

# 1 EINLEITUNG

*... von der Zielstellung dieser Arbeit im Kontext der Endlichkeit fossiler Rohstoffe, des Klimawandels und den Herausforderungen der modernen Verbrennungsforschung.*

## 1.1 Energie, Ressourcen und Klimawandel

In der jährlich erscheinenden Studie *State of the Future* [1] der Denkfabrik *The Millenium Project* [2] benennen Experten aus allen Bereichen der Gesellschaft die ihrer Meinung nach 15 größten Herausforderungen der Menschheit der nächsten Jahrzehnte (vgl. ABBILDUNG 1.1). Untereinander in komplexer Abhängigkeit stehend, wird eine Vielzahl der genannten Aspekte durch eine Fragestellung umfasst, die Einfluss auf vielfältige Bereiche der Gesellschaft hat:

*Wie kann die Menschheit mit nachhaltiger, bezahlbarer und zuverlässiger Energie versorgt werden?*

Sei es zur Produktion von Industriegütern, zum Personen- und Warentransport oder zur Klimatisierung von Gebäuden, um nur einige der wichtigsten Positionen zu nennen [3] – unzweifelhaft ist die Versorgung mit Energie in ihren vielfältigen Formen ein zentraler Grundstein der heutigen globalen und in der Globalisierung begriffenen Gesellschaften. Zuwachs der Weltbevölkerung, Industrialisierung und Technisierung, wirtschaftliches Wachstum und Wohlstand gehen mit steigendem Energieverbrauch einher, doch gleichzeitig erfordern zwei direkt mit dem Energieverbrauch in Zusammenhang stehende maßgebliche Entwicklungen ein rasches Handeln auf gesellschaftlicher, politischer und wissenschaftlich-technischer Ebene: zum einen die Endlichkeit fossiler Energieträger in Ermangelung breit einsetzbarer alternativer Technologien, zum anderen der globale Klimawandel, dessen Hauptursache unzweifelhaft der anthropogene CO<sub>2</sub>-Ausstoß ist.

Folgende Zahlen sollen die beschriebene Problematik verdeutlichen. In den letzten 30 Jahren verdoppelte sich der globale Primärenergiebedarf auf rund 17.2 Mrd. t SKE (2007), wovon über 80 % auf fossile Brennstoffe (Öl, Kohle und Gas) entfielen [3]. Die energiebedingten jährlichen CO<sub>2</sub>-Emissionen verdoppelten sich ebenfalls und beliefen sich 2007 auf 31 Mrd. t [4]. Im Vergleich zum vorindustriellen Zeitalter erhöhte sich die atmosphärische CO<sub>2</sub>-Konzentration um 100 ppm auf rund 380 ppm und die mittlere globale Temperatur stieg um 0.74 °C. Gleichzeitig nahm die Häufigkeit extremer Wetterphänomene signifikant zu [5]. Schon heute gibt es starke Indikatoren dafür, dass der Klimawandel beginnt, die globalen Ökosysteme zu beeinträchtigen [6, 7, 8] – mit unabsehbaren Folgen für die Menschheit.

Zukünftige Trends in der Ressourcenlage und dem Klimawandel werden maßgeblich von drei Faktoren bestimmt werden: dem Bevölkerungswachstum, der Industrialisierung der Entwicklungs- und Schwellenländer sowie dem Einsatz neuer Technologien.

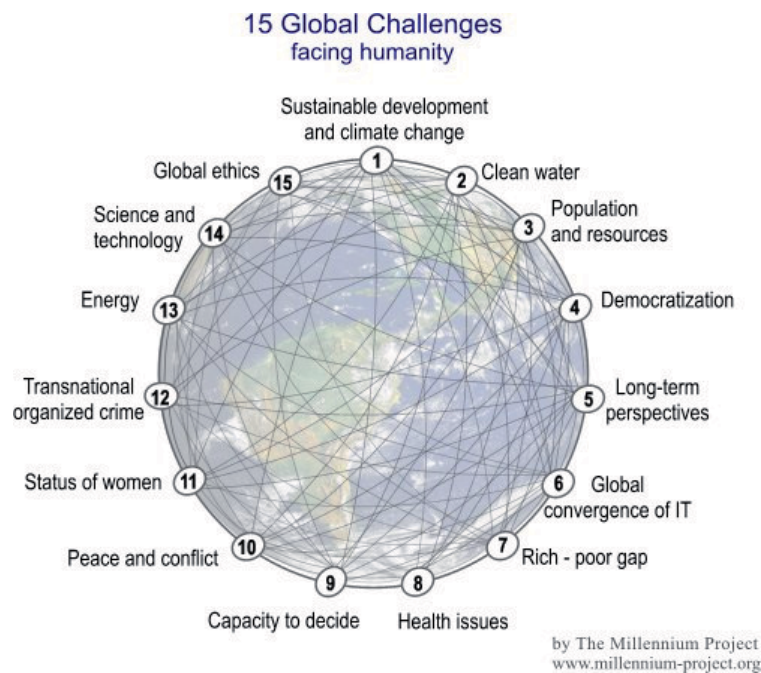


ABBILDUNG 1.1 – Die 15 globalen Herausforderungen der kommenden Jahrzehnte.

Zuverlässige Zukunftsprognosen der nächsten 50 bis 100 Jahre sind aufgrund der gegebenen Komplexität und der unbekanntenen Faktoren nicht möglich, wohl aber lassen sich in Was-wäre-wenn-Betrachtungen verschiedene Szenarien und deren Konsequenzen gegeneinander darstellen.

Im Bereich der fossilen Brennstoffe hängt die Reichweite zum einen von den nicht exakt bekannten Gesamtressourcen bzw. dem verbleibenden Potenzial (Definitionen gemäß [9]) sowie der Entwicklung der Förderraten ab. Bei gleichbleibenden bis moderat steigenden Raten wird bei Kohle von einer Reichweite von mindestens 100 Jahren bis einigen Jahrhunderten ausgegangen, wohingegen Erdgas und Erdöl innerhalb der nächsten 50 bis 150 Jahre erschöpft sein würden.

Allerdings wird das Klimasystem Erde die vollständige Umwandlung fossiler Brennstoffe in atmosphärisches CO<sub>2</sub> (rund 2800 Gt ab dem Jahr 2000 [10]) nicht ohne massive und zeitnahe (d.h. innerhalb von Dekaden) Änderungen tolerieren. Internationaler Konsens ist deshalb, die Erderwärmung langfristig auf 2 oder sogar 1.5 °C im Vergleich zum vorindustriellen Wert zu limitieren [11], um zumindest die gefährlichsten Folgen des Klimawandels abzuwenden und die Wahrscheinlichkeit sog. Kipp-Prozesse zu minimieren [12]. Um dieses Ziel zu erreichen, müssen sich die atmosphärischen Treibhausgas-Konzentrationen bei etwa 450 ppm CO<sub>2</sub>-Äquivalenten stabilisieren [5]. Hierfür beträgt das kumulative Globalbudget von 2000 bis 2050 in Abhängigkeit der verwendeten Klimamodelle und des Konfidenzintervalls nicht mehr als 1000 Gt CO<sub>2</sub> (bzw. 1500 Gt CO<sub>2</sub>-Äquivalente der Kyoto-Gase) [10, 13]. Die jährliche Emissionsmenge muss dafür umgehend bzw. sehr zeitnah ihr Maximum erreichen und dann bis 2050 auf Werte zwischen 0 und 5 Mrd. t CO<sub>2</sub> / Jahr limitiert werden. Die Menschheit ist also mit immensen Herausforderungen und sich rasch schließenden Handlungsfenstern konfrontiert.

International verbindliche Übereinkünfte werden sich nur dann erzielen lassen, wenn in einer für alle Staaten akzeptablen und für gerecht angesehenen Form, z.B. folgende Leitsätze als Grundlage zur Bestimmung nationaler Emissionsbudgets dienen [13]: Das *Verursacherprinzip*, das den Industrieländern mit hohen historischen Emissionswerten eine besondere Verantwortlichkeit zukommen lässt, das *Vorsorgeprinzip*, das auch den Entwicklungsländern eine nachholende, auf fossilen Energieträgern beruhende Entwicklung untersagt sowie das *Gerechtigkeitsprinzip*, das jedem Individuum prinzipiell die gleichen Emissionsrechte zubilligt. Nicht zuletzt muss auch in der Frage der Finanzierung und der Verteilung der Lasten eine Antwort gefunden werden.

Neben den notwendigen politischen und gesellschaftlichen Anstrengungen muss vor allem ein revolutionärer Technologiewandel stattfinden. Dieser Wandel muss eine Vielzahl von Maßnahmen in unterschiedlichsten Sektoren beinhalten. Hervorzuheben ist der eingangs erwähnte Energiesektor (öffentlich, industriell und privat), da mindestens 80 % der anthropogenen CO<sub>2</sub>-Emissionen in Zusammenhang mit der energetischen Nutzung fossiler Brennstoffe, d.h. Verbrennung und Umwandlung in Nutzenergie (Wärme, Elektrizität oder mechanische Arbeit), stehen [14]. Wichtige technologische Aspekte sind hierbei erstens eine *Energieeffizienz-Steigerung* bereits etablierter Technologien, um den Primärenergieeinsatz und damit den CO<sub>2</sub>-Ausstoß pro Nutzenergie bzw. die Menge benötigter Endenergie zu reduzieren, zweitens die Entwicklung und der breite Einsatz sog. *Carbon-Capture-and-Storage* (CCS)-Technologien, um bei Prozessen entstandenes CO<sub>2</sub> abzutrennen und geologisch oder marin zu sequestrieren sowie letztlich eine konsequente Umstrukturierung auf gänzlich CO<sub>2</sub>-neutrale *regenerative* bzw. *unerschöpfliche Energieformen*.

Die kurz- bis mittelfristigen technischen Maßnahmen, den Ausstoß von Treibhausgasen, allen voran CO<sub>2</sub>, zu reduzieren, umfassen vor allem Effizienzsteigerungen bei der energetischen Nutzung *fossiler* Energieträger, da diese einen Großteil des gesamten Primärenergieaufkommens ausmachen (s.o.). Aber selbst in einer *nicht fossilen*, auf erneuerbaren Quellen basierenden Energiewirtschaft könnten Wasserstoff, Biogase und -kraftstoffe und damit die Technik zu deren Verbrennung, eine wichtige Rolle einnehmen. Gerade in Bezug auf diese Brennstoffe muss auch den Emissionen klassischer Luftschadstoffe (CO, SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, flüchtige Kohlenwasserstoffe, Ruß und anderer Feinstäube [15]) sowie von Schall bzw. Lärm in technischen Verbrennungssystemen Beachtung geschenkt werden. Nicht zuletzt spielen Kosten- und Zuverlässigkeitsaspekte eine Rolle.

Die Verbrennungsforschung im weitesten Sinne beschäftigt sich mit dem Verständnis des Phänomens Verbrennung und trägt so zu den nötigen technischen Neu- und Weiterentwicklungen bei. Die spezifischen Forschungsfelder sind dabei so zahlreich wie die involvierten Phänomene und Wechselwirkungen und reichen von den physikalisch-chemischen Grundlagen bis hin zur technischen Anwendung, vom Experiment bis zur numerischen Simulation und von der Entwicklung bis zur Applikation der nötigen experimentellen und numerischen Techniken.

Die vorliegende Arbeit ist im Bereich der anwendungsorientierten Grundlagenforschung einzuordnen und beschäftigt sich mit der experimentellen Charakterisierung generischer, aber technisch relevanter Flammen.

## 1.2 Kontext dieser Arbeit

### 1.2.1 Charakteristika technischer Verbrennungsprozesse

Die technische Verbrennung ist i.Allg. ein komplexer Vorgang, der vielfältige physikalische und chemische Prozesse umfasst und sich über einen weiten Bereich von Zeit- und Größenskalen erstreckt. Involvierte Phänomene und Aspekte sind z.B.:

- **Komplexe Geometrie** – Technische Verbrennungssysteme (z.B. Brennkammern von Turbinen oder Kraftwerken, Verbrennungsmotoren, ...) sind meist komplizierte Konstruktionen mit einer Vielzahl von Komponenten stark unterschiedlicher Größen. Die Geometrie kann dabei auch zeitlich variabel sein.
- **Turbulente 3-dimensionale Strömung** – Technische Verbrennungssysteme sind i.d.R. für einen großen Durchsatz ausgelegt. Die hohen Strömungsgeschwindigkeiten bewirken dabei in Wechselwirkung mit der Geometrie die Ausbildung von Turbulenz.
- **Dynamik** – Technische Verbrennung ist stets ein dynamischer, instationärer (auch *transient* genannter) Prozess, der sowohl die *homogene* Instationarität der Turbulenz als auch ggf. die *inhomogene* Instationarität (z.B. bei Zünd- und Löschvorgängen) umfasst.
- **Phasenübergänge und Mehrphasenströmung** – Bei mit flüssigen oder festen Brennstoffen operierenden Systemen treten Mehrphasenströmungen auf, d.h. es finden wechselseitige Interaktionen zwischen Fluid und Partikeln bzw. Tropfen statt. Der Phasenübergang in die Gasphase spielt eine entscheidende Rolle für die anschließende Verbrennung.
- **Gemischbildung und Stofftransport** – Die Mischung zwischen gasförmigem Brennstoff und Oxidator (z.B. Luft) durch konvektiven und diffusiven Stofftransport entscheidet über die lokale stoffliche Zusammensetzung und darüber, ob das Gemisch zündfähig und brennbar ist. Die Zusammensetzung stellt die Rahmenbedingungen für die chemische Reaktion dar und beeinflusst somit maßgeblich den thermodynamischen Zustand (d.h. Temperatur und Zusammensetzung) nach der Verbrennung.
- **Chemische Reaktion, Zündung, Verlöschung und Wärmefreisetzung** – Die thermodynamischen und reaktionskinetischen Abläufe entscheiden über den Ausbrand (und damit über die Effizienz der Verbrennung) und die Bildung von Schadstoffen, wie Ruß, unverbrannten Kohlenwasserstoffen, Kohlenstoffmonoxid oder Stickoxi-

den. Zur Zündung und stabilen Verbrennung muss dem System zudem externe oder interne Wärmeenergie zugeführt werden. Die freigesetzte Wärme und die damit verbundene Druck- oder Volumenerhöhung stellt die intendierte Sekundärenergie dar.

- **Wärmetransport und Wandwechselwirkung** – Der Wärmetransport ist in Hinblick auf die Zündung entscheidend für die Stabilisierung der Verbrennung. Der konvektive oder strahlungsbedingte Wärmeübergang auf die Wände des Systems kann zu einer Verlangsamung der chemischen Reaktion oder lokaler Verlöschung führen und beeinflusst so das Ausbrandverhalten und die Schadstoffproduktion. Die Wände selbst werden thermisch belastet und ggf. in Mitleidenschaft gezogen, wenn sie nicht ausreichend gekühlt werden.
- **Strukturveränderungen** – Thermische und mechanische Kräfte führen zu mikroskopischen (Materialdegradation) oder makroskopischen (z.B. Wärmedehnung, Deformation, Schallentwicklung) Veränderungen des Systems.
- **Multilaterale Interaktionen** – Die gegenseitigen Wechselwirkungen aller genannten Phänomene macht die theoretische Beschreibung der technischen Verbrennung außerordentlich komplex, sodass i.Allg. lediglich mehr oder weniger isolierte und vereinfachte Teilaspekte betrachtet werden können.

Das Verständnis all dieser Vorgänge ist essentiell für die Weiterentwicklung und Verbesserung praktischer Verbrennungssysteme.

### 1.2.2 Mathematische Beschreibung technischer Verbrennung

Die treibende Motivation der Verbrennungsforschung ist letztendlich die Verbesserung technischer Verbrennungssysteme. Die heuristische Methode von „Versuch und Irrtum“ ist angesichts der Vielzahl involvierter Parameter und Komplexität der Wechselwirkungen allerdings mühselig und wenig Erfolg versprechend. Das Ziel muss daher sein, die einzelnen Abläufe durch Beobachtung bestmöglich zu verstehen und physikalisch-mathematische Modelle zu deren Beschreibung zu abstrahieren. Die Gesamtheit dieser Modelle unter Berücksichtigung ihrer Wechselwirkungen müsste dann in der Lage sein, ein technisches System abzubilden. Zwei grundsätzliche Probleme erschweren diesen Ansatz: Zum einen sind viele Prozesse nicht das, was man gemeinhin als deterministisch bezeichnet, d.h. sie haben einen probabilistischen Charakter und verhalten sich mitunter chaotisch. Chaotische Systeme hängen empfindlich von den Anfangsbedingungen ab, die für einen technischen Prozess nie mit hinreichender Genauigkeit bekannt oder kontrollierbar sind. Zum anderen lassen sich die beschreibenden nicht linearen Differentialgleichungen nicht analytisch, sondern nur numerisch lösen. In Kombination mit der durchaus beachtlichen Größe eines Verbrennungssystems und der Spanne der involvierten Skalen und Phänomene sind beträchtliche Ressourcen an Rechen- und Speicherkapazität zur Lösung des numerischen Problems nötig. Deshalb müssen zwangsläufig approximative Modelle angewandt werden. Die numerische Untersu-

chung eines oder mehrerer Modelle innerhalb eines definierten Parameterraums wird dann als *Simulation* bezeichnet. Weist diese eine hinreichende Übereinstimmung mit der Realität auf, kann sie einerseits genutzt werden, einzelne Prozesse besser zu verstehen oder andererseits Prädiktionen über die Reaktion des Systems bei geänderten Randbedingungen zu machen und auf diese Weise eine Optimierung herbeizuführen. Die Simulation kann dabei Bereiche zugänglich machen, die sich der experimentellen Beobachtung entziehen, und trägt dazu bei, technische Entwicklungsprozesse effektiver zu gestalten. Da heutzutage quasi ausschließlich Computer die Simulation durchführen, hat sich der Begriff *Computational Fluid Dynamics* (CFD) durchgesetzt.

Die Überprüfung, ob und unter welchen Randbedingungen eine Simulation korrekte Aussagen über das tatsächliche Verhalten macht, wird *Validierung* genannt und erfolgt über den Vergleich mit experimentellen Beobachtungen, d.h. konkreten physikalischen Messgrößen. Im Kontext der Verbrennungssimulation interessieren dabei vor allem Größen wie die Temperatur und Spezieskonzentrationen als Repräsentanten des chemischen Zustandes sowie die Geschwindigkeit als maßgebliche Größe des Strömungsfeldes, da diese für das gewünschte technische Verhalten des Systems entscheidend sind. Bei stochastischen Prozessen, wie etwa turbulenten Strömungen, muss der Vergleich auf statistischem Wege, d.h. mit den entsprechenden Momenten von Wahrscheinlichkeitsverteilungen, erfolgen.

### 1.2.3 Anforderungen an experimentelle Validierungsdaten

Die speziellen Anforderungen an experimentelle Validierungsdaten im Kontext der CFD von Verbrennungssystemen hängen im Einzelnen von der adressierten Fragestellung ab, dennoch lassen sich einige allgemein anerkannte Regeln [16] formulieren. Es ist dabei nicht zwangsläufig nötig oder überhaupt möglich, alle im Folgenden genannten Punkte zu erfüllen, da experimentelle Notwendigkeiten und numerische Anforderungen sich durchaus konträr verhalten können. Je mehr Kriterien jedoch erfüllt sind, desto höher wird die Aussagekraft des Vergleichs und desto eher kann man, bei Übereinstimmung, die Simulation bzw. die enthaltenen Modelle als validiert ansehen.

Die experimentellen Anforderungen lassen sich als zugehörig zu drei Bereichen klassifizieren. Für jeden Bereich werden im Anschluss die wesentlichen im Kontext dieser Arbeit erfüllten Aspekte beispielhaft vorweggenommen. Zur detaillierten Erklärung der Konzepte und Begrifflichkeiten sei auf die entsprechenden Kapitel verwiesen.

Zentraler Punkt ist das **Messobjekt**, das folgenden Punkten genügen muss oder sollte:

- **Adaption an die Fragestellung** – Das Messobjekt sollte möglichst isoliert die physikalisch-chemischen Attribute aufweisen, auf welche die theoretischen Modelle abzielen. Typische Untersuchungsobjekte weisen deshalb eine im Vergleich zur realen technischen Applikation reduzierte Komplexität auf – sie werden als *generische Konfigurationen* bezeichnet.

- **Parametervariationen** – Ein brauchbares Modell muss zumindest einen Bereich ähnlicher Randbedingungen korrekt abbilden können. Somit sollte auch die experimentelle Validierungsbasis Parametervariationen umfassen. Meist wird darunter eine Abwandlung der fluidischen Eigenschaften verstanden, also z.B. eine Änderung der Strömungsgeschwindigkeit oder der Brennstoffzusammensetzung. Auch entsprechende nicht reagierende Konfigurationen sind wünschenswert, um bestimmte Bestandteile der Simulation unter vereinfachten Bedingungen testen zu können.
- **Definierte Randbedingungen** – Da Strömungssysteme mitunter sensitiv auf die Randbedingungen reagieren, müssen sowohl Geometrie als auch Betriebsparameter klar definiert und dokumentiert sein. Dies erfordert zusätzlichen experimentellen Aufwand und ggf. Einbeziehung komplementärer Methoden.
- **Applikation der Messtechnik** – Das generische System muss sowohl für die Messung der Zielgrößen als auch für die der Randbedingungen zugänglich sein. Im Kontext moderner Laserdiagnostik (vgl. KAPITEL 3.2) versteht man darunter meist die optische Zugänglichkeit.

Die in dieser Arbeit untersuchten vorgemischten Flammen (vgl. KAPITEL 3.1) weisen einerseits hohe Turbulenzgrade, andererseits eine Stratifizierung (Schichtung), d.h. eine räumliche Variation des Brennstoff-Luft-Verhältnisses, auf. Sie dienen der Untersuchung der Chemie-Turbulenz-Interaktion im Allgemeinen und des Einflusses der Stratifizierung auf die vorgemischte Verbrennung im Speziellen. Darüber hinaus sind Geometrie des Brenners und Strömungsfeld bewusst einfach gehalten: Beides ist rotationssymmetrisch und Phänomene wie Drall oder Rezirkulation werden weitestgehend vermieden. Die axiale Ausdehnung des Brenners gewährleistet eine definierte Zuströmung zur Verbrennungszone. Zahlreiche Variationen der Einströmbedingungen, des Brennstoffes, der Brennstoffzusammensetzung sowie begleitende nicht reagierende Konfigurationen spannen einen weiten Parameterbereich auf. Die Brennerdüse ist für die Zugänglichkeit optischer Abbildungssysteme kleiner F-Zahl geeignet.

Der zweite Bereich umfasst Aspekte der angewandten **Messtechnik**:

- **Multi-Dimensionalität** – Die Messgröße sollte prinzipiell in möglichst vielen Raumrichtungen und der Zeit erfasst werden. Eine 4-dimensionale Messung, d.h. eine gleichzeitige volumetrische Erfassung der Messgröße innerhalb korrelierter Zeitabstände, stellte sozusagen das Höchstmaß der Diagnostik dar. Aus solch einer Messung könnten sämtliche zur Beschreibung des Systems nötigen räumlichen und zeitlichen Ableitungen bestimmt werden. In der Praxis ist eine der Symmetrie der Strömung angepasste Dimensionalität meist ein guter Kompromiss.
- **Multi-Skalarität** – Je mehr Messgrößen (z.B. Komponenten eines Geschwindigkeitsvektors, Temperatur, Konzentrationen...) gleichzeitig erfasst werden, desto höher wird der Informationsgehalt der Messung, da neben der Kenntnis der einzelnen Messgrößen auch Korrelationen zwischen selbigen bestimmt werden können.