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_2-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_x-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.

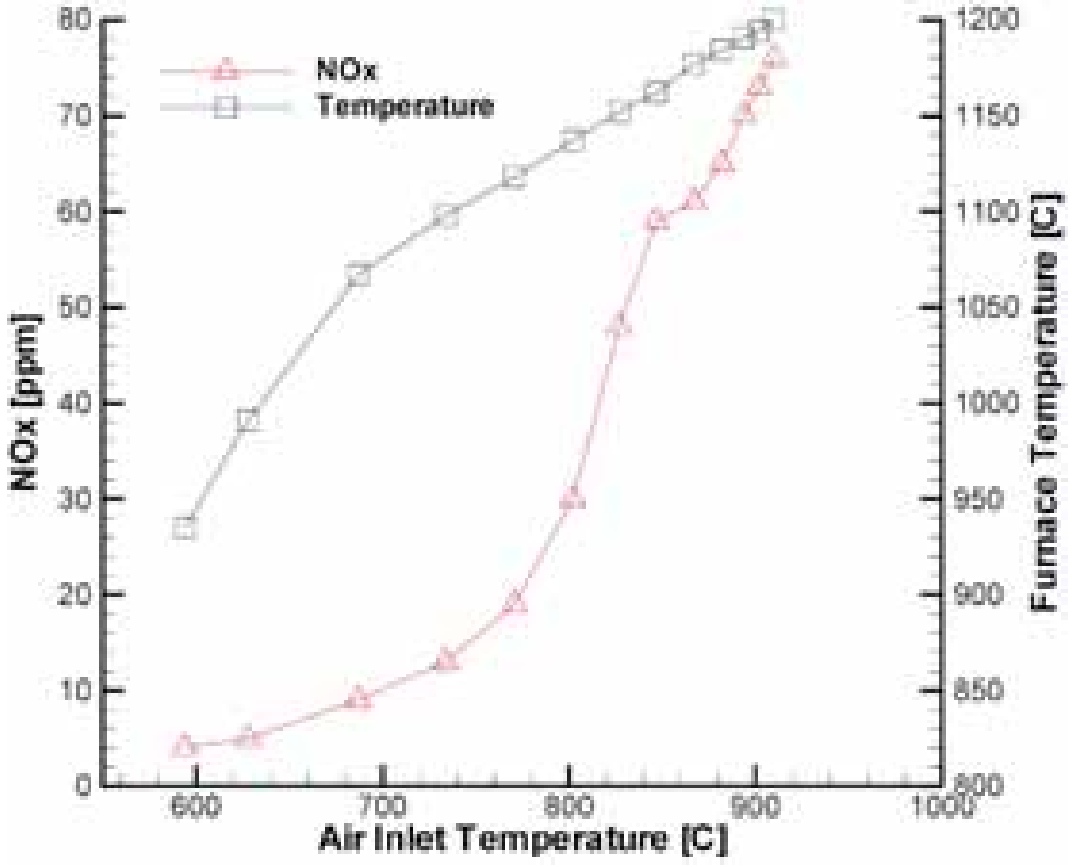

Abbildung 1.1: *Stickoxide und Brennkammer-Temperatur als Funktion der Luftvorwärm-Temperatur* [29]

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®-Brenners [109] für die Verbrennung schwachkaloriger Gase in Mikrogasturbinen und konnten so trotz stark vorgewärmter Verbrennungsluft extrem niedrige NO_x-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_x-Emissionen meist zu hoch sind. Komplexere NO_x-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_x über thermisches und Prompt-NO enthalten. Ebenso wird die Bildung von NO über N_2O sowie der Abbau von NO über den sogenannten NO-Reburn-Pfad beschrieben. Weiterhin ist die Oxidation von NO zu NO_2 enthalten.