Kolmogorov [58] und später auch von Prandtl [96] vorgeschlagen, die Geschwindigkeitsskala anhand der turbulenten kinetischen Energie zu bestimmen. Der Mischungsweg wird als Längenmaß beibehalten, und die turbulente Scheinviskosität ergibt sich zu

$$\nu_t = c \, k^{1/2} \, l_m \,. \tag{2.35}$$

Die turbulente kinetische Energie kann nach Prandtl und Kolmogorov mit einer Transportgleichung bestimmt werden. Daher handelt es sich hier um ein Ein-Gleichungs-Modell. In solchen Modellen wird das Längenmaß empirisch vorgegeben, während das Längenmaß in Zwei-Gleichungs-Modellen über Zweipunkt-Korrelationen oder wie im k- $\varepsilon$  Modell aus der turbulenten kinetischen Energie und der turbulenten Dissipation ermittelt wird.

Dieses Modell wurde zuerst von Jones und Launder [54] als Standard k- $\varepsilon$  Modell vorgestellt und basiert auf in [62] zusammengefassten Beiträgen. Es wurde später mit veränderten Konstanten von Launder und Sharma [61] überarbeitet. Zusätzlich zur Einführung der turbulenten Scheinviskosität und der Lösung der Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie k wird eine Transportgleichung für die turbulente Dissipation  $\varepsilon$  verwendet. Die kinematische turbulente Scheinviskosität kann durch die Favre gemittelte turbulente kinetische Energie  $\tilde{k}$ 

$$\tilde{k} = \frac{1}{2} \widetilde{\boldsymbol{v}'' \boldsymbol{v}''} \tag{2.36}$$

und deren Dissipation  $\widetilde{\varepsilon}$  über

$$\nu_t = c_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}}, \qquad c_\mu = 0.09 \tag{2.37}$$

ausgedrückt werden. Die Einführung der Favre gemittelten Größen k und  $\tilde{\varepsilon}$  erfordert modellierte Transportgleichungen für diese Größen. Diese lauten in ihrer einfachsten Form für die turbulente kinetische Energie

$$\bar{\rho}\frac{\partial\tilde{k}}{\partial t} + \bar{\rho}\boldsymbol{\nabla}\tilde{\boldsymbol{v}}\tilde{k} = \boldsymbol{\nabla}\cdot(\frac{\bar{\rho}\nu_t}{\mathrm{Pr}_k}\boldsymbol{\nabla}\tilde{k}) - \bar{\rho}\widetilde{\boldsymbol{v}''\boldsymbol{v}''}:\boldsymbol{\nabla}\tilde{\boldsymbol{v}} - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon}, \qquad (2.38)$$

und für die turbulente Dissipation

$$\bar{\rho}\frac{\partial\tilde{\varepsilon}}{\partial t} + \bar{\rho}\boldsymbol{\nabla}\tilde{\boldsymbol{v}}\tilde{\varepsilon} = \boldsymbol{\nabla}\cdot\left(\bar{\rho}\frac{\nu_t}{\mathrm{Pr}_{\varepsilon}}\boldsymbol{\nabla}\tilde{\varepsilon}\right) - c_{\varepsilon 1}\bar{\rho}\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}\widetilde{\boldsymbol{v}''\boldsymbol{v}''}:\boldsymbol{\nabla}\tilde{\boldsymbol{v}} - c_{\varepsilon 2}\bar{\rho}\frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}}.$$
(2.39)

In diesen Gleichungen beschreiben die Terme der linken Seite die lokale zeitliche Änderung und Konvektion. Der erste Term der rechten Seite beschreibt den turbulenten Transport, der zweite repräsentiert den turbulenten Produktionsterm und der dritte die turbulente Dissipation. Bei Verwendung des Standard  $k - \varepsilon$  Modells werden im allgemeinen für die Konstanten in diesen Gleichungen die Werte  $Pr_k = 1.0$ ,  $Pr_{\varepsilon} = 1.3$ ,  $c_{\varepsilon 1} = 1.44$  und  $c_{\varepsilon 2} = 1.92$  verwendet.

Die Dissipation  $\varepsilon$  ist von entscheidender Bedeutung in der Turbulenztheorie. Die Wirbelkaskaden-Theorie interpretiert die Dissipation als die Energietransferrate von großen zu kleinen Wirbeln. Daher ist sie unveränderlich im Inertialbereich der Turbulenz. Somit können unter Berücksichtigung dieser Eigenschaft für  $\varepsilon$  in der Gleichung für die turbulente kinetische

Engergie k (2.38) von der Reynolds-Zahl unabhängige Lösungen für freie Scherströmungen ermittelt werden [82].

Aufgrund der hohen Robustheit in numerischen Simulationsrechnungen ist das Konzept der Wirbelviskosität in Verbindung mit dem  $k - \varepsilon$  Modell weit verbreitet, obwohl es sich um eine stark vereinfachte Betrachtung der komplexen Eigenschaften der Turbulenz handelt, woraus entsprechende Einschränkungen folgen. Die Abhängigkeit turbulenter Mischung von Stromlinienkrümmungseffekten wird beispielsweise nicht berücksichtigt, und Stabilisierungseffekte durch Auftriebskräfte können nicht reproduziert werden.

## 2.3 Laminare Flamelets

Das Flamelet-Modell basiert im wesentlichen auf der von der Behandlung der Strömungsdynamik isolierten Betrachtung der chemischen Reaktionskinetik. Möglich wird diese Art der Betrachtung durch die Annahme der Existenz einer sehr dünnen Flammenschicht, deren chemische Zeit- und Längenskalen viel kleiner sind als die kleinste turbulente Skala, die Kolmogorov-Skala. Die laminare Struktur der Flammenschicht kann durch die turbulenten Wirbel nicht zerstört werden, es kommt lediglich zu Streckungen und Translationen der chemischen Reaktionszone. Williams [106] führte die Betrachtung turbulenter Flammen als Ensemble gestreckter laminarer Flammen, sogenannter Diffusionsflamelets, ein. Ausgehend von diesen Überlegungen entwickelte Peters [78–80] das Flamelet-Modell für die nicht vorgemischte turbulente Verbrennung, welches im Folgenden beschrieben wird.

Da in laminaren Flammen die chemischen Zeitskalen um mehrere Größenordnungen kleiner sind als die konvektiven und diffusiven Zeitskalen, lassen sich die chemischen separat von den Strömungsvorgängen beschreiben. Diese Annahme der separierten Skalen wurde von Peters [81] ausführlich anhand einer Längen- und Zeitskalenanalyse in turbulenten Diffusionsflammen diskutiert.

Entsprechend wird die chemische Umsatzrate in laminaren Flammen im wesentlichen durch die diffusiven Flüsse bestimmt. Burke und Schumann [19] erkannten dies bereits Ende der zwanziger Jahre des 20. Jahrhunderts und betrachteten die Reaktionszone unabhängig von der chemischen Reaktionskinetik als unendlich dünne Schicht oder Flammenfläche, in der Brennstoff und Oxidator zusammengeführt und zu Produkten umgewandelt werden.

Aus den Konzentrationen von Brennstoff und Oxidator wird eine Kopplungsfunktion ermittelt. Diese kann durch quelltermfreie Transportgleichungen wiedergegeben werden, wodurch sich die Struktur der umgebenden diffusiven Schicht in einfacher Weise beschreiben läßt. Die Burke-Schumann Lösung beschreibt das Limit großer Damköhler-Zahl und irreversibler Chemie (vgl. Abschnitt 3.1.2), wobei die Damköhler-Zahl das Verhältnis der charakteristischen Zeiten der strömungsdynamischen und der chemischen Vorgänge darstellt. Somit lassen sich die Konzentrationen der chemischen Komponenten als eindeutige Funktion einer Kopplungsfunktion angeben. Bilger [10] definierte eine allgemeine Form von Kopplungsfunktionen für ein System mit zwei Einlassströmen durch Normalisierung auf die Einlasswerte

$$Z = \frac{\beta - \beta_2}{\beta_1 - \beta_2}, \qquad (2.40)$$

wobei  $\beta$  eine beliebige Kopplungsfunktion darstellt. Die Funktion Z stellt eine konservierte Größe dar, welche unhabhängig von den jeweiligen Gemischzusammensetzungen die Eigenschaft hat, im Strom 1 den Wert Z = 1 und im Strom 2 den Wert Z = 0 anzunehmen. Sie wird im Folgenden als Mischungsbruch bezeichnet.

### 2.3.1 Definition des Mischungsbruchs

Die Definition des Mischungsbruchs gemäß Gleichung (2.40) erfordert die Festlegung einer geeigneten Kopplungsfunktion. Im Gegensatz zu den chemischen Komponenten einer Mischung, deren Masse sich während der Reaktionen von Edukten zu Produkten ändert, bleiben die chemischen Elemente erhalten. Ist  $a_{ij}$  die Anzahl der Atome des chemischen Elementes j in einem Molekül einer chemischen Komponente i, ergibt sich die Masse aller Atome j in der Mischung zu

$$m_j = \sum_{i=1}^{n_s} \frac{a_{ij} W_j}{W_i} m_i \,. \tag{2.41}$$

W steht hier für die molaren Massen. Somit kann für den Massenbruch eines chemischen Elements j

$$Z_{j} = \frac{m_{j}}{m} = \sum_{i=1}^{n_{s}} \frac{a_{ij}W_{j}}{W_{i}}Y_{i}$$
(2.42)

aus Gleichung (2.52) eine quelltermfreie Erhaltungsgleichung hergeleitet werden. Mit der Definition des Operators  $\mathcal{L}$ 

$$\mathcal{L} = \rho \frac{\partial}{\partial t} + \rho \boldsymbol{v} \cdot \nabla - \nabla \left(\rho D_Z \nabla\right)$$
(2.43)

folgt

$$\mathcal{L}(Z_j) = -\nabla \left( \sum_{j}^{n_s} \frac{a_{ij} W_j}{W_i} \left( \rho D_Z \nabla Y_i + \boldsymbol{j}_i \right) \right) + \sum_{i}^{n_s} \frac{a_{ij} W_j}{W_i} \dot{m}_i \,. \tag{2.44}$$

Der letzte Term der rechten Seite stellt die chemische Produktionsrate des Elementes j dar. Da chemische Elemente durch die hier betrachteten chemischen Reaktionen weder gebildet noch verbraucht werden und der Elementmassenbruch Z daher eine konservierte Variable darstellt, ist dieser Term gleich Null. Wird die molekulare Diffusion gemäß dem ersten Fickschen Gesetz laut Gleichung (2.7) beschrieben, und sind weiter alle Diffusivitäten den chemischen Komponenten gleich  $D_Z$ , so verschwindet auch der erste Term auf der rechten Seite von Gleichung (2.44), woraus

$$\mathcal{L}(Z_i) = 0 \tag{2.45}$$

folgt. Zur Herleitung einer sinnvollen Kopplungsfunktion wird eine Globalreaktion unter Beteiligung der chemischen Elemente C, H und O mit der Reaktionsrate  $\dot{m}$  betrachtet:

$$\nu_{\mathsf{C}}\mathsf{C} + \nu_{\mathsf{H}}\mathsf{H} + \nu_{\mathsf{O}}\mathsf{O} \longrightarrow \mathsf{P}$$
(2.46)

Darin stellen die  $\nu_j$  die Anzahl der in den Edukten enthaltenen Atome des Elements *j* dar. Unter Berücksichtigung des globalen Umsatzes der Ausgangsstoffe wird nun Gleichung (2.44) für jedes beteiligte Element der Ausgangsstoffe formuliert:

$$\mathcal{L}(Z_j) = -\nu_j W_j \dot{m} . \tag{2.47}$$

Durch Addition von  $\mathcal{L}(Z_{\mathsf{C}})$  und  $\mathcal{L}(Z_{\mathsf{H}})$  sowie Eliminierung des chemischen Quellterms mit  $\mathcal{L}(Z_{\mathsf{O}})$  folgt

$$\mathcal{L}(\beta) \equiv \mathcal{L}\left(\frac{Z_{\mathsf{C}}}{\nu_{\mathsf{C}}W_{\mathsf{C}}} + \frac{Z_{\mathsf{H}}}{\nu_{\mathsf{H}}W_{\mathsf{H}}} - 2\frac{Z_{\mathsf{O}}}{\nu_{\mathsf{O}}W_{\mathsf{O}}}\right) = 0.$$
(2.48)

Nach Einführung der Kopplungsfunktion  $\beta$  in Gleichung (2.40) und Zuordnung der Indizes 1 für den Brennstoffstrom und 2 für den Oxidatorstrom ist der Mischungsbruch definiert durch

$$Z = \frac{Z_{\rm C}/(\nu_{\rm C}W_{\rm C}) + Z_{\rm H}/(\nu_{\rm H}W_{\rm H}) + 2(Z_{\rm O,2} - Z_{\rm O}/(\nu_{\rm O}W_{\rm O})}{Z_{\rm C,1}/(\nu_{\rm C}W_{\rm C}) + Z_{\rm H,1}/(\nu_{\rm H}W_{\rm H}) + 2Z_{\rm O,2}/(\nu_{\rm O}W_{\rm O})}.$$
(2.49)

Aufgrund der zuvor getroffenen Annahme gleicher Diffusivitäten für alle beteiligten Komponenten folgt für die Transportgleichung des Mischungsbruchs

$$\mathcal{L}(Z) = 0. \tag{2.50}$$

Das stöchiometrische Mischungsverhältnis ergibt sich mit der Bedingung, daß die Massenbrüche der Edukte Null sind, aus Gleichung (2.49) zu

$$Z_{\rm st} = \frac{2Z_{\rm O,2}/(\nu_{\rm O}W_{\rm O})}{Z_{\rm C,1}/(\nu_{\rm C}W_{\rm C}) + Z_{\rm H,1}/(\nu_{\rm H}W_{\rm H}) + 2Z_{\rm O,2}/(\nu_{\rm O}W_{\rm O})} \,.$$
(2.51)

Da der Mischungsbruch einen nicht reagierenden Skalar darstellt und damit eine Transportgleichung für diesen Skalar im physikalischen Raum keine chemischen Quellterme enthält, können klassische Turbulenz-Modellierungsannahmen für nicht reagierende Skalare angewendet werden. Bei der Verwendung des Presumed Shape Pdf Ansatzes, welcher in Abschnitt 2.4.1 eingeführt wird, kann die Pdf des Mischungsbruchs erstellt werden. Die dazu benötigten Transportgleichungen für den Mittelwert und die Varianz des Mischungsbruchs werden im CFD-Code gelöst. Wird der Verlauf der Pdf für den Mischungsbruch als bekannt vorausgesetzt, kann die Wahrscheinlichkeit, die Reaktionszone an einem Ort x zur Zeit t im Strömungsfeld anzutreffen, ermittelt werden. Nach Lösung der Flamelet-Gleichungen, welche in Abschnitt 2.3.2 eingeführt werden, können mit Hilfe der Pdf turbulente Mittelwerte für die Massenbrüche der chemischen Spezies  $Y_i$  berechnet werden.

#### 2.3.2 Flamelet-Gleichungen

Ziel der Flamelet-Formulierung ist die Darstellung aller skalaren Größen mit Ausnahme des Drucks als eindeutige Funktion des Mischungsbruchs Z sowie die Transformation der Bilanzgleichungen für die Massenbrüche der chemischen Komponenten und die Energiegleichung in eine eindimensionale Form [78–80].

Ausgangspunkt für die Ableitung des Modells sind die Transportgleichungen für die Massenbrüche  $Y_i$  der chemischen Komponenten i (2.6) und die Temperatur T (2.13) für das Limit kleiner Mach-Zahlen, hier formuliert in einem kartesischen Koordinatensystem mit den Achsen  $x_{\alpha}$  und  $\alpha = 1,2,3$ :

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho v_\alpha \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} + \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left( \rho Y_i V_{i\alpha} \right) - \dot{m}_i = 0, \quad i = 1, \dots, n_s$$
(2.52)

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho v_{\alpha} \frac{\partial T}{\partial x_{\alpha}} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x_{\alpha}} \right) + \sum_{i=1}^{n_s} \rho Y_i V_{i\alpha} \frac{c_{p_i}}{c_p} \frac{\partial T}{\partial x_{\alpha}} - \frac{\lambda}{c_p^2} \frac{\partial c_p}{\partial x_{\alpha}} \frac{\partial T}{\partial x_{\alpha}} + \frac{1}{c_p} \left( \sum_{i=1}^{n_s} h_i \dot{m}_i - \frac{\partial p}{\partial t} - \dot{q}_R \right) = 0$$

$$(2.53)$$

In diesen Gleichungen bezeichnet  $n_s$  die Anzahl der betrachteten chemischen Spezies,  $v_{\alpha}$  und  $V_{i\alpha}$  sind die Geschwindigkeit beziehungsweise die Diffusionsgeschwindigkeit in Richtung der Raumkoordinaten  $x_{\alpha}$ .

Die Verbrennungsprozesse finden hauptsächlich im Bereich der Fläche stöchiometrischer Mischung statt. Die Ausbildung dieser Fläche durch Mitreißen umgebenden Oxidators durch den mit einer Düse eingebrachten Brennstoffstrom ist in Abbildung 2.1 dargestellt.



Abbildung 2.1: Mischung von Brennstoff und Oxidator in der Reaktionszone

Die Lage dieser Fläche, in welcher der Mischungsbruch den Wert stöchiometrischer Mischung annimmt, also  $Z(x, t) = Z_{st}$ , kann anhand einer Feldgleichung durch Einsetzen des Operators  $\mathcal{L}$ , definiert in Gleichung (2.43), und des Mischungsbruchs Z in Gleichung (2.50) beschrieben werden:

$$\rho \frac{\partial Z}{\partial t} + \rho \boldsymbol{v} \cdot \nabla Z - \nabla \left(\rho D_Z \nabla Z\right) = 0.$$
(2.54)

Für diese Fläche wird ein lokales Koordinatensystem definiert, für das die  $x_2$ - und die  $x_3$ -Koordinate tangential zur Fläche stöchiometrischer Mischung liegen. Die senkrecht zu dieser Fläche eingeführte Koordinate  $x_1$  soll durch die neue Koordinate Z ersetzt werden, wobei die übrigen unabhängigen Koordinaten  $x_2$ ,  $x_3$  und die Zeit t beibehalten werden. Für die Koordinatentransformation

$$t, x_1, x_2, x_3 \longrightarrow \tau, Z, Z_2, Z_3 \tag{2.55}$$

mit  $\tau = t, Z_2 = x_2$  und  $Z_3 = x_3$  ergeben sich die Transformationsregeln formal zu

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial Z}{\partial t} \frac{\partial}{\partial Z}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial Z}{\partial x_1} \frac{\partial}{\partial Z}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_\beta} = \frac{\partial}{\partial Z_\beta} + \frac{\partial Z}{\partial x_\beta} \frac{\partial}{\partial Z}, \qquad \beta = 2, 3.$$
(2.56)

Mit Berücksichtigung des Fickschen Gesetzes

$$\rho Y_i V_{i\alpha} = -\rho D_Z \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} \tag{2.57}$$

und  $Le_i = 1$  lassen sich die Gleichungen (2.52) und (2.53) wie folgt vereinfachen:

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial t} + \rho v_\alpha \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left( \rho D_Z \frac{\partial Y_i}{\partial x_\alpha} \right) - \dot{m}_i = 0, \quad i = 1, \dots, N$$
(2.58)

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} + \rho v_{\alpha} \frac{\partial T}{\partial x_{\alpha}} - \frac{\partial}{\partial x_{\alpha}} \left( \rho D_Z \frac{\partial T}{\partial x_{\alpha}} \right) - \frac{\rho D_Z}{c_p} \left( \sum_{i=1}^{n_s} c_{p_i} \frac{\partial Y_i}{\partial x_{\alpha}} + \frac{\partial c_p}{\partial x_{\alpha}} \right) \frac{\partial T}{\partial x_{\alpha}} + \frac{1}{c_p} \left( \sum_{i=1}^{n_s} h_i \dot{m}_i - \frac{\partial p}{\partial t} - \dot{q}_R \right) = 0.$$

$$(2.59)$$

Nach Anwendung der Transformationsregeln aus Gleichung (2.55) auf die Gleichungen (2.58) und (2.59) sowie anschließender asymptotischer Analyse, bei der nur die Terme höherer Ordnung beibehalten werden, ergeben sich die Flamelet-Gleichungen für die chemischen Spezies  $Y_i$  zu

$$\rho \frac{\partial Y_i}{\partial \tau} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 Y_i}{\partial Z^2} - \dot{m}_i = 0$$
(2.60)

und für die Temperatur T zu

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \rho \frac{\chi}{2c_p} \left( \sum_{i=1}^{n_s} c_{p_i} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} + \frac{\partial c_p}{\partial Z} \right) \frac{\partial T}{\partial Z} + \frac{1}{c_p} \left( \sum_{i=1}^{n_s} h_i \dot{m}_i - \frac{\partial p}{\partial \tau} - \dot{q}_R \right) = 0.$$
(2.61)

In diesen Gleichungen bezeichnet  $n_s$  die Gesamtzahl der chemischen Spezies i,  $c_{p_i}$  die Wärmekapazitäten bei konstantem Druck,  $\dot{m}_i$  die chemischen Produktionsraten,  $h_i$  die Enthalpien der Spezies i und  $\dot{q}_R$  die Strahlungsverluste.

In den Flamelet-Gleichungen wurde bereits berücksichtigt, daß die Reaktionszone in Diffusionsflammen mit hoher Aktivierungsenergie sehr dünn ist, da die chemische Umsatzrate außerhalb eines kleinen Bereichs in der Nähe der maximalen Temperatur sehr stark abfällt. Daher sind die räumlichen Ableitungen in Richtung von  $Z_2$  und  $Z_3$ , welche aufgrund obiger Transformation in den Gleichungen erscheinen, von höherer Ordnung klein gegenüber der in Z-Richtung und wurden somit vernachlässigt.

Die Massenbrüche der chemischen Komponenten sowie die Enthalpie und der Mischungsbruch unterliegen dem gleichen konvektiven Transport im physikalischen Raum. Durch die Transformation in den Mischungsbruchraum verschwinden die konvektiven Terme im transformierten Gleichungssystem, und Gleichung (2.60) kann mit Gleichung (2.61) ohne zusätzliche Impulsgleichungen gelöst werden, sofern alle Parameter und Randbedingungen bekannt sind. In diesen Gleichungen wird der Einfluß des Strömungsfeldes allein durch die skalare Dissipationsrate repräsentiert. Die skalare Dissipationsrate wurde als

$$\chi = 2D_Z \left(\frac{\partial Z}{\partial x_\alpha}\right)^2 \tag{2.62}$$

eingeführt. In der Reaktionszone nimmt  $\chi$  den Wert  $\chi_{st}$  an. Ist  $\chi$  eine Funktion des Mischungsbruchs, und ist der funktionelle Zusammenhang bekannt, kann diese Funktion mit  $\chi_{st}$  parametrisiert werden. Die skalare Dissipationsrate spielt eine wichtige Rolle bei der Flamelet-Modellierung nicht vorgemischter Verbrennungsprozesse. Sie hat die Dimension einer inversen Zeit und repräsentiert damit die Inverse einer Diffusionszeitskala. Ebenso kann sie als Diffusivität im Mischungsbruchraum interpretiert werden, wobei der Gradient von Z unter anderem durch kompressive Streckung verstärkt wird, welche durch Turbulenzeinflüsse auf das Mischungsbruchfeld einwirkt.

Ebenso wie die turbulente Dissipation  $\varepsilon$  muss die skalare Dissipationsrate modelliert werden. Das Vorgehen bei der Modellierung sowie die Ermittlung der konditionierten skalaren Dissipationsrate wird im folgenden beschrieben.

#### 2.3.3 Flamelet-Parameter

Die Kopplung der Flamelet-Gleichungen im Mischungsbruchraum an das Strömungsfeld im physikalischen Raum erfolgt über die sogenannten Flamelet-Parameter. Im einzelnen sind dies der Druck p und die bereits in Abschnitt 2.3.2 eingeführte skalare Dissipationsrate  $\chi$  definiert durch Gleichung (2.62). Die skalare Dissipationsrate repräsentiert unmittelbar durch das Strömungsfeld verursachte molekulare Diffusionseffekte sowie Streckungseffekte auf den kleinen Skalen [79]. Damit liefert das Flamelet-Modell Informationen über die Flammenstruktur auf kleinen Skalen, welche durch die Favre-Mittelung verloren gehen. Dies stellt eine starke Verbesserung gegenüber einfacheren Modellen wie dem Eddy Dissipation Modell dar, welches diese Information vernachlässigt. Der numerische Aufwand verringert sich, da die Mischung durch einen einzelnen Skalar, den Mischungsbruch, beschrieben werden kann.

In den meisten Anwendungsfällen für das Limit kleiner Mach-Zahlen kann der Druck als räumlich konstant angesehen werden und muss somit nicht als Funktion des Mischungsbruchs beschrieben werden. Die Mischungsbruchabhängigkeit der skalaren Dissipationsrate ist [79] entnommen und ist gegeben durch

$$\chi(Z) = \frac{a_s}{\pi} \exp\left\{-2[\operatorname{erfc}^{-1}(2Z)]^2\right\} = \frac{a_s}{\pi} f_{\operatorname{erfc}}(Z) \,. \tag{2.63}$$

Unter der Annahme, dass diese Formulierung auch für die konditionierte skalare Dissipationsrate gültig ist, kann  $\chi$  in den Flamelet-Gleichungen (2.60) und (2.61) mit Hilfe der Formulierung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl. probability density function oder kurz Pdf) von  $\chi_{st}$  über die Dirac-Delta-Funktion

$$f_{\chi_{\rm st}}(\chi) = \delta(\chi_{\rm st} - \chi) \tag{2.64}$$

wie folgt ermittelt werden:

$$\chi = \tilde{\chi}(Z, \boldsymbol{x}, t) = \tilde{\chi}_{\rm st}(\boldsymbol{x}, t) \frac{f_{\rm erfc}(Z)}{f_{\rm erfc}(Z_{\rm st})}.$$
(2.65)

Der turbulente Mittelwert der skalaren Dissipationsrate  $\widetilde{\chi}$  ist durch

$$\widetilde{\chi} = c_{\chi} \frac{\widetilde{\widetilde{k}}}{\widetilde{k}} \widetilde{Z''^2}$$
(2.66)

gegeben und wird nach Jones et al. [56] mit  $c_{\chi} = 2.0$  modelliert.

Somit wird die skalare Dissipationsrate aus den fluktuierenden Größen  $\chi_{st}$  und Z bestimmt. Wird die statistische Unabhängigkeit dieser beiden Größen angenommen, kann der turbulente Mittelwert der skalaren Dissipationsrate zu

$$\widetilde{\chi} = \int_{\chi'_{\rm st}} \chi'_{\rm st} \widetilde{P}(\chi'_{\rm st}) d\chi'_{\rm st} \int_{Z} f(Z) \widetilde{P}(Z) dZ$$
(2.67)

bestimmt werden. Das erste Integral in Gleichung (2.67) repräsentiert den auf  $Z_{st}$  konditionierten Mittelwert der skalaren Dissipationsrate

$$\widetilde{\chi}_{\rm st} = \int_{\chi_{\rm st}} \chi'_{\rm st} \widetilde{P}(\chi'_{\rm st}) d\chi'_{\rm st} \,. \tag{2.68}$$

Nach Hellström [48] kann dieser durch Gleichsetzen der rechten Seite von Gleichung (2.67) mit der gebräuchlichen Formulierung für den turbulenten Mittelwert der skalaren Dissipationsrate aus Gleichung (2.66) wie folgt ermittelt werden:

$$\widetilde{\chi}_{\rm st} = \frac{c_{\chi} \frac{\widetilde{\varepsilon}}{k} \widetilde{Z}^{\prime\prime 2}}{\int\limits_{Z} f(Z) \widetilde{P}(Z) dZ}$$
(2.69)

Durch Berücksichtigung von Gleichung (2.65) in Gleichung (2.69) folgt die konditionierte gemittelte skalare Dissipationsrate zu

$$\widetilde{\chi}_{\rm st} = \frac{c_{\chi} \tilde{\underline{\tilde{\xi}}} \widetilde{Z}^{\prime\prime 2}}{\int\limits_{0}^{1} \frac{f_{\rm erfc}(Z)}{f_{\rm erfc}(Z_{\rm st})} \widetilde{P}(Z) dZ}.$$
(2.70)

Alternativ lässt sich die Mischungsbruchabhängigkeit analog zu Gleichung (2.65) nach [85] über folgende Beziehung angeben:

$$\chi = \widetilde{\chi}(Z, \boldsymbol{x}, t) = \widetilde{\chi}_{\rm st}(\boldsymbol{x}, t) \frac{Z^2}{Z_{\rm st}^2} \frac{\ln Z}{\ln Z_{\rm st}}$$
(2.71)

Die Gleichung (2.70) lautet entsprechend in modifizierter Form

$$\widetilde{\chi}_{\rm st} = \frac{c_{\chi} \tilde{\underline{\tilde{k}}} \widetilde{Z''^2}}{\int\limits_{0}^{1} \frac{Z^2}{Z_{\rm st}^2} \frac{\ln Z}{\ln Z_{\rm st}} \widetilde{P}(Z) dZ}.$$
(2.72)

Diese Größe wird bei der CFD-Berechnung für jede Zelle berechnet und über den betrachteten räumlichen Bereich gemittelt. Der so erhaltene Gebietsmittelwert für die konditionierte skalare Dissipationsrate  $\widehat{\chi_{st}}$  wird mit der Fläche stöchiometrischer Mischung pro Volumeneinheit gewichtet. Nach [85] kann  $\widehat{\chi_{st}}$  aus folgender Gleichung ermittelt werden:

$$\widehat{\chi_{\text{st}}} = \frac{\int\limits_{V} \bar{\rho}(\boldsymbol{x}) \, \widetilde{\chi}_{\text{st}}^{3/2}(\boldsymbol{x}) \widetilde{P}(Z_{\text{st}}) \, dV'}{\int\limits_{V} \bar{\rho}(\boldsymbol{x}) \, \widetilde{\chi}_{\text{st}}^{1/2}(\boldsymbol{x}) \widetilde{P}(Z_{\text{st}}) \, dV'}$$
(2.73)

Die im CFD-Code benötigten turbulenten Mittelwerte der Massenbrüche der chemischen Spezies  $Y_i$  lassen sich anhand einer Pdf-Integration und der Verteilung der Speziesmassenbrüche im Mischungsbruchraum aus der Lösung der instationären Flamelets  $Y_i(Z, \chi_{st})$  für jeden Zeitschritt ermitteln. Die Vorgehensweise zur Ermittelung turbulenter Mittelwerte und die numerische Implementation wird in Kapitel 3 erläutert.

## 2.4 Das Representative Interactive Flamelet (RIF) Modell

Die Lösung der Flamelet-Gleichungen liefert die Verteilung der Speziesmassenbrüche  $Y_i$  im Mischungsbruchraum. Zur Ermittlung der räumlichen Verteilung der Spezies wird der sogenannte Presumed Shape Pdf Ansatz angewendet, welcher den Verlauf der Pdf als bekannt voraussetzt und in Abschnitt 2.4.1 erläutert wird. Werden die Flamelets stationär gelöst, können die Flamelet-Profile im Voraus berechnet werden und in geeigneten Libraries gespeichert werden. Die Zuordnung der Werte in den Libraries erfolgt über die in Abschnitt 2.3.3 definierten Flamelet-Parameter. Während Druck und Temperatur an den Rändern des Mischungsbruchraums dem betrachteten physikalischen Problem folgen und die chemische Zusammensetzung des Brennstoff- und Oxidatorstroms zu Beginn definiert werden, ist die skalare Dissipationsrate ein veränderlicher Parameter, welcher die strömungsdynamischen Einflüsse repräsentiert. Die Entwicklung der skalaren Dissipationsrate als bestimmender Flamelet-Parameter wird in Abschnitt 2.4.2 diskutiert.

### 2.4.1 Presumed Shape Pdf Ansatz

Bei der Verwendung dieses Ansatzes wird der Verlauf einer geeigneten zwei-parametrigen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (Pdf) als bekannt vorausgesetzt. Dieser Verlauf wurde von Jones et al. [56] anhand experimenteller Daten ermittelt (vgl. [11]). Somit kann der funktionale Zusammenhang der Pdf in Abhängigkeit der beiden Parameter  $\widetilde{Z}$  und  $\widetilde{Z''^2}$  an jedem Ort im Strömungsfeld hergestellt werden. Für diese Parameter werden entsprechende Transportgleichungen im CFD-Code gelöst.

In einem System mit zwei Einlassströmen variiert der Mischungsbruch Z in den Grenzen von  $0 \le Z \le 1$ . Daher wird häufig die  $\beta$ -Funktion Pdf benutzt, um die Favre Pdf bei der Simulation turbulenter nicht vorgemischter Verbrennung zu bestimmen. Die  $\beta$ -Funktion Pdf oder kurz  $\beta$ -Pdf hat folgende Form:

$$\widetilde{P}(Z; \boldsymbol{x}, t) = \frac{Z^{\alpha - 1} (1 - Z)^{\beta - 1} \Gamma(\alpha + \beta)}{\Gamma(\alpha) \Gamma(\beta)}$$
(2.74)
In Gleichung (2.74) beschreibt  $\Gamma$  die Gamma-Funktion. Die beiden Parameter  $\alpha$  und  $\beta$  können über folgende Beziehungen für die Favre gemittelten Werte des Mischungsbruchs  $\widetilde{Z}(\boldsymbol{x},t)$  und der Varianz des Mischungsbruchs  $\widetilde{Z''^2}(\boldsymbol{x},t)$  bestimmt werden:

$$\alpha = \widetilde{Z}\gamma , \quad \beta = (1 - \widetilde{Z})\gamma , \qquad (2.75)$$

wobei  $\gamma$  wiederum als Funktion von  $\widetilde{Z}$  und  $\widetilde{Z''^2}$  gegeben ist:

$$\gamma = \frac{\widetilde{Z}(1-\widetilde{Z})}{\widetilde{Z''^2}} - 1 \ge 0.$$
(2.76)

Die  $\beta$ -Pdf ist in Abbildung 2.2 für verschiedene Kombinationen der Parameter  $\tilde{Z}$  und  $\gamma$  über dem Mischungsbruch aufgetragen.



Abbildung 2.2: Verläufe der  $\beta$ -Pdf für verschiedene Werte von  $\tilde{Z}$  und  $\gamma$ 

Für eine sehr kleine Varianz des Mischungsbruchs  $\widetilde{Z''^2}$  (großes  $\gamma$ ) nähert sich die  $\beta$ -Pdf der Gauss-Verteilung an. Für  $\alpha < 1$  bildet sich eine Singularität bei Z = 0 und für  $\beta < 1$  eine Singularität bei Z = 1 aus.

Die  $\beta$ -Pdf stellt eine gute Approximation für Freistrahl-Diffusionsflammen dar [56]. Der Verlauf dieser Pdf wird also nur durch den turbulenten Mittelwert  $\widetilde{Z}$  und die Varianz des Mischungsbruchs  $\widetilde{Z''^2}$  festgelegt, deren räumliche Verteilung durch

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{Z})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\,\tilde{\boldsymbol{v}}\widetilde{Z}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu_t}{\operatorname{Sc}_{\widetilde{Z}}}\nabla\widetilde{Z}\right]$$
(2.77)

und

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\widetilde{Z''^2})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\,\tilde{\boldsymbol{v}}\widetilde{Z''^2}) = \nabla \cdot \left[\frac{\mu_t}{\operatorname{Sc}_{\widetilde{Z''^2}}}\nabla\widetilde{Z''^2}\right] + \frac{2\mu_t}{\operatorname{Sc}_{\widetilde{Z''^2}}}(\nabla\widetilde{Z})^2 - \bar{\rho}\widetilde{\chi}$$
(2.78)

bestimmt wird. Entsprechend müssen zusätzliche Transportgleichungen für diese Größen im CFD-Code gelöst werden. In diesen Gleichungen bezeichnet  $\mu_t$  die turbulente dynamische Viskosität. Für die turbulenten Schmidt-Zahlen  $Sc_{\tilde{Z}}$  und  $Sc_{\tilde{Z''}}$  wird in der Regel ein konstanter Wert von 0.7 benutzt [34]. Die Energieerhaltung wurde in Form einer modifizierten Gleichung für den turbulenten Mittelwert der Gesamtenthalpie  $\tilde{h}$  in den CFD-Code integriert:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{h})}{\partial t} + \nabla \cdot (\bar{\rho}\boldsymbol{v}\tilde{h}) = \frac{D\tilde{p}}{Dt} - \nabla \cdot \boldsymbol{j}_{q} + \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} + \dot{q}_{r}.$$
(2.79)

### 2.4.2 Zeitliche Änderung der Flamelet-Parameter

Der Einfluss der zeitlichen Änderung der skalaren Dissipationsrate auf die Flamelet-Lösung wurde anhand numerischer Analysen der Flamelet-Gleichungen untersucht [5, 67]. Bei schneller Änderung von  $\chi$  stellt sich nur langsam wieder eine stationäre Lösung ein, sodass fortlaufende Änderungen der Flamelet-Parameter nicht mit Hilfe stationärer Flamelets abgebildet werden können. Insbesondere gegenüber den wärmefreisetzenden Reaktionen als langsam einzustufende chemische Prozesse wie Zündung, Extinktion oder die Bildung von Schadstoffen erfordert daher die Berücksichtigung instationärer Effekte.

Die chemischen Zeitskalen für die NO<sub>x</sub>- und Rußbildung sind deutlich größer als die der Hauptverbrennungsreaktionen, welche für die Wärmefreisetzung verantwortlich sind. Ändern sich die Flamelet-Parameter mit der Zeit, erfolgt die Schadstoffbildung vergleichsweise langsam, während sich die Verbrennungsreaktionen sehr schnell an die geänderten Bedingungen anpassen können. Dies erfordert die Verwendung eines instationären Flamelet-Modells, bei dem die skalare Dissipationsrate die Einflüsse des turbulenten Strömungs- und Mischungsfeldes innerhalb der Flamelet-Gleichungen repräsentiert.

Lokale und zeitliche Änderungen der skalaren Dissipationsrate entlang des Weges eines betrachteten Fluidpartikels beeinflussen die individuellen Schadstoffbildungsraten. Wird dieses Fluidpartikel durch ein Flamelet repräsentiert, folgt daraus die Abhängigkeit der zeitlichen und örtlichen Lösung des Flamelets vom Weg desselben durch das Strömungsfeld. Aufgrund des starken Temperaturabfalls normal zur dünnen Reaktionszone und der hohen Aktivierungsenergie der Oxidationsreaktionen kommen diese außerhalb der Reaktionszone zum Stillstand. Ruß wird in Gebieten fetter Mischung gebildet und beim Durchqueren der Reaktionszone durch OH-Radikale oxidiert. Diese Charakteristik von Diffusionsflammen wird in Abb. 2.3 darge-stellt.



Abbildung 2.3: Profile für Temperatur, OH-Radikal-Konzentration und Ruß als Funktion des Mischungsbruchs

Der RIF-Code wird für einen Modellbrennstoff erweitert, welcher die chemischen Eigenschaften von Kerosin repräsentiert. Der Modellbrennstoff besteht aus einer aliphatischen und einer aromatischen Komponente. Anhand numerischer und experimenteller Untersuchungen wurden *n*-Dekan und 1,2,4 Trimethyl-Benzol im Massenverhältnis 4 zu 1 als Komponenten festgelegt [97]. Dieser Mechanismus wird bei der Berechnung der Gasturbinen-Brennkammer eingesetzt. Ferner erfolgt die Simulation der Verbrennung in einer MILD-Brennkammer mit einer C<sub>1</sub>–C<sub>4</sub>-Kinetik (vgl. Abschnitt 4.1). Die wesentlichen Details werden in Abschnitt 4.2 erläutert. Die Verwendung mehrerer Flamelets erfolgt durch Einführung des sogenannten Eulerian Particle Flamelet Modells. welches in [7] detailliert beschrieben und in Abschnitt 3.4 kurz vorgestellt wird.

# **Kapitel 3**

# **Numerische Implementation**

Die numerische Implementation erfolgt durch Verwendung eines interaktiven Flamelet-Modells, wie in Abschnitt 2.4 beschrieben. Für die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse wurde der RIF-Code in der Version 3.7 zusammen mit dem CFD-Code FLUENT verwendet. Der CDF-Code wird zur Berechnung des Strömungsfelds eingesetzt. Für die Simulation der turbulenten reagierenden Strömung wurde eine erweiterte Version basierend auf dem CFD-Code FLUENT 6.0.12 verwendet. Der Löser und die verwendeten Modelle werden ausführlich im FLUENT Manual [36] beschrieben. Im Folgenden werden die wichtigsten Eigenschaften sowie die Erweiterungen für die Kopplung mit dem am Institut für Technische Mechanik entwickelten RIF-Code [46] erläutert. Anhand der zu lösenden Gleichungen und der Kopplung des CFD-Codes und des RIF-Codes wird der numerische Ablauf der instationären Simulationsrechnungen verdeutlicht.

## 3.1 CFD-Code

Mit dem impliziten Löser in sequentieller Form werden zunächst die Impulsgleichungen mit anschließender Druckkorrektur gelöst. Die Kopplung der Gleichungen für den Druck, den Impuls und die Energie erfolgt über den SIMPLE Algorithmus [76]. Anschließend werden die Gleichungen für die Skalare gelöst. Bei der Verwendung des RIF-Modells kommt der Gleichung für die Energie besondere Bedeutung zu. Diese wird als Enthalpiegleichung in modifizierter Form der Totalenthalpie über user defined functions (udf) implementiert. Daher treten keine chemischen Quellterme auf, und die Temperatur kann bei bekannter Speziesverteilung aus der Definition der Enthalpie ermittelt werden. Die stationäre Lösung des Strömungsund Temperaturfeldes wird zuvor unter Verwendung einfacher Verbrennungsmodelle mit Hilfe des im CFD-Code FLUENT integrierten Pdf-Mischungsbruch-Ansatzes berechnet, welcher in Abschnitt 3.1.1 vorgestellt wird. Zur Beschreibung der Turbulenz wird das Standard- $\tilde{k}$ ,  $\tilde{\epsilon}$ -Turbulenzmodell verwendet.

#### 3.1.1 Pdf-Mischungsbruch-Ansatz

Werden durch Verwendung eines Preprozessors Werte für Massenbrüche der Spezies  $Y_i$ , Dichte  $\rho$  oder Temperatur T als Funktion des Mittelwerts und der Varianz des Mischungsbruchs berechnet, können für diese Skalare turbulente Mittelwerte im CFD-Code FLUENT über sogenannte Look-Up Table mit Hilfe der in Abschnitt 2.4.1 erläuterten Pdf-Integration ermittelt werden. In adiabaten Systemen, in denen die instantane Enthalpie lediglich eine Funktion des instantanen Mischungsbruchs ist, sind die Skalare aus einem zweidimensionalen Look-Up Table, beispielhaft gezeigt in Abbildung 3.1, ablesbar.



Abbildung 3.1: Look-Up Table für einen Skalar  $\phi$  als Funktion des Mittelwerts und der Varianz des Mischungsbruchs in einem adiabaten System

Die Parameter der Tabulierung sind der Mischungsbruch und die Varianz des Mischungsbruchs. Die Varianz des Mischungsbruchs  $\widetilde{Z''^2}$  wird dabei mit dem Maximalwert der Varianz skaliert:

$$\widetilde{Z''}_s = \frac{\widetilde{Z''}^2}{0.25\,\widetilde{Z}(1-\widetilde{Z})}\,.\tag{3.1}$$

Zur Erstellung der Look-Up Tables wird der Präprozessor prePDF benutzt. Mit diesem Präprozessor wird die Umsetzung von Edukten zu Produkten bei der nicht vorgemischten Verbrennung anhand der in Abschnitt 3.1.2 und 3.1.3 beschriebenen Methoden oder mit Hilfe stationärer Flamelets berechnet, die hier jedoch nicht verwendet wurden.

In nicht adiabaten Systemen ist die Enthalpie keine lineare Funktion des Mischungsbruchs. Vielmehr müssen auch Wärmeverluste über Wandwärmefluss und Strahlung berücksichtigt werden. Daher wird für jeden möglichen Enthalpie-Wert ein Look-Up Table benötigt. Daraus resultieren dreidimensionale Look-Up Table, wie in Abbildung 3.2 dargestellt.

Jede Ebene in einem solchen 3D-Look-Up Table entspricht einem normalisierten Wärmeverlust oder -gewinn. Die unterste Ebene entspricht dabei maximalem Wärmeverlust, sodass alle Einträge bei minimaler im Problem definierter Temperatur vorliegen. Die oberste Ebene



Abbildung 3.2: Dreidimensionaler Look-Up Table für einen Skalar  $\phi$  als Funktion des Mittelwerts und der Varianz des Mischungsbruchs sowie des normalisierten Wärmeflusses in einem nicht adiabaten System

repräsentiert maximalen Wärmegewinn. Daher liegen alle Einträge bei der als Maximalwert definierten Temperatur vor. Die Ebene ohne Wärmeverlust oder -gewinn entspricht adiabaten Bedingungen. Die Werte für die Skalare können dann anhand des normalisierten Wärmeübergangs interpoliert werden.

#### 3.1.2 Burke-Schumann Lösung

Unter der Annahme, dass die chemische Umsetzung von Edukten zu Produkten unendlich schnell abläuft, lässt sich die Verbrennung anhand einer irreversiblen Ein-Schritt-Reaktion beschreiben. Die Massenbrüche der chemischen Spezies  $Y_i$  können direkt aus der Reaktionsstöchiometrie ermittelt werden. Die Reaktionsraten der Teilreaktionen oder Informationen über das chemische Gleichgewicht sind nicht erforderlich. Im Limit der unendlich schnellen irreversiblen 1-Schritt-Reaktion existiert nach [19] eine unendlich dünne Fläche chemischen Ungleichgewichts bei  $Z = Z_{st}$ . Ausserhalb dieser Fläche werden die Massenbrüche für den

Brennstoff und den Oxidator entweder zu Null oder sind durch linerare Funktionen von Z darstellbar. Für die Massenbrüche der Produkte können dann entsprechende Abhängigkeiten abgeleitet werden. Unter bestimmten Voraussetzungen kann die Temperatur T ebenfalls als stückweise lineare Funktion von Z ausgedrückt werden, wie in Abbildung 3.3 dargestellt.



Abbildung 3.3: Burke-Schumann Lösung als Funktion des Mischungsbruchs

Da bei dieser idealisierten Form der Betrachtung chemischer Prozesse die vollständige Umsetzung zu Produkten im Moment der Mischung von Brennstoff und Oxidator erfolgt, wird dieses Modell auch mit dem Begriff "Gemischt = Verbrannt" (engl. Mixed is Burned) beschrieben. Im unverbrannten Zustand (Index  $_u$ ) können die Massenbrüche von Brennstoff und Oxidator sowie die Temperatur bei gleicher Diffusivität aller beteiligten Spezies als eindeutige Funktion des Mischungsbruchs dargestellt werden. Aufgrund der Betrachtung der Kinetik in Form einer Ein-Schritt-Reaktion werden allerdings Bildungs- und Dissoziationseffekte von Zwischenprodukten vernachlässigt, sodass auch keine Information über die Massenbrüche der Zwischenprodukte erhalten wird. Weiterhin wird die Maximaltemperatur vor allem im Bereich stöchiometrischer Mischung in der Regel überschätzt, weshalb die Burke-Schumann Lösung hier nicht verwendet wird.

#### 3.1.3 Chemisches Gleichgewicht

Sind die Reaktionen unendlich schnell, im Gegensatz zur Burke-Schumann-Lösung jedoch reversibel, liegen alle Spezies für jeden Wert des Mischungsbruchs Z im chemischen Gleichgewicht vor. Die Molenbrüche  $X_i$  der Spezies i können über einen auf der Minimierung der freien Gibbs'schen Energie [60] basierenden Algorithmus als Funktion des Mischungsbruchs Z bestimmt werden. Dabei werden alle bei der Verbrennung betrachteten chemischen Spezies und somit auch Zwischenprodukte erfasst, ohne detaillierte chemische Produktionsraten zu benötigen. Durch den linearen Zusammenhang zwischen Enthalpie und Mischungsbruch bei Vernachlässigung von Verlusttermen im Mischungsbruchraum entspricht die berechnete Gleichgewichts-Temperatur der adiabaten Flammentemperatur für jeden Wert des Mischungsbruchs. Diese Gleichgewichtslösung ist in Abbildung 3.4 dargestellt.



Abbildung 3.4: Gleichgewichtslösung als Funktion des Mischungsbruchs

Hauptnachteil dieses Ansatzes ist die Vernachlässigung von Nicht-Gleichgewichts-Effekten. Da alle chemischen Spezies entsprechend der Mischung im chemischen Gleichgewicht vorliegen, können z.B. Schadstoffe, deren Bildung und Verbrauch langsamer abläuft als bei den Hauptspezies, nicht korrekt bestimmt werden. Die dazu notwendige Berücksichtigung instationärer Effekte erfordert neben der Betrachtung detaillierter Chemie auch die Betrachtung der zeitabhängigen Vorgänge während der Verbrennung. Dennoch ist die Methode des chemischen Gleichgewichts geeignet, die an der Wärmefreisetzung beteiligten Reaktionen und damit die räumliche Temperaturverteilung sowie die Verteilung der wesentlichen Spezies zu ermitteln.

## 3.2 Kopplung des CFD- und des RIF-Codes

Um die für die Lösung der Flamelet-Gleichungen benötigten Parameter bereitzustellen sowie die mittleren Speziesmassenbrüche aus den Flamelet-Lösungen zu ermitteln, werden zusätzliche Gleichungen im CFD-Code benötigt. Dazu ist ein Interface für das Anbinden eigener Routinen erforderlich, welches in Fluent über sogenannte benutzerdefinierte Funktionen (engl. user defined functions, udf) bereitgestellt wird.

Mit Hilfe der udf erfolgt die Implementierung von Gleichungen für den turbulenten Mittelwert und die Varianz des Mischungsbruchs sowie von Transportgleichungen für die Wahrscheinlichkeit  $\tilde{I}_l$ , ein Flamelet l zu finden. Durch eine udf, die den Zugriff auf externe Programme ermöglicht, wird der Flamelet-Code RIF 3.7 aufgerufen, welcher zu jedem Zeitschritt der Strömungssimulation die Lösung der Flamelet-Gleichungen im Mischungsbruchraum liefert. Die Kopplung der beiden Codes wird in Abbildung 3.5 dargestellt.



Abbildung 3.5: Kopplung des CFD-Codes FLUENT und des Flamelet-Codes RIF

Vom CFD-Code werden nach Berechnung eines Strömungszeitschritts die *Flamelet-Parameter* bereitgestellt, welche zur Formulierung eines eindeutigen Problems angegeben werden müssen. Dies sind im einzelnen die gebietsgemittelte skalare Dissipationsrate  $\widehat{\chi_{st}}$ , konditioniert auf stöchimetrische Mischung  $Z_{st}$ , der mittlere Druck  $\overline{p}$  sowie der untere und obere Grenzwert für den Mischungsbruch,  $Z_l$  bzw.  $Z_r$  und die dazugehörigen Randbedingungen. Dies sind normalerweise die Temperatur und die chemische Zusammensetzung für  $Z_l = 0$  und  $Z_r = 1$ . Abweichende Werte für den linken und rechten Rand des Mischungsbruchs wurden u.a. in [45, 85] diskutiert.

#### 3.2.1 Bereitstellung der Flamelet-Parameter

Die gebietsgemittelte skalare Dissipationsrate wird nach [87] ermittelt, wobei die Oberflächenintegrale in Volumenintegrale umgewandelt werden. Zusätzlich werden die Terme mit der Wahrscheinlichkeit  $\tilde{I}_l$ , ein Flamelet l zu finden, gewichtet. Damit lässt sich Gleichung (2.73) wie folgt erweitern:

$$\widehat{\chi_{\rm st}}(l) = \frac{\int_{V} \widetilde{I}_{l}(\boldsymbol{x}) \,\bar{\rho}(\boldsymbol{x}) \,\widetilde{\chi}_{\rm st}^{3/2}(\boldsymbol{x}) \,\widetilde{P}(Z_{\rm st}) \,dV'}{\int_{V} \widetilde{I}_{l}(\boldsymbol{x}) \,\bar{\rho}(\boldsymbol{x}) \,\widetilde{\chi}_{\rm st}^{1/2}(\boldsymbol{x}) \,\widetilde{P}(Z_{\rm st}) \,dV'}.$$
(3.2)

Die hierin angegebene skalare Dissipationsrate konditioniert auf stöchiometrische Mischung  $\tilde{\chi}_{st}$  wird wie folgt ermittelt (vgl. Gleichung (2.72)):

$$\widetilde{\chi}_{\rm st} = \frac{\widetilde{\chi}(Z)}{\int\limits_{0}^{1} \frac{Z^2}{Z_{\rm st}^2} \frac{\ln Z}{\ln Z_{\rm st}}} \widetilde{P}(Z) dZ$$
(3.3)

Für den jeweiligen Zeitschritt werden nun im RIF-Code die Flamelet-Gleichungen gelöst, welche die Speziesmassenbrüche und die Temperatur als Funktion des Mischungsbruchs und der Zeit liefern. Um ausgehend von diesen instantanen Speziesmassenbrüchen die lokalen turbulenten Mittelwerte im CFD-Code zum Zeitpunkt t zu ermitteln, wird eine Pdf-Integration angewendet. Unter der Annahme, dass sich die Mischungsbruchabhängigkeit der skalaren Dissipationsrate durch Gleichung (2.65) darstellen lässt, können die Flamelet-Lösungen mit

$$Y_i = Y_i(Z, \chi_{\rm st}) \tag{3.4}$$

beschrieben werden. Die turbulenten Mittelwerte der Massenbrüche der chemischen Spezies  $Y_i$  können allgemein mit der Pdf-Integration der Form

$$\widetilde{Y}_i = \int_0^\infty \int_0^1 Y_i(Z) \widetilde{P}(Z,\chi) dZ d\chi$$
(3.5)

und mit Gleichung (3.4) aus der Beziehung

$$\widetilde{Y}_{i} = \int_{0}^{\infty} \int_{0}^{1} Y_{i}(Z, \chi_{\rm st}) \widetilde{P}(Z, \chi_{\rm st}) dZ d\chi_{\rm st}$$
(3.6)

ermittelt werden. Die Pdf zur Bestimmung Favre-gemittelter Werte

$$\widetilde{P}(Z,\chi_{\rm st}) = \frac{\rho P(Z,\chi_{\rm st})}{\overline{\rho}}$$
(3.7)

ist die gemeinsame Pdf von Z und  $\chi_{st}$ . Diese kann mit

$$\widetilde{P}(Z,\chi_{\rm st}) = P(\chi_{\rm st}|Z)\widetilde{P}(Z) \tag{3.8}$$

durch die konditionierte Pdf der skalaren Dissipationsrate  $\tilde{P}(\chi_{st}|Z)$  oder mit der Annahme, dass  $\chi_{st}$  und Z statistisch unabhängig sind, als

$$\widetilde{P}(Z,\chi_{\rm st}) = \widetilde{P}(\chi_{\rm st})\widetilde{P}(Z)$$
(3.9)

dargestellt werden. Für  $\tilde{P}(Z)$  kann z.B. nach [65] eine logarithmische Normalverteilung mit einer Varianz von  $\sigma = 1$  [33] angenommen werden.

Der für die Auswertung von Gleichung (3.6) benötigte funktionale Zusammenhang  $Y_i(Z, \chi_{st})$  wird durch die Lösung der instationären Flamelets gegeben. Damit ergibt sich für die Massenbrüche der chemischen Spezies die Beziehung

$$\widetilde{Y}_i = \int_0^1 Y_i(Z, \widehat{\chi_{\text{st}}}) \widetilde{P}(Z) dZ \,.$$
(3.10)

Mit Hilfe der sogenannten  $\beta$ -Pdf [65], welche als Parameter den Mittelwert und die Varianz des Mischungsbruchs als Funktion des Ortes im CFD-Code benötigt, werden die mittleren Speziesmassenbrüche für den aktuellen Zeitschritt berechnet. Erläuterungen hierzu finden sich in Abschnitt 2.4.1.

Ausgehend von den turbulenten Mittelwerte der chemischen Spezies  $\tilde{Y}_i$  kann die Temperatur durch eine Newton-Iteration aus der Definition der Totalenthalpie

$$\widetilde{h} = \sum_{i=1}^{n_s} \widetilde{Y}_i h_i(\widetilde{T}) , \qquad (3.11)$$

deren räumliche Verteilung im CFD-Code anhand der zusätzlichen Transportgleichung (2.79) ermittelt wird, berechnet werden. Wird das RIF-Modell interaktiv angewendet, folgt somit ein neues Dichtefeld für den aktuellen Zeitschritt im CFD-Code, und die daraus resultierenden Änderungen erfordern eine erneute Berechnung des Strömungsfeldes. Da in dem hier angewendeten Verfahren das Strömungs- und Temperaturfeld zuvor mit im CFD-Code verfügbaren Verbrennungsmodellen berechnet wird und lediglich Schadstoffverteilungen und -emissionen mit dem instationären Flamelet-Code ermittelt werden sollen, wird das Dichtefeld konstant gehalten, und lediglich die instationäre Änderung der Flamelet-Verteilungen wird aktualisiert.

### 3.3 Wandwärmeverluste

Im Mischungsbruchraum ist die Enthalpie h unter der Voraussetzung, dass keine Verluste auftreten, eine lineare Funktion von Z mit den Randbedingungen  $h = h_{Ox}$  auf der Oxidatorseite (Z = 0) und  $h = h_f$  auf der Brennstoffseite (Z = 1):

$$h(Z) = h_{\rm Ox} + (h_{\rm f} - h_{\rm Ox}) Z$$
(3.12)

In realen Anwendungen ist das Strömungsfeld allerdings nicht adiabat, sodass Wärmeverluste, speziell Strahlungswärmeverluste und Wandwärmeverluste, auftreten. Der Einfluss von Wandwärmeverlusten auf die Schadstoffbildung bei der Simulation der dieselmotorischen Verbrennung wurde unter anderem von Hergart et al. [49, 50] untersucht.

In der in Abschnitt 6 diskutierten MILD-Brennkammer wurden für mit  $CO_2$  verdünnten Brennstoff der turbulente Mittelwert der Enthalpie gemäß Gleichung (2.79) jeweils mit und ohne Wärmeverluste sowie der turbulente Mittelwert des Mischungsbruchs gemäß Gleichung (2.77) berechnet. In Abbildung 3.6 ist die mittlere Enthalpie  $\tilde{h}$  als Funktion des mittleren Mischungsbruchs  $\tilde{Z}$  im Strömungsfeld dargestellt.



Abbildung 3.6: Turbulenter Mittelwert der Enthalpie  $\tilde{h}$  als Funktion des turbulenten Mittelwertes des Mischungsbruchs  $\tilde{Z}$  im Strömungsfeld

Für die gezeigte Konfiguration der MILD-Brennkammer mit zusätzlichem Inertgas im Brennstoffstrom liegt der stöchiometrische Wert des Mischungsbruchs bei  $Z_{\rm st} = 0.2449$ . In diesem Bereich treten die größten Verluste auf. Dies ist auch in Abbildung 3.6 erkennbar.

Unter der Annahme, dass in Wandnähe für den mittleren Mischungsbruch  $\widetilde{Z}$  Werte um  $Z_{st}$  auftreten und die Varianz des Mischungsbruchs  $\widetilde{Z''^2}$  klein ist, lassen sich die adiabate und verlustbehaftete mittlere Enthalpie unter Vernachlässigung der Strahlung gemäß Abbildung 3.7 vereinfacht darstellen.

Nach dieser Darstellung verläuft die verlustbehaftete Enthalpie als Funktion des Mischungsbruchs auf den Intervallen  $Z \leq Z_{st}$  und  $Z > Z_{st}$  nun wie folgt:

$$h(Z) = \begin{cases} h_{\rm Ox} + \frac{h_{\rm st} - h_{\rm Ox}}{Z_{\rm st}} & Z & : & Z \le Z_{\rm st} \\ h_{\rm st} + \frac{h_{\rm f} - h_{\rm st}}{1 - Z_{\rm st}} & (Z - Z_{\rm st}) & : & Z > Z_{\rm st} \end{cases}$$
(3.13)

Abbildung 3.8 zeigt die graphischen Zusammenhänge zwischen Enthalpiedifferenz  $\Delta h$  und maximaler Enthalpiedifferenz  $\Delta h_{\rm st}$  bei stöchiometrischer Mischung. Allgemein kann dieser Zusammenhang durch die Beziehung

$$\Delta h = \Delta h_{\rm st}(\boldsymbol{x}, t) \, d(Z) \tag{3.14}$$

beschrieben werden. Bei bekanntem Verlauf der verlustbehafteten Enthalpie gemäß Abbildung 3.7 und 3.8 lässt sich die Funktion d(Z) durch lineare Funktionen von Z auf den Intervallen  $Z \leq Z_{st}$  und  $Z > Z_{st}$  beschreiben:

$$d(Z) = \begin{cases} -\frac{Z}{Z_{\rm st}} & : \quad Z \le Z_{\rm st} \\ -\frac{1-Z}{1-Z_{\rm st}} & : \quad Z > Z_{\rm st} \end{cases}$$
(3.15)

Entsprechend folgt im physikalischen Raum für  $\Delta \tilde{h}(Z, \boldsymbol{x}, t)$  mit Hilfe von  $\Delta \tilde{h}_{st}$ :

$$\Delta h = \Delta h(Z, \boldsymbol{x}, t) = \Delta h_{\rm st}(\boldsymbol{x}, t) \, d(Z) \,. \tag{3.16}$$

Der turbulente Mittelwert der Enthalpiedifferenz entspricht der Differenz aus dem Mittelwert der lokalen Enthalpie im CFD-Code  $\tilde{h}(\boldsymbol{x},t)$  und der Enthalpie des zugehörigen Wertes des Mischungsbruchs  $h(\tilde{Z}(\boldsymbol{x},t))$ :

$$\Delta \widetilde{h}(\boldsymbol{x},t) = \widetilde{h}(\boldsymbol{x},t) - h(\widetilde{Z}(\boldsymbol{x},t)).$$
(3.17)



Abbildung 3.7: Enthalpie h als Funktion des Mischungsbruchs Z



Abbildung 3.8: Enthalpieverlust  $\Delta h$  als Funktion des Mischungsbruchs Z

Somit wird  $\Delta \tilde{h}(\boldsymbol{x},t)$  aus den fluktuierenden Größen  $\Delta \tilde{h}_{st}(\boldsymbol{x},t)$  und  $\tilde{Z}(\boldsymbol{x},t)$  bestimmt. Wird die statistische Unabhängigkeit dieser beiden Größen angenommen, kann der turbulente Mittelwert der Enthalpiedifferenz analog zu Gleichung (3.14) aus der Beziehung

$$\Delta \widetilde{h}(\boldsymbol{x},t) = \Delta \widetilde{h}_{\text{st}} \int_{Z} d(Z) \widetilde{P}(Z) dZ$$
(3.18)

bestimmt werden. Die Größe  $\Delta \tilde{h}_{st}$  repräsentiert den auf  $Z_{st}$  konditionierten Mittelwert der Enthalpiedifferenz. Entsprechend folgt für diesen Wert

$$\Delta \widetilde{h}_{\rm st} = \frac{\Delta \widetilde{h}(\boldsymbol{x}, t)}{\int\limits_{Z} d(Z) \widetilde{P}(Z) dZ} = \frac{\widetilde{h}(\boldsymbol{x}, t) - h(\widetilde{Z}(\boldsymbol{x}, t))}{\int\limits_{Z} d(Z) \widetilde{P}(Z) dZ}.$$
(3.19)

Diese Größe wird bei der numerischen Simulation im CFD-Code für jede Zelle und zu jedem Zeitschritt berechnet und über den betrachteten räumlichen Bereich gemittelt. Dabei werden die Terme mit der Fläche stöchiometrischer Mischung pro Volumeneinheit gewichtet:

$$\widehat{\Delta h_{\rm st}} = \frac{\int\limits_{V} \bar{\rho}(\boldsymbol{x}) \, \Delta \widetilde{h}_{\rm st} \widetilde{P}(Z_{\rm st}) \, dV'}{\int\limits_{V} \bar{\rho}(\boldsymbol{x}) \, d(Z) \widetilde{P}(Z_{\rm st}) \, dV'}$$
(3.20)

Bei der Verwendung mehrerer Flamelets, wie sie in Abschnitt 3.4 beschrieben wird, muss die statistische Verteilung der Flamelets im Strömungsfeld berücksichtigt werden. Daher werden die Terme zusätzlich mit der Wahrscheinlichkeit  $I_l$ , ein Flamelet l zu finden, gewichtet. Somit kann der Gebietsmittelwert für die konditionierte Enthalpiedifferenz  $\widehat{\Delta h_{st}}(l)$  für jedes Flamelet l aus folgender Beziehung ermittelt werden:

$$\widehat{\Delta h_{\rm st}}(l) = \frac{\int\limits_{V} \widetilde{I}_{l}(\boldsymbol{x}) \,\bar{\rho}(\boldsymbol{x}) \,\Delta \widetilde{h}_{\rm st} \widetilde{P}(Z_{\rm st}) \,dV'}{\int\limits_{V} \widetilde{I}_{l}(\boldsymbol{x}) \,\bar{\rho}(\boldsymbol{x}) \,d(Z) \widetilde{P}(Z_{\rm st}) \,dV'}$$
(3.21)

Um nun den Einfluss der Wandwärmeverluste im Flamelet zu berücksichtigen, wird ein zusätzlicher Quellterm  $\dot{q}_{\Delta h}$  in die Flamelet-Gleichung für die Temperatur eingeführt. Gleichung (2.61) lautet damit in erweiterter Form: 1

$$\rho \frac{\partial T}{\partial t} - \rho \frac{\chi}{2} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \rho \frac{\chi}{2c_p} \left( \sum_{i=1}^{n_s} c_{p_i} \frac{\partial Y_i}{\partial Z} + \frac{\partial c_p}{\partial Z} \right) \frac{\partial T}{\partial Z} + \frac{1}{c_p} \left( \sum_{i=1}^{n_s} h_i \dot{m}_i - \frac{\partial p}{\partial \tau} - \dot{q}_R - \dot{q}_{\Delta h} \right) = 0.$$
(3.22)

Mit Hilfe dieses Quellterms wird die Enthalpie im Flamelet als Funktion des Mischungsbruchs entsprechend dem in Abbildung 3.7 gezeigten Verlauf für die verlustbehaftete Enthalpie aus dem Strömungsfeld aufgeprägt. Berechnet wird der Quellterm zu jedem Zeitschritt als Funktion des Mischungsbruchs nach Gleichung (3.23):

$$\dot{q}_{\Delta h} = \frac{\rho}{\Delta t} \left( \widehat{\Delta h_{\text{st},t}}(l) \, d(Z) + h_{\text{lin}}(Z) - h_{t-\Delta t}(Z) \right) \tag{3.23}$$

Darin bezeichnet  $\Delta h_{\text{st},t}(l)$  den Gebietsmittelwert für die konditionierte Enthalpiedifferenz zum Zeitpunkt t,  $h_{\text{lin}}(Z)$  beschreibt den linearen Verlauf der Enthalpie über Z und  $h_{t-\Delta t}(Z)$  den Enthalpieverlauf aus der Flamelet-Lösung des vorangegangenen Zeitschritts. Die Flamelet-Lösungen für die Temperatur in Abhängigkeit der Enthalpie zu drei verschiedenen Zeitpunkten ist in Abbildung 3.9 dargestellt.



Abbildung 3.9: Zeitliche Entwicklung der Temperatur T und der Enthalpie h als Funktion des Mischungsbruchs Z im Flamelet

## **3.4 Das Eulerian Particle Flamelet Modell**

Die Bildung von Schadstoffen bei der Verbrennung setzt ein, wenn ein Fluid-Partikel in einer turbulenten, stationären Diffusionsflamme die Flammenfront passiert. Die chemischen Zeitskalen für  $NO_x$  und Ruß sind deutlich länger als die der Verbrennungsreaktionen, welche für die Wärmefreisetzung verantwortlich sind. Während sich diese Reaktionen schnell an die lokalen Bedingungen anpassen, schreitet die Schadstoffbildung nur langsam voran. Daher ist die Verwendung instationärer Flamelets erforderlich. Diese wurden zuerst von Mauss et al. [67] bei der Simulation von Zünd- und Löscherscheinungen in turbulenten Freistrahl-Diffusionsflammen eingesetzt und bei der numerischen Simulation von Diesel-Motoren [6, 47, 86] und Freistrahl-Diffusionsflammen [23] erfolgreich angewendet .

Bei der Verwendung instationärer Flamelets repräsentiert die skalare Dissipationsrate Turbulenz- und Mischungseinflüsse auf die Verbrennung, und die Änderung dieses Parameters entlang des Weges eines Fluid-Partikels durch das Strömungsfeld beeinflusst die Schadstoffbildung. Das Fluid-Partikel wird bei diesem Verfahren durch ein Flamelet repräsentiert. Die Entwicklung der Lösung für dieses Flamelet ist damit abhängig vom im Strömungsfeld zurückgelegten Weg des Fluid-Partikels. Unter der Annahme, dass verschiedene Fluid-Partikel statistisch unterschiedliche Wege durch das Strömungsfeld zurücklegen und dabei unterschiedliche Änderungen der Flamelet-Parameter entlang des zurückgelegten Weges erfahren, ist die Verwendung mehrerer Flamelets sinnvoll.

Der statistische Weg der Fluid-Partikel wird mit Eulerschen Transportgleichungen für den Massenbruch des Partikels an der Position x beschrieben. Zusätzlich zu den Transportgleichungen des CFD-Codes müssen daher neben Gleichungen für den turbulenten Mittelwert und die Varianz des Mischungsbruchs sowie die Totalenthalpie Transportgleichungen für die Wahrscheinlichkeit  $\tilde{I}_l(x, t)$ , ein Flamelet l an der Stelle x zum Zeitpunkt t zu finden, implementiert werden.

Im Eulerschen Strömungsfeld wird der Transport von nicht diffundierenden Partikeln durch die Advektionsgleichung

$$\frac{\partial I_l}{\partial t} + \boldsymbol{v} \,\nabla \cdot I_l = 0 \tag{3.24}$$

beschrieben. Durch Kombination mit der Kontinuitätsgleichung (2.1) und Multiplikation mit der Dichte  $\rho$  folgt daraus

$$\frac{\partial \rho I_l}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \, \boldsymbol{v} I_l) = 0. \qquad (3.25)$$

Durch Favre-Mittelung für das turbulente Strömungsfeld lassen sich die turbulenten Mittelwerte der Flamelet-Wahrscheinlichkeiten aus den konvektiv-diffusiven Transportgleichungen

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{I}_l}{\partial t} + \nabla \cdot \left( \bar{\rho} \, \tilde{\boldsymbol{v}} \tilde{I}_l \right) - \nabla \cdot \left( \frac{\mu_t}{Sc_t} \nabla \tilde{I}_l \right) = 0 \tag{3.26}$$

ermitteln. In diesen Gleichungen ist  $Sc_t$  die turbulente Schmidt-Zahl für die Flamelet-Wahrscheinlichkeiten  $\tilde{I}_l$ , welche entsprechend den turbulenten Schmidt-Zahlen für den Mischungsbruch und die Varianz des Mischungsbruchs zu 0.7 gesetzt wird.

#### 3.4.1 Flamelet-Initialisierung

Aufbauend auf der stationären Lösung des Strömungs- und Temperaturfeldes werden die Flamelets zu Beginn der instationären Flamelet-Rechnung zum Zeitpunkt  $t_{res} = 0$  s initialisiert. Für die Anfangsverteilung der Partikel werden alle Zellen des Rechengebiets gewählt, in denen brennstoffreiche Bedingungen bei Werten von  $Z > Z_{st}$  für den Mischungsbruch vorliegen und die Temperatur niedriger als ein charakteristischer Wert ist.

Bei der Berechnung der Gasturbinen-Brennkammer wurde dieser Wert zu  $T_{\text{Init}} = 1800 \text{ K}$  und bei der Berechnung der MILD-Brennkammer zu  $T_{\text{Init}} = 1600 \text{ K}$  gewählt, sodass das Initialisierungskriterium wie folgt formuliert werden kann:

$$\widetilde{I}_{l}(\boldsymbol{x}) = \begin{cases} 1 & \text{if } Z_{\text{st}} < \widetilde{Z}(\boldsymbol{x}), T < T_{\text{Init}} \\ 0 & \text{else} \end{cases}$$
(3.27)

Die benötigte Temperaturverteilung wird durch ein einfaches, im CFD-Code FLUENT implementiertes Verbrennungsmodell, z.B. dem Mixture Fraction/Pdf Model [36] in Verbindung mit dem in Abschnitt 3.1.3 vorgestellten Modell für chemisches Gleichgewicht, berechnet. Somit ist sichergestellt, dass die Flamelets in einem Gebiet im Brennstoffstrom initialisiert werden, in dem die Schadstoffkonzentrationen aufgrund der Obergrenze für die Temperatur vernachlässigbar sind.

Die Unterteilung der Flamelets erfolgt anhand der skalaren Dissipationsrate. Das Initialisierungsgebiet wird je nach Anzahl der zu verwendenden Flamelets in Teilgebiete gleicher Masse unterteilt, in denen die skalare Dissipationsrate in einem entsprechenden Bereich liegt (vgl. Abschnitt 6.3). Für die einzelnen Flamelets l wird die konditionierte gemittelte skalare Dissipationsrate  $\widehat{\chi_{st}}(l)$  nach Gleichung (3.2) durch zusätzliche Gewichtung mit der Wahrscheinlichkeit  $\widetilde{I}(l)$ , ein Flamelet l zu finden, berechnet.

#### 3.4.2 Zeitliche Entwicklung der Flameletparameter

Abbildung 3.10 zeigt die Verteilung der auf  $Z_{st}$  konditionierten skalaren Dissipationsrate in der Ebene durch den Haupteinlass der in Abschnitt 5.3 diskutierten Gasturbinen-Brennkammer. Deutlich zu erkennen sind die sehr hohen Gradienten vor allem im Bereich der Einlässe. Maximalwerte treten aufgrund der hohen Turbulenz am Haupteinlass auf. Die gebietsgemittelte skalare Dissipationsrate konditioniert auf stöchiometrische Mischung ist in diesen Bereichen relativ hoch, und das hier initialisierte Flamelet befindet sich nahe der Löschgrenze.



Abbildung 3.10: Verteilung der konditionierten skalaren Dissipationsrate  $\widehat{\chi_{st}}$  in <sup>1</sup>/<sub>s</sub> in Ebene durch Haupteinlass

Abbildung 3.11 zeigt die zeitliche Entwicklung der gebietsgemittelten skalaren Dissipationsrate konditioniert auf stöchiometrische Mischung als zeitabhängigen Flameletparameter in der Gasturbinen-Brennkammer. Der Minimal- und Maximalwert für den Mischungsbruch ist konstant, ebenso der mittlere Druck in der Brennkammer. Deutlich ist der sehr hohe Anfangswert von  $\chi \approx 120 \, \text{l/s}$  zum Zeitpunkt  $t = 0 \, \text{s}$  zu erkennen, welcher Bedingungen nahe dem Verlöschen für das Flamelet bedeutet. Innerhalb kurzer Zeit fällt die skalare Dissipationsrate auf einen Wert um  $\chi \approx 5 \, \text{l/s}$ , bevor sie sich bei  $\chi \approx 7 \, \text{l/s}$  einstellt. Dieser relativ konstante Wert entspricht in der Brennkammer dem Zustand, in dem die Flameletwahrscheinlichkeit kontinuierlich abnimmt, die relative Verteilung der Flameletwahrscheinlichkeit sich aber nicht mehr ändert.



Abbildung 3.11: Zeitliche Entwicklung der gebietsgemittelten skalaren Dissipationsrate in <sup>1</sup>/<sub>s</sub> konditioniert auf stöchiometrische Mischung

#### 3.4.3 Zeitliche Entwicklung der Flamelet-Profile

Als Reaktion auf die zeitliche Änderung der Flameletparameter erfahren auch die Flamelet-Lösungen für die Temperatur und die Speziesmassenbrüche als Funktion des Mischungsbruchs zeitliche Änderungen. Als Beispiele sind Profile der Änderung der Temperatur im Mischungsbruchraum (Abbildung 3.12) sowie die Änderung einiger Speziesmassenbrüche (Abbildung 3.13, 3.14 und 3.15) und des Rußvolumenbruchs (Abbildung 3.16) dargestellt.

In Abbildung 3.12 ist neben der Temperatur auch die Enthalpie im Flamelet dargestellt. Der lineare Verlauf verdeutlicht, dass im Flamelet keine Verlustterme auftreten. Der Temperaturverlauf wird zu Beginn durch die Initialisierung des Flamelets mit Hilfe der Burke-Schumann-Lösung bestimmt (blaue Linie). Anschliessend wurde die Flamelet-Lösung entsprechend der hohen skalaren Dissipationsrate zum Zeitpunkt t = 0 s ermittelt. Im weiteren zeitlichen Verlauf der Flamelet-Parameter wird die Temperatur aufgrund der im wesentlichen zeitlich konstanten gebietsgemittelten skalaren Dissipationsrate im Flamelet nur noch unwesentlich beeinflusst.



Abbildung 3.12: Zeitliche Entwicklung der Temperatur als Funktion des Mischungsbruchs, Enthalpie als Funktion des Mischungsbruchs

Aus Abbildung 3.13 geht hervor, dass die Massenbrüche der Hauptspezies durch die Änderung der skalaren Dissipationsrate zu Beginn der Flamelet-Rechnung verhältnismäßig wenig beeinflusst werden. Die Verteilung dieser Spezies im Mischungsbruchraum ließe sich demnach auch mit stationären Flamelets ermitteln.

Abbildung 3.14 zeigt die zeitliche Entwicklung der Stickoxide im Mischungsbruchraum. Die Bildung von  $NO_x$  wird verglichen mit den wärmefreisetzenden Hauptreaktionen als langsam eingestuft, weshalb hier instationäre Effekte zum Tragen kommen. Da Stickoxide aufgrund der thermischen NO-Bildung nach Zel'dovich [111] vor allem in Gebieten hoher Temperatur gebildet werden, steigen die Profile für NO und NO<sub>2</sub> zu Beginn der Rechnung stark an. Besonders hoch sind die Werte für NO bei  $Z_{st}$ , also im Bereich stöchiometrischer Mischung. Hier liegen im Flamelet die höchsten Temperaturen vor.

In Gebieten fetter Mischung wird NO vor allem über den Prompt NO-Pfad gebildet, da hier die benötigten Kohlenwasserstoff-Radikale vorliegen und die Aktivierungsenergie der entsprechenden Reaktionen niedriger ist als beim thermischen NO. In Gebieten magerer Mischung



Abbildung 3.13: Zeitliche Entwicklung der Hauptspezies als Funktion des Mischungsbruchs

kann NO über den sogenannten Nitrous Path, also den Pfad über N<sub>2</sub>O, gebildet werden. Die Massenbrüche für NO<sub>2</sub> sind fast im gesamten Mischungsbruchbereich um mehr als 2 Größenordnungen niedriger. Zur Bildung von NO<sub>2</sub> aus NO werden OH-Radikale benötigt, die vornehmlich in der Reaktionszone anzutreffen sind.

Die Anderung der Flameletprofile von Kohlenmonoxid ist in Abbildung 3.15 dargestellt. Bei der Brennstoffdissoziation wird CO gebildet, welches zu  $CO_2$  umgesetzt wird. Da bei der Initialisierung der Flamelets mit Hilfe der Burke-Schumann-Lösung CO nicht berücksichtigt wird, nehmen die CO-Anteile bei der Berechnung der tatsächlichen Flameletprofile in den ersten Zeitschritten im Flamelet zunächst zu. Mit zunehmender Zeit verhalten sich die Profile zeitlich konstant.

Der Einfluss der Änderung der skalaren Dissipationsrate auf die Verteilung des Rußvolumenbruchs im Flamelet geht aus Abbildung 3.16 hervor. Hier sind Profile für kleine Zeiten dargestellt, zu denen der Rußvolumenbruch im Flamelet zunimmt. Mit fortschreitender Flamelet-



Abbildung 3.14: Zeitliche Entwicklung der Stickoxide als Funktion des Mischungsbruchs

Zeit wird der Ruß beim Durchqueren der Fläche stoichiometrischer Mischung oxidiert. Dieser Vorgang entspricht dem Rußabbrand in der Zumischzone der Brennkammer.

Die lokalen stationären Speziesmassenbrüche  $\tilde{Y}_i(\boldsymbol{x})$  ergeben sich aus der Integration über die Zeit, der Summation über die Flamelet-Wahrscheinlichkeiten  $\tilde{I}_l$  der Flamelets l, der Integration im Mischungsbruchraum und der Gewichtung mit dem zeitlichen Integral der Flamelet-Wahrscheinlichkeiten:

$$\widetilde{Y}_{i}(\boldsymbol{x}) = \frac{\int_{0}^{t_{end}} \sum_{l} \widetilde{I}_{l}(\boldsymbol{x}, t) \int_{Z} Y_{i,l}(Z, t) \widetilde{P}_{l}(Z) dZ dt}{\int_{0}^{t_{end}} \sum_{l} \widetilde{I}_{l}(\boldsymbol{x}, t) dt}$$
(3.28)

Ausgewählte Ergebnisse für die Speziesverteilungen sind in Abschnitt 5.3 dargestellt.



Abbildung 3.15: Zeitliche Entwicklung von Kohlenmonoxid als Funktion des Mischungsbruchs



Abbildung 3.16: Zeitliche Entwicklung des Rußvolumenbruch als Funktion des Mischungsbruchs

# **Kapitel 4**

# **Chemische Mechanismen**

Die verwendeten Mechanismen zur Simulation der Verbrennung in Gasturbinen- und MILD-Brennkammern beschreiben die Reaktionskinetik des jeweiligen Brennstoffs. Die Gasturbinenbrennkammer wird in den Versuchen mit Kerosin betrieben. Dieser aus einer Vielzahl einzelner Komponenten bestehende Brennstoff wird anhand eines Zwei-Komponenten-Modellbrennstoffs für Kerosin angenähert. Die geeignete aliphatische und aromatische Komponente werden in Abschnitt 4.2 diskutiert. Die Simulation der Verbrennung der mit Methan betriebenen MILD-Brennkammer erfordert die Verwendung eines Reaktionsmechanismus, welcher die Kinetik von Kohlenwasserstoffen mit bis zu vier C-Atomen beschreibt. Dieser Mechanismus wird in 4.1 vorgestellt

Beide Mechanismen beinhalten die Reaktionskinetik zur Beschreibung der Zündung und Brennstoffdissoziation sowie -oxidation. Die  $NO_x$ -Chemie wird durch einen Submechanismus [51] bereitgestellt und berücksichtigt thermische, prompte und N<sub>2</sub>O-Beiträge zur Bildung von  $NO_x$  sowie reburn durch CH-Radikale und NH<sub>x</sub>. Der NO<sub>x</sub>-Submechanismus wird detailliert in Abschnitt 4.3 beschrieben.

# 4.1 $C_1$ – $C_4$ -Kinetik

Der Reaktionsmechanismus zur Berechnung der chemischen Umsetzung von Methan basiert auf einem Basis-Mechanismus für  $C_1$ – $C_2$  Moleküle [8, 71, 103] und wurde für höhere Kohlenwasserstoffe erweitert [64, 66]. Neuere Erweiterungen und Veränderungen wurden von Bikas [9] zusammengefasst. Obwohl reduzierte Mechanismen für diesen Brennstoff erstellt wurden (u.a. [98]), wird hier der vollständige Mechanismus verwendet. Der Mechanismus beinhaltet 523 meist reversible Reaktionen zwischen 58 chemischen Spezies. Die in Abschnitt 4.3 vorgestellten Reaktionspfade zur Bildung und Reduzierung von NO<sub>x</sub> wurde vollständig in den Reaktionsmechanismus integriert. Da in der MILD-Brennkammer keine Rußbildung erfolgt, werden die Reaktionen zur Beschreibung der Rußvorläufer, insbesondere der aromatischen Verbindungen, nicht benötigt. Dieser Mechanismus bildet auch die Grundlage für den n-Dekan-Mechanismus, welcher die Kinetik für die aliphatische Brennstoffkomponente im Kerosin-Modellbrennstoff beschreibt (vgl. Abschnitt 4.2).

## 4.2 Kerosin-Modellbrennstoff

Kerosin ist ein aus natürlichen Rohstoffen hergestelltes Produkt. Seine Zusammensetzung ist durch die in verschiedenen Normen festgelegten Kenndaten beschränkt. Diese Kenndaten erfassen vor allem die für den Turbinenhersteller und die Fluggesellschaften wichtigen Eigenschaften wie beispielsweise Aromatengehalt, Siedeverlauf der Destillation, Viskosität bei verschiedenen Temperaturen, Brennwert, spezifische Dichte (vgl. [2, 108]). Je nach Herkunft und Behandlung der Rohöls ergeben sich daraus verschiedene mögliche Zusammensetzungen des Kerosins, die wiederum jede aus einer unüberschaubaren Anzahl von Einzelkomponenten wechselnder Mengenanteile bestehen.

Bei der numerischen Modellierung der Verbrennung von realen Brennstoffen wie Benzin, Diesel oder Kerosin und der dabei stattfindenden Schadstoffbildung ist es weder sinnvoll noch machbar, den realen Brennstoff durch einen genau die Stoffzusammensetzung wiedergebenden Modellbrennstoff zu beschreiben. Bei der Untersuchung der Zündung, Verbrennung und Schadstoffbildung in Dieselmotoren wurde daher sowohl im Experiment als auch in der numerischen Simulation *n*-Heptan als Brennstoff eingesetzt [90]. Die chemischen und physikalischen Eigenschaften weichen jedoch stark von denen eines realen Dieselkraftstoffs ab. Bei der Modellierung realer Brennstoffe wird daher eine Brennstoffzusammensetzung gewählt, welche auf Schlüsselkomponenten mit bekannter Verbrennungskinetik beschränkt ist. Dabei wird in der Regel ein System aus zwei bis drei Brennstoffkomponenten gewählt, welches in der Summe die Eigenschaften des realen Brennstoffs so gut wie möglich repräsentiert. Für Dieselund Kerosinbrennstoff werden meist Zwei-Komponenten-Modellbrennstoffe verwendet, von denen eine Komponente ein aliphatischer und die andere Komponente ein aromatischer Kohlenwasserstoff ist.

Wird n-Dekan als aliphatische Komponente für die Zusammensetzung des Kerosin-Modellbrennstoffs verwendet, muss der Gesamtreaktionsmechanismus um die Kinetik für die aromatische Komponente erweitert werden. In dieser Arbeit wurde 1,2,4 Trimethyl-Benzol als aromatische Komponente verwendet. Die entsprechende Kinetik sowie eine modifizierte Kinetik für n-Dekan, welche anhand von experimentellen Daten validiert wurde [32, 84],wurden [9] entnommen. Der chemische Reaktionsmechanismus für den Kerosin-Modellbrennstoff besteht damit aus 1171 meist reversiblen Reaktionen zwischen 132 chemischen Komponenten.

Die Reaktionskinetik für den Kerosin-Modellbrennstoff beinhaltet die Bildung von höheren

Kohlenwasserstoffen ( $\rightarrow$  Benzol) und das Wachstum dieser aromatischen Komponenten bis zu 4 Ringen. Das darauf aufbauende Rußmodell wird in Abschnitt 4.4 erläutert. Hinsichtlich der Rußbildung ist die Berücksichtigung der Rußvorläufer von besonderer Bedeutung. Da das Rußmodell für alle Mechanismen gleich ist, haben diese wesentlichen Einfluss auf die Rußemissionen. Die Teilkinetik für die aliphatische Komponente *n*-Dekan im Kerosin-Modellbrennstoff unterscheidet sich von der in [88] für reines *n*-Dekan verwendete Kinetik unter anderem durch folgende an der Benzolbildung beteiligten Reaktionen,

$$\mathbf{C}_{3}\mathbf{H}_{3} + \mathbf{C}_{3}\mathbf{H}_{3} \longleftrightarrow \mathbf{C}_{6}\mathbf{H}_{6} \tag{R4.1}$$

$$\mathbf{C}_{3}\mathbf{H}_{4} + \mathbf{C}_{3}\mathbf{H}_{3} \longleftrightarrow \mathbf{C}_{6}\mathbf{H}_{6} + \mathbf{H}$$
(R 4.2)

$$\mathbf{C}_{6}\mathbf{H}_{6} + \mathbf{H} \longleftrightarrow \mathbf{u} \cdot \mathbf{C}_{6}\mathbf{H}_{7} \tag{R 4.3}$$

$$u-C_6H_7 \longleftrightarrow A_1-C_6H_6+H \tag{R4.4}$$

welche nicht in die neue Kinetik übernommen wurden. Demgegenüber sind folgende Reaktionen in beiden Mechanismen enthalten:

$$\mathbf{C}_{3}\mathbf{H}_{3} + \mathbf{C}_{3}\mathbf{H}_{3} \longleftrightarrow \mathbf{A}_{1} - \mathbf{C}_{6}\mathbf{H}_{6} \tag{R4.5}$$

$$\mathbf{C}_{3}\mathbf{H}_{4} + \mathbf{C}_{3}\mathbf{H}_{3} \longleftrightarrow \mathbf{A}_{1} - \mathbf{C}_{6}\mathbf{H}_{6} + \mathbf{H}$$
(R 4.6)

Reaktionspfadanalysen haben gezeigt, dass Benzol im wesentlichen über diesen Pfad der Propargyl-Propargyl-Kombinationsreaktion gebildet wird, sowie über die Anlagerung von Wasserstoff an Phenyl ( $A_1$ - $C_6H_5$ ). Die Auswirkungen auf die Rußvorläufer werden in den Abbildungen 4.1, 4.2, 4.3 und 4.4 erkennbar.

Im Mechanismus für reines *n*-Dekan aus [88] werden sowohl die Bildung als auch der Verbrauch von Benzol überbewertet. Benzol wird schnell zu höheren Aromaten mit Hilfe des HACA-Mechanismus umgesetzt, und die Konzentration von Benzol liegt unter der mit dem Kerosin-Modellbrennstoff berechneten. Die übrigen gezeigten Komponenten, Naphthalin (A<sub>2</sub>-  $C_{10}H_8$ ), Acenaphthalin (A<sub>2</sub>-  $C_{10}H_8$ ) und A<sub>4</sub>-  $C_{18}H_{10}$ , verhalten sich entsprechend umgekehrt.

Sowohl der Verlauf der Speziesmassenbrüche über dem Mischungsbruch als auch der Maximalwert und dessen Ort sind für alle gezeigten Profile unterschiedlich. Zusammengefasst lässt sich sagen, dass aufgrund der unterschiedlichen Pfade zur Rußvorläuferbildung mit dem Kerosin-Modellbrennstoff weniger höherwertige Aromaten gebildet werden, wodurch geringere Rußemissionen zu erwarten sind, obwohl dieser Brennstoff eine aromatische Komponente enthält.



Abbildung 4.1: Verteilung von  $A_1$ -  $C_6H_6$  als Funktion des Mischungsbruchs



Abbildung 4.2: Verteilung von  $A_2$ -  $C_{10}H_8$  als Funktion des Mischungsbruchs



Abbildung 4.3: Verteilung von  $A_2R_5$ -  $C_{12}H_8$  als Funktion des Mischungsbruchs



Abbildung 4.4: Verteilung von  $A_4$ -  $C_{18}H_{10}$  als Funktion des Mischungsbruchs

# 4.3 NO<sub>x</sub>-Modell

Der bei der Simulation der Schadstoffbildung verwendete  $NO_x$ -Mechanismus wurde vollständig in den detaillierten Reaktionsmechanismus für die verwendeten Brennstoffe integriert. Der  $NO_x$ -Mechanismus berücksichtigt die wichtigsten  $NO_x$ -Bildungs- und Verbrauchspfade. Die Bildung von  $NO_x$  erfolgt über den thermischen und den Prompt Pfad sowie Distickstoffmonoxid-Beiträge (Nitrous NO) zur  $NO_x$ -Bildung. Die Reduzierung der  $NO_x$ -Konzentrationen erfolgt über den sogenannten Reburn-Pfad durch Kohlenwasserstoff-Radikale wie CH und CH<sub>2</sub> sowie Amine (NH<sub>x</sub>).

Der detaillierte  $NO_x$ -Reaktionsmechanismus wurde von Bollig et al. [13, 51] zusammengestellt. Die Kinetik wurde mit Hilfe von Experimenten für verschiedene Flammenkonfigurationen und Parameterbereiche validiert. Die wesentlichen Pfade für die Bildung und den Verbrauch wurden durch eine Reaktionsfluss-Analyse für eine *n*-Heptan-Diffusionsflamme [13] identifiziert. Diese sind schematisch in Abbildung 4.5 dargestellt.

In Verbrennungsprozessen mit Temperaturen größer als 1800 K ist üblicherweise die thermische NO-Bildung nach Zel'dovich [111] der wichtigste Pfad [70], welcher über folgende Reaktionsschritte abläuft:

$$N_2 + O \longleftrightarrow NO + N$$
 (R 4.7)

$$O_2 + N \longleftrightarrow NO + O$$
 (R 4.8)

Diese wurden von Lavoie [63] um einen dritten Reaktionsschritt erweitert:

$$N + OH \longleftrightarrow NO + H$$
 (R 4.9)

Dieser sogenannte erweiterte Zel'dovich-Mechanismus ist aufgrund der Reaktion (R 4.7) stark temperaturabhängig. Da weiterhin ein Sauerstoff-Radikal benötigt wird, läuft dieser Mechanismus unter stöchiometrischen bis mageren Bedingungen ab. In Gebieten fetter Mischung kann es auch zur Rückbildung von NO nach  $N_2$  kommen.

In Dieselmotoren und Gasturbinen-Brennkammern ist dieser Pfad maßgebend für die Bildung von  $NO_x$ . Der Beitrag der übrigen Pfade (Prompt NO, Nitrous NO, Reburn und De- $NO_x$ ) ist in der Regel um eine Größenordnung geringer. Bei der Verwendung von Abgasrückführung steigt der Anteil des Prompt NO-Pfades an.

Der Prompt NO- oder Fenimore [35] Pfad wird durch den Angriff kleiner Kohlenwasserstoff-Radikale auf molekularen Stickstoff eingeleitet und erhält daher in Gebieten fetter Mischung höhere Bedeutung. Die Initiierungsreaktion bewirkt die Bildung von HCN, in der Regel über CH-Angriffe:

$$\mathsf{CH} + \mathsf{N}_2 \longleftrightarrow \mathsf{HCN} + \mathsf{N} \tag{R 4.10}$$



Abbildung 4.5: Reaktionsfluss-Analyse einer *n*-Heptan–Diffusionsflame für p = 40 bar und  $\chi = 1 s^{-1}$  von Bollig [12]

Das HCN reagiert über CN oder NCO zu atomarem Stickstoff, welcher zum Beispiel über Reaktion (R 4.8) NO bildet. Die Aktivierungsenergie von Reaktion (R 4.10) ist deutlich niedriger als die von Reaktion R 4.7. Daher hängt die prompte NO-Bildung nicht so stark von der Temperatur ab und wird demnach im Bereich niedrigerer Temperaturen und fetter Mischung wichtig. Der Distickstoffmonoxid-Bildungspfad wird durch die Bildung von  $N_2O$  aus molekularem Stickstoff über die Reaktionen

$$N_2 + OH \longleftrightarrow N_2O + H$$
 (R 4.11)

und

$$N_2 + O + M \longleftrightarrow N_2O + M \tag{R4.12}$$

eingeleitet. Bei Reaktion (R 4.12) handelt es sich um eine trimolekulare Rekombinationsreaktion, welche im Bereich hoher Drücke, welche im Dieselmotor und in abgeschwächter Form in Gasturbinen-Brennkammern auftritt, an Bedeutung gewinnt. Unter mageren Mischungsbedingungen kann NO dann direkt über

$$N_2O + O \longleftrightarrow 2 NO$$
 (R 4.13)

gebildet werden. In brennstoffreichen Gebieten sind Reaktionspfade über NH schneller.

Die Reduzierung von NO über den Reburn-Pfad wird gemäß der Reaktion

$$NO + HCCO \longleftrightarrow HNCO + CO$$
 (R 4.14)

eingeleitet. Trifft das Ketenyl-Radikal auf NO, wird HNCO gebildet, welches über  $NH_2$  auf den in Abbildung 4.5 dargestellten Pfaden zu NH und weiter zu  $N_2O$  oder  $N_2H$  und schließlich zu molekularem Stickstoff reagiert. Da entlang dieser Pfade jeweils ein weiteres NO verbraucht wird, können durch Zugabe entsprechender Komponenten bereits gebildete Stickoxide reduziert werden.

### 4.4 Rußmodell

Die Rußbildung in Flammen ist ein komplexer chemischer und physikalischer Vorgang, bei dem innerhalb weniger Millisekunden aus einfachen Kohlenwasserstoffen Partikel entstehen, die aus mehr als 10<sup>6</sup> Kohlenstoffatomen bestehen. Nach heutiger Vorstellung entstehen Rußpartikel durch die Koagulation von polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen (engl. polycyclic aromatic hydrocarbons, PAH). Diese haften untereinander durch Van-der-Waals'sche Kräfte und bilden so dreidimensionale Strukturen aus. Deren Koagulation führt zur Entstehung erster Rußpartikel.

Das weitere Wachstum der Partikel erfolgt durch PAH-Anlagerung oder den H-Abstraction- $C_2H_2$ -Addition oder kurz HACA Mechanismus, welcher heterogene Oberflächenreaktionen zwischen der Gasphase und den aktiven Stellen der PAH beschreibt. Dies führt zur Anlagerung von Acetylenmolekülen ( $C_2H_2$ ). Die Oxidation der Rußpartikel geschieht durch heterogene Reaktionen mit Hydroxylradikalen (OH) und molekularem Sauerstoff. Die Bildung, das Wachstum und die Oxidation von Rußpartikeln werden durch ein kinetisch basiertes Modell nach Frenklach et al. [39–41] und Mauss [66] beschrieben. Diese Vorgänge lassen sich in folgende Schritte unterteilen:

- Die Bildung des ersten aromatischen Rings (Benzol),
- die Bildung, das Wachstum sowie die Oxidation der PAHs und
- die Bildung, das Wachstum und die Oxidation von Rußpartikeln durch Oberflächenreaktionen und Koagulationsprozesse.

Die Modellierung dieser einzelnen Teilschritte zur Rußbildung und -oxidation wird im Folgenden erläutert.

#### 4.4.1 Benzolbildung

Die Bildung und das Wachstum kleiner PAHs beginnt mit der Bildung des ersten aromatischen Rings (Benzol). In der Literatur werden verschiedene Reaktionspfade zur Bildung von Benzol genannt. Nach Frenklach et al. [40] und Westmoreland [105] können Phenyl und Benzol durch Anlagerung von Acetylen an n-C<sub>4</sub>H<sub>3</sub> oder n-C<sub>4</sub>H<sub>5</sub> und anschließenden Ringschluss gebildet werden. Unter hohen Temperaturen, bei denen die aromatischen Komponenten gebildet werden, sind diese Reaktionen unter Umständen zu vernachlässigen, da die Radikale bei Flammentemperaturen leicht dissoziieren. Zusätzlich existieren stabilere Isomere zu den Radikalen (*i*-C<sub>4</sub>H<sub>3</sub> und *i*-C<sub>4</sub>H<sub>5</sub>), welche entsprechend weniger reaktionsfreudig sind. Diese treten in höheren Konzentrationen auf, wodurch die oben genannten Reaktionspfade noch unbedeutender werden.

Ein weiterer Reaktionspfad für Benzol über die Propargyl-Propargyl Rekombination wurde von Stein vorgeschlagen [100]. Das Propargyl ( $C_3H_3$ ) ist ebenso wie  $n-C_4H_3$  und  $n-C_4H_5$ resonanzstabilisiert und geht mit stabilen Molekülen nur schwache Bindungen ein. Daher liegt  $C_3H_3$  in Flammenzonen in hoher Konzentration vor (vgl. Miller et al.[72]) und trägt damit maßgeblich zur Bildung von Benzol bei. Dieser Pfad sowie die Bildung kleiner PAHs bis zu vier aromatischen Ringen sind im Reaktionsmechanismus für den Kerosin-Modellbrennstoff integriert.

#### 4.4.2 PAH-Wachstum

Das weitere Wachstum zu größeren ebenen PAHs kann durch verschiedene Modelle beschrieben werden, welche diesen Prozess als Polymerisation beschreiben. Frenklach [37, 38, 41] führte den Begriff des linearen Lumpings für die statistische Beschreibung der Polymerisation ein. Die PAHs wachsen durch den HACA-Mechanismus. Dabei werden die PAHs entsprechend ihrer Größe in Polymerisationsstufen unterteilt, welche jeweils aus sechs Molekülstrukturen bestehen. Die Differentialgleichungen für jede mögliche PAH-Struktur werden durch Erhaltungsgleichungen für die statistischen Momente der Größenklassen ersetzt.

Eine weitere Methode wurde von Mauss [66] vorgeschlagen. Diese basiert auf Steady-State-Annahmen für die PAHs und liefert ein System algebraischer Gleichungen. Das Wachstum der PAHs wird wiederum durch den HACA-Mechanismus beschrieben, und der Verbrauch von PAHs erfolgt entweder durch Oxidation oder physikalische Prozesse, welche zur Bildung und zum Wachstum von Rußteilchen beitragen. Diese Methode wurde von Pitsch vereinfacht [85]. Die Nukleation und Kondensation werden gegenüber dem Polymerisationsprozess als schnell angenommen, sodass höhere PAHs direkt verbraucht werden und lediglich auf der ersten Stufe der Polymerisation nennenswerte Anteile an PAHs auftreten. Durch Berechnungen der Rußemissionen bei der dieselmotorischen Verbrennung sowie der einzelnen Polymerisationsstufen konnte die Gültigkeit dieser Annahme gezeigt werden, weshalb dieses Modell hier Verwendung findet.

#### 4.4.3 Bildung, Wachstum und Oxidation von Rußpartikeln

Die Größe der Rußteilchen variiert von sehr kleinen Rußpartikeln mit 36 C-Atomen bis zu theoretisch unendlicher Größe. Um die Menge des gebildeten Ruß zu beschreiben, wurde die Anzahldichte  $N_j$  für Rußpartikel der Größenklasse j definiert:

$$N_j = \frac{\rho Y_j}{W_j} \,. \tag{4.1}$$

Hierfür formulierte Pitsch [92] analog zu Gleichung (2.52) unter Verwendung eines einfachen Diffusionsmodells nach Gleichung (2.57) und unter Berücksichtigung des thermophoretischen Transports eine Transportgleichung im physikalischen Raum:

$$\rho \frac{\partial N_j / \rho}{\partial t} + \rho v_\alpha \frac{\partial N_j / \rho}{\partial x_\alpha} - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left( \rho D_{p,j} \frac{\partial N_j / \rho}{\partial x_\alpha} \right) - \frac{\partial}{\partial x_\alpha} \left( 0.55 \frac{\mu}{T} \frac{N_j}{\rho} \frac{\partial T}{\partial x_\alpha} \right) - \dot{N}_j = 0, \quad j = 1, \dots, \infty$$

$$(4.2)$$

 $D_{p,j}$  ist der Diffusionskoeffizient eines Partikels der Größenklasse j. Die Größenklasse j ist durch die Masse eines Rußteilchens

$$m_i = j m_1 \tag{4.3}$$

definiert, wobei  $m_1$  die kleinste im Rußteilchen auftretende Masseneinheit darstellt, welche unter Vernachlässigung der Masse des Wasserstoffs durch die Masse von  $C_2$  gegeben ist. Der Diffusionskoeffizient  $D_{p,j}$  variiert mit dem Partikeldurchmesser  $d_j^{-2}$  der Größenklasse j [42]. Für die Annahme spärischer Rußpartikel wird der Diffusionskoeffizient zu

$$D_{p,j} = j^{-2/3} D_{p,1} , (4.4)$$

und für die Lewis-Zahl Le<sub>p,j</sub> der Partikel der Größenklasse j gilt

$$Le_{p,j} = j^{2/3}Le_1$$
. (4.5)

Die Lewis-Zahl der ersten Größenklasse Le<sub>1</sub> wird entsprechend dieser Beziehung aus der Lewis-Zahl von Benzol (A<sub>1</sub>- $C_6H_6$ ) mit 3 Masseneinheiten  $C_2$  (j = 3) zu Le<sub>p,1</sub>  $\approx 0.5 Le_{A_1}$  bestimmt.

In Gleichung (4.2) beschreibt der Quellterm  $N_j$  die Änderung der Anzahldichte  $N_j$  aufgrund chemischer und physikalischer Prozesse. Diese lassen sich wie folgt unterteilen:

- Die PAHs können untereinander koagulieren und so erste Rußpartikel bilden. Diese Entstehung der Rußpartikel wird auch als Nukleation bezeichnet. Dadurch wird die Anzahl der Rußpartikel erhöht. Ferner können PAHs auf bereits bestehenden Rußpartikeln kondensieren und so zum Wachstum dieser Partikel beitragen.
- Koagulieren bereits bestehende Rußpartikel untereinander, wird die Zahl der Partikel bei gleichzeitigem Partikelwachstum verringert.
- Durch Interaktion mit der Gasphase wird die Größe der Rußpartikel verringert oder erhöht. Dies geschieht anhand heterogener Oberflächenreaktionen in Form von Oxidation und Oberflächenwachstum (vgl. [68]).

Diese Koagulationsprozesse werden mit der Koagulationsgleichung von Smoluchowski [42] für den freien molekularen Bereich beschrieben

$$\frac{dN_i}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{i-1} \beta_{j,i-1} N_j N_{i-j} - \sum_{j=1}^{\infty} \beta_{i,j} N_i N_j \,. \tag{4.6}$$
Der darin enthaltene Frequenzfaktor kann unter den hier getroffenen Annahmen als

$$\beta_{i,j} = C \left(\frac{1}{i} + \frac{1}{j}\right)^{1/2} \left(i^{1/3} + j^{1/3}\right)^2 \tag{4.7}$$

ausgedrückt werden. Der Faktor C berechnet sich zu

$$C = 2.2 \left(\frac{8\pi R_m T}{W_{C_2}}\right) \left(\frac{3W_{C_2}\sqrt{N_A}}{4\pi\rho_s}\right)^{2/3} \qquad \left[\frac{\mathrm{m}^3}{\mathrm{kmol}\,\mathrm{s}}\right] \,. \tag{4.8}$$

Der erste Term der rechten Seite in Gl. (4.6) beschreibt die Bildung von Partikeln der Größenklasse *i* und der zweite Term deren Verbrauch. Die Auswertung dieser Gleichung folgt Frenklach et al. [39] und Mauss [66].

Nach Einführung von Gleichung (4.5) in Gleichung (4.2) kann unter Verwendung der Transformationsregeln aus Gleichung (2.55) mit  $\text{Le}_j \neq 1$  eine Flamelet-Gleichung für die Rußteilchendichte hergeleitet werden [85,92]:

$$\rho \frac{\partial N_j}{\partial \tau} - \frac{\rho \chi}{2} j^{-2/3} \frac{\text{Le}_Z}{\text{Le}_{p,1}} \frac{\partial^2 N_j / \rho}{\partial Z^2} - 0.55 \frac{\chi}{2} \frac{\text{Le}_Z}{\text{Pr}} \frac{N_j}{T} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{1}{4} \left[ 2\rho \chi j^{-2/3} \frac{\partial}{\partial Z} \left( \frac{\text{Le}_z}{\text{Le}_{p,1}} \right) + \left( j^{-2/3} \frac{\text{Le}_z}{\text{Le}_{p,1}} - 1 \right) \left( \frac{\partial \rho \chi}{\partial Z} + \rho \chi \text{Le}_Z \frac{c_p}{\lambda} \frac{\partial}{\partial Z} \left( \frac{\lambda}{cp \text{Le}_Z} \right) \right) \right] \frac{\partial N_j / \rho}{\partial Z} \quad (4.9) - \frac{0.55}{4} \left[ 2\chi \frac{N_j}{T} \frac{\partial}{\partial Z} \left( \frac{\text{Le}_Z}{\text{Pr}} \right) + \frac{\text{Le}_Z}{\text{Pr}} \left( \frac{\partial N_j \chi / T}{\partial Z} + \rho \chi \text{Le}_Z \frac{c_p}{\lambda} \frac{\partial}{\partial Z} \left( \frac{N_j \lambda / T}{c_p \text{Le}_Z} \right) \right) \right] \frac{\partial T}{\partial Z} - \dot{N}_j = 0, \qquad j = 1, \dots, \infty$$

Zur Berechnung der Rußmasse im Mischungsbruchraum mit Hilfe von Gleichung (4.9) wird statt der Lösung unendlich vieler Gleichungen für die Größenklassen j eine statistische Methode nach Frenklach [39] verwendet. Die statistischen Momente sind durch

$$M_r = \sum_{j=1}^{\infty} j^r N_j, \qquad r = 0, \dots, \infty$$
 (4.10)

definiert. Durch Multiplikation von Gleichung (4.9) mit  $j^r$  und Summation über alle j ergibt sich nach Einführung von Gleichung (4.10)

$$\begin{split} \rho \frac{\partial M_r}{\partial \tau} &- \frac{\rho \chi}{2} \frac{\text{Le}_Z}{\text{Le}_{p,1}} \frac{\partial^2 M_{r-2/3} / \rho}{\partial Z^2} \\ &- 0.55 \frac{\chi}{2} \text{Pr} \text{Le}_Z \frac{M_r}{T} \frac{\partial^2 T}{\partial Z^2} - \frac{\rho \chi}{2} \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{\text{Le}_Z}{\text{Le}_{p,1}}\right) \frac{\partial M_{r-2/3} / \rho}{\partial Z} \\ &- \frac{1}{4} \left(\frac{\partial \rho \chi}{\partial Z} + \rho \chi \text{Le}_Z \frac{c_p}{\lambda} \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{\lambda}{c_p \text{Le}_Z}\right)\right) \left(\frac{\text{Le}_Z}{\text{Le}_{p,1}} \frac{\partial M_{r-2/3} / \rho}{\partial Z} - \frac{\partial M_r / \rho}{\partial Z}\right)_{(4.11)} \\ &- \frac{0.55}{4} \left[2 \chi \frac{M_r}{T} \frac{\partial \text{Pr} \text{Le}_Z}{\partial Z} \\ &+ \text{Pr} \text{Le}_Z \left(\frac{\partial M_r \chi / T}{\partial Z} + \rho \chi \text{Le}_Z \frac{c_p}{\lambda} \frac{\partial}{\partial Z} \left(\frac{\lambda M_r}{\rho c_p \text{Le}_Z T}\right)\right)\right] \frac{\partial T}{\partial Z} \\ &- \dot{M}_r = 0, \qquad r = 0, \dots, \infty \,. \end{split}$$

Die in dieser Gleichung auftretenden gebrochenen Momente werden durch logarithmische Interpolation erster Ordnung bestimmt. Die Quellterme wurden mit  $\dot{M}_r$  bezeichnet und bestimmen sich aus

$$\dot{M}_r = \sum_{j=1}^{\infty} j^r \dot{N}_j, \quad r = 0, \dots, \infty.$$
 (4.12)

Es können beliebig viele Momente zur Erzielung einer hohen Genauigkeit benutzt werden. Pels-Leusden [77] untersuchte den Einfluss der Berücksichtigung von drei Momenten auf die Berechnung der Rußkonzentration in laminaren Gegenstrom-Diffusionsflammen. Mit Hilfe des dritten Moments konnten in Bereichen verstärkter Partikelbildung leichte Verbesserungen bei der Berechnung der Partikeldurchmesser erzielt werden. Eine signifikante Auswirkung auf die Berechnung der Rußkonzentration konnte jedoch nicht beobachtet werden. In dieser Arbeit werden demnach nur die Gleichungen für die ersten beiden Momente gelöst, welchen eine einfache physikalische Bedeutung zukommt. Das Moment  $M_0$  ist nach Gleichung (4.10) die Summe der Rußteilchendichten aller Größenklassen und gibt damit die Anzahl der Partikel pro Volumen an. Für das Moment  $M_1$  wird die Partikeldichte jeder Klasse mit der jeweiligen Anzahl  $C_2$  pro Partikel gewichtet. Daher entspricht  $M_1$  der Anzahl  $C_2$  pro Volumen. Aus dieser Größe kann der Rußvolumenbruch mit  $W_{C_2} = 24 \text{ kg/kmol}$  und der Rußdichte von  $\rho_s = 1800 \text{ kg/m}^3$  zu

$$f_V = \frac{W_{\mathsf{C}_2}}{\rho_s} M_1 \tag{4.13}$$

bestimmt werden. Unter der Annahme sphärischer Partikel ergibt sich der mittlere Partikeldurchmesser zu

$$d_p = \sqrt[3]{\frac{6}{\pi\rho_s} \frac{W_{\mathbf{C}_2}}{N_A} \frac{M_1}{M_0}} \approx 3.48 \times 10^{-10} \sqrt[3]{\frac{M_1}{M_0}} \,[m] \,, \tag{4.14}$$

wobei  $N_A$  die Avogadrokonstante ist.

In Gebieten mit fetter Mischung treten in der Flamme Partikel mit einem Durchmesser  $d_p > 10$  nm auf. Nach Gleichung (4.14) bestehen diese Partikel bereits aus mehr als 20 000 C<sub>2</sub>, und die Lewis-Zahl dieser Partikel ist etwa 500 mal größer als die von Benzol. Der gewöhnliche Diffusionsfluß der Rußpartikel [17] verschwindet, wodurch in Gleichung (4.9) alle Terme mit  $j^{2/3}$  und entsprechend in Gleichung (4.11) alle Terme mit  $M_{r-2/3}$  klein sind. Von der gewöhnlichen Diffusion verbleibt nur der Term  $\frac{1}{4} \frac{\partial \rho \chi}{\partial Z} \frac{\partial M_r / \rho}{\partial Z}$ , der formal einen konvektiven Term darstellt. Dieser Term beschreibt den relativen Fluß der Rußpartikel gegen den Mischungsbruch in Richtung fetter Mischung aufgrund der Diffusion im physikalischen Raum zum Mageren hin. Die in dieser Arbeit berechneten Ergebnisse wurden ausschließlich unter Vernachlässigung differentieller Diffusion für Ruß ermittelt.

Die Quellterme  $\dot{M}_r$  in Gleichung (4.11) schließen die Bildung von Partikeln durch Koagulation von PAH-Molekülen ein, welche ab einer Größe von vier aromatischen Ringen erlaubt ist. Ferner enthalten sie die Koagulation der PAH mit Rußteilchen und das damit verbundene Anwachsen der Rußmasse sowie die Koagulationen von Rußteilchen, welche eine Vergrößerung der Partikel unter Abnahme der Teilchendichte bewirkt.

# **Kapitel 5**

# Gasturbinen-Brennkammer

Gasturbinen werden als Antriebsaggregat von Flugzeugen und Helikoptern in der zivilen und militärischen Luftfahrt genutzt. Des weiteren werden sie in stationärer Form zur Stromerzeugung in Gasturbinenkraftwerken und Gas- und Dampfturbinen- oder GuD-Kraftwerken eingesetzt. Gasturbinenkraftwerke sind in ihrer Bauweise kompakt und daher flexibel einsetzbar. Einheiten mit hoher Zuverlässigkeit werden für Leistungen von zwischen einem und 100 MW gebaut und sind daher auch für dezentrale Energieversorgung geeignet. In Kraft-Wärme-Kopplungsanlagen werden Gasturbinen mittlerweile als Alternative zu dieselmotorischen Blockheizkraftwerken bei der Strom- und Prozesswärmeerzeugung eingesetzt.

Aus sicherheitstechnischen Überlegungen werden die Brennkammern in der Regel als Diffusionsflammen-Brennkammern ausgelegt, mittlerweile werden aber auch vermehrt partiell vorgemischte Verbrennungskonfigurationen erarbeitet [15]. Obwohl die Abgasnachbehandlung weit weniger aufwändig ist als z.B. bei Kohlekraftwerken, welche z.B. eine Entschwefelung der Abgase erfordern, unterliegen auch Gasturbinen strengen Auflagen zur Verminderung der Emission von unverbrannten Kohlenwasserstoffen, Ruß und vor allem Stickoxiden.

Eine ähnliche Problematik findet sich auch bei den Flugzeuggasturbinen. Diese haben aufgrund des maximalen Leistungsbedarfs vor allem beim Start einen hohen Schadstoffausstoß. Zu diesem Zweck werden unter anderem gestufte Brennkammern in Gasturbinen eingesetzt. Diese bestehen aus einer Pilotstufe für hohe Stabilität des Verbrennungsprozesses bei niedrigem Lastbetrieb und einer Hauptstufe mit schnellem Übergang von fetter zu magerer Mischung, welcher erst bei hoher Leistung zugeschaltet wird. Somit lassen sich geringe Ruß- und Stickoxidemissionen bei Volllastbetrieb erzielen. Abbildung 5.1 zeigt schematisch den Aufbau einer gestuften Brennkammer.

Der flüssige Brennstoff wird mit Hilfe einer Luftdrallzerstäuberdüse dem Brennraum am jeweiligen Einlass zugeführt. Die rasche und intensive Vermischung dieser Drallströmung mit dem Hauptstrom des Pilot- und Hauptbrenners ist von essentieller Bedeutung für den Ausbrenngrad, die Schadstoffbildung und das Temperaturprofil am Austritt der Brennkammer, das



Abbildung 5.1: Gestufte Gasturbinen-Brennkammer

für die nachfolgende Turbine von Bedeutung ist. Durch spezielle Materialeigenschaften sowie Schaufelkühlung konnte die maximale Eintrittstemperatur in die Turbine erhöht werden. Dennoch ist aufgrund von Materialermüdung, Kriechen und andere Belastungen darauf zu achten, dass die Temperatur nahe der Turbinenachse niedriger ist als im äußeren Bereich.

## 5.1 Experimenteller Aufbau

Die zur Verfügung gestellten Messdaten wurden an einem experimentellen Aufbau zur Durchführung von Rigversuchen bei Rolls-Royce Deutschland ermittelt, welcher in Abbildung 5.2 dargestellt ist. Betrachtet wurde ein 90° Sektor einer BMW Rolls-Royce axial gestuften Brennkammer einer Flugzeug-Gasturbine, bestehend aus 5 Segmenten mit je einem Pilot- und Hauptbrennstoffeinlass. Vermessen wurden reduzierte Takeoff-Bedingungen, skaliert auf die Prüfstandbedingung  $P_{max} = 20$  bar. Es wurden Messungen von Temperatur, Ruß und NO<sub>x</sub> sowie CO, CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O in der Auslassebene durchgeführt. Des weiteren wurden Geschwindigkeitsmessungen an Injektoren durch LDA-Messungen in der kalten Strömung vorgenommen und anschließend auf die tatsächliche Temperatur unter der Voraussetzung konstanten relativen Druckabfalls skaliert.



Abbildung 5.2: Schema des experimentellen Aufbaus

In Tabelle 5.1 sind zwei der verschiedenen Betriebspunkte zusammengestellt, für die bei Rolls-Royce Deutschland Messungen durchgeführt wurden. Numerisch untersucht wurden die Betriebspunkte 100% Takeoff sowie die Air Fuel Ratio Variation 100%-40%. Bei der Air Fuel Ratio Variation werden die Betriebsbedingungen Druck, Eintrittstemperatur, Brennstoffmassenstrom der Pilotbrenner und Luftmassenstrom konstant gehalten, während der Brennstoffmassenstrom der Hauptbrenner um 40% vermindert wird.

Betriebspunkt		Fuelflow [kg/s]	Airflow [kg/s]	AFR [-]
Α	100% Takeoff	0.028267	1.194	42.24
В	100%-40% AFR Variation	0.019037	1.182	62.09

Tabelle 5.1: Betriebspunkte für den Prüfstand

## 5.2 Gitter für die Gasturbinen-Brennkammer

Abbildung 5.3 zeigt eine Skizze des bei den numerischen Simulationsrechnungen verwendeten Gitters. Das unstrukturierte Gitter repräsentiert ein Segment des 90° Sektors der Versuchsanordnung. Das 18° Segment enthält je einen Haupt- und Pilot-Brennstoffeinlass, letzterer geteilt in den Symmetrieebenen. Die sogenannten Mixing Jets sind in den inneren und äußeren Brennraumwänden über den Umfang verteilt. Sie dienen der Durchmischung der Strömung sowie der Ausbildung des am Austritt geforderten Temperaturprofiles. Die Anordnung der Einlässe ist in



Abbildung 5.3: Gitter für 18° Sektor der Gasturbinen-Brennkammer

Abbildung 5.4 dargestellt. Das Gitter bildet einen 18° Ausschnitt der gesamten Ringbrennkammer ab. Die seitlichen Begrenzungen erhalten periodische Randbedingungen. Es besteht aus ca. 350 000 Gitterpunkten.



Abbildung 5.4: Einlässe am 18° Sektor der Gasturbinen-Brennkammer

## 5.3 Ergebnisse für die Gasturbinen-Brennkammer

Die Berechnung des stationären Strömungsfeldes und der Temperaturverteilung mit dem CFD-Code FLUENT liefert den Ausgangspunkt für die Verwendung des Eulerian Partikel Flamelet Modells im Postprocessing. Die Temperaturverteilung wird mit Hilfe eines einfachen Verbrennungsmodells berechnet, welches auf der Annahme chemischen Gleichgewichts beruht. Das Dichtefeld wird während der instationären Flamelet-Rechnung als konstant angenommen.

Zum Zeitpunkt t = 0 s werden die Flamelets anhand der in Abschnitt 3.4.1 diskutierten Kriterien initialisiert. Abbildung 5.5 verdeutlicht das Initialisierungsgebiet anhand des eingegrenzten Bereichs. In diesem Bereich sind die Temperaturen niedriger als 1800 K, und der mittlere Mischungsbruch ist größer als  $Z_{st}$  (vgl. Gleichung (3.27)). Somit erfolgt die Initialisierung in der brennstoffreichen Zone nahe des Einlasses, und die Bildung von Schadstoffen wird aufgrund der Temperatur in diesem Bereich vernachlässigt.

Zur Verdeutlichung der Verwendung mehrerer Flamelets ist das Initialisierungsgebiet in Abbildung 5.6 schematisch in zwei Teilgebiete gleicher Flamelet-Masse unterteilt. Die skalare Dissipationsrate variiert im gesamten Initialisierungsgebiet um mehrere Größenordnungen und dient damit als Kriterium für die Aufteilung des Initialisierungsgebiets. Die mit den beiden Flamelets assoziierte Masse wird statistisch gesehen auf unterschiedlichen Pfaden durch das Strömungsfeld transportiert. Dadurch werden für die Berechnung der instationären Flamelet-Lösungen unterschiedliche Verläufe der Flamelet-Parameter aufgeprägt.



Abbildung 5.5: Temperatur aus Berechnungen mit Gleichgewichts-Chemie



Abbildung 5.6: Flamelet-Initialisierung in einer Gasturbinen-Brennkammer

Die PDF der Verweilzeit der Partikel ist gegeben durch

$$P(t) = \frac{\frac{dc(t)}{dt}}{\int_0^\infty \frac{dc(t)}{dt}dt}.$$
(5.1)

Wird die Konzentrationsänderung der Partikel über den Massenstrom der die Brennkammer verlassenden Flamelets ausgedrückt, folgt die PDF der Verweilzeit zu

$$P(t) = \frac{\dot{m}_l(t)}{\int_0^\infty \dot{m}_l(t) \, dt} \,.$$
(5.2)

Der Massenstrom eines solchen Flamelets durch den Auslass der Brennkammer sowie die insgesamt aus der Brennkammer ausgetretene Flamelet-Masse sind in Abbildung 5.7 als Funktion der Zeit dargestellt. Der Endwert von  $4.72e^{-05}$  kg entspricht der ursprünglich initialisierten Flamelet-Masse.



Abbildung 5.7: Massenstrom durch den Auslass und insgesamt ausgeströmte Masse eines Flamelets als Funktion der Zeit

Abbildung 5.8 zeigt die PDF der Verweilzeit für ein Flamelet in der Gasturbinen-Brennkammer. Nach etwa 0.8 ms beginnen die Partikel, die Brennkammer zu verlassen, und nach etwa 10 ms haben nahezu 100% der initialisierten Partikel den Brennraum verlassen. Die mittlere Verweilzeit kann aus folgender Beziehung ermittelt werden:

$$\int_0^\infty t \, \dot{m}_l(t) \, dt = t_{\text{Res}} \int_0^\infty \dot{m}_l(t) dt \,. \tag{5.3}$$



Abbildung 5.8: PDF der Verweilzeit eines Flamelets

Der berechnete Wert von  $t_{\text{Res}} = 2.1 \text{ ms}$  entspricht der mittleren Verweilzeit berechnet aus dem Verhältnis aus Brennraummasse und Massenstrom durch den Auslass.

Abbildung 5.9 zeigt die Geschwindigkeitsvektoren an den Haupt- und Pilotbrennstoffeinlässen. Deutlich zu erkennen ist die Strömungsstruktur der Drallbrenner. Da für die Simulation bei der Modellierung auf ein Verdampfungsmodell verzichtet und somit der Brennstoff gasförmig in die Brennkammer eingebracht wird, werden sowohl für die Geschwindigkeiten als auch für den Mischungsbruch und dessen Varianz Profile als Funktion des Radius des jeweiligen Einlasses vorgegeben. Somit wird erreicht, dass im Innern des Einlasses ein Brennstoff-Luftgemisch eingebracht wird, welches aufgrund maximaler Varianz des Mischungsbruchs als statistisches Mittel aus reinem Brennstoff und reiner Luft besteht. Dieser Strom ist umgeben vom Oxidatorstrom aus reiner Luft, welcher zusätzlich zur Verdrallung und Rezirkulation beiträgt. Auf diese Weise wird die Filmerlippe modelliert, von welcher der in der Realität flüssig vorliegende Brennstoff mitgerissen und aufgrund der hohen Temperatur der umgebenden Luft verdampft wird.

Abbildung 5.10 zeigt die Verteilung von Sauerstoff in der Ebene durch den Haupteinlass. Deutlich sind die maximalen Massenbrüche von 0.232% im Bereich der Mixing Jets und am Rand des Haupteinlasses zu erkennen. Im Bereich des eindringenden Brennstoffs ist die Sauerstoffkonzentration gleich Null. Der Brennstoff wird zunächst zu niederen Kohlenwasserstoffen und dann unter Einfluss des Sauerstoffs vor allem zu CO umgewandelt. In diesem Bereich wird auch viel Ruß gebildet. Im weiteren Brennverlauf werden unter Ausbildung einer Fläche stöchiometrischer Mischung die Zwischenprodukte und auch weitestgehend Ruß oxidiert.



Abbildung 5.9: Geschwindigkeitsvektoren an den Haupt- und Piloteinlässen



Abbildung 5.10: Verteilung von Sauerstoff in Ebene durch Haupteinlass

Die berechnete räumliche Verteilung des mittleren Mischungsbruchs für Betriebspunkt A ist in Abbildung 5.11 dargestellt. Hier wird der schnelle Übergang von fetter zu magerer Mischung und der unterschiedlich starke Einfluss von Pilot- und Haupteinlass verdeutlicht.



Abbildung 5.11: Verteilung des Mischungsbruchs in Schnittebenen senkrecht zur Hauptströmungsrichtung

In den drei hinteren Schnittebenen sind im oberen Bereich eintretende Strahlen niedrigen Mischungsbruchs zu erkennen. Diese gehen von den Mixing Jets aus, in denen Sekundärluft in die Brennkammer eingebracht wird, um die heißen Abgase zu kühlen und das Temperaturprofil am Brennkammeraustritt zu beeinflussen.

Abbildung 5.12 zeigt die Verteilungen des turbulenten Mittelwerts des Mischungsbruchs in einer Schnittebene durch den Hauptbrennstoffeinlass der Gasturbine aus der Simulation. Wie zuvor in Abbildung 5.11 wird deutlich, dass im Bereich des Haupteinlasses ein rascher Übergang von fetter zu magerer Mischung stattfindet. In gestuften Brennkammern werden so geringe Emissionen erreicht. Für den Betriebspunkt A wird ein Maximalwert des Mischungsbruchs von ca. 0.30 erreicht, während für den Betriebspunkt B der maximale Mischungsbruch etwa 0.21 beträgt. In der Nähe des Piloteinlasses liegen im Betriebspunkt B höhere Werte vor, was auf die unterschiedliche Brennstoffmassenstrom-Aufteilung (80% durch den Haupteinlass für den Betriebspunkt A, 71% für B) und Luftmassenstrom-Aufteilung zurückzuführen ist. Somit sollen deutlich niedrigere Rußemissionen im Teillastbereich erreicht werden.



Abbildung 5.12: Verteilung des Mischungsbruchs in Ebene durch Haupteinlass für die Betriebspunkte A (links) und B (rechts)

### 5.3.1 Temperaturverteilungen und Stickoxide

Die numerisch ermittelte Temperaturverteilung und die Verteilung von  $NO_x$  in der Ebene durch den Haupteinlass zeigen Abbildung 5.13 und 5.14. Deutlich ist die starke Korrelation von Temperatur- und  $NO_x$ -Level zu erkennen. Des weiteren zeigt sich der Einfluss der Mixing Jets in der Sekundärzone, welche zu starker Durchmischung im hinteren Bereich der Brennkammer sowie zu der gewünschten Kühlung der heißen Verbrennungsgase und der Temperaturschichtung im Auslass führen. Für den Betriebspunkt B zeigt sich ein lokales  $NO_x$ -Maximum im Bereich des Piloten aufgrund der lokal höheren Temperatur und der damit verbundenen vermehrten prompt NO - Bildung.



Abbildung 5.13: Verteilung der Temperatur in Kelvin in Ebene durch Haupteinlass für die Betriebspunkte A (links) und B (rechts)

Der gegenüber dem Betriebspunkt A im Experiment beobachtete erhöhte  $NO_x$ -Ausstoß konnte in der Simulation jedoch nicht nachvollzogen werden (vgl. Tab. 5.2).



Abbildung 5.14: Verteilung des Stickoxid-Massenbruchs in Ebene durch Haupteinlass für die Betriebspunkte A (links) und B (rechts)

### 5.3.2 Rußemissionen

Abbildung 5.15 zeigt, dass erhebliche Mengen Ruß in der Zone fetter Mischung nahe dem Haupteinlass gebildet werden. Dieser wird überwiegend beim Durchqueren der Fläche stöchiometrischer Mischung durch die dort vorhandenen OH-Radikale oxidiert.



Abbildung 5.15: Verteilung des Rußvolumenbruchs in Ebene durch Haupteinlass für die Betriebspunkte A (links) und B (rechts, andere Skalierung!)

Entsprechend liegen die Rußemissionen mehrere Größenordnungen niedriger als der in der Brennkammer gebildete Ruß. Dieses Verhalten wird auch in Dieselmotoren beobachtet [86], wo etwa 95% des in der Brennkammer gebildeten Ruß wieder abbrennt, bevor das Abgas die Brennkammer verläßt.

Die Piloteinlässe tragen aufgrund der geringeren eingebrachten Brennstoffmenge weniger zur Rußbildung bei. Deren lokale Maxima sind in dieser Abbildung nicht zu erkennen, da die Piloteinlässe nicht in der Schnittebene liegen. Das Maximum für den Rußvolumenbruch ist im Betriebspunkt B um etwa eine Größenordnung niedriger als im Betriebspunkt A. Dies ist auf den geringeren Brennstoffmassenstrom am Haupteinlass für den Betriebspunkt B zurückzuführen.

### 5.3.3 Vergleich zu experimentellen Daten

Der Vergleich zwischen experimentellen Daten und Daten aus den Simulationsrechnungen ist exemplarisch in Abbildung 5.16 dargestellt. Die verglichenen Temperaturverteilungen im Auslass der Brennkammer zeigen beide den Temperaturanstieg von innen nach außen, also über den Radius, welcher aufgrund der Materialbeanspruchung der Schaufeln am Turbineneintritt erforderlich ist.



Abbildung 5.16: Verteilung der Temperatur in Kelvin in Auslassebene für den Betriebspunkt A

Die in der Simulation erkennbaren Kühlluftfilme sind für das Experiment nicht erkennbar, da der Ausschnitt der Messung nur etwa 10 bis 90 % der gesamten Höhe am Austritt umfasst. Aufgrund des Abstands der Messebene zum Austritt der Brennkammer von etwa 1/4 der Brennkammerlänge führt eine stärkere Durchmischung des Austrittsstroms zu geringeren Gradienten als in der Simulation, deren Daten direkt am Brennkammeraustritt ermittelt werden. Eine andere mögliche Ursache für die geringere Durchmischung liegt in der Unterschätzung des Mischungvorgangs durch das verwendete  $k - \varepsilon$  Modell. Dieses Turbulenzmodell stellt hinsichtlich der exakten Beschreibung verwirbelter Strömungen einen Kompromiss das. Brocklehurst et al. [18] versuchten, diese Schwäche des  $k - \varepsilon$  Modells durch die Reduzierung der turbulente Prandtl-Zahl auf 0.4 auszugleichen, um die skalare Mischung in der Simulation zu erhöhen.

In Tabelle 5.2 sind die Emissionsindices des Experiments den Werten aus der Simulation gegenüber gestellt. Obwohl die absoluten Werte teilweise nicht exakt übereinstimmen, wird deutlich, dass das Modell in der Lage ist, die Ergebnisse tendentiell richtig zu reproduzieren. Der in der Tabelle angegebene Overall Temperature Distribution Factor (OTDF) berechnet sich nach folgender Formel:

$$\text{OTDF} = \frac{T_{\text{max}} - T_{40}}{T_{40} - T_{30}} \tag{5.4}$$

Darin ist  $T_{\text{max}}$  die maximale Temperatur am Brennkammer-Austritt,  $T_{40}$  die gemittelte Brennkammeraustrittstemperatur und  $T_{30}$  die mittlere Lufttemperatur am Brennkammereintritt.

Betriebspunkt		EI für NO <sub>×</sub>	EI für Ruß	OTDF
		[g/kg Fuel]	[ <b>mg/m</b> <sup>3</sup> ]	[–]
	Experiment			0.506
	100% Takeoff	26.6	$3 \pm 2$	
٨	Kerosin-Modell	00 C	6.2	0.614
А	1 Flamelet, $Sc_t = 0.85$	23.0		
	Kerosin-Modell	01 7	3.3	0.569
	5 Flamelets, $Sc_t = 0.85$	21.7		
	Experiment	20 6		_
D	AFR Variation 100%-40%	30.0	—	
В	Kerosin-Modell AFR Var.	10.0	0.076	1.24
	5 Flamelets, $Sc_t = 0.85$	18.9	0.276	

Tabelle 5.2: Emissions index für  $NO_x$  und Ruß sowie OTDF

Wie sich bei den Simulationsrechnungen gezeigt hat, können durch die Verwendung mehrerer Flamelets die Trends eher erfasst werden, wobei in der Regel die Verwendung von maximal 10 Flamelets ausreichend ist. Die hier zusammengefassten Ergebnisse wurden unter Verwendung von 5 Flamelets erziehlt. Dies stellt einen akzeptablen Kompromiss zwischen gewünschter Genauigkeit und numerischem Aufwand (Rechenzeit) dar.

Die experimentell ermittelte Stickoxid-Emission wird in der Simulation relativ gut reproduziert. Auch die Emissionswerte für Ruß entsprechen unter Verwendung des Kerosin-Modellbrennstoffes den Experimenten. Der Wert für den OTDF liegt relativ nah am Experiment.

Der experimentell ermittelte Anstieg der NO<sub>x</sub>-Emissionen für den Betriebspunkt B konnte numerisch nicht reproduziert werden. Die Reduzierung der Rußemissionen folgt der verminderten Rußproduktion in Gebieten fetter Mischung (siehe auch Abbildung 5.15), wobei der Vergleich zum Experiment aufgrund fehlender Daten nicht möglich ist.

Ein weiteres Maß für die Qualität der Simulation ist die Verteilung des Radial Temperature Distribution Factor (RTDF), welcher wie folgt ermittelt wird:

$$\text{RTDF} = \frac{T_{\text{R}} - T_{40}}{T_{40} - T_{30}} \tag{5.5}$$

Darin ist  $T_{\rm R}$  der radiale Mittelwert der Temperatur am Brennkammer-Austritt,  $T_{40}$  die gemittelte Brennkammeraustrittstemperatur und  $T_{30}$  die mittlere Lufttemperatur am Brennkammereintritt. Abbildung 5.17 zeigt die RTDF-Verteilung für den Betriebspunkt A aus dem Experiment (Dreiecke) sowie zweier Simulationsrechnungen mit den von Rolls Royce Deutschland (RRD) übernommenen (durchgezogene Linie) und modifizierten Randbedingungen (gestrichelte Linie) zum internen Abgleich bei RRD.



Abbildung 5.17: RTDF Daten im Vergleich mit Messungen von RRD

Da mit den ursprünglichen Randbedingungen die im Experiment eingestellten Massenströme für Brennstoff und Luft an den Haupt- und Piloteinlässen nicht exakt erreicht werden konnten, wurden in einer ersten Näherung die Werte für den Mischungsbruch und die axiale Geschwindigkeitskomponente dieser Einlässe modifiziert. Somit konnte auch die zu niedrige mittlere Austrittstemperatur von  $T_{40} \approx 1420$  K der ursprünglichen Rechnung mit  $T_{40} \approx 1530$  K etwas genauer berechnet werden (zum Vergleich aus dem Experiment:  $T_{40} \approx 1570$  K). Die geänderten Randbedingungen für die axiale Geschwindigkeitskomponente im Bereich des Brennstoffaustritts sowie den mittleren Mischungsbruch und dessen Varianz sind in Tabelle 5.3 gegenübergestellt. Ebenfalls aufgelistet sind die mit dem Eulerian Particle Flamelet Modell berechneten Massenströme für den Brennstoff im Vergleich zu den experimentellen Werten.

	Hauptinjektor		Pilot-Injektor		
	Original	Modifiziert	Original	Modifiziert	
$v_{ax}[m/s]$	39	44.85	102.4	102.4	
$\widetilde{Z}$	0.303	0.3448	0.1709	0.2084	
$\widetilde{Z''^2}$	0.21132	0.226	0.1417	0.165	
$\dot{m}_{Fuel}$ (CFD) [kg/s]	0.0195	0.0237	0.00658	0.00733	
$\dot{m}_{Fuel}$ (Exp.) [kg/s]	0.02262		0.00565		

Tabelle 5.3: Modifikation der Randbedingungen

Die Simulationsergebnisse mit nicht modifizierten Randbedingungen stimmen relativ gut mit den Messungen überein. Der Temperaturanstieg verläuft zu Beginn etwas steiler und flacht ab 30% Kanalhöhe wieder ab, bevor die Temperatur zu 90% Kanalhöhe wieder stärker abfällt als im Experiment. Entsprechend sind die Temperaturen im Bereich von 20 bis 60% Höhe des Brennkammeraustritts etwas zu hoch. Die Ursache hierfür liegt wahrscheinlich in der zu geringen Durchmischung der Strömung durch die Mixing Jets (vgl. Abbildung 5.13). Dem gegenüber liegen die berechneten Temperaturen bei modifizierten Randbedingungen in der unteren Hälfte oberhalb der gemessenen, in der oberen unterhalb. Vor allem in der unteren Hälfte des Kanals weicht die berechnete Temperatur deutlich von der gemessenen Temperatur ab. Beim Betrachten der Temperaturverteilung im Auslass (Abbildung 5.18) wird deutlich, dass sich hier aufgrund der neuen Randbedingungen und der damit verbundenen höheren Eindringtiefe des Haupteinlasses kein definiertes Temperaturprofil erkennen lässt. Vielmehr finden sich viele sogenannte hot streaks in Bereichen zwischen 20 und 80% der Kanalhöhe, welche nicht durch die Mixing Jets aufgelöst werden können.

#### 5.3.4 Strahlungseinfluss

In turbulenten Flammen wirkt sich die Berücksichtigung der Strahlungsverluste vor allem für große Abstände vom Brennstoffeinlass aus. Pitsch et al. [87] haben gezeigt, daß nahe der Düse in Freistrahldiffusionsflammen aufgrund großer Gradienten der diffusive Wärmetransport in der Regel sehr groß ist. Der Einfluß von Strahlungswärmeverlusten kann daher in diesem Bereich vernachlässigt werden. Weiter stromabwärts sind die Aufenthaltszeiten in der Flamme



Abbildung 5.18: Verteilung der Temperatur in Kelvin in Auslassebene für den Betriebspunkt A, Vergleich modifizierter (links) und ursprünglicher (rechts) Randbedingungen

aufgrund der mit zunehmender Entfernung von der Düse abfallenden axialen Geschwindigkeit im Freistrahl größer, sodaß Strahlungsverluste merklichen Einfluß bekommen (vgl. [91]).

Der Strahlungsverlustterm pro Volumeneinheit  $\dot{q}_R^{\prime\prime\prime}$  wird durch ein Modell für optisch dünne Gase beschrieben und ergibt sich aus der Integration der spontan emittierten Strahlung über den gesamten Raumwinkel, also von 0 bis  $4\pi$ , zu

$$\dot{q}_{R}^{\prime\prime\prime} = 4\sigma_{s} \left(T^{4} - T_{u}^{4}\right) \sum_{i} p_{i} \alpha_{P,i}$$
(5.6)

Darin bedeutet  $\sigma_s$  die Stefan-Boltzmann-Konstante,  $T_u$  die Umgebungs- bzw. Wandtemperatur;  $p_i$  und  $\alpha_{P,i}$  repräsentieren die Partialdrücke sowie die Planckschen Absorptionskoeffizienten der berücksichtigten chemischen Komponenten *i*. Für Wasserstoffflammen wird nur der Strahlungsanteil von gasförmigem H<sub>2</sub>O berücksichtigt, während in Kohlenwasserstoffflammen auch der Strahlungsanteil von CO<sub>2</sub> berechnet wird.

Zusätzlich zu den Strahlungstermen von  $H_2O$  und  $CO_2$  in der Gasphase wird in stark rußenden Flammen wie der hier betrachteten Kerosin-Flamme die Strahlung der Rußpartikel betrachtet. Der Partialdruck der chemischen Komponente entspricht hierbei dem Rußvolumenbruch  $f_v$ . Der Plancksche Absorptionskoeffizient für Ruß wurde einem Diagramm von Hubbard et al. [52] mit der Temperatur T in Kelvin entnommen:

$$\alpha_{P,\text{Soot}} = -3.75 \cdot 10^5 + 1735 \cdot T \,. \tag{5.7}$$

Da der Rußvolumenbruch die Einheit  $m^3/m^3$  hat, ist die Einheit von  $\alpha_{P,Soot}$  per Definition 1/m. Somit folgt für die Summe der Partialdrücke und des Rußvolumenbruchs mit Gleichung (5.6):

$$\sum_{i} p_i \alpha_{P,i} = p_{\text{CO}_2} \alpha_{P,\text{CO}_2} + p_{\text{H}_2\text{O}} \alpha_{P,\text{H}_2\text{O}} + f_v \alpha_{P,\text{Soot}}$$
(5.8)

Durch vergleichende Berechnungen der Gasturbinen-Brennkammer konnte festgestellt werden, daß die Vernachlässigung des Rußstrahlungsterms sowohl zu einer lokal leicht überhöhten Temperatur als auch zu geringeren Rußvolumenbrüchen führt. Die Unterschiede sind allerdings aufgrund der niedrigen mittleren Verweilzeiten in der Brennkammer von etwa 2 bis 3 ms gering.

Da das Gas in der Brennkammer optisch dick ist, wird die emittierte Strahlung schnell wieder durch das Gas absorbiert, sodass letztlich nur die Temperaturgradienten verringert werden und somit das Temperaturfeld geglättet wird. Dies wird in den Abbildungen 5.19 und 5.20 deutlich.



Abbildung 5.19: Verteilung der Temperatur in Ebene durch Haupteinlass unter Berücksichtigung der Strahlungsverluste (links) im Vergleich zur Vernachlässigung (rechts) der Strahlungsverluste



Abbildung 5.20: Verteilung der Temperatur in Auslassebene unter Berücksichtigung der Strahlungsverluste (links) im Vergleich zur Vernachlässigung (rechts) der Strahlungsverluste

# **Kapitel 6**

# **MILD-Brennkammer**

Durch Vorwärmen der Verbrennungsluft ist es möglich, die Effizienz von Verbrennungsprozessen zu erhöhen. Um dies ohne zusätzlichen Energieaufwand zu erreichen, wird die Verbrennungsluft durch das heiße Abgas in rekuperativen oder regenerativen Wärmeaustauschern vorgewärmt. Durch hohe Verbrennungslufttemperaturen steigt die maximale Temperatur in der Brennkammer. Dem zur Folge steigen in der Regel auch die Stickoxid-Emissionen aufgrund des starken Einflusses auf die thermische NO<sub>x</sub>-Bildung stark an. Ziel neu entwickelter Brennerkonfigurationen ist es daher, die Energieeffizienz unter Berücksichtigung möglichst niedriger Schadstoffemissionen zu steigern. Bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen mit Luft entstehen bei hohen Flammentemperaturen von etwa 2000°C innerhalb von Millisekunden Stickoxide in erheblicher Menge. In mittleren Temperaturbereichen von etwa 1600°C wird, wenn die Verweilzeit in den heißen Regionen ausreichend lang ist, ebenfalls NO<sub>x</sub> gebildet. Wesentliche Voraussetzungen zur Reduzierung der NO<sub>x</sub>-Emissionen sind daher die Absenkung der Maximaltemperatur, möglichst kurze Verweilzeiten in den heißen Regionen sowie Vermeidung hoher lokaler Sauerstoff-Konzentrationen in der Flamme.

Fukushima et al. [43] stellten einen regenernativen Brenner mit niedrigen  $NO_x$ -Emissionen vor. Bei diesem Konzept wird die Verbrennungsluft über einen Wärmeaustauscher mit Hilfe des heißen Abgases vorgewärmt. Wünning et al. [109] untersuchten technische Verbrennungsprozesse hinsichtlich des Potentials für die Reduzierung von  $NO_x$ -Emissionen. Neben den gestuften Brennkammern zur Kontrolle der Emissionen, wie sie in Abschnitt 5.3 diskutiert wurden, bietet das Abkühlen der Flamme durch das Abführen von Wärme oder Zumischen von bereits abgekühlten Verbrennungsgasen, Wasser oder Wasserdampf wirksame Mechanismen zur  $NO_x$ -Reduzierung. Maßgebend ist dabei die Realisierung abgesenkter Maximaltemperaturen und geringerer Verweilzeiten der Verbrennungsprodukte in der Reaktionszone.

Die externe Abgasrückführung ist eine im Bereich motorischer Verbrennung eingesetztes Verfahren zur Absenkung der Maximaltemperatur. Dabei wird ein Teil des zuvor gekühlten Abgases der angesaugten Verbrennungsluft beigemischt und so dem Brennraum zugeführt. Dies bewirkt eine Verringerung der NO<sub>x</sub>-Emissionen. Allerdings erfolgt gleichzeitig eine Erhöhung der Rußemissionen, weshalb die Abgasrückführungs-Rate angepasst werden muss. Bei kontinuierlichen Verbrennungsprozessen lässt sich durch konstruktive Maßnahmen an der Brennergeometrie auch innerhalb einer Brennkammer sogenannte interne Abgasrezirkulation erreichen. Wünning et al. [109] haben ein Brennverfahren vorgestellt, welches aufgrund hoher interner Abgasrückführung trotz starker Verbrennungsluft-Vorwärmung niedrige NO<sub>x</sub>-Emissionen sichert. Für dieses Brennverfahren führten sie den Begriff der flammenlosen Oxidation (engl. flameless oxidation, FLOX<sup>®</sup>) ein. Dieser Begriff beruht auf der Beobachtung, beim vorliegenden Brennverfahren keine optisch oder akustisch erkennbare Flamme in der Brennkammer vorzufinden, da weder Flammenleuchten noch hörbare Zünd- und Löscherscheinungen auftreten. Dieses Phänomen wurde auch von Weber et al. [104] beobachtet.

Durch laseroptische Untersuchungen an einer Brennkammer mit starker Verbrennungsluft-Vorwärmung und hoher interner Abgasrückführung untersuchten Plessing et al. [93] den Einfluss der Abgasrezirkulation auf den Temperaturanstieg während der Verbrennung und verglichen diesen mit dem Temperaturanstieg in einem ideal durchmischten Reaktor. Durch zweidimensionale laserinduzierte predissoziative Fluoreszenz-Messung der OH-Radikale (OH-LIPF) konnte die Flammenfront in der Brennkammer lokalisiert werden. Die ermittelte OH-Konzentration lag unterhalb derer für nicht vorgewärmte Verbrennungsprozesse in turbulenten Flammen ohne Abgasrückführung. Dennoch ist der Begriff der flammenlosen Oxidation physikalisch nicht korrekt und wurde durch den Begriff Moderate Or Intense Low oxygen Dilution (MILD) Verbrennung ersetzt.

Die aerodynamischen, chemischen und thermischen Aspekte bei der MILD-Verbrennung wurden von Özdemir et el. [75] untersucht. Einsaugen (engl. Entrainment) heißer Abgase in die Frischgasströmung konnte als wichtige Voraussetzung für die Initiation und das Fortschreiten der Verbrennung identifiziert werden. Durch den verringerten Temperaturanstieg während der Verbrennung aufgrund der Verdünnung des Oxidatorstroms mit eingesaugtem Abgas konnte eine verminderte Stickoxidbildung beobachtet werden. Vergleichbare Ergebnisse wurden von Dally et al. [28] ermittelt. Durch einen experimentellen Aufbau zur simulierten Abgasrezirkulation und der damit verbundenen Verdünnung der Frischgase in einer Freistrahl-Diffusionsflamme konnte der Einfluss reduzierter Sauerstoffkonzentration im Oxidatorstrom auf abnehmendes Flammenleuchten, geringen Temperaturanstieg während der Verbrennung sowie verminderte Stickoxidbildung im Detail analysiert werden.

Für die in [75,93] vermessene Brennkammer wurden erste Berechnungen des Strömungsfeldes, der Temperaturverteilung und der Stickoxidemissionen von Coelho et al. [22] durchgeführt. Bei der Ermittlung der Temperaturverteilung wurden stationäre Flamelets verwendet, während die Emissionen mit Hilfe des Eulerian Particle Flamelet Modells berechnet wurden. Um die durchgeführten Messungen und Rechnungen zur Analyse des Einflusses von Wärmeverlusten in der Brennkammer sowie die Kriterien für die Stabilität des MILD-Verbrennungsverfahrens zu erweitern, wurden von Dally [29] Experimente mit unterschiedlichen Brennstoffen sowie Zumischung von  $N_2$  und  $CO_2$  in den Brennstoffstrom durchgeführt. Diese Messungen bilden die Grundlage für die in diesem Kapitel beschriebenen Simulationsrechnungen und werden im folgenden näher erläutert.

## 6.1 Experimenteller Aufbau

Die MILD-Brennkammer hat einen quadratischen Querschnitt der Kantenlänge 250 mm und eine Gesamthöhe von 485 mm. Die in der Mitte des Bodens integrierte Düsengeometrie besteht aus einer Brennstoffdüse und sechs im Abstand von 20 mm angeordneten, umliegenden Luftdüsen. Die Brennstoffdüse hat einen Durchmesser von 4 mm, die Luftdüsen von jeweils 4.7 mm. In einem außerhalb der Brennkammer liegenden Wärmeaustauscher kann die Verbrennungsluft durch die heißen Abgase vorgewärmt werden. Die Brennkammer wird durch brennerstabilisierte Flammen vorgewärmt, um die Voraussetzung für stabilen Betrieb im MILD-Verbrennungsmodus zu schaffen. Abbildung 6.1 verdeutlicht den schematischen Aufbau der Brennkammer.



Abbildung 6.1: Schematischer Aufbau der MILD-Brennkammer

Der Auslass der Brennkammer ist konzentrisch um die Düsengeometrie angeordnet, sodass Einlässe und Auslass in der selben Ebene liegen und die Strömung beim Verlassen der Brennkammer an den Freistrahlen der Luftdüsen vorbeigeführt wird. Somit erfolgt das Einsaugen heißer Verbrennungsgase in die Luftströme, wodurch diese weiter aufgeheizt und gleichzeitig verdünnt werden. Als Brennstoff wurde Methan verwendet. Die Messungen wurden unter atmosphärischem Druck für drei unterschiedliche Brennstoffzusammensetzungen durchgeführt, deren Daten in Tabelle 6.1 zusammengefasst sind.

Massenbruch Inertgas	$Z_{\rm st}$	$\dot{m}_{CH_4}$	$\dot{m}_{ m Inert}$	$\dot{m}_{ m Luft}$	$\Phi$
im Brennstoff	[-]	[kg/s]	[kg/s]	[kg/s]	[-]
0 %	0.05516	1.26 E-04	0.0	2.63 E-03	0.8333
$88 \% N_2$	0.32728	1.26 E-04	9.24 E-04	2.63 E-03	0.8333
82 % CO <sub>2</sub>	0.24490	1.26 E-04	$5.74\mathrm{E}\text{-}04$	2.63 E-03	0.8333

Tabelle 6.1: Brennstoffzusammensetzungen und Massenströme der MILD-Brennkammer

## 6.2 Gitter der MILD-Brennkammer

Das bei den Simulationsrechnungen verwendete unstrukturierte dreidimensionale Gitter repräsentiert aufgrund der Symmetrie der Brennkammer ein Viertel der gesamten Brennkammer. Es besteht aus etwa 35 000 Zellen und wird an den Symmetrieebenen durch Zonen mit entsprechenden Symmetrie-Randbedingungen begrenzt. Die Verteilungen der Temperatur, des Mischungsbruchs und der chemischen Spezies sowie der skalaren Dissipationsrate werden in einer vertikalen Schnittebene durch diesen Ausschnitt dargestellt. Diese Schnittebene ist so angeordnet, dass sie den Brennstoffeinlass in der Bodenmitte der Brennkammer sowie eine der sechs umliegenden Lufteinlassdüsen schneidet. Die Schnittebene entspricht in etwa dem in Abbildung 6.1 markierten Bereich. Abbildung 6.2 verdeutlicht das verwendete Gitter für die MILD-Brennkammer (links) und den schematischen Aufbau der Düsengeometrie als Ausschnittvergrößerung (rechts).

Abbildung 6.3 verdeutlicht die wesentlichen Details der Anordnung der Düsengeometrie und des Auslasses sowie den entsprechenden Detailausschnitt des verwendeten Gitters. Die Brennstoffdüse hat einen Durchmesser von 4 mm. Der Kegelstumpf ragt 41 mm in die Brennkammer hinein. Die sechs Luftdüsen sind in einem Abstand von 20 mm von der Brennstoffdüse in einem abgerundeten Zylinder von 16 mm Höhe angeordnet. Der Winkel zwischen den Luftdüsen beträgt 60°. Der Auslass ist konzentrisch im Abstand von 46.5 mm um die Düsengeometrie angeordnet und hat eine radiale Ausdehnung von 15.5 mm



Abbildung 6.2: Gitter eines Sektors der MILD-Brennkammer und Aufbau der Düsengeometrie



Abbildung 6.3: Gitter der Düsengeometrie

## 6.3 Ergebnisse für die MILD-Brennkammer

Wie schon in Abschnitt 5.3 erläutert basiert die Anwendung des Eulerian Particle Flamelet Modells auf einer stationären Lösung des Strömungs- und Temperaturfeldes, welches mit dem im CFD-Code integrierten Modellen berechnet wird. Die Anwendung der in Abschnitt 3.4.1 diskutierten Kriterien zur Festlegung des Initialisierungsgebietes werden auch bei der Simulation einer MILD-Brennkammer angewendet. Die Initialisierung wird in Abbildung 6.4 verdeutlicht.



Abbildung 6.4: Temperatur in Kelvin aus Berechnungen mit Gleichgewichts-Chemie (links) und Flamelet-Initialisierung (rechts) in einer MILD-Brennkammer

Zur Veranschaulichung der Initialisierung mehrerer Flamelets wurde das Initialisierungsgebiet in Abbildung 6.4 in drei Teilgebiete entsprechend drei Flamelets unterteilt. Bei der Berechnung der MILD-Brennkammer wurden fünf Flamelets verwendet. Die skalare Dissipationsrate in den Teilgebieten gleicher Flamelet-Masse nimmt mit zunehmendem Abstand von der Düse ab. Somit liegen zum Zeitpunkt t = 0 s unterschiedliche Startbedingungen für die skalare Dissipationsrate der einzelnen Flamelets vor, und die instationäre Berechnung der Flamelet-Lösungen erfolgt mit individuellen zeitabhängigen Flamelet-Parametern.

#### 6.3.1 Strömungsfeld

Abbildung 6.5 stellt das berechnete Strömungsfeld in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoff- und einen Lufteinlass für reines Methan dar.



Abbildung 6.5: Geschwindigkeitsvektoren in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoff- und einen Lufteinlass für reines Methan, die Länge der Vektoren skaliert nicht mit dem Betrag der Geschwindigkeit (Vektoren sind farblich skaliert,  $v_{max} = 82 \text{ m/s}$ )

Die Geschwindigkeitsvektoren sind farblich bis 20 m/s skaliert, die Maximalgeschwindigkeit in Düsennähe beträgt etwa 82 m/s. Die Strömung ist durch die hohe interne Abgasrezirkulation charakterisiert. Dies wird durch die Anordnung des Auslasses für die heißen Abgase in direkter Nähe zu den Lufteinlässen erreicht. Aufgrund der hohen Geschwindigkeiten an den Düsenaustritten wird das rezirkulierende heiße Abgas in die Luftströmung eingesogen. Erst danach mischen sich Brennstoff- und mit Abgas vorgemischter Luftstrom entlang der Symmetrieachse. Die Sauerstoffkonzentration im Oxidatorstrom ist entsprechend herabgesetzt. In diesem Bereich findet die Verbrennung statt.

Die heißen Gase treffen auf die obere Brennkammerwand auf und werden zu den äußeren Wänden umgelenkt, wo die Strömung nach unten geführt wird. Dort wird ein Teil wie zuvor beschrieben der internen Rezirkulation zugeführt, während die übrige Strömung die Brennkammer durch den Auslass verlässt. Im anschließenden Wärmeaustauscher wird die thermische Energie zur Vorwärmung der Verbrennungsluft genutzt. Im oberen Bereich ist die Strömung durch die Ausbildung eines großen Wirbels dominiert, in dessen Zentrum hohe Aufenthaltszeiten erreicht werden. Dieser Wirbel wird durch die Einlassströmung in der Mitte des Brennkammerbodens aufgeprägt und beeinflusst auch die Strömung im unteren Bereich der Brennkammer.

#### 6.3.2 Einfluss der skalaren Dissipationsrate

Wie bereits in Abschnitt 2.3.2 hervorgehoben spielt die skalare Dissipationsrate eine entscheidende Rolle bei der Flamelet-Modellierung Der Einfluss dieses Parameters wird anhand des Vergleichs unterschiedlicher Brennstoffstrom-Zusammensetzungen untersucht. In Abbildung 6.6 ist die auf  $Z_{\rm st}$  konditionierte skalare Dissipationsrate in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoffeinlass sowie einen der Lufteinlässe für die in Tabelle 6.1 aufgeführten Brennstoffzusammensetzungen dargestellt. Bei allen Brennstoffzusammensetzungen bleibt der Massenstrom des Brennstoffs Methan konstant, und unterschiedliche Mengen eines Inertgases werden zugemischt. Dadurch ändern sich der Massenstrom des Gemisches sowie dessen Zusammensetzunge.

Für reines Methan ohne Inertgas-Zusatz ist die konditionierte skalare Dissipationsrate in Abbildung 6.6 links dargestellt. Nahe der Brennstoffdüse liegen hohe Werte im Bereich von  $\chi_{st} = 10^2 \text{ l/s}$  vor. Mit zunehmender Entfernung von der Düse entlang der Symmetrieachse fällt  $\chi_{st}$  sehr schnell ab. Im oberen Bereich der Brennkammer liegen die Werte bereits bei  $10^{-2} \text{ l/s}$ , und im weiteren Verlauf der Strömung sinkt  $\chi_{st}$  auf Werte ab, welche sich dem Regime eines homogenen Reaktors mit  $\chi_{st} = 0 \text{ l/s}$  annähern (vgl. Peters [83], Coelho et al. [22]). Dieses berechnete Feld für die konditionierte skalare Dissipationsrate wird verwendet, um mit Gleichung 3.2 den Gebietsmittelwert der konditionierten skalaren Dissipationsrate zu ermitteln. Dieser dient als Flamelet-Parameter für die instationäre Berechnung der Flamelet-Lösungen im RIF Code.



Abbildung 6.6: Auf  $Z_{st}$  konditionierte skalare Dissipationsrate in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoff- und einen Lufteinlass für reines Methan (links), Methan mit zusätzlichem N<sub>2</sub> (0.88% des Gesamtmassenstroms, mitte) und für Methan mit zusätzlichem CO<sub>2</sub> (0.82% des Gesamtmassenstroms, rechts) im Brennstoffstrom

Abbildung 6.6 mitte stellt die konditionierte skalare Dissipationsrate in der vertikalen Schnittebene für den Zusatz von Stickstoff im Brennstoffstrom dar. Die Werte für  $\chi_{st}$  liegen nahe der Düse ebenfalls im Bereich von  $10^2 \, 1/s$  und fallen entlang der Achse schnell ab. Beim Vergleich der absoluten Werte am Düsenaustritt zeigt sich, dass die Werte noch höher sind als bei dem Fall ohne Inertgas im Brennstoffstrom. Gleiches gilt für den Zusatz von  $CO_2$  im Brennstoffstrom (vgl. Abbildung 6.6 rechts). Aufgrund der höheren Massenströme am Brennstoffeinlass und damit der verstärkten Turbulenz vor allem in Düsennähe liegen die Werte für  $\chi_{st}$  über denen für reines Methan. In den folgenden Abbildungen wird die konditionierte skalare Dissipationsrate zusammmen mit der Kontur stöchiometrischer Mischung in einer vertikalen Schnittebene bei 50 und bei 200 mm über dem Brennkammerboden dargestellt.

In der Schnittebene 50 mm über dem Brennkammerboden in Abbildung 6.7 verläuft die Kontur stöchiometrischer Mischung nahe der Symmetrieachse. In diesem Bereich mischen sich Brennstoff und Oxidatorstrom durch Entrainment. Die konditionierte skalare Dissipationsrate mit  $\chi_{st} > 10^{1/s}$  bereits hoch genug, um die Stabilisierung der Flamme am Brennstoffdüsenaustritt zu verhindern. Aufgrund des hohen Impulses der Einlässe und der daraus folgenden Extinktion in Düsennähe bildet sich die Flamme mischungskontrolliert weiter stromabwärts aus. Die dort vorliegenden niedrigen Werte der skalaren Dissipationsrate repräsentieren Bedingungen ähnlich einem homogenen Reaktor, für den  $\chi = 0^{1/s}$  gilt.

Die Aufweitung der inneren Kontur 200 mm über dem Brennkammerboden lässt sich anhand des Plots in Abbildung 6.8 erkennen. Durch weiteres Entrainment von Verbrennungsluft und heißen Abgasen und die daraus folgende Strahlaufweitung hat sich die Kontur in radialer Richtung nach außen verschoben. Die konditionierte skalare Dissipationsrate ist bereits um etwa zwei Größenordnungen niedriger als in Düsennähe. Unter solchen Bedingungen deutlich unterhalb des Extinktionslimits kann sich die Flamme ausbilden.

Dieser Effekt wird durch den Zusatz von Inertgasen gemäß Tabelle 6.1 noch verstärkt. Durch die Verschiebung von  $Z_{st}$  hin zu höheren Z-Werten aufgrund des Zusatzes von Inertgasen liegt die Kontur stöchiometrischer Mischung näher an der Symmetrieachse. Dies geht aus den Abbildungen 6.9 und 6.10 hervor, in denen die konditionierte skalare Dissipationsrate zusammen mit der Kontur stöchiometrischer Mischung für zusätzlichen Stickstoff im Brennstoffstrom dargestellt ist. Es wird deutlich, dass die Kontur stöchiometrischer Mischung in Bereichen höherer konditionierter skalarer Dissipationsraten liegt als bei reinem Methan im Brennstoffstrom. Entsprechend wird nahe der Düse die Flammenstabilisierung ebenfalls verhindert und somit die Voraussetzung für MILD Bedingungen favorisiert.

Die Abbildungen 6.11 und 6.12 stellen die konditionierte skalare Dissipationsrate zusammen mit der Kontur stöchiometrischer Mischung für zusätzlichen  $CO_2$  im Brennstoffstrom dar. Auch hier wird die Verbrennung unter MILD Bedingungen durch die Verschiebung der stöchiometrischen Kontur und damit der möglichen Flammenzone in den Bereich fetterer Mischung und damit höherer konditionierter skalarer Dissipationsraten weiter favorisiert.



Abbildung 6.7: Auf  $Z_{st}$  konditionierte skalare Dissipationsrate in 1/s in Schnittebene 50 mm oberhalb des Bodens der Brennkammer für reines Methan



Abbildung 6.8: Auf  $Z_{st}$  konditionierte skalare Dissipationsrate in 1/s in Schnittebene 200 mm oberhalb des Bodens der Brennkammer für reines Methan



Abbildung 6.9: Auf  $Z_{st}$  konditionierte skalare Dissipationsrate in 1/s in Schnittebene 50 mm oberhalb des Bodens der Brennkammer für Methan mit zusätzlichem N<sub>2</sub> (0.88% des Gesamtmassenstroms) im Brennstoffstrom



Abbildung 6.10: Auf  $Z_{st}$  konditionierte skalare Dissipationsrate in 1/s in Schnittebene 200 mm oberhalb des Bodens der Brennkammer für Methan mit zusätzlichem N<sub>2</sub> (0.88% des Gesamtmassenstroms) im Brennstoffstrom



Abbildung 6.11: Auf  $Z_{st}$  konditionierte skalare Dissipationsrate in 1/s in Schnittebene 50 mm oberhalb des Bodens der Brennkammer für Methan mit zusätzlichem CO<sub>2</sub> (0.82% des Gesamtmassenstroms) im Brennstoffstrom



Abbildung 6.12: Auf  $Z_{st}$  konditionierte skalare Dissipationsrate in 1/s in Schnittebene 200 mm oberhalb des Bodens der Brennkammer für Methan mit zusätzlichem CO<sub>2</sub> (0.82% des Gesamtmassenstroms) im Brennstoffstrom

#### 6.3.3 Axiale Temperaturprofile

Abbildung 6.13 zeigt den Vergleich gemessener und berechneter Temperaturprofile entlang der Achse der Brennkammer. Die Temperatur wurde mit Hilfe eines Thermoelementes gemessen, dessen radiale Position entlang der Achse mit einer Genauigkeit von  $\pm 5$  mm konstant gehalten werden konnte. Untersucht wurden die in Tabelle 6.1 genannten Konfigurationen für reines Methan sowie Methan mit Zumischung von N<sub>2</sub> oder CO<sub>2</sub>.



Abbildung 6.13: Vergleich gemessener und berechneter axialer Temperaturprofile für reines Methan, Methan mit zusätzlichem  $N_2$  und mit  $CO_2$  im Brennstoffstrom, Anteile in Massenprozent

Die Wandwärmeverluste wurden in der Simulation berücksichtigt, um die Enthalpieverteilung im Mischungsbruchraum zu ermitteln, wodurch die niedrigen Temperaturen in der Brennkammer auch in der Flamelet -Lösung auftreten. Für reines Methan stimmen die Rechnungen relativ gut mit den Messungen überein. Bei Zumischung der Inertgase sind Unterschiede nahe der Düse zu erkennen. Die Temperaturmaxima werden in der Simulation etwa 10 bis 15% zu niedrig bestimmt und sind in ihrer axialen Position nicht exakt wiedergegeben. Dennoch wird deutlich, dass die Verwendung des CFD-Codes und des Flamelet-Codes korrekte Temperaturniveaus auch bei hohen Aufenthaltszeiten und hohen internen Rezirkulationsraten ermöglicht.

### 6.3.4 Temperatur und Stickoxide

Die Abbildungen 6.14 und 6.15 stellen den Mischungsbruch, die Temperatur und Stickoxide in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoff- und einen Lufteinlass für reines Methan dar. Für Methan mit zusätzlichem Stickstoff im Brennstoffstrom sind die entsprechenden Ergebnisse in den Abbildungen 6.16 und 6.17 sowie für Methan mit zusätzlichem Kohlendioxid im Brennstoffstrom in den Abbildungen 6.18 und 6.19 dargestellt.

Zunächst lässt sich feststellen, dass die Temperaturverteilung lokal stark an den Mischungsbruch gekoppelt ist. Die Maximaltemperaturen befinden sich in der Nähe stöchiometrischer Mischung. In den Abbildungen 6.14, 6.16 und 6.18 für den Mischungsbruch ist die Position stöchiometrischer Mischung jeweils durch eine Kontur markiert. Die Diffusionsflamme brennt um den Kern des eindringenden Brennstoffstrahls, welcher innerhalb dieser Kontur liegt. Die Stickoxidverteilung korreliert stark über den Zel'dovich-Mechanismus mit der oben beschriebene Temperaturverteilung. In der Düsennähe ist die Bildung von NO<sub>x</sub> aufgrund der hier vorliegenden hohen Varianz des Mischungsbruchs geringer als weiter stromabwärts, wo die Varianz aufgrund der abnehmenden Turbulenz schnell abnimmt und die Temperaturen höher sind.

Der Vergleich der drei dargestellten Konfigurationen verdeutlicht die Abhängigkeit der lokalen Stickoxid-Konzentration sowie der Stickoxid-Emissionen von der Brennstoffzusammensetzung und der internen Rezirkulationsrate. Letztere steigt mit dem eingebrachten Massenstrom und dem zur Folge mit dem zusätzlichen Inertgas im Brennstoffstrom an. Für reines Methan liegen die berechneten lokalen NO<sub>x</sub>-Maxima bei etwa 20 ppm, bei Zumischung von N<sub>2</sub> bei 1.5 ppm und bei Zumischung von  $CO_2$  bei 2 ppm. Die Emissionen der Brennkammer sind in Tabelle 6.2 zusammengefasst.

Massenbruch Inertgas	$Z_{ m st}$	$\dot{m}_{CH_4}$	$\dot{m}_{ m Inert}$	NO <sub>x</sub> , Exp.	NO <sub>x</sub> , Sim.
im Brennstoff	[–]	[kg/s]	[kg/s]	[ppm]	[ppm]
0 %	0.05516	1.26E-04	0.0	30	8.9934
$88~\%$ $N_2$	0.32728	1.26E-04	9.24E-03	1	0.9739
$82\%\ CO_2$	0.24490	1.26E-04	5.74E-04	1	1.2828

Tabelle 6.2: Brennstoffzusammensetzung und NO<sub>x</sub>-Emissionen

Es wird deutlich, dass durch die Verwendung des Eulerian Particle Flamelet Modells in Verbindung mit der  $C_1-C_4$ -Kinetik die Trends bei den Rechnungen richtig wiedergegeben werden. Für reines Methan liegen die berechneten NO<sub>x</sub>-Werte niedriger als die gemessenen. Es ist anzunehmen, dass hier die Wärmeverluste überbewertet werden. Durch eine zusätzliche Varianzgleichung für die Enthalpie ließen sich die zu erwartenden turbulenten Schwankungen erfassen, welche zu Temperaturspitzen und damit zu hohen NO<sub>x</sub>-Emissionen führen können.


Abbildung 6.14: Mischungsbruch in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoff- und einen Lufteinlass für reines Methan



Abbildung 6.15: Temperatur in Kelvin (links) und Stickoxid-Massenbruch (rechts) in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoff- und einen Lufteinlass für reines Methan



Abbildung 6.16: Mischungsbruch in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoff- und einen Lufteinlass für Methan mit zusätzlichem N<sub>2</sub> (0.88% des Gesamtmassenstroms) im Brennstoffstrom



Abbildung 6.17: Temperatur in Kelvin (links) und Stickoxid-Massenbruch (rechts) in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoff- und einen Lufteinlass für Methan mit zusätzlichem  $N_2$  (0.88% des Gesamtmassenstroms) im Brennstoffstrom



Abbildung 6.18: Mischungsbruch in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoff- und einen Lufteinlass für Methan mit zusätzlichem  $CO_2$  (0.82% des Gesamtmassenstroms) im Brennstoffstrom



Abbildung 6.19: Temperatur in Kelvin (links) und Stickoxid-Massenbruch (rechts) in einer vertikalen Schnittebene durch den Brennstoff- und einen Lufteinlass für Methan mit zusätzlichem  $CO_2$  (0.82% des Gesamtmassenstroms) im Brennstoffstrom

# **Kapitel 7**

# Zusammenfassung

Das Ziel der vorliegenden Arbeit war die Anwendung des erweiterten Representative Interactive Flamelet (RIF) Modells für mehrere Flamelets auf stationäre Verbrennungsprozesse unter Berücksichtigung der Wärmeverluste im Flamelet-Modell. Die Wärmeverluste wurden im Strömungsfeld mit Hilfe des CFD-Codes FLUENT ermittelt und über ein Mittelungsverfahren in den Mischungsbruchraum übertragen. Der Einfluss des Strömungsfeldes und der Wärmeverluste auf die temperaturabhängigen chemischen Prozesse zur Schadstoffbildung konnte dadurch berücksichtigt werden.

Nach einer Einführung in die Problemstellung wurden in Kapitel 2 die mathematischen Modelle zur numerischen Simulation der Strömung und Verbrennung in technischen Anwendungen erläutert. Die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls und Energie sowie das verwendete k- $\varepsilon$  Turbulenzmodell wurden vorgestellt. Das in dieser Arbeit verwendete Representative Interactive Flamelet Modell und die Erweiterung für die Anwendung instationärer Flamelets auf stationäre Verbrennungsprozesse wurden erläutert. Die Bedeutung der Strömungsparameter für die Betrachtung der chemischen Prozesse im Mischungsbruchraum wurde verdeutlicht.

In Kapitel 3 wurden die numerische Implementation der verwendeten Modelle und die Kopplung des RIF-Modells an den CFD-Code FLUENT erläutert. Das Interface zwischen beiden Codes wurde vorgestellt, und die Funktionsweise des Interfaces sowie der schrittweise Lösungsprozess wurden aufgezeigt. Des weiteren wurden die Methoden zur Bestimmung der turbulenten Mittelwerte aus den Flamelet-Lösungen und die Bereitstellung der Flamelet-Parameter vorgestellt.

Kapitel 4 beschreibt die verwendeten Reaktionsmechanismen für die eingesetzten Modellbrennstoffe. Für die Simulation der Verbrennung in einer Gasturbinen-Brennkammer wurde ein Modellbrennstoff für Kerosin vorgestellt. Dieser Modellbrennstoff besteht zu 80% (Masse) aus *n*-Dekan und zu 20% aus Trimethylbenzol. Entsprechend wurden die Teilkinetiken der aliphatischen und der aromatischen Komponente in den Mechanismus integriert. Das verwendete statistische Modell zur Berechnung der Rußbildung und -oxidation wurde erläutert. Anschließend wurde der für die Simulation der Verbrennung von Methan in einer MILD-Brennkammer verwendete Reaktionsmechanismus für Kohlenwasserstoffe mit bis zu vier Kohlenstoff-Atomen beschrieben. Die Reaktionskinetik für beide Modellbrennstoffe wurde um Teilmechanismen für die Stickoxidbildung erweitert, welche eingehend erläutert wurden.

Die Anwendbarkeit des physikalisch und chemisch fundierten Berechnungsmoduls für die Schadstoffbildung in Gasturbinen- und MILD-Brennkammern konnte anhand der numerischen Simulationsergebnisse für den jeweils verwendeten Modellbrennstoff in den Kapiteln 5 und 6 gezeigt werden. In den wesentlichen Punkten konnte Übereinstimmung zu den vorliegenden Messergebnissen erzielt werden. Die zu dem Kerosin-Modellbrennstoff erstellte Reaktionskinetik und das verwendete detaillierte Rußmodell liefern gute Ergebnisse bei den numerischen Simulationsrechnungen. Die Verwendbarkeit des auf den ermittelten Daten aufbauenden Flamelet-Modells konnte anhand von Vergleichen mit von Rolls Royce Deutschland zur Verfügung gestellten Daten der Temperatur-, Spezies- und Rußmessungen an der Gasturbinen-Brennkammer nachgewiesen werden.

Anschließend wurde das Modell durch Vergleiche mit Messungen an einer MILD-Brennkammer überprüft. Insbesondere der Einfluss von Wärmeverlusten auf die Temperaturverteilung und die Bildung von Stickoxiden sowie die Stabilisierung der Flamme in Bereichen niedriger skalarer Dissipationsraten wurden diskutiert. Die starke Korrelation von Temperaturund  $NO_x$ -Emissionen konnte ebenso gezeigt werden wie die Fähigkeit des Moduls, Stickoxid-Emissionen in der richtigen Größenordnung zu berechnen. Dies wurde durch die Verwendung einer in den Reaktionsmechanismus für den Modellbrennstoff eingebundenen vollständigen Kinetik für Stickoxide erreicht.

Die Beschreibung der Rußbildung und -oxidation wurde anhand der Berechnung der Gasturbinen-Brennkammer diskutiert. Aufgrund der Oxidation der Rußpartikel beim Durchqueren der Fläche stöchiometrischer Mischung ist der Rußvolumenbruch im Abgas um mehrere Größenordnungen kleiner als in der Primärzone der Brennkammer, in welcher der Ruß gebildet wird. Das im Modul implementierte detaillierte Rußmodell ist in der Lage, diesen Sachverhalt des Rußabbrands in der Zumischzone wieder zu geben und die Emissionen für Ruß in der richtigen Größenordnung zu berechnen. Durch die Verwendung des neuen Reaktionsmechanismus und der Analyse der Reaktionspfade hin zu polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffen als Rußvorläufer konnte eine deutliche Verbesserung gegenüber den Ergebnissen mit dem zuvor verwendeten Ein-Komponenten-Modellbrennstoff erzielt werden.

Der Strahlungseinfluss wurde mit Hilfe vergleichender Rechnungen überprüft. Für die in dieser Arbeit untersuchte Gasturbinenbrennkammer wurden niedrige mittlere Verweilzeiten ermittelt. Des weiteren ist das Gasgemisch in der Brennkammer optisch dick. In Folge dessen wird die emittierte Strahlung schnell wieder durch das Gas absorbiert. Somit können die auftretenden Strahlungsverluste vernachlässigt werden. Durch Vergleiche der Ergebnisse für die Temperaturverteilung in der Brennkammer aus Simulationen unter Berücksichtigung bzw. Vernachlässigung der Strahlung wurde diese Annahme bestätigt. In der MILD-Brennkammer ist der Strahlungseinfluss aufgrund der hohen Verweilzeiten nicht vernachlässigbar und musste bei den Simulationsrechnungen berücksichtigt werden. Ebenfalls berücksichtigt wurden Wärmeverluste durch Wandwärmeübergang. Diese Verlustterme beeinflussten die Temperaturverteilung im Strömungsfeld. Durch Konditionierung dieser Verluste auf einen charakteristischen Wert des Mischungsbruchs konnten die Verluste als Parameter an die Flamelet-Rechnungen übertragen werden und führten zu realistischen Temperaturverteilungen im Mischungsbruchraum und damit zu deutlich verbesserten Simulationsergebnissen für Stickoxide.

## Literaturverzeichnis

- A. Al-Halbouni, A. Giese, M. Flamme, J. G. Wünning, B. Michalski, and V. Scherer. Neue Brennersysteme zur dezentralen Nutzung von schwachkalorigen Gasen in Mikro-Gasturbinen. In VDI Berichte Nr. 1750, pages 275–280, 2003.
- [2] Hans-Jürgen Arpe, editor. Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry. Wiley-VCH, 2002.
- [3] X.-S. Bai, M. Balthasar, F. Mauss, and L. Fuchs. Detailed soot modeling in turbulent jet diffusion flames. *Proc. Combust. Inst.*, 27:1623–1630, 1998.
- [4] M. Balthasar, F. Mauss, M. Pfitzner, and A. Mack. Implementation and validation of a new soot model and application to aeroengine combustors. ASME Paper 2000-GT-0142, 2000.
- [5] R. S. Barlow and J.-Y. Chen. On transient flamelets and their relationship to turbulent methane-air jet flames. *Proc. Combust. Inst.*, 24:231–237, 1992.
- [6] H. Barths, C. Antoni, and N. Peters. Three-dimensional simulation of pollutant formation in a DI-diesel engine using multiple interactive flamelets. *SAE paper*, 982459, 1998.
- [7] H. Barths, N. Peters, N. Brehm, A. Mack, M. Pfitzner, and V. Smiljanovski. Simulation of pollutant formation in a gas turbine combustor using unsteady flamelets. *Proc. Combust. Inst.*, 27:1841–1847, 1998.
- [8] D. L. Baulch, C.J. Cobos, R.A. Cox, P. Frank, G. Hayman, Th. Just, J.A. Kerr, T. Murrells, M.J. Pilling, J. Troe, R.W. Walker, and J. Warnatz. Evaluated kinetic data for combustion modelling. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 98:411–429, 1992.
- [9] G. Bikas. *Kinetic Mechanisms for Hydrocarbon Ignition*. PhD thesis, RWTH Aachen, 2001.
- [10] R. W. Bilger. The structure of diffusion flames. *Combust. Sci. and Technol.*, 13:155–170, 1976.

- [11] R. W. Bilger. Turbulent flows with nonpremixed reactants. In P. A. Libby and F. A. Williams, editors, *Turbulent Reacting Flows*, pages 65–113. Springer-Verlag, Berlin, 1980.
- [12] M. Bollig. Berechnung laminarer Kohlenwasserstoffflammen im Hinblick auf die Stickoxidbildung in Verbrennungsmotoren. PhD thesis, RWTH Aachen, 1998.
- [13] M. Bollig, J. Hewson, B. Rogg, and N. Peters. Reduced kinetic model for  $NO_x$  formation and development of the flamelet library and formulation of a turbulent radiation model. Technical report, IDEA Report, 1994.
- [14] J. Boussinesq. Théorie de l'écoulement tourbillant. *Mem présenté par divers Savants Acad. Sci. Inst. Fr.*, 23:46–50, 1877.
- [15] W. J. G. Bräunling. *Flugzeugtriebwerke*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 2001.
- [16] N. Brehm, A. Mack, and V. Smiljanowski. Low emission technology for the next generation of aeroengines: Industrial application of CFD in the design and development process. In *Ercoftac Summer School*, 1997.
- [17] H. Breitbach, J. Göttgens, F. Mauss, H. Pitsch, and N. Peters. Laminar counterflow mixing of acetylene into hot combustion products. *Proc. Combust. Inst.*, 25:1357–1364, 1994.
- [18] H. T. Brocklehurst, C. H. Priddin, and J. B. Moss. Soot predictions within an aero gas turbine combustion chamber. ASME Paper 97-GT-148, 1997.
- [19] S. P. Burke and T. E. W. Schumann. Diffusion flames. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 1, pages 2–11. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1928.
- [20] A. Cavaliere and M. de Joannon. Mild combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, submitted to publication, 2004.
- [21] Gyung-Min Choi and Masashi Katsuki. Chemical kinetic study on the reduction of nitric oxide in highly preheated air combustion. In *Twenty-Ninth Symposium (International) on Combustion*, pages 1165–1171, Pittsburgh, 2002. The Combustion Institute.
- [22] P. J. Coelho and N. Peters. Numerical simulation of a MILD combustion burner. *Combust. Flame*, 124:503–518, 2001.
- [23] P. J. Coelho and N. Peters. Unsteady modelling of a piloted methane / air jet flame based on the eulerian particle flamelet model. *Combust. Flame*, 124:444–465, 2001.

- [24] S. M. Correa. A review of  $NO_x$  formation under gas-turbine combustion conditions. *Combust. Sci. and Technol.*, 87:329–362, 1992.
- [25] S. M. Correa. Power generation and aeropropulsion gas turbines: From combustion science to combustion technology. *Proc. Combust. Inst.*, 27:1793–1807, 1998.
- [26] S. M. Correa and W. Shyy. Computational models and methods for continuous gaseous turbulent combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 13:249–292, 1987.
- [27] D. S. Crocker, C. E. Smith, and G. D. Myers. Pattern factor reduction in a reverse flow gas turbine combustor using angled dilution jets. ASME paper 94-GT-406, 1994.
- [28] B. B. Dally, A. N. Karpetis, and R. S. Barlow. Structure of turbulent non-premixed jet flames in a diluted hot coflow. In *Twenty-Ninth Symposium (International) on Combustion*, volume 29, pages 1147–1154. The Combustion Institute, Pittsburgh, 2002.
- [29] B.B. Dally, E. Riesmeier, and N. Peters. Effect of fuel mixture on mild combustion. *Submitted to Comb. Flame*, 2003.
- [30] M. de Joannon, A. Cavaliere, R. Donnarumma, and R. Ragucci. Dependence of autoignition delay on oxygen concentration in mild combustion of high molecular weight paraffin. In *Twenty-Ninth Symposium (International) on Combustion*, pages 1139–1146, Pittsburgh, 2002. The Combustion Institute.
- [31] M. de Joannon, G. Langella, F. Beretta, A. Cavaliere, and C. Noviello. Mild combustion: Process features and technological constrains. In *Proceedings of the Mediterranean Combustion Symposium*, pages 347–360. Mediterranean Combustion Symposium, 1999.
- [32] C. Douté, J.-L. Delfau, and C. Vovelle. Modeling of the structure of a premixed n-decane flame. *Combust. Sci. Technol.*, 130:269–313, 1997.
- [33] E. Effelsberg and N. Peters. Scalar dissipation rates in turbulent jets and jet diffusion flames. *Proc. Combust. Inst.*, 22:693–700, 1988.
- [34] G. M. Faeth. Evaporation and combustion of sprays. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 9:1–76, 1983.
- [35] C. P. Fenimore. Studies of fuel-nitrogen in rich flame gases. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 17, page 661. The Combustion Institute, 1979.
- [36] Fluent Inc., Lebanon, NH 03766, USA. FLUENT 6.1 Documentation, 2003.
- [37] M. Frenklach. Computer modeling of infinite reaction sequences: A chemical lumping. *Chemical Engineering Science*, 40(10):1843–1849, 1985.

- [38] M. Frenklach and W. C. Gardiner. Representation of multistage mechanisms in detailed computer modeling of polymerisation kinetics. *J. Phys. Chem.*, 88:6263–6266, 1984.
- [39] M. Frenklach and S. J. Harris. Aerosol dynamics modeling using the method of moments. J. Coll. Interf. Sci., 118:252–261, 1987.
- [40] M. Frenklach and H. Wang. Detailed modeling of soot particle nucleation and growth. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 23, pages 1559–1566. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990.
- [41] M. Frenklach and J. Warnatz. Detailed modeling of pah profiles in a sooting low-pressure acetylene flame. *Combust. Sci. Technol.*, 51:265–283, 1987.
- [42] S. K. Friedlander. Smoke, Dust and Haze. Wiley and Sons, 1986.
- [43] S. Fukushima, Y. Suzukawa, T. Akiyama, Y. Kato, A. Fujibayashi, and T. Tada. Ecofriendly regenerative burner heating system technology application and its future prospects. Technical report, NKK Technical Review No. 87, 2002.
- [44] E. J. Fuller and C. E. Smith. Integrated CFD modeling of gas turbine combustors. AIAA-93-2196, 1993.
- [45] C. Hasse, G. Bikas, and N. Peters. Modeling of DI-Diesel combustion using the Eulerian Particle Flamelet Model (EPFM). *Paper No. SAE 2000-01-2934*, 2000.
- [46] C. Hasse and N. Peters. RIF Fortran Version 3.7. Advanced Combustion, 2002.
- [47] C. Hasse, S. Vogel, and N. Peters. Modeling of a Daimlerchrysler truck engine using an eulerian spray model. In 13th International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting. Cray Inc, 2003.
- [48] T. Hellström. RIF Implementation and Testing, Task 9, DIESEL. Technical report, 01.07.'96-31.12.'96, 1997.
- [49] C. Hergart and N. Peters. Applying the representative interactive flamelet model to evaluate the potential effect of wall heat transfer on soot emissions in a small-bore di diesel engine. Proceedings of the American Society of Mechanical Engineers, ICE-Division Spring Technical Conference, Philadelphia, 2001.
- [50] C. A. Hergart, H. Barths, and N. Peters. Using representative interactive flamelets in the three-dimensional modeling of diesel combustion including the effect of heat transfer. In *Tenth International Multidimensional Engine Modeling User's Group Meeting*. Cray Research Inc., 2000.

- [51] H. C. Hewson and M. Bollig. Reduced mechanisms for  $NO_x$  emissions from hydrocarbon diffusion flames. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 26, pages 2171–2180. The Combustion Institute, 1996.
- [52] C. L. Hubbard and C. L. Tien. Infrared mean absorption coefficients of luminous flames and smoke. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 10:319–339, 1982.
- [53] W. P. Jones. Turbulence modeling and numerical solution methods for variable density and combusting flows. In P. A. Libby and F. A. Williams, editors, *Turbulent Reacting Flows*, pages 309–374. Academic Press, 1994.
- [54] W. P. Jones and B. E. Launder. The prediction of laminarization with a two-equation model of turbulence. *Int. J. Heat Mass Transfer*, pages 301–314, 1972.
- [55] W. P. Jones and Y. Prasetyo. Probability density function modeling of premixed turbulent opposed jet flames. *Proc. Combust. Inst.*, 26:275–282, 1996.
- [56] W. P. Jones and J. H Whitelaw. Calculation methods for turbulent reacting flows: A review. *Combust. Flame*, 48:1–26, 1982.
- [57] A. N. Kolmogorov. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluids for very large reynolds numbers. *Doklady Akademii Nauk SSSR*, 30:301–305, 1941.
- [58] A. N. Kolmogorov. The equations of turbulent motion in an incompressible fluid. *Izvestia Acad. Sci. USSR; Phys.*, 6:56–58, 1942.
- [59] S. Kumar, P. J. Paul, and H. S. Mukunda. Studies on a new high-intensity low-emission burner. In *Twenty-Ninth Symposium (International) on Combustion*, pages 1131–1137, Pittsburgh, 2002. The Combustion Institute.
- [60] K. K. Y. Kuo. Principles of Combustion. John Wiley and Sons, New York, 1986.
- [61] B. E. Launder and B. I. Sharma. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Lett. Heat Mass Transf.*, 1:131–138, 1974.
- [62] B. E. Launder and D. B. Spalding. *Lectures in Mathematical Models of Turbulence*. Academic Press, London, England, 1972.
- [63] G. A. Lavoie, J. B. Heywood, and J. C. Keck. Experimental and Theoretical Study of Nitric Oxide Formation in Internal Combustion engines. *Combust. Sci. Technol.*, 1:313– 338, 1970.
- [64] K. M. Leung and R. P. Lindstedt. Detailed kinetic modeling of  $c_1 c_3$  alkane diffusion flames. *Combust. Flame*, 102:129–160, 1995.

- [65] S. K. Liew, K. N. C. Bray, and J. B. Moss. A stretched laminar flamelet model of turbulent nonpremixed combustion. *Combust. Flame*, 56:199–213, 1984.
- [66] F. Mauss. *Entwicklung eines kinetischen Modells der Ruβbildung mit schneller Polymerisation*. PhD thesis, RWTH Aachen, 1997.
- [67] F. Mauss, D. Keller, and N. Peters. A lagrangian simulation of flamelet extinction and re-ignition in turbulent jet diffusion flames. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 23, pages 693–698. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1990.
- [68] F. Mauss, B. Trilken, B. Breitbach, and N. Peters. *Soot Formation in Combustion*, chapter Soot Formation in Partially Premixed Diffusion Flames. Springer Verlag, 1994.
- [69] A. M. Mellor. Design of Modern Turbine Combustors. Academic Press, 1990.
- [70] J. A. Miller and C. T. Bowman. Prog. Energy Combust. Sci., 15:287–338, 1989.
- [71] J. A. Miller and C. F. Melius. Kinetic and thermodynamic issues in the formation of aromatic compounds in flames of aliphatic fuels. *Combust. Flame*, 91:21–39, 1992.
- [72] J. A. Miller, J. V. Volponi, and J.-F. Pauwels. The effect of allene addition on the structure of a rich c<sub>2</sub>h<sub>2</sub>/o<sub>2</sub>/ar flame. *Combust. Flame*, 105:451–461, 1996.
- [73] R. K. Mongia, E. Tomita, F. K. Hsu, L. Talbot, and R. W. Dibble. Use of an optical probe for time-resolved in situ measurement of local air-fuel ratio and extent of fuel mixing with applications to low  $NO_x$  emissions in premixed gas turbines. In *Twenty-Sixth Symposium (International) on Combustion*, pages 2749–2755, Pittsburgh, 1996. The Combustion Institute.
- [74] M. Oberlack, R. Arlitt, and N. Peters. On stochastic damköhler number variations in a homogeneous flow reactor. *Combust. Theory Modelling*, 4:495–509, 2000.
- [75] I. B. Özdemir and N. Peters. Characteristics of the reaction zone in a combustor operating at mild combustion. *Experiments in Fluids*, 30:683–695, 2001.
- [76] S.V. Patankar. Numerical Heat Transfer and Fluid Flow. Hemisphere Publishing Corporation, Washington D.C., 1980.
- [77] C. Pels-Leusden. *Experimentelle und theoretische Untersuchung der Ruβbildung in laminaren Gegenstromdiffusionsflammen.* PhD thesis, RWTH Aachen, 2001.
- [78] N. Peters. Local quenching of diffusion flamelets and non-premixed turbulent combustion. *Combust. Sci. and Technol.*, 30:1–17, 1983.
- [79] N. Peters. Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 10:319–339, 1984.

- [80] N. Peters. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 21, pages 1231–1250. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1986.
- [81] N. Peters. Length scales in laminar and turbulent flames. *AIAA journal, Numerical Approaches to Combustion Modeling*, 135:155–182, 1991. Progress in Astronautics and Aeronautics.
- [82] N. Peters. Turbulent Combustion. Cambridge University Press, 2000.
- [83] N. Peters. Principles and potential of HiCOT combustion. In *Proceedings of the Forum* on *High-Temperature Air Combustion Technology*, page 109. Josui Kaikan, 2001.
- [84] U. Pfahl, K. Fiewegger, and G. Adomeit. Shock tube investigation of ignition delay times of multicomponent fuel/air-mixtures under engine relevant conditions. Technical report, IDEA EFFECT, 1996.
- [85] H. Pitsch. Modellierung der Zündung und Schadstoffbildung bei der dieselmotorischen Verbrennung mit Hilfe eines interaktiven Flamelet-Modells. PhD thesis, RWTH Aachen, 1997.
- [86] H. Pitsch, H. Barths, and N. Peters. Three-dimensional modeling of no<sub>x</sub> and soot formation in di-diesel engines using detailed chemistry based on the interactive flamelet approach. *Paper No. SAE 962057*, 1996.
- [87] H. Pitsch, M. Chen, and N. Peters. Unsteady flamelet modeling of turbulent hydrogen-air diffusion flames. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 27, pages 1057–1064. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1998.
- [88] H. Pitsch and N. Peters. Reduced kinetics of multicomponent fuels to describe the auto-ignition, flame propagation and post flame oxidation of gasoline and diesel fuels. Technical report, IDEA EFFECT, 1996.
- [89] H. Pitsch and N. Peters. A consistent flamelet formulation for non-premixed combustion considering differential diffusion effects. *Combust. Flame*, 114:26–40, 1998.
- [90] H. Pitsch and N. Peters. Investigation of the ignition process of sprays under diesel engine conditions using reduced *n*-heptane chemistry. *Paper No. SAE 982464*, 1998.
- [91] H. Pitsch, E. Riesmeier, and N. Peters. Unsteady flamelet modeling of soot formation in turbulent diffusion flames. *Combust. Sci. and Technol.*, 158:389–406, 2000.
- [92] H. Pitsch, Y. P. Wan, and N. Peters. Numerical investigation of soot formation and oxidation under diesel engine conditions. *Paper No. SAE 952357*, 1995.

- [93] T. Plessing, N. Peters, and J. G. Wünning. Laseroptical investigation of highly preheated combustion with strong exhaust gas recirculation. *Proc. Combust. Inst.*, 27:3197–3204, 1998.
- [94] S. B. Pope. Turbulent Flows. Cambridge University Press, Cambridge, U. K., 2000.
- [95] L. Prandtl. Bericht über die Entstehung der Turbulenz. Z. Angew. Math. Mech., 5:136– 139, 1925.
- [96] L. Prandtl. über ein neues Formelsystem für die ausgebildete Turbulenz. Nachr. Akad. Wiss. Göttingen, Math.-Phys. K1, pages 6–19, 1945.
- [97] E. Riesmeier, N. Peters, J. Hentschel, and H. Bockhorn. Abschlussbericht über das Vorhaben Nr. 738. Technical report, Heft R 520 (2003), Informationstagung Turbinen, Frühjahr 2003, Frankfurt, 2003.
- [98] M. D. Smooke, editor. Reducing mechanisms. Springer Verlag, 1991.
- [99] R. C. Steele, P. C. Malte, D. G. Nicol, and J. C. Kramlich. NO<sub>x</sub> and N<sub>2</sub>O in lean premixed jet-stirred flames. *Comb. Flame*, 100:440–449, 1995.
- [100] S. E. Stein, J. A. Walker, M. M. Suryan, and A. Fahr. A new path to benzene in flames. In *Proc. Combust. Inst.*, volume 23, pages 85–91. The Combustion Institute, Pittsburgh, 1991.
- [101] J. Swithenbank, I. Poll, and M. W. Vincent. Combustion design fundamentals. In *Four-teenth Symposium (International) on Combustion*, pages 627–638, Pittsburgh, 1973. The Combustion Institute.
- [102] H. Tennekes and J. L. Lumley. A First Course in Turbulence. MIT Press, 1972.
- [103] J. Warnatz, U. Maas, and R. W. Dibble. Combustion- Physical and Chemical Fundamentals, Modeling and Simulation, Experiments, Pollutant Formation-. Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1996.
- [104] R. Weber, S. Orsino, N. Lallemant, and A. Verlaan. Combustion of natural gas with high-temperature air and large quantities of flue gas. In *Twenty-Eighth Symposium (International) on Combustion*, pages 1315–1321, Pittsburgh, 2000. The Combustion Institute.
- [105] P. R. Westmoreland, A. M. Dean, J. B. Howard, and J. P. Longwell. Forming benzene in flames by chemically activated isomerization. *J. Phys. Chem*, 93:8171, 1989.
- [106] F. A. Williams. Recent advances in theoretical descriptions of turbulent diffusion flames. In S. N. B. Murthy, editor, *Turbulent Mixing in Nonreactive and Reactive Flows*, pages 189–208. Plenum Press, New York, 1975.

- [107] F. A. Williams. *Combustion Theory*. The Benjamin/Cummins Publishing Co., Menlo Park Ca., 1985.
- [108] P. E. Wolveridge. *Modern Petroleum Technology, Volume 2, Downstream*, chapter Aviation Turbine Fuels. John Wiley & Sons, 2000.
- [109] J. A. Wünning and J. G. Wünning. Flameless oxidation to reduce thermal NO-formation. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 23:81–94, 1997.
- [110] K. J. Young, C. D. Stewart, and J. B. Moss. Soot formation in turbulent nonpremixed kerosine-air flames burning at elevated pressure: Experimental measurement. In *Twenty-Fifth Symposium (International) on Combustion*, pages 609–617, Pittsburgh, 1994. The Combustion Institute.
- [111] Y. B. Zel'dovich. The oxidation of nitrogen in combustion and explosions. *Acta Physiochim.*, 21:577, 1946.

# Anhang A

# Symbolverzeichnis

## Lateinische Buchstaben

$a_{ij}$	_	Anzahl Atome des chemischen Elementes <i>j</i> in Mo-
		lekül der chemischen Komponente i
$c_p$	J/kgK	Wärmekapazität bei konstantem Druck
d	m	mittlerer Partikeldurchmesser
$D_i$	$m^2/s$	Binärer Diffusionskoeffizient der Spezies i
$D_{p,j}$	$m^2/s$	Diffusionskoeffizient eines Partikels der Größen-
1 )5	,	klasse j
$f_v$	$m^{3}/m^{3}$	Rußvolumenbruch
h	J/kg	Enthalpie
$\widetilde{I}_l$	_	Wahrscheinlichkeit, ein Flamelet l zu finden
j	_	Größenklasse
$\boldsymbol{j}_i$	$kg/m^2s$	molekularer Diffusionsflussvektor der Spezies i
$j_a$	$J/m^2s$	Wärmeflussvektor
$k^{4}$	$m^2/s^2$	turbulente kinetische Energie
$l_0$	m	integrales Längenmaß
$l_m$	m	Prandtl'scher Mischungsweg
Le <sub>i</sub>	-	Lewis-Zahl der Spezies <i>i</i>
$m_{j}$	kg	Masse eines Rußteilchens der Größenklasse j
$M_0$	$1/m^3$	statistisches Moment der Pdf der Rußpartikel, An-
		zahl Partikel pro Volumen
$M_1$	$1/m^3$	statistisches Moment der Pdf der Rußpartikel, An-
		zahl $C_2$ pro Volumen
$\dot{m}$	kg/s	chemische Produktionsrate
$n_s$	_	Gesamtzahl chemischer Spezies

N	$1/m^{3}$	Teilchendichte
p	Pa	Druck
$p_i$	Pa	Partialdruck der Spezies i
P	_	Wahrscheinlichkeit
$\dot{q}_R^{\prime\prime\prime}$	$J/m^3s$	Quellterm infolge Strahlung
Re	_	Reynolds-Zahl
$\operatorname{Sc}$	_	Schmidt-Zahl
old S	1/s	Deformations-Gradienten-Tensor
t	S	Zeit, Flamelet-Zeit
T	К	Temperatur
$\boldsymbol{v}$	m/s	Geschwindigkeitsvektor
V	$\mathrm{m}^3$	Volumen
$V_{i\alpha}$	m/s	Diffusionsgeschwindigkeit in Richtung der Raum-
		koordinaten $x_{\alpha}$
$W_i$	kg/mol	molare Masse der Spezies i
$x_{\alpha}$	m	kartesische Koordinate mit $\alpha$ =1,2,3
$\boldsymbol{x}$	m	Ortsvektor
$Y_i$	kg/kg	Massenanteil der Spezies i
Z	_	Mischungsbruch
$Z_j$	-	Massenbruch des chemischen Elements $j$

### Griechische Buchstaben

$\alpha_{P,i}$	$m^2/J$	Planckscher Absorptionskoeffizient der Spezies $i$
$\alpha_{P,Soot}$	1/m	Planckscher Absorptionskoeffizient für Ruß
$\beta$	-	beliebige Kopplungsfunktion
δ	-	Dirac-Delta-Funktion
ε	$m^2/s^3$	turbulente Dissipation
$\eta$	m	Kolmogorov-Länge
$\lambda$	J/mKs	Wärmeleitfähigkeit
$ u_t$	$m^2/s$	kinematische turbulente Scheinviskosität
$\mu_t$	kg/ms	dynamische turbulente Scheinviskosität
$\nu_j$	_	Anzahl Atome des Elements $j$
ρ	$kg/m^3$	Dichte
au	S	Zeit
$ au_0$	S	integrale Zeitskala
$ au_{\eta}$	S	Kolmogorov-Zeitskala
au	$kg/ms^2$	Schubspannungstensor

 $\chi$  <sup>1</sup>/<sub>s</sub>

Skalare Dissipationsrate

#### Konstanten

$c_{\varepsilon 1}$	1.44	$k - \varepsilon$ Modell-Konstante
$c_{\varepsilon 2}$	1.92	$k - \varepsilon$ Modell-Konstante
$c_{\mu}$	0.09	Kolmogorov-Konstante
$c_{\chi}$	2.0	Konstante für Modellierung der skalaren Dissipa-
		tionsrate
$m_1$	$24  \mathrm{kg/kmol}$	kleinste im Rußteilchen auftretende Masseneinheit
$N_A$	$6.022 \cdot 10^{23}  {}^{1}\!/{}_{ m mol}$	Avogadro-Konstante
$\Pr_k$	1.0	Prandtl-Zahl für turbulente kinetische Energie
$\Pr_{\varepsilon}$	1.3	Prandtl-Zahl für turbulente Dissipation
$R_{\text{Gas}}$	$8.314  \mathrm{J/mol}  \mathrm{K}$	universelle Gaskonstante
$\operatorname{Sc}_{\widetilde{Z}}$	0.7	turbulente Schmidt-Zahl für den Mischungsbruch
$\operatorname{Sc}_{\widetilde{Z''^2}}$	0.7	turbulente Schmidt-Zahl für die Varianz des Mi-
2		schungsbruchs
$\sigma_s$	$5.669 \cdot 10^{-8}  \mathrm{W/m^{2}K^{4}}$	Stefan-Boltzmann-Konstante

## Operatoren

$\nabla$	Nabla-Operator
$\mathcal{L}$	Differentialoperator
$\delta_{ij}$	Kronecker-Delta

#### **Superscripts**

räumnliche Mittelung
Ensemble-Mittelung
Favre Ensemble-Mittelung
Fluktuation um Ensemble-Mittelwert
Fluktuation um Favre Ensemble-Mittelwert

#### Subcripts

st	stöchiometrische Bedingungen
t	turbulent

#### Lebenslauf

#### **Persönliche Daten**

Name	Elmar Riesmeier
Geburtsdatum	22. März 1970
Geburtsort	Lippstadt
Familienstand	ledig
Nationalität	deutsch
Schulbildung	
1976–1980	Grundschule Lipperode
1980–1989	Ostendorf-Gymnasium Lippstadt; Abschluss: Abitur
Zivildienst	
1989–1990	Mobiler sozialer Hilfsdienst bei der Arbeiterwohlfahrt in Lippstadt
Studium	
10/1990–11/1998	Grund- und Hauptstudium Maschinenbau an der RWTH Aachen, Fachrichtung Wärmetechnik; Abschluss: Diplom
Berufserfahrung	
seit 12/1998	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Technische Mechanik der RWTH Aachen
11/1999–10/2002	Teilnahme am Graduiertenkolleg "Turbulenz und Ver- brennung" mit Bewilligung eines Doktorandenstipendiums durch die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) im Rahmen dieses Forschungsprojekts

#### Auslandsaufenthalt

03/1999–05/1999	Forschungsprojekt an der University of California at San
	Diego, USA