

Frank Wetzel

# Numerische Untersuchungen zur Stabilität nicht-vorgemi- schter, doppelt-verdrallter Flammen





Frank Wetzel

**Numerische Untersuchungen zur Stabilität nicht-vorgemischter,  
doppelt-verdrallter Flammen**



# **Numerische Untersuchungen zur Stabilität nicht-vorgemischter, doppelt-verdrallter Flammen**

von  
Frank Wetzel



---

universitätsverlag karlsruhe

Dissertation, Universität Karlsruhe (TH)

Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik, 2007

## **Impressum**

Universitätsverlag Karlsruhe  
c/o Universitätsbibliothek  
Straße am Forum 2  
D-76131 Karlsruhe  
www.uvka.de



Dieses Werk ist unter folgender Creative Commons-Lizenz  
lizenziert: <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/2.0/de/>

Universitätsverlag Karlsruhe 2007  
Print on Demand

ISBN: 978-3-86644-154-5





# Numerische Untersuchungen zur Stabilität nicht-vorgemischter, doppelt-verdrallter Flammen

Zur Erlangung des akademischen Grades eines

Doktors der Ingenieurwissenschaften  
(Dr.-Ing.)

von der Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik  
der

Universität Fridericiana Karlsruhe (TH)

genehmigte

Dissertation

von

Dipl.-Ing. Frank Wetzel  
aus Laudenbach a. d. Bergstraße

Referent: Prof. Dr.-Ing. N. Zarzalis  
Korreferentin: Prof. Dr. B. Kraushaar-Czarnetzki  
Tag des Kolloquiums: 29.06.2007



Meiner Frau Judith gewidmet.



*Wenn ich weiter als andere gesehen habe, dann nur deshalb,  
weil ich auf den Schultern von Giganten stand.*

Isaac Newton

## Vorwort

Die vorliegende Arbeit ist am Lehrstuhl für Verbrennungstechnik des Engler-Bunte-Instituts der Universität Karlsruhe (TH) entstanden.

Meinem Doktorvater, Herrn Prof. Dr.-Ing. N. Zarzalis, danke ich für das mir entgegengebrachte Vertrauen zur Durchführung dieser Arbeit und die stete Bereitschaft, mich mit seinem tiefgründigen Fachwissen zu unterstützen. Sein großes Interesse an dieser Arbeit und die damit einhergehende Konkretisierung der Aufgabenstellung haben einen wesentlichen Teil zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen.

Frau Prof. Dr. B. Kraushaar-Czarnetzki danke ich für die Übernahme sowie die zügige und unkomplizierte Bearbeitung des Korreferats.

Die freundschaftliche, sogar familiäre Atmosphäre am Lehrstuhl für Verbrennungstechnik hat mein Leben stark bereichert, sodass mir die Zeit meiner Promotion stets positiv in Erinnerung bleiben wird. Besonders hervorheben will ich hierbei die Theorie- und EDV-Gruppe, namentlich: Peter Habisreuther, Matthias Hettel, meinen langjährigen Freund Thomas Lischer, Gerd Knochenhauer, Arne Hoffmann, Dirk Großschmidt, Wolfgang Paulat, Walter Pfeffinger, Oliver Brunn und Torsten Voigt, derer Unterstützung ich mir stets sicher sein konnte. Ich hoffe, dass diese Atmosphäre dem Lehrstuhl noch lange erhalten bleibt.

Für seine Unterstützung sowie die Bereitstellung der experimentellen Ergebnisse, auf welchen meine numerischen Untersuchungen aufbauen, schulde ich Herrn Klaus Merkle großen Dank.

Meinen Diplomarbeitern Christoph Windmeier und Ilian Dinkov sowie meinen wissenschaftlichen Hilfsassistenten Antoniya Nikolova und Matthias Kern danke ich für ihr Engagement und ihre Mitwirkung an dieser Arbeit.

Schließlich gilt mein weitaus größter Dank meiner Frau Judith. Ihre Bereitschaft, mich, unter Zurückstellung eigener Bedürfnisse und Interessen, zu unterstützen und entlasten, hat das Werden dieser Arbeit immerfort getragen.

Karlsruhe, Juni 2007.

Frank Wetzel



---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Physikalische und mathematische Beschreibung turbulenter Drallflammen</b>	<b>3</b>
2.1	Grundgleichungen reagierender Gasströmungen . . . . .	3
2.1.1	Bilanz der Gesamtmasse . . . . .	3
2.1.2	Bilanz des Impulses . . . . .	3
2.1.3	Bilanz der Energie . . . . .	4
2.1.4	Bilanz der Speziesmassen . . . . .	5
2.1.5	Bilanz der Elementmassen - Definition des Mischungsbruchs . .	6
2.1.6	Zustandsgleichung idealer Gase . . . . .	7
2.2	Reaktionskinetische Grundlagen . . . . .	7
2.3	Turbulente, verdrallte, isotherme Strömungen . . . . .	9
2.3.1	Charakteristika allgemeiner turbulenter Strömungen . . . . .	9
2.3.2	Turbulente Energiekaskade und turbulente Längenmaße . . . . .	10
2.3.3	Grundgleichungen zur Beschreibung des mittleren Strömungsfeldes	12
2.3.4	Tangentialgeschwindigkeitsverteilung und Wirbelform . . . . .	14
2.3.5	Charakterisierung der Stärke des Dralls durch die Drallzahl . . .	16
2.3.6	Vortex Breakdown . . . . .	16
2.3.7	Wechselwirkungen zwischen Rotation und Turbulenz . . . . .	18
2.4	Verbrennung in turbulenten, verdrallten Strömungen . . . . .	20
2.4.1	Kategorisierung allgemeiner Verbrennungsvorgänge . . . . .	21
2.4.2	Struktur und Eigenschaften laminarer Flammen . . . . .	21
2.4.3	Skalen und Klassifizierung turbulenzbedingter Reaktionsstrukturen	32
2.4.4	Effekte der Wechselwirkung von Verbrennung, Rotation und Turbulenz . . . . .	37
<b>3</b>	<b>Stabilität turbulenter Drallflammen</b>	<b>43</b>
3.1	Definition der Flammenstabilität . . . . .	43
3.2	Flammenstabilisierung durch Drall . . . . .	44
3.3	Stabilitätsmodelle . . . . .	45
3.3.1	Modelle auf Basis der kritischen Peclet-Zahl . . . . .	45

3.3.2	Reaktor-(Netzwerk-)Modelle . . . . .	46
3.3.3	Modelle auf der Basis des Energieaustausches . . . . .	47
3.3.4	Grenzen der Stabilitätsmodelle . . . . .	48
<b>4</b>	<b>Numerische Modellierung reagierender, turbulenter Drallströmungen</b>	<b>49</b>
4.1	Modellierung turbulenter, isothermer Drallströmungen . . . . .	49
4.1.1	Methoden zur Simulation turbulenter Strömungen . . . . .	49
4.1.2	Statistische Turbulenzmodelle . . . . .	51
4.1.3	Turbulenter Skalartransport . . . . .	56
4.1.4	Lokale, mittlere Aufenthaltszeit . . . . .	57
4.2	Modellierung der Reaktion in turbulenten Drallflammen . . . . .	58
4.2.1	Turbulente Reaktionsmodelle: Überblick . . . . .	58
4.2.2	Reaktionsmodelle für Drallflammen . . . . .	61
4.3	Nicht-adiabates JPDF-Reaktionsmodell . . . . .	62
4.3.1	Mathematische Grundlagen . . . . .	63
4.3.2	Schließung des zeitlich mittleren Reaktionsquellterms . . . . .	67
4.3.3	Wahl der JPDF-Variablen . . . . .	68
4.3.4	Konstruktion der JPDF . . . . .	77
4.3.5	Zusammenfassende Bewertung des nicht-adiabaten JPDF-Reaktionsmodells . . . . .	78
4.4	Die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik . . . . .	78
4.4.1	Idealisierte Reaktorsysteme . . . . .	80
4.4.2	Reduzierte Reaktionsmechanismen der Methanverbrennung . . . . .	82
4.4.3	Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik . . . . .	90
4.4.4	Mathematische Beschreibung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik . . . . .	92
<b>5</b>	<b>Untersuchtes System und numerisches Setup</b>	<b>101</b>
5.1	Geometrie und Kenngrößen . . . . .	101
5.1.1	Geometrie . . . . .	101
5.1.2	Kenngrößen . . . . .	103
5.2	Experimentelle Datenbasis . . . . .	104
5.2.1	Messtechnik und ermittelte Größen . . . . .	104
5.2.2	Betriebsparameter . . . . .	105
5.3	Charakteristika des Systems - experimenteller Befund . . . . .	106
5.3.1	System-Charakteristika und treibende physikalische Prozesse . . . . .	106
5.3.2	Experimenteller Befund . . . . .	108
5.3.3	Anforderungen an die numerische Simulation . . . . .	108
5.4	Numerische Vorgehensweise . . . . .	109
5.4.1	Verwendete Rechengitter . . . . .	109
5.4.2	Übersicht: durchgeführte Simulationen . . . . .	110
5.4.3	Fluidmechanische Randbedingungen . . . . .	113

5.4.4	Erfassung von Wärmeverlusten durch Konvektion, Konduktion und Strahlung . . . . .	114
5.5	Implementierung des nicht-adiabaten JPDF Reaktionsmodells . . . . .	116
5.5.1	PrePDF: Erzeugung der JPDF look-up Tabelle . . . . .	116
5.5.2	JPDF-Schnittstelle zu CFX-TASCflow <sup>TM</sup> . . . . .	118
5.6	Koeffizienten, Parameter, Implementierung und Validierung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik . . . . .	119
5.6.1	Bestimmung des stöchiometrischen Koeffizienten von O <sub>2</sub> . . . . .	120
5.6.2	Bestimmung der Parameter der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik . . . . .	120
5.6.3	Implementierung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik . . . . .	121
5.6.4	Validierung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik . . . . .	121
5.7	Hilfsgrößen zur Analyse der Simulationsergebnisse . . . . .	122
5.7.1	Normierte Stromfunktion . . . . .	122
5.7.2	Lokale Luftzahl und lokaler Ausbrandgrad . . . . .	125
<b>6</b>	<b>Ergebnisse der Simulation</b>	<b>127</b>
6.1	Isothermes Strömungsfeld . . . . .	128
6.1.1	Zeitlich mittleres Strömungsfeld . . . . .	128
6.1.2	Turbulenz im isothermen Strömungsfeld . . . . .	135
6.2	Isothermes Mischungsfeld . . . . .	136
6.2.1	Vergleich mit experimentellen Ergebnissen - Unterschiede Gleich-/Gegendrall . . . . .	136
6.2.2	Numerische Untersuchungen zu den Einflüssen auf das Mischungsfeld . . . . .	139
6.2.3	Modifikationen im Hinblick auf die Simulation der reagierenden Drallströmung . . . . .	142
6.3	Wärmefreisetzung und Wärmeabgabe . . . . .	143
6.3.1	Einfluss von Wärmeverlusten auf die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik . . . . .	143
6.3.2	Lokale Wärmeverluste im untersuchten System . . . . .	144
6.4	Charakteristika der reagierenden Drallströmung . . . . .	147
6.4.1	Zeitlich mittleres Strömungsfeld . . . . .	148
6.4.2	Turbulenz in der reagierenden Drallströmung . . . . .	157
6.4.3	Zeitlich mittleres Mischungsfeld . . . . .	159
6.4.4	Ausbrand und Temperatur . . . . .	163
6.5	Stabilitätsuntersuchung . . . . .	165
6.5.1	Kriterien zur Beurteilung der Stabilität des Systems . . . . .	166
6.5.2	Betriebsbereiche und Stabilitätsdiagramm . . . . .	168
6.5.3	Mechanismus der Stabilisierung . . . . .	171
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>177</b>

<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>XVI</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>XX</b>
<b>Nomenklatur</b>	<b>XXI</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

Die Verbrennung ist nach wie vor einer der wichtigsten Energieumwandlungsprozesse. Ihre technische Anwendung in Prozessfeuerungen, Dampferzeugern, Verbrennungsmotoren und Gasturbinen belegt ihre Schlüsselrolle v. a. im Kontext der Wärme- und Stromerzeugung sowie der Flugzeug- und Automobilindustrie.

Die technologische Weiterentwicklung von Verbrennungsprozessen der letzten Jahrzehnte und auch aktuellen Datums ist geprägt durch die Steigerung der Effizienz des Verbrennungsprozesses bei gleichzeitiger Optimierung hinsichtlich der Investitions- und Betriebskosten sowie der Einhaltung von Umweltschutzrichtlinien, die sich hauptsächlich in der Forderung nach minimalem Schadstoffausstoß abzeichnet. Einerseits resultiert hieraus der Trend zur Erhöhung des Durchsatzes bei - speziell im Hinblick auf mobile Anwendungen - kompakter, gewichtseinsparender Bauweise des Systems. Andererseits wird eine Minimierung der Schadstoffentstehung durch entsprechende Führung des Verbrennungsprozesses angestrebt, um meist kostenintensive, der Verbrennung nachgeschaltete Maßnahmen zur Abgasreinigung zu vermeiden.

Am Beispiel nitroser Gase lässt sich der Einfluss der Verbrennungsführung auf die Schadstoffentstehung veranschaulichen. Maximale Stickoxidkonzentrationen treten bei der Verbrennung nahestöchiometrischer Gemischzusammensetzungen auf. Abseits nahestöchiometrischer Zusammensetzungen können dennoch erhöhte Stickoxidkonzentrationen beobachtet werden, wenn die Mischung nicht ausreichend homogenisiert ist. Konzepte zur Minimierung der Stickoxidbildung basieren demnach auf der Vermeidung nahestöchiometrischer und nicht-stöchiometrischer inhomogener Zusammensetzungen im Verbrennungssystem, was z. B. durch gestufte (fett - mager) Verbrennung oder aber durch rein brennstoffarme Gemischzusammensetzungen erreicht werden kann. Als technische Realisierung bietet sich die magere, vorgemischte Verbrennung an; wegen der dabei bestehenden Gefahr der Selbstzündung bzw. des Flammenrückschlags, wird jedoch häufig die magere, nicht-vorgemischte Prozessführung favorisiert, die sich durch getrennte Zuführung von Brennstoff und Verbrennungsluft auszeichnet.

Die Maximierung der Energieumsatzdichte bei möglichst kompakter Bauweise bedingt Strömungsgeschwindigkeiten, die meist um ein vielfaches über der turbulenten Brenngeschwindigkeit der Flammen liegen. Folglich bedarf die Verbrennung in derart hoch belasteten Systemen einer besonderen, strömungsmechanischen Stabilisierung. Hierzu konnten sich Verbrennungssysteme etablieren, die eine durch Verdrallung der Verbrennungsluft induzierte innere Rückströmzone aufweisen, welche eine brennernahe Stabilisierung der Flamme auf Grund niedriger mittlerer Strömungsgeschwindigkeiten entlang ihres äußeren Randes, turbulenz-bedingter Steigerung der Wärmefreisetzung-

rate in Brenneraustrittsnähe und der Rückführung heißer Abgase zur Flammenwurzel ermöglicht. Als Weiterentwicklung solcher Systeme werden in zunehmendem Maße luftseitig zweiflutige Brenner angewendet, die durch die Möglichkeit gleich- und gegensinniger Verdrallung der beiden konzentrischen Luftströme einen weiteren Freiheitsgrad zur Beeinflussung des turbulenten Strömungsfeldes bieten, mit dem Ziel, eine Verbesserung der Stabilisierungseigenschaften des Systems zu erreichen. Im Falle der zur Schadstoffminderung angestrebten mageren, nicht-vorgemischten Verbrennung werden die bei nahe-stöchiometrischen Bedingungen maximalen Brenngeschwindigkeiten nicht erreicht, sodass selbst diese doppelt-verdrallten, rückströmungsstabilisierten Brenner Stabilitätsgrenzen und damit einen eingeschränkten Betriebsbereich aufweisen.

Auf Grund ihrer Komplexität sowie ihrer wechselseitigen Beeinflussung existiert für die physikalischen und chemischen Prozesse nahe der Stabilitätsgrenze turbulenter, nicht-vorgemischter Drallflammen bislang keine geschlossene Erklärung. Neueste, experimentelle Methoden ermöglichen zwar die Untersuchung bestehender Verbrennungssysteme, sind aber sehr kosten- und zeitintensiv, sodass ihre alleinige Anwendung im Entwicklungsprozess moderner Verbrennungssysteme nicht ausreicht. Alternativ bietet sich die numerische Simulation der reagierenden Strömung an, deren wesentlicher Vorteil in den vielfältigen Möglichkeiten der Untersuchung und gezielten Variation einzelner Teilprozesse liegt, welche mittels experimenteller Methoden, wenn überhaupt, nur unter erheblichem Aufwand zugänglich sind.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, die treibenden Mechanismen nahe der Stabilitätsgrenze nicht-vorgemischter, doppelt-verdrallter Flammen und den Einfluss gleich- und gegensinniger Verdrallung auf die Stabilisierungseigenschaften dieser Verbrennungssysteme mittels numerischer Methoden zu untersuchen. Hierzu werden in Kap. 2 die physikalischen und mathematischen Grundlagen bereit gestellt, die zur Beschreibung des untersuchten Systems nötig sind. Kapitel 3 ist der Stabilität turbulenter Drallflammen gewidmet und zeigt die Möglichkeiten und Grenzen existierender Stabilitätsmodelle auf. Die numerische Modellierung reagierender, turbulenter Drallströmungen wird in Kap. 4 behandelt. Hierbei sei im Besonderen auf die Beschreibung des nicht-adiabaten JPDF-Reaktionsmodells hingewiesen, das gegenüber bislang verfügbaren Reaktionsmodellen, welche die Behandlung nicht-vorgemischter, partiell-vorgemischter und vorgemischter Verbrennung bei gleichzeitiger Auflösung des Verbrennungsverlaufes ermöglichen, auch die Erfassung von Wärmeverlusten sowie deren Einflüsse auf die Verbrennungschemie erlaubt. Ausgehend von einer Beschreibung des untersuchten Systems und des experimentellen Befundes werden in Kap. 5 die Anforderungen an die numerische Simulation abgeleitet und die numerische Vorgehensweise beschrieben. Die Simulationsergebnisse werden schließlich in Kap. 6 diskutiert. Der erste Teil dieses Kapitels (Kap. 6.1 und Kap. 6.2) behandelt das isotherme Strömungs- und Mischungsfeld. In Kapitel 6.3 wird die Anwendung des nicht-adiabaten JPDF-Reaktionsmodells und die Notwendigkeit der Charakterisierung und Erfassung lokaler Wärmeverluste sowie deren Einflüsse auf die chemische Reaktionskinetik dargelegt. Im Falle der Strömung mit überlagerter Verbrennung (Kap. 6.4) werden die Simulationsergebnisse der Gleich- und Gegendrallkonfiguration untereinander sowie mit entsprechenden experimentellen Ergebnissen verglichen. Das abschließende Kapitel 6.5 behandelt das Stabilitätsverhalten des Systems und die unterschiedlichen Stabilisierungseigenschaften der Gleich- und Gegendrallkonfiguration.

## Kapitel 2

# Physikalische und mathematische Beschreibung turbulenter Drallflammen

## 2.1 Grundgleichungen reagierender Gasströmungen

Die vollständige Beschreibung reagierender Gasströmungen basiert auf den Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie. Ausführliche Ableitungen dieser Gleichungen finden sich z.B. in BIRD, STEWART & LIGHTFOOT [16], WILLIAMS [221] und SCHLICHTING [170]. Der Strömungszustand eines Fluids wird durch Masse- und Impulsbilanz (Navier-Stokes'sche Gleichungen) beschrieben; die Energiegleichung ermöglicht die Berücksichtigung von Wärmetransportvorgängen in Systemen, in welchen Temperaturunterschiede vorhanden sind. Die Berechnung reagierender Gasströmungen erfordert schließlich die Bilanzierung der Speziesmassen zur Berechnung deren Transports im Strömungsfeld. Die lokalen Werte von Dichte, Druck und Temperatur können durch die Zustandsgleichung des idealen Gases miteinander in Bezug gesetzt werden.

### 2.1.1 Bilanz der Gesamtmasse

Die Bilanz der Gesamtmasse (Kontinuitätsgleichung) lautet in Indexnotation unter Verwendung der Summationsregel nach Einstein<sup>1</sup> [170]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i)}{\partial x_i} = 0. \quad (2.1)$$

### 2.1.2 Bilanz des Impulses

Die Impulsbilanz bleibt in reaktiven sowie in isothermen Strömungen gleich:

$$\frac{\partial (\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\partial \tau_{ij,l}}{\partial x_i} + f_i. \quad (2.2)$$

Hierin sind  $f_i$  eingeprägte äußere Feldkräfte und  $\tau_{ij,l}$  der viskose Spannungstensor, der die viskosen Eigenschaften eines Fluids beschreibt und für Newton'sche Fluide durch

---

<sup>1</sup>Summationsregel nach Einstein: Tritt ein Index in einem Term doppelt auf, so ist über diesen Index von eins bis drei zu summieren.

(2.3) definiert ist:

$$\tau_{ij,l} = \mu_l \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right); \quad (2.3)$$

mit der molekularen, dynamischen Viskosität  $\mu_l$  und dem Kronecker-Symbol  $\delta_{ij}$ . Obwohl in der Impulsbilanzgleichung (2.2) kein expliziter, von chemischen Reaktionen abhängiger Term auftritt, üben diese über die Temperaturabhängigkeit der dynamischen Viskosität und der Dichte mitunter großen Einfluss auf die Impulsbilanz aus. Hieraus resultiert für reaktive Strömungen eine weitaus stärkere Variation der Reynolds-Zahl gegenüber isothermen Strömungen.

### 2.1.3 Bilanz der Energie

Nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik ist die Änderung der Energie eines Fluid-Volumens gleich der Summe aus zu-/abgeführter Wärme und am Fluid-Volumen verrichteter Arbeit. Demnach gilt für die Bilanz der inneren Energie  $e$  nach POINSOT & VEYNANTE [147]:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i e)}{\partial x_i} = -\frac{\partial j_i^q}{\partial x_i} + (\tau_{ij,l} - p\delta_{ij}) \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{q}_R + \rho \sum_{k=1}^{N_k} Y_k f_{k,i} V_{k,i}. \quad (2.4)$$

Der letzte Summand der rechten Seite in (2.4) repräsentiert die Leistung durch viskose Kräfte (Diffusionsgeschwindigkeiten  $V_{k,i}$  der Spezies  $k$  in Richtung  $i$ ) und Volumenkräfte ( $f_{k,i}$ : Volumenkräfte, die auf die Spezies  $k$  in Richtung  $i$  wirken); er wird im folgenden vernachlässigt. Die spezifische Enthalpie  $h$  steht nach:

$$h = e + p/\rho, \quad (2.5)$$

mit der inneren Energie  $e$  in Zusammenhang und kann für ein System aus  $N_k$  Spezies nach (2.6) berechnet werden:

$$h = \sum_{k=1}^{N_k} h_k Y_k. \quad (2.6)$$

Die spezifische Enthalpie  $h_k$  einer Spezies  $k$  ist die Summe aus ihrer spezifischen Bildungsenthalpie  $h_{f,k}^\circ$  bei Standardtemperatur  $T^\circ$  und ihrer spezifischen, fühlbaren Enthalpie  $h_{s,k}$ :

$$h_k = h_{f,k}^\circ + h_{s,k}, \quad (2.7)$$

mit:

$$h_{s,k} = \int_{T^\circ}^T c_{p,k}(T) dT, \quad (2.8)$$

worin  $c_{p,k}$  die spezifische Wärmekapazität der Spezies  $k$  bei konstantem Druck ist.

Mit (2.5) folgt aus (2.4) die Bilanzgleichung für die spezifische Enthalpie  $h$ :

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial j_i^q}{\partial x_i} + \tau_{ij,l} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{q}_R. \quad (2.9)$$

In (2.9) ist  $Dp/Dt$  die substantielle Ableitung des Drucks analog derer einer beliebigen Größe  $\Phi$  gemäß:

$$\frac{D\Phi}{Dt} = \frac{\partial\Phi}{\partial t} + \frac{\partial\Phi}{\partial x_i} \frac{\partial x_i}{\partial t}, \quad (2.10)$$

und  $\dot{q}_R$  ein Quellterm, der die Energiezufuhr durch Fernwirkung (z.B. Wärmestrahlung) berücksichtigt. Der Term  $\tau_{ij,l} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}$  beschreibt den Energietransport auf Grund von Reibungskräften. Unter Vernachlässigung des Dufour-Effektes (Enthalpie-Diffusion durch Massenbruch-Gradienten [16]), setzt sich der Wärmestrom  $j_i^q$  aus Wärmeleitung nach dem Fourier'schen Wärmeleitungsgesetz  $j_i^{q,c}$  [211]:

$$j_i^{q,c} = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} \quad (2.11)$$

und einem Enthalpiestrom  $j_i^{q,d}$  auf Grund der Diffusion von Spezies unterschiedlicher Enthalpie  $h_k$ :

$$j_i^{q,d} = \sum_{k=1}^{N_k} h_k j_i^k, \quad (2.12)$$

nach (2.13) zusammen:

$$j_i^q = j_i^{q,c} + j_i^{q,d}. \quad (2.13)$$

Mit Einführung der Prandtl-Zahl:

$$Pr = \frac{\mu_l \cdot c_p}{\lambda} = \frac{\nu_l}{\lambda / (\rho \cdot c_p)} = \frac{\nu_l}{a} \quad (2.14)$$

und der Definition der spezifischen Wärmekapazität bei konstantem Druck:

$$c_p = \left. \frac{\partial h}{\partial T} \right|_p, \quad (2.15)$$

folgt aus (2.11)-(2.13) mit (2.18) für den Wärmestrom:

$$j_i^q = -\frac{\mu_l}{Pr} \left[ \frac{\partial h}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N_k} \left( \frac{Pr}{Sc_k} - 1 \right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right]. \quad (2.16)$$

Die Prandtl-Zahl beschreibt hierbei das Verhältnis aus diffusivem Transport von Impuls und Temperatur wobei  $\lambda$  die Wärmeleitfähigkeit und  $a = \lambda / (\rho \cdot c_p)$  die Temperaturleitfähigkeit ist.

## 2.1.4 Bilanz der Speziesmassen

In einem System aus  $N_k$  Spezies gilt je eine Bilanzgleichung für die Massen aller chemischen Komponenten bzw. ihres Massenbruchs  $Y_k$ :

$$\frac{\partial (\rho Y_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i Y_k)}{\partial x_i} = -\frac{\partial j_i^k}{\partial x_i} + \dot{w}_k \quad k = 1, \dots, N_k. \quad (2.17)$$

Der in (2.17) auftretende Diffusionsstrom  $j_i^k$  lässt sich unter Vernachlässigung der Thermodiffusion (Diffusion auf Grund von Temperatur-Gradienten [16]) nach dem Fick'schen Diffusionsgesetz [16] durch (2.18) ausdrücken. Hierin ist die Schmidt-Zahl  $Sc_k$  der Spezies  $k$  nach (2.19) als das Verhältnis aus diffusivem Transport von Impuls

zu diffusivem Transport von Masse definiert.  $D_k$  ist der molekulare Diffusionskoeffizient der Spezies  $k$  im Gemisch [147]:

$$j_i^k = -\frac{\mu_l}{Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i}, \quad (2.18)$$

$$Sc_k = \frac{\mu_l}{\rho \cdot D_k}. \quad (2.19)$$

Der Term  $\dot{w}_k$  bezeichnet die Reaktionsrate der Spezies  $k$  und beschreibt damit die Änderung ihrer Teilchenzahldichte durch chemische Reaktionen. Für die Summe über das System aus  $N_k$  Teilchen gilt:

$$\sum_{k=1}^{N_k} Y_k = 1, \quad \sum_{k=1}^{N_k} Y_k j_i^k = 0 \quad \text{und damit} \quad \sum_{k=1}^{N_k} \dot{w}_k = 0. \quad (2.20)$$

### 2.1.5 Bilanz der Elementmassen - Definition des Mischungsbruchs

Im Gegensatz zu den Spezies werden die chemischen Elemente während der chemischen Reaktion weder verbraucht noch gebildet. Ihre Masse und damit auch ihre Massenbrüche bleiben unverändert. Für die Massenbrüche der chemischen Elemente  $Z_j$  gilt die Bilanzgleichung:

$$\frac{\partial (\rho Z_j)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i Z_j)}{\partial x_i} = -\frac{\partial j_i^j}{\partial x_i}. \quad (2.21)$$

Mit den Speziesmassenbrüchen  $Y_k$  sind die Massenbrüche der chemischen Elemente  $Z_j$  (Elementmassenbrüche) über:

$$Z_j = \sum_{k=1}^{N_k} \nu_k^j \cdot \frac{W_j}{W_k} \cdot Y_k \quad (2.22)$$

verknüpft, wobei die Koeffizienten  $\nu_k^j$  die Anzahl der Atome des Elements  $j$  in der Spezies  $k$  angeben.  $W_j$  bzw.  $W_k$  bezeichnen die Molmassen des Elements  $j$  bzw. der Spezies  $k$ . Der Diffusionsstrom eines Elements  $j_i^j$  kann als gewichteter Diffusionsstrom  $j_i^j = \sum \nu_k^j W_j / W_k j_i^k$  in Abhängigkeit vom Diffusionsstrom  $j_i^k$  (s. Gl. 2.18) der Spezies ausgedrückt werden.

Der Mischungsbruch  $f$  kann je nach Problemstellung als eine normierte Form des Elementmassenbruchs definiert werden:

$$f = \frac{Z_j - Z_{j,\min}}{Z_{j,\max} - Z_{j,\min}}. \quad (2.23)$$

Er wird, wie die Elementmassenbrüche, nicht durch chemische Reaktionen verändert ("conserved scalar", s. Übersicht von BILGER [15]). Seine Bilanzgleichung, in der  $j_i^f$  analog zu  $j_i^j$  in Abhängigkeit von  $j_i^k$  ausgedrückt werden kann, lautet:

$$\frac{\partial (\rho f)}{\partial t} + \frac{\partial (\rho u_i f)}{\partial x_i} = -\frac{\partial j_i^f}{\partial x_i}. \quad (2.24)$$

Im Falle einer Kohlenwasserstoff-Verbrennung mit reinen Brennstoff- (Br) und Oxidatorströmen (Ox) ist der Mischungsbruch (2.23) als Summe der Elementmassenbrüche von Kohlenstoff und Wasserstoff, bezogen auf die charakteristischen Eintrittszustände zu definieren:

$$f = \frac{(Z_C + Z_H) - (Z_C + Z_H)_{Ox}}{(Z_C + Z_H)_{Br} - (Z_C + Z_H)_{Ox}}. \quad (2.25)$$

Ein Mischungsbruch  $f = 0$  repräsentiert dabei reine Verbrennungsluft, wohingegen ein Mischungsbruch mit dem Wert  $f = 1$  reinen Brennstoff charakterisiert. Stöchiometrische Zusammensetzung resultiert bei einer  $\text{CH}_4/\text{Luft}$ -Verbrennung in einem stöchiometrischen Mischungsbruch von:  $f_{st} = 0,055$ .

### 2.1.6 Zustandsgleichung idealer Gase

Die Zustandsgleichung idealer Gase, die die Zustandsvariablen  $p$ ,  $\rho$ ,  $T$  und  $Y_k$  miteinander verknüpft, kann nach WILLIAMS [221] wie folgt formuliert werden:

$$p = \rho \mathcal{R} T \sum_{k=1}^{N_k} \frac{Y_k}{W_k}, \quad (2.26)$$

worin die ideale Gaskonstante den Wert  $\mathcal{R} = 8.3147 \frac{\text{J}}{\text{mol} \cdot \text{K}}$  besitzt.

## 2.2 Reaktionskinetische Grundlagen

### Mathematische Beschreibung homogener Gasphasenreaktionen

Chemische Stoffumwandlungsprozesse streben einem Gleichgewichtszustand entgegen. Im Unterschied zur Thermodynamik, die diesen Gleichgewichtszustand als Funktion des Ausgangszustandes des Systems festlegt, beschreibt die chemische Reaktionskinetik sowohl Zeitverlauf als auch Reaktionsweg der Stoffumwandlung vom Ausgangszustand bis zum Gleichgewicht. Bruttogleichungen geben Auskunft über Anfangs- und Endprodukte einer chemischen Reaktion, jedoch nicht über deren molekularen Ablauf. Demgegenüber geben Elementarreaktionen die durch Stoßvorgänge einzelner Moleküle initiierten Stoffumwandlungen wieder und erfassen dabei alle auftretenden Zwischenprodukte. In einem reaktionskinetischen System, das aus einer beliebigen Anzahl von  $N_k$  Spezies mit chemischem Symbol  $\chi_k$  besteht, können Elementarreaktionen einer beliebigen Anzahl  $N_i$  wie folgt mathematisch beschrieben werden:

$$\sum_{k=1}^{N_k} \nu'_{ki} \chi_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N_k} \nu''_{ki} \chi_k \quad i = 1, \dots, N_i. \quad (2.27)$$

Hierin bezeichnet  $\nu'_{ki}$  den stöchiometrischen Koeffizienten der Edukte der Reaktion  $i$ , sowie  $\nu''_{ki}$  denjenigen der Produkte. Die Summe aller Elementarreaktionen bildet den Reaktionsmechanismus.

Die chemische Reaktionsgeschwindigkeit, die ein Maß für die Umsatzgeschwindigkeit einer Elementarreaktion  $i$  ist, lässt sich aus der molaren Konzentration  $C_k = \rho \cdot Y_k / W_k$  der an der Reaktion beteiligten Spezies  $k$ , den stöchiometrischen Koeffizienten und den

Geschwindigkeitskoeffizienten der Hinreaktion  $k_{i,f}$  sowie der Rückreaktion  $k_{i,b}$  bestimmen:

$$q_i = k_{i,f} \prod_{k=1}^{N_k} C_k^{\nu'_{k,i}} - k_{i,b} \prod_{k=1}^{N_k} C_k^{\nu''_{k,i}} , \quad (2.28)$$

und kann als Differenz der Geschwindigkeiten von Hin- und Rückreaktion betrachtet werden. Die Geschwindigkeitskoeffizienten der Hin- und Rückreaktion sind mittels der Gleichgewichtskonstanten  $K_{c,i}$  miteinander verknüpft:

$$\frac{k_{i,f}}{k_{i,b}} = K_{c,i}(T) . \quad (2.29)$$

Ihre stark nicht-lineare Abhängigkeit von der Temperatur kann durch einen modifizierten Arrhenius-Ansatz dargestellt werden:

$$k_{i,(f,b)} = B_i T^{b_i} \exp\left(-\frac{E_{Ai}}{\mathcal{R}T}\right) . \quad (2.30)$$

Gaskinetisch ist die darin auftretende Aktivierungsenergie  $E_{Ai}$  als Differenz zwischen der mittleren Energie der reaktiven Molekülstöße zwischen den Reaktionspartnern und der mittleren Energie aller Stöße zu interpretieren. Sie repräsentiert also eine Energieschwelle, die zum erfolgreichen Ablauf der Reaktion überwunden werden muss. Der Frequenzfaktor  $B_i$  ist ein Maß für die Wahrscheinlichkeit eines auftretenden Stoßes und begrenzt den Geschwindigkeitskoeffizienten nach oben, wenn die Aktivierungsenergie gegen null strebt. Die Bestimmung der Konstanten  $B_i$ ,  $b_i$  und  $E_{Ai}$  erfolgt meist experimentell, da mit Hilfe der kinetischen Gastheorie berechnete Werte häufig von experimentell bestimmten abweichen.

Die Reaktionsrate  $\dot{w}_k$  einer Spezies  $k$  ergibt sich als anteilige Summe der Reaktionsgeschwindigkeiten aller Reaktionen, die an ihrer Bildung bzw. Abbau beteiligt sind:

$$\dot{w}_k = W_k \cdot \dot{\omega}_k = W_k \cdot \sum_{i=1}^{N_i} (\nu'_{k,i} - \nu''_{k,i}) \cdot q_i , \quad (2.31)$$

wobei  $\dot{\omega}_k$  die molare Reaktionsrate bezeichnet.

### (vollständiges) Gleichgewicht

Befindet sich das System im (vollständigen) chemischen Gleichgewicht, so sind die Reaktionsgeschwindigkeiten aller Reaktionen gleich null. Eine Kombination von (2.28) mit (2.29) führt in diesem Fall zu:

$$K_{c,i}(T) = \prod_{k=1}^{N_k} C_k^{(\nu'_{k,i} - \nu''_{k,i})} . \quad (2.32)$$

Die Gleichgewichtskonstante  $K_{c,i}$  ist eine Funktion der Temperatur und durch die Änderung der freien Enthalpie der Reaktion  $\Delta_R G_i^\circ$  bestimmt:

$$K_{c,i}(T) = \left(\frac{p_0}{\mathcal{R}T}\right)^{\sum_k (\nu'_{ki} - \nu''_{ki})} \exp\left(-\frac{\Delta_R G_i^\circ}{\mathcal{R}T}\right) , \quad (2.33)$$

mit:

$$\Delta_R G_i^\circ = \sum_{k=1}^{N_k} (\nu'_{k,i} - \nu''_{k,i}) \cdot W_k \cdot (h_{f,k}^\circ - T \cdot s_k^\circ) , \quad (2.34)$$

worin  $s_k^\circ$  die Standardentropie der Spezies  $k$  ist.

### Partielles Gleichgewicht

Sind die Reaktionsgeschwindigkeiten von Hin- und Rückreaktion einer Reaktion  $i$  sehr viel größer als die resultierende Reaktionsgeschwindigkeit  $q_i$ , befindet sich die Reaktion in einem partiellen Gleichgewicht [138]:

$$q_i \approx 0 \quad \text{falls} \quad \begin{cases} |q_i| \ll k_{f,i} \prod_{k=1}^{N_k} C_k^{\nu'_{k,i}} \\ |q_i| \ll k_{b,i} \prod_{k=1}^{N_k} C_k^{\nu''_{k,i}} \end{cases} . \quad (2.35)$$

### Quasistationärer Zustand (steady-state)

Sind die Bildungsgeschwindigkeit  $\dot{\omega}'_k$  und die Abbaugeschwindigkeit  $\dot{\omega}''_k$  einer Spezies  $k$  sehr viel Größer als die resultierende Reaktionsgeschwindigkeit  $\dot{\omega}_k$ , befindet sich die Spezies  $k$  in einem quasistationären Zustand [35]:

$$\dot{\omega}_k \approx 0 \quad \text{falls} \quad \begin{cases} \left| \frac{dC_k}{dt} \right| \ll \dot{\omega}'_k \\ \left| \frac{dC_k}{dt} \right| \ll \dot{\omega}''_k \end{cases} . \quad (2.36)$$

## 2.3 Turbulente, verdrallte, isotherme Strömungen

Die Untersuchung diffusiver Drallflammen verlangt nach einer Diskussion der diesen Flammen zu Grunde liegenden aerodynamischen Prozesse. Hierzu werden im Folgenden zunächst die Phänomenologie, die Eigenschaften und die theoretische Behandlung allgemeiner turbulenter, isothermer Strömungen skizziert, bevor am Ende dieses Abschnitts der Fokus auf turbulente, isotherme Strömungen mit überlagerter Rotationsbewegung, sog. verdrallte, turbulente, isotherme Strömungen gelenkt wird. Neben einer Charakterisierung dieser Drallströmungen werden auch ihre Eigenschaften umrissen, wobei für eine ausführliche Darstellung dieser auf die Monographien von LUGT [111] und GREENSPAN [53], sowie auf die Übersichten von SYRED & BEER [190, 191] und GUPTA et al. [56] verwiesen sei.

### 2.3.1 Charakteristika allgemeiner turbulenter Strömungen

Bei der Klassifizierung eines viskosen Fluids nach verschiedenen Strömungsformen unterscheidet man zwischen laminarer und turbulenter Strömung mit einem instabilen Übergangsbereich [170]. Der Übergang von laminarer zu turbulenter Strömung kann anhand der REYNOLDS-Zahl [156] charakterisiert werden, die Trägheits- und Zähigkeitskräfte zwischen den einzelnen Volumenelementen eines viskosen Fluids miteinander in Beziehung setzt und durch:

$$Re = \frac{u_{char} \cdot l_{char}}{\nu_l} , \quad (2.37)$$

definiert ist. Hierin sind  $u_{char}$  und  $l_{char}$  charakteristische Geschwindigkeit bzw. charakteristisches Längenmaß der zeitlich mittleren Strömung und  $\nu_l$  die kinematische Viskosität des Fluids. Solange die Reynolds-Zahl eines fluiden Systems einen kritischen Wert ( $Re_{crit}$ ) nicht überschreitet, folgen die von der Strömung transportierten Größen in einzelnen Fluidschichten festgelegten Bahnen, den Stromlinien. Dieser laminare Strömungszustand bleibt stationär, solange sich die Randbedingungen nicht ändern. Der Austausch von Impuls, Wärme und Stoff zwischen den Schichten erfolgt auf Grund diffusiver Prozesse: Reibung, Wärmeleitung bzw. Stoffdiffusion. Mit steigender Strömungsgeschwindigkeit reichen die viskosen Kräfte nicht mehr aus, die destabilisierenden Trägheitskräfte zu kompensieren; die kritische Reynolds-Zahl ist überschritten und das instabile Übergangsgebiet vom laminaren zum voll-turbulenten Regime ist erreicht. Dieses ist gekennzeichnet durch die Verstärkung ursprünglich kleiner Störungen, das Auftreten von Gebieten mit geballten, rotierenden Strukturen, die Bildung intensiver, kleinskaliger Bewegungen und schließlich das Wachstum und Zusammenwachsen dieser Gebiete bis hin zur voll ausgebildeten turbulenten Strömung [206].

Nach HINZE [68], ROTTA [162], TENNEKES & LUMLEY [199] und POPE [150] sind turbulente Strömungen instationär (selbst bei konstanten Randbedingungen), regellos, chaotisch, dreidimensional, mischungsintensiv, dissipativ und wirbelbehaftet. Transportierte Größen (Impuls, Stoffmenge, Temperatur) unterliegen zufälligen Schwankungen in Raum und Zeit. Trotz ihres statistischen Charakters besitzen turbulente Strömungen bereichsweise strukturierte Eigenschaften, sog. kohärente Strukturen (Fluidelemente, deren Geschwindigkeitsschwankungen korreliert sind).

### 2.3.2 Turbulente Energiekaskade und turbulente Längenmaße

Messungen in turbulenten Strömungen zeigen auf, dass sich eine ausgebildete turbulente Strömung durch einen großen Bereich unterschiedlicher Längenmaße  $l$  auszeichnet, bei welchen die Fluktuationen der Geschwindigkeit auftreten. Diese Beobachtung korrespondiert mit der weit verbreiteten Vorstellung, dass sich die Turbulenzbewegung aus einer großen Anzahl unterschiedlich großer Wirbel zusammensetzt, die jeweils mittels einer Geschwindigkeit  $u(l)$  bzw. eines Zeitmaßes  $\tau$  und einer Abmessung (Längenmaß  $l$ ) charakterisiert werden können.

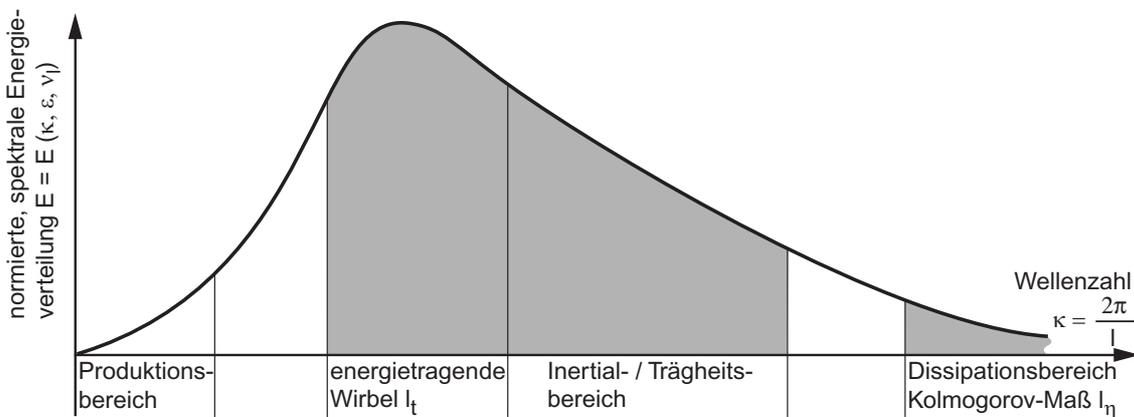


Abbildung 2.1: Normierte, spektrale Energieverteilung als Funktion der Wellenzahl  $\kappa$  nach LEUCKEL & ZARZALIS [103]

Das obere Ende dieses Spektrums turbulenter Längenmaße (s. Abb. 2.1) wird von großskaligen Wirbelstrukturen geprägt, die einen Großteil der Energie in sich tragen und hauptsächlich für den Austausch von Impuls und skalaren Größen verantwortlich sind [68, 162]. Die sog. Makromaße dieser großskaligen Wirbelstrukturen, die Länge  $l_t$  und Geschwindigkeit  $u_t(l_t)$ , besitzen die Größenordnung der entsprechenden charakteristischen Werte der zeitlich mittleren Strömung. Die aus ihnen gebildete Reynolds-Zahl:

$$Re_t = Re(l_t) = \frac{u_t \cdot l_t}{\nu_l}, \quad (2.38)$$

nimmt in der Regel (ausgebildete turbulente Strömung) große Werte an und verdeutlicht, dass die großen turbulenten Längenmaße vor allem durch Trägheitskräfte, nicht aber durch viskose Kräfte, bestimmt werden.

Die in den großskaligen Wirbelstrukturen enthaltene Energie wird in einem Kaskadenprozess (turbulente Energiekaskade) sukzessive zu Wirbelstrukturen kleinerer Längenmaße transferiert. Der zugehörige Skalenbereich wird auch Inertial- oder Trägheitsbereich genannt. Hier treten Produktion und Dissipation von Turbulenz höchstens in vernachlässigbarem Maße auf. Die turbulente Energiekaskade kann mit dem Prinzip der Wirbelfadenstreckung [22] erklärt werden. Hierbei geht man davon aus, dass Wirbelfäden sowohl durch Scherung der zeitlich mittleren Strömung als auch durch benachbarte Wirbel ähnlicher oder größerer Abmessungen gestreckt werden. Somit nehmen ihre charakteristischen Längenmaße (Durchmesser) ab. Auf Grund der Drehimpulserhaltung im reibungsfreien System steigt die Winkelgeschwindigkeit eines Wirbels mit abnehmendem Durchmesser und folglich seine Rotationsenergie: Bewegungsenergie wird von Kaskadenstufe zu Kaskadenstufe übertragen. Dieser Energiefluss bleibt im Verlauf der Energiekaskade konstant und erfolgt, wegen des mit sinkendem Durchmesser abnehmenden Einflussbereichs eines Wirbels, stets zur nächstkleineren Wirbelklasse. Für ausreichend große Reynolds-Zahlen ist der Energiefluss nach KOLMOGOROV's [93] zweiter Ähnlichkeitshypothese nur durch die turbulente Dissipationsrate  $\varepsilon$  der kinetischen Energie  $k$  bestimmt und unabhängig von der kinematischen Viskosität  $\nu_l$ . Die turbulente Dissipationsrate  $\varepsilon$  ist proportional zum Quotienten aus kinetischer Energie  $u(l)^2$  und turbulentem Zeitmaß  $l/u(l)$  [147, 197]:

$$\varepsilon \propto \frac{u(l)^2}{l/u(l)} = \frac{u(l)^3}{l}. \quad (2.39)$$

Aus der im Verlauf der Energiekaskade steigenden Winkelgeschwindigkeit der immer kleiner werdenden Wirbel resultieren wachsende Geschwindigkeitsgradienten; die molekularen Reibungskräfte werden zunehmend signifikant und erhöhen die Dissipation der Bewegungsenergie in innere thermische Energie des Fluids. Diese Dissipation besitzt ihr Maximum am unteren Ende der turbulenten Energiekaskade bei den Kolmogorov-Mikromaßen  $l_\eta$ ,  $u_\eta(l_\eta)$  und  $\tau_\eta$  [93]. Mit der Annahme lokaler Isotropie<sup>2</sup> besagt KOLMOGOROV's erste Ähnlichkeitshypothese, dass die Parameter lokal-isotroper Skalen durch die turbulente Dissipationsrate  $\varepsilon$  und die kinematische Viskosität  $\nu_l$  eindeutig bestimmt

---

<sup>2</sup>lokale Isotropie: Für ausreichend große Reynolds-Zahlen weisen Wirbel, deren Längenmaße einen bestimmten Wert unterschreiten, ein richtungsunabhängiges Verhalten auf. Sie besitzen keine Information mehr über die Randbedingungen der Strömung. Die Turbulenz kann in diesem Bereich als universell angesehen werden.

sind. Die Kolmogorov-Mikromaße sind damit wie folgt gegeben:

$$l_\eta = \left( \frac{\nu_l^3}{\varepsilon} \right)^{1/4}, \quad u_\eta = \left( \frac{\nu_l}{\varepsilon} \right)^{1/2}, \quad \tau_\eta = (\nu_l \cdot \varepsilon)^{1/4}. \quad (2.40)$$

Die mit den Kolmogorov-Mikromaßen gebildete Reynolds-Zahl ist von der Größenordnung  $\mathcal{O}(1)$ :

$$Re_\eta = Re(l_\eta) = \frac{u_\eta \cdot l_\eta}{\nu_l} = 1. \quad (2.41)$$

Unter der Annahme, dass sich die Makrolängenmaße mit  $\varepsilon \propto u_t^3/l_t$  analog zu (2.39) verhalten, ergeben sich die Verhältnisse der Kolmogorov-Mikromaße zu den Makromaßen aus (2.42)-(2.44):

$$l_\eta/l_t \propto Re_t^{-3/4}, \quad (2.42)$$

$$u_\eta/u_t \propto Re_t^{-1/4}, \quad (2.43)$$

$$\tau_\eta/\tau_t \propto Re_t^{-1/2}. \quad (2.44)$$

Diese Beziehungen zeigen, dass Längen-, Geschwindigkeits- und Zeitskalen der kleinsten Wirbel sehr viel kleiner sind als die der größten Wirbel.

Für große  $Re_t$  existiert ein weiter Bereich turbulenter Längenskalen und ein voll ausgebildetes Spektrum turbulenter Längenskalen. Die turbulente kinetische Energie wird bei großen Längenskalen in die turbulente Energiekaskade eingespeist und auf kleinen Längenskalen dissipiert. Diese Trennung der Eigenschaften der Turbulenz nach Skalen verdeutlicht einerseits die hohe Effektivität des turbulenten Austausches, der aus der makroskopischen Bewegung von Wirbeln in der Strömung und dem damit verbundenen Transport von Impuls, Konzentration und Energie resultiert. Andererseits ist der viskose Dissipationsvorgang in Wirbeln der Kolmogorov-Mikromaße entscheidend für die Mikromischung von Wärme und Stoff bis hin zur rein diffusionskontrollierten Mischung.

### 2.3.3 Grundgleichungen zur Beschreibung des mittleren Strömungsfeldes

Zur mathematischen Beschreibung laminarer und turbulenter Strömungen müssen die in Abschnitt 2.1 vorgestellten Bilanzgleichungen für Gesamtmasse, Impuls, Enthalpie und Speziesmassen berechnet werden. Auf Grund der Eigenschaft der Turbulenz, Längen- und Zeitskalen auszubilden, die mehrere Größenordnungen umspannen, ist die direkte numerische Lösung dieser Gleichungen für turbulente Strömungen in technisch relevanten Systemen selbst bei Verwendung moderner Großrechenanlagen auf Grund des Speicherplatz- und Rechenzeitbedarfs bislang nicht rentabel oder gar unmöglich. Eine Möglichkeit, diese Schwierigkeit zu umgehen, besteht in der Charakterisierung der turbulenten Strömung durch gemittelte Feldvariablen und der Intensität ihrer Fluktuationen.

#### 2.3.3.1 Reynolds- und Favre-Mittelung

Ausgangspunkt für die Mittelung sind die instationären Bilanzgleichungen für Gesamtmasse (2.1), Impuls (2.2), Enthalpie (2.9) und Speziesmassen (2.17).

**Reynolds-Mittelung:** Hierbei wird der Momentanwert jeder Größe  $f$  in einen zeitlich mittleren Anteil  $\bar{f}$  und einen fluktuierenden Anteil  $f'$  aufgespalten (REYNOLDS'sche Zerlegung [157]),

$$f(x_i, t) = \bar{f}(x_i) + f'(x_i, t) , \quad \text{mit} \quad \overline{f'(x_i, t)} = 0 , \quad (2.45)$$

diese Zerlegung in die Bilanzgleichungen eingeführt und die so erhaltenen Gleichungen zeitlich gemittelt. Ergebnis dieser Prozedur sind die sog. Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen (RANS: *Reynolds Averaged Navier-Stokes*), bezüglich deren Diskussion hier auf die Arbeiten von ZARZALIS [223] und RODI [159] verwiesen sei.

**Favre-Mittelung:** Die Anwendung der Reynolds-Mittelung auf die instationären Bilanzgleichungen führt im Falle reaktiver, turbulenter Strömungen, in denen große Dichtegradienten auftreten, zu Korrelationen zwischen der Dichteschwankung und anderen fluktuierenden Größen. Unter Verwendung dichtegewichteter Mittelwerte nach FAVRE [47]:

$$\tilde{f} = \frac{\overline{\rho f}}{\bar{\rho}} , \quad (2.46)$$

kann dieses Problem umgangen werden. Die Zerlegung des Momentanwertes einer Größe in Favre-Mittelwert  $\tilde{f}$  und Favre-Schwankungswert  $f''$  erfolgt analog zur Reynolds-Zerlegung:

$$f(x_i, t) = \tilde{f}(x_i) + f''(x_i, t) . \quad (2.47)$$

Die durch Einsetzen dieser Zerlegung in die instationären Bilanzgleichungen und nachfolgender Mittelung erhaltenen sogenannten Favre-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen (FANS: *Favre Averaged Navier-Stokes*) sind formal identisch mit den klassischen Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen für Strömungen konstanter Dichte, besitzen jedoch eine andere Bedeutung [14]. Für die wechselseitige Umrechnung Favre-gemittelter und zeitlich gemittelter Größen gelten folgende Beziehungen:

$$\tilde{f} = \bar{f} + \frac{\overline{\rho' f'}}{\bar{\rho}} , \quad \overline{f''} = -\frac{\overline{\rho' f'}}{\bar{\rho}} , \quad (2.48)$$

$$\bar{f} = \tilde{f} + \overline{f''} \quad f'' = f' + \overline{f''} . \quad (2.49)$$

Obwohl die Favre-Mittelung für reaktive, turbulente Strömungen als geschickte Methode erscheint, das Auftreten unerwünschter Korrelationen der Dichteschwankung zu umgehen, stellt sie lediglich eine Verschiebung des Problems dar; denn der Vergleich einer Favre-gemittelten  $\tilde{f}$  mit einer Reynolds-gemittelten Größe  $\bar{f}$  setzt nach (2.48) die Kenntnis der Korrelation der Dichteschwankung mit der Schwankung der Größe selbst  $\overline{\rho' f'}$  voraus. Wenn diese meßtechnisch zugänglich sind, können mit Hilfe von (2.48) Favre-gemittelte Größen experimentell bestimmt werden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit werden, auf Grund der daraus hervorgehenden Vorteile, die im folgenden Abschnitt vorgestellten, Favre-gemittelten Bilanzgleichungen angewendet.

### 2.3.3.2 Zeitlich mittlere Bilanzgleichungen

Die Anwendung der Favre-Mittelung auf die instationären Bilanzgleichungen (2.1), (2.2), (2.9) und (2.17) führt zu den nachfolgend dargestellten Favre-gemittelten Bilanzgleichungen (sog. Transportdifferentialgleichungen bzw. Transportgleichungen) für:

- Gesamtmasse:

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0, \quad (2.50)$$

- Impuls:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_j)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j)}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial \overline{\tau_{ij,l}}}{\partial x_i} - \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{u''_i u''_j})}{\partial x_i} + \bar{f}_j, \quad (2.51)$$

- Enthalpie:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h})}{\partial x_i} = \frac{\overline{Dp}}{Dt} - \frac{\partial \overline{j_i^q}}{\partial x_i} + \overline{\tau_{ij,l} \frac{\partial u_i}{\partial x_j}} - \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{u''_i h''})}{\partial x_i} + \bar{q}_R, \quad (2.52)$$

mit:

$$\frac{\overline{Dp}}{Dt} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + u_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{p}}{\partial t} + \tilde{u}_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + u''_i \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i}, \quad (2.53)$$

- Speziesmassen:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{Y}_k)}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_k)}{\partial x_i} = -\frac{\partial \overline{j_i^k}}{\partial x_i} - \frac{\partial (\bar{\rho} \widetilde{u''_i Y''_k})}{\partial x_i} + \bar{w}_k \quad k = 1, \dots, N_k. \quad (2.54)$$

In diesen treten ungeschlossene Terme auf, deren Schließung durch entsprechende Modellierung (s. Kapitel 4) erfolgt. An dieser Stelle sei vorweggenommen, dass turbulente Flüsse von Enthalpie ( $\widetilde{u''_i h''}$ ) und Spezies ( $\widetilde{u''_i Y''_k}$ ) in der Regel über Gradiententransport-Ansätze modelliert werden; laminare diffusive Flüsse ( $\overline{j_i^q}, \overline{j_i^k}$ ) sind bei großen Reynolds-Zahlen sehr klein im Vergleich zum turbulenten Transport der entsprechenden Größen. Die Schließung des chemischen Reaktionsquellterms ( $\bar{w}_k$ ) erfolgt durch ein chemisches Reaktionsmodell (s. Kap. 4.2). Die auftretenden Reynolds-Spannungen ( $\widetilde{u''_i u''_j}$ ) bilden den turbulenten Spannungstensor, dessen Modellierung durch Turbulenzmodelle unterschiedlicher Komplexität (s. Kap. 4.1) Rechnung getragen wird.

### 2.3.4 Tangentialgeschwindigkeitsverteilung und Wirbelform

In Strömungen mit überlagerter Rotationsbewegung erfordert die mathematische Beschreibung der Geschwindigkeitsverteilungen zusätzlich zu Axial- und Radialgeschwindigkeit auch die Betrachtung der Verteilung der Tangentialgeschwindigkeit  $w(r)$ . Letzteres geschieht in der Regel durch Annahme idealisierter, ebener Wirbelformen.

Der **Potentialwirbel** ist eine Wirbelform der reibungsfreien, isoenergetischen Strömung [225]. Er besitzt eine hyperbolische Tangentialgeschwindigkeitsverteilung:

$$\bar{w}(r) = C_1 \cdot \frac{1}{r} \quad (2.55)$$

und eine konstante Zirkulation:

$$\Gamma = \oint_c \vec{u} \cdot d\vec{s} = 2\pi \cdot \bar{w}(r) \cdot r = 2\pi \cdot C_1, \quad (2.56)$$

wobei  $\vec{u}$  den Geschwindigkeitsvektor und  $d\vec{s}$  das zugehörige Weg-Vektorelement eines beliebigen geschlossenen Kurvenzugs  $c$  darstellt. Tangentialgeschwindigkeit (2.55) und Druck (2.57) variieren im Potentialwirbel gegenläufig (s. Abb. 2.3,  $r \geq r_1$ ):

$$p = p_1 + \frac{\rho}{2} \cdot \overline{w}_1^2 \cdot r_1^2 \left( \frac{1}{r_1^2} - \frac{1}{r^2} \right) . \quad (2.57)$$

Bei Annäherung an das singuläre Drehzentrum ( $r = 0$ ) spielt für ein Newton'sches Fluid die Reibung eine zunehmende Rolle; die Scherkräfte nehmen zu und verhindern dass die Umfangsgeschwindigkeit gegen unendlich wächst. Im sog. Wirbelkern bildet sich folglich ein **Starrkörperwirbel** aus, der eine lineare Geschwindigkeitsverteilung:

$$\overline{w}(r) = C_2 \cdot r , \quad (2.58)$$

besitzt. Seine Zirkulation berechnet sich nach ihrer Definition in (2.56) zu:

$$\Gamma = 2\pi \cdot \overline{w}(r) \cdot r = 2\pi \cdot C_2 \cdot r^2 . \quad (2.59)$$

Im Gegensatz zum Potentialwirbel variieren beim Starrkörperwirbel Tangentialgeschwindigkeit (2.58) und Druck (2.60) gleichsinnig (s. Abb. 2.3,  $r \leq r_1$ ):

$$p = p_1 + \frac{\rho}{2} \cdot \frac{\overline{w}_1^2}{r_1^2} (r^2 - r_1^2) . \quad (2.60)$$

Er ist drehungsbehaftet ( $rot \vec{u} = const.$ , d. h. jedes Fluidelement bewegt sich bei einem Umlauf um das Wirbelzentrum einmal um seine eigene Achse), aber nicht dissipativ.

Aus der Überlagerung eines Starrkörperwirbels im Wirbelkern ( $r \leq r_1$ ) mit einem modifizierten Potentialwirbel ( $r > r_1$ ) resultiert das Modell des **Rankine-Wirbels**:

$$\overline{w}(r) = \overline{w}(r_1) \cdot \left( \frac{r}{r_1} \right)^{-n} \quad \text{mit} \quad \left\{ \begin{array}{ll} n = -1 & \text{für } 0 \leq r \leq r_1 \\ 0 \leq n \leq 1 & \text{für } r > r_1 \end{array} \right\} , \quad (2.61)$$

der einen unstetigen Übergang der beiden Wirbelformen bei  $r = r_1$  aufweist. Der Exponent  $n$  dient der Anpassung des Potentialbereichs des Rankine-Wirbelmodells an verschiedene Strömungsformen. Im Fall eingeschlossener, isothermer Drehströmungen bestimmen DÖBBELING [40] und HOLZÄPFEL [75] Werte von  $0, 2 < n < 0, 8$ . Bei nicht eingeschlossenen Drallströmungen treten nach SCHMITTEL [174] Werte bis  $n = 16$  auf. Eine dem Rankine-Wirbel analoge Überlagerung mit stetigem Übergang ist mit dem Modell des **Burgers-Wirbels** [30] gegeben:

$$\overline{w}(r) = \frac{C_1}{r} \cdot \left( 1 - e^{-C_2 \cdot r^2} \right) , \quad (2.62)$$

der für  $r \rightarrow 0$  asymptotisch in den den Starrkörperwirbel übergeht, für  $r \gg 0$  in den Potentialwirbel.

Die sich ausbildende Wirbelform hängt von der Art der Erzeugung des rotationsbehafteten Strömungsfeldes ab. Eine ausführliche Darstellung verschiedener Drallerzeuger und der aus diesen resultierenden Wirbelformen ist in den Arbeiten von MUNDUS & KREMER [131] sowie von SCHMID [171] gegeben.

### 2.3.5 Charakterisierung der Stärke des Dralls durch die Drallzahl

Dimensionslose Kriterien zur quantitativen Charakterisierung der Intensität der Verdrallung einer Strömung (Rosbyzahl [171], Drallwinkel [20], Energiestromverhältnisse [205]) weisen meist den Nachteil auf, dass sie bestimmte Wirbelformen voraussetzen oder entlang des Strahlwegs nicht konstant sind. Für die technische Anwendung von Drallströmungen wird meist ein dimensionsloser Parameter, die Drallzahl  $S$  (2.63), verwendet. Darin wird der vorhandene Drehimpulsstrom (2.64) auf den Axialimpulsstrom/Strahlschub (2.65) und eine charakteristische Länge  $R_0$  bezogen:

$$S = \frac{\dot{D}}{\dot{I} \cdot R_0}, \text{ mit} \quad (2.63)$$

$$\dot{D} = 2\pi \int_0^\infty \bar{\varrho} \cdot (\overline{uw} + \overline{u'w'}) \cdot r^2 \cdot dr \quad \text{und} \quad (2.64)$$

$$\dot{I} = 2\pi \int_0^\infty \left[ \bar{\varrho} \cdot (\overline{u^2} + \overline{u'^2}) + (p - p_\infty) \right] \cdot r \cdot dr . \quad (2.65)$$

Für Drallfreistrahlen ist die Drallzahl nach (2.63) eine Erhaltungsgröße und kann auch in zylindrischen Rohren unter Vernachlässigung der Wandreibung als solche betrachtet werden [67, 144]. Zur konkreten Berechnung der Drallzahl müssen genaue radiale Verläufe von Druck und Geschwindigkeiten bekannt sein. Daher wird in der Praxis auf eine vereinfachte Definition der Drallzahl (2.66) unter Annahme einer Kolbenströmung ( $\dot{V}_0$ : Volumenstrom,  $A_0$ : Austrittsquerschnitt) zurückgegriffen:

$$S_0 = \frac{\dot{D}}{\dot{I}_0 \cdot R_0}, \text{ mit} \quad \dot{I}_0 = \bar{\varrho} \cdot \frac{\dot{V}_0^2}{A_0} . \quad (2.66)$$

Die Berechnung des Drehimpulsstroms anhand der Geometrie des Drallerzeugers liefert schließlich, wiederum unter Annahme von Kolbenströmungsprofilen, die theoretische Drallzahl  $S_{0,th}$ , die nur noch von den geometrischen Daten des Drallerzeugers abhängt:

$$S_{0,th} = \frac{\dot{D}_0}{\dot{I}_0 \cdot R_0} . \quad (2.67)$$

Eine Herleitung für verschiedene Drallerzeugertypen kann bei LEUCKEL [98] nachgelesen werden. Insbesondere bei Strömungen mit überlagerter Verbrennung ist mit erheblichen Abweichungen zwischen  $S$  und  $S_{0,th}$  und folglich mit Fehlinterpretationen zu rechnen, vor allem da bei der Berechnung von  $S_{0,th}$  der statische Druck nicht berücksichtigt wird.

### 2.3.6 Vortex Breakdown

Ein in verdrallten Strömungen häufig beobachtetes Phänomen ist der sog. Vortex Breakdown (inneres Wirbelaufplatzen). Dieser tritt oberhalb einer kritischen Drallzahl  $S_{krit}$  auf, deren Wert in der Literatur mit  $0,4 \leq S_{krit} \leq 1,0$  angegeben wird.  $S_{krit}$  hängt sowohl vom Typ des Drallerzeugers sowie von den geometrischen Randbedingungen ab.

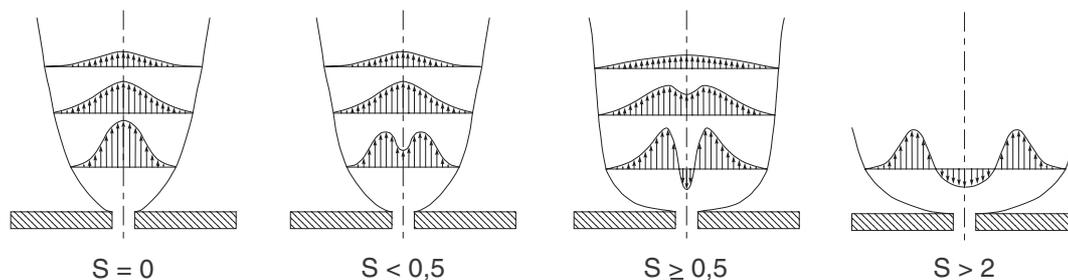


Abbildung 2.2: Axialgeschwindigkeitsverteilung des Drallfreistrahls bei zunehmender Drallstärke (nach MAIER [114])

In Abb. 2.2 ist der Vorgang des Vortex Breakdown anhand der Axialgeschwindigkeitsverteilung eines Drallfreistrahls für steigende Drallzahlen illustriert. Die Untersuchung des Phänomens Vortex Breakdown beschäftigt viele Autoren seit der Mitte des 20. Jahrhunderts. Mit experimentellen Methoden konnte SARPKEYA [165] drei Erscheinungsformen des Vortex Breakdown identifizieren, FALER & LEBOVICH [46] deren sechs. Neben einer rotationsymmetrischen/blasenförmigen Erscheinungsform treten spiralförmige Erscheinungsformen und eine Doppelhelix, mitunter auch nacheinander oder in variierender Reihenfolge auf. Zur Erklärung des Vortex Breakdown existieren verschiedene theoretische Ansätze, die nach HALL [61] in drei Kategorien eingeteilt werden können. Diese beruhen auf 1.) der Ablösung einer inneren Grenzschicht, 2.) einer hydrodynamischen Instabilität und 3.) der Existenz eines kritischen Zustandes. Da eine dem Umfang der bislang veröffentlichten Erkenntnisse zum Vortex Breakdown angemessene Diskussion den Rahmen der vorliegenden Arbeit sprengen würde, sei sowohl auf die Übersichten von HALL [61], LEBOVICH [96], DELERY [41] und LUCCA-NEGRO & O'DOHERTY [110], als auch auf die in diesen Übersichten referenzierte Literatur verwiesen und an dieser Stelle ein einfaches Modell zur Veranschaulichung des Vortex Breakdown vorgestellt, das aus einer Kräftebilanz senkrecht zum Stromfaden resultiert. Letztere ergibt für eine rotationsymmetrische, reibungsfreie, ebene Wirbelbewegung ein Gleichgewicht zwischen Druck- und Zentrifugalkraft:

$$\frac{w^2}{r} = \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial p}{\partial r} . \quad (2.68)$$

Für den idealisierten Rankine-Wirbel (2.61) zeigt sich dabei, dass der resultierende Druckverlauf nur vom Maximum der Tangentialgeschwindigkeit abhängt, wie in Abb. 2.3 dargestellt ist. Eine durch die Form oder das Fehlen (Freistrah) der Strömungsführung hervorgerufene Divergenz der Drallströmung führt zu einer Verlagerung des Maximums der Tangentialgeschwindigkeit zu größeren Radien. Auf Grund der Erhaltung des Drehimpulses nimmt die maximale Tangentialgeschwindigkeit ab und damit der Druck auf der Rotationsachse zu. In axialer Richtung bildet sich ein positiver Druckgradient aus. Ab einer kritischen Drallstärke kann dieser positive, axiale Druckgradient den Axialimpuls der Strömung überwinden und somit eine Zone negativer Axialgeschwindigkeiten, die zentrale Rezirkulationszone, erzeugen.

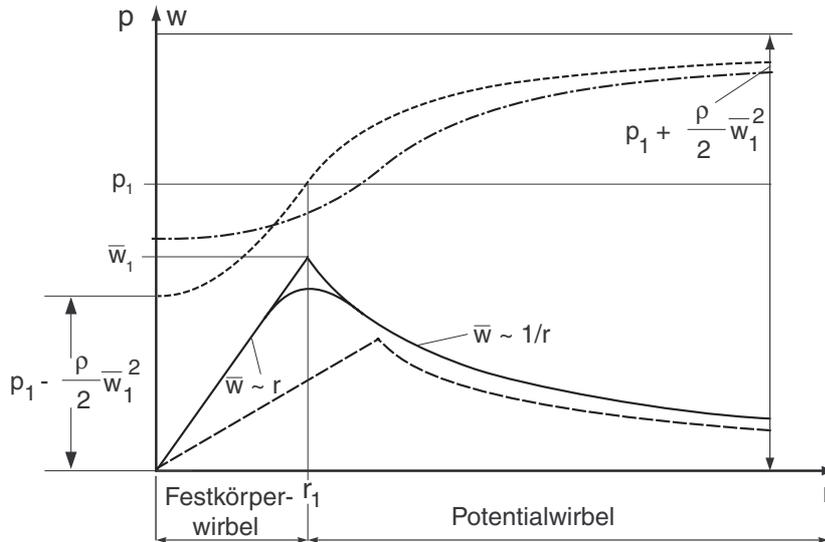


Abbildung 2.3: Wirbelform und Vortex Breakdown

### 2.3.7 Wechselwirkungen zwischen Rotation und Turbulenz

Die wechselseitige Beeinflussung von Rotation und Turbulenz resultiert in unterschiedlichsten, zum Teil bisher nur phänomenologisch erklärbaren Erscheinungsformen, zu denen nicht zuletzt der im vorangehenden Abschnitt diskutierte Vortex Breakdown zu zählen ist. Eine recht anschauliche Darstellung, inwiefern sich Rotation auf Turbulenz auswirken kann, ist anhand des Stabilitätskriteriums nach Lord Rayleigh (s. u.) gegeben, mit dessen Hilfe die Dämpfung bzw. Verstärkung turbulenter Schwankungen in Drehströmungen abgeschätzt werden kann. Die Schwingungsneigung von Drallströmungen ist durchaus plausibel, handelt es sich dabei doch um hyperbolische Systeme, in welchen die zur Entstehung von Schwingungen nötige Rückstellkraft durch die im Zentrifugalfeld auftretende Corioliskraft gegeben ist [111].

In der Literatur findet sich eine Vielzahl an Theorien [10, 78, 118, 128, 196, 201, 202] die eine Erklärung der Dynamik der Wechselwirkung von Rotation und Turbulenz anstreben. Eine geschlossene Theorie hierzu existiert bislang nicht, jedoch bestätigen etliche Untersuchungen, dass die Turbulenzdynamik mit zunehmendem Rotationseinfluss tendenziell zweidimensionalen Charakter annimmt [77, 80]. Zur Erläuterung dieser Tendenz wird das Prinzip des zweidimensionalen Zwangs, für den Grenzfall sehr starker Verdrallung, vorgestellt (s.u.). Basierend auf Arbeiten von JACQUIN et al. [80] unterscheidet HIRSCH [69] lineare und nicht-lineare Wechselwirkungen zwischen Rotation und Turbulenz. Hierbei beschreiben nicht-lineare Wechselwirkungen die Beeinflussung der Struktur der Turbulenzkaskade und des turbulenten Dissipationsprozesses durch ein auf die Turbulenzwirbel wirkendes, durch die Rotationsbewegung erzeugtes Kreiselmoment. Lineare Wechselwirkungen betreffen die direkte Kopplung mit dem mittleren Strömungsfeld durch die zur Drallstärke proportionale und durch die Corioliskraft bedingte Lageänderung des turbulenten Spannungstensors relativ zum Koordinatensystem.

Die Untersuchung der Wechselwirkungen von Rotation und Turbulenz fordert schließlich die Berücksichtigung der in turbulenten Drallströmungen häufig auftretenden instationären, periodischen, dreidimensionalen Erscheinungsformen (s.u.). Diese hydrody-

namischen Instabilitäten unterschiedlich starker Intensität sind der ungestörten, axial-symmetrischen Strömung überlagert, wegen ihrer Periodizität aber nicht der Turbulenz zuzurechnen. Sie führen somit, speziell bei der Bestimmung turbulenter Schwankungsgeschwindigkeiten und deren Korrelationen, zu Messfehlern [74].

**Das Rayleigh-Kriterium:** Ein Fluidelement, das sich auf einer Umlaufbahn mit konstantem Radius befindet, steht im Gleichgewicht zwischen Zentrifugal- und Zentripetalkraft, wobei letztere durch den radialen Druckgradienten hervorgerufen wird. Erfährt dieses Fluidelement durch eine Schwankungsbewegung eine reibungsfreie, radiale Auslenkung, so gelangt es unter Beibehaltung seines spezifischen Drehimpulses ( $\Gamma/2\pi = \bar{w}(r) \cdot r$ ) und seiner Dichte an einen Ort, an dem es im Ungleichgewicht zur lokalen Zentripetalkraft seiner neuen Umgebung steht. Die resultierende Kraft wirkt entweder rückstellend auf das Fluidelement oder führt zu dessen weiterer Auslenkung. Die Richtung dieser Resultierenden verknüpfte Lord Rayleigh mit dem lokalen Drehimpulsgradienten und leitete daraus ein Kriterium für die Stabilität einer Drehströmung mit der Tangentialgeschwindigkeitsverteilung  $\bar{w}(r)$  ab [155]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial r} (\varrho \cdot \Gamma^2) &> 0 && \text{stabil} \\ \frac{\partial}{\partial r} (\varrho \cdot \Gamma^2) &= 0 && \text{indifferent} \\ \frac{\partial}{\partial r} (\varrho \cdot \Gamma^2) &< 0 && \text{instabil.} \end{aligned}$$

Demnach sind isotherme, inkompressible Strömungen stabil, wenn sie einen positiven Zirkulationsgradienten aufweisen, instabil bei einem negativen Zirkulationsgradienten und indifferent gegenüber radialen Auslenkungen bei zirkulationsfreier Strömung. Abbildung 2.4 illustriert das aus dem Rayleigh-Kriterium resultierende eigendämpfende bzw. selbstverstärkende Verhalten turbulenter, rotationsbehafteter Strömungen für statistische Auslenkungen der Fluidelemente im Wirbel. Ein dem Rayleigh-Kriterium identisches Stabilitätskriterium, das die Induktion von Trägheitswellen durch die Corioliskraft in rotierenden Strömungen beschreibt, liefert die Betrachtungsweise SCHMIDS [171].

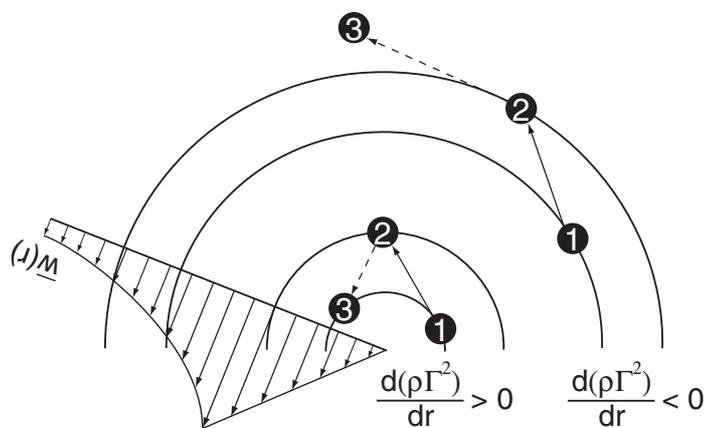


Abbildung 2.4: Rayleigh-Kriterium

**Zweidimensionaler Zwang:** Anhand der Formulierung der reibungsfreien, stationären Navier Stokes'schen Gleichungen im mitrotierenden Koordinatensystem konnte PROUDMAN [153] für den Grenzfall sehr starker Verdrallung ein Verschwinden der axialen Gradienten der Geschwindigkeitskomponenten ableiten. Einen experimentellen Nachweis des Taylor-Proudman-Theorems, das die Konstanz der Geschwindigkeitsverteilung entlang der Drehachse beschreibt, erbrachte TAYLOR [196] durch Untersuchung der Umströmung eines zylindrischen Gegenstandes in einem rotierenden Wasserbad. Hierbei stellte er fest, dass sich die Umströmung des eingebrachten, zylindrischen Gegenstandes nicht nur auf dessen Länge beschränkt, sondern in axialer Richtung über die gesamte Länge des Strömungssystems in einer sog. Taylor-Proudman Säule erstreckt; die Strömung wird zweidimensional. Im Falle rotationssymmetrischer Strömungen, d.h. Rotationsachse und Achse des eingebrachten Gegenstandes fallen zusammen, hängt das Strömungsfeld lediglich von der radialen Koordinate ab; es ist damit eindimensional.

In technisch relevanten Drallströmungen ist der Grad der Verdrallung meist zu gering, um die vollständige Ausbildung des zweidimensionalen Zwanges zu bewirken. Dennoch kann schon bei geringer Verdrallung eine mit zunehmender Drallzahl steigende Abhängigkeit des Strömungsfeldes von der Geometrie des Auslasses vorliegen, die sich z.B. in einer Präkontraktion der Stromlinien vor einem Durchmessersprung äußert [69, 76].

**Instationäre, periodische, dreidimensionale Effekte:** Zahlreiche Untersuchungen [6, 34, 55, 56, 191, 192, 194] befassen sich mit in Drallströmungen auftretenden instationären, meist periodischen Effekten, die ein nicht-axialsymmetrisches Strömungsfeld bedingen und sowohl in Strömungen mit und ohne Vortex Breakdown beobachtet werden. Die Periodizität dieser Effekte äußert sich in einer präzedierenden Bewegung der Wirbelachse um die Symmetrieachse des Systems mit unterschiedlichen Vorzugsfrequenzen. Zusammenfassend werden Effekte dieser Art als Precessing Vortex Core (PVC) bezeichnet. Die beobachteten Vorzugsfrequenzen liegen im Bereich 10Hz bis 200Hz und hängen von Reynolds-, Drall-, Strouhalzahl sowie der Auslassgeometrie des Systems ab.

## 2.4 Verbrennung in turbulenten, verdrallten Strömungen

Die Überlagerung turbulenter, verdrallter Strömungen (s. Kap. 2.3) mit Verbrennungsvorgängen basiert auf der komplexen Interaktion turbulenter Mischungs- und Transportprozesse mit den chemischen Reaktionen der Verbrennung. Zur Diskussion dieser Interaktion werden in diesem Unterkapitel, nach einer einführenden Kategorisierung allgemeiner Verbrennungsvorgänge und der Beschreibung laminarer Flammen, die turbulenzbedingten Reaktionsstrukturen anhand charakteristischer Skalen klassifiziert, bevor schließlich einige wesentliche Merkmale der wechselseitigen Beeinflussung von Verbrennung und mittlerer Strömung, Turbulenz sowie instationären, periodischen Effekten behandelt werden.

## 2.4.1 Kategorisierung allgemeiner Verbrennungsvorgänge

Der Verbrennungsvorgang, der - chemisch betrachtet - eine Oxidationsreaktion ist und - energetisch betrachtet - eine Energieumwandlung darstellt, setzt die Mischung der Edukte der chemischen Elementarreaktionen auf molekularer Ebene voraus. Die chemische Reaktion kann dann durch molekulare Stoßvorgänge initiiert werden, wenn eine ausreichend hohe Temperatur, d.h. eine genügend hohe Bewegungsenergie der Stoßpartner gewährleistet ist. Die technische Anwendungsbreite von Verbrennungsvorgängen resultiert in einer Vielzahl von Flammentypen, die nach verschiedenen Kriterien kategorisiert werden können. Abbildung 2.5 zeigt die Einteilung verschiedener Flammen nach: Ort der Mischung, Strömungszustand, zeitlicher Abhängigkeit, Stabilisierung, Randbedingungen und Brennstoffart. In der Literatur hingegen ist eine Einteilung nach Mischung (vorgemischt - nicht-vorgemischt) und Strömungszustand (laminar - turbulent) am weitesten verbreitet und bietet sich zur Gliederung nachfolgender Darstellung allgemeiner Verbrennungsvorgänge an, zu deren ausführlichen Diskussion auf die Arbeiten von LIBBY & WILLIAMS [106], POINSOT & VEYNANTE [147], TURNS [203], WARNATZ, MAAS & DIBBLE [211] und WILLIAMS [221] verwiesen sei.

## 2.4.2 Struktur und Eigenschaften laminarer Flammen

### 2.4.2.1 Laminare, vorgemischte Flamme

Die laminare, vorgemischte Flamme ist durch die selbst-induzierte Ausbreitung einer Flammenfront in einem homogenen Gemisch aus Brennstoff und Oxidator gekennzeichnet. Die Ausbreitungsgeschwindigkeit dieser Flammenfront, die sog. laminare Flammengeschwindigkeit  $u_{F,l,v}^{\circ}$ , ist im Fall einer adiabaten, planaren Flammenfront eine Funktion von Gemischzusammensetzung, Druck und Vorwärmtemperatur [211].

**Flammenstruktur:** Eine anschauliche Zusammenfassung der wesentlichen Theorien zur Abschätzung der Flammengeschwindigkeit, zur Beschreibung der Struktur einer planaren Flammenfront laminarer, vorgemischter Flammen, sowie die Diskussion ihrer Dynamik und der Effekte von Flammenfrontkrümmung und -streckung ist in der Arbeit von HOFFMANN [71] am Beispiel der adiabaten Methan/Luft-Verbrennung gegeben. Demnach lässt sich die Struktur der laminaren, vorgemischten Flamme, dargestellt in Abb. 2.6, in drei Zonen (Vorwärmzone, Reaktionszone und Ausbrandzone) unterteilen. In der Vorwärmzone, in der in erster Näherung keine Wärmefreisetzung erfolgt, werden die Edukte der Vorwärmtemperatur  $T_u$  auf die Zündtemperatur  $T_i$  aufgeheizt. Die Dicke der Vorwärmzone ist von den molekularen Wärme- und Stofftransportprozessen bestimmt, da hier ein Gleichgewicht zwischen Konvektion und Konduktion bzw. Diffusion herrscht. Die Dicke der Reaktionszone, in der die eigentliche Wärmefreisetzung durch Abbau des Brennstoffes erfolgt, ist deutlich geringer als die der Vorwärmzone. Die freigesetzte Reaktionswärme und der konduktiv transportierte Energiestrom dominieren in diesem Bereich gegenüber dem konvektiven Energietransport. In der sich an die Reaktionszone anschließenden Ausbrandzone, an deren Ende sich die Verbrennungsgase bei adiabater Verbrennungstemperatur  $T_b$  im thermodynamischen Gleichgewicht befinden, werden die stabilen, während des Brennstoffabbaus gebildeten Zwischenprodukte  $H_2$  und  $CO$  schließlich zu den Verbrennungsprodukten  $CO_2$  und  $H_2O$  oxidiert. Die Aufrechterhaltung der Verbrennungsreaktion ist bestimmt durch die Freisetzung

## Einteilungskriterien

### 1. Ort der Mischung

- Diffusionsflamme: Reaktion und Mischung finden parallel statt
- Vormischflamme: Brennstoff & Oxidator sind vorgemischt

### 3. Zeitliche Abhängigkeit

- quasistationär (im zeitlichen Mittel stationär): Position der Flamme variiert nur stochastisch
- instationär: Flammenfront schreitet fort oder pulsiert

### 5. Randbedingungen

- freibrennend
- eingeschlossen
- Wandflamme

### 2. Strömungszustand

- laminar: geordnete, geschichtete Strömung
- turbulent: stochastisch fluktuierende Strömung

### 4. Stabilisierung

- keine
- aerodynamisch (Verdrallung)
- nicht aerodynamisch Halteflamme oder Staukörper

### 6. Brennstoffart

- gasförmig: Gasflamme
- flüssig: Sprayflamme
- fest: Staubflamme



Abbildung 2.5: Kategorisierung allgemeiner Verbrennungsvorgänge (nach HETTEL et al. [66])

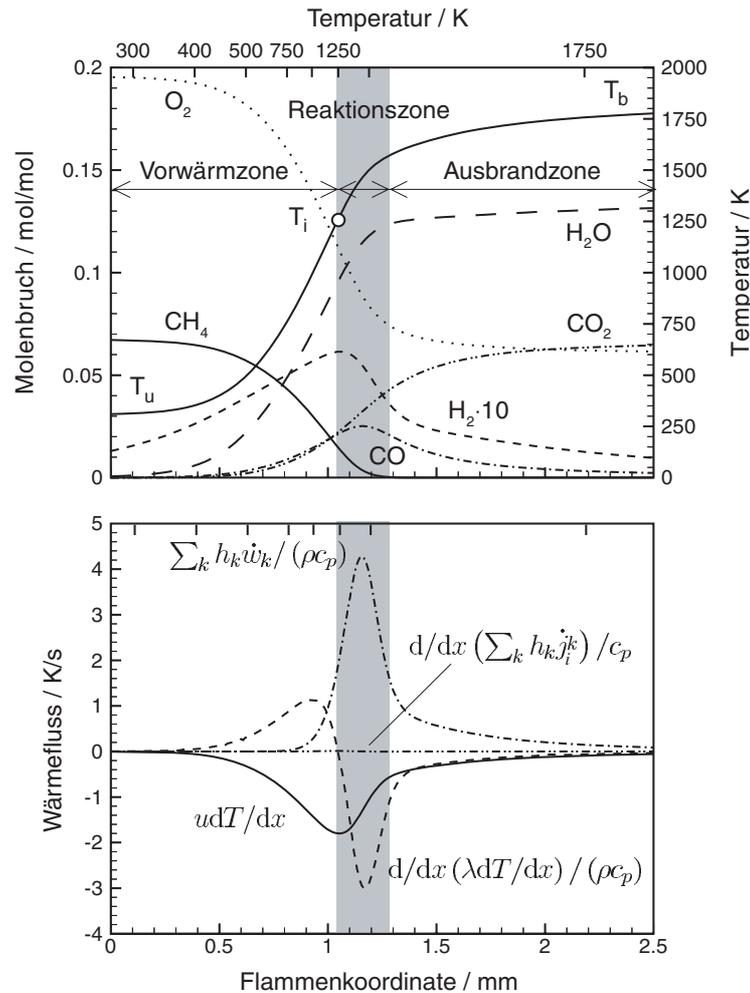


Abbildung 2.6: Struktur einer adiabaten, mageren  $\text{CH}_4/\text{Luft}$ -Flamme unter Standardbedingungen: Profile von Temperatur, stabilen Zwischen- und Endprodukten sowie Vergleich konvektiver, diffusiver und chemischer Beiträge zur Energiebilanz (nach HOFFMANN [71])

von Energie und chemischen Radikalen in der Reaktionszone und deren Transport in die Vorwärmzone zur Aufheizung des Frischgemischs auf Zündtemperatur und zur Initiierung von Kettenfortpflanzungsreaktionen. [71]

**Charakteristische Größen:** Neben der laminaren Flammengeschwindigkeit der ungestreckten Flamme  $u_{F,l,v}^{\circ}$  (typische Werte:  $u_{F,l,v}^{\circ} \approx 0,1$  bis  $1,0 \text{ m/s}$ ), die mit steigender Vorwärmtemperatur stark zunimmt, eine schwache, inverse Abhängigkeit vom Druck zeigt und ihr Maximum in leicht brennstoffreichen Mischungen erreicht, wird als weitere charakteristische Größe der laminaren, vorgemischten Flammenfront die Ausdehnung der gesamten Flammenfront  $l_{F,l,v}$  (typische Werte:  $l_{F,l,v} \approx 0,1$  bis  $1,0 \text{ mm}$ ) mittels des Temperaturgradienten am Ort der Zündtemperatur  $T_i$  definiert:

$$l_{F,l,v} = \frac{T_b - T_u}{(\partial T / \partial x)_i}, \quad (2.69)$$

Diese kann nach BLINT [17] über das Verhältnis aus Temperaturleitfähigkeit  $a = \lambda / (\varrho \cdot c_p)$  und laminarer Flammengeschwindigkeit abgeschätzt werden:

$$l_{F,l,v} = \left( \frac{\lambda}{\varrho \cdot c_p} \right)_u \cdot \frac{1}{u_{F,l,v}^\circ} . \quad (2.70)$$

Des Weiteren wird die Dicke der Reaktionszone  $l_\delta$  verwendet, die über den von Druck und Vorwärmtemperatur abhängigen Expansionsfaktor der Reaktionszone  $\delta$  ( $\delta \approx 0,1$  für  $\text{CH}_4/\text{Luft}$ -Flammen bei Standardbedingungen) mit der Flammenfrontdicke  $l_{F,l,v}$  in Beziehung gesetzt werden kann:

$$l_\delta = \delta \cdot l_{F,l,v} . \quad (2.71)$$

Das Zeitmaß der Wärmefreisetzung für die laminare, vorgemischte Flamme:

$$\tau_{F,l,v} = \frac{l_{F,l,v}}{u_{F,l,v}^\circ} \quad (2.72)$$

kann als Quotient aus Flammendicke und laminarer Flammengeschwindigkeit definiert werden. [71]

**Flammenfrontkrümmung und -streckung:** Abweichend vom Idealfall der eindimensionalen, laminaren Flammenfront ist diese in der Realität Streckungs- und Krümmungseffekten unterworfen, die unter dem Begriff “Stretch” zusammengefasst werden. Die räumliche Lage der dreidimensional zu betrachtenden Flammenfront (s. Abb. 2.7) kann durch die Reaktionsfortschrittsvariable  $c$ , die im Unverbrannten den Wert 0 und im Verbrannten den Wert 1 besitzt, definiert werden. Hierbei ist eine Flammenfrontoberfläche eine beliebige Isofläche, auf der die Reaktionsfortschrittsvariable den Wert  $c = c^*$  annimmt. Im lokalen, flammenfrontbezogenen Koordinatensystem  $\mathbf{e} = (\mathbf{e}_\xi, \mathbf{e}_\psi, \mathbf{e}_\zeta)$  lässt sich der Einheitsvektor eines betrachteten Flammenfrontoberflächenelements als Gradient der Reaktionsfortschrittsvariablen ausdrücken:  $\mathbf{n} = -\nabla c / |\nabla c|$  und zeigt in Richtung des unverbrannten Gemisches. Die Absolutgeschwindigkeit des Flammenfrontoberflächenelements  $\mathbf{w}$  ergibt sich als Summe aus Strömungsgeschwindigkeit  $\mathbf{u}$  und Ausbreitungsgeschwindigkeit der gekrümmten Isofläche  $u_{F,l,v}$ :  $\mathbf{w} = \mathbf{u} + \mathbf{n} \cdot u_{F,l,v}$ .

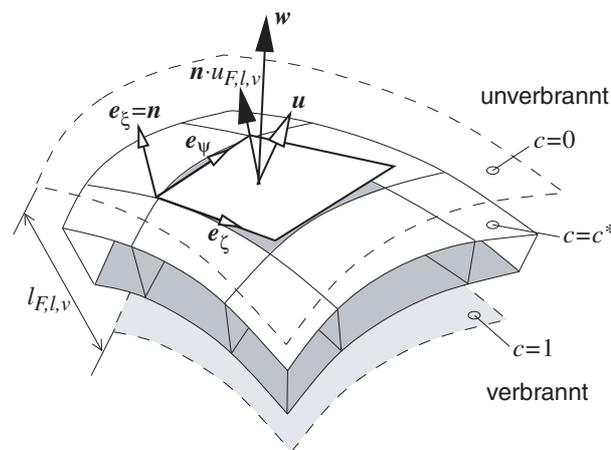


Abbildung 2.7: Dreidimensionales, gekrümmtes Flammenfrontoberflächenelement (nach HOFFMANN [71])

Unter der Annahme paralleler Isoflächen der Dichte und Konzentrationen sowie einer sehr dünnen Flammenfront können instationäre Änderungen der Flammenfrontdicke durch unterschiedliche Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Flammenfrontflächen bzw. Dichteänderungen entlang der betrachteten Isofläche vernachlässigt werden. Somit ist die durch Inhomogenitäten des Strömungsfeldes bedingte, relative Änderung des Flammenfrontoberflächenelementes  $dA$  mittels der Stretchrate  $K$  zu beschreiben:

$$K = \frac{1}{A} \frac{dA}{dt}, \quad (2.73)$$

die wiederum, mit Hilfe der in Abb. 2.7 getroffenen Definitionen formuliert werden kann:

$$K = -\mathbf{n}\mathbf{n} : \nabla\mathbf{u} + \nabla \cdot \mathbf{u} + u_{F,l,v} \nabla \cdot \mathbf{n}. \quad (2.74)$$

Demnach setzt sich die Stretchrate aus drei Anteilen zusammen: Der erste Term auf der rechten Seite in (2.74), der Streckungseinflüsse auf Grund von Strömungsinhomogenitäten entlang der Oberfläche des Flammenfrontelementes beschreibt, wird mit dem zweiten Term, der die Wirkung einer Flammenfrontbewegung z.B. infolge einer Expansionsströmung der verbrannten Gase berücksichtigt, in der sog. Streckungsrate  $K_S$  ("strain rate") zusammengefasst. Der Stretchanteil durch Flammenfrontkrümmung  $K_C$  ("flame curvature") wird mit dem dritten Term erfasst [32].

Erstmals eingeführt wurde die Stretchrate  $K$  von KARLOVITZ et al. [84]. Die nach ihm benannte, dimensionslose Karlovitz-Zahl:

$$Ka = K \cdot \tau_{F,l,v}, \quad (2.75)$$

ist das Verhältnis aus dem Zeitmaß der Wärmefreisetzung der Vormischflamme (2.72) und dem Zeitmaß der Stretchrate (2.73). Sie beschreibt den Einfluss der Stretchrate auf die Struktur der Flammenfront und kann daher als Maß der Stromfadenaufweitung innerhalb der Flammenfront betrachtet werden.

Strech-Effekte können die molekular-diffusiven Transportvorgänge von Wärme und Spezies, die eine laminare Flammenfront bestimmen, lokal erheblich beeinflussen und damit die Flammentemperatur, die lokale Struktur der Reaktionszone sowie die laminare Flammengeschwindigkeit der gestreckten Flamme  $u_{F,l,v}$  gegenüber dem ungestreckten Fall verändern. Ist die Flammenfront z.B. in Richtung des unverbrannten Gases konvex gekrümmt (positive Krümmung), so tritt eine Wärmedefokussierung aus der Reaktionszone in die Vorwärmzone (d.h. eine Verteilung der Wärme auf eine größere Fläche) auf, die eine Verringerung der laminaren Flammengeschwindigkeit im gesamten Stöchiometriebereich bedingt. Demgegenüber führt eine Stofffokussierung aus der Vorwärmzone in die Reaktionszone zu einer Änderung der Flammengeschwindigkeit durch eine Verschiebung der Stöchiometrie, abhängig davon, ob die schneller diffundierende Komponente des Brennstoff/Oxidator-Gemisches im Unter- oder Überschuss vorliegt [27]. In Gemischen, in denen Wärme- und Stofftransport gleich schnell verlaufen ( $Le_k = a/D_k = 1$ ), hängt die Flammengeschwindigkeit allein von der Krümmung der Flammenfront und damit der Karlovitz-Zahl  $Ka$  ab [71]. Unterscheiden sich jedoch die Geschwindigkeiten dieser Transportprozesse, muss die Überlagerung von Wärme- und Stofftransport, die sog. bevorzugte Diffusion, erfasst werden. Üblicherweise erfolgt dies über die mit der Flammenfrontdicke  $l_{F,l,v}$  entdimensionierte Markstein-Länge  $L_M$  [37], die sog. Markstein-Zahl  $Ma = L_M/l_{F,l,v}$ , zu deren experimenteller Bestimmung

z.B. BRUTSCHER [27] eine Übersicht gibt. Demnach lässt sich schließlich das Verhältnis der laminaren Flammengeschwindigkeiten mit und ohne Stretch-Einfluss mittels Karlovitz- und Marksteinzahl abschätzen:

$$\frac{u_{F,l,v}^{\circ}}{u_{F,l,v}} = 1 + Ma \cdot Ka . \quad (2.76)$$

#### 2.4.2.2 Laminare, nicht-vorgemischte Flamme (Diffusionsflamme)

Im Gegensatz zu laminaren, vorgemischten Flammen werden bei laminaren, nicht-vorgemischten Flammen Brennstoff und Oxidator erst im Brennraum durch Konvektion zusammengeführt und anschließend durch Diffusion bis zu der für die chemischen Verbrennungsreaktionen nötigen molekularen Mischung der Edukte vermischt. Sie bewegen sich daher nicht durch einen selbst-induzierten Flammenfortpflanzungsmechanismus fort. Ihre Flammengeschwindigkeit und Flammendicke hängt auch von lokalen Strömungsgrößen ab. [147]

**Flammenstruktur bei irreversibler, unendlich schneller Chemie:** In vielen technischen Verbrennungsprozessen sind die charakteristischen Zeitmaße der Konvektion und Diffusion meist von gleicher Größenordnung, jedoch viel größer als das charakteristische Zeitmaß der Wärmefreisetzung. Im Grenzfall “unendlich schneller Chemie” (lokales chemisches Gleichgewicht) ist die Mischung der langsamste und damit geschwindigkeitsbestimmende Schritt. Die Annahme unendlich schneller Chemie dient seit Einführung des Flammenflächenmodells von BURKE & SCHUMANN [31] (1928) der Vorhersage globaler Eigenschaften nicht-vorgemischter Flammen (z.B. Flammenlänge), ohne dabei die Einzelheiten der chemischen Kinetik berücksichtigen zu müssen. Ausgehend von der Annahme, dass die chemische Reaktion irreversibel und in einer singulären Fläche bei stöchiometrischer Mischung stattfindet, erlaubt das Flammenflächenmodell die Darstellung aller skalaren Größen (Temperatur, Speziesmassenbrüche und Dichte) einzig als Funktion des Mischungsbruchs, welcher nach Abschnitt 2.1.5 eine normierte Form des Elementmassenbruchs und damit unabhängig von chemischen Reaktionen (“conserved scalar”) ist. Eine Darstellung im Mischungsbruchraum erhält man durch Transformation der räumlichen Koordinaten  $x_i$  in den Mischungsbruchraum  $f$ , wobei die skalaren Größen dem lokalen Wert des Mischungsbruchs zugeordnet werden [140]. Abb. 2.8 (unteres Teilbild) zeigt das Schema einer laminaren Gegenstrom-Diffusionsflamme, die eine räumlich eindimensionale Betrachtung des laminaren, nicht-vorgemischten Verbrennungsprozesses erlaubt [203, 211]. Bei gleichen Impulsströmen liegt die Stagnationsebene der Strömung in der Mitte zwischen Brennstoff- und Oxidator-Düse, während sich die Flamme an der Stelle nahe der stöchiometrischen Zusammensetzung  $f_{st}$  lokalisiert. Zum Vergleich sind im mittleren Teilbild die Mischungslinien im nicht-reaktiven Fall dargestellt, im oberen Teilbild hingegen, schematische Verläufe der Speziesmassenbrüche  $Y_k$  und der Temperatur  $T$  im Mischungsbruchraum als Burke-Schumann-Lösung der laminaren nicht-vorgemischten Flamme. Die Annahme irreversibler, unendlich schneller Chemie führt zu einem linearen Verlauf der Massenbrüche und der Temperatur.

**Erfassung der Einflüsse reversibler, endlich schneller Chemie:** Die Einflüsse reversibler, endlich schneller chemischer Reaktionskinetik wirken sich insbesondere in der dünnen Reaktionszone nahe der Fläche stöchiometrischer Mischung und den diese

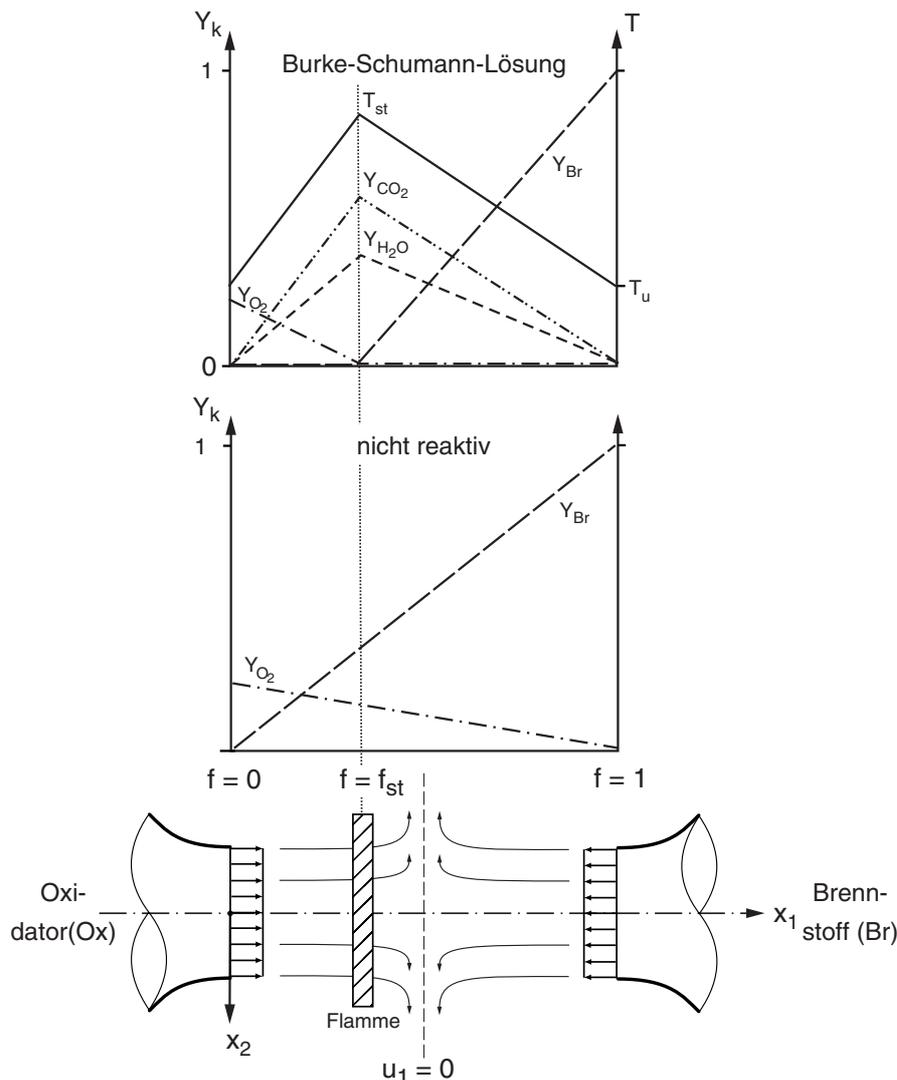


Abbildung 2.8: Struktur der laminaren, nicht-vorgemischten, eindimensionalen Flamme im Mischungsbruchraum; isotherme Mischungslinien und experimentelle Anordnung der Gegenstrom-Diffusionsflamme

umgebenden, chemisch inerten Diffusionszonen aus. Sie müssen bei der Betrachtung von Zünd- und Verlöschprozessen in Stabilisierungszonen nicht-vorgemischter Flammen berücksichtigt werden. Ihre Erfassung erfolgt häufig unter Anwendung des sog. Flamelet<sup>3</sup>-Ansatzes [25, 140, 221]. Hierbei werden die Erhaltungsgleichungen der Speziesmassen und der Energie in die Fläche stöchiometrischer Mischung projiziert und die dazu senkrecht stehende Koordinate durch den Mischungsbruch  $f$  ersetzt. Die resultierenden Flamelet-Gleichungen für skalare Größen  $\phi_k$ :

$$\rho \frac{\partial \phi_k}{\partial t} = \frac{\rho}{Le_k} \chi \frac{\partial^2 \phi_k}{\partial f^2} + \dot{w}_k, \tag{2.77}$$

beschreiben die reaktiv-diffusive Struktur der Umgebung der Reaktionszone, deren Lage aus der Bedingung  $f = f_{st}$  und damit aus der Lösung der Bilanzgleichung des

<sup>3</sup>Flamelets sind dünne, reaktiv-diffusive Schichten in einem ansonsten nicht-reagierenden Strömungsfeld [220].

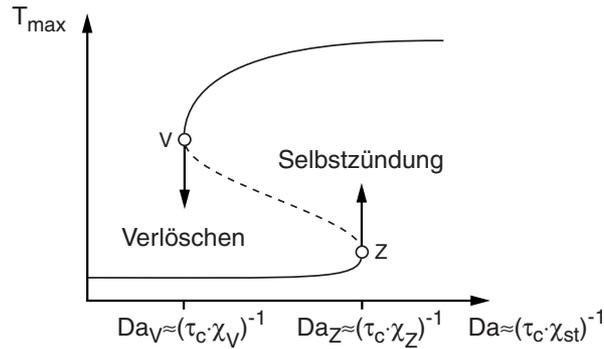


Abbildung 2.9: Wärmefreisetzung einer laminaren, nicht-vorgemischten Flamme in Abhängigkeit von der skalaren Dissipationsrate

Mischungsbruchs (2.24) hervorgeht.

Als zentraler Parameter tritt in den Flamelet-Gleichungen (2.77) die skalare Dissipationsrate auf:

$$\chi = 2D_k \left| \frac{\partial f}{\partial x_i} \right|^2. \quad (2.78)$$

Diese beschreibt die Dissipation der Fluktuation von Skalaren analog zur Dissipation von Geschwindigkeitsfluktuationen durch viskose Reibung [211], kann also als Diffusivität im Mischungsbruchraum betrachtet werden (in (2.78) wird der Diffusionskoeffizient  $D_k$  mit dem Quadrat des Mischungsbruchgradienten  $\partial f / \partial x_i$  multipliziert). Sie repräsentiert die Auswirkungen des Strömungs- und Mischungsfeldes auf den Energiehaushalt der Reaktionszone, da sie sowohl konvektiven als auch diffusiven Transport implizit enthält. Als Funktion des Mischungsbruchs kann die skalare Dissipationsrate  $\chi(f)$  durch ihren Wert bei stöchiometrischer Zusammensetzung  $\chi_{st}$  parametrisiert werden. Der Kehrwert der skalaren Dissipationsrate ist als inverses charakteristisches Transportzeitmaß  $\tau_\chi \approx \chi_{st}^{-1}$  zu interpretieren. Mit einem gegebenen, in erster Näherung als konstant angenommenen, charakteristischen Zeitmaß der Wärmefreisetzung  $\tau_c$  kann eine Damköhler-Zahl  $Da = (\tau_\chi / \tau_c) \approx (\tau_c \cdot \chi_{st})^{-1}$  gebildet werden, als deren Funktion in Abb. 2.9 die Maximaltemperatur als Maß der Wärmefreisetzung einer laminaren, nicht-vorgemischten Flamme dargestellt ist. Der untere Ast der S-förmigen Kurve in Abb. 2.9 beschreibt das Zündverhalten der Flamme. Für kleine Damköhler-Zahlen wird die lokale Radikalbildung durch die schnellere Diffusion kompensiert. Mit zunehmender Damköhler-Zahl (abnehmender skalarer Dissipationsrate) werden Diffusionsprozesse immer langsamer, bis schließlich für  $Da \geq Da_Z$  bzw.  $\chi_{st} \leq \chi_Z$  Selbstzündung eintritt, die einer instationären Zustandsänderung von Punkt  $Z$  auf den oberen Kurvenzug entspricht. Ausgehend von Zuständen schneller Chemie auf dem oberen Kurvenzug (große Damköhler-Zahlen), bedeuten abnehmende Damköhler-Zahlen (steigende skalare Dissipationsraten) eine Zunahme der Wärmeabfuhr über die Diffusionszonen. Kann die Wärmefreisetzung diese Wärmeabfuhr nicht mehr kompensieren, d.h.  $Da \leq Da_V$  bzw.  $\chi_{st} \geq \chi_V$  ( $\chi_V = \chi_{st,V}$ ), so tritt im Punkt  $V$  Verlöschen ein. Nach PETERS [140] ist dieses Gleichgewicht zwischen Wärmefreisetzung durch chemische Reaktionen und Wärmeabfuhr in Richtung beider Diffusionszonen in einer laminaren, nicht-vorgemischten Flamme bei Verlöschbedingungen als Analogon zum Gleichgewicht zwischen Wärmefreisetzung und Wärmeabfuhr in die Vorwärmzone bei laminaren Vor-

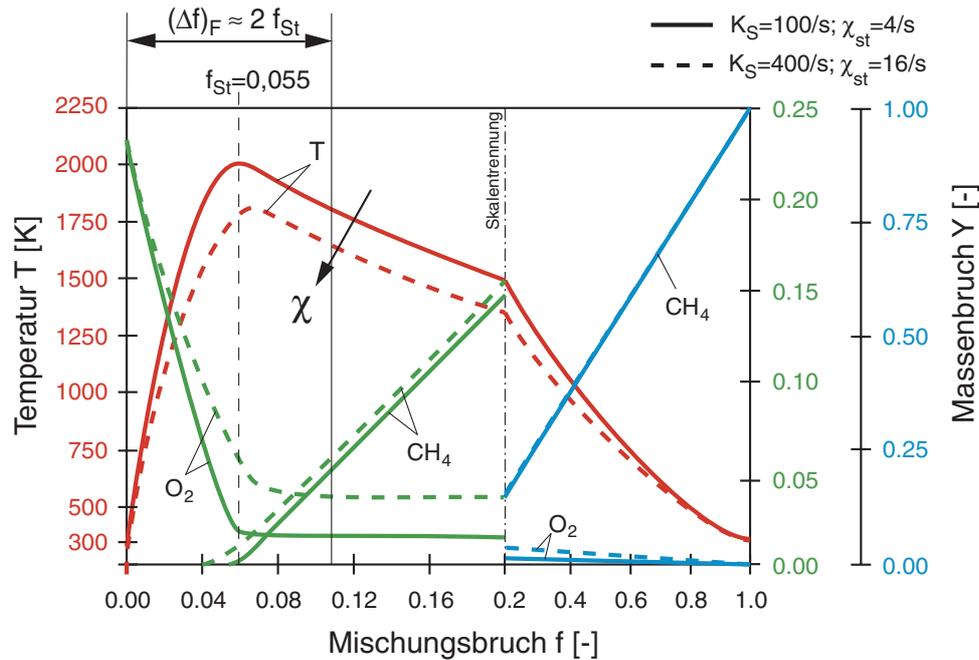


Abbildung 2.10: Struktur der nicht-vorgemischten, gestreckten, laminaren Methan/Luft-Flamme (nach PETERS [141])

mischflammen zu verstehen.[138, 140]

Als Lösung der Flamelet-Gleichungen (2.77) unter Verwendung eines 4-Schritt Reaktionsmechanismus zeigt Abb. 2.10 die Struktur einer Methan/Luft-Flamme bei unterschiedlichen skalaren Dissipationsraten  $\chi_{st}$  bzw. Streckungsraten  $K_S$  anhand des Verlaufes von Temperatur und Speziesmassenbrüchen im Mischungsbruchraum [141]. Hierbei entsprechen  $K_S = 400/s$  bzw.  $\chi_{st} = 16/s$  einem Zustand nahe der Verlöschungsgrenze. Mit zunehmender Streckungsrate bzw. skalarer Dissipationsrate, also einer verstärkten Diffusion im Mischungsbruchraum, führt eine erhöhte Wärmeleitung aus der Reaktionszone in die umliegenden brennstoffreichen und brennstoffarmen Zonen zu einer Abnahme der Temperatur. Die chemischen Reaktionen erreichen nicht mehr die Gleichgewichtslage. Die Reaktionszone, erkennbar an der Lage des Temperaturmaximums, verschiebt sich in Richtung größeren Mischungsbruchs.

**Charakteristische Größen:** Im Gegensatz zu laminaren Vormischflammen, die sich auf Grund eines selbst-induzierten Flammenfortpflanzungsmechanismus fortbewegen (laminare Flammengeschwindigkeit:  $u_{F,l,v}^{\circ}$ ) und eine definierte Flammendicke ( $l_{F,l,v}$ ) aufweisen, lassen sich für laminare, nicht-vorgemischte Flammen charakteristische Größen, d.h. Zeit-, Geschwindigkeits- bzw. Längenmaß, nicht direkt ableiten.

BORGHI [19] zufolge können auf der Basis dimensionsanalytischer Betrachtungen ein charakteristisches Längen- sowie Geschwindigkeitsmaß der gestreckten, laminaren, nicht-vorgemischten Flamme in Abhängigkeit von Diffusionskoeffizient  $D$  und Streckungsrate  $K_S$  die hergeleitet werden:

$$l_{F,l,d} \propto \sqrt{D/K_S} \quad \text{bzw.} \quad u_{F,l,d} \propto \sqrt{D \cdot K_S}. \quad (2.79)$$

Nach PETERS [140] besitzt eine laminare, vorgemischte Flamme nur ein Zeitmaß  $\tau_{F,l,v}$ , während in einer laminaren, nicht-vorgemischten Flamme ein durch die Strömung auf-

geprägtes Zeitmaß ( $\chi_{st}^{-1}$ ) mit dem Zeitmaß der die Umsatzrate bestimmenden chemischen Reaktion ( $\tau_c$ ) konkurriert. Da diese beiden Zeitmaße bei Verlöschbedingungen jedoch gleich sind (Gleichgewicht zwischen Wärmefreisetzung durch chemische Reaktionen und Wärmeabfuhr in Richtung beider Diffusionszonen, s. Abb. 2.9 Punkt V), kann ein Zeitmaß für die laminare, nicht-vorgemischte Flamme  $\tau_{F,l,d}$  ( $\tau_{F,l,d} = 2,9 \cdot 10^{-4} s$  für stöchiometrische  $CH_4$ /Luft-Flammen bei Atmosphärendruck und 300K Vorwärmtemperatur [138]) als Funktion der skalaren Dissipationsrate bei Verlöschbedingungen  $\chi_V$  ausgedrückt werden :

$$\tau_{F,l,d} \propto \chi_V^{-1} . \quad (2.80)$$

Unter der Annahme eines eindimensionalen Mischungsbruchprofils senkrecht zur Fläche stöchiometrischer Zusammensetzung ist die sog. Diffusions-Dicke der Flammenfront bzw. Flammenfrontdicke im Mischungsbruchraum  $(\Delta f)_F$  durch:

$$(\Delta f)_F \approx 2 \cdot f_{st} , \quad (2.81)$$

abzuschätzen (s. Abb. 2.10) und umfasst sowohl die Reaktionszone, die durch große Massenbruch-Gradienten der Reaktanten gekennzeichnet ist, sowie die diese umgebenden, chemisch inerten Diffusionszonen [139]. Die Dicke der Reaktionszone  $(\Delta f)_R$  kann als Funktion der Diffusions-Dicke der Flammenfront dargestellt werden:

$$(\Delta f)_R = (\Delta f)_F \cdot \varepsilon_V \cdot \left( \frac{\chi_{st}}{\chi_V} \right)^{1/4} , \quad (2.82)$$

wobei für  $CH_4$ /Luft-Flammen  $\varepsilon_V = 0,16$  ist.

### 2.4.2.3 Laminare, teil-vorgemischte Flamme

Die in den vorangehenden Abschnitten diskutierten vorgemischten und nicht-vorgemischten Flammen lassen sich anhand des Mischungszustandes von Brennstoff und Oxidator unterscheiden. In technischen Anwendungen herrschen oft Zustände, die weder der einen noch der anderen dieser Verbrennungsformen entsprechen, sondern vielmehr einer Mischform, der sog. teil-vorgemischten Verbrennung. Ihre Diskussion anhand der "triple-flame" soll einen Eindruck über die komplexen Vorgänge bei der Interaktion von Mischung, Verbrennung sowie - vorausblickend auf die Diskussion turbulenter Verbrennung - turbulenzbedingter Fluid-Dynamik vermitteln. Die teil-vorgemischte Verbrennung tritt auf, wenn Brennstoff und Oxidator zwar voneinander getrennt dem Brennraum zugeführt, aber durch konvektiven (turbulenten) Austausch vor der eigentlichen Verbrennung teilweise vermischt werden, also nicht mehr ein rein diffusiv-reaktiv kontrolliertes System zu betrachten ist. Auch werden Stabilisierungsmechanismen vieler Verbrennungssysteme durch die lokale Mischung von Brennstoff, Oxidator und rezirkulierten, verbrannten Abgasen kontrolliert; d.h. es liegen nicht immer reiner Brennstoff und reiner Oxidator vor.

Die Koexistenz von magerer und fetter vorgemischter, sowie nicht-vorgemischten, laminaren Flammen macht die sog. "triple-flame" zu einem attraktiven Modell zur Untersuchung teil-vorgemischter Verbrennung. Sie tritt bei der abgehobenen Stabilisierung laminarer, nicht-vorgemischter Flammen im Nachlauf einer Trennplatte zwischen Oxidator- und Brennstoffstrom sowie an den Enden unterbrochener Diffusionsflammenfronten bei turbulenter Verbrennung auf. Nachdem PHILLIPS [146] 1965 erstmals

“triple-flames” beobachtet hat, wurden diese fortan eingehend untersucht [28, 42, 50, 65, 91, 163]. Bei einer “triple-flame”, dargestellt in Abb. 2.11, entwickeln sich, ausgehend von einem stöchiometrisch vorgemischtem Flammenkern, zum einen brennstoffseitig eine fette vorgemischte Flamme, zum anderen oxidatorseitig eine magere vorgemischte Flamme. Beide Vormischflammen sind auf Grund ihrer mit zunehmendem Abstand von der Linie stöchiometrischer Mischung abnehmenden Brenngeschwindigkeit gekrümmt und umschließen eine Diffusionsflamme, in der überschüssiger, von den Vormischflammen nicht umgesetzter Brennstoff bzw. Oxidator verbraucht wird. Der Punkt, an dem die drei Flammen aufeinander treffen, der zugleich Stabilisierungspunkt der Diffusionsflamme ist, wird Tripelpunkt genannt. Er bewegt sich entlang der Fläche stöchiometrischer Zusammensetzung. Die Fortpflanzungsgeschwindigkeit der “triple-flame” ist einerseits von der Krümmung der teil-vorgemischten Flammenfront bestimmt, die mit steigender skalarer Dissipationsrate zunimmt, andererseits von der Wärmefreisetzung durch die chemischen Reaktionen. RUETSCH et al. [163] haben gezeigt, dass eine durch Wärmefreisetzung verursachte Expansion hinter der Flammenfront der “triple-flame” zu einer Aufweitung des Strömungsfeldes führt und somit in einer gegenüber einer ebenen, laminaren Flammenfront höheren Fortpflanzungsgeschwindigkeit resultieren kann. Mit zunehmender skalarer Dissipationsrate an der Flammenspitze nimmt die Fortpflanzungsgeschwindigkeit der “triple-flame” jedoch ab. GHOSAL & VERVISH [50] drücken die Fortpflanzungsgeschwindigkeit der “triple-flame” als Funktion der Ausbreitungsgeschwindigkeit der laminaren, ebenen Vormischflamme, der Wärmefreisetzung und der stöchiometrischen skalaren Dissipationsrate vor der Flammenfront aus. Ob “triple-flames” eine Rolle bei der Stabilisierung nicht-vorgemischter, turbulenter Flammen spielen ist bislang nicht geklärt, doch wurden “triple-flame”-ähnliche Strukturen zum einen in Direkten Numerischen Simulationen [43], zum anderen experimentell in Stabilisierungsgebieten turbulenter, abgehobener Flammen [129] gefunden.

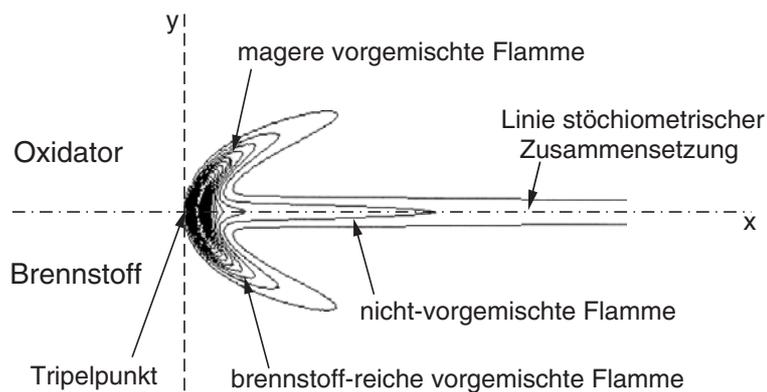


Abbildung 2.11: Struktur einer isolierten, fortschreitenden “triple-flame” als Lösung einer Direkt-Numerischen-Simulation (DNS); Isolinien der Wärmefreisetzung nach RUETSCH et al. [163]

### 2.4.3 Skalen und Klassifizierung turbulenzbedingter Reaktionsstrukturen

Die komplexe Interaktion turbulenter Mischungs- und Transportprozesse mit den chemischen Reaktionen der Verbrennung, d.h. die Wechselwirkung von Wirbelelementen unterschiedlicher Abmessungen mit der Flammenfront, resultiert in turbulenten Flammenfronten unterschiedlicher Gestalt und Struktur. Zur Klassifizierung dieser turbulenzbedingten Reaktionsstrukturen verwenden viele Autoren [3, 18, 19, 24, 136, 221] grafische Darstellungen, basierend auf dem Vergleich charakteristischer Skalen der zwei grundlegenden Prozesse, nämlich der turbulenten Mischung und der Wärmefreisetzung durch chemische Reaktionen. Nachfolgend werden exemplarisch die Regime-Diagramme nach BORGHİ [19] für vorgemischte und nicht-vorgemischte, turbulente Verbrennung, sowie das Regime-Diagramm nach PETERS [139] für nicht-vorgemischte Bedingungen vorgestellt.

#### 2.4.3.1 Regime-Diagramm vorgemischter, turbulenter Verbrennung nach BORGHİ

Mit der Vereinfachung, dass sowohl für die turbulente Mischung sowie für die chemische Reaktion jeweils nur ein Zeit- und Längenmaß relevant sei, entwickelt BORGHİ [18, 19] ein Diagramm für vorgemischte Flammen (s. Abb. 2.12), in dem er das Verhältnis aus einem für die Turbulenz charakteristischen Geschwindigkeitsmaß  $u_t$  zur Brenngeschwindigkeit der ungestreckten, laminaren, vorgemischten Flamme  $u_{F,l,v}^\circ$  mit dem Verhältnis aus turbulentem Längenmaß  $l_t$  zur Dicke der laminaren, vorgemischten Flamme  $l_{F,l,v}$  vergleicht. Zur Einteilung in verschiedene Bereiche, sog. Regime, verwendet Borghi verschiedene, nachfolgend beschriebene, dimensionslose Kennzahlen.

Ausgehend von der Annahme, dass die Prandtl-Zahl ( $Pr$ ) gleich eins ist, d.h. dass kinematische Viskosität und Temperaturleitfähigkeit gleich groß sind, kann die turbulente Reynolds-Zahl (2.38), die die Abgrenzung der turbulenten von der laminaren Verbrennung ermöglicht, als Funktion der in Abb. 2.12 verglichenen Verhältnisse ausgedrückt werden:

$$Re_t = \frac{u_t}{u_{F,l,v}^\circ} \cdot \frac{l_t}{l_{F,l,v}} \quad \text{bzw.} \quad \frac{u_t}{u_{F,l,v}^\circ} = Re_t \cdot \left( \frac{l_t}{l_{F,l,v}} \right)^{-1}. \quad (2.83)$$

Die turbulente Damköhler-Zahl  $Da_t$  erlaubt den Vergleich des Zeitmaßes der größten Wirbel im turbulenten Spektrum  $\tau_t = l_t/u_t$  mit dem Zeitmaß der Wärmefreisetzung (2.72), beschreibt also das Verhältnis von Wärmefreisetzung durch chemische Reaktionen zu turbulentem Transport der energietragenden, integralen Skalen:

$$Da_t = \frac{\tau_t}{\tau_{F,l,v}} = \frac{l_t/u_t}{l_{F,l,v}/u_{F,l,v}^\circ} \quad \text{bzw.} \quad \frac{u_t}{u_{F,l,v}^\circ} = Da_t^{-1} \cdot \frac{l_t}{l_{F,l,v}}. \quad (2.84)$$

Die zur Erfassung von Stretch-Effekten dienende turbulente Karlovitz-Zahl  $Ka_t$  ist als Verhältnis aus Zeitmaß der Wärmefreisetzung (2.72) und dem Zeitmaß der jeweiligen, die Flammenfront beeinflussende Wirbelklasse darstellbar. Sie wird maximal für die kleinsten im Turbulenzfeld existierenden Wirbel, die Kolmogorov-Wirbel dissipativer Skalen. Sie kann also mit dem Kolmogorov-Mikromaß  $\tau_\eta$  (2.40) gebildet und unter Anwendung von (2.42) bis (2.44) wiederum in Abhängigkeit der Makromaße ( $u_t, l_t, \tau_t$ )

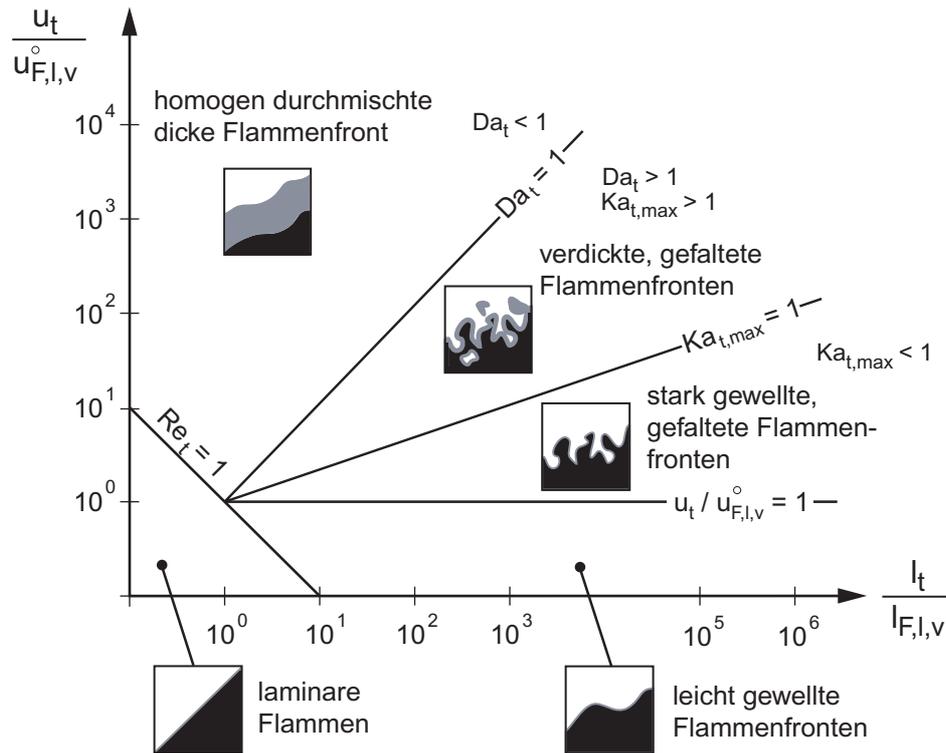


Abbildung 2.12: Regime der turbulenten, vorgemischten Verbrennung (nach BORGIHI [19])

ausgedrückt werden:

$$Ka_{t,max} = \frac{\tau_{F,l,v}}{\tau_\eta} \approx \frac{\tau_{F,l,v}}{\tau_t} \cdot Re_t^{1/2} = \left( \frac{u_t}{u_{F,l,v}^0} \right)^{3/2} \cdot \left( \frac{l_t}{l_{F,l,v}} \right)^{-1/2}$$

bzw.  $\frac{u_t}{u_{F,l,v}^0} = Ka_{t,max}^{2/3} \cdot \left( \frac{l_t}{l_{F,l,v}} \right)^{1/3} \quad (2.85)$

Die in den Gleichungen (2.83) bis (2.85) auftretenden Exponenten  $-1$ ,  $1$  bzw.  $1/3$  entsprechen, bei doppelt-logarithmischer Auftragung in Abb. 2.12, der Steigung derjenigen Geraden, die die verschiedenen Regime voneinander abgrenzen:



$Re_t < 1$ : Von Inhomogenitäten der laminaren Strömung abgesehen, ist die Flammenfront in diesem Bereich der laminaren Verbrennung glatt und kann, wie in Kap. 2.4.2.1 ausgeführt, als ungestreckte, laminare, vorgemischte Flamme beschrieben werden.

Zur Diskussion der turbulenten Regime für  $Re_t > 1$  soll das Borghi-Diagramm bei einem festen Abszissenwert von  $l_t/l_{F,l,v} \geq 10$  in Richtung der Ordinate durchlaufen werden. Diese Vorgehensweise reflektiert eine kontinuierliche Zunahme der turbulenten Reynolds-Zahl und damit, bei festgehaltenem  $l_t$ , eine Steigerung des für die Turbulenz charakteristischen Geschwindigkeitsmaßes  $u_t$ ;  $u_{F,l,v}^0$  und  $l_{F,l,v}$  werden hier als konstante Größen betrachtet.



$Re_t > 1$ ;  $u_t < u_{F,l,v}^0$ : Die Flammenfront wird in diesem Bereich durch die gegen-

über der Flammengeschwindigkeit  $u_{F,l,v}^\circ$  kleinere Schwankungsgeschwindigkeit  $u_t$  und die gegenüber der Flammenfrontdicke  $l_{F,l,v}$  größeren Turbulenzelemente  $l_t$  nur wenig beeinflusst. Sie ist folglich nur gewellt (“wrinkled flamelets”) und dennoch dünn, fluktuiert aber und wirkt daher im zeitlichen Mittel verdickt. Die Flammengeschwindigkeit der turbulenten Flamme  $u_{F,t,v}$  ist im Vergleich zur laminaren, ungestreckten Vormischflamme  $u_{F,l,v}^\circ$  auf Grund der Oberflächenvergrößerung der Flammenfront erhöht [97, 172]:

$$\frac{u_{F,t,v}}{u_{F,l,v}^\circ} \propto \frac{u_t}{u_{F,l,v}^\circ}. \quad (2.86)$$



$Re_t > 1$ ;  $u_t > u_{F,l,v}^\circ$ ;  $Ka_{t,max} < 1$ : Mit Überschreiten des Wertes der Flammengeschwindigkeit  $u_{F,l,v}^\circ$  führt eine wachsende Schwankungsgeschwindigkeit  $u_t$  zu einer zunehmenden Auffaltung der Flammenfront, die gegenüber den Wirbelabmessungen immer noch als dünn anzusehen ist und durch die turbulente Strömung nur deformiert und konvektiv transportiert wird. Neben der Flammenfrontdehnung gewinnen mit wachsender Schwankungsgeschwindigkeit die Flammenfrontkrümmung und damit auch Effekte der bevorzugten Diffusion zunehmend an Bedeutung. Es kann zu Quench- und Wiederzündungsvorgängen und damit zur Abschnürung einzelner Inseln von Frischgemisch und Rauchgas kommen (“wrinkled flamelets with pockets”).



$Re_t > 1$ ;  $Ka_{t,max} > 1$ ;  $Da_t \geq 1$ : Für  $Ka_{t,max} > 1$  ist das Zeitmaß der Wärmefreisetzung  $\tau_{F,l,v}$  stets größer als die Zeitskala der kleinsten Turbulenzelemente  $\tau_\eta$ . Diese können auf Grund ihres gegenüber der Flammenfrontdicke  $l_{F,l,v}$  kleineren Längenmaßes  $l_\eta$  (s. Gl. (2.42)) in die Flammenfront eindringen, dort den diffusiven Austausch intensivieren und damit eine Verdickung der Flammenfront bewirken. Die Verdickung der Flammenfront ermöglicht ein Eindringen von Turbulenzelementen zunehmend größeren Längenmaßes, die wiederum die Verdickung der Flammenfront intensivieren. Aus dimensionsanalytischen Betrachtungen leitet ZIMONT [226] Proportionalitätsbeziehungen zwischen Flammengeschwindigkeit, Flammenfrontdicke und Temperaturleitfähigkeit im turbulenten Fall ab. Unter der Voraussetzung, dass die Dissipationszeit  $\tau_t$  der Turbulenzelemente, die in der Flammenfront sind, nicht größer sein kann als das Zeitmaß der Wärmefreisetzung  $\tau_{F,l,v}$ , werde die Dicke der Flammenfront  $l_{F,t,v}$  gemäß:

$$l_{F,t,v} \propto l_t \cdot \left( \frac{\tau_{F,l,v}}{\tau_t} \right)^{3/2} \propto l_t \cdot \left( \frac{1}{Da_t} \right)^{3/2}, \quad (2.87)$$

begrenzt [226].

Große Stretchraten führen zu lokalem Verlöschen, zum Zerreißen der Flammenfront. Diese ist nun nicht mehr als laminar zu betrachten, sondern als turbulent verdickte, gefaltete Flammenfront, in der unterschiedliche Reaktionsgrade nebeneinander vorliegen (“distributed reaction zones”, “perturbed flamelets”). Bei konstantem Makrolängenmaß  $l_t$  nimmt mit zunehmender Schwankungsgeschwindigkeit  $u_t$  das turbulente Zeitmaß  $\tau_t$  im Vergleich zum Zeitmaß der Wärmefreisetzung  $\tau_{F,l,v}$  stetig ab, bis schließlich gemäß (2.84)  $Da_t = 1$  erreicht wird, sodass Wirbel aller Größenklassen bis hin zum turbulenten Makrolängenmaß  $l_t$  in die Flammenfront eindringen und diese verdicken können. Über die durch die Oberflächenvergrößerung gegenüber dem laminaren, ungestreckten Fall erhöhte turbulente Flammengeschwindigkeit (2.86) hinaus, bewirkt die Verstärkung des Austausches in der turbulenten, verdickten Flamme eine weitere Erhöhung

der turbulenten Brenngeschwindigkeit. Ein in der Literatur weit verbreiteter Ansatz hierzu ist folgender [172]:

$$\frac{u_{F,t,v}}{u_{F,l,v}^{\circ}} \propto \left( \frac{u_t}{u_{F,l,v}^{\circ}} \right)^a \cdot \left( \frac{l_t}{l_{F,l,v}} \right)^b, \text{ mit } \begin{array}{l} 1 > a > 0,5 \quad ; \quad a = f(Re_t) \\ 0 < b < 0,5 \quad ; \quad b = f(Da_t) \end{array} \quad (2.88)$$



$Re_t > 1$ ;  $Da_t < 1$ : In diesem Regime, in dem selbst das turbulente Zeitmaß der größten Wirbel  $\tau_t$  der Turbulenzstruktur kleiner als das Zeitmaß der Wärmefreisetzung  $\tau_{F,l,v}$  ist, trägt die gesamte Turbulenzstruktur zur Intensivierung des Austausches und der Verdickung der Flamme, aber nicht zu deren Auffaltung bei. Für den Grenzfall sehr kleiner turbulenter Damköhler-Zahlen ( $Da_t \ll 1$ ) ist die Wärmefreisetzung durch chemische Reaktionen sehr viel langsamer als die turbulente Mischung; es liegt ein nahezu ideal rückvermisches System vor ("well stirred reactor"). Für die Umsatzgeschwindigkeit ist das langsamere Zeitmaß der Wärmefreisetzung entscheidend, woraus sich die von DAMKÖHLER [39] formulierte Abhängigkeit der turbulenten Flammengeschwindigkeit ergibt:

$$\frac{u_{F,t,v}}{u_{F,l,v}^{\circ}} \propto \left( \frac{u_t}{u_{F,l,v}^{\circ}} \cdot \frac{l_t}{l_{F,l,v}} \right)^{1/2} \quad \text{bzw.} \quad \frac{u_{F,t,v}}{u_{F,l,v}^{\circ}} \propto Re_t^{1/2} \quad (2.89)$$

### 2.4.3.2 Turbulente, nicht-vorgemischte Flammen im BORGI-Diagramm

Eine dem Regime-Diagramm der Vormischverbrennung (s. Abb. 2.12) entsprechende Klassifizierung turbulenter, nicht-vorgemischter Flammen erfordert zur Entdimensionierung der Abszissen- und Ordinatenwerte sowohl ein Geschwindigkeitsmaß als auch ein Längenmaß der ungestreckten, laminaren, nicht-vorgemischten Flamme, analog zu  $u_{F,l,v}^{\circ}$  bzw.  $l_{F,l,v}$  im Falle der vorgemischten Verbrennung. Wie in Abschnitt 2.4.2.2 während der Diskussion der charakteristischen Größen laminarer, nicht-vorgemischter Flammen beschrieben, lassen sich entsprechende Geschwindigkeits- bzw. Längenmaße nicht direkt ableiten, aber als Funktion von Streckungsrate und Diffusionskoeffizient darstellen (s. Gl. (2.79)). Da  $u_{F,l,d}$  und  $l_{F,l,d}$  lediglich nicht-vorgemischte Flammen mit ausreichend kleinem Zeitmaß der Wärmefreisetzung charakterisieren, verwendet BORGI [19] dennoch die Größen  $u_{F,l,v}^{\circ}$  und  $l_{F,l,v}$  der laminaren Vormischflamme, zu deren Bestimmung meist die stöchiometrische Luftzahl verwendet wird, wobei man davon ausgeht, dass sich die Reaktionszone turbulenter, nicht-vorgemischter Flammen nahe der Kontur stöchiometrischer Mischung einstellt.

Die Klassifizierung turbulenter, nicht-vorgemischter Flammen erfolgt nun analog zur Vormischverbrennung. Oberhalb einer kritischen Karlovitz-Zahl kann durch die sehr hohen Scherraten der Kolmogorov-Wirbel lokale Extinktion einzelner Flamelets auftreten, eventuell gefolgt von lokaler Vormischung der Reaktionspartner und Wiederzündungen nach Abklingen der hohen Scherraten. Eine weitere Steigerung der Turbulenzintensität führt zu einer Verdickung der durch intensive turbulente Mischung gekennzeichneten Flammenfront und folglich zur Zunahme des lokalen Vormischungsgrades, wodurch die nicht-vorgemischte Verbrennung einen vorgemischten Charakter erhält.

### 2.4.3.3 Klassifizierung turbulenter, nicht-vorgemischter Flammen nach PETERS

Da die Position der nicht-vorgemischten Flammenfront durch die Struktur des Mischungsbruchfeldes bestimmt ist und im Bereich des stöchiometrischen Mischungsbruchs liegt (vgl. Abb. 2.8 und Abb. 2.10), erfasst PETERS [139, 140] in seinem Regime-Diagramm (s. Abb. 2.13) die Wirkung turbulenter Schwankungen auf die Ausbildung lokaler Flammenfrontstrukturen ausschließlich in Form der lokalen, Favre-gemittelten, turbulenten Mischungsbruchvarianz  $\widetilde{f''^2}$  und betrachtet in erster Näherung nur Mischungsbruchschwankungen um den stöchiometrischen Mischungsbruch. Die mit Hilfe der Flammenfrontdicke im Mischungsbruchraum  $(\Delta f)_F$  (s. Gl. (2.81)) entdimensionierte Mischungsbruchvarianz  $\widetilde{f''^2}$  trägt er in Abb. 2.13 auf der Ordinate auf.

Um den Einfluss eines reaktionskinetischen Zeitmaßes auf die turbulente, nicht-vorgemischte Verbrennung zu beschreiben, verwendet PETERS das Verhältnis aus skalarer Dissipationsrate bei Verlöschen  $\chi_V$  und lokaler, Favre-gemittelter, stöchiometrischer skalarer Dissipationsrate  $\widetilde{\chi}_{st}$  als Abszisse in Abb. 2.13. Während  $\chi_V^{-1}$  als Zeitmaß der Wärmefreisetzung interpretiert werden kann, ist  $\widetilde{\chi}_{st}^{-1}$  als lokale Mischungsgeschwindigkeit in der Fläche stöchiometrischer Mischung aufzufassen. Sobald das Mischungszeitmaß das Zeitmaß der Wärmefreisetzung unterschreitet ( $\chi_V/\widetilde{\chi}_{st} < 1$ ), tritt lokales Flammenverlöschen (“flame extinction”) auf, denn ein diffusives, laminares Flamelet kann entsprechend der Diskussion zu Abb. 2.9 unter diesen Bedingungen nicht existieren.

Vorausgesetzt, dass lokales Flammenverlöschen nicht auftritt ( $\chi_V/\widetilde{\chi}_{st} > 1$ ), unterteilt PETERS die turbulenten, nicht-vorgemischten Reaktionsstrukturen zunächst mittels einer horizontalen Geraden  $\widetilde{f''^2} = (\Delta f)_F$  in zwei Bereiche. Oberhalb dieser Geraden lassen große Mischungsbruchvarianzen  $\widetilde{f''^2} > (\Delta f)_F$  erwarten, dass eine zusammenhängende Fläche stöchiometrischen Mischungsbruchs nur noch im zeitlichen Mittel existiert, die bei zeitaufgelöster Betrachtungsweise lokal durch entsprechend brennstoffreiche oder brennstoffarme Turbulenzballen unterbrochen ist. Dementsprechend löst sich die Diffusionsflamme in Einzelstrukturen, sog. laminaire Flamelets, auf, die voneinander durch Gebiete getrennt sind, deren lokaler Mischungsbruch vom stöchiometrischen Wert hinreichend stark abweicht. PETERS bezeichnet diesen Bereich als Flamelet-Regime (“separated flamelets”). Intensive Mischung bzw. teilweise Vormischung kann derart kleine Mischungsbruchvarianzen  $\widetilde{f''^2} < (\Delta f)_F$  bedingen, sodass diese zum Zerfall der Reaktionsstruktur in einzelne Flamelets nicht ausreichen. Die Diffusionszonen der Flamme sind in diesem Regime der miteinander verbundenen Flammenzonen (“connected flame zones”) nicht unterbrochen. Eine weitere Unterteilung kann durch die Gerade  $\widetilde{f''^2}/(\Delta f)_R = 1$  erfolgen, die nach (2.82) in Abb. 2.13 die Steigung  $-1/4$  besitzt und ausdrückt, dass Mischungsbruchvarianzen der Dicke der Reaktionszone  $(\Delta f)_R$  entsprechen. Unterhalb dieser Geraden sind Mischungsbruchschwankungen kleiner als die Dicke der Reaktionszone, wodurch gewährleistet ist, dass die Reaktionszonen zusammenhängen, weshalb dieser Bereich die Bezeichnung zusammenhängende Reaktionszonen (“connected reaction zones”) trägt.

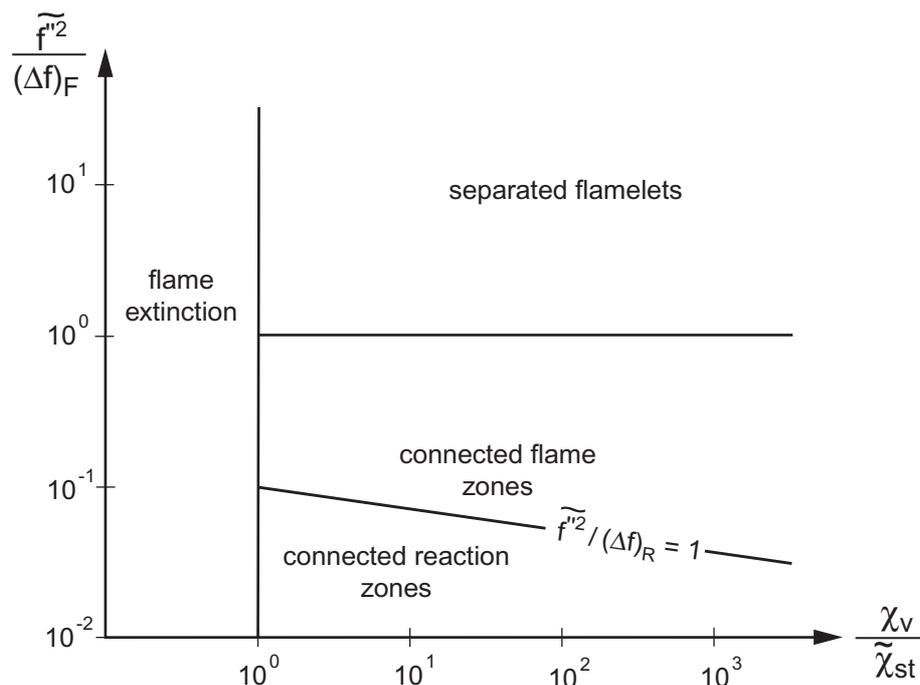


Abbildung 2.13: Regime der turbulenten, nicht-vorgemischten Verbrennung (nach PETERS [139, 140])

## 2.4.4 Effekte der Wechselwirkung von Verbrennung, Rotation und Turbulenz

Die Wechselwirkungen zwischen Verbrennung, Rotation und Turbulenz bergen einerseits vielfältige Möglichkeiten im Hinblick auf den technischen Nutzen nicht-vorgemischter, turbulenter, verdrallter Flammen, andererseits aber nicht minder vielfältige, größtenteils ungeklärte Fragen bezüglich der auftretenden Phänomene sowie der komplexen Verflechtung grundlegender Prozesse, die im Folgenden umrissen werden.

### 2.4.4.1 Wechselseitige Beeinflussung von Verbrennung und Turbulenz

Obige Diskussion der Möglichkeiten einer Klassifizierung turbulenter Reaktionsstrukturen (s. Kap. 2.4.3) weist bereits die wesentlichen Einflussfaktoren turbulenter Mischungs- und Transportprozesse auf die chemischen Reaktionen der Verbrennung und damit die Flammenfront auf. Hierbei zeigt sich, dass bereits kleine turbulente Schwankungen zu einer Formänderung der Flammenfrontoberfläche führen können und damit, in Analogie zur Krümmung einer laminaren Flammenfront (s. Kap. 2.4.2.1), entscheidenden Einfluss auf makroskopische Größen wie z.B. die turbulente Flammgeschwindigkeit nehmen.

Es existiert aber nicht nur eine Wirkung der Turbulenz auf die Verbrennung, in umgekehrter Wirkrichtung kann die Verbrennung auch einen wesentlichen Einfluss auf die Struktur der Turbulenz ausüben. So resultiert eine Modifikation des Turbulenzfeldes schon alleine aus der Beschleunigung der Strömung über die Flammenfront hinweg, die sowohl zu einer Abschwächung der Turbulenz führen kann (Laminarisierung) oder zu

deren Verstärkung (Flammenerzeugte Turbulenz) [147]. Die “Flammenerzeugte Turbulenz” wurde schon zu Beginn der 50er Jahre des 20. Jahrhunderts von KARLOVITZ [85] bzw. SCURLOCK [175] entdeckt und interpretiert. KARLOVITZ stellte in experimentellen Untersuchungen deutlich höhere turbulente Flammengeschwindigkeiten fest, als er auf Basis der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit unter Annahme groballiger Turbulenz berechnet hatte. Er führte dies auf eine höhere, rauchgasseitig effektiv wirkende Turbulenz zurück, welche durch den Expansionsprozess des reagierenden Frischgases hervorgerufen sei. In Übereinstimmung mit SCURLOCK deutet KARLOVITZ daraus eine zusätzliche turbulente Schwankungsgeschwindigkeit, jedoch entwickeln die beiden Autoren unterschiedliche Ansätze zur Erklärung der Wirkungsweise des Expansionsprozesses auf die Turbulenzproduktion [97]. POINSOT & VEYNANTE [147] beschreiben die “Flammenerzeugte Turbulenz” als Beeinflussung des Rotations-Feldes durch Geschwindigkeits- und Dichteänderung auf Grund der Flamme anhand einer Transportgleichung für den Rotations-Vektor.

#### 2.4.4.2 Untersuchungen zur Verbrennung in rotationsbehafteten Strömungen

Die Flammenausbreitung in turbulenten Strömungen wird von vielen Autoren [1, 2, 27, 36, 107, 178, 224] anhand der Änderung der turbulenten Flammengeschwindigkeit in stationären Flammen, Explosionsbehältern oder Stoßwellenrohren in Abhängigkeit der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen, der Flammenfrontkrümmung, der Gemischzusammensetzungen und auch verschiedener Brennstoffe untersucht. Die Einflüsse der Interaktion der Flammenfront mit Wirbelstrukturen können hierbei meist nicht behandelt werden.

Untersuchungen zur Wechselwirkung zwischen einzelnen Wirbeln bzw. Wirbelpaaren und meist vorgemischten, ebenen sowie gekrümmten Flammenfronten [32, 109, 115, 130] zeigen anschaulich die Effekte dieser Interaktion auf, behandeln aber meist auf die Flammenfront senkrecht auftreffende Wirbel, stellen also eine ein-, höchstens zweidimensionale Betrachtung dar.

In seiner Literaturstudie befasst sich ISHIZUKA [79] mit der Ausbreitung einer Flammenfront entlang einer Wirbelachse, wobei er ausgehend von experimentellen Ergebnissen aus der Literatur sowohl eingeschlossene Drallströmungen in feststehenden Rohren, freie Wirbelringe bzw. geradlinige freie Wirbelröhren sowie Wirbelströmungen in rotierenden Rohren behandelt. Dabei hebt er hervor, dass die Geschwindigkeit der Ausbreitung einer Flammenfront entlang einer Wirbelachse im Gegensatz zur ebenen und sphärischen Flammenausbreitung, nicht proportional zur laminaren Brenngeschwindigkeit, sondern vielmehr eine Funktion der maximalen Tangentialgeschwindigkeit der rotationsbehafteten Strömung ist. Die zahlreichen Erklärungen dieses Phänomens fasst er in vier Mechanismen zusammen:

- Dem “flame kernel deformation”-Mechanismus zufolge resultiert die Erhöhung der Flammengeschwindigkeit aus der Deformation des Flammenkerns im Zentrifugalfeld.
- Der Mechanismus des “vortex bursting” beschreibt den diskontinuierlichen Zusammenbruch des Wirbels, ähnlich dem Vortex Breakdown im isothermen Fall, wobei der positive axiale Druckgradient durch den Dichtegradienten zwischen Frischgas und verbranntem Gas verstärkt wird.

- Nach dem “baroclinic push”-Mechanismus entstehen auf Grund des baroclinen Drehmomentes (Vektorprodukt aus Dichte- und Druckgradient) azimuthale Wirbel an der Grenze zwischen Flammenfront und unverbranntem Frischgemisch, welche eine axiale Geschwindigkeit in Richtung des unverbrannten Frischgemischs induzieren.
- Die reaktionsbedingte Querschnittserweiterung eines Wirbel-Filaments führt auf Grund der Drehimpulserhaltung zur Reduktion der Tangentialgeschwindigkeit und damit zur Produktion negativer azimuthaler Wirbelstärke. Diese induziert eine axiale Geschwindigkeit in Richtung des unverbrannten Frischgemischs und verleiht dem “azimuthal vorticity evolution”-Mechanismus seinen Namen.

Das Zusammenwirken der von ISHIZUKA zusammengefassten Mechanismen beschreibt KIESEWETTER [90] in seiner numerischen Arbeit über das verbrennungsinduzierte Wirbelaufplatzen, indem er den Einfluss der verschiedenen Mechanismen auf die Aufweitung des Wirbelkerns und die damit einhergehende Beschleunigung der Flamme diskutiert: Ausgehend von einer zur Wirbelröhre senkrecht angeordneten ebenen Flammenfront und der Annahme, dass der radiale Verlauf der Tangentialgeschwindigkeit als konstant entlang der Achse der Wirbelröhre ist, entstehen bei erstem Auftreten des baroclinen Drehmomentes (“baroclinic push”-Mechanismus) azimuthale Wirbel, die eine axiale Geschwindigkeit in Richtung des unverbrannten Frischgemischs induzieren (Abb. 2.14 a)). Diese wird zusätzlich durch den Druck- und Dichteunterschied (“vortex bursting”-Mechanismus) über die Flammenfront verstärkt. Der durch die induzierte Axialgeschwindigkeit verursachte Massenfluss weitet den Wirbelkern auf (Abb. 2.14 b)). Infolgedessen steigt einerseits - analog dem isothermen Vortex Breakdown (s. Kap. 2.3.6) - der Druck auf der Achse (“vortex bursting”-Mechanismus), andererseits entstehen azimuthale Wirbel vor der Flammenfront (“azimuthal vorticity evolution”-Mechanismus), wodurch zusätzlich axiale Geschwindigkeit induziert wird. Da sich die Richtungen des Druckgradienten und des Dichtegradienten während der Aufweitung des Wirbels angleichen, sinkt der Einfluss des baroclinen Drehmomentes (Abb. 2.14 c)).

ISHIZUKAs [79] Reflexion der Ergebnisse direkter numerischer Untersuchungen lassen eine schnelle Flammenausbreitung entlang der Achse von Wirbelröhren der turbulenten Feinstruktur eher unwahrscheinlich erscheinen, da Längenmaße kohärenter, fein-skaliger Wirbel meist kleiner als die laminare Flammendicke sind und somit das Eindringen einer Flammenfront in diese nicht möglich sei. So ist die schnelle Flammenausbreitung entlang der Wirbelachse lediglich in Wirbeln, deren Längenmaß das Kolmogorov’sche Längenmaß übersteigt, zu erwarten.

Zusammenfassend bleibt festzuhalten, dass die gegenseitige Beeinflussung von Rotation und Verbrennung vor allem auf der Wirkung von Kräften, die aus der Rotationsbewegung resultieren, auf ein durch Dichtegradienten (Dichteunterschiede zwischen Volumina kalten Frischgemischs und heißen, verbrannten Gases) gekennzeichnetes Fluid beruht, sowie auf hieraus resultierenden, sekundären Effekten.

#### 2.4.4.3 Phänomenologie der Verbrennung in technischen Drallströmungen

Je nach Stärke der Verdrallung einer der Verbrennung aufgeprägten Rotationsbewegung kann diese unterschiedliche Auswirkungen auf die Eigenschaften der Verbrennung haben. In sog. “fire-whirls” oder “pool-flames” [13, 45] führen die aus einer schwach verdrallten Rotationsbewegung resultierenden Zentrifugalkräfte zur Abschwächung von

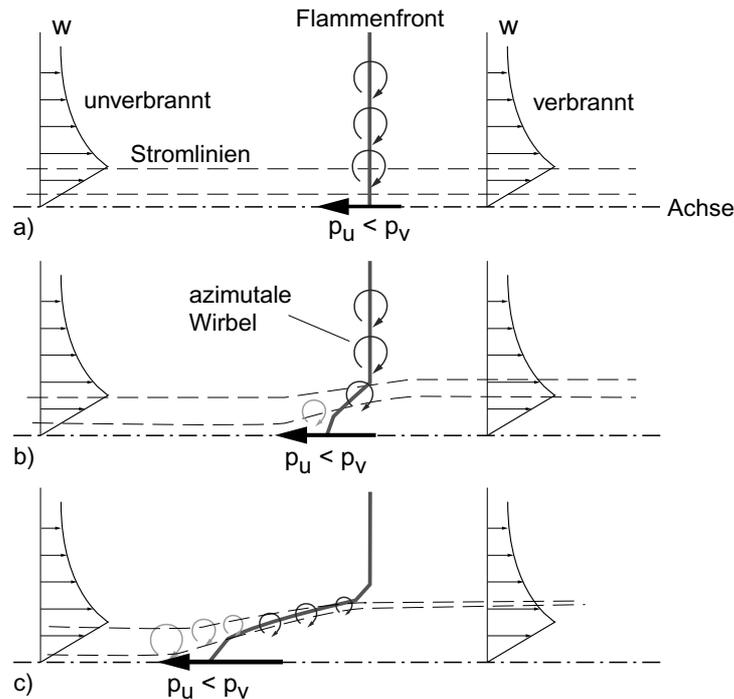


Abbildung 2.14: Überlagerung der Mechanismen des verbrennungsinduzierten Wirbelaufplatzens (nach KIESEWETTER [90])

Mischung und Entrainment und damit zu einer Vergrößerung der Flammenlänge. Demgegenüber lässt sich durch hinreichend starke Verdrallung und damit gewährleisteter Ausbildung einer ausgeprägten, inneren Rezirkulationszone (s. Kap. 2.3.6) ein drallstabilisiertes Verbrennungssystem (s. Kap. 3.2) realisieren. Derartige Verbrennungssysteme nutzt man in technischen Verbrennungsanlagen zur aktiven Kontrolle von Länge, Form, Stabilität und Intensität der Flamme. [56]

**Strömungsformen in turbulenten, nicht-vorgemischten Drallflammen:** Bei der technischen Realisierung turbulenter, verdrallter, nicht-vorgemischter Flammen lassen sich, abhängig von der Art der Brennstoffzuführung, zwei prinzipiell verschiedene Flammentypen gemäß einer Konvention des IFRF (International Flame Research Foundation) [99, 102] voneinander abgrenzen (s. Abb. 2.15). Eine Typ-I Drallflamme bildet sich aus, wenn der Brennstoff axial und mit großem Austrittsimpuls eingedüst wird, sodass er die Rezirkulationszone durchstoßen kann und sich ein ringförmiges, inneres Rezirkulationsgebiet ausbildet. Daraus resultiert eine für Drallflammen relativ langsame Vermischung von Luft und Brennstoff und die lang gestreckte, schlanke Form dieser Flamme, die eher den Charakter einer Axialstrahlflamme aufweist. Wird der Brennstoff radial oder unter einem bestimmten Winkel zur Achse mit niedrigem Austrittsimpuls eingedüst, sodass er die innere Rezirkulationszone nicht zu durchstoßen vermag, bildet sich eine Typ-II Drallflamme aus. Da hierbei der Brennstoff in die Scherzone zwischen innerem Rezirkulationswirbel und Luftstrahl eingebracht wird, woraus eine schnelle Brennstoff/Luft-Mischung und hohe Reaktionsdichten resultieren, besitzt diese Flamme eine kurze und buschige Form. Durch Variation des Impulsverhältnisses von Brennstoff und Luft im Falle axialer Brennstoffeindüsung können beide Flammentypen erzeugt und ineinander überführt werden [102].

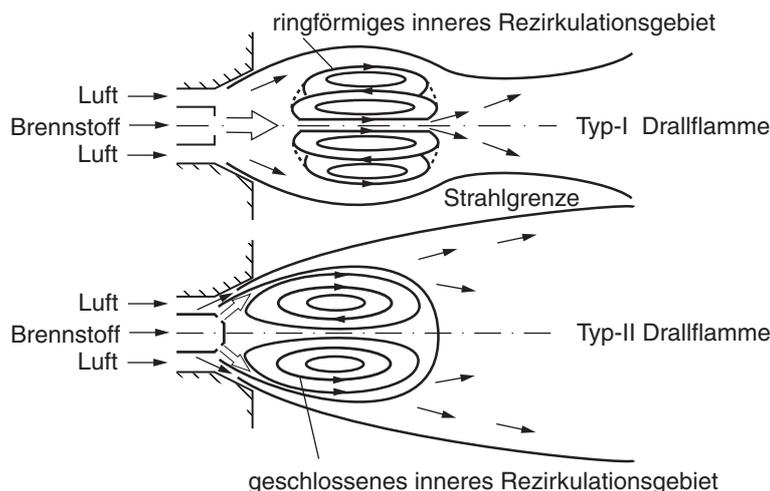


Abbildung 2.15: Schematische Strömungsfelder der Typ-I und Typ-II Drallflamme

**Einfluss der Verbrennung auf Reynolds-Zahl, Impulsströme und Drallzahl:**

Bei gleichen Turbulenzgrößen, d.h. konstanter charakteristischer Geschwindigkeit und konstantem Längenmaß, nimmt die Reynolds-Zahl (2.37) mit steigender Temperatur auf Grund der steigenden kinematischen Viskosität ( $\nu \propto T^{1.7}$ ) ab. [147]

Eine direkte Änderung der Impulsströme, und damit der Drallzahl, durch den bei einer der turbulenten, verdrallten Strömung überlagerten Verbrennung zusätzlich dem System zugeführten Brennstoffimpulsstrom ist in technischen Verbrennungssystemen meist vernachlässigbar. Der hauptsächliche Einfluss der Verbrennung liegt hier in der mit der Wärmefreisetzung bzw. Temperaturerhöhung einhergehenden Abnahme der Fluidichte und der daraus resultierenden thermischen Expansion des Fluids. Durch diese wird, unter Berücksichtigung der Bilanz der Gesamtmasse (2.1), in einem eingeschlossenen System, die Strömung in axialer Richtung beschleunigt. Gemäß (2.65) steigt der Axialimpulsstrom  $\dot{I}$  mit steigender axialer Geschwindigkeit, d.h. steigender Temperatur an, während der Drehimpulsstrom  $\dot{D}$  nach (2.64) unbeeinflusst bleibt. Folglich nimmt die effektive Drallzahl bei überlagerter Verbrennung gegenüber dem isothermen Fall (2.67) ab:

$$S_{0,th,effektiv} = S_{0,th,isotherm} \cdot \frac{\dot{I}_{isotherm}}{\dot{I}_{reaktiv}}, \quad (2.90)$$

sodass mit steigender Temperatur in der Regel die Größe des von der inneren Rezirkulationszone rezirkulierten Massenstromes abnimmt und es bei Unterschreiten der kritischen Drallzahl zum Zusammenbruch der inneren Rezirkulationszone kommen kann [212, 213]. Isotherme und reaktionsbehaftete, turbulente, verdrallte Strömungen sind bei gleichen effektiven, theoretischen Drallzahlen näherungsweise vergleichbar, eine strömungsmechanische Ähnlichkeit ist aber wegen der unterschiedlichen Verteilung der Impulsstromdichten, die in die integrale, effektive Drallzahl nicht eingeht, nicht gewährleistet.

**Turbulenzstruktur und -intensität:** Die Diskussion der Turbulenzstruktur einer verdrallten Strömung - sowohl mit, als auch ohne überlagerter Verbrennung - birgt die Schwierigkeit der eindeutigen Bestimmung von Turbulenzgrößen, da in diesen Strömungen häufig instationäre, periodische Strukturen z.B. Precessing Vortex Cores (PVC, s.u.) auftreten. Diese Strukturen können bei Messungen scheinbar turbulente, von der

eigentlichen Turbulenz überlagerte Schwankungen vorspiegeln, woraus mitunter große Fehler in der Bestimmung der Turbulenzgrößen resultieren. Experimentellen Untersuchungen zufolge können im Vergleich zu isothermen Strömungen im reaktiven Fall sowohl höhere [56] als auch niedrigere [212] Turbulenzintensitäten festgestellt werden. VANOVERBERGHE et al. [204] analysieren die Turbulenzstruktur abgehobener Drallflammen mit Hilfe von Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen der Geschwindigkeitskomponenten aus LDA-Messungen (Laser Doppler Anemometrie). Diese ermöglichen die Erfassung sowohl großskaliger Strukturen (periodische, dreidimensionale Effekte: PVC oder Flattern der Flamme) als auch die diesen überlagerten feinskaligen Strukturen (feinskalige Turbulenz) und erlauben deren Unterscheidung anhand der Modalität der ermittelten Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen. Dieser Ansatz der sog. "Breitband-Turbulenz" veranschaulicht die Komplexität der Überlagerung von Strukturen unterschiedlicher Skalen in reaktiven Drallströmungen, deren jeweilige, entkoppelten Beiträge zur Turbulenzstruktur bislang nicht hinreichend erklärt werden können.

**"Counter-Gradient"-Diffusion:** Ein Phänomen, das in reaktiven, turbulenten Strömungen auftritt ist die sog. "Counter-Gradient"-Diffusion. Demnach kann es zu einem Fluss turbulenter Transportströme entgegen den durch die Wirbelviskositätshypothese nach Boussinesq (s. Kap. 4.1.2.3) beschriebenen Gradienten kommen. LIBBY & BRAY [105] beschreiben die "Counter-Gradient"-Diffusion als Folge der separierenden Wirkung des bei hohen Verbrennungsdichten und damit hohen Dichteschwankungen auftretenden mittleren Druckgradienten auf kalte Gemischballen hoher Dichte und heiße Abgasballen niedriger Dichte; VEYNANTE et al. [207] hingegen durch die reaktionsbedingte Aufweitung der Flamme. In einer verdrallten, nicht-vorgemischten Flamme beobachteten TAKAGI et al. [195] die "Counter-Gradient"-Diffusion von Wärme, die sie im unverdrallten Fall nicht feststellen konnten und erklärten sie durch die in rotierenden, reaktiven Strömungen vorherrschende, zyklonartige Sichtwirkung des mittleren Druckgradienten auf Turbulenzballen unterschiedlicher Temperatur und Dichte.

**Rayleigh-Kriterium und Verbrennung:** Im Gegensatz zur isothermen, verdrallten Strömung existiert im reaktiven Fall mitunter ein ausgeprägter radialer Dichtegradient. Dieser muss bei der Analyse des eigendämpfenden bzw. selbstverstärkenden Verhaltens turbulenter, rotierender, reaktiver Strömungen anhand des Rayleigh-Kriteriums (s. Kap. 2.3.7) berücksichtigt werden. Dieses wiederum stellt sich je nach Kombination der Richtungen des Dichte- und Zirkulationsgradienten ein.

**Precessing Vortex Cores in Drallflammen:** In Drallströmungen unter isothermen Bedingungen auftretende Precessing Vortex Cores (PVC, s. Kap. 2.3.7) können durch vorgemischte Verbrennung intensiviert und durch diffusive Verbrennung abgeschwächt werden [55, 191]. In der Feuerungstechnik sind PVC wegen der durch sie verstärkten turbulenten Mischung mitunter erwünscht, aber dennoch mit Vorsicht zu genießen, da sie unerwünschte Brennkammerschwingungen verursachen können. Neuere Untersuchungen befassen sich mit den Wechselwirkungen zwischen PVC und reaktiven Drallströmungen [189, 193].

## Kapitel 3

# Stabilität turbulenter Drallflammen

### 3.1 Definition der Flammenstabilität

Über die Definition des Begriffs “Flammenstabilität” vertreten Autoren vieler Arbeiten zu diesem Thema unterschiedliche Auffassungen. Dies mag einerseits in der Subjektivität der Wahrnehmung des Beginns eines instabilen Brennverhaltens liegen, andererseits in der Relevanz der Stärke und der Auswirkung der Instabilität im jeweiligen technischen Anwendungsfall; sicherlich jedoch in der Verwendung dieses Begriffs für unterschiedliche, z.T. miteinander gekoppelte chemisch-physikalische Prozesse und damit einhergehende makroskopische Erscheinungen.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit zur Stabilität turbulenter, nicht-vorgemischter Drallflammen sind die Begriffe “Flammenstabilität” bzw. “Stabilität” im Sinne von Flammen zu verwenden, die unmittelbar am Brenner anliegen und - abgesehen von turbulenzbedingten Lageänderungen ihrer Reaktionszone - pulsationsfrei brennen. Grundlegende Voraussetzung für die Stabilisierung einer nicht-vorgemischten Flamme ist die Existenz einer Zone im Strömungsfeld, in der:

- eine molekular feinvermischte und zündfähige Mischung der Edukte der chemischen Verbrennungsreaktionen vorhanden ist,
- die Reaktionspartner bis auf die Zündtemperatur aufgeheizt werden und
- die durch die Strömung bestimmte Verweilzeit der Reaktionspartner größer bzw. gleich der durch den lokal vorherrschenden thermodynamischen Zustand bestimmten Reaktionszeit ist.

Das Vorliegen dieser notwendigen Bedingungen wird im allgemeinen unter dem Begriff “Zündstabilität” zusammengefasst, der aber insbesondere gegen den Begriff der periodischen Verbrennungsinstabilität abzugrenzen ist. So weisen drall- oder staukörperstabilisierte Flammen als Charakteristikum das Verlassen des zündstabilen Betriebsbereiches bei Überschreiten einer Grenzluftzahl auf, während das Auftreten periodischer Verbrennungsinstabilitäten ausgehend von brennstoffarmen Bedingungen bei Unterschreiten einer Grenzluftzahl beobachtet wird. Inwieweit sich Effekte von Zündstabilisierung und periodischen Verbrennungsinstabilitäten wechselseitig beeinflussen, ist bislang nicht geschlossen geklärt. Einerseits kann eine unzureichende Zündstabilität als Anregungsmechanismus periodischer Verbrennungsinstabilitäten betrachtet werden, andererseits ist in einigen Systemen eine ausreichende Zündstabilität die Voraussetzung, welche das Auftreten periodischer Verbrennungsinstabilitäten ermöglicht. [11]

Da sich die vorliegende Arbeit mit Prozessen der Zünstablisierung in nicht-vorgemischten Drallflammen beschäftigt, wird der Begriff "Stabilität" im Folgenden in diesem Sinne gebraucht.

## 3.2 Flammenstabilisierung durch Drall

Unter vielen technisch erprobten Stabilisierungsmethoden [52] hat sich die Erzeugung einer drallinduzierten, zentralen Rezirkulationszone in Brennernähe als wirksamste und anpassungsfähigste Methode zur Stabilisierung von Flammen bei Strömungsgeschwindigkeiten, die über den Werten der laminaren oder turbulenten Brenngeschwindigkeit liegen, herausgestellt. Die sich brennernahe, zwischen der zentralen Rezirkulationszone und der diese umgebenden Vorwärtsströmung ausbildende Stabilisierungszone (s. Abb. 3.1), ist durch niedrige mittlere Strömungsgeschwindigkeiten und hohe, Mischungsfördernde Turbulenz gekennzeichnet. Hierbei ermöglichen die niedrigen mittleren Strömungsgeschwindigkeiten große Verweilzeiten der chemischen Reaktionspartner in der Stabilisierungszone, während die hohe, Mischungsfördernde Turbulenz in einer Erhöhung der lokalen, turbulenten Flammengeschwindigkeit (s. Kap. 2.4.3) resultiert. Der durch die Rückströmung verursachte Transport von Energie aus dem stromab liegenden Ende der Hauptreaktionszone an ihren stromauf liegenden Anfang, wodurch das anströmende Frischgas bis auf Zündtemperatur aufgeheizt (Wärmetransport) und chemisch aktive Spezies in der Zündzone bereit gestellt werden (Stofftransport), stellt ein weiteres wesentliches Merkmal des Stabilisierungsmechanismus dar. Dieser Energietransport ist aufs Engste an die turbulenten Austauschvorgänge zwischen Hauptreaktionszone und Rückströmung gekoppelt. Speziell in nicht-vorgemischten Drallflammen ist die Art der Brennstoffzufuhr ein wichtiger Parameter, da hierdurch die Brennstoffverteilung im System bestimmt ist. Durch geeignete Brennstoffzufuhr können in der Stabilisierungszone nahe-stöchiometrische Gemischzusammensetzungen erreicht werden, um somit die bei diesen Bedingungen maximale laminare Flammengeschwindigkeit (s. Kap. 2.4.2) und damit maximale turbulente Flammengeschwindigkeit (s. z.B. BRUTSCHER [27]) auszunutzen [74, 127, 154, 174].

Da der Zündmechanismus durch aerodynamische Transportvorgänge der turbulenten Strömung gesteuert wird und das Strömungs- und Mischungsfeld als nahezu unabhängig vom Durchsatz betrachtet werden können [67, 144, 145], sind technische, nicht-

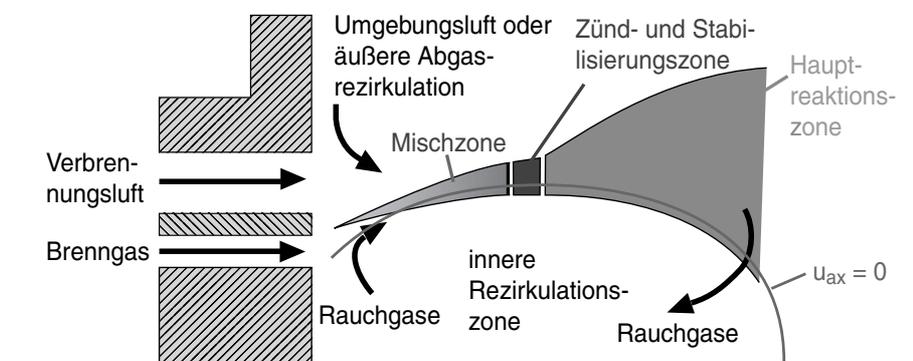


Abbildung 3.1: Flammenstabilisierung durch Drall

vorgemischte Drallflammen über einen weiten Lastregelbereich einsetzbar [100]. Zwar ist das Strömungsfeld und damit die Form und Ausdehnung der zentralen Rezirkulationszone von der Lage der Reaktionszone (Wärmefreisetzung) bestimmt [144], doch bleiben das Reaktions- und Temperaturfeld über einen weiten Lastregelbereich konstant [123]. Dennoch ist der stabile Betriebsbereich eines Verbrennungssystems beschränkt. Seine Grenzen können zum einen durch Erhöhung der thermischen Leistung (Gesamtdurchsatz) bei konstanter globaler Stöchiometrie (Luftzahl) überschritten werden, zum anderen durch Variation der Luftzahl bei konstantem Durchsatz. Unter der Vorgabe einer konstanten globalen Stöchiometrie führt eine Durchsatzerhöhung zum Verlöschen, wenn - wegen sinkender Verweilzeiten - der limitierende Einfluss des Zeitmaßes der Wärmefreisetzung zum Tragen kommt [74, 123].

### 3.3 Stabilitätsmodelle

Ein vielfach beschrittener Weg bei der Untersuchung der Stabilität von Drallflammen ist die Entwicklung von Stabilitätsmodellen. Hierbei werden die Stabilität begrenzende, lokale Größen auf globale, das Verbrennungssystem beschreibende Größen d.h. dessen Randbedingungen zurückgeführt, um vereinfachte Kriterien abzuleiten, mittels derer die Stabilitätsgrenzen für das jeweilige Verbrennungssystem vorhergesagt werden können.

#### 3.3.1 Modelle auf Basis der kritischen Peclet-Zahl

LEWIS & VON ELBE [104] haben für laminare Vormischflammen gezeigt, dass eine Flammenstabilisierung dann gesichert ist, sobald in einem Punkt Strömungsgeschwindigkeit  $u$  und laminare Flammgeschwindigkeit  $u_{F,l}$  gleich groß und entgegengesetzt gerichtet sind:

$$u = u_{F,l} . \quad (3.1)$$

MARKSTEIN & POLANYI [116] betrachten den Löschabstand an der Brennerwand

$$d_l \propto \frac{a}{u_{F,l}} \quad (3.2)$$

als den die Stabilität begrenzenden Einflussfaktor und leiten daraus für laminare Vormischflammen unter Verwendung des Grenzgeschwindigkeitsgradienten

$$g \propto \frac{u_0}{d_0} \quad (3.3)$$

eine Ähnlichkeitsbedingung für die Stabilität gegen Abheben her:

$$\frac{u_0 \cdot d_0}{a} \propto \left( \frac{u_{F,l} \cdot d_0}{a} \right)^2 . \quad (3.4)$$

Mit der Definition der Peclet-Zahl

$$Pe = Re \cdot Pr = \frac{u \cdot d}{a} \quad (3.5)$$

ergibt sich:

$$Pe_u \propto (Pe_{u_{F,l,max}})^2, \text{ bzw. } Pe_u = c \cdot (Pe_{u_{F,l,max}})^n, \quad (3.6)$$

worin  $Pe_u = u_0 \cdot d_0/a$  mit der Gemischgeschwindigkeit an der Abhebegrenze  $u_0$ , dem Brennerdurchmesser  $d_0$  und der Temperaturleitfähigkeit  $a$  und  $Pe_{u_{F,l,max}} = u_{F,l,max} \cdot d_0/a$  mit der maximalen Flammengeschwindigkeit des jeweiligen Brennstoffs  $u_{F,l,max}$  gebildet ist und  $c$  bzw.  $n$  Konstanten sind. Dieses Stabilitätskriterium für laminare Flammen wurde erstmals von MINX [127] auf staukörperstabilisierte turbulente Flammen übertragen und von RAWE [154] für frei brennende Drallflammen erweitert. Eingehendere Diskussionen der Stabilitätsmodelle auf Basis der kritischen Peclet-Zahl und weitere Ableitungen ähnlicher Modelle für frei brennende und eingeschlossene Drallflammen sind z.B. bei HILLEMANN [67], HOFFMANN [74] oder SCHMITTEL [174] zu finden. Ihr Manko ist jedoch die Notwendigkeit, die Konstanten  $c$  und  $n$ , die von der jeweiligen Geometrie abhängig sind, mittels aufwändiger experimenteller Untersuchungen zu bestimmen, bevor eines dieser Modelle angewendet werden kann.

### 3.3.2 Reaktor-(Netzwerk-)Modelle

Ausgehend von der Annahme, dass die Stabilisierung hochturbulenter Drallflammen in einem homogenen Gebiet stattfindet, in dem Mischungszustände herrschen, die dem Grenzfall des idealen Rührkesselreaktors entsprechen, beschreibt HILLEMANN [67] ein Stabilitätsmodell, das im Gegensatz zu den Stabilitätsmodellen auf der Basis der kritischen Peclet-Zahl die Reaktionskinetik als den die Stabilität begrenzenden Faktor verwendet. Auch SCHEFER et al. [167] entwickeln ein Stabilitätsmodell für staukörperstabilisierte, nicht-vorgemischte Drallflammen auf Basis nahezu mischungsbruchgradientenfreier Rückströmzonen. Die Annahme einer homogenen Stabilisierungszone bleibt speziell im Falle nicht-vorgemischter Systeme kritisch zu hinterfragen, da hierin erhebliche Gradienten des Strömungs- und Temperaturfeldes vor allem aber des Mischungsfeldes vorherrschen.

Eine genauere Methode zur analytischen Beschreibung realer Verbrennungssysteme ist durch deren Zerlegung in ein mehr oder weniger kompliziertes Netzwerk aus einzelnen Modellreaktoren gegeben. Hierbei werden hochturbulente Strömungsbereiche mit starker Rückvermischung durch ideale Rührkesselreaktoren (PSR: Perfectly Stirred Reactor), Strömungsbereiche mit geringer Rückvermischung durch Kolbenstromreaktoren (PFR: Plug Flow Reactor) und der turbulente Queraustausch durch geeignete Verschaltung der einzelnen Reaktoren simuliert (s. Abb. 3.2) [188, 200]. Wegen des relativ geringen numerischen Aufwandes können detaillierte chemische Reaktionskinetiken verwendet werden. Aussagen zur Stabilität resultieren aus dem Vergleich von Zeitmaß der Wärmefreisetzung mit der Verweilzeit in der Zündzone. Dennoch werden durch die Verwendung von PSR-Reaktoren für Gebiete mit starker Rückvermischung speziell im Falle nicht-vorgemischter Drallflammen vorherrschende Konzentrationsgradienten vernachlässigt. Schwierig gestaltet sich auch die Abschätzung der Reaktorvolumina, die einen signifikanten Modellparameter darstellen.

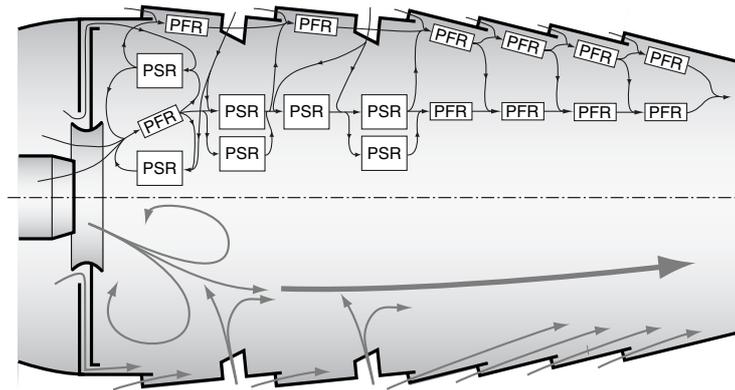


Abbildung 3.2: Reaktornetzwerk zur Beschreibung einer Gasturbinenbrennkammer (aus TILSTON et al. [200])

### 3.3.3 Modelle auf der Basis des Energieaustausches

Eine Untersuchung der Flammenstabilität kann nach einem Vorschlag von SPALDING [185] durch Bilanzierung der turbulenten Austauschströme zwischen einzelnen, als diskrete Volumina definierte Flammenzonen (s. Abb. 3.3) erfolgen, mit dem Ziel, eine Aussage darüber zu treffen, ob die ausgetauschten Energieströme ausreichen, das Frischgasgemisch auf Zündbedingungen aufzuheizen. Diesem Modell, das erneut von BAFUWA & MACCALLUM [9] und HILLEMANN [67] aufgegriffen wurde, liegt einerseits die Annahme einer vollständigen Vermischung von Brennstoff und Verbrennungsluft bei Eintritt in das Reaktionsvolumen zu Grunde, andererseits die Voraussetzung, dass in der Rückströmzone keine Reaktion stattfindet. Es stellt eine Beschreibung der Flammenstabilisierung dar, die dem Mechanismus der drallinduzierten Flammenstabilisierung (s. Kap. 3.2) ähnlich ist, und ermöglicht die Berücksichtigung der Einmischung von Umgebungsmedium im Falle nicht eingeschlossener Flammen, sowie die Rückführung heißer Abgase im Falle eingeschlossener Flammen. Festzulegende Modellparameter sind die Volumina der Flammenzonen, die turbulenten Austauschströme und die Temperatur der rezirkulierten Gase; hierin liegen die Schwierigkeiten bei der Anwendung dieses Modells.

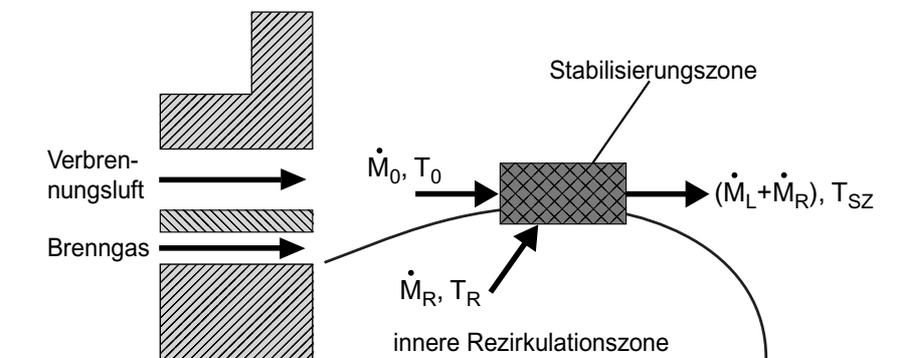


Abbildung 3.3: Bilanzierung der ausgetauschten Energieströme

### 3.3.4 Grenzen der Stabilitätsmodelle

Oben skizzierte Stabilitätsmodelle auf Basis der kritischen Peclet-Zahl, die Reaktor-(Netzwerk)-Modelle, sowie die Modelle auf Basis des Energieaustausch besitzen “integralen” Charakter, da sie die räumliche Verteilung der eingehenden Größen nicht bzw. unzureichend berücksichtigen und somit keine quantitativen Aussagen getroffen werden können. Dies ist nur durch meist aufwändige Experimente und nachfolgende Anpassung der Stabilitätsmodelle möglich. Auf dieser Basis bieten die Stabilitätsmodelle jedoch die Möglichkeit Aussagen für geometrisch ähnliche Verbrennungssysteme zu formulieren.

---

## Kapitel 4

# Numerische Modellierung reagierender, turbulenter Drallströmungen

Aufbauend auf der mathematischen Beschreibung turbulenter Drallflammen in Kap. 2 behandelt die “numerische Modellierung reaktiver, turbulenter Drallströmungen” ihre Simulation mittels CFD-Methoden (CFD: *Computational-Fluid-Dynamics*). Nach einführer Diskussion gängiger Vorgehensweisen zur Simulation isothermer Strömungen in Kap. 4.1 und reaktiver Strömungen in Kap. 4.2, wird das im Rahmen dieser Arbeit weiterentwickelte turbulente Reaktionsmodell in Kap. 4.3 und die diesem zu Grunde liegende chemische Reaktionskinetik in Kap. 4.4 vorgestellt.

### 4.1 Modellierung turbulenter, isothermer Drallströmungen

#### 4.1.1 Methoden zur Simulation turbulenter Strömungen

Zur Berechnung der in Kap. 2.1 eingeführten Navier-Stokes’schen Gleichungen, d.h. der Bilanzgleichungen für Gesamtmasse, Impuls und Enthalpie, welche ein turbulentes Strömungsfeld vollständig beschreiben, existieren mehrere Ansätze sowohl unterschiedlichen Abstraktionsgrades als auch numerischen Aufwandes:

##### Direkte Numerische Simulation - DNS

Eine modellfreie Lösung dieses instationären Gleichungssystems ermöglicht die Methode der direkten numerischen Simulation (DNS: *Direct Numerical Simulation*), die ohne Modellterme für die fein-skaligen Anteile der turbulenten Strömung auskommt [51]. Die Lösung einer DNS hängt hauptsächlich von der Qualität der definierten Randbedingungen ab und ist wegen der erforderlichen Auflösung aller Zeit- und Längenskalen des Systems extrem rechenintensiv. Mit wachsender Turbulenz, also steigender Reynolds-Zahl, nehmen sowohl die Gittergröße mit  $N_{\Delta x} \propto Re^{2,3/4}$  Gitterpunkten je Raumrichtung als auch die Zahl erforderlicher Zeitschritte mit  $N_{\Delta t} \propto Re^{1/2}$  zu [49]. Die Behandlung reaktiver Strömungen verkompliziert die Problemstellung der DNS, da zusätzlich die Zeitskalen der chemischen Reaktionen aufgelöst werden müssen. Ihre Anwendung beschränkt sich daher meist auf akademische Aufgabenstellungen.

## Grobstruktursimulation - LES

Motiviert durch die Existenz unterschiedlicher turbulenter Skalen, erfolgt bei der Grobstruktursimulation (LES: *Large-Eddy Simulation*) eine Unterteilung des Turbulenzspektrums auf Basis energetischer Betrachtungen. Hierzu werden die instationären Navier-Stokes'schen Gleichungen zunächst gefiltert, um eine klare Skalentrennung vornehmen zu können. Die energietragenden und damit für die instationäre Struktur der Strömung wichtigen, groß-skaligen Wirbel werden wie im Falle der DNS direkt gelöst, während die energetisch untergeordneten Beiträge der kleinsten, nahezu isotropen Wirbelklassen über ein Turbulenzmodell (SGS: *SubGrid-Scale Model* [33, 180]) geschlossen werden; die Auflösung der kleinsten Skalen entfällt somit. Die Festlegung des Übergangs von Grob- auf Feinstruktur und damit die Maschenweite des Rechengitters ist durch die Reynolds-Zahl mit  $N_{\Delta x} \propto Re^{0,4}$  von der jeweiligen Aufgabenstellung abhängig. So müssen Strömungsgebiete mit dünnen Grenzschichten und komplexer Turbulenzstruktur (Scherzonen, Wandgrenzschichten) durch ein entsprechend feines Gitter aufgelöst werden ( $N_{\Delta x} \propto Re^{1,8}$ ), was speziell in eingeschlossenen Strömungen zu sehr großen Rechengittern führen kann [62]. Vielversprechend zeichnen sich hier neuere Hybrid-Modelle ab; ein Ansatz verfolgt die zonale Aufteilung in wandferne Bereiche, für die die LES gelöst wird, und wandnahe Bereiche, in denen ein statistisches Strömungsmodell (RANS, s.u.) seine Anwendung findet, welches in Wand-Normalenrichtung lediglich eine recht grobe Gitterauflösung ( $N_{\Delta x} \propto \ln [Re]$ ) erfordert [168, 198]. Auch bei der DES (DES: *Detached-Eddy Simulation*) [122, 132, 187] erfolgt eine Kopplung der LES mit RANS-Methoden; allerdings wird hierbei die Verwendung des jeweiligen Teilmodells durch die Gitterabmessungen bestimmt [62]. Im Falle der LES reaktiver turbulenter Strömungen kann die Flammenfront wegen ihrer geringen Abmessung (s. Kap. 2.4) nicht durch das Rechengitter aufgelöst werden, weshalb für den SGS-Anteil ein turbulentes Reaktionsmodell benötigt wird. Die LES technisch, relevanter Anwendungen erfordert mitunter lange Rechenzeiten und damit einen hohen Speicherbedarf. Vor allem die Validierung der Simulationsergebnisse anhand experimentell ermittelter Daten, für die ein Vergleich zeitlich gemittelter Größen unerlässlich ist, bedingt große physikalische Rechenzeiten, um eine repräsentative statistische Mittelung der instationären Simulation zu gewährleisten. Auch Parameterstudien für komplexe, ingenieurtechnische Anwendungen mit LES-Methoden sind bislang nicht praktikabel.

## Simulation mittels statistischer Turbulenzmodellierung - RANS

Für viele ingenieurtechnische Aufgabenstellungen genügt es, die Wirkung der Turbulenz auf die mittlere Strömung zu erfassen, ohne dabei die turbulenten Fluktuationen bis ins Detail aufzulösen. So kann eine wesentliche Verringerung des numerischen Aufwandes zur Lösung der Navier-Stokes'schen Gleichungen durch die Beschränkung auf eine statistische Behandlung des turbulenten, strömungsmechanischen Problems erzielt werden. Hierzu werden die in Kap. 2.1 eingeführten Navier-Stokes'schen Gleichungen, wie in Kap. 2.3.3.1 beschrieben, lokal zeitlich gemittelt. In den resultierenden, nach Favre gemittelten Bilanzgleichungen (2.50) bis (2.54) treten ungeschlossene Terme auf, zu deren Schließung statistische Turbulenzmodelle angewendet werden, auf die in den folgenden Abschnitten näher eingegangen wird.

## 4.1.2 Statistische Turbulenzmodelle

### 4.1.2.1 Bestimmung des Reynolds'schen Spannungstensors - Hierarchie der Turbulenzmodelle

Die in den zeitlich mittleren Impulsbilanzgleichungen (2.51) auftretenden, ungeschlossenen Kovarianzen  $-\overline{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}$  (statistische Momente zweiter Ordnung; "second-moments") beschreiben den Einfluss der Turbulenz auf das Strömungsfeld und lassen sich zum sog. Reynolds'schen Spannungstensor zusammenfassen:

$$\tau_{ij,t} = -\overline{\rho} \widetilde{u_i'' u_j''}, \quad (4.1)$$

der, in Analogie zum viskosen Spannungstensor (2.3), als turbulenter Spannungstensor interpretiert werden kann und stets symmetrisch ( $\widetilde{u_i'' u_j''} = \widetilde{u_j'' u_i''}$ ) ist. So können der zeitlich mittlere laminare Spannungstensor und der Reynolds'sche Spannungstensor entsprechend ihrer linearen Überlagerung in den Impulsbilanzgleichungen zum Gesamtspannungstensor gemäß  $\tau_{ij} = \overline{\tau_{ij,l}} + \tau_{ij,t}$  zusammengefasst werden. Die Nebendiagonalelemente des Reynolds'schen Spannungstensors ( $i \neq j$ ) werden als Reynolds'sche Schubspannungen, seine Diagonalelemente ( $i = j$ ) als Reynolds'sche Normalspannungen bezeichnet. Die halbe Summe der Reynolds'schen Normalspannungen definiert die massenspezifische, turbulente kinetische Energie:

$$k = \frac{1}{2} \cdot \widetilde{u_i'' u_i''}, \quad (4.2)$$

die im Gegensatz zu den einzelnen Elementen des Reynolds'schen Spannungstensors invariant gegenüber Koordinatentransformation und damit ein Maß für die Turbulenzintensität ist. Eine häufig zur Charakterisierung der Intensität turbulenter Schwankungsbewegungen herangezogene Größe ist der sog. Turbulenzgrad, der sich aus der Entdimensionierung der turbulenten kinetischen Energie mit einer charakteristischen, zeitmittleren Geschwindigkeit des makroskopischen Strömungssystems ergibt:

$$Tu = \frac{\sqrt{\frac{2}{3}k}}{u_{char}}. \quad (4.3)$$

Das eigentliche Schließungsproblem der statistischen Turbulenzmodellierung liegt in der Bestimmung des Reynolds'schen Spannungstensors. Hierzu gibt es prinzipiell die Möglichkeit, Differentialgleichungen für die unbekanntenen Kovarianzen herzuleiten, die ihrerseits jedoch höhere statistische Momente enthalten. Dieses Verfahren führt zu einer unendlichen Kaskade gekoppelter Differentialgleichungen immer höherer statistischer Momente, die abgebrochen werden muss, um den numerischen Aufwand in Grenzen zu halten. Eine Hierarchie der Turbulenzmodelle kann folglich anhand der Ordnung des gewählten Abbruchs entwickelt werden:

- Bei den Reynolds-Spannungsmodellen erfolgt der Abbruch nach statistischen Momenten zweiter Ordnung (SMC: *Second-Moment Closure*); höhere statistische Momente werden wiederum durch ein Turbulenzmodell bestimmt.
- Die sog. Wirbelviskositätsmodelle modellieren die Reynolds'schen Spannungen mit Hilfe statistischer Momente erster Ordnung (*First-Moment Closure*), d.h. mittels der mittleren Geschwindigkeitsgradienten der Strömung, weshalb diese Modelle auch als Gradientenansätze bezeichnet werden.

### 4.1.2.2 Reynolds-Spannungsmodelle (RSM)

Unter Ausnutzung der Symmetrie des Reynolds'schen Spannungstensors (4.1) basieren die verschiedenen Formulierungen der Reynoldsspannungsmodelle (RSM: *Reynolds Stress Transport Model*) [38, 83, 95, 159, 161] auf je einer Transportgleichung für jede der sechs unbekanntenen Reynolds'schen Spannungen  $-\bar{\rho} \widetilde{u''_i u''_j}$  und einer weiteren Transportgleichung für die Dissipationsrate  $\varepsilon$  der turbulenten kinetischen Energie  $k$ . Die dabei auftretenden Tripelkorrelationen  $\widetilde{u''_i u''_j u''_k}$  werden wiederum durch Modellannahmen geschlossen. Die Reynolds-Spannungsmodelle bieten gegenüber den unten beschriebenen Wirbelviskositätsmodellen zwar den Vorteil, dass die Transportgleichungen der Reynolds'schen Spannungen die bei einer Krümmung der Stromlinien auftretenden, sog. "secondary strain rates" [23], zwar implizit behandeln [144], aber die Lösung der sieben eng gekoppelten und zudem numerisch steifen Transportgleichungen ist sehr aufwändig und damit Speicherplatz- und Rechenzeit-intensiv. Da Reynolds-Spannungsmodelle im Rahmen dieser Arbeit keine Anwendung finden, sei zur Diskussion der zugehörigen Transportgleichungen auf die Arbeiten von HIRSCH [69] und JONES [81] verwiesen.

### 4.1.2.3 Wirbelviskositätsmodelle (EVM)

Wirbelviskositätsmodelle (EVM: *Eddy Viscosity Model*) lösen das Schließungsproblem der Turbulenz durch Modellierung der Reynolds'schen Spannungen mit Hilfe statistischer Momente erster Ordnung, d.h. den mittleren Geschwindigkeitsgradienten der Strömung.

**Boussinesq-Hypothese:** In seiner bereits 1877 formulierten Hypothese geht BOUSSINESQ [21] davon aus, dass die turbulenten Reynolds'schen Spannungen (4.1) - analog den viskosen Spannungen im Falle laminarer Strömung - proportional zu den Gradienten der zeitlich mittleren Scherraten sind:

$$\tau_{ij,t} = -\bar{\rho} \widetilde{u''_i u''_j} = \mu_t \cdot \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij}. \quad (4.4)$$

Die hier vollständige Formulierung der Boussinesq-Hypothese berücksichtigt den Einfluss der Kompressibilität durch die in inkompressiblen Strömungen verschwindende Divergenz des Geschwindigkeitsvektors im Term  $-\frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}$ ; der Term  $\frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{ij}$  dient der Erfüllung der Kontinuität, damit die Spur des Tensors  $\tau_{ij,t}$  exakt  $-2\bar{\rho}k$  ergibt.

**Wirbelviskosität:** Die in (4.4) eingeführte Wirbelviskosität  $\mu_t$  (*eddy viscosity*) ist im Gegensatz zur laminaren dynamischen Viskosität  $\mu_l$  keine Stoffgröße, sondern maßgeblich durch die lokale Turbulenzstruktur bestimmt und kann damit innerhalb des Strömungsfeldes stark variieren. Zu ihrer Berechnung wird ein sog. Wirbelviskositätsmodell benötigt, womit das Schließungsproblem der Turbulenzmodellierung auf die Bestimmung der Wirbelviskosität verschoben ist. Zur Klassifizierung der Wirbelviskositätsmodelle, deren wesentliche Einschränkung auf der mit Einführung der skalaren Wirbelviskosität getroffenen Annahme isotroper Turbulenz beruht, wird die Anzahl der zu ihrer Bestimmung verwendeten zusätzlichen Transportgleichungen herangezogen, wobei man in Null-, Ein-, Zwei- und z.T. auch Dreigleichungsmodelle unterscheidet [160, 223].

**Nullgleichungsmodelle - Prandtl'sche Mischungsweghypothese:** Die einfachsten Wirbelviskositätsmodelle verwenden nur algebraische Beziehungen und damit überhaupt keine Transportgleichungen. Das sicherlich bekannteste Beispiel hierfür ist die Prandtl'sche Mischungsweghypothese [151, 169]. Aus der statistischen Physik ist bekannt, dass sich der molekular diffusive Transport proportional zum Produkt einer charakteristischen Geschwindigkeit und einer Austauschlänge definieren lässt, wobei im molekularen Fall die Molekülgeschwindigkeit  $c_{mol}$  und die mittlere freie Weglänge  $\lambda_{mol}$  einzusetzen sind:

$$\mu_l \propto \varrho \cdot \lambda_{mol} \cdot c_{mol} . \quad (4.5)$$

In Analogie hierzu führte PRANDTL [151] zur Bestimmung der Wirbelviskosität  $\mu_t$  die Mischungslänge  $l_t$  als charakteristisches Längenmaß ein, das die Strecke repräsentiert, die ein Turbulenzballen zurücklegt, bis er seine ursprüngliche Identität verloren hat und damit nicht mehr von seiner Umgebung zu unterscheiden ist:

$$\mu_t \propto \bar{\varrho} \cdot l_t \cdot u_t . \quad (4.6)$$

Unter Annahme turbulenten Austausches senkrecht zur mittleren Strömungsrichtung verwendete PRANDTL als charakteristisches Geschwindigkeitsmaß den mit der Mischungslänge multiplizierten mittleren Geschwindigkeitsgradienten ( $u_t = l_t \cdot |\partial\tilde{u}/\partial y|$ ), womit sich die Wirbelviskosität wie folgt darstellen lässt:

$$\mu_t = \bar{\varrho} \cdot l_t^2 \cdot \left| \frac{\partial\tilde{u}}{\partial y} \right| . \quad (4.7)$$

Für einen dreidimensionalen Strömungszustand kann die Prandtl'sche Mischungsweghypothese mittels des mittleren Deformationstensors  $S_{ij}$  ausgedrückt werden [147]:

$$\mu_t = \bar{\varrho} \cdot l_t^2 \cdot |S_{ij}| , \quad \text{mit} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial\tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial\tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) . \quad (4.8)$$

Zur Bestimmung von  $\mu_t$  muss die Mischungslänge  $l_t$  empirisch bestimmt werden und kann eine Feldabhängigkeit (z.B. Funktion des Wandabstandes) enthalten [223]. Mischungswegmodelle sind einfach zu implementieren, wenig Rechenzeit-intensiv und wegen ihrer guten Prädiktion für Problemstellungen dünner Grenzschichten auf den Gebieten der Tragflügelumströmung und freier Scherschichten weit verbreitet [206]. Sie zeigen aber wesentliche Schwächen in komplexen Strömungen wegen der hierbei schwierigen, problemabhängigen Bestimmung der Mischungslänge [160] und der impliziten Vernachlässigung des Transports turbulenter Größen [223].

**Eingleichungsmodelle - Prandtl-Kolmogorov:** Um die Einschränkungen oben beschriebener Mischungswegmodelle zu überwinden, wurden Modelle unter Verwendung einer zusätzlichen Bilanzgleichung zur Beschreibung des Transports turbulenter Größen vorgeschlagen. Eine Möglichkeit besteht hierbei in der Ableitung einer Bilanzgleichung für die turbulente kinetische Energie  $k$ . Die Wirbelviskosität kann dann nach einer unabhängig von KOLMOGOROV [94] und PRANDTL [152] vorgeschlagenen Beziehung als Funktion von  $\sqrt{k}$  bestimmt werden, welche ein Geschwindigkeitsmaß für großskalige turbulente Bewegungen darstellt [160, 223]:

$$\mu_t = \bar{\varrho} \cdot C_\mu \cdot l_t \cdot \sqrt{k} . \quad (4.9)$$

Hierin ist der Anisotropieparameter  $C_\mu$  eine Modellkonstante (meist:  $C_\mu = 0.09$ ) und  $l_t$  ein charakteristisches Längenmaß der Turbulenz. Obwohl Eingleichungsmodelle Änderungen in der Turbulenzstruktur besser als Nullgleichungsmodelle beschreiben können, besitzen sie auf Grund des empirisch zu bestimmenden turbulenten Längenmaßes keinen allgemeingültigen Charakter [223].

**Zweigleichungsmodelle:** Mit dem Ziel, sowohl turbulente Geschwindigkeits- als auch turbulente Längenmaße im gesamten Strömungsfeld zu bestimmen, wird bei den Zweigleichungsmodellen zusätzlich zur Transportgleichung für die turbulente kinetische Energie, aus der ein turbulentes Geschwindigkeitsmaß berechnet werden kann ( $u_t \propto \sqrt{k}$ ), eine weitere Transportgleichung zur Bestimmung des turbulenten Längenmaßes gelöst. Letztere kann z.B. eine Transportgleichung für die charakteristische Frequenz  $\omega$  der energietragenden Wirbel sein ( $k$ - $\omega$ -Modell [218, 219]) oder, wie im Falle des im Rahmen dieser Arbeit verwendeten und in Kap. 4.1.2.4 beschriebenen Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodells, die Dissipationsrate  $\varepsilon$  der turbulenten kinetischen Energie  $k$ .

#### 4.1.2.4 Standard $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell (STKE)

Das ursprünglich von JONES & LAUNDER [82] vorgeschlagene Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell (STKE) ist das wohl bekannteste und auf Grund seiner Effizienz und numerischen Stabilität im Bereich der angewandten Strömungsmechanik weitest verbreitete und am besten validierte Zweigleichungsmodell zur Bestimmung der Wirbelviskosität. In Analogie zur laminaren dynamischen Viskosität kann die unter Annahme lokalisotroper Turbulenz als feldverteilte und skalare Größe zu betrachtende Wirbelviskosität nach (4.6) in Abhängigkeit ebenfalls feldverteilter, turbulenter Geschwindigkeits- und Längenmaße ausgedrückt werden. Beim STKE werden die turbulenten Geschwindigkeitsmaße  $u_t$  als Funktion der turbulenten kinetischen Energie  $k$ :

$$u_t = \sqrt{k}, \quad (4.10)$$

die turbulenten Längenmaße  $l_t$  als Funktion der turbulenten kinetischen Energie  $k$  und deren Dissipationsrate  $\varepsilon$ :

$$l_t = \frac{k^{3/2}}{\varepsilon}, \quad (4.11)$$

berechnet [160], woraus sich die zu bestimmende Wirbelviskosität ergibt:

$$\mu_t = \bar{\rho} \cdot C_\mu \cdot \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (4.12)$$

Die zunächst fragwürdig erscheinende Verknüpfung des makroskopischen turbulenten Längenmaßes  $l_t$  mit der für kleine Skalen definierten Dissipationsrate  $\varepsilon$  nach (4.11) besitzt Gültigkeit bei Annahme einer sich im Gleichgewicht befindlichen Turbulenzkaskade (Gleichgewichtsturbulenz). Dem zu Grunde liegt die Vorstellung, dass die gesamte in der turbulenten Schwankungsbewegung gespeicherte Bewegungsenergie bei großen Skalen  $l_t$  aus der mittleren Scherung entnommen, beim Durchlaufen des sog. Inertialbereichs verlustfrei zu immer kleineren Skalen transportiert wird und schließlich bei kleinsten Skalen  $l_\eta$  dissipiert (s. Kap. 2.3.2). D.h. der Energietransfer ist längs

der Kaskade konstant und die Dissipation kinetischer Energie gleich groß derer Produktion. Folglich kann die auf kleinen Skalen stattfindende Dissipation ( $\varepsilon$ ) mit den makroskopischen Skalen ( $l_t$ ) gemäß (4.11) in Beziehung gesetzt werden. [164]

Die zur Bestimmung von  $\mu_t$  notwendigen Transportgleichungen für  $k$  und  $\varepsilon$  lassen sich exakt herleiten [63], enthalten aber Terme, die modelliert werden müssen [223]. Die entsprechend modellierten Transportgleichungen lauten in ihrer stationären, inkompressiblen Formulierung:

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i k)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu_l + \frac{\mu_t}{Sc_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_i} \right] + P_k - \bar{\rho}\varepsilon. \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_i \varepsilon)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[ \left( \mu_l + \frac{\mu_t}{Sc_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_i} \right] + C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{k} P_k - C_{\varepsilon 2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon^2}{k}. \quad (4.14)$$

In den Quelltermen der rechten Seite der Gleichungen (4.13) und (4.14) ist  $P_k$  der Produktionsterm der turbulenten kinetischen Energie:

$$P_k = \tau_{ij,t} \cdot \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}, \quad (4.15)$$

wobei für den Reynolds'sche Spannungstensor  $\tau_{ij,t}$  die Boussinesq-Hypothese (4.4) eingesetzt wird. Die empirisch zu bestimmenden Modellkonstanten bieten durch entsprechende Anpassung an spezielle Strömungsformen die Möglichkeit einer problembezogenen Verbesserung der Genauigkeit des STKE. Um eine möglichst große Allgemeingültigkeit des Modells zu erzielen, wurden sie durch numerische Optimierung auf Basis von Messdaten vereinfachter Strömungssituationen zu den in Tab. 4.1 aufgelisteten Werten bestimmt [160].

$C_\mu$	$C_{\varepsilon 1}$	$C_{\varepsilon 2}$	$Sc_k$	$Sc_\varepsilon$
0,09	1,44	1,92	1,0	1,3

Tabelle 4.1: Konstanten des Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodells

#### 4.1.2.5 Drallkorrektur - Modifiziertes $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell (MKE)

**Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell und turbulente Drallströmungen:** Aus der Anwendung der Boussinesq-Hypothese (4.4), die mit der proportionalen Abhängigkeit der turbulenten Spannungen von den mittleren Geschwindigkeitsgradienten der Strömung und der Einführung der Wirbelviskosität als zwar feldverteilte aber isotrope, d.h. richtungsunabhängige Größe zwei nicht allgemein gültige Annahmen postuliert, resultieren die in der Literatur diskutierten Schwächen des STKE. Insbesondere bei der Modellierung turbulenter Drallströmungen liefert das STKE häufig unbefriedigende Ergebnisse, die nicht zuletzt aus der in diesen Strömungen vorherrschenden Anisotropie der turbulenten Austauschgrößen hervortreten und sich in einer Überschätzung des radialen Austausches von Tangentialimpuls äußern, welche zur bevorzugten Ausbildung von Tangentialgeschwindigkeitsprofilen des Starrkörperwirbeltyps führt [199, 23, 179, 40, 144, 69, 75].

**Modifikationen bei isotroper Wirbelviskosität:** Um das numerisch robuste  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell auch für Drallströmungen verwenden zu können, wurden einige Korrektur-Ansätze entwickelt. Zur Korrektur des radial-tangentialen Austausches bietet sich die sog. Richardson-Zahl-Korrektur [179, 40, 144] an, die auf Basis des lokalen Zirkulationsgradienten (s. Kap. 2.3.7 - Rayleigh-Kriterium) in die  $\varepsilon$ -Transportgleichung eingreift und z.B. bei turbulenzdämpfendem, positivem radialen Zirkulationsgradienten die Dissipationsrate  $\varepsilon$  erhöht und damit eine Verringerung der Wirbelviskosität bewirkt [144].

**Modifiziertes  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell nach HIRSCH:** In seinem Modifikationsansatz zum  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell beschreibt HIRSCH [69] einen anderen Weg. Aufbauend auf Arbeiten von JACQUIN et al. [80] unterscheidet er in lineare und nicht-lineare Wechselwirkungen zwischen Rotation und Turbulenz. Demnach erfassen nicht-lineare Effekte die Wirkung starker Rotation auf die Turbulenzkaskade und verändern deren Struktur erst ab einer kritischen Drallstärke. Entsprechende Modelle greifen in die  $\varepsilon$ -Transportgleichung ein, da diese den Transfer von Turbulenzenergie über die Kaskade beschreibt. Da er sich in seiner Arbeit vorwiegend mit der Wirkung der linearen Effekte befasst und diese entkoppelt von den nicht-linearen untersuchen will, verwendet HIRSCH die Dissipationsgleichung des STKE-Modells ohne Modifikation. Lineare Wechselwirkungen betreffen hingegen die direkte Kopplung der Turbulenzstruktur mit dem mittleren Strömungsfeld durch eine zur Drallstärke proportionale Lageänderung des turbulenten Spannungstensors relativ zum Koordinatensystem und werden folglich nicht über eine Beeinflussung der Dissipationsgleichung modelliert. HIRSCHs Drallkorrektur greift direkt in die Boussinesq-Hypothese (4.4) ein, indem er ausgehend von einer Analyse der im Reynoldsspannungsmodell identifizierten, drallrelevanten Terme eine richtungsabhängige Korrektur der Wirbelviskosität als Funktion der lokalen Beschleunigung und damit der Krümmung von Strombahnen entwickelt, die streng genommen nur in sehr stark verdrehten Strömungen gültig ist [69]. Zur detaillierten Herleitung und Implementierung des Modifizierten  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodells (MKE) sei an dieser Stelle auf die Arbeit von HIRSCH [69] bzw. den Bericht von SCHMID [173] verwiesen.

### 4.1.3 Turbulenter Skalartransport

Zur vollständigen Schließung der zeitlich mittleren Bilanzgleichungen (s. Kap. 2.3.3.2) müssen die dort auftretenden ungeschlossenen Terme der turbulenten Flüsse von Enthalpie  $-\overline{\rho} \widetilde{u_i'' h_i''}$  (2.52) und Speziesmassen  $-\overline{\rho} \widetilde{u_i'' Y_k''}$  (2.54) bestimmt werden. Hierzu bietet es sich an, diese jeweils als turbulenten Fluss einer skalaren Größe<sup>1</sup>  $\Phi$  zu behandeln, für welche, analog zu den vektoriellen Größen, durch Anwendung der in Kap. 2.3.3.1 beschriebenen Mittelungsmethoden, eine allgemeine Skalar-Transportgleichung für die zeitlich gemittelte, turbulente Strömung abgeleitet werden kann:

$$\frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{\Phi})}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u_i} \widetilde{\Phi})}{\partial x_i} = - \frac{\partial \overline{j_i^\Phi}}{\partial x_i} - \frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u_i''} \widetilde{\Phi''})}{\partial x_i} + \overline{S_\Phi}. \quad (4.16)$$

<sup>1</sup>Skalare Größen sind massegebundene Eigenschaften des Fluids.

Der laminare diffusive Fluss  $\overline{j_i^\Phi}$  des Skalars  $\Phi$  kann durch einen Gradientenansatz in Analogie zu  $\overline{j_i^q}$  bzw.  $\overline{j_i^k}$  nach (2.16) bzw. (2.18) berechnet werden, ist aber bei großen Reynolds-Zahlen sehr klein im Vergleich zu dessen turbulentem Fluss  $-\overline{\rho} \widetilde{u_i'' \Phi''}$ , der wiederum in Analogie zum turbulenten Impulsaustausch als Funktion des mittleren Gradienten der ausgetauschten Größe ausgedrückt wird:

$$-\overline{\rho} \widetilde{u_i'' \Phi''} = \Gamma_t \frac{\partial \tilde{\Phi}}{\partial x_i} . \quad (4.17)$$

Hierin ist  $\Gamma_t$  die turbulente Diffusivität, die wie die Wirbelviskosität  $\mu_t$  keine Stoffgröße, sondern durch die Turbulenzstruktur bestimmt ist, und nach der Reynolds'schen Analogie mittels eines Proportionalitätsfaktors  $\sigma_t$  auf diese bezogen werden kann:

$$\Gamma_t = \frac{\mu_t}{\sigma_t} . \quad (4.18)$$

Der Proportionalitätsfaktor  $\sigma_t$  drückt das Verhältnis von turbulentem Impulsaustausch zum turbulenten Austausch des jeweiligen Skalars aus und wird im Falle des Wärmeaustausches als turbulente Prandtl-Zahl  $Pr_t$ , im Falle des Stoffaustausches als turbulente Schmidt-Zahl  $Sc_t$  bezeichnet. Experimenten zufolge variieren die Diffusivitäten von Impuls, Wärme und Stoff zwar stark innerhalb eines Strömungsfeldes, ihr Verhältnis  $\sigma_t$  bleibt aber annähernd konstant, was in vielen Modellen durch Verwendung konstanter turbulenter Prandtl-Zahl bzw. Schmidt-Zahl genutzt wird [223]. Zur Übersicht sind in Tab. 4.2 die Entsprechungen zwischen allgemeinem Skalar- und Wärme- bzw. Stofftransport gegenübergestellt.

	laminarer Fluss	turbulenter Fluss	turbulente Diffusivität	Quellterm
$\Phi$	$\overline{j_i^\Phi}$	$-\overline{\rho} \widetilde{u_i'' \Phi''}$	$\Gamma_t = \mu_t / \sigma_t$	$\overline{S_\Phi}$
$h$	$\overline{j_i^q}$	$-\overline{\rho} \widetilde{u_i'' h''}$	$\Gamma_t = \mu_t / Pr_t$	$\overline{\dot{q}_R}$
$Y_k$	$\overline{j_i^k}$	$-\overline{\rho} \widetilde{u_i'' Y_k''}$	$\Gamma_t = \mu_t / Sc_t$	$\overline{\dot{w}_k}$

Tabelle 4.2: Analogie zwischen Skalar-, Wärme- und Stofftransport

Die Behandlung des turbulenten Skalartransports in Form des Gradientenaustauschansatzes (4.17) verliert ihre Gültigkeit in einigen reaktiven, turbulenten Strömungen, in denen die sog. "Counter-Gradient"-Diffusion (s. Kap. 2.4.4.3) beobachtet wurde.

#### 4.1.4 Lokale, mittlere Aufenthaltszeit

Die Untersuchung stationärer Strömungen, die durch Prozesse stark unterschiedlicher Zeitmaße gekennzeichnet sind, wirft mitunter die Frage nach der lokalen Verweilzeit des Fluids in einem bestimmten Teil des Strömungsgebietes auf. Im Gegensatz zu einer auf Basis globaler Größen definierten Verweilzeit kann dieser Anforderung durch eine lokale Definition Rechnung getragen werden. Einem Vorschlag von HABISREUTHER [58] zufolge ist die sog. lokale, mittlere Aufenthaltszeit  $\tilde{\tau}$  als massegebundener Skalar durch

eine zur allgemeinen Skalar-Transportgleichung (4.16) analogen aber stationären Formulierung zu berechnen:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\tau})}{\partial x_i} = -\frac{\partial \bar{j}_i^{\tilde{\tau}}}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \Gamma_t \frac{\partial \tilde{\tau}}{\partial x_i} \right) + \bar{S}_{\tau}. \quad (4.19)$$

Hierin wird die turbulente Diffusivität gemäß  $\Gamma_t = \mu_t / Sc_{\tau}$  mit  $Sc_{\tau} = 0,7$  und der Quellterm zu  $S_{\tau} = 1 \cdot \rho$  mit der Einheit  $[(s/s) \cdot (kg/m^3)]$  gesetzt. Die lokale, mittlere Aufenthaltszeit beschreibt die Zeit, die ein sich an einem bestimmten Ort befindliches Masseteilchen im statistischen Mittel seit seinem Eintritt in die Brennkammer verbracht hat. Sie wird am Einlassrand zu  $\tilde{\tau} = 0$  definiert und ist somit streng genommen nur für Strömungssysteme mit nur einem Ein- bzw. Auslass gültig [58].

In Systemen mit mehreren Einlässen bietet die lokale, mittlere Aufenthaltszeit nicht mehr die Möglichkeit ihren lokalen Wert strikt als Maß der Verweilzeit des Fluids seit Eintritt in das System zu verwenden, sie kann aber dennoch zur qualitativen Analyse herangezogen werden, wenn sich die jeweiligen Impulsströme an den Einlässen nicht zu stark unterscheiden und letztere im Verhältnis zur Gesamtgröße des Systems nicht zu weit auseinander liegen.

## 4.2 Modellierung der Reaktion in turbulenten Drallflammen

Die in Kap. 4.1 beschriebenen Turbulenzmodelle ermöglichen die Bestimmung der turbulenten Transportterme nicht reagierender skalarer Größen und damit die Berechnung der in Kap. 2.1 eingeführten Bilanzgleichungen für Gesamtmasse, Impuls und Enthalpie in turbulenten, isothermen Strömungen. In reaktiven, turbulenten Strömungen müssen zusätzlich die Bilanzgleichungen der Speziesmassen (2.54) gelöst werden. Die Bestimmung der darin auftretenden ungeschlossenen Terme des turbulent-diffusiven Speziesstransports  $\left( \partial \left( \bar{\rho} \widetilde{u_i'' Y_k''} \right) / \partial x_i \right)$  sowie der mittleren Reaktionsquellterme  $\bar{w}_k$  ist Aufgabe des turbulenten Reaktionsmodells. In der Regel werden hierbei reagierende Komponenten als passive Skalare behandelt und demnach ihr turbulent-diffusiver Transport analog zum turbulenten Skalartransport (s. Kap. 4.1.3) mit Hilfe des Gradientenaustauschansatzes (4.17) modelliert. Folglich besteht die Hauptaufgabe des turbulenten Reaktionsmodells in der Bestimmung des Reaktionsquellterms  $\bar{w}_k$ , welcher die Interaktion von Turbulenz und Chemie beschreibt.

### 4.2.1 Turbulente Reaktionsmodelle: Überblick

Ein wichtiges Kriterium zur Klassifizierung der bislang verfügbaren turbulenten Reaktionsmodelle ist der Ort der Mischung von Brennstoff und Oxidator. So sind in erster Linie Modelle für vorgemischte und nicht-vorgemischte Verbrennung voneinander zu unterscheiden.

#### Vormischverbrennung

Da turbulente Reaktionsmodelle die Interaktion von Turbulenz und Chemie beschreiben, bietet sich eine Einteilung entsprechend der Klassifizierung turbulenter Reakti-

onsstrukturen an, wie sie in Kap. 2.4.3 vorgestellt wurde. Die mittlerweile als klassisches Werk einzustufende Arbeit von BORGHI [19] gibt hierzu eine detaillierte Übersicht. Darin wird deutlich, dass viele Modelle nicht alle turbulenten Reaktionsstrukturen erfassen, d.h. nicht das komplette BORGHI-Diagramm (s. Kap. 2.4.3.1) abdecken, sondern oft nur kleine Bereiche. So lassen sich, z.B. durch Betrachtung der turbulenten Damköhlerzahl, welche gemäß (2.84) das charakteristische Zeitmaß der Turbulenz mit demjenigen der Wärmefreisetzung vergleicht, im wesentlichen zwei Klassen von Modellen unterscheiden: Modelle, die auf der Annahme unendlich schneller Chemie basieren, und solche, die von einem reaktionskinetisch kontrollierten Umsatz, d.h. finiter Chemie ausgehen. Eine Klassifizierung turbulenter Reaktionsmodelle kann auch auf Basis des im jeweiligen Reaktionsmodell verwendeten Modellierungsansatzes erfolgen. Demnach unterscheidet HABISREUTHER [58] in Modelle auf Basis der turbulenten Flammengeschwindigkeit und statistische Modelle. VEYNANTE & VERVISH [208] geben eine ausführliche Übersicht über turbulente Reaktionsmodelle der Vormischverbrennung, die sie in Modelle auf Basis der skalaren Dissipationsrate, der Beschreibung der Flammenfrontgeometrie und wiederum der statistischen Beschreibung gliedern. HOFFMANN [71], der diese Gliederung übernimmt, liefert eine ausführliche Darstellung der diesen Kategorien zuzuordnenden Reaktionsmodelle und zeigt die Bereiche im Regime-Diagramm der turbulenten Vormischverbrennung nach BORGHI auf, die das jeweilige Modell abdeckt. In Anbetracht der mittlerweile existierenden Fülle an turbulenten Reaktionsmodellen erscheint eine Einteilung dieser Art als am besten geeignet, einen Überblick über die Möglichkeiten der turbulenten Verbrennungsmodellierung zu vermitteln:

**Korrelationen auf Basis der turbulenten Flammengeschwindigkeit:** Turbulente Reaktionsmodelle auf Basis der turbulenten Flammengeschwindigkeit setzen den gesuchten mittleren Reaktionsquellterm in Bezug zur turbulenten Flammengeschwindigkeit, welche wiederum durch Korrelationen auf der Basis asymptotischer Zeit- und Längenmaßverhältnisse bestimmt wird. In Analogie zum laminaren Fall wird auch hier oft nur ein Zeitmaß für Wärmefreisetzung und turbulent-diffusiven Austausch verwendet.[58]

**Beschreibung auf Basis der skalaren Dissipationsrate:** Modelle dieser Klasse beschreiben den mittleren Reaktionsquellterm auf Basis der turbulenten Mischung, die mittels der skalaren Dissipationsrate (2.78) ausgedrückt werden kann. Für große Damköhlerzahlen (2.84) sind die charakteristischen Zeitskalen der Wärmefreisetzung kleiner als die der Turbulenz, sodass der mittlere Reaktionsumsatz durch die turbulente Mischung limitiert ist. Da in diesem Fall die im Vergleich zum Wirbelzerfall sehr schnelle Chemie sich immer nahe des chemischen Gleichgewichts befindet, bezeichnet man diese Modelle auch als Gleichgewichtsmodelle. Unter diesen Umständen kann die Flammenfront als dünn betrachtet werden, eine entkoppelte Beschreibung von Turbulenz und Chemie ist möglich.[208]

**Beschreibung der Flammenfrontgeometrie:** Basis der Modellierungsansätze dieser Kategorie ist die Bestimmung der Kinematik der Flammenfront, welche anhand der Topologie und Dynamik von Isoflächen oder mittels der zeitlichen Entwicklung der Flammenfrontnormalen beschrieben werden kann. Hierbei wird die Reaktionszone der Flamme als dünn gegenüber den Abmessungen der turbulenten Wirbelelemente betrachtet und entspricht im BORGHI-Diagramm dem sog. "Flamelet"-Bereich ( $Ka_t > 1$ ),

weshalb Modelle dieser Klasse als “Flamelet”-Modelle bezeichnet werden. Diese ermöglichen eine entkoppelte Beschreibung von Turbulenz und Chemie, da die Reaktionszone von “Flamelets” entsprechend obiger Annahme nicht durch die turbulente Strömung beeinflusst wird.[71]

**Statistische Beschreibung:** Statistische, turbulente Reaktionsmodelle basieren auf der Berechnung zeitlich mittlerer Größen mit Hilfe lokaler Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Einflussgrößen der chemischen Reaktion. Hierbei wird davon ausgegangen, dass die turbulente Verbrennung vollständig durch den Verlauf der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion wiedergegeben werden kann, d.h. dass sich Zeit- und Längenmaßverhältnisse des Reaktionsprozesses vollständig darin widerspiegeln und somit zunächst keine einschränkenden Annahmen bezüglich der chemischen Kinetik und des turbulenten Transports getroffen werden müssen.[58]

### Nicht-vorgemischte Verbrennung

Verglichen mit der vorgemischten Verbrennung müssen die Reaktionsmodelle der turbulenten, nicht-vorgemischten Verbrennung zusätzlich die turbulente Makromischung von Brennstoff und Oxidator möglichst genau abbilden, wozu meist die Mischungszusammensetzung mittels der Definition des Mischungsbruches (s. Kap. 2.1.5) erfasst wird. Die den turbulenten Reaktionsmodellen der vorgemischten Verbrennung zu Grunde liegenden Theorien und vereinfachenden Annahmen besitzen prinzipiell auch im Falle der nicht-vorgemischten Verbrennung Gültigkeit. Demnach bietet es sich an, diese Modelle entsprechend der vereinfachenden Annahmen, auf denen sie basieren, zu gliedern. Eine ausführliche Übersicht auch neuerer Modellierungsansätze ist in VEYNANTE & VERVISH [208] zu finden. Im Folgenden werden exemplarisch die Ansätze einiger weiter verbreiteter Modellklassen umrissen.

**Gleichgewichtsmodelle:** Auch im Rahmen der nicht-vorgemischten Verbrennung existieren turbulente Reaktionsmodelle, die auf der Annahme unendlich schneller Chemie aufbauen. Häufig wird hierzu die Struktur der Flamme im Mischungsbruchraum dargestellt und die skalaren Größen einzig als Funktion des lokalen Mischungsbruchs ausgedrückt.

**Flamelet-Modelle:** Eine weitere weit verbreitete Klasse basiert auf den Annahmen des Flamelet-Ansatzes. Hierbei werden skalare Größen als Funktion des lokalen Mischungsbruchs und der skalaren Dissipationsrate erfasst. Durch Projektion der Bilanzgleichungen der skalaren Größen in die Fläche stöchiometrischer Mischung und Ersetzen der dazu senkrecht stehenden Koordinate durch den Mischungsbruch können die sog. Flamelet-Gleichungen abgeleitet werden, welche die reaktiv-diffusive Struktur der Reaktionszone in Abhängigkeit von der skalaren Dissipationsrate beschreiben, während die Position der Reaktionszone durch den stöchiometrischen Mischungsbruch festgelegt ist (s. Kap. 2.4.2.2). Die Chemie kann in tabellierter Form in sog. Flamelet-Bibliotheken abgelegt werden und resultiert meist aus dem Modellsystem der eindimensionalen Gegenstromdiffusionsflamme.

**Statistische Modelle:** Die statistische Beschreibung des Mischungszustandes bildet die Grundlage auch vieler anderer turbulenter Reaktionsmodelle der nicht-vorge-

gemischter Verbrennung. Hierzu wird, analog der Vorgehensweise der statistischen Beschreibung des Reaktionsverlaufes im vorgemischtem Fall, davon ausgegangen, dass sich der Mischungszustand vollständig durch die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung des Mischungsbruchs abbilden lässt. In Kombination mit der Annahme, dass Brennstoff und Oxidator durch eine als vernachlässigbar dünn anzusehende Flammenfront getrennt sind, d.h. die Chemie unendlich schnell ist und sich jederzeit im chemischen Gleichgewicht befindet, ergibt sich ein relativ einfaches, Modell mischungskontrollierter Turbulenz/Chemie-Interaktion, das im Allgemeinen als Gleichgewichts-PDF Modell bezeichnet wird.

Eine weitere Möglichkeit der statistischen Modellierung turbulenter, nicht-vorgemischter Verbrennung ist durch die Darstellung aller Einflussgrößen des chemischen Ansatzes in Form einer Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion gegeben, welche die Wahrscheinlichkeit des Vorkommens jeder Kombination der Einflussparameter beschreibt und somit die Gesamtcharakteristik des Vorganges wiedergibt. Hierdurch soll der Informationsverlust, der bei der zeitlichen Mittelung auftritt, ausgeglichen werden. In Anlehnung an die zeitliche Mittelung der Größen des turbulenten Impulstransports werden die mittleren Reaktionsquellterme als statistische Mittelwerte berechnet. Durch die gemeinsame statistische Behandlung des Mischungs- und des Reaktionszustandes können alle möglichen turbulenten Reaktionsstrukturen erfasst und damit sämtliche Bereiche des BORGI-Diagramms abgedeckt werden.[58, 144]

## 4.2.2 Reaktionsmodelle für Drallflammen

Die im vorangehenden Abschnitt umrissenen turbulenten Reaktionsmodelle bieten die Möglichkeit, die Interaktion von Turbulenz und Chemie für verschiedenste turbulente Reaktionsstrukturen zu beschreiben. Jedoch kann aus ihrer Diskussion auch geschlossen werden, dass viele turbulente Reaktionsmodelle nur spezielle turbulente Reaktionsstrukturen erfassen können. Zur Auswahl eines für die zu untersuchenden, reagierenden Drallströmungen geeigneten Reaktionsmodells muss zunächst geklärt werden, welche Reaktionsstrukturen darin vorherrschen.

Eine anschauliche Diskussion der in turbulenten Drallflammen vorkommenden Reaktionsstrukturen auf Basis einer Betrachtung der Turbulenz- und Aufenthaltszeitbedingungen sowie eine darauf aufbauende Abschätzung der Eignung verschiedener Reaktionsmodelle ist in der Arbeit von PHILIPP [144] gegeben. Aus dem weiten Lastregelbereich, der nach experimentellen Untersuchungen in rückströmungsstabilisierten, turbulenten Drallflammen möglich sei, schließt PHILIPP, dass der Reaktionsumsatz in diesen Flammen mit dem Durchsatz steigt. Er führt dies auf eine wachsende turbulente Mischungsintensität, v. a. der Einmischung heißer, zündstabilisierender, aus der Rezirkulationszone stammender Rauchgase in die Stabilisierungszone der Drallflamme zurück. Ergebnissen der experimentellen Arbeit von HILLEMANN [67] an turbulenten Drallflammen zufolge, resultiere aus dem Vergleich mittlerer Verweilzeiten der Strömung mit reaktionskinetischen Zeiten, dass die mittleren Aufenthaltszeiten in der Flamme den errechneten reaktionskinetischen Zeiten entsprechen, z.T. sogar kürzer als diese seien. Somit könne bei entsprechend großem Durchsatz von äußerst intensiver turbulenter Mischung und damit charakteristischen Zeitmaßen der Turbulenz ausgegangen werden, die nahe bei oder über jenen der Wärmefreisetzung liegen. Im Hinblick auf die angestrebte Untersuchung der Stabilität turbulenter Drallflammen, ist per se von

großen Durchsätzen auszugehen, womit Reaktionsmodelle für Mischungsgesteuerten Umsatz, d.h. Modelle auf Basis der skalaren Dissipationsrate oder Gleichgewichtsmodelle, ausscheiden. Desweiteren führe eine Abschätzung der kleinsten Wirbel des turbulenten Energiespektrums zu Kolmogorov-Längenmaßen von  $l_\eta \approx 0,1 \dots 0,2 \text{ mm}$ , die also kleiner als die laminare Flammendicke (s. Kap. 2.4.2.1) sind. Folglich kann die Reaktionszone der Flamme nicht als dünn gegenüber den Abmessungen der turbulenten Wirbelelemente betrachtet werden. Damit ist eine der grundlegenden Annahmen des Flamelet-Ansatzes verletzt, weshalb die in Drallflammen vorherrschenden Bedingungen auch nicht mit Hilfe von Flamelet-Konzepten erfasst werden können.[144]

Turbulente Reaktionsmodelle auf Basis von Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktionen, sog. JPDF-Reaktionsmodelle besitzen gegenüber Modellen der kinematischen Beschreibung der Flammenfrontgeometrie, welche einen Flamelet-Ansatz verwenden, zwar den Nachteil, dass sie etwaige Einflüsse einer Flammenfrontkrümmung auf die Flammenfrontausbreitung und damit auf die Stabilität der Flamme vernachlässigen. Jedoch bieten JPDF-Reaktionsmodelle gegenüber Flamelet-Ansätzen, wie im vorangegangenen Abschnitt beschrieben, die Möglichkeit alle möglichen in turbulenten Drallflammen auftretenden Reaktionsstrukturen zu erfassen. Aus diesem Grund stützt sich die Modellierung der Turbulenz/Chemie-Interaktion im Rahmen dieser Arbeit auf ein JPDF-Reaktionsmodell, dessen Bildung in Kap. 4.3 beschrieben wird.

### 4.3 Nicht-adiabates JPDF-Reaktionsmodell

Statistische Methoden auf Basis von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF: probability density function) bzw. Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (JPDF: joint probability density function) werden seit etlichen Jahren zur Beschreibung der Turbulenz/Chemie-Interaktion in turbulenten, reagierenden Strömungen verwendet. Einführungen in die Thematik und ausführliche Diskussionen der Anwendung der PDF- und JPDF-Methoden sind z.B. in den Arbeiten von POPE [149], BORGI [19] und GIVI [51] zu finden.

Beginnend mit dem JPDF-Reaktionsmodell für nicht-vorgemischte Drallflammen von PHILIPP [144], welches auf der Verbundwahrscheinlichkeitsdichte aus Mischungsbruch und Temperatur basiert, besitzen JPDF-Reaktionsmodelle auch in der Geschichte des Engler-Bunte-Instituts seit längerer Zeit Tradition. Im Gegensatz zu PHILIPP, aber ebenfalls zur numerischen Simulation nicht-vorgemischter Drallflammen, verwendet HABISREUTHER [58] eine JPDF aus Mischungsbruch und Ausbrandgrad (s. Kap. 5.7.2), wobei er in einem ersten Ansatz auch den Einfluss von Wärmeverlusten diskutiert. HOFFMANN [71] leitet in seiner Arbeit zur Modellierung turbulenter Vormischverbrennung ein PDF-Modell ab, das auf einer Reaktionsfortschrittsvariablen ähnlicher Definition wie derjenigen des Ausbrandgrades bei HABISREUTHER basiert. Im Rahmen des EU-Forschungsprojekts "Computational Fluid Dynamics for Combustion" (CFD4C) stellten GROSSCHMIDT et al. [54] ein Reaktionsmodell vor, bei welchem die JPDF aus der Reaktionsfortschritts-PDF des Modells von HOFFMANN und einer Mischungsbruch-PDF konstruiert wird. Dieses ermöglicht die Behandlung vorgemischter, teil-vorgemischter sowie nicht-vorgemischter Verbrennungsprozesse bei gleichzeitiger Erfassung der Effekte finiter Chemie.

Ein Kernziel der vorliegenden Arbeit ist die Weiterentwicklung des aus CFD4C her-

vorgegangenen JPFD-Reaktionsmodells mit dem Ziel, nicht-adiabate Systeme betrachten, d.h. Wärmeverluste und deren Einflüsse auf die Verbrennungsschemie erfassen zu können. Das hierzu entwickelte nicht-adiabate JPFD-Reaktionsmodell wird in den folgenden Abschnitten beschrieben, wobei seine Darstellung zur Wahrung der Konsistenz seiner Dokumentation zum Teil den Ausführungen von GROSSSCHMIDT et al. [54] und HOFFMANN [71] entlehnt ist.

### 4.3.1 Mathematische Grundlagen

#### Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion und statistische Momente

In Analogie zur turbulenten Strömung ist auch die turbulente Verbrennung ein stochastischer Prozess, sodass anstatt der Berechnung der zeitlichen Entwicklung einer Feldgröße  $\phi(x_i, t)$ , diese Größe als Zufallsvariable betrachtet und durch ihre Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung (PDF)  $\mathcal{P}_\phi(\varphi, x_i, t)$ <sup>2</sup> in jedem Punkt des Strömungsfeldes beschrieben, d.h. lokal-statistisch erfasst werden kann. Die PDF einer Zufallsvariablen  $\phi$  ist als die Ableitung deren Verteilungsdichtefunktion  $\mathcal{D}_\phi(\varphi)$  definiert [149]:

$$\mathcal{P}_\phi(\varphi) = \frac{d}{d\varphi} (\mathcal{D}_\phi(\varphi)) . \quad (4.20)$$

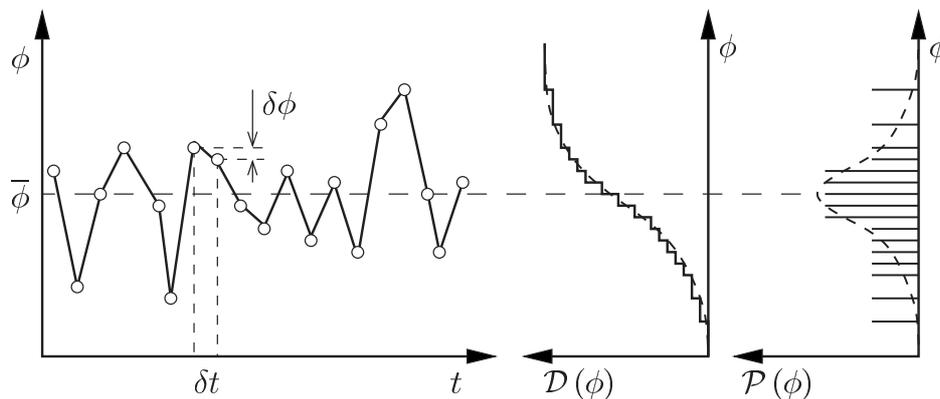


Abbildung 4.1: Zur Definition der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (aus HOFFMANN [71])

Gemäß des in Abb. 4.1 dargestellten Zusammenhangs zwischen  $\mathcal{P}_\phi(\varphi)$  und  $\mathcal{D}_\phi(\varphi)$  ist die Wahrscheinlichkeit, eine Zufallsgröße  $\phi$  innerhalb eines Abstandes  $d\varphi$  um den Wert  $\varphi$  zu finden, durch:

$$\text{Prob}(\varphi \leq \phi \leq \varphi + d\varphi) = \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi , \quad (4.21)$$

gegeben.

Aus der Forderung, dass die Wahrscheinlichkeit eines beliebigen Wertes der Variable  $\phi$  innerhalb deren Wertebereichs gleich eins sein muss, geht schließlich die Normierungsbedingung der PDF hervor:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi = 1 . \quad (4.22)$$

<sup>2</sup>Auf die Kennzeichnung der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung als Funktion von Ort  $x_i$  und Zeit  $t$  wird der Übersichtlichkeit wegen im Folgenden verzichtet.

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

$$\bar{\phi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi \cdot \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi . \quad (4.23)$$

Statistische Schwankungsgrößen lassen sich als zentrale Momente, d.h. Momente um den Mittelwert, berechnen. Hierbei ist das erste zentrale Moment, der Mittelwert der Schwankungsgröße selbst, definitionsgemäß gleich null (2.45). Das zweite zentrale Moment, die Varianz:

$$\overline{\phi'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (\phi - \bar{\phi})^2 \cdot \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi , \quad (4.24)$$

gibt die Intensität von Fluktuationen wieder.

Der zeitliche Mittelwert einer beliebigen Funktion  $Q(\phi)$  kann analog dem ersten Moment  $\bar{\phi}$  berechnet werden:

$$\overline{Q(\phi)} = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\varphi) \cdot \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi , \quad (4.25)$$

ist aber verschieden von  $Q(\bar{\phi})$ , insofern die Funktion  $Q(\phi)$  nichtlinear von  $\phi$  abhängt. Zur Charakterisierung auftretender Fluktuationen der Funktion  $Q(\phi)$  lässt sich deren Varianz entsprechend dem zweiten zentralen Moment von  $\phi$  ableiten:

$$\overline{Q'^2(\phi)} = \int_{-\infty}^{+\infty} (Q(\varphi) - \overline{Q(\phi)})^2 \cdot \mathcal{P}_\phi(\varphi) d\varphi . \quad (4.26)$$

Die statistischen Momente einer PDF geben zwar Auskunft über deren Form, jedoch kann eine beliebige PDF nicht aus einer endlichen Anzahl statistischer Momente rekonstruiert werden [149]; im Falle spezieller PDFs reichen hierzu einige wenige statistische Momente aus. So lässt sich z.B. eine Gauß'sche Normalverteilung durch Mittelwert (erstes Moment) und Varianz (zweites zentrales Moment) vollständig rekonstruieren. Dies ist ein wesentliches Merkmal spezieller Verteilungsdichtefunktionen, das in der Modellierung von PDFs häufig genutzt wird.

### Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Die statistische Beschreibung einer Funktion  $Q$ , die von mehreren stochastischen Variablen abhängig ist, kann mittels einer Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion (JPDF) erfolgen. Im Falle zweier Zufallsgrößen  $\phi(x_i, t)$  und  $\chi(x_i, t)$  ist diese durch:

$$\mathcal{P}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi) = \frac{d}{d\varphi d\psi} (\mathcal{D}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi)) , \quad (4.27)$$

gegeben. Da sowohl  $\mathcal{P}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi)$  als auch  $\mathcal{D}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi)$  im zweidimensionalen Zustandsraum  $\varphi-\psi$  definiert sind, ergibt sich die Wahrscheinlichkeit, dass ein Ereignis innerhalb des Bereiches  $d\varphi d\psi$  um den Punkt  $(\varphi, \psi)$  zu finden ist, zu:

$$\text{Prob}(\varphi \leq \phi \leq \varphi + d\varphi, \psi \leq \chi \leq \psi + d\psi) = \mathcal{P}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi) d\varphi d\psi . \quad (4.28)$$

Für Mittelwert und Varianz können in Abhängigkeit von der JPFD folgende Beziehungen abgeleitet werden:

$$\overline{Q(\phi, \chi)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\varphi, \psi) \mathcal{P}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi) d\varphi d\psi, \quad (4.29)$$

$$\overline{Q'^2(\phi, \chi)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left( Q(\varphi, \psi) - \overline{Q(\phi, \chi)} \right)^2 \mathcal{P}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi) d\varphi d\psi. \quad (4.30)$$

### Statistische Unabhängigkeit

Sind im Falle einer JPFD zweier Zufallsgrößen  $\phi(x_i, t)$  und  $\chi(x_i, t)$  diese nicht korreliert, d.h. statistisch voneinander unabhängig, so kann die JPFD als Produkt der PDFs  $\mathcal{P}_\phi(\varphi)$  und  $\mathcal{P}_\chi(\psi)$  ausgedrückt werden:

$$\mathcal{P}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi) = \mathcal{P}_\phi(\varphi) \cdot \mathcal{P}_\chi(\psi). \quad (4.31)$$

Dabei ist die Herleitung einer sog. marginalen PDF aus einer JPFD durch Projektion der JPFD in einen Unterraum (Marginale), z.B. die  $\psi$ -Achse möglich:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}_{\phi, \chi}(\varphi, \psi) d\psi = \mathcal{P}_\phi(\varphi). \quad (4.32)$$

### Dichtegewichtete Formulierung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

Die Einführung der dichtegewichteten Mittelung nach FAVRE (s. Kap. 2.3.3.1) ermöglichte die Ableitung der Favre-gemittelten Bilanzgleichungen (s. Kap. 2.3.3.2), deren Lösung auch eine dichtegewichtete Formulierung der PDF  $\tilde{\mathcal{P}}_\phi(\varphi)$  nötig macht. Diese kann, nach einem Vorschlag von BILGER [14], unter Anwendung von (4.32) definiert werden:

$$\tilde{\mathcal{P}}_\phi(\varphi) = \frac{1}{\bar{\varrho}} \int_0^\infty \varrho \cdot \mathcal{P}_{\varrho, \phi}(\varrho, \varphi) d\varrho, \quad (4.33)$$

worin die zeitlich mittlere Dichte durch:

$$\frac{1}{\bar{\varrho}} = \int_0^\infty \frac{1}{\varrho} \cdot \tilde{\mathcal{P}}_\phi(\varphi) d\varphi, \quad (4.34)$$

gegeben ist. Dichtegewichtete Mittelwerte und Varianzen erhält man, wie im Falle rein zeitlicher Mittelung:

$$\tilde{\phi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \phi \cdot \tilde{\mathcal{P}}_\phi(\varphi) d\varphi, \quad (4.35)$$

$$\tilde{\phi'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \phi - \tilde{\phi} \right)^2 \cdot \tilde{\mathcal{P}}_\phi(\varphi) d\varphi, \quad (4.36)$$

$$\widetilde{Q(\phi)} = \int_{-\infty}^{+\infty} Q(\varphi) \cdot \tilde{\mathcal{P}}_\phi(\varphi) d\varphi, \quad (4.37)$$

$$\widetilde{Q'^2(\phi)} = \int_{-\infty}^{+\infty} \left( Q(\varphi) - \widetilde{Q(\phi)} \right)^2 \cdot \tilde{\mathcal{P}}_\phi(\varphi) d\varphi, \quad (4.38)$$

wohingegen Reynolds-gemittelte Größen nach:

$$\overline{Q(\phi)} = \bar{\varrho} \int_0^\infty \frac{Q(\varphi)}{\varrho} \tilde{\mathcal{P}}_\phi(\varphi) d\varphi, \quad (4.39)$$

berechnet werden können. Ansonsten gelten für dichtegewichtete PDFs die gleichen Rechenvorschriften wie für rein zeitgemittelte PDFs.

Dichtegewichtete PDFs können in dichtevariablen Strömungen nach BILGER [15] analog zeitgemittelten PDFs in dichtekonstanten Strömungen modelliert werden. Sie bieten zudem den Vorteil, dass ihre Parameter durch Favre-gemittelte Momente bestimmt und mittels Favre-gemittelter Transportgleichungen berechenbar sind.

### Die abgeschnittene Gauß'sche Verteilungsdichtefunktion

PDFs können bei Verwendung spezieller Verteilungsdichtefunktionen auf der Basis einiger weniger, bekannter statistischer Momente rekonstruiert werden. Da in PDF-basierten Reaktionsmodellen häufig normierte, stochastische Variablen verwendet werden, deren Werte auf das Intervall  $[0 : 1]$  beschränkt sind, bietet sich die Verwendung einer Verteilungsdichtefunktion an, deren Wertebereich diesem Intervall entspricht. Eine Verteilungsdichtefunktion, die diese Anforderungen erfüllt, ist die in Abb. 4.2 dargestellte abgeschnittene Gauß'sche Verteilungsdichtefunktion ("clipped Gaussian"). Für eine stochastische Variable  $\phi$  ist diese durch:

$$\tilde{\mathcal{P}}(\phi) = \alpha \cdot \delta(\phi) + \beta \cdot \delta(1 - \phi) + [\mathcal{H}(\phi) - \mathcal{H}(\phi - 1)] \cdot \gamma \cdot \mathcal{G}(\phi), \quad (4.40)$$

gegeben, mit der Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion:

$$\mathcal{G}(\phi) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \cdot \exp\left[-(\phi - \mu)^2 / 2\sigma^2\right]. \quad (4.41)$$

Hierbei bezeichnen  $\delta(\phi)$  die Dirac-Funktion,  $\mathcal{H}(\phi)$  die Heavyside-Funktion,  $\mu$  den Erwartungswert und  $\sigma$  die Varianz der Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion.

Die angestrebte Beschränkung auf den Wertebereich  $[0 : 1]$  wird durch Zusammenfassung der Werte, welche die Gauß'sche Verteilungsdichtefunktion (4.41) in den Bereichen  $\phi < 0$  bzw.  $\phi > 1$  annimmt, in zwei Dirac-Funktionen an den Stellen  $\phi = 0$  bzw.  $\phi = 1$  in (4.40) erreicht. Diese sind darin durch die beiden Parameter  $\alpha$  bzw.  $\beta$  bestimmt:

$$\alpha = \int_{-\infty}^0 \mathcal{G}(\phi) d\phi = \frac{1}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{\mu}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right], \quad (4.42)$$

$$\beta = \int_1^\infty \mathcal{G}(\phi) d\phi = \frac{1}{2} \left[ 1 - \operatorname{erf}\left(\frac{1 - \mu}{\sqrt{2}\sigma}\right) \right]. \quad (4.43)$$

Mit der Normierungskonstante  $\gamma$ , die nach:

$$\gamma = \frac{2 \cdot (1 - \alpha - \beta)}{\operatorname{erf}[\mu/\sqrt{2}\sigma] + \operatorname{erf}[(1 - \mu)/\sqrt{2}\sigma]}, \quad (4.44)$$

berechnet werden kann, erfüllt die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $\tilde{\mathcal{P}}(\phi)$  auch die Normierungsbedingung (4.22).

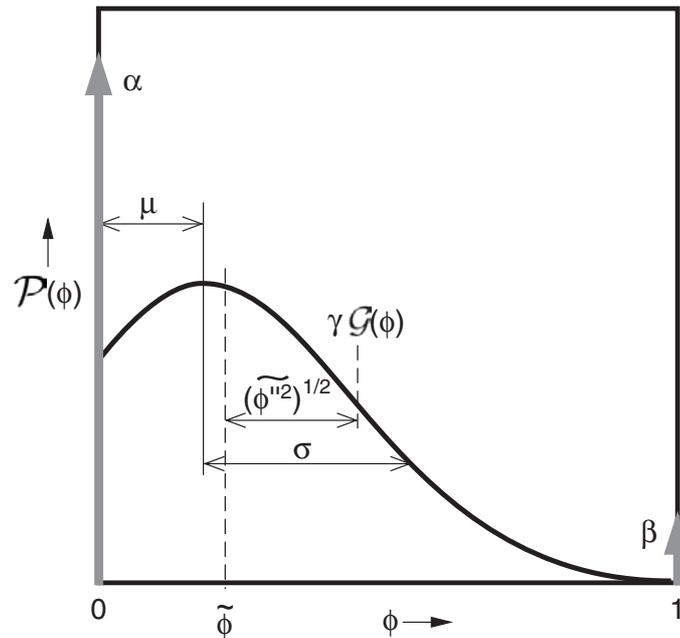


Abbildung 4.2: Zur Veranschaulichung der abgeschnittenen Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion (nach HOFFMANN [71])

### 4.3.2 Schließung des zeitlich mittleren Reaktionsquellterms

Aufgabe von Reaktionsmodellen ist die Schließung des zeitlich mittleren Reaktionsquellterms  $\overline{\dot{w}_k}$ . Wie bereits in Kap. 4.2 beschrieben, basieren hierzu verwendete, statistische Methoden auf der lokalen, statistischen Erfassung aller möglichen Zustände derjenigen Größen, welche die chemischen Reaktionen beeinflussen. Im allgemeinen sind dies die den thermodynamischen Zustand eines reagierenden Systems in der Gasphase definierenden Größen: Druck  $p$ , Konzentrationen der Spezies  $Y_k$  und die Temperatur  $T$ . Die JPDP ist eine Funktion dieser Größen in jedem diskreten Volumen des Strömungsfeldes und damit ortsabhängig. Mit der lokalen, dichtegewichteten JPDP dieser Größen  $\tilde{\mathcal{P}}_{p,T,Y_k}(p, T, Y_k)$  ergibt sich der zeitlich mittlere Reaktionsquellterm zu:

$$\overline{\dot{w}_k} = \bar{\varrho} \int_0^1 \dots \int_0^1 \int_0^\infty \int_0^\infty \frac{\dot{w}_k(p, T, Y_k)}{\varrho(p, T, Y_k)} \cdot \tilde{\mathcal{P}}_{p,T,Y_k}(p, T, Y_k) dp dT dY_1 \dots dY_{N_k} . \quad (4.45)$$

Auf Grund von (4.45) hat sich die Problemstellung auf die Berechnung der ortsabhängigen, multivariablen JPDP  $\tilde{\mathcal{P}}_{p,T,Y_k}(p, T, Y_k)$  in jedem Punkt des Strömungsfeldes  $x_i$  verlagert. Deren Umfang erstreckt sich auf  $(N_k + 2)$  statistische Variablen ( $N_k$  Spezies, Druck und Temperatur). Unter Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus, der im einfachen Fall der Methan-Verbrennung bereits  $N_k = 50 - 100$  Spezies umfassen kann, ergibt sich bei einer Diskretisierung der JPDP mit je  $N_{PDF}$  Werten ein numerisch zu lösendes Problem mit  $N_{PDF}^{(N_k+2)}$  Werten für die JPDP, zu dessen Lösung verschiedene Konzepte existieren [58]:

#### Transport-PDF Methoden

Mit der Annahme, dass die JPDP, wie die Masse des Fluids selbst, dem konvektiv-diffusiven Transport unterliegt, kann analog zum Massetransport eine Differentialglei-

chung für den Transport der JPDF formuliert werden. Gemäß dieser Betrachtungsweise führt die molekulare Diffusion über Quell- bzw. Senkenterme zu einer internen Umbildung der statistischen Verteilung, mit der Tendenz zur Verringerung der Verteilungsbreite und im Extremfall schließlich zu einem Delta-Peak. Die sog. Transport-PDF Methoden (s. auch [134, 149, 44, 150]) streben eine Lösung der Transportgleichung für die JPDF an. Da zum einen auf Grund ihrer Dimensionalität ( $(N_k + 2)$  Variablen) die direkte Lösung dieser Differentialgleichung extrem schwierig und zum anderen ihre Modellierung speziell bezüglich des Quellterms mangels unterstützender Messdaten nicht eindeutig geklärt ist, gehen die meisten Modellierungsansätze von stark vereinfachenden Annahmen aus. Die Anwendung der sog. “Monte-Carlo Methode” [148] ermöglicht zumindest für einfache Strömungskonfigurationen und unter Reduktion der Dimensionalität des Problems durch Verwendung eines reduzierten chemischen Reaktionsmechanismus dennoch eine Lösung der PDF-Transportgleichung.[58]

### Presumed-PDF Methoden

Die Berechnung der JPDF kann durch empirische Annahme ihrer Form (“presumed-PDF” [108, 92]) erheblich vereinfacht werden, insofern die hierzu gewählte Verteilungsdichtefunktion durch einige wenige statistische Momente eindeutig bestimmt ist. Es muss nun nicht mehr die Differentialgleichung der Dimension  $(N_k + 2)$  gelöst werden, vielmehr reicht die Kenntnis der statistischen Momente aus, um die JPDF zu rekonstruieren. Hierzu werden die statistischen Momente der JPDF als massegebundene Eigenschaft des Fluids angenommen und durch Lösen entsprechender Transportgleichungen berechnet. Die Frage, welche Form der JPDF der Realität am nächsten kommt, wird in der Literatur kontrovers diskutiert. Einige Autoren vertreten die Meinung, dass die exakte Form der PDF in Anbetracht anderer in den jeweiligen Modellen getroffener Annahmen eine eher untergeordnete Rolle spielt [186, 58, 71].

### 4.3.3 Wahl der JPDF-Variablen

In ihrer ursprünglichen Formulierung als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion von Druck, Temperatur und Konzentrationen aller Spezies  $\tilde{\mathcal{P}}_{p,T,Y_k}(p, T, Y_k)$  (s. Kap. 4.3.2) zeigt sich die zu berechnende JPDF als Funktion hoher Dimensionalität, deren stochastische Variablen zudem stark miteinander korrelieren, d.h. statistisch voneinander abhängig sind [58]. Durch geeignete, vereinfachende Annahmen und geeignete Wahl stochastischer Variablen, kann die Dimensionalität der JPDF und damit der numerische Aufwand zu ihrer Berechnung erheblich reduziert werden. Hierbei muss eine geschlossene Beschreibung des thermodynamischen Systems jedoch immer gewährleistet sein. Ein weiterer Vorteil resultiert aus der Verwendung normierter stochastischer Variablen, die statistisch voneinander unabhängig sind. In diesem Fall treten in der JPDF keine gemischten Korrelationen auf, sodass die JPDF nach (4.31) als Produkt mehrerer PDFs dargestellt werden kann.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird eine Verringerung der Dimensionalität der JPDF vor allem durch Anwendung der sog. “2-Bereich-1-Schritt Kinetik” erreicht; eine reduzierte chemische Reaktionskinetik, die in Kap. 4.4 ausführlich beschrieben wird. Mit Hilfe dieser Kinetik ist es möglich, den Verlauf der chemischen Reaktionen mit nur einer Variablen, der in Kap. 4.3.3.1 definierten Reaktionsfortschrittsvariablen  $c$ ,

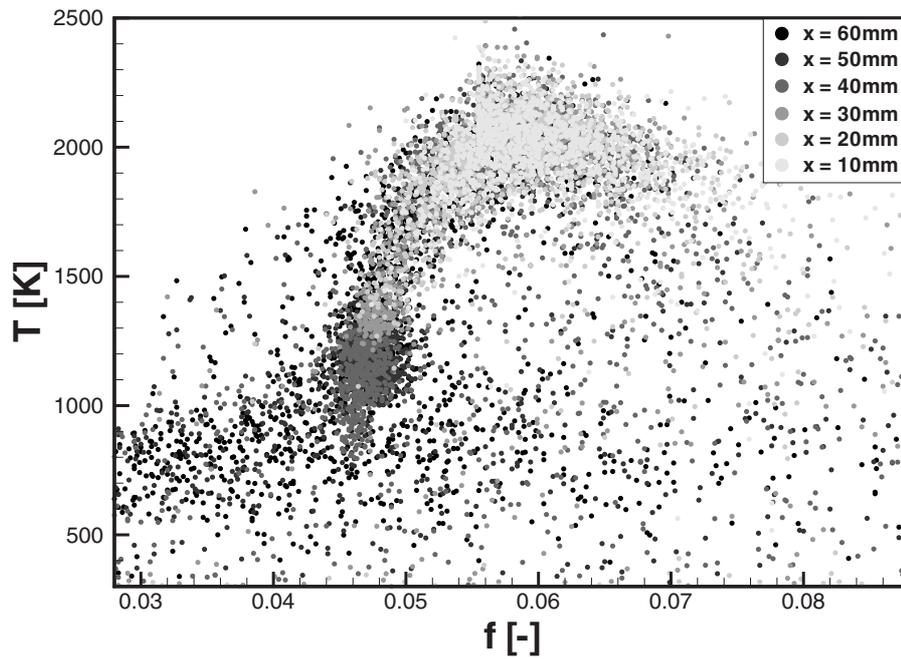


Abbildung 4.3:  $T - f$  - Raman-Scatter-Plot: Messungen in der TECFLAM Standard-Diffusionsflamme (nach KECK et al. [86])

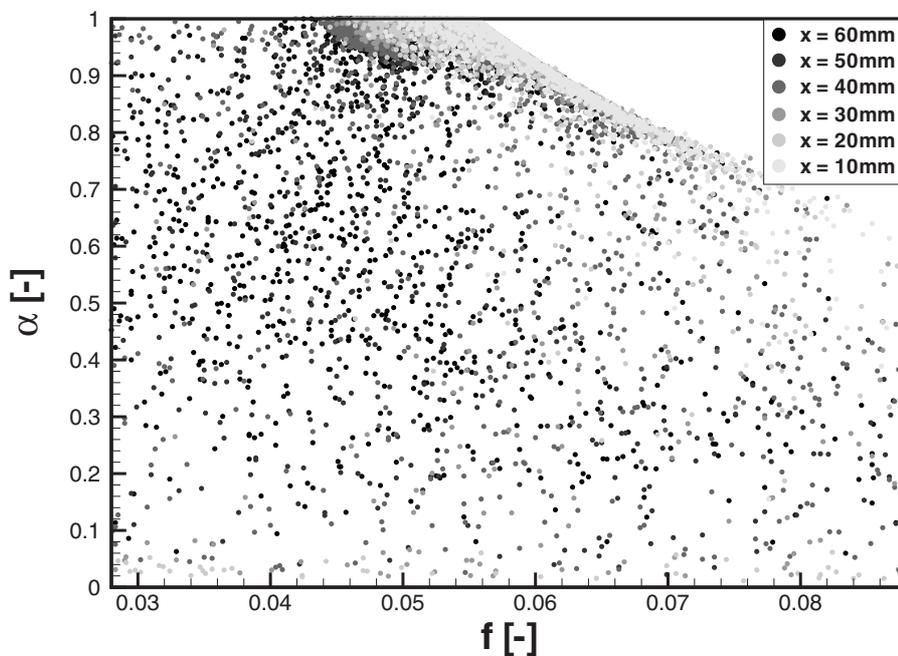


Abbildung 4.4:  $\alpha - f$  - Raman-Scatter-Plot: Messungen in der TECFLAM Standard-Diffusionsflamme (nach KECK et al. [86])

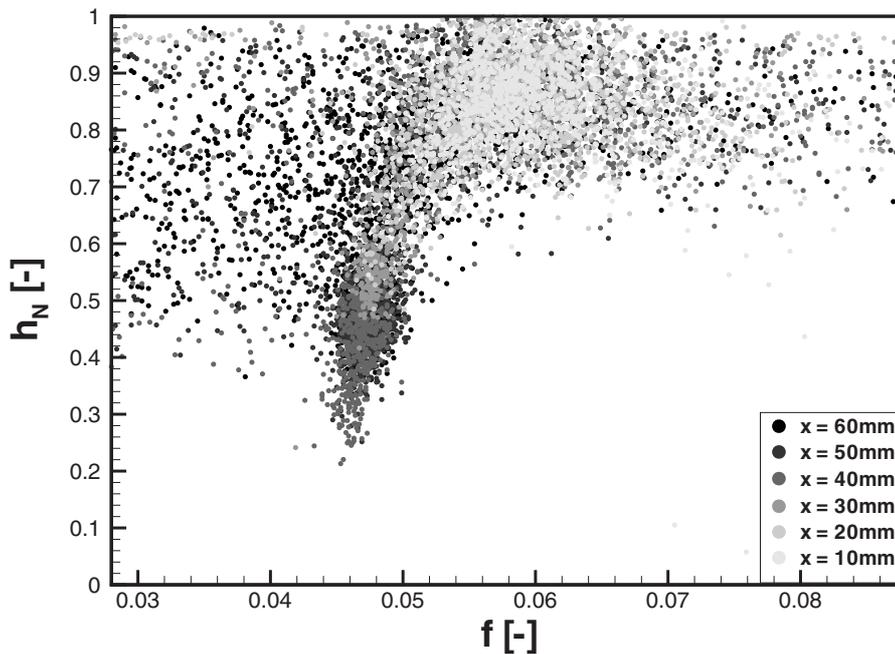


Abbildung 4.5:  $h_N - f$  - Raman-Scatter-Plot: Messungen in der TECFLAM Standard-Diffusionsflamme (nach KECK et al. [86])

zu beschreiben. Desweiteren wird im hier vorliegenden Ansatz die Mischungszusammensetzung mit Hilfe des Mischungsbruchs  $f$  erfasst (s. Kap. 4.3.3.2). Sind in einem adiabaten System Druck und Temperatur der Ausgangsstoffe gegeben und die Erhaltung der chemischen Elemente erfüllt, so ist der Zustand des Systems eine eindeutige Funktion von Mischungsbruch und Reaktionsfortschritt. Wärmeverluste über die Systemgrenzen bedingen eine Änderung der Enthalpie des thermodynamischen Systems. Zu deren Erfassung wird in Kap. 4.3.3.3 schließlich der Enthalpie-Index  $h_N$  eingeführt.

Zur Diskussion der statistischen Unabhängigkeit der gewählten Variablen sind in den Abbildungen 4.3 bis 4.5 sog. Scatter-Plots verschiedener Größen, die aus den experimentellen Daten der Raman-Einzelpuls-Messungen von KECK et al. [86] hervorgehen, dargestellt. Das zu Grunde liegende System ist die eingeschlossene, nach LEUCKEL & FRICKER [102] als Typ-II Drallflamme einzustufende, TECFLAM Standard-Diffusionsdrallflamme (s. z.B.[174]) die mit einer thermischen Leistung von  $P_{th} = 150 \text{ kW}$  bei einer globalen Luftzahl  $\lambda_{glob} = 1,2$ , d.h. einem globalen Mischungsbruch  $f_{glob} \approx 0,046$  betrieben wurde. Die in den Abbildungen 4.3 bis 4.5 dargestellten Punkte sind die Ergebnisse von Raman-Messungen an einzelnen Punkten im Strömungsfeld, deren axiale Position ( $x = 10 \text{ mm}$  bis  $x = 60 \text{ mm}$ ) anhand verschiedener Graustufen zu erkennen ist. Diese Darstellungsweise erlaubt es, Aussagen über die Korrelation zwischen der jeweils auf der Ordinate aufgetragenen Größe und dem Mischungsbruch (Abszisse) zu treffen. Hierbei ist der Wertebereich des Mischungsbruchs auf die Zündgrenzen von  $\text{CH}_4$  in Luft, d.h. auf das Intervall  $f = [0,028 : 0,088]$  beschränkt. Demnach zeigt Abb. 4.3 eine starke Abhängigkeit der Temperatur vom Mischungsbruch, weshalb diese beiden Größen nicht als statistisch unabhängig voneinander betrachtet

werden dürfen. Abbildung 4.4 verdeutlicht, dass der aus gemessenen Speziesmolenbrüchen nach (5.30) berechnete Ausbrandgrad (s. Kap. 5.7.2) weitaus weniger mit dem Mischungsbruch korreliert und damit näherungsweise von diesem statistisch unabhängig ist. Da der Ausbrandgrad sich direkt in die im Rahmen dieser Arbeit verwendete, ebenfalls auf einer Basis einer Sauerstoffbilanz definierte Reaktionsfortschrittsvariable (s. Kap. 4.3.3.1) umrechnen lässt, kann auch diese als statistisch unabhängig vom Mischungsbruch angenommen werden. Wie in Kap. 4.3.3.3 gezeigt wird, ist der Enthalpie-Index eine Größe, mittels derer die lokale Enthalpie mit derjenigen im Falle adiabater Bedingungen verglichen wird, und kann daher als inverser Wärmeverlust gesehen werden. Schließt man bei Betrachtung von Abb. 4.5 Werte des Enthalpie-Index  $h_N < 0,4$ , die einem lokalen Wärmeverlust von mehr als 60% gegenüber adiabaten Bedingungen entsprechen, aus, so tendiert diese Größe zu einer gleichmäßigeren Verteilung im verbleibenden Bereich, als dies für die Temperatur (Abb. 4.3) der Fall ist. Verglichen mit der Temperatur, ist tendenziell eine weniger starke Korrelation des Enthalpie-Index mit dem Mischungsbruch gegeben und damit die Annahme statistischer Unabhängigkeit auch eher gerechtfertigt, aber auf Grund des Fehlens weiterer, aussagekräftiger Messdaten sicherlich nicht nachgewiesen. Dennoch wird, motiviert durch seine recht breite Verteilung in Abb. 4.5, der Enthalpie-Index als statistisch unabhängige Variable betrachtet.

Mischungsbruch, Reaktionsfortschrittsvariable und Enthalpie-Index bilden einen Satz an JPFD-Variablen, die als statistisch unabhängig angenommen werden und mittels derer der thermodynamische Zustand eines nicht-adiabaten Systems bei Kenntnis von Druck, Temperatur und Zusammensetzung der Ausgangsstoffe eindeutig bestimmt ist. Nachfolgend werden Definition, Transport und statistische Behandlung jeder einzelnen dieser Variablen näher diskutiert.

#### 4.3.3.1 Reaktionsfortschritt

**Definition:** Unter der Annahme eines isobaren, adiabaten und perfekt vorgemischten Verbrennungsprozesses hängt der thermodynamische Zustand des Systems nur vom Fortschritt der chemischen Reaktionen ab. Diesen durch eine einzige Reaktionsfortschrittsvariable abzubilden, ist eine weit verbreitete Vorgehensweise in der Verbrennungsmodellierung. Sie entstammt der Annahme einer irreversiblen Einschrittreaktion für die Verbrennung, besitzt aber auch im Falle der in Kap. 4.4 beschriebenen 2-Bereich-1-Schritt Kinetik Gültigkeit. Eine eindeutige Beschreibung des Reaktionsfortschritts kann nach HABISREUTHER [58] anhand des sog. lokalen Ausbrandgrades  $\alpha$ , dessen Definition auf Basis einer Bilanz der molaren Sauerstoffkonzentration in Kap. 5.7.2 gegeben ist, erfolgen. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird der Reaktionsfortschritt durch die Reaktionsfortschrittsvariable  $c$  dargestellt, die ebenfalls als Sauerstoffbilanz jedoch auf Basis des Sauerstoffelementmassenbruchs definiert ist [54, 71]:

$$c = \frac{Z_{\text{O,geb}}}{\min(Z_{\text{O,erf}}, Z_{\text{O,vorh}})} . \quad (4.46)$$

Hierin ist  $Z_{\text{O,vorh}}$  der lokale Sauerstoffelementmassenbruch:

$$Z_{\text{O,vorh}} = Z_{\text{O}} , \quad (4.47)$$

$Z_{O,geb}$  der Elementmassenbruch der bereits in Zwischen- oder Endprodukten gebundenen Sauerstoffatome:

$$Z_{O,geb} = Z_O - Y_{O_2} , \quad (4.48)$$

und  $Z_{O,erf}$  der Elementmassenbruch des Sauerstoffs, der zum vollständigen Reaktionsumsatz nötig ist:

$$Z_{O,erf} = 2 \frac{W_O}{W_C} Z_C + \frac{1}{2} \frac{W_O}{W_H} Z_H . \quad (4.49)$$

Ausgehend von der Erhaltung der chemischen Elemente, können die Massenbrüche der Elemente Kohlenstoff, Wasserstoff und Sauerstoff im Falle einer Kohlenwasserstoff-Verbrennung nach folgenden Beziehungen bestimmt werden:

$$Z_C = C_{Z,C} [(Z_C + Z_H)_{Br} \cdot f + (Z_C + Z_H)_{Ox} \cdot (1 - f)] , \quad (4.50)$$

$$Z_H = (Z_C + Z_H)_{Br} \cdot f + (Z_C + Z_H)_{Ox} \cdot (1 - f) - Z_C , \quad (4.51)$$

$$Z_O = Z_{O,max} [1 - (Z_C + Z_H)_{Br} \cdot f + (Z_C + Z_H)_{Ox} \cdot (1 - f)] , \quad (4.52)$$

worin die Konstante  $C_{Z,C}$  von der Zusammensetzung des Brennstoffs (Br) gemäß:

$$C_{Z,C} = \nu_{Br}^C \cdot \frac{W_C}{W_{Br}} , \quad (4.53)$$

abhängt. Der Maximalwert des Elementmassenbruchs des Atoms  $O$  ist gleich dem maximalen Sauerstoffmassenbruch und damit durch die Zusammensetzung des Oxidators, im Falle von Luft zu  $Z_{O,max} = 0,233$  bestimmt.

Die Reaktionsfortschrittsvariable hat die Eigenschaft, im Unverbrannten den Wert  $c = 0$  und in vollständig ausgebrannten Mischungen den Wert  $c = 1$  anzunehmen. Zur Veranschaulichung zeigt Abbildung 4.6 schematisch den Verlauf der Speziesmassenbrüche und der Temperatur in Abhängigkeit der Reaktionsfortschrittsvariablen  $c$  für ein adiabates, homogenes System.

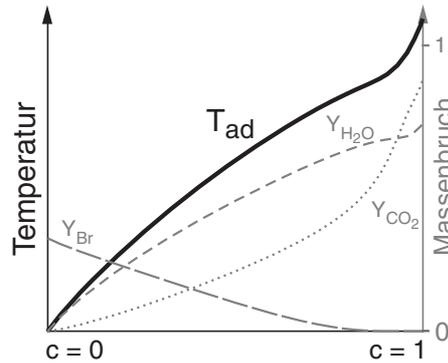


Abbildung 4.6: Zur Veranschaulichung der Reaktionsfortschrittsvariablen

**Transport:** Als skalare Größe betrachtet ist für den Mittelwert  $\tilde{c}$  der Reaktionsfortschrittsvariablen  $c$  folgende Favre-gemittelte Transportgleichung gegeben [147, 54, 71]:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{c})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{c})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \bar{\rho} \mathcal{D} + \frac{\mu_t}{Sc_c} \right) \cdot \frac{\partial \tilde{c}}{\partial x_i} \right) + \bar{w}_c . \quad (4.54)$$

Die Erfassung der Intensität turbulenter Fluktuationen des Reaktionsfortschritts erfolgt anhand der Reaktionsfortschrittsvarianz  $\widetilde{c''^2}$ , für welche die folgende Transportgleichung formuliert werden kann [24, 221, 147, 54, 71]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left( \bar{\rho} \widetilde{c''^2} \right)}{\partial t} + \frac{\partial \left( \bar{\rho} \widetilde{u}_i c''^2 \right)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \bar{\rho} \mathcal{D} + \frac{\mu_t}{Sc_{c''}} \right) \frac{\partial \widetilde{c''^2}}{\partial x_i} \right) \\ &+ C_{c'',1} \frac{\mu_t}{Sc_{c''}} \frac{\partial \widetilde{c}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{c}}{\partial x_i} - 2 \overline{\rho \mathcal{D} \frac{\partial c''}{\partial x_i} \frac{\partial c''}{\partial x_i}} \\ &+ 2 \cdot \overline{\dot{w}_c c''} . \end{aligned} \quad (4.55)$$

Hierin werden der diffusive und konvektive Transport (Term 1 der rechten Seite) sowie die turbulente Produktion (Term 2 der rechten Seite) mittels klassischer Gradientenaustauschansätze modelliert. Der dritte Term der rechten Seite in (4.55) entspricht der skalaren Dissipationsrate der Fluktuationen des Reaktionsfortschritts  $\widetilde{\chi}_c$  und beschreibt analog zur Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie  $\varepsilon$  die turbulente Mikromischung, besitzt damit also die Bedeutung eines Mischungszeitmaßes  $\tau_t$ . Dieses kann über die Zerfallszeit der großskaligen Wirbel abgeschätzt werden:  $\tau_t = k/\varepsilon$ , und ist damit durch das Turbulenzmodell bestimmt [199, 83, 147]:

$$\bar{\rho} \widetilde{\chi}_c = 2 \overline{\rho \mathcal{D} \frac{\partial c''}{\partial x_i} \frac{\partial c''}{\partial x_i}} \propto \bar{\rho} \frac{\widetilde{c''^2}}{\tau_t} = C_{c'',2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{c''^2} . \quad (4.56)$$

Die Modellkonstanten in den Gleichungen (4.54) bis (4.56) sind in Tab. 4.3 zusammengefasst.

$Sc_c$	$Sc_{c''}$	$C_{c'',1}$	$C_{c'',2}$
0,7	0,7	2,8	2,0

Tabelle 4.3: Konstanten der Transportgleichungen der Reaktionsfortschrittsvariablen

In (4.54) und (4.55) treten zwei bislang ungeschlossene Quellterme auf. Hiervon entspricht  $\overline{\dot{w}_c}$  dem mittleren Reaktionsquellterm, der durch die Einführung der Reaktionsfortschrittsvariablen an die Stelle von  $\overline{\dot{w}_k}$  (4.45) tritt. Der Reaktionsquellterm der Reaktionsfortschrittsvarianzgleichung  $\overline{\dot{w}_c c''}$  gibt den Einfluss des chemischen Umsatzes auf die Varianz des Reaktionsfortschritts insofern wieder, dass er auf der dem Frischgemisch zugewandten Seite der Flammenfront, wo die chemische Reaktion die Gradienten der Reaktionsfortschrittsvariablen verstärkt und damit deren Varianz erhöht, als Quellterm, aber rauchgasseitig als Senkenterm wirkt, da der Reaktionsfortschritt dort seinem Gleichgewichtswert entgegenstrebt. Eine ausführliche Diskussion der Abhängigkeiten der beiden Reaktionsquellterme von Mittelwert und Varianz des Reaktionsfortschritts ist in HOFFMANN [71] zu finden. Ihre Schließung wird im Rahmen der Konstruktion der JPDP in Kap. 4.3.4 behandelt.

**Statistische Behandlung:** Die statistische Erfassung aller möglichen Zustände im Reaktionsfortschrittsraum erfolgt in der vorliegenden Arbeit mittels der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $\widetilde{P}_c(c)$ , deren Form als abgeschnittene Gauß'sche Verteilungsdichtefunktion angenommen wird (presumed-PDF). Entsprechend der Ausführungen

in Kap. 4.3.1 ist diese durch ihre beiden Parameter, Mittelwert  $\mu$  und Varianz  $\sigma$ , vollständig definiert, welche wiederum indirekt aus dem ersten Moment  $\tilde{c}$  bzw. dem zweiten zentralen Moment  $\tilde{c}''^2$  der statistisch darzustellenden Reaktionsfortschrittsvariablen bestimmt werden können (s. Kap. 4.3.4). Demzufolge sind alle möglichen Zustände im Reaktionsfortschrittsraum mit der Lösung der Transportgleichungen (4.54) und (4.55) statistisch erfassbar.

### 4.3.3.2 Mischungsbruch

**Definition:** Die Behandlung nicht-vorgemischter Verbrennung erfordert die Charakterisierung der Mischungszusammensetzung. Diese ist, mit den Annahmen, dass die molekularen Diffusionskoeffizienten aller Spezies identisch ( $D_k = \mathcal{D}$ ) und ihre Lewis-Zahlen eins ( $Le_k = 1$ ) sind, eindeutig durch den Mischungsbruch  $f$  bestimmt. Dieser wird in Kap. 2.1.5 definiert. Bei Annahme unendlich schneller Chemie (s. Kap. 2.4.2.2) ist der thermodynamische Zustand eines adiabaten, nicht-vorgemischten Systems alleine als Funktion des Mischungsbruchs  $f$  darstellbar. Schematisch ist dieser Zusammenhang in Abb. 4.7 veranschaulicht.

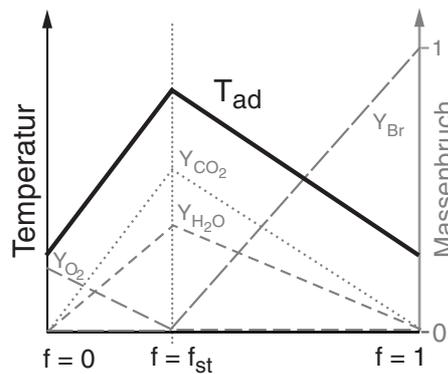


Abbildung 4.7: Thermodynamischer Zustand eines adiabaten, nicht-vorgemischten Systems bei Annahme unendlicher Chemie als Funktion des Mischungsbruchs

**Transport:** Da der Mischungsbruch  $f$  eine skalare, d.h. massegebundene Größe ist, kann aus seiner Bilanzgleichung (2.24), analog zur allgemeinen Transportgleichung skalarer Größen (s. Kap. 4.1.3), unter Verwendung eines Gradientenaustauschansatzes, die quelltermfreie, Favre-gemittelte Transportgleichung für seinen Mittelwert  $\tilde{f}$  abgeleitet werden:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{f})}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{f})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \bar{\rho} \mathcal{D} + \frac{\mu_t}{Sc_f} \right) \cdot \frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_i} \right). \quad (4.57)$$

Hierbei werden Effekte der ‘‘Counter-Gradient’’-Diffusion (s. Kap. 2.4.4.3 und 4.1.3) vernachlässigt.

Zur Erfassung turbulenter Mischungsbruchschwankungen dient die Varianz des Mischungsbruchs  $\tilde{f}''^2$ , für welche im Kontext der hier angestrebten RANS-Simulationen

ebenfalls eine Favre-gemittelte Transportgleichung abgeleitet werden kann<sup>3</sup>:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left( \bar{\rho} \widetilde{f''^2} \right)}{\partial t} + \frac{\partial \left( \bar{\rho} \widetilde{u_i} \widetilde{f''^2} \right)}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \bar{\rho} \mathcal{D} + \frac{\mu_t}{Sc_{f''}} \right) \frac{\partial \widetilde{f''^2}}{\partial x_i} \right) \\ &+ C_{f'',1} \frac{\mu_t}{Sc_{f''}} \frac{\partial \widetilde{f}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{f}}{\partial x_i} \\ &- 2 \bar{\rho} \mathcal{D} \frac{\partial \widetilde{f''}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{f''}}{\partial x_i}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

Wie schon im Fall der Transportgleichung für die Reaktionsfortschrittsvarianz (4.55) werden die turbulenten Transport- und Produktionsterme der rechten Seite von Gleichung (4.58) mittels klassischer Gradientenaustauschansätze modelliert und die skalare Dissipationsrate der Mischungsbruchfluktuationen  $\widetilde{\chi}_f$  durch lineare Relaxation auf das turbulente Mischungszeitmaß  $\tau_t$  bezogen [199, 83, 147]:

$$\bar{\rho} \widetilde{\chi}_f = 2 \bar{\rho} \mathcal{D} \overline{\frac{\partial \widetilde{f''}}{\partial x_i} \frac{\partial \widetilde{f''}}{\partial x_i}} \propto \bar{\rho} \frac{\widetilde{f''^2}}{\tau_t} = C_{f'',2} \bar{\rho} \frac{\varepsilon}{k} \widetilde{f''^2}. \quad (4.59)$$

Die Modellkonstanten in den Gleichungen (4.57) bis (4.59) sind in Tab. 4.4 zusammengefasst.

$Sc_f$	$Sc_{f''}$	$C_{f'',1}$	$C_{f'',2}$
0,7	0,7	2,0	2,0

Tabelle 4.4: Konstanten der Transportgleichungen des Mischungsbruchs

**Statistische Behandlung:** In vollständiger Analogie zur Vorgehensweise im Falle des Reaktionsfortschritts (s. Kap. 4.3.3.1) erfolgt die statistische Erfassung aller möglichen Zustände im Mischungsbruchraum durch eine presumed-PDF  $\widetilde{P}_f(f)$  der Form einer abgeschnittenen Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion (s. Kap. 4.3.1). Deren Parameter  $\mu$  und  $\sigma$  sind mittels des durch (4.57) zugänglichen ersten Moments  $\widetilde{f}$  und des aus (4.58) hervorgehenden zweiten zentralen Moments  $\widetilde{f''^2}$  des Mischungsbruchs bestimmt (s. Kap. 4.3.4).

### 4.3.3.3 Enthalpie-Index

**Definition:** In nicht-adiabaten, thermodynamischen Systemen bedingen Wärmeverluste eine Änderung der Enthalpie und damit der Temperatur. Unter Vernachlässigung von Effekten finiter Chemie ist dieser Sachverhalt in Abb. 4.8 durch Vergleich des realen Temperaturverlaufes mit jenem unter adiabaten Bedingungen im Mischungsbruchraum dargestellt.

<sup>3</sup>Eine ähnliche Ableitung ist in [147] gegeben, jedoch ist dort der Term der molekularen Diffusion vernachlässigt.

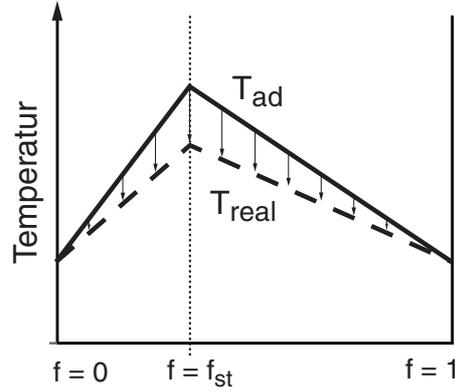


Abbildung 4.8: Einfluss nicht-adiabater Effekte auf die Temperatur

Da die Temperatur zudem mit der lokalen Zusammensetzung variiert, eignet sie sich nicht zur Beschreibung lokaler Wärmeverluste bzw. deren Einflüsse auf die Verbrennungsschemie. Eine Möglichkeit, lokale Wärmeverluste unabhängig von der Stöchiometrie zu erfassen, ist durch den Vergleich des tatsächlichen, massebezogenen Energieinhalts der lokalen Mischung gegenüber dem adiabaten Fall gegeben [58]. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit erfolgt dies durch Einführung des sog. Enthalpie-Index  $h_N$ :

$$h_N = \frac{h - h_{ref}}{h_{ad} - h_{ref}}. \quad (4.60)$$

Hierin ist  $h$  die spezifische Enthalpie der lokalen Mischung nach (2.6) und  $h_{ad}$  die spezifische Enthalpie der lokalen Mischung unter adiabaten Bedingungen. Die Referenzenthalpie  $h_{ref}$  ist als diejenige spezifische Enthalpie definiert, welche die lokale Mischung bei sofortigem Abkühlen auf die niedrigste Temperatur der Randbedingungen des Systems, die Referenztemperatur  $T_{ref}$ , besitzt. Die spezifischen Enthalpien  $h_{ad}$  und  $h_{ref}$  sind ihrerseits nur von der Mischungszusammensetzung abhängig und können daher auf Basis des Mischungsbruchs berechnet werden. Eine Differenzenbildung mit  $h_{ref}$  bietet sich an, um den Enthalpie-Index auf den Wertebereich  $[0, \dots, 1]$  zu beschränken. Aus seiner Definition (4.60) ergibt sich, dass der Enthalpie-Index für adiabate Bedingungen ( $h = h_{ad}$ ) den Wert  $h_N = 1$  annimmt, bei maximal möglichem Wärmeverlust ( $h = h_{ref}$ ) den Wert  $h_N = 0$ .

**Transport:** Prinzipiell lassen sich auch für Mittelwert und Varianz des Enthalpie-Index  $h_N$  Transportgleichungen herleiten. Ansätze hierzu liefern die Arbeiten von HARTICK et al. [64] oder RIBERT et al. [158]. Da die Modellierung der in der Varianztransportgleichung des Enthalpie-Index auftretenden ungeschlossenen Terme mangels unterstützender experimenteller Daten nicht gesichert ist, werden turbulente Fluktuationen des Enthalpie-Index in der vorliegenden Arbeit in erster Näherung vernachlässigt und lediglich dessen Mittelwert  $\widetilde{h_N}$  berücksichtigt. Dieser ist direkt aus der lokalen, spezifischen Enthalpie und dem lokalen Mischungsbruch berechenbar. Somit kann auch auf eine Transportgleichung für  $\widetilde{h_N}$  verzichtet werden, insofern Transportgleichungen für spezifische Enthalpie und Mischungsbruch gelöst werden.

**Statistische Behandlung:** Auf Grund der Vernachlässigung turbulenter Fluktuationen (Varianz) des Enthalpie-Index  $h_N$  wird dieser durch seinen Mittelwert  $\widetilde{h}_N$  repräsentiert. Folglich ist die Form seiner Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $\widetilde{P}_{h_N}(h_N)$  durch eine einfache Dirac-Funktion darstellbar.

#### 4.3.4 Konstruktion der JPDP

Ausgehend von ihrer vollständigen Formulierung, lässt sich die Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $\widetilde{P}_{p,T,Y_k}(p, T, Y_k)$  (s. Kap. 4.3.2) bei Verwendung der in Kap. 4.3.3 beschriebenen stochastischen Variablen: Reaktionsfortschritt  $c$ , Mischungsbruch  $f$  und Enthalpie-Index  $h_N$  sowie der im Rahmen deren Ableitungen getroffenen Annahmen und der Annahme eines isobaren Systems zur JPDP dieser stochastischen Variablen  $\widetilde{P}_{c,f,h_N}(c, f, h_N)$  umformen, wodurch sich die Dimensionalität der JPDP drastisch reduziert.

Da zudem die statistische Unabhängigkeit der gewählten stochastischen Variablen angenommen werden kann, ist die JPDP nach (4.31) als Produkt der PDFs der einzelnen Variablen darstellbar:

$$\widetilde{P}_{c,f,h_N}(c, f, h_N) = \widetilde{P}_c(c) \cdot \widetilde{P}_f(f) \cdot \widetilde{P}_{h_N}(h_N) . \quad (4.61)$$

Damit ergibt sich der ungeschlossene mittlere Reaktionsquellterm  $\overline{\dot{w}_c}$  zu:

$$\overline{\dot{w}_c} = \overline{\varrho} \cdot \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \frac{\dot{w}_c(c, f, h_N)}{\varrho(c, f, h_N)} \cdot \widetilde{P}_c(c) \cdot \widetilde{P}_f(f) \cdot \widetilde{P}_{h_N}(h_N) \, dc \, df \, dh_N , \quad (4.62)$$

und derjenige der Varianzgleichung der Reaktionsfortschrittsvariablen zu:

$$\overline{\dot{w}_c c''} = \overline{\varrho} \cdot \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \frac{\dot{w}_c(c, f, h_N)}{\varrho(c, f, h_N)} \cdot (c - \overline{c}) \cdot \widetilde{P}_c(c) \cdot \widetilde{P}_f(f) \cdot \widetilde{P}_{h_N}(h_N) \, dc \, df \, dh_N , \quad (4.63)$$

wonach die Transportgleichungen der Reaktionsfortschrittsvariablen (4.54) und (4.55) geschlossen sind.

Die zeitlich mittlere Dichte ist entsprechend (4.34) nach:

$$\frac{1}{\overline{\varrho}} = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \frac{1}{\varrho(c, f, h_N)} \cdot \widetilde{P}_c(c) \cdot \widetilde{P}_f(f) \cdot \widetilde{P}_{h_N}(h_N) \, dc \, df \, dh_N , \quad (4.64)$$

berechenbar, beliebige Favre-gemittelte skalare Feldgrößen  $\widetilde{\phi}$ , wie z.B. die Speziesmassenbrüche, wie folgt:

$$\widetilde{\phi} = \int_0^1 \int_0^1 \int_0^1 \phi(c, f, h_N) \cdot \widetilde{P}_c(c) \cdot \widetilde{P}_f(f) \cdot \widetilde{P}_{h_N}(h_N) \, dc \, df \, dh_N . \quad (4.65)$$

Die in (4.61) bis (4.65) auftretenden PDFs  $\widetilde{P}_c(c)$  bzw.  $\widetilde{P}_f(f)$  des Reaktionsfortschritts  $c$  und des Mischungsbruchs  $f$  werden, entsprechend der Ausführungen in Kap. 4.3.3, mittels abgeschnittener Gauß'scher Verteilungsdichtefunktionen dargestellt. Um die folgende Darstellung zu vereinfachen, seien  $c$  und  $f$  durch die skalare Größe  $\phi$  repräsentiert, ihre jeweilige PDF durch  $\widetilde{P}_\phi(\phi)$ . Durch die Beschränkung des Wertebereichs der

Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion auf das Intervall  $[0 : 1]$  sind deren Parameter  $\mu$  bzw.  $\sigma$ , wie Abb. 4.2 verdeutlicht, nicht mit dem ersten Moment  $\tilde{\phi}$  bzw. dem zweiten zentralen Moment  $\tilde{\phi}''^2$  der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion  $\tilde{\mathcal{P}}_\phi(\varphi)$  identisch, sondern nur implizit in (4.35) bzw. (4.36) enthalten und müssen daher mittels numerischer Verfahren für jedes Kontrollvolumen der Strömungssimulation bestimmt werden. Um den damit verbundenen numerischen Aufwand zu umgehen, können die Parameter  $\mu$  und  $\sigma$  nach einem Vorschlag von LOCKWOOD & NAGUIB [108] in einem der Simulation vorausgehenden Schritt als Funktion möglicher  $\tilde{\phi}$  und  $\tilde{\phi}''^2$  berechnet und tabellarisch abgelegt werden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wird neben den PDFs von Reaktionsfortschritt und Mischungsbruch auch der Enthalpie-Index-Raum diskretisiert, sodass die Gleichungen (4.61) bis (4.65) ausgewertet und die daraus hervorgehenden zeitlich mittleren Größen als Funktion von  $\tilde{c}$ ,  $\tilde{c}''^2$ ,  $\tilde{f}$ ,  $\tilde{f}''^2$  und  $\tilde{h}_n$  tabellarisch abgelegt werden können (s. Kap. 5.5.1).

### 4.3.5 Zusammenfassende Bewertung des nicht-adiabaten JPDF-Reaktionsmodells

Das in den vorangehenden Abschnitten beschriebene, nicht-adiabate JPDF-Reaktionsmodell basiert auf drei stochastischen Variablen:

- Reaktionsfortschrittsvariable  $c$ : Erfassung des Reaktionsverlaufes
- Mischungsbruch  $f$ : Erfassung der Mischungszusammensetzung
- Enthalpie-Index  $h_N$ : Erfassung von Wärmeverlusten

Durch als statistisch unabhängig voneinander zu betrachtende stochastische Variablen, deren Wertebereich auf das Intervall  $[0 : 1]$  beschränkt ist, kann ein presumed-JPDF Modell auf Basis abgeschnittener Gauß'scher Verteilungsdichtefunktionen formuliert werden, das lediglich fünf zusätzliche Transportgleichungen zur Beschreibung der Turbulenz/Chemie-Interaktion erforderlich macht. Im Hinblick auf die Untersuchung komplexer Systeme resultiert somit ein numerisch recht kostengünstiges turbulentes Reaktionsmodell, das es ermöglicht, vorgemischte, teil-vorgemischte und nicht-vorgemischte Verbrennungsprozesse zu untersuchen, während sowohl Effekte finiter Chemie als auch Wärmeverluste und deren Einflüsse auf die chemische Reaktionskinetik erfasst werden können.

## 4.4 Die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

Eine chemische Reaktionskinetik ist, entsprechend der Ausführungen in Kap. 2.2, die Summe aller zur Beschreibung der chemischen Stoffumwandlungsprozesse nötigen Elementarreaktionen und dient der mathematischen Abbildung der chemischen Reaktionen des Verbrennungsprozesses. Da die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen ein komplexer Prozess mit zahlreichen Untersystemen ist [210] - so umfassen detaillierte kinetische Ansätze mehrere hundert Elementarreaktionen (z.B. [181]) - finden v. a. im Falle

turbulenter Strömungsprobleme stark vereinfachte kinetische Ansätze, sog. reduzierte Reaktionsmechanismen (z.B. [137, 113]) ihre Anwendung.

Wie in Kap. 4.3 gezeigt wurde, ist eine Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion selbst bei Verwendung eines reduzierten chemischen Reaktionsmechanismus mit einigen wenigen Reaktionsgleichungen (meist zweistellige Anzahl) eine komplexe Funktion einer großen Anzahl statistisch voneinander abhängiger Variablen. Ihre Dimensionalität lässt sich aber drastisch durch einen Reaktionsmechanismus verringern, der den Reaktionsverlauf mittels einer einzigen Reaktionsfortschrittsvariablen beschreibt, wobei zugleich die problematische Handhabung mehrerer statistisch abhängiger Variablen umgangen wird. Hierzu verwendete Globalkinetiken, die von einer Einschrittreaktion, im Falle der Methanverbrennung:



ausgehen, geben zwar Informationen über Flammgeschwindigkeit und Konzentrationsverläufe von Edukten und Produkten der Verbrennung, können aber keine Konzentrationen stabiler intermediärer Spezies, wie z.B.  $\text{H}_2$  oder  $\text{CO}$  vorhersagen, welche wiederum Voraussetzung für Schadstoffmodelle zur Beschreibung von  $\text{NO}_x$ - oder Rußemissionen sind.

Mit dem Ziel, die Oxidation von Kohlenwasserstoffen bei gleichzeitiger Berücksichtigung der stabilen Zwischenprodukte  $\text{CO}$  und  $\text{H}_2$  mit einer einzigen Reaktionsfortschrittsvariablen beschreiben zu können, entwickelte HABISREUTHER [58] die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für die Verbrennung von Methan unter Ausnutzung der darin beobachteten Charakteristik, dass die Konzentrationsverläufe der Hauptspezies eine Einteilung des Verbrennungsprozesses in zwei Bereiche erlauben. HOFFMANN [71] gibt in seiner Arbeit eine ausführliche Ableitung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ausgehend von einer Analyse der asymptotischen Struktur laminarer Vormischflammen nach PETERS & WILLIAMS [143] bzw. BUI-PHAM et al. [29] (s. Kap. 4.4.2) und stellt dabei insbesondere die einfache Übertragbarkeit dieses Konzepts auf unterschiedliche Brennstoffe, v. a. höhere Kohlenwasserstoffe wie Kerosin oder Benzin heraus, für welche bislang kaum ausreichend validierte Reaktionsmechanismen verfügbar seien. Ausführliche Validierung und Anpassung an verschiedene Brennstoffe sowie Vorwärmtemperaturen und Drücke wurden im Rahmen der EU-Forschungsprojekte “Brite-EuRam/Low  $\text{NO}_x$  III” [73] und “Computational Fluid Dynamics for Combustion” (CFD4C) [72] durchgeführt. Die aus dem EU-Forschungsprojekt “Modelling of UnSteady Combustion in Low Emission Systems” (MUSCLES) [215, 217] hervorgehende, speziell an brennstoffarme Bedingungen angepasste Version für das nicht-adiabate JPDF-Reaktionsmodell wird in der vorliegenden Arbeit verwendet. Ihre Darstellung in der vorliegenden Arbeit baut im wesentlichen auf oben genannten Arbeiten auf, die mathematische Beschreibung (Kap. 4.4.4) ist weitestgehend der Arbeit von HOFFMANN [71] entnommen.

Bevor die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik beschrieben wird (Kap. 4.4.3 - Kap. 4.4.4), sollen die sowohl zu ihrer Einbindung in das turbulente Reaktionsmodell als auch zu ihrer Validierung benötigten, idealisierten Reaktorsysteme vorgestellt (Kap. 4.4.1) sowie die ihr zu Grunde liegenden reaktionskinetischen Überlegungen anhand der Methanverbrennung dargelegt (Kap. 4.4.2) werden.

### 4.4.1 Idealisierte Reaktorsysteme

Zur Beurteilung von Reaktionsmechanismen werden bezüglich ihres Transports vereinfachte Modellsysteme verwendet, die sowohl experimentell als auch numerisch untersucht werden können und damit die Validierung eines Reaktionsmechanismus anhand des Vergleichs mit experimentellen Daten erlauben. Die Verwendung eines validierten, detaillierten Reaktionsmechanismus anstelle von experimentellen Daten ermöglicht insbesondere die Validierung reduzierter Reaktionsmechanismen über einen weiten Bereich an Randbedingungen und kinetischen Parametern.

Die wichtigsten dieser Modellsysteme sind der “ideale Rührkesselreaktor”, der “ideale Kolbenströmungsreaktor” und die “eindimensionale, laminare, vorgemischte Flamme”. Zur Berechnung dieser Modellsysteme können die Programme PSR (idealer Rührkesselreaktor), SENKIN (idealer Kolbenströmungsreaktor) [112], PREMIX (eindimensionale, laminare, vorgemischte Flamme) [87] des Programmpakets CHEMKIN II der Sandia National Laboratories herangezogen werden.

Im Folgenden werden Grundzüge und das System definierende Gleichungen beschrieben, zum eingehenden Studium der Programme sei auf ihre Dokumentation [88] verwiesen.

#### 4.4.1.1 Idealer Rührkesselreaktor

Das Modellsystem “idealer Rührkesselreaktor” (PSR: perfectly stirred reactor) beschreibt einen kontinuierlich durchströmten Reaktor, dessen Inhalt jedoch als ideal rückvermischt betrachtet wird, sodass Zusammensetzung und Temperatur im Reaktor ortsunabhängig und gleich der Zusammensetzung bzw. Temperatur im Auslass ist:

$$Y_k = Y_{k,Auslass} , \quad (4.66)$$

$$T = T_{Auslass} . \quad (4.67)$$

Die Problemstellung hat damit nulldimensionalen Charakter. Häufig wird zusätzlich eine stationäre Durchströmung angenommen, wonach die Verweilzeit  $\tau_{PSR}$  im Reaktor nach:

$$\tau_{PSR} = \frac{\rho \cdot V_{PSR}}{\dot{m}} = \frac{V_{PSR}}{\dot{V}} , \quad (4.68)$$

berechnet werden kann. Unter Vernachlässigung von Dichtegradienten ergibt sich die Spezies-Bilanz zu:

$$\dot{m} \cdot (Y_k - Y_{k,Einlass}) = \dot{\omega}_k \cdot W_k \cdot V_{PSR} \quad k = 1, \dots, N_k , \quad (4.69)$$

die Energiebilanz zu:

$$\frac{\rho}{\tau_{PSR}} \cdot \sum_{k=1}^{N_k} (h_{k,Einlass} - h_k) + \sum_{k=1}^{N_k} (h_k \cdot \dot{\omega}_k \cdot W_k) = 0 , \quad (4.70)$$

wobei Wärmeverluste über die Systemgrenzen vernachlässigt sind.

#### 4.4.1.2 Idealer Kolbenströmungsreaktor (homogenes System)

Der ideale Kolbenströmungsreaktor (PFR: plug flow reactor) ist ein in axialer Richtung (Koordinate  $x$ ) kontinuierlich durchströmtes System, dessen Strömung, um radiale Gradienten vernachlässigen zu können, ein möglichst ausgeglichenes (kolbenförmiges) Profil aufweisen muss. Mit der Annahme, dass der diffusive Transport gegenüber dem konvektiven vernachlässigbar ist, ergibt sich eine eindimensionale Problemstellung.

In ortsabhängiger Formulierung lässt sich die Spezies-Bilanz des PFR nach:

$$\varrho \cdot u \cdot \frac{dY_k}{dx} = \dot{\omega}_k \cdot W_k \quad k = 1, \dots, N_k, \quad (4.71)$$

seine Energiebilanz unter Vernachlässigung von Wärmeverlusten über die Systemgrenzen nach:

$$\varrho \cdot c_p \cdot u \cdot \frac{dT}{dx} + \sum_{k=1}^{N_k} (h_k \cdot \dot{\omega}_k \cdot W_k) = 0, \quad (4.72)$$

darstellen.

Mit der Kenntnis des zeitlichen Verlaufes der Strömungsgeschwindigkeit  $u(t) = dx/dt$  können Spezies-Bilanz:

$$\mathcal{L}(Y_k) = \varrho \cdot \frac{dY_k}{dt} = \dot{\omega}_k \cdot W_k \quad k = 1, \dots, N_k, \quad (4.73)$$

und Energiebilanz:

$$\varrho \cdot c_p \cdot \frac{dT}{dt} + \sum_{k=1}^{N_k} (h_k \cdot \dot{\omega}_k \cdot W_k) = 0, \quad (4.74)$$

auch als Funktion der Zeit ausgedrückt werden und beschreiben somit ein homogenes System.  $\mathcal{L}(Y_k)$  ist der Transportoperator des Systems.

In einem abgeschlossenen, homogenen System ist eine Verbrennung von molekularen Transportprozessen wie Diffusion oder Wärmeleitung unabhängig, wonach der Verbrennungsverlauf durch den Reaktionsterm gemäß (4.73) bestimmt ist.

Im Falle einer Einschrittkinetik sind die molaren Produktionsraten der Spezies  $\dot{\omega}_k$  direkt über ihre stöchiometrischen Koeffizienten  $\nu_{k,I}$  mit der Umsatzrate  $q_I$  der Globalreaktion (RI''''') nach  $\dot{\omega}_k = \nu_{k,I} \cdot q_I$  verknüpft, sodass sich (4.73) wie folgt schreiben lässt:

$$\mathcal{L}(Y_k) = \varrho \cdot \frac{dY_k}{dt} = \nu_{k,I} \cdot q_I \cdot W_k \quad k = 1, \dots, N_k. \quad (4.75)$$

#### 4.4.1.3 Eindimensionale, laminare, vorgemischte Flamme (reaktiv-diffusives System)

Im Vergleich zum idealen Kolbenströmungsreaktor ist das Modellsystem der eindimensionalen, laminaren, vorgemischten Flamme durch den Einfluss der Diffusion gekennzeichnet, weshalb dieses System auch als "reaktiv-diffusives System" bezeichnet wird. So gehen neben Stofftransport durch Strömung und Produktion durch chemische Reaktion in die Bilanz der Wärme- und Stoffströme auch diffusive Transportprozesse mit ein, womit zum einen die durch Wärmeleitung und Diffusion bestimmte Vorwärmzone erfasst

werden kann und zum anderen aus dieser Bilanz auch die Ausbreitungsgeschwindigkeit der Flammenfront  $u_{F,l,v}$  hervorgeht.

Im Unterschied zur Formulierung der Spezies-Transportgleichung des homogenen Reaktors (4.73) treten in derjenigen der eindimensionalen, laminaren, vorgemischten Flamme zusätzlich ein Konvektions- und Diffusionsterm auf.

Die Spezies-Transportgleichung im reaktiv-diffusiven System lautet nach WILLIAMS [221] unter stationären Bedingungen:

$$\mathcal{L}(Y_k) = \varrho \cdot u_{F,l,v} \cdot \frac{dY_k}{dx} - \frac{1}{Le_k} \cdot \frac{d}{dx} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{dY_k}{dx} \right) = \dot{\omega}_k \cdot W_k \quad k = 1, \dots, N_k, \quad (4.76)$$

im Falle einer Einschrittkinetik:

$$\mathcal{L}(Y_k) = \varrho \cdot u_{F,l,v} \cdot \frac{dY_k}{dx} - \frac{1}{Le_k} \cdot \frac{d}{dx} \left( \frac{\lambda}{c_p} \frac{dY_k}{dx} \right) = \nu_{k,I} \cdot q_I \cdot W_k \quad k = 1, \dots, N_k. \quad (4.77)$$

#### 4.4.2 Reduzierte Reaktionsmechanismen der Methanverbrennung

Detaillierte chemische Reaktionsmechanismen umfassen eine große Anzahl an Elementarreaktionen, deren Lösung v. a. im Kontext turbulenter Strömungsprobleme ein numerisch sehr aufwändiges Problem darstellt. Zur Lösung dieses Problems wird versucht, vereinfachte Reaktionsmechanismen abzuleiten, welche zwar im Hinblick auf die Simulation die wesentlichen Eigenschaften des Systems, wie Flammengeschwindigkeit oder Zündverzugszeit, wiedergeben, aber mit möglichst wenigen Reaktionsfortschrittsvariablen - bestenfalls einer einzigen - auskommen.

Basis der meisten Reduktionsstrategien ist die Analyse des Verbrennungsvorgangs, mit dem Ziel, den Reaktionsverlauf in Abhängigkeit von verschiedenen Ausgangszuständen zu erfassen. Abb. 4.9 zeigt hierzu das Reaktionsflussdiagramm einer vorgemischten, stöchiometrischen  $\text{CH}_4$ /Luft-Flamme, das außer der Komplexität des Verbrennungsprozesses auch die Dominanz bestimmter Reaktionspfade aufzeigt. Die Dicke der Pfeile ist darin proportional zu den über die Flammenfront integrierten Reaktionsraten.

Aufbauend auf der Reaktionsflussanalyse können vernachlässigbare Elementarreaktionen identifiziert (Sensitivitätsanalysen) und anschließend aus dem detaillierten Mechanismus eliminiert werden. Diese Vorgehensweise ist dadurch motiviert, dass sich die Reaktionsgeschwindigkeiten der Elementarreaktionen über mehrere Größenordnungen erstrecken und die langsamsten Reaktionen geschwindigkeitsbestimmend sind. Die verbleibenden, unabhängigen Reaktionen werden in einem sog. Rumpfmechanismus, wie z.B. in Tab. 4.5, zusammengefasst und schließlich die Anzahl der zu lösenden Differentialgleichungen durch die Annahme der Quasistationarität ausgewählter Spezies oder des partiellen Gleichgewichts ausgewählter Reaktionen (s. Kap. 2.2) weiter reduziert. [143, 211, 142]

#### 4-Schritt Mechanismus

PETERS & WILLIAMS [143] konnten durch systematische Reduktion eines detaillierten  $\text{CH}_4$ -Mechanismus mit Hilfe von Quasistationaritäts- und partiellen Gleichgewichtsanahmen einen Mechanismus gewinnen, der die Verbrennung von  $\text{CH}_4$  in 4 Schritten

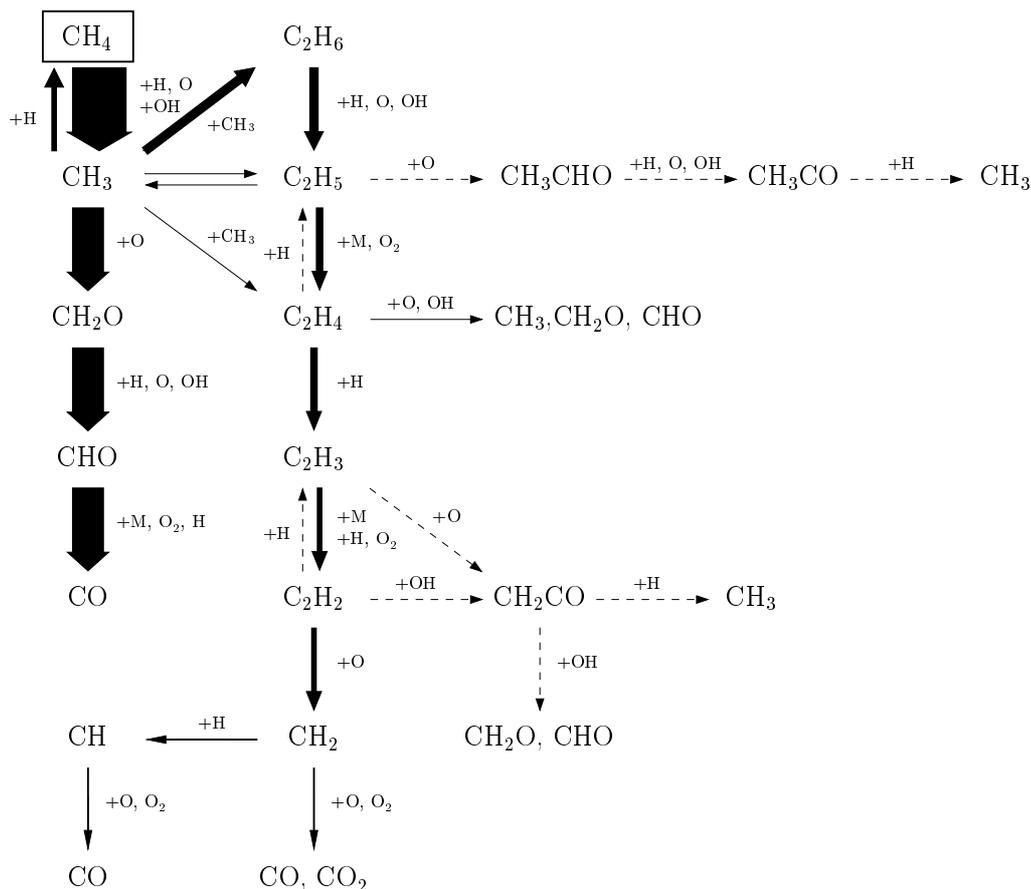


Abbildung 4.9: Reaktionsflussdiagramm der  $\text{CH}_4$ -Oxidation in einer stöchiometrischen  $\text{CH}_4$ /Luft-Flamme (nach WARNATZ [209])

mittels der folgenden Globalreaktionen beschreibt:



Im ersten Schritt (RI\*) reagiert der Brennstoff zu  $\text{CO}$  und  $\text{H}_2$ . Die Wassergas-Shift-Reaktion (RII) (Wassergasgleichgewicht) repräsentiert die Oxidation von  $\text{CO}$  zum Endprodukt  $\text{CO}_2$ , während (RIV) die Produktion von  $\text{H}_2\text{O}$  beschreibt. Kettenabbruchreaktionen werden durch (RIII) erfasst. Da für alle anderen Radikale bzw. Atome ein stationärer Zustand angenommen wird, werden Radikale in diesem Schema nur durch das Wasserstoffatom repräsentiert. Durch Sensitivitätsanalysen oder direkten Vergleich der jeweiligen Elementarreaktionen kann die Bedeutung der geschwindigkeitsbestimmenden Reaktionen des Rumpfmehanismus (s. Tab. 4.5) auf die Reaktionen (RI) - (RIV) analysiert werden, woraus folgende globale Reaktionsraten resultieren [138]:

$$\begin{aligned} q_{\text{I}} &= q_9 + q_{11} + q_{12} \\ q_{\text{II}} &= q_9 \\ q_{\text{III}} &= q_5 - q_9 + q_{16} - q_{18} + q_{19} - q_{21} + q_{23} + q_{24} + q_{25} \\ q_{\text{IV}} &= q_1 + q_6 + q_{18} + q_{21} - q_{23} \end{aligned} \quad (4.78)$$

Nr.	Reaktion		$B_i$ [mol/(cm · s · K)]	$b_i$ [-]	$T_{A,i}$ [K]
R1	H+O2	⇌ OH+O	2,000E-014	0,0	8,45E+003
R2	O+H2	⇌ OH+H	1,800E+010	1,0	4,44E+003
R3	OH+H2	⇌ H2O+H	1,170E+009	1,3	1,82E+003
R4	2OH	⇌ O+H2O	6,000E+008	1,3	0,0
R5	H+O2+M	⇌ HO2+M	2,300E+018	-0,8	0,0
	CH4 -6,500; O2 -0,400; H2O -6,500; CO2 -1,500; H2 -1,000; CO -0,750; N2 -0,400				
R6	H+HO2	⇌ 2OH	1,500E+014	0,0	5,05E+002
R7	H+HO2	⇌ H2+O2	2,500E+013	0,0	3,52E+002
R8	OH+HO2	⇌ H2O+O2	2,000E+013	0,0	5,03E+002
R9	H+CH3(+M)	⇌ CH4(+M)	6.300E+014	0,0	5,23E+004
			1,350E+024	-2,57	7,17E+002
	$\alpha=0,7824; T^{***}=271,0000; T^*=2755,0000; T^{**}=6570,0000$				
R10	CO+OH	⇌ CO2+H	1,510E+017	1,3	-3,81E+002
R11	CH4+H	⇌ CH3+H2	2,200E+004	3,0	4,40E+003
R12	CH4+OH	⇌ CH3+H2O	1,600E+006	2,1	1,24E+003
R13	CH3+O	⇌ CH2O+H	6,800E+013	0,0	0,0
R14	CH2O+H	⇌ HCO+H2	2,500E+013	0,0	2,01E+003
R15	CH2O+OH	⇌ HCO+H2O	3,000E+013	0,0	6,01E+002
R16	HCO+H	⇌ CO+H2	4,000E+013	0,0	0,0
R17	HCO+M	⇌ H+CO+M	1,600E+014	0,0	7,40E+003
R18	CH3+O2	⇌ CH3O+O	7,000E+012	0,0	1,29E+004
R19	CH3O+H	⇌ CH2O+H2	2,000E+013	0,0	0,0
R20	CH3O+M	⇌ CH2O+H+M	2,400E+013	0,0	1,45E+004
R21	2HO2	⇌ H2O2+O2	2,000E+012	0,0	0,0
R22	H2O2+M	⇌ 2OH+M	1,300E+017	0,0	2,29E+004
R23	H2O2+OH	⇌ H2O+HO2	1,000E+013	0,0	9,06E+002
R24	H+OH+M	⇌ H2O+M	2,200E+022	-2,0	0,0
	CH4 -6,500; O2 -0,400; H2O -6,500; CO2 -1,500; H2 -1,000; CO -0,750; N2 -0,400				
R25	2H+M	⇌ H2+M	1,000E+018	-1,0	0,0
	CH4 -6,500; O2 -0,400; H2O -6,500; CO2 -1,500; H2 -1,000; CO -0,750; N2 -0,400				

Tabelle 4.5: Rumpfmechanismus der CH<sub>4</sub>-Oxidation (aus SMOOKE et al.[182])

Hierin beziehen sich die arabischen Ziffern auf die Nummerierung in Tab. 4.5. Mit Einführung des linearen Transportoperators  $\mathcal{L}_k(Y_k)$  beschreibt das gekoppelte Differentialgleichungssystem:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{\text{CH}_4}(Y_{\text{CH}_4}) &= -q_{\text{I}} \\
\mathcal{L}_{\text{O}_2}(Y_{\text{O}_2}) &= -q_{\text{IV}} \\
\mathcal{L}_{\text{H}_2}(Y_{\text{H}_2}) &= 4q_{\text{I}} + q_{\text{II}} + q_{\text{III}} - 3q_{\text{IV}} \\
\mathcal{L}_{\text{CO}}(Y_{\text{CO}}) &= q_{\text{I}} - q_{\text{II}} \\
\mathcal{L}_{\text{H}_2\text{O}}(Y_{\text{H}_2\text{O}}) &= -q_{\text{I}} - q_{\text{II}} + 2q_{\text{III}} \\
\mathcal{L}_{\text{CO}_2}(Y_{\text{CO}_2}) &= q_{\text{II}} \\
\mathcal{L}_{\text{H}}(Y_{\text{H}}) &= -2q_{\text{I}} - 2q_{\text{III}} + 2q_{\text{IV}} ,
\end{aligned} \tag{4.79}$$

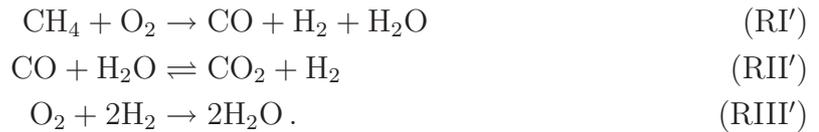
die Änderung der Mischungszusammensetzung im jeweils betrachteten System.

### 3-Schritt Mechanismus

Mit Hilfe der Annahme, dass auch die Wasserstoffatome sich in einem quasistationären Zustand befinden, kann (RIV) aus dem Differentialgleichungssystem (4.79) eliminiert werden [143]:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{L}_{\text{CH}_4}(Y_{\text{CH}_4}) &= -q_{\text{I}} \\
 \mathcal{L}_{\text{O}_2}(Y_{\text{O}_2}) &= -q_{\text{I}} - q_{\text{III}} \\
 \mathcal{L}_{\text{H}_2}(Y_{\text{H}_2}) &= q_{\text{I}} + q_{\text{II}} - 2q_{\text{III}} \\
 \mathcal{L}_{\text{CO}}(Y_{\text{CO}}) &= q_{\text{I}} - q_{\text{II}} \\
 \mathcal{L}_{\text{H}_2\text{O}}(Y_{\text{H}_2\text{O}}) &= q_{\text{I}} - q_{\text{II}} + 2q_{\text{III}} \\
 \mathcal{L}_{\text{CO}_2}(Y_{\text{CO}_2}) &= q_{\text{II}} \\
 \mathcal{L}_{\text{H}}(Y_{\text{H}}) &= -2q_{\text{I}} - 2q_{\text{III}} + 2q_{\text{IV}} = 0 .
 \end{aligned} \tag{4.80}$$

Durch Addition von (RIV) zu (RI\*) und (RIII) verschwindet in diesen die Konzentration des Wasserstoffatoms, sodass folgender Mechanismus verbleibt:



Ist der Brennstoff vollständig verbraucht, gilt  $q_{\text{I}} = 0$ , und die Konzentration der Wasserstoffatome ergibt sich aus:

$$q_{\text{IV}} = q_{\text{III}} . \tag{4.81}$$

Da nun auch die Elementarreaktionen der  $\text{C}_1$ -Kette (R9) und (R11-R20) keine Rolle spielen, ist:

$$q_5 = q_1 + q_6 . \tag{4.82}$$

Unter Annahme partiellen Gleichgewichts für die Reaktionen (R2) und (R3) ergeben sich die Konzentrationen der Radikale OH und O zu:

$$C_{\text{OH}}^{\text{PEQL}} = \frac{C_{\text{H}_2\text{O}}C_{\text{H}}}{K_3C_{\text{H}_2}} = \gamma C_{\text{H}} , \tag{4.83}$$

$$C_{\text{O}}^{\text{PEQL}} = \frac{C_{\text{H}_2\text{O}}C_{\text{H}}^2}{K_2K_3C_{\text{H}_2}^2} = \frac{1}{K_2}\gamma \frac{C_{\text{H}}^2}{C_{\text{H}_2}} , \tag{4.84}$$

diejenige des Hydroxyl-Radikals zu:

$$C_{\text{HO}_2}^{\text{PEQL}} = \frac{k_{5f}C_{\text{M}}C_{\text{O}_2}}{k_6 + k_7 + k_8 + k_9\gamma} . \tag{4.85}$$

Betrachtet man jedoch unter Berücksichtigung der Reaktionen (R1-R4) die Radikale OH und O als quasistationär, lassen sich folgenden Beziehungen ableiten:

$$C_{\text{OH}}^{\text{QSSA}} = \frac{k_{3b}C_{\text{H}_2\text{O}}C_{\text{H}} + k_{1f}C_{\text{H}}C_{\text{O}_2}}{k_{3f}C_{\text{H}_2} + k_{1b}K_4\gamma^2C_{\text{H}}^2/C_{\text{H}_2\text{O}}} , \tag{4.86}$$

$$C_{\text{O}}^{\text{QSSA}} = \frac{k_{1f}C_{\text{O}_2}C_{\text{H}} + (k_{2b}\gamma + k_{4f}\gamma^2)C_{\text{H}}^2}{k_{2f}C_{\text{H}_2} + k_{4b}C_{\text{H}_2\text{O}} + k_{1b}\gamma C_{\text{H}}}, \quad (4.87)$$

und die Wasserstoffkonzentration aus der kubischen Gleichung:

$$C_{\text{H}}^{3,\text{QSSA}}(AB) + C_{\text{H}}^{2,\text{QSSA}}(AC) + C_{\text{H}}^{\text{QSSA}}(D[C - E] - AF) - CF = 0, \quad (4.88)$$

mit den Koeffizienten:

$$A = k_{1b}\gamma \quad (4.89a)$$

$$B = k_{2b}\gamma + k_{4f}\gamma^2 \quad (4.89b)$$

$$C = (k_{5f} - k'_{6f})C_{\text{M}}C_{\text{O}_2} \quad (4.89c)$$

$$D = k_{2f}C_{\text{H}_2} + k_{4b}C_{\text{H}_2\text{O}} \quad (4.89d)$$

$$E = k_{1f}C_{\text{O}_2} \quad (4.89e)$$

$$F = k'_{5b}C_{\text{O}_2}C_{\text{M}}^2. \quad (4.89f)$$

iterativ berechnen [71]. Für die modifizierten Geschwindigkeitskoeffizienten gilt:

$$k'_{5b} = \frac{k_{5f}k_{5b}}{k_6 + k_7 + k_8 + k_9\gamma} \quad (4.90a)$$

$$k'_{6f} = \frac{k_{5f}k_{6f}}{k_6 + k_7 + k_8 + k_9\gamma}. \quad (4.90b)$$

## Asymptotische Analyse der Flammenstruktur - Ableitung eines 2-Schritt Mechanismus

Mit Hilfe des 3-Schritt Mechanismus der  $\text{CH}_4$ -Oxidation lässt sich die Struktur der laminaren, vorgemischten Flamme, dargestellt in Abb. 4.10, 4.11 und diskutiert in Kap. 2.4.2.1, in die charakteristischen Bereiche: Vorwärm-, Reaktions- und Oxidationszone unterteilen [143].

### Reaktionszone

In der Reaktionszone erfolgt der Brennstoffabbau gemäß der Bruttoreaktion (RI') und ist über den Abbau des  $\text{CH}_4$ -Moleküls nach (R11) bestimmt. Die im Rahmen der asymptotischen Betrachtungen getroffene Annahme, dass der Brennstoffabbau sehr viel schneller als die Oxidation der Zwischenprodukte verläuft, d.h. dass die charakteristische Damköhlerzahl<sup>4</sup>  $Da_{\text{I}}$  der Reaktion (RI) viel größer als diejenigen von (RII') und (RIII') ist, repräsentiert eine im Verhältnis zur Oxidationszone viel dünnere Reaktionszone. Die den Brennstoffabbau bestimmende Reaktion (R11) ist durch die Konzentration der H-Atome limitiert, welche sich wiederum aus dem Verhältnis der Reaktionsgeschwindigkeiten von (R11) (Kettenabbruch) zu (R1) (Kettenverzweigung) ergibt, und die Dicke der Reaktionszone  $l_{\delta}$  über den Parameter:

$$\delta = \frac{l_{\delta}}{l_{F,l,v}} = \left( \frac{k_{1f}}{k_{11f}} \frac{Y_{\text{O}_2}}{W_{\text{O}_2}} \right)^0 \frac{W_{\text{CH}_4}}{Y_{\text{CH}_4,u}}, \quad (4.91)$$

bestimmt.

<sup>4</sup>Die Damköhlerzahl ist als Verhältnis von charakteristischem Zeitmaß des konvektiv-diffusiven Transports in der Vorwärmzone  $l_{F,l,v}^0/u_{F,l,v}^0$  zum charakteristischen Zeitmaß der Reaktion  $i$ :  $(\dot{w}_i/\rho)^0$  definiert, wobei die Reaktionsgeschwindigkeit für die Temperatur der Reaktionszone  $T^0$  zu berechnen ist. Das Superskript 0 indiziert Bedingungen in der Reaktionszone.

### Vorwärmzone

Durch die Prämisse, dass der den Brennstoffabbau limitierende Faktor anhand des Mangels an Radikalen festgelegt ist, wird die Vorwärmzone per se als chemisch inert betrachtet.

### Oxidationszone

Die Oxidationszone beschreibt die Oxidation von CO bzw. H<sub>2</sub>, kontrolliert durch (R10) bzw. (R5). Da die Brennstoffkonzentration als verschwindend gering angenommen werden kann, spielen die Elementarreaktionen der C<sub>1</sub>-Kette, (R9) und (R11-R20), sowie die Bruttoreaktion (RI') keine Rolle. Die Struktur dieser Zone wird somit durch die in den Bruttoreaktionen (RII') und (RIII') zusammengefassten Elementarreaktionen (R1-R8) und (R10) dominiert. Durch weitere vereinfachende Annahmen, wie partielles Gleichgewicht der Wassergas-Shift-Reaktion oder Quasistationarität von H<sub>2</sub>, können die beiden Bruttoreaktionen der Oxidationszone (RII') und (RIII') zusammengefasst werden.

**Partielles Gleichgewicht der Wassergas-Shift-Reaktion:** In ihren Arbeiten nehmen PETERS & WILLIAMS [143], SESHADRI & PETERS [176, 177] und BECHTOLD & LAW [12] an, dass sich die Wassergas-Shift-Reaktion (RII) im partiellen Gleichgewicht (Wassergasgleichgewicht) befindet (s. Kap. 2.2). Mit der Beziehung für OH aus der Annahme partiellen Gleichgewichts für die Reaktion (R2) und (R3) (4.83) lässt sich  $q_{II}$  zu:

$$\begin{aligned} q_{II} &= k_{10f} C_{CO} C_{OH} - k_{10b} C_{CO_2} C_H \approx 0 \\ &= \frac{k_{10f}}{K_3} \frac{C_H}{C_{H_2}} \left( C_{CO} C_{H_2O} - \frac{1}{K_{II}} C_{CO_2} C_{H_2} \right) \approx 0, \end{aligned} \quad (4.92)$$

umformen, sodass das Konzentrationsverhältnis der beiden Zwischenprodukte CO und H<sub>2</sub> durch:

$$\alpha = \frac{C_{CO}}{C_{H_2}} = \frac{C_{CO_2}}{C_{H_2O} \cdot K_{II}}, \quad (4.93)$$

gegeben ist und das Differentialgleichungssystem (4.80) durch Elimination der Rate  $q_{II}$  mit Hilfe der Beziehungen:

$$\mathcal{L}_{H_2}(Y_{H_2}) + \mathcal{L}_{CO}(Y_{CO}) = 2q_I - 2q_{III} = \mathcal{L}_{H_2}(Y_{H_2} + \beta \cdot Y_{H_2}), \quad (4.94)$$

$$\mathcal{L}_{H_2}(Y_{H_2}) = \frac{2}{1 + \beta} (q_I - q_{III}) = q_I + q_{II} - 2q_{III}, \quad (4.95)$$

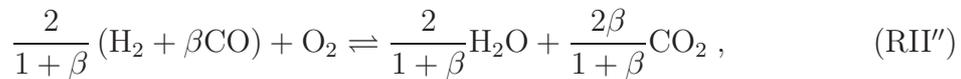
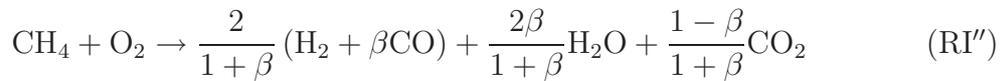
und

$$q_{II} = \frac{1 - \beta}{1 + \beta} \cdot q_I + \frac{2\beta}{1 + \beta} \cdot q_{III}, \quad (4.96)$$

weiter vereinfacht werden kann:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_{\text{CH}_4}(Y_{\text{CH}_4}) &= -q_{\text{I}} \\
\mathcal{L}_{\text{O}_2}(Y_{\text{O}_2}) &= -q_{\text{I}} - q_{\text{III}} \\
\mathcal{L}_{\text{H}_2}(Y_{\text{H}_2}) &= \frac{2}{1+\beta} \cdot q_{\text{I}} - \frac{2}{1+\beta} \cdot q_{\text{III}} \\
\mathcal{L}_{\text{CO}}(Y_{\text{CO}}) &= \frac{2\beta}{1+\beta} \cdot q_{\text{I}} - \frac{2\beta}{1+\beta} \cdot q_{\text{III}} \\
\mathcal{L}_{\text{H}_2\text{O}}(Y_{\text{H}_2\text{O}}) &= \frac{2\beta}{1+\beta} \cdot q_{\text{I}} + \frac{2\beta}{1+\beta} \cdot q_{\text{III}} \\
\mathcal{L}_{\text{CO}_2}(Y_{\text{CO}_2}) &= \frac{1-\beta}{1+\beta} \cdot q_{\text{I}} + \frac{2\beta}{1+\beta} \cdot q_{\text{III}} .
\end{aligned} \tag{4.97}$$

Es ergibt sich folgender 2-Schritt Mechanismus:



worin  $\beta$  neben der Funktion  $\alpha$  auch Informationen über die Transportoperatoren von CO und H<sub>2</sub> beinhaltet [71].

Bezüglich der Flammenstruktur bei Annahme partiellen Gleichgewichts der Wassergas-Shift-Reaktion, dargestellt in Abb. 4.10, gilt:  $Da_{\text{II}} \gg Da_{\text{III}}$ . Die geschwindigkeitsbestimmende Reaktion ist somit durch die als Kettenabbruchreaktion wirkende Reaktion (R5) der Bruttoreaktion (RIII') gegeben. Die Dicke der Oxidationszone kann anhand der Damköhlerzahl  $Da_{\text{III}}$ , welche sich mit Hilfe der Energiegleichung näherungsweise als Temperaturverhältnis darstellen lässt, abgeschätzt werden:

$$\varepsilon = \frac{l_\varepsilon}{l_{F,l,v}} = \left( Da_{\text{III}}^{-1/4} \right)^0 \approx \frac{T_b - T^0}{T_b - T_u} . \tag{4.98}$$

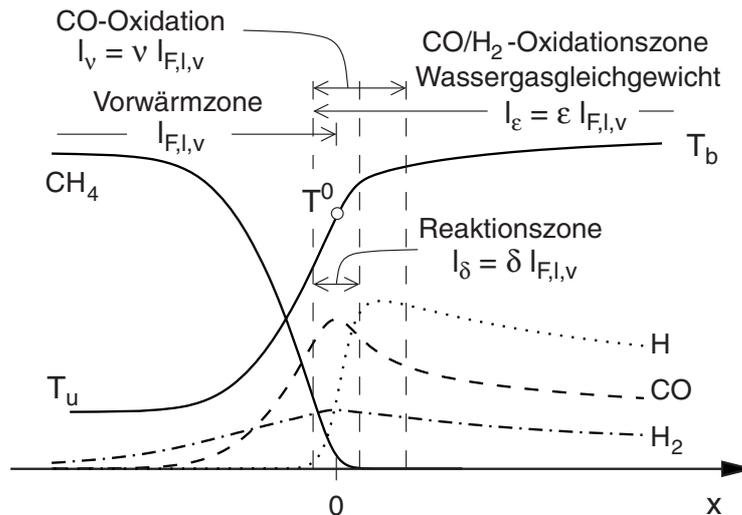


Abbildung 4.10: Struktur einer laminaren, vorgemischten CH<sub>4</sub>/Luft-Flamme unter Annahme partiellen Gleichgewichts der Wassergasreaktion in der Oxidationszone (nach HOFFMANN [71])

In einer schmalen Zone der Größenordnung:

$$\nu = \frac{l_\nu}{l_{F,l,v}} = (1 - \alpha^0) [(1 + \alpha^0) Da_{II}]^{-1/2}, \quad (4.99)$$

verliert die partielle Gleichgewichtsannahme ihre Gültigkeit, sodass die asymptotische Betrachtung in diesem Bereich zu hohe H<sub>2</sub>-Konzentrationen vorhersagt. [71]

**Wasserstoff im quasistationären Zustand:** BUI-PHAM et al. [29] gehen im entgegengesetzten Grenzfall  $Da_{III} \gg Da_{II}$  davon aus, dass sich H<sub>2</sub> in einem quasistationären Zustand befindet (s. Kap. 2.2) und die Umsatzgeschwindigkeit in der Oxidationszone somit durch die CO-Oxidation (langsame CO-Oxidation), folglich durch (R10) bestimmt ist. Diese Annahme ist bis auf eine dünne Zone der Größenordnung:

$$\varepsilon = \frac{l_\varepsilon}{l_{F,l,v}} = \left(Da_{III}^{-2/5}\right)^0 \propto \nu \cdot \frac{Y_{H_2}^0}{W_{H_2}} \frac{W_{CH_4}}{Y_{CH_4,u}}, \quad (4.100)$$

in der die Oxidation des H<sub>2</sub> dominiert, gültig. Hierin ist  $\nu$  die Größendordnung der Oxidationszone und kann anhand der Damköhlerzahl von (RII) zu:

$$\nu = \frac{l_\nu}{l_{F,l,v}} = \left(Da_{II}^{-2/5}\right)^0 \approx \frac{T_b - T^0}{T_b - T_u}, \quad (4.101)$$

bestimmt werden. Die Darstellung der Flammenfronstruktur bei Annahme des quasistationären Zustands von H<sub>2</sub> ist in Abb. 4.11 gegeben.

Wasserstoff im quasistationären Zustand bedeutet für die Oxidationszone, dass gemäß:

$$\dot{\omega}_{H_2} = q_{II} - 2q_{III} \approx 0, \quad (4.102)$$

die Reaktionsraten  $q_{II}$  und  $q_{III}$  von gleicher Größenordnung sind und sich damit durch Elimination der Reaktionsrate  $q_{III}$  aus dem 3-Schritt Mechanismus (s.o.) ein 2-Schritt Mechanismus ableiten lässt:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{CH_4}(Y_{CH_4}) &= -q_I \\ \mathcal{L}_{O_2}(Y_{O_2}) &= \frac{3}{2}q_I - \frac{1}{2}q_{II} \\ \mathcal{L}_{H_2}(Y_{H_2}) &= q_I + q_{II} + q_{III} \\ \mathcal{L}_{CO}(Y_{CO}) &= q_I - q_{II} \\ \mathcal{L}_{H_2O}(Y_{H_2O}) &= 2q_I \\ \mathcal{L}_{CO_2}(Y_{CO_2}) &= q_{II}. \end{aligned} \quad (4.103)$$



Mit Hilfe der aus (4.102) hervorgehenden Beziehung:

$$\begin{aligned} q_{II} &= 2q_{III} \\ &= k_{10f}C_{CO}C_{OH} - k_{10b}C_{CO_2}C_H \\ &= 2k_{5f}C_{O_2}C_H C_M - 2k_{5b}C_{HO_2}C_M, \end{aligned} \quad (4.104)$$

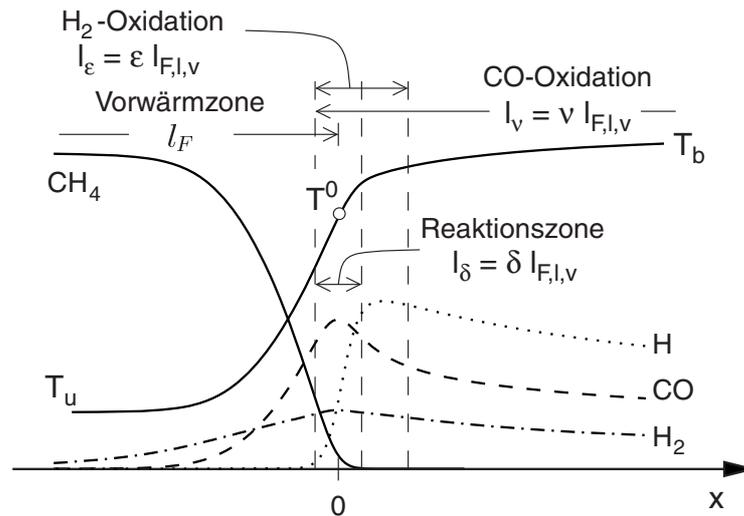


Abbildung 4.11: Struktur einer laminaren, vorgemischten  $\text{CH}_4$ /Luft-Flamme unter Annahme der Quasistationarität für  $\text{H}_2$  in der Oxidationszone (nach BUI-PHAM et al. [29])

sowie der Annahmen, dass (R3) sich im partiellen Gleichgewicht befindet, also (4.83) gilt, und die Rückreaktion (R5b) vernachlässigbar ist, kann die Wasserstoffkonzentration nach:

$$C_{\text{H}_2} = \frac{k_{10f} C_{\text{CO}} C_{\text{H}_2\text{O}}}{K_3 (k_{10b} C_{\text{CO}_2} + 2k_{5f} C_{\text{O}_2} C_{\text{M}})}, \quad (4.105)$$

berechnet werden. [71]

Die vorausgehenden Ausführungen haben gezeigt, dass die asymptotische Analyse der Flammenstruktur es ermöglicht, mittels Quasistationaritäts- und partieller Gleichgewichtsannahmen für die Oxidationszone, einen 2-Schritt Mechanismus abzuleiten, in dessen Vordergrund die Aufteilung der Flammenstruktur in einen Bereich des Brennstoffabbaus und einen Bereich der Oxidation der Zwischenprodukte steht, zu dessen Berechnung aber zwei Reaktionsfortschrittsvariablen benötigt werden, welche nicht als statistisch unabhängig zu betrachten sind.

#### 4.4.3 Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

Ziel der Entwicklung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ist es, die Oxidation von Kohlenwasserstoffen bei gleichzeitiger Berücksichtigung der stabilen Zwischenprodukte  $\text{CO}$  und  $\text{H}_2$  mittels einer einzigen Reaktionsfortschrittsvariablen zu beschreiben. Hierzu wird die bereits im Verlaufe der Diskussion reduzierter Reaktionsmechanismen der  $\text{CH}_4$ -Oxidation (s. Kap. 4.4.2) hervorgehobene Möglichkeit der Einteilung der Flammenstruktur in zwei charakteristische Bereiche ausgenutzt, sodass die wesentliche Annahme der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik die Unterteilung des Verbrennungsverlaufs in eine Brennstoffabbau- und eine Ausbrandzone ist. In jedem dieser beiden Bereiche wird die Verbrennung mittels einer Einschrittreaktion beschrieben.

Im ersten Bereich - der Brennstoffabbauzone - erfolgt die Abbildung des Brennstoffumsatzes durch eine Bruttoreaktion, deren Umsatzrate durch einen erweiterten Arrhenius-Ansatz dargestellt wird. Diese Vorgehensweise macht es zwar erforderlich, Angaben

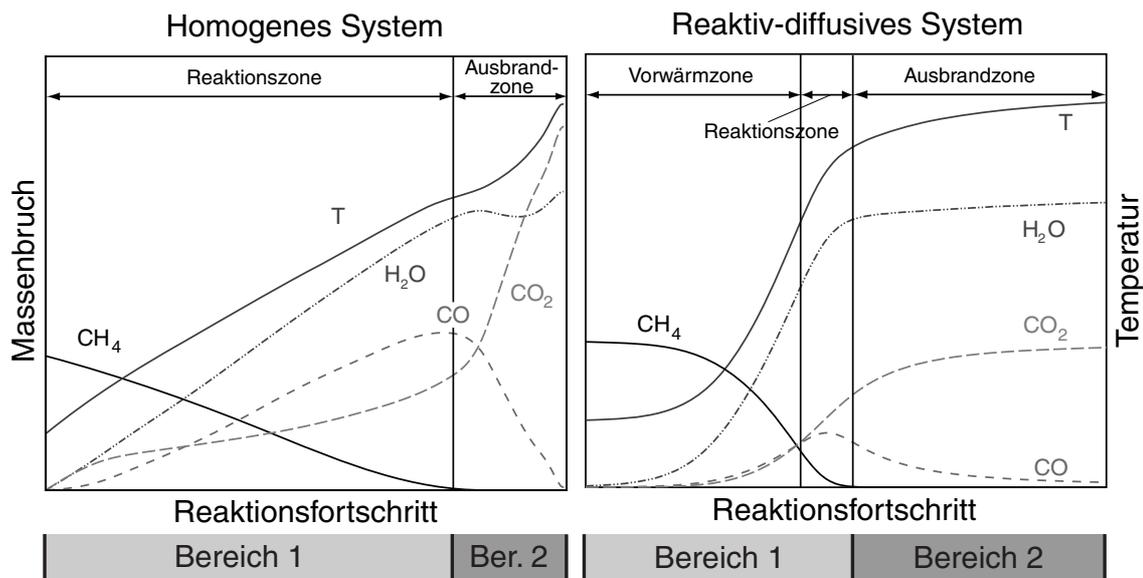


Abbildung 4.12: Zum Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik (nach HOFFMANN [71])

über Frequenzfaktor, Aktivierungstemperatur, Reaktionsordnungen und den stöchiometrischen Koeffizienten des Brennstoffs zu beschaffen, aber ermöglicht eine recht einfache Anwendung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik auf verschiedene Brennstoffe, für welche zumindest Frequenzfaktor und stöchiometrischer Koeffizient anhand gemessener Flammgeschwindigkeiten angepasst werden können. Auf Grund der Abbildung der chemischen Reaktionen mittels einer Bruttoreaktion müssen die Konzentrationen von Atomen und Radikalen nicht berechnet werden.

In der Ausbrandzone, die durch die Abwesenheit des Brennstoffs gekennzeichnet ist, kann die Verbrennungschemie mit Hilfe der Reaktionen (RII'') bzw. (RII''') für die Oxidationszone der in Kap. 4.4.2 vorgestellten Zweischnittmechanismen beschrieben werden, wobei die geschwindigkeitsbestimmenden Reaktionen durch die Elementarreaktionen (R5) und (R10) nach Tab. 4.5 gegeben sind. Im Gegensatz zur Brennstoffabbauzone sind in der Ausbrandzone die Konzentrationen aller Spezies, auch der Radikale, erforderlich, da sie in diesem Bereich die Reaktionsgeschwindigkeit der limitierenden Reaktionen und die adiabate Verbrennungstemperatur bestimmen, lassen sich aber bei Kenntnis der stöchiometrischen Koeffizienten aus der Elementerhaltung als eindeutige Funktion der Reaktionsfortschrittsvariablen berechnen.

Die Anwendung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik auf das homogene und das reaktiv-diffusive System (s. Kap. 4.4.1) ist in Abb. 4.12 anhand der Verläufe von Speziesmassenbrüchen und Temperatur als Funktion der Reaktionsfortschrittsvariablen veranschaulicht. Obwohl diese beiden Systeme durch unterschiedliche Differentialgleichungen beschrieben werden, zeigen sie eine ähnliche charakteristische Struktur auf wodurch eine Aufteilung des Verbrennungsprozesses in zwei Bereiche und damit die Anwendung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ermöglicht wird.

Zur Definition der Reaktionsfortschrittsvariablen kann der Sauerstoffmassenbruch  $Y_{O_2}$ , welcher im Rahmen der Diskussion des nicht-adiabaten JPDF-Reaktionsmodells nach (4.46) in normierter Form Verwendung findet, herangezogen werden, da er über beide Bereiche der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik hinweg einen stetigen Verlauf aufweist.

## 4.4.4 Mathematische Beschreibung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

### 4.4.4.1 Bereich-I: Brennstoffabbau

Durch Annahme partiellen Gleichgewichts der Wassergas-Shift-Reaktion (RII) kann der 3-Schritt Reaktionsmechanismus der  $\text{CH}_4$ -Oxidation zu einem 2-Schritt Mechanismus reduziert werden (s. Kap. 4.4.2). Dessen Bruttoreaktion (RI'') verdeutlicht, dass der Abbau von  $\text{CH}_4$  zur Bildung der Produkte  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{CO}_2$  führt. Diesem Ansatz zufolge sind die stöchiometrischen Koeffizienten aus der Gleichgewichtskonstanten der Wassergas-Shift-Reaktion (RII) zu bestimmen.

Werden demgegenüber die stöchiometrischen Koeffizienten als konstant aber unbekannt angenommen, ist der Brennstoffabbau durch eine Bruttoreaktion der Form:



zu beschreiben. Somit kann der Reaktionsfortschritt mittels einer einzigen Variablen beschrieben werden, während die Geschwindigkeit des chemischen Umsatzes in Bereich-I durch diejenige dieser Bruttoreaktion gegeben ist, insofern ein geschlossener Zusammenhang bezüglich der stöchiometrischen Koeffizienten gefunden wird.

### Globale Reaktionsrate des Brennstoffabbaus

Die Umsatzrate des Brennstoffabbaus nach (RI) wird mit Hilfe eines dem Arrhenius-Ansatz (s. auch (2.30)) ähnlichen Ansatzes berechnet:

$$q_{\text{I}} = B \cdot Y_{\text{Br}}^n \cdot Y_{\text{O}_2}^m \cdot \exp\left(-\frac{T_A}{T}\right) \quad (4.106)$$

Nach HOFFMANN [71] sind die darin auftretenden Reaktionsordnungen des Brennstoffs  $n$  und des Sauerstoffs  $m$  sowie die Aktivierungstemperatur  $T_A = E_A/\mathcal{R}$  von der Art des Brennstoffs abhängig, während der Frequenzfaktor  $B$  zusätzlich als Funktion des Drucks  $p$ , der Vorwärmtemperatur  $T_u$  sowie der Stöchiometrie ( $\lambda$ ) anzugeben sei. Demnach lasse sich der Frequenzfaktor aufbauend auf asymptotischen Analysen von CLAVIN und WILLIAMS [37, 221] für magere Gemische durch:<sup>5</sup>

$$B_{\lambda>1} = B^\circ p^2 \cdot \left(\frac{T^\circ}{T_u}\right)^{3/4} \left(\frac{Y_{\text{Br},u}^{n_1}}{Y_{\text{O}_2,u}}\right)^2 \times \left(\frac{T_A}{T_b}\right)^3 \frac{1}{T_b^3} \left(\frac{T_b}{T_u}\right)^{1/4-2} (T_b - T_u)^{3-2n_2} \exp\left[\left(\frac{T_A}{T_b}\right)\right], \quad (4.107)$$

für fette Gemische durch:

$$B_{\lambda<1} = B^\circ p^2 \cdot \left(\frac{T^\circ}{T_u}\right)^{3/4} \left(\frac{1}{Y_{\text{Br},u}}\right) \times \left(\frac{T_A}{T_b}\right)^2 \frac{1}{T_b^2} \left(\frac{T_b}{T_u}\right)^{1/4} (T_b - T_u)^{2-2n_2} \exp\left[\left(\frac{T_A}{T_b}\right)\right], \quad (4.108)$$

<sup>5</sup>Die Subskripte  $u$  und  $b$  indizieren den unverbrannten bzw. verbrannten Zustand.

und im Bereich nahestöchiometrischer Zusammensetzung mittels der Überlagerung:

$$B = (1/B_{\lambda>1}^{10} + 1/B_{\lambda<1}^{10})^{1/10}, \quad (4.109)$$

darstellen. Die Bestimmung der kinetischen Parameter wird in Kap. 5.6.2 behandelt.

### Stöchiometrische Koeffizienten der Globalreaktion des Brennstoffabbaus

Die Brutto-Brennstoffabbaureaktion (RI) ist im Bereich-I eine Globalreaktion. Somit hängen die Produktionsraten  $\dot{\omega}_k$  aller Spezies  $k$  von ihrer Umsatzrate  $q_I$  ab:

$$\dot{\omega}_k = \nu_{k,I} \cdot q_I. \quad (4.110)$$

Da auf Grund der Elementerhaltung bei Annahme identischer Lewis-Zahlen aller Spezies für die molaren Produktionsraten zudem die Bedingung:

$$\sum_{k=1}^{N_k} \nu_k^j \cdot \dot{\omega}_k = 0, \quad (4.111)$$

gilt, sind lediglich zwei der sechs stöchiometrischen Koeffizienten unabhängig. Durch Wahl der stöchiometrischen Koeffizienten von  $O_2$  und  $H_2O$  als unabhängige Variablen und Festlegen des stöchiometrischen Koeffizienten des Brennstoffs Br zu:

$$\nu_{Br,I} = -1, \quad (4.112)$$

ergeben sich die stöchiometrischen Koeffizienten der verbleibenden Spezies zu:

$$\nu_{H_2,I} = \frac{1}{2} \cdot \nu_{Br}^H \cdot \nu_{Br,I} - \nu_{H_2O,I} \quad (4.113)$$

$$\nu_{CO,I} = 2 \cdot \nu_{O_2,I} + \nu_{H_2O,I} - 2 \cdot \nu_{Br}^C \cdot \nu_{Br,I} \quad (4.114)$$

$$\nu_{CO_2,I} = -\nu_{O_2,I} - \nu_{H_2O,I} - \nu_{Br}^C \cdot \nu_{Br,I}. \quad (4.115)$$

Die bislang unbekanntenen stöchiometrischen Koeffizienten von  $O_2$  und  $H_2O$  können durch Annahme eines homogenen Systems (s. Kap. 4.4.1.2) gewonnen werden. Unter Verwendung von (4.120) sowie der Randbedingung  $Y_{H_2O,u} = 0$  und der am Übergang von Bereich-I zu Bereich-II (Superskript  $z$ ) gültigen Bedingung  $Y_{Br}^Z = 0$  ergibt sich der stöchiometrische Koeffizient von  $H_2O$  zu:

$$\nu_{H_2O,I} = \nu_{Br} \frac{W_{Br}}{W_{H_2O}} \frac{Y_{H_2O}^Z - Y_{H_2O,u}}{Y_{Br}^Z - Y_{Br,u}} = -\nu_{Br,I} \cdot \frac{W_{Br}}{W_{H_2O}} \frac{Y_{H_2O}^Z}{Y_{Br,u}}. \quad (4.116)$$

Da sich der stöchiometrische Koeffizient von  $O_2$  mittels (4.120) wie folgt ausdrücken lässt:

$$\nu_{O_2,I} = \frac{W_{Br}}{W_{O_2}} \frac{Z_O - Y_{O_2}^Z}{(Z_C + Z_H) - Y_{Br}^Z} = \frac{W_{Br}}{W_{O_2}} \frac{\Delta Y_{O_2}}{\Delta Y_{Br}}, \quad (4.117)$$

kann er auf Grund des nahezu linearen Verlaufs von  $Y_{Br}(Y_{O_2})$  im Bereich-I des homogenen Systems durch lineare Regression aus der Steigung  $\Delta Y_{O_2}/\Delta Y_{Br}$  gewonnen werden. Hierzu wird das homogene System (s. Kap. 4.4.1.2) unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen mit Hilfe des Programms SENKIN [112] berechnet und die Steigung  $\Delta Y_{O_2}/\Delta Y_{Br}$  aus der Lösung bestimmt (s. Kap. 5.6.1). Somit ist der stöchiometrische Koeffizient von  $O_2$  als Parameter zu betrachten, der den Reaktionspfad der Brennstoffabbaureaktion beschreibt.

### Spezieskonzentrationen im homogenen System

Die Annahme einer Einschrittkinetik für den Brennstoffabbau führt in einem abgeschlossenen, homogenen System zu einer linearen Abhängigkeit der Massenbrüche reagierender Spezies (s. Abb. 4.12) vom Reaktionsverlauf, die durch (4.75) gegeben ist. Die Kopplung dieser Bilanzgleichungen mit der entsprechenden Bilanzgleichung für die Reaktionsfortschrittsvariable  $Y_{O_2}$  führt mit Hilfe der Transformationsregel:

$$\frac{dY_k}{dt} = \frac{\partial Y_k}{\partial Y_{O_2}} \frac{dY_{O_2}}{dt}, \quad (4.118)$$

zu:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial Y_{O_2}} = \frac{W_k \nu_{k,I}}{W_{O_2} \nu_{O_2,I}}. \quad (4.119)$$

Mit der Anfangsbedingung  $Y_k(t=0) = Y_{k,u}$  ergibt die Integration von (4.119) eine lineare Beziehung für die Abhängigkeit der Speziesmassenbrüche von  $Y_{O_2}$ :

$$Y_k(Y_{O_2}) = Y_{k,u} + (Y_{O_2} - Z_O) \frac{W_k \nu_{k,I}}{W_{O_2} \nu_{O_2,I}}. \quad (4.120)$$

Auf Grund der Elementerhaltung sind die Speziesmassenbrüche im unverbrannten Zustand  $Y_{k,u}$  bekannt, sodass für den Sauerstoff:  $Y_{O_2,u} = Z_O$  und für den Brennstoff:  $Y_{Br,u} = Z_C + Z_H$  gilt.

### Spezieskonzentrationen im reaktiv-diffusiven System

Auf Grund der diffusiven Transportprozesse tritt im reaktiv-diffusiven System, welches eine laminare, vorgemischte Flamme repräsentiert, eine chemisch inerte Vorwärmzone auf. Diese wird dem Bereich-I der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik zugeordnet (s. Abb. 4.12) und ist daher bei der Berechnung der Zusammensetzung in diesem Bereich zu berücksichtigen. Die in Kap. 4.4.1.3 vorgestellte, im Falle einer Einschrittkinetik gültige Spezies-Transportgleichung des reaktiv-diffusiven Systems (4.77) ist durch Einführung der Variablen:

$$\xi = \int_0^x (\rho \cdot u) \frac{c_p}{\lambda} dx \quad (4.121)$$

$$\psi_k = \frac{Y_k}{W_k} \quad (4.122)$$

$$\Omega = \frac{q_I}{(\rho_u \cdot u_{F,l,v})^2 c_p} \lambda, \quad (4.123)$$

folgendermaßen zu formulieren:

$$\frac{d\psi_k}{d\xi} - \frac{1}{Le_k} \frac{d^2\psi_k}{d\xi^2} = \nu_{k,I} \Omega. \quad (4.124)$$

Diese Gleichung kann durch Verwendung der Transformationsregeln:

$$\begin{aligned} \frac{d\psi_k}{d\xi} &= \frac{\partial \psi_k}{\partial \psi_{O_2}} \frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} \\ \frac{d^2\psi_k}{d\xi^2} &= \frac{\partial \psi_k}{\partial \psi_{O_2}} \frac{d^2\psi_{O_2}}{d\xi^2} + \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial \psi_{O_2}^2} \left( \frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} \right)^2, \end{aligned} \quad (4.125)$$

umgeformt werden:

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial \psi_{O_2}} \frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} - \frac{1}{Le_k} \frac{\partial \psi_k}{\partial \psi_{O_2}} \frac{d^2 \psi_{O_2}}{d\xi^2} - \frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial \psi_{O_2}^2} \left( \frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} \right)^2 = \nu_{k,I} \Omega . \quad (4.126)$$

In der Reaktionszone ist der konvektive Transportterm vernachlässigbar ( $d\psi_{O_2}/d\xi \approx 0$ ), wonach sich (4.126) zu:

$$-\frac{1}{Le_k} \frac{\partial \psi_k}{\partial \psi_{O_2}} \frac{d^2 \psi_{O_2}}{d\xi^2} = \nu_{k,I} \Omega , \quad (4.127)$$

bzw.

$$-\frac{1}{Le_{O_2}} \frac{d^2 \psi_{O_2}}{d\xi^2} = \nu_{O_2,I} \Omega , \quad (4.128)$$

vereinfacht. Der unbekannte Quellterm  $\Omega$  kann durch Kombination beider Gleichungen eliminiert werden:

$$\frac{\partial \psi_k}{\partial \psi_{O_2}} = -\frac{\nu_{k,I} Le_k}{\nu_{O_2,I} Le_{O_2}} , \quad (4.129)$$

Mit mit den Randwerten am Übergang von Vorwärm- zu Reaktionszone (Superskript  $x$ ) ergibt sich aus (4.129) durch Integration der Zusammenhang  $\psi_k = (\psi_{O_2})$ :

$$\psi_k = \psi_k^X - \frac{\nu_{k,I} Le_k}{\nu_{O_2,I} Le_{O_2}} (\psi_{O_2} - \psi_{O_2}^X) . \quad (4.130)$$

In der Vorwärmzone kann der Reaktionsterm  $\nu_{k,I} \Omega$  vernachlässigt werden. Somit führt die Subtraktion der dementsprechend modifizierten Gleichungen (4.124) und (4.126) zu:

$$-\frac{1}{Le_k} \frac{\partial^2 \psi_k}{\partial \psi_{O_2}^2} \left( \frac{d\psi_{O_2}}{d\xi} \right)^2 = 0 . \quad (4.131)$$

Mit (4.130) als erster und der Zusammensetzung des Frischgemischs  $\psi_k = \psi_{k,u}$  als zweiter Randbedingung kann (4.131) integriert und nach  $\psi_k$  aufgelöst werden:

$$\psi_k = \psi_{k,u} - \frac{\nu_{k,I} Le_k}{\nu_{O_2,I} Le_{O_2}} (\psi_{O_2} - \psi_{O_2,u}) , \quad (4.132)$$

wonach die Massenbrüche in der Vorwärmzone mit der Reaktionsfortschrittsvariablen verknüpft sind.

Da am Übergang von Vorwärm- zu Reaktionszone die Konzentrationen der Spezies nach (4.132) und (4.130) übereinstimmen müssen, gilt für beide Zonen der gleiche Zusammenhang, der durch (4.132) beschrieben ist, sodass bei bekannten stöchiometrischen Koeffizienten alle Speziesmassenbrüche als Funktion der Reaktionsfortschrittsvariablen darstellbar sind.

#### 4.4.4.2 Bereich-II: CO - H<sub>2</sub> - Ausbrand

Das Hauptmerkmal der Ausbrandzone ist die Abwesenheit des Brennstoffs:  $Y_{Br} = 0$  bzw.  $q_I = 0$ . Als Ausgangspunkt für die Ableitung der Beziehungen in der Ausbrandzone sei der in Kap. 4.4.2 vorgestellte 3-Schritt Reaktionsmechanismus der CH<sub>4</sub>-Oxidation gewählt, während dessen Reduktion zu einem 2-Schritt Mechanismus schon gezeigt werden konnte, dass bei Abwesenheit des Brennstoffs die Verbrennungsschemie durch die

Reaktionen (R1-R8) sowie (R10) kontrolliert wird und diese in den Bruttoreaktionen (RII') bzw. (RIII') zusammengefasst sind. Eine Beschreibung des Reaktionsfortschritts mittels einer einzigen Variablen bedingt damit entweder eine Reduktion dieser beiden Bruttoreaktionen zu einer einzigen Reaktion oder deren Kopplung durch weitere Annahmen. Hierzu bietet es sich an, analog der Ableitung des 2-Schritt Mechanismus, den quasistationären Zustand des  $H_2$  oder partielles Gleichgewicht der Wassergas-Shift-Reaktion anzunehmen.

### Bestimmung der Reaktionsgeschwindigkeit in der Ausbrandzone

Die Reaktionsgeschwindigkeit in der Ausbrandzone hängt von der jeweiligen getroffenen Annahme zur Kopplung der Bruttoreaktionen (RII') bzw. (RIII') ab und kann durch Vergleichen der charakteristischen Umsatzgeschwindigkeiten dieser beiden Reaktionen am Übergang von Bereich-I zu Bereich-II z.B. anhand ihrer Damköhlerzahl (s. Kap. 4.4.2) bestimmt werden.

**Partielles Gleichgewicht der Wassergas-Shift-Reaktion:** Für  $Da_{II} \gg Da_{III}$  kann partielles Gleichgewicht der Wassergas-Shift-Reaktion (RII') angenommen werden. Die für die CO-Oxidation maßgebliche, geschwindigkeitsbestimmende Reaktion ist mit der Kettenabbruchreaktion (R5) nach Tab. 4.5 gegeben. Die Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktionsfortschrittsvariablen  $Y_{O_2}$  ergibt sich zu:

$$\dot{\omega}_{O_2} = -q_{III} , \quad (4.133)$$

worin  $q_{III}$  die globale Reaktionsgeschwindigkeit ist:

$$q_{III} = k_{5f}C_{O_2}C_H C_M - k_{5b}C_{HO_2}C_M . \quad (4.134)$$

**$H_2$  im quasistationären Zustand:** Im umgekehrten Grenzfall  $Da_{III} \gg Da_{II}$  befindet sich  $H_2$  im quasistationären Zustand, sodass die Oxidation des CO durch die Oxidationsreaktion (R10) bestimmt ist. Die Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktionsfortschrittsvariablen  $Y_{O_2}$  ist mit:

$$\dot{\omega}_{O_2} = -q_{III} - q_{II} , \quad (4.135)$$

gegeben, mit der globalen Reaktionsgeschwindigkeit  $q_{II}$  nach:

$$q_{II} = k_{10f}C_{CO}C_{OH} - k_{10b}C_{CO_2}C_H . \quad (4.136)$$

Die Bestimmung der in (4.134) und (4.136) benötigten Konzentrationen der stabilen Spezies sowie der Radikale wird in den folgenden Abschnitten dargelegt.

### Spezieskonzentrationen im homogenen System

In der Ausbrandzone können die Konzentrationen der Verbrennungsprodukte CO,  $CO_2$ ,  $H_2$  und  $H_2O$  mit Hilfe der Erhaltung der Elemente C, H und O sowie der Annahme

partiellen Gleichgewichts der Wassergas-Shift-Reaktion bzw. des quasistationären Zustands von  $\text{H}_2$  bestimmt werden. Hierzu bietet es sich an, durch Einführung der molaren Größen  $\psi_k$  nach (4.122) und  $\zeta_j = Z_j/W_j$  eine molspezifische Formulierung der Elementerhaltung (2.22) einzuführen:

$$\zeta_j = \sum_{k=1}^{N_k} \nu_k^j \psi_k . \quad (4.137)$$

Für Konzentrationen gilt:  $C_k = \rho Y_k/W_k = \rho \psi_k$ .

**Partielles Gleichgewicht der Wassergas-Shift-Reaktion:** Entsprechend obiger Nomenklatur lautet die Annahme partiellen Gleichgewichts für die Wassergas-Shift-Reaktion (s. Kap. 4.4.2) nach (4.93):

$$\frac{\psi_{\text{CO}}}{\psi_{\text{H}_2}} = \frac{\psi_{\text{CO}_2}}{\psi_{\text{H}_2\text{O}}} \frac{1}{K_{\text{II}}} . \quad (4.138)$$

Zusammen mit (4.137) kann aus (4.138) eine quadratische Gleichung für  $\psi_{\text{H}_2}$  abgeleitet werden:

$$a_2 \psi_{\text{H}_2}^2 + a_1 \psi_{\text{H}_2} + a_0 = 0 . \quad (4.139)$$

Die Koeffizienten sind hierbei zu:

$$a_2 = (1 - K_{\text{II}}) , \quad (4.140a)$$

$$a_1 = \left( \zeta_{\text{O}} - 2\psi_{\text{O}_2} - \zeta_{\text{C}} + \frac{1}{2}\zeta_{\text{H}} \right) (1 - K_{\text{II}}) + K_{\text{II}} \left( \zeta_{\text{C}} + \frac{1}{2}\zeta_{\text{H}} \right) , \quad (4.140b)$$

$$a_0 = \left( \zeta_{\text{O}} - 2\psi_{\text{O}_2} - \frac{1}{2}\zeta_{\text{H}} \right) \frac{1}{2}\zeta_{\text{H}} K_{\text{II}} , \quad (4.140c)$$

bestimmt. Die positive Wurzel der Lösung von (4.139) liefert die gesuchte  $\text{H}_2$ -Konzentration. Unter Verwendung der Elementerhaltung (4.137) ergeben sich die Konzentrationen der fehlenden Spezies. Die Berechnung der Spezieskonzentrationen erfolgt iterativ, da die Gleichgewichtskonstante  $K_{\text{II}}$  eine Funktion der Temperatur und somit abhängig von der Zusammensetzung ist.

**$\text{H}_2$  im quasistationären Zustand:** Gemäß der Ausführungen in Kap. 4.4.2 ist die Konzentration von  $\text{H}_2$ , insofern für diesen ein quasistationärer Zustand angenommen werden kann, nach (4.105) unter Vernachlässigung der Rückreaktion (R5b) wie folgt gegeben:

$$\psi_{\text{H}_2} = \frac{k_{10f} \psi_{\text{CO}} \psi_{\text{H}_2\text{O}}}{K_3 (k_{10b} \psi_{\text{CO}_2} + 2k_{5f} \psi_{\text{O}_2} C_{\text{M}})} . \quad (4.141)$$

Gekoppelt mit der Elementerhaltung (4.137) kann aus (4.141) eine quadratische Gleichung für  $\psi_{\text{CO}}$  abgeleitet werden:

$$b_2 \psi_{\text{CO}}^2 + b_1 \psi_{\text{CO}} + b_0 = 0 , \quad (4.142)$$

deren Koeffizienten durch:

$$b_2 = k_{10f} - K_3 k_{10b} \quad (4.143a)$$

$$b_1 = -\zeta_O + 2\psi_{O_2} + \zeta_C (2 + K_3 k_{10b}) + \frac{1}{2} \zeta_H (1 - k_{10f}) - 2K_3 k_{5f} C_M \psi_{O_2} \quad (4.143b)$$

$$b_0 = \left( -\zeta_O + 2\psi_{O_2} + 2\zeta_C + \frac{1}{2} \zeta_H \right) (K_3 k_{10b} \zeta_C + 2K_3 k_{5f} C_M \psi_{O_2}) , \quad (4.143c)$$

gegeben sind. Gleichung (4.142) besitzt zwei Lösungen, von denen nur jene mit der positiven Wurzel sinnvoll ist. Die restlichen Spezieskonzentrationen ergeben sich aus der Elementerhaltung (4.137). Auch hier ist wegen der Temperaturabhängigkeit der Gleichgewichts- und Geschwindigkeitskonstanten eine äußere Iteration nötig.

### Spezieskonzentrationen im reaktiv-diffusiven System

Die Konzentrationen der Spezies in Ausbrandzone können für das reaktiv-diffusive System mit den Gleichungen für das homogene System gelöst werden, wobei jedoch - wegen der zunehmenden Bedeutung der unterschiedlichen Diffusivität der Spezies (v. a. H<sub>2</sub>) - die Speziesmolenbrüche mit der Lewis-Zahl gebildet werden sollten:

$$\psi_k = \frac{Y_k}{W_k} \frac{1}{Le_k} . \quad (4.144)$$

### Bestimmung der Radikalkonzentrationen

Im Gegensatz zur Brennstoffabbauzone werden in der Ausbrandzone die Konzentrationen der Atome H und O sowie der Radikale OH und HO<sub>2</sub> benötigt. Diejenigen des Sauerstoffatoms und der Radikale OH und HO<sub>2</sub> können unter der Annahme, dass sich diese Spezies in einem quasistationären Zustand befinden, aus den Gleichungen (4.85) bis (4.87) bestimmt werden, insofern die Konzentration des Wasserstoffatoms bekannt ist. Die Konzentration des ebenfalls als quasistationär betrachteten Wasserstoffatoms ergibt sich aus der Lösung der kubischen Gleichung (4.88).

Nahe des Übergangs von Bereich-I zu Bereich-II verliert die Quasistationaritätsannahme für H, O, OH und HO<sub>2</sub> ihre Gültigkeit, weil die Reaktionen dieser Spezies in der Brennstoffabbauzone vernachlässigt werden. Da die Konzentrationen der Spezies O, OH und HO<sub>2</sub> von derjenigen des Wasserstoffatoms abhängen, reicht eine Korrektur von dessen Konzentration aus. Hierzu wird aus dem Vergleich der Kettenverzweigungsreaktion (R1) mit den Kettenfortpflanzungsreaktionen (R5) und (R11) die Funktion  $\Phi$  abgeleitet [143]:

$$\Phi = 1 - \frac{k_{5f}}{k_{1f}} - \frac{k_{11f}}{k_{1f}} \frac{\psi_{Br}}{\psi_{O_2}} , \quad (4.145)$$

welche im Bereich der chemisch inerten Vorwärmzone negativ ist, mit abnehmender Brennstoffkonzentration positive Werte annimmt und sich in der Ausbrandzone dem Wert eins schnell annähert. Mit Hilfe der Funktion  $\Phi$  kann die aus (4.88) hervorgehende Wasserstoffkonzentration  $\psi_H^{QSSA}$  nach:

$$\psi_H = \psi_H^{QSSA} \sqrt{\max(0, \Phi)} \cdot \mathcal{T} , \quad (4.146)$$

korrigiert werden. Wegen der Unstetigkeit der ersten Ableitung von  $\psi_H$  für  $\Phi = 0$  wird die Glättungsfunktion  $\mathcal{T}$  eingeführt:

$$\mathcal{T} = \frac{1}{1 + \exp(-(T - T^Z)/\Delta T)}, \quad (4.147)$$

worin  $T^Z$  die mit Hilfe der Randbedingung  $Y_{Br}^Z = 0$  zu bestimmende Temperatur am Übergang von Reaktions- zu Ausbrandzone und  $\Delta T$  die Breite der Glättungsfunktion ist, die zu  $\Delta T = 50K$  gesetzt werden kann. Zur Verdeutlichung sind in Abb. 4.13 für den Fall eines homogenen Systems die Verläufe der unkorrigierten  $Y_H^{QSSA}$ , korrigierten  $Y_H^{QSSA} \sqrt{\max(0, \Phi)}$  und geglätteten  $Y_H = Y_H^{QSSA} \sqrt{\max(0, \Phi)} \cdot \mathcal{T}$  Wasserstoffatomkonzentration derjenigen mittels eines detaillierten chemischen Mechanismus berechneten gegenübergestellt. [71]

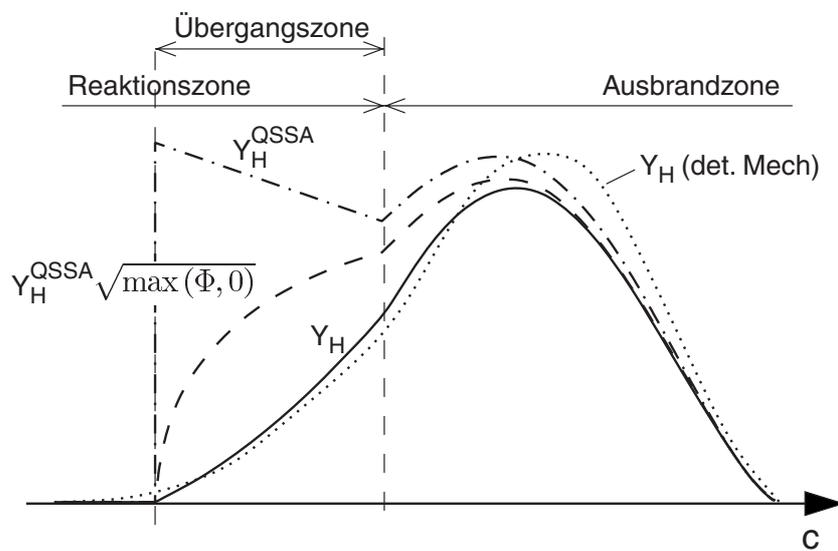


Abbildung 4.13: Zur Verbesserung der Vorhersagequalität der Wasserstoffatomkonzentration (aus HOFFMANN [71])



## Kapitel 5

# Untersuchtes System und numerisches Setup

Als Modellsystem für die angestrebten numerischen Untersuchungen zur Stabilität nicht-vorgemischter Drallflammen dient die von MERKLE [123] entwickelte und sowohl von HAESSLER [60] als auch MERKLE et al. [125, 124, 123, 126] experimentell untersuchte Düsen/Brennkammer-Konfiguration, deren Geometrie in Kap. 5.1 vorgestellt wird. Kapitel 5.2 befasst sich mit der experimentellen Datenbasis und den angewendeten Messverfahren. Nach einer kurzen Diskussion der Charakteristika des Systems (Kap. 5.3) und des experimentellen Befunds wird in Kap. 5.4 die numerische Vorgehensweise dargelegt, in Kap. 5.5 die Integration des nicht-adiabaten JPDPF Reaktionsmodells in den verwendeten CFD-Code behandelt. Kapitel 5.7 ist schließlich einigen nützlichen Hilfsmitteln zur Analyse der Simulationsergebnisse gewidmet.

### 5.1 Geometrie und Kenngrößen

#### 5.1.1 Geometrie

Das den durchgeführten Rechnungen als Vorlage dienende, atmosphärische Verbrennungssystem besteht im wesentlichen aus den in Abb. 5.1 dargestellten Elementen: Doppeldralldüse, Düsenstock und Brennkammer.

Die zylindrische Brennkammer (Innendurchmesser:  $D_{CC} = 100 \text{ mm}$ , Länge:  $L_{CC} = 440 \text{ mm}$ ) ist gegen Wärmeverluste mit einer wärmedämmenden Auskleidung isoliert, ihr außen liegender Stahlmantel wassergekühlt. In axialer Richtung gliedert sich die Brennkammer in vier Segmente. Die beiden unteren enthalten Zugänge für optische und Sondenmesstechnik und können zur Vermessung verschiedener Bereiche axialer Ebenen gegeneinander ausgetauscht werden. Darüber folgen ein Ausbrandsegment sowie der ringförmige Brennkammerauslass, dessen zentrale Versperrung ein Einsaugen von Umgebungsluft auf Grund des axialen Unterdrucks der rotierenden Strömung verhindern soll.

Der Düsenstock dient der Aufnahme der Doppeldralldüse, bildet folglich zusammen mit dieser den Brenner des Systems und mündet in das untere Ende der Brennkammer. Während der Brennstoff über eine zentrale Lanze zur Doppeldralldüse transportiert wird, wird die Verbrennungsluft über zwei, durch eine Scheidewand voneinander getrennte, konzentrische Ringspalte der luftseitig zweiflutigen Doppeldralldüse zugeführt, wodurch eine unabhängige Regelung der beiden vorheizbaren Luftvolumenströme gewährleistet ist. Zur Einstellung verschiedener axialer Messebenen kann der Düsenstock

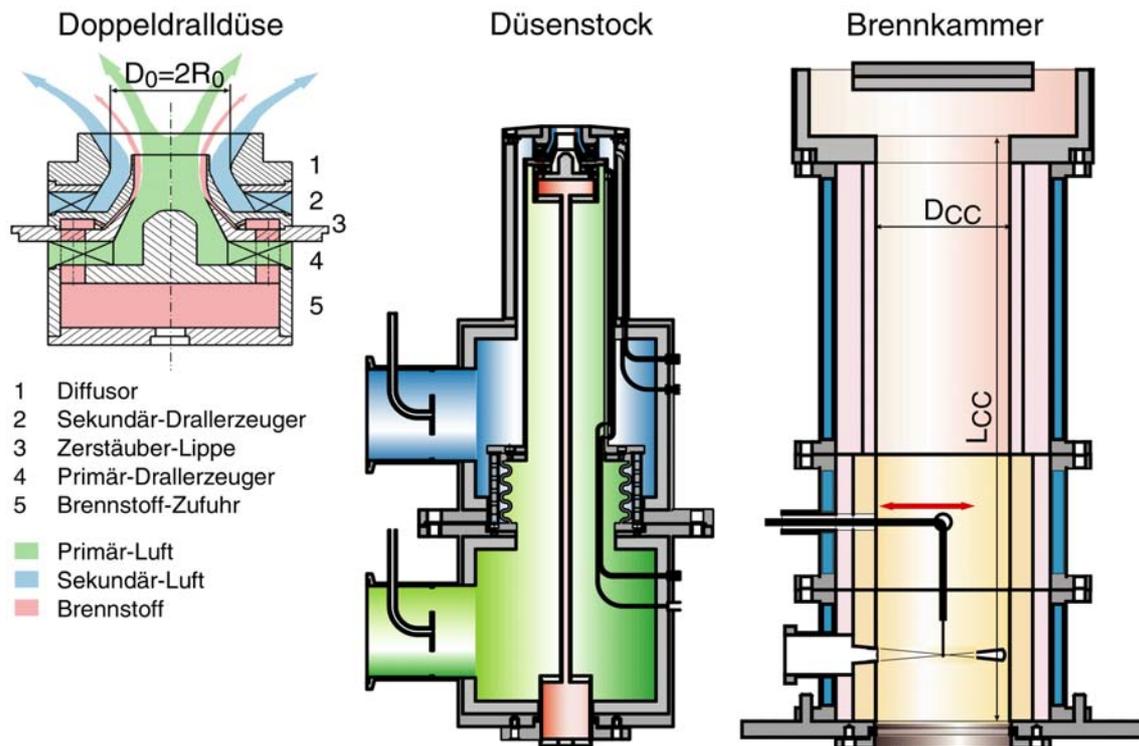


Abbildung 5.1: Doppeldralldüse, Düsenstock und Brennkammer des untersuchten Systems (nach Merkle [123])

über eine Länge von  $150\text{ mm}$  in die Brennkammer eingefahren werden.

Die Düsenkonstruktion ist ein Derivat der in Fluggasturbinen eingesetzten, mit Kerosin betriebenen Airblast-Zerstäuber-Düsen. Deren Konzept ist die Erzeugung eines flüssigen Brennstofffilms durch Aufsprühen des Kerosins mittels eines Druckdrallzerstäubers auf die Innenseite der Zerstäuberlippe, gefolgt von dessen durch den Primärluftstrom angetriebenem Transport zur Vorderkante der Zerstäuberlippe und schließlich der Zerfall des Brennstofffilms in feine Tröpfchen im Schergebiet zwischen Primär- und Sekundärluftstrom. Die Brennstofftröpfchen werden konvektiv vom Strömungsfeld in die Brennkammer eingetragen, zumindest teilweise verdampft und bilden nach Einmischung in die Verbrennungsluft mit dieser das zündfähige Gemisch. Mit dem Ziel der von den komplexen Prozessen der Zerstäubung und Verdampfung isolierten Untersuchung der aerodynamischen Einflüsse auf das Stabilisierungsverhalten dieses Verbrennungssystems entwickelte MERKLE [123] eine Gasfilmdüse in Anlehnung an das Airblast-Zerstäuber-Düsen-Konzept. Hierbei ist der Druckdrallzerstäuber durch einen Dummy ersetzt, um die Geometrie des Primärluftkanals nicht zu ändern; der gasförmige Brennstoff (Methan, in Abb. 5.1 rot eingefärbt) wird über einen Ringspalt auf die Zerstäuberlippe aufgebracht. Luftseitig wird die Doppeldralldüse mit zwei radialen Drallerzeugern (s. Abb. 5.2) betrieben. Der Austausch des Sekundärdrallerzeugers durch ein spiegelbildliches Bauteil ermöglicht sowohl die gleich- (GLD) als auch gegensinnige (GGD) Verdrallung von Primärluftstrom (in Abb. 5.1 grün eingefärbt) und Sekundärluftstrom (in Abb. 5.1 blau eingefärbt), die stromab der Drallerzeuger durch die Zerstäuberlippe voneinander getrennt werden und erst nach deren Vorderkante aufeinander treffen. Stromab des Sekundärdrallerzeugers befindet sich ein Diffusor mit

einem Öffnungswinkel von  $30^\circ$  und einem Halsradius von  $R_0 = 12,5 \text{ mm}$ .

### 5.1.2 Kenngrößen

**Drallzahl der Doppeldralldüse:** Die für die Doppeldralldüse charakteristischen, theoretischen Drallzahlen von Primär- ( $S_{0,th,pri}$ ) und Sekundärdrallerzeuger ( $S_{0,th,sek}$ ) sowie die Gesamtdrallzahl ( $S_{0,th,ges}$ ) werden in Analogie zur Arbeit von MERKLE [123], der auch die nachfolgende Ableitung entnommen ist, definiert. Demnach können die zur Berechnung der theoretischen Drallzahlen (s. Gl. (2.67)) benötigten Drehimpuls- ( $\dot{D}_0$ ) und Axialimpulsströme ( $\dot{I}_0$ ) aus den Geometriedaten der Drallerzeuger und dem durchgesetzten Massenstrom ( $\dot{M}$ ) berechnet werden:

$$\dot{D}_0 = \frac{\dot{M}^2}{\rho \cdot n \cdot B \cdot H} \cdot R_1 \cdot \sin(\alpha) , \quad (5.1)$$

$$\dot{I}_0 = \frac{\dot{M}^2}{\rho \pi \cdot (R_a^2 - R_i^2)} , \quad (5.2)$$

wobei die Anzahl ( $n$ ), Breite ( $B$ ), Höhe ( $H$ ) und Exzentrizität ( $R_1 \cdot \sin(\alpha)$ ) der Lufteinlaufkanäle in Abb. 5.2 erläutert sind und  $R_a$  und  $R_i$  für den Außen- bzw. Innenradius (letzterer z.B. durch einen zentralen Versperrungskörper gebildet) der jeweiligen Düse bezeichnen. Als Normierungsradius dient der Diffusor-Halsradius  $R_0$ . Die theoretische

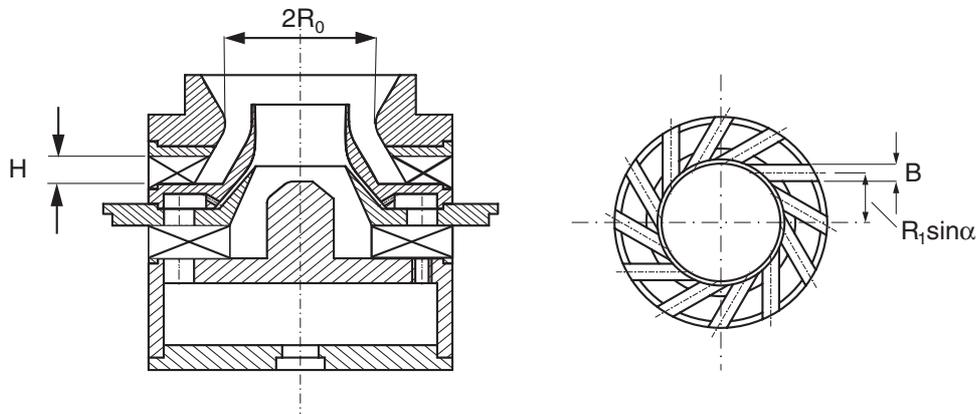


Abbildung 5.2: Normierungsradius und geometrische Daten des Drallerzeugers zur Bestimmung der Drallzahl (aus MERKLE [123])

Gesamtdrallzahl der Doppeldralldüse berechnet sich nach MERKLE [123] durch Addition der Einzelimpulsströme gemäß:

$$S_{0,th,ges} = \frac{\dot{D}_{0,pri} + \dot{D}_{0,sek}}{R_0 \cdot (\dot{I}_{0,pri} + \dot{I}_{0,sek})} . \quad (5.3)$$

Die Werte der Drallzahlen der untersuchten Doppeldralldüse sind in Tab. 5.1 gelistet.

	$S_{0,th,pri}$ [-]	$S_{0,th,sek}$ [-]	$S_{0,th,ges}$ [-]	$x_{pri}$ [-]
Gleichdrall (GLD)	0,46	1,0	0,81	0,37
Gegendrall (GGD)	0,46	-1,0	-0,48	0,37

Tabelle 5.1: Drallzahlen und Luftmassenstromverhältnis der untersuchten Doppeldralldüse

**Verhältnis der Luftmassenströme:** In realen Flugtriebwerken werden die beiden Drallkanäle der Doppeldralldüse aus einem gemeinsamen Plenum versorgt, wodurch sich das Verhältnis von Primär- zu Sekundärluftstrom derart einstellt, dass der Druckverlust über beide Kanäle gleich groß ist. In den experimentellen Untersuchungen [123, 60] erfolgte die Zufuhr der Primär- und Sekundärluft über getrennte Kanäle, um das Volumenstromverhältnis bei ebenfalls gleichem Druckverlust vorgeben zu können und damit auch die Volumen-/Massenströme durch Primär- und Sekundärdrallerzeuger zu kennen. Tabelle 5.1 enthält hierzu das Verhältnis von Primärluftmassenstrom zu Gesamtluftmassenstrom:

$$x_{pri} = \frac{\dot{M}_{L,pri}}{\dot{M}_{L,ges}}. \quad (5.4)$$

## 5.2 Experimentelle Datenbasis

Die als Vergleichsbasis zu Grunde liegenden Messdaten sind den Arbeiten von HAESSLER [60] und MERKLE [123] entnommen. Hierdurch stehen detaillierte Daten isothermer und reagierender Drallströmungen in Form von Strömungs-, Mischungs- und Temperaturfeldern der in Kap. 5.1 beschriebenen Anlage bei verschiedenen Betriebsbedingungen zur Verfügung.

### 5.2.1 Messtechnik und ermittelte Größen

Die konditionierte Messung der drei Geschwindigkeitskomponenten erfolgte mittels 3-Farben Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) in 30° Vorwärtsstreuungs-Anordnung. Aus den auf diese Weise erhaltenen, zeitlich diskontinuierlichen Signalen wurden die Mittelwerte der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten  $\bar{u}_i$  sowie die zentralen Momente  $\overline{u_i'^2}$  und  $\overline{u_i' u_j'}$  durch Mittelung über eine hinreichend große Anzahl diskreter Einzelwerte berechnet.

Zur Bestimmung des isothermen Mischungsfeldes wurde auch in den isothermen, experimentellen Untersuchungen der Brennstoff, Methan zugeführt, die Methan-Konzentrationsverteilung mittels einer Absaugsonde (Außendurchmesser: 1 mm) und anschließender Gasanalyse nach dem Prinzip der Infrarot-Absorption bestimmt. Im reagierenden Fall erfolgte die Konzentrationsmessung mit Hilfe einer wassergekühlten Absaugsonde (Außendurchmesser: 3 mm) und anschließender Gasanalyse. Die gemessenen Spezies umfassten die Gemischkomponenten Methan (CH<sub>4</sub>) und Sauerstoff (O<sub>2</sub>), die Abgaskomponente Kohlendioxid (CO<sub>2</sub>) und sowie die intermediären Spezies Wasserstoff (H<sub>2</sub>) und Kohlenmonoxid (CO); die Wasserdampf-Konzentration (H<sub>2</sub>O) wurde aus einer Elementbilanz bezüglich Kohlenstoff und Wasserstoff berechnet.

Die Feldverteilung der zeitlich mittleren Temperatur ermittelte MERKLE [123] mit Hilfe eines Platin-Platin/Rhodium-Thermoelements.

## 5.2.2 Betriebsparameter

Die Betriebsparameter der im weiteren Verlauf dieser Arbeit behandelten, experimentell untersuchten Konfigurationen sind in Tab. 5.2 zusammengefasst. Darin bezieht sich die in der zweiten Spalte aufgelistete Art der Verdrallung auf die in Kap. 5.1.2 beschriebene Gleich- bzw. Gegendrallanordnung der Doppeldralldüse. Die zugehörigen Drallzahlen und Massenstromaufteilungen können Tab. 5.1 entnommen werden, da diese für alle betrachteten Konfigurationen konstant gehalten wurden. Desweiteren bezeichnet in Tab. 5.2  $P_{th}$  die thermische Leistung, aus der sich der auch im isothermen Fall durchgesetzte Brennstoffmassenstrom  $\dot{M}_{CH_4}$  bei Kenntnis dessen Heizwertes ( $H_{u,CH_4} = 35900 \text{ kJ/m}_N^3$ ) und Normdichte  $\varrho_{CH_4,N} = 0,7168 \text{ kg/m}_N^3$  errechnen lässt:

$$\dot{M}_{CH_4} = \frac{P_{th}}{H_{u,CH_4}} \cdot \varrho_{CH_4,N} \cdot \quad (5.5)$$

Mit der globalen Luftzahl  $\lambda_{glob}$ , der Dichte von Luft bei Normalbedingungen  $\varrho_{L,N} = 1,2929 \text{ kg/m}_N^3$  und dem minimalen Luftbedarf  $l_{min} = 9,546$  ist der Gesamtluftmassenstrom  $\dot{M}_{L,ges}$  definiert:

$$\dot{M}_{L,ges} = \frac{\varrho_{L,N}}{\varrho_{CH_4,N}} \cdot \dot{M}_{CH_4} \cdot \lambda_{glob} \cdot l_{min} \cdot \quad (5.6)$$

Aus diesem ergibt sich unter Verwendung des Primärluftmassenstromverhältnisses (5.4) der Primärluftmassenstrom:

$$\dot{M}_{L,pri} = \dot{M}_{L,ges} \cdot x_{pri} \ , \quad (5.7)$$

sowie der Sekundärluftmassenstrom:

$$\dot{M}_{L,sek} = \dot{M}_{L,ges} - \dot{M}_{L,pri} \ . \quad (5.8)$$

$T_{vor}$  steht in Tab. 5.2 schließlich für die Vorwärmtemperatur der Luftströme.

	Verdrallung	$P_{th}$ [kW]	$\lambda_{glob}$ [-]	$T_{vor}$ [K]	$u_0$ [m/s]
isotherm	GLD	29,0	2,0	323,0	45,169
isotherm	GGD	29,0	2,0	323,0	45,169
reaktiv	GLD	10,0	1,75	373,0	13,725
reaktiv	GLD	15,0	1,75	373,0	20,588
reaktiv	GGD	15,0	1,75	373,0	20,588
reaktiv	GGD	29,0	1,75	373,0	39,804

Tabelle 5.2: Betriebsparameter der im Detail untersuchten Konfigurationen

Zur besseren Vergleichbarkeit mit den Ergebnissen der Arbeit von MERKLE [123] sowie der verschiedenen Konfigurationen untereinander werden im Ergebnisteil dieser Arbeit (s. Kap. 6) einige Größen normiert dargestellt. Als Normierungsgröße für Ortskoordinaten dient der Diffusor-Halsradius  $R_0 = 12,5 \text{ mm}$  (s. Abb. 5.1). Die Normierung der Größen der Dimension  $m/s$  bzw.  $(m/s)^2$  erfolgt mittels der volumetrisch gemittelten Ausströmgeschwindigkeit  $u_0$  im Halsquerschnitt des Diffusors der Doppeldralldüse nach:

$$u_0 = \frac{(\dot{M}_{\text{CH}_4} + \dot{M}_{\text{L,ges}})}{\left(\frac{\varrho_{\text{L,N}} \cdot \lambda_{\text{glob}} \cdot l_{\text{min}} + \varrho_{\text{CH}_4,\text{N}}}{\lambda_{\text{glob}} \cdot l_{\text{min}} + 1}\right) \cdot \pi \cdot R_0^2} \quad (5.9)$$

Die sich für die verschiedenen, untersuchten Konfigurationen ergebenden Normierungsgeschwindigkeiten sind ebenfalls in Tab. 5.2 aufgelistet.

## 5.3 Charakteristika des Systems - experimenteller Befund

### 5.3.1 System-Charakteristika und treibende physikalische Prozesse

Als Basis zur Diskussion der wichtigsten Charakteristika des untersuchten Systems zeigt Abb. 5.3 einen Schnitt durch den doppelt-isolierten, wassergekühlten Versuchsbrenner samt Doppeldralldüse. Im Vorgriff auf die Simulationsergebnisse sind das Strömungs- und Mischungsfeld im isothermen Fall sowie das Strömungs- und Temperaturfeld der reagierenden Drallströmung in der Brennkammergeometrie dargestellt. Diese sollen hier nicht als Ergebnisse betrachtet werden, sondern lediglich schematisch die Gegebenheiten in der Strömung illustrieren und die Darlegung der treibenden physikalischen Prozesse unterstützen.

Das isotherme Strömungsfeld, dargestellt anhand der Streichlinien im zweidimensionalen Halbschnitt (linkes Teilbild in Abb. 5.3), zeigt deutlich das Aufplatzen der hier gleichsinnig verdrallten Strömung, direkt stromab der Querschnittserweiterung, beim Eintritt in die Brennkammer und die damit einhergehende äußere und innere Rezirkulationszone. Ein Konturbild der lokalen Luftzahl ( $\lambda_{\text{loc}}$ ) verdeutlicht die extrem schnelle Vermischung von Brennstoff (blau) und Luft (rot), vor allem in der turbulenten Scherzone im Nachlauf der Kante der Zerstäuberlippe. Kontur-Levels in grüner Farbe entsprechen dem Wert der globalen Luftzahl ( $\lambda_{\text{glob}}$ ), zeigen also Zonen nahezu vollständiger Vermischung. Demnach koexistieren in dieser komplexen Strömung sowohl nicht-vorgemischte, als auch teil-vorgemischte und vorgemischte Bereiche, was sich in den Messungen von WEIGAND et al. und MEIER et al. [214, 120] bestätigt findet.

Im Falle der reagierenden Drallströmung (rechtes Teilbild in Abb. 5.3) vermittelt die Temperaturverteilung einen Eindruck über die Lage der Flammenfront, die in erster Näherung anhand maximaler Temperaturgradienten auszumachen ist. Eine integrale Wärmebilanz für die Brennkammer ergibt, dass 80% der zugeführten Energie die Brennkammer mit dem Abgasmassenstrom verlassen, während Wärmeverluste über die Brennkammerwand durch Strahlung und Wärmeleitung 20% betragen [48]. Zur Illustration ist der Temperaturverlauf ausgehend von wandnahen Bereichen in der Strömung über die Brennkammerwand bis in den Kühlwasserstrom schematisch dargestellt.

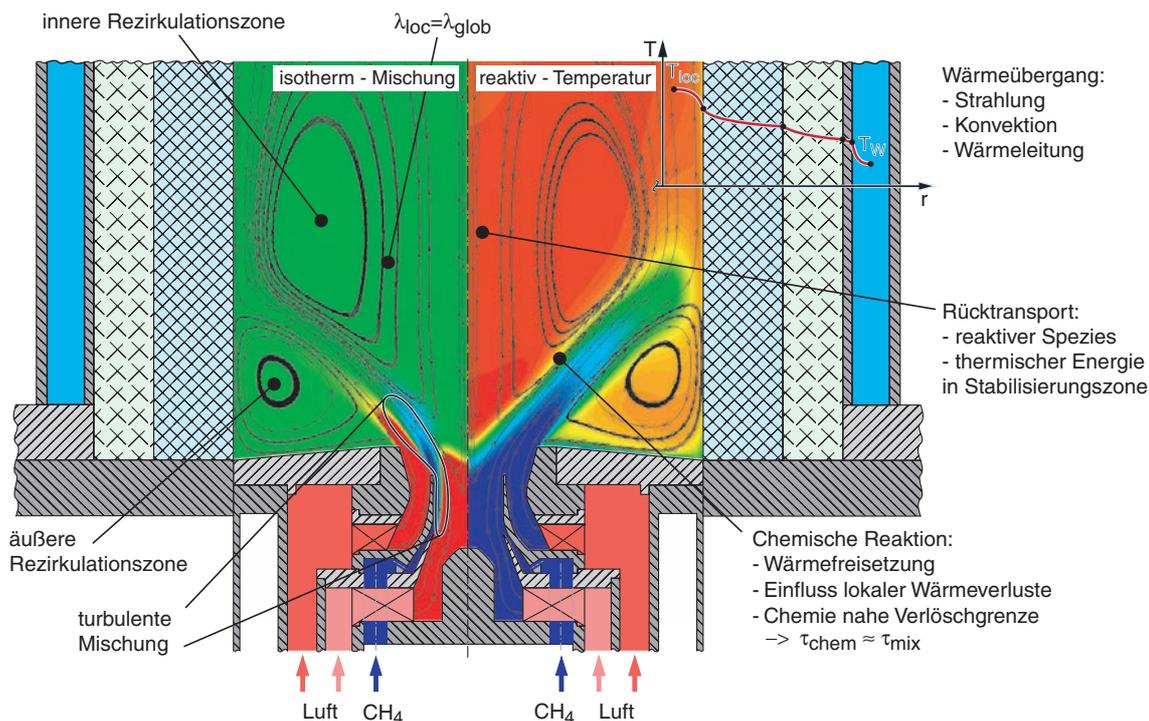


Abbildung 5.3: Zur Diskussion der Systemcharakteristika

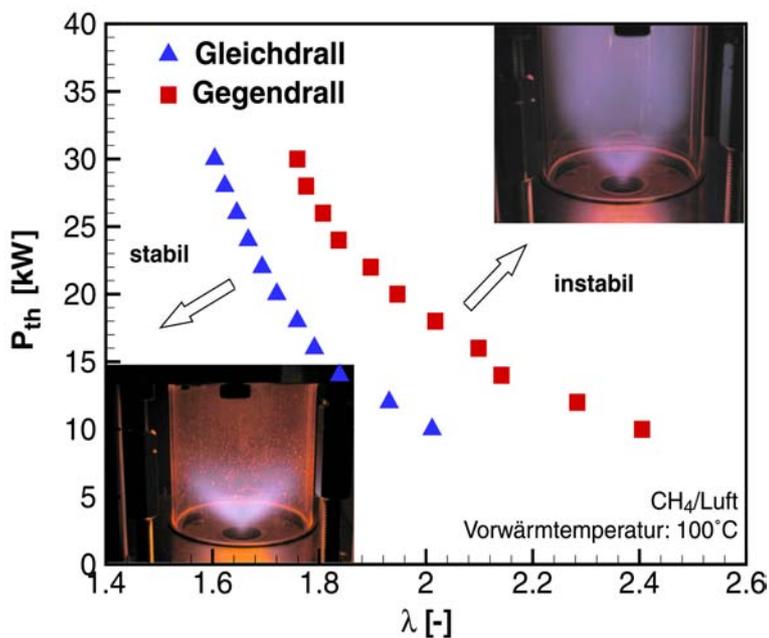


Abbildung 5.4: Experimentell ermitteltes Stabilitätsdiagramm der Gleich- und Gegendrallflamme (aus MERKLE [123])

Die innere Rezirkulationszone bedingt den Rücktransport thermischer Energie sowie chemisch reaktiver Spezies aus stromab gelegenen Bereichen fortgeschrittenen Reaktionsumsatzes in die Stabilisierungszone (s. Kap. 3.2) der Flamme und dient damit der Initiierung und Aufrechterhaltung der chemischen Reaktionen und der Aufheizung

des anströmenden, unverbrannten Gemischs. Der in Kap. 3.2 beschriebenen drallinduzierten Flammenstabilisierung zufolge herrscht, bei Betriebsbedingungen nahe des Verlöschens, eine Konkurrenz zwischen fluid-mechanisch bedingten Verweilzeiten der Mischung ( $\tau_{mix}$ ) und dem Zeitmaß der limitierenden chemischen Reaktionen ( $\tau_{chem}$ ) vor. Demzufolge können im Falle stabiler Verbrennung gerne getroffene Vereinfachungen, wie die Annahme unendlich schneller Chemie (s. Kap. 2.4.2.2), hier nicht angewendet werden; vielmehr ist die Auflösung des Verlaufs der chemischen Reaktionen erforderlich.

### 5.3.2 Experimenteller Befund

Durch detaillierte Feldmessungen sowohl der gleichsinnig als auch der gegensinnig orientierten, reagierenden Drallströmung für stabile Betriebsbedingungen und solche nahe der jeweiligen Stabilitätsgrenze zeigt MERKLE [123], dass die Flammenstabilisierung auf der Überlagerung von Zonen basiere, in denen auf Grund niedriger mittlerer Strömungsgeschwindigkeiten und nahestöchiometrischer Gemischzusammensetzungen, besonders günstige strömungsmechanische und reaktionskinetische Zündbedingungen vorherrschen. Die Stabilitätsgrenze definiert MERKLE [123] anhand des beobachteten, abrupten Übergangs der Flamme in eine andere Stabilisierungsform, welchen er als Folge des Überschreitens eines kritischen Grenzdurchsatzes bei Steigerung der thermischen Leistung deutet und als Konsequenz der Annäherung der mit zunehmendem Durchsatz abnehmenden Verweilzeit an das Zeitmaß der Wärmefreisetzung in der Stabilisierungszone erklärt. Hierbei diene die innere Rezirkulationszone als Rückkopplungsmechanismus, der anstelle sofortigen Verlöschens den Übergang in eine andere Stabilisierungsform bedingt; folglich sei zwischen Stabilitäts- und Verlöschgrenze zu unterscheiden.

Abbildung 5.4 zeigt hierzu die experimentell ermittelten Stabilitätsgrenzkurven (Stabilitätskurve) der Gleich- und Gegendrallflamme, d.i. die Auftragung der thermischen Leistung  $P_{th}$ , bei der die Flamme den beobachteten abrupten Übergang (Foto links unten  $\rightarrow$  Foto rechts oben) in eine andere Stabilisierungsform vollzieht, als Funktion der globalen Luftzahl  $\lambda_{glob}$ . Von einem Punkt auf der jeweiligen Stabilitätskurve aus gesehen, herrschen links unten stabile Betriebsbedingungen, rechts oben instabile. Der Vergleich Gleich-/Gegendrallkonfiguration zeigt eine starke Erweiterung des stabilen Betriebsbereiches im Falle der Gegendrallflamme auf, deutlich zu erkennen an der zu größeren thermischen Leistungen verschobenen Stabilitätskurve dieser Konfiguration in Abb. 5.4. Die erhöhte Stabilität der Gegendrallflamme resultiere nach MERKLE [123] aus einer sich tiefer in die Brennkammer hinein erstreckende Zone nahestöchiometrischer Gemischzusammensetzungen, eine Folge der auf Grund gedämpften, turbulenten Austausches verzögerten Brennstoff/Luft-Mischung.

### 5.3.3 Anforderungen an die numerische Simulation

Aus den beschriebenen Charakteristika des Systems, den damit verbundenen, treibenden physikalischen Prozessen sowie den experimentell erschlossenen Erkenntnissen resultieren einige wesentliche Anforderungen an die numerische Simulation, die in Abb. 5.5 zusammengefasst sind. Ihrer Umsetzung ist der nachfolgende Abschnitt (s. Kap. 5.4) gewidmet, während die Ergebnisse der sowohl durch diese Anforderungen

- Zuverlässige Berechnung des 3-dimensionalen, turbulenten Strömungsfeldes.
- Bestimmung des Mischungsfeldes in der turbulenten Strömung.
- Beschreibung der Wärmefreisetzung, d.h. der Interaktion von turbulentem Strömungs-/Mischungsfeld und der Verbrennungs-Chemie:
  - Wärmefreisetzung durch chemische Reaktionen.
  - Behandlung nicht-vorgemischter, teil-vorgemischter und vorgemischter Verbrennung.
  - Rückwirkung lokaler Wärmeverluste auf chemische Reaktionen.
  - Berücksichtigung der Einflüsse endlich schneller Chemie.
- Erfassung der Wärmeabgabe durch Konvektion, Konduktion und Strahlung.

Abbildung 5.5: Anforderungen an die numerische Simulation

als auch durch den experimentellen Befund motivierten, numerischen Simulationen in Kap. 6 dargestellt werden.

## 5.4 Numerische Vorgehensweise

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen erfolgten unter Verwendung der kommerziellen CFD-Programme CFX-TASCflow<sup>TM</sup> (Ver. 2.12-1) und ANSYS CFX<sup>TM</sup> (Ver. 10.0-SP1) der Firma ANSYS Inc. zu deren detaillierten Beschreibung auf ihre jeweilige Dokumentation [4, 8] verwiesen, an dieser Stelle lediglich auf einige wichtige ihrer Merkmale hingewiesen sei. CFX-TASCflow<sup>TM</sup> ist ein 3-D CFD-Code, der die Geometrie mit einem auf der Finite-Elemente-Methode basierenden Finite-Volumen-Verfahren [133, 135, 206] abbildet und implizite Diskretisierungsverfahren erster und zweiter Ordnung in der Zeit sowie verschiedene Verfahren erster und zweiter Ordnung zur räumlichen Diskretisierung zur Verfügung stellt. Die Druck-Geschwindigkeits-Kopplung erfolgt bei CFX-TASCflow<sup>TM</sup> wie auch bei ANSYS CFX<sup>TM</sup> durch Lösen der Kontinuitäts- und Impulsgleichungen in einem vollständig gekoppelten Schritt. CFX-TASCflow<sup>TM</sup> diente im Rahmen dieser Arbeit der stationären (RANS, s. Kap. 4.1.1) und instationären (Unsteady-RANS) Berechnung der isothermen Strömungs- und Mischungsfelder sowie der stationären (RANS) Berechnung im Falle der reagierenden Drallströmung, ANSYS CFX<sup>TM</sup> der Berechnung des isothermen Strömungs- und Mischungsfeldes unter Anwendung der LES-Methode (s. Kap. 4.1.1).

### 5.4.1 Verwendete Rechengitter

Insgesamt wurden drei verschiedene, in Abb. 5.6 dargestellte, hexahedral-blockstrukturierte Rechengitter verwendet, zu deren Generierung das Ziel vorgegeben war, bei möglichst geringer Gittergröße alle notwendigen Details der zu untersuchenden Problem-

stellung physikalisch sinnvoll und geometrisch angemessen genau aufzulösen.

Mit dem weiterführenden Wunsch instationäre, periodische, dreidimensionale Effekte der Strömung zu erfassen, wurde zunächst ein dreidimensionales Rechengitter (“Gitter-1”) mit 590.096 Knoten entwickelt, welches die komplette räumliche Geometrieordnung der Brennkammer wiedergibt. Um die Modellierung der Drallströmung zu vereinfachen, wurde hierbei das Rechenggebiet in der Düse auf die Bereiche stromab der Drallerzeuger begrenzt und die tangentialen Einlasskanäle durch Ringspalte ersetzt (s. Abb. 5.7).

Ein weiteres Rechengitter, das im Rahmen des EU-Forschungsprojekts “Modelling of UnSteady Combustion in Low Emission Systems” (MUSCLES) [217] von der MTU Aeroengines (München) entwickelt und zur Verfügung gestellt wurde, umfasst die Kanäle der Drallerzeuger sowie einen Teil der stromauf der Drallerzeuger gelegenen Plenen. Es besteht aus 1.519.997 Knoten und wird im Folgenden mit “Gitter-2” bezeichnet.

Das dritte verwendete Rechengitter (“Gitter-3”) weist eine im Vergleich zu Gitter-1 identische Knotenverteilung in axialer und radialer Richtung auf, gibt in Umfangsrichtung jedoch nur einen Sektor der Geometrie mit einem Öffnungswinkel von  $6^\circ$  wieder. Es umfasst daher nur 53.208 Knoten und wird mit in Umfangsrichtung periodischen Randbedingungen verwendet, wodurch in dieser Richtung eine gegenüber Gitter-1 um den Faktor 2,5 höhere, fiktive Gitterauflösung erreicht wird.

## 5.4.2 Übersicht: durchgeführte Simulationen

### Isotherme Strömungs- und Mischungsfeld-Berechnungen

**Statistische Methoden (Unsteady-RANS, RANS):** Das isotherme Strömungs- und Mischungsfeld wurde für die in Kap. 5.1.1 beschriebene Geometrie bei den in Tab. 5.2 aufgelisteten Betriebsparametern sowohl für die Gleich- als auch Gegendrall-Konfiguration im Rahmen der Diplomarbeit von WINDMEIER [222] untersucht. Mit dem Ziel, den Einfluss gleich- und gegensinniger Verdrallung auf das Strömungs- und Mischungsfeld zu erfassen, wurden hierbei sowohl instationäre Berechnungen (Unsteady-RANS) als auch stationäre Berechnungen (RANS) mit Hilfe des CFD-Codes CFX-TASCflow<sup>TM</sup> unter Verwendung des Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodells (STKE) sowie des modifizierten  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodells nach HIRSCH [69] (MKE) durchgeführt (s. Kap. 4.1.2.3). Als Rechengitter diente das in Kap. 5.4.1 beschriebene Gitter-1, zur räumlichen Diskretisierung ein *HYBRID*-Diskretisierungsschema<sup>1</sup> und zur zeitlichen Diskretisierung ein Schema zweiter Ordnung bei einem physikalischen Iterationszeitschritt von  $\Delta t = 1,0 \cdot 10^{-4}$  s.

Die instationären Berechnungen (Unsteady-RANS) resultierten auch bei Variation der numerischen Parameter (Zeitschritt, Konvergenzkriterien) bereits nach ca. 1,2 Brennkammerverweilzeiten in stationären, rotationssymmetrischen Strömungsfeldern, sodass weder periodische noch chaotische instationäre Effekte der turbulenten Drallströmung (s. Kap. 2.3.7) detektiert werden konnten. Instationäre Berechnungen mittels der Unsteady-RANS Methode wurden daher nicht weiter verfolgt und finden auch keine eingehendere Behandlung im Rahmen dieser Arbeit.

<sup>1</sup>Diskretisierungsschema, das auf einer von der Gitter-Peclet-Zahl abhängigen Überlagerung aus CDS (central differencing scheme) und UDS (upwind differencing scheme) beruht und für  $Pe_\Delta \geq 10$  in ein reines UDS übergeht [4, 133].

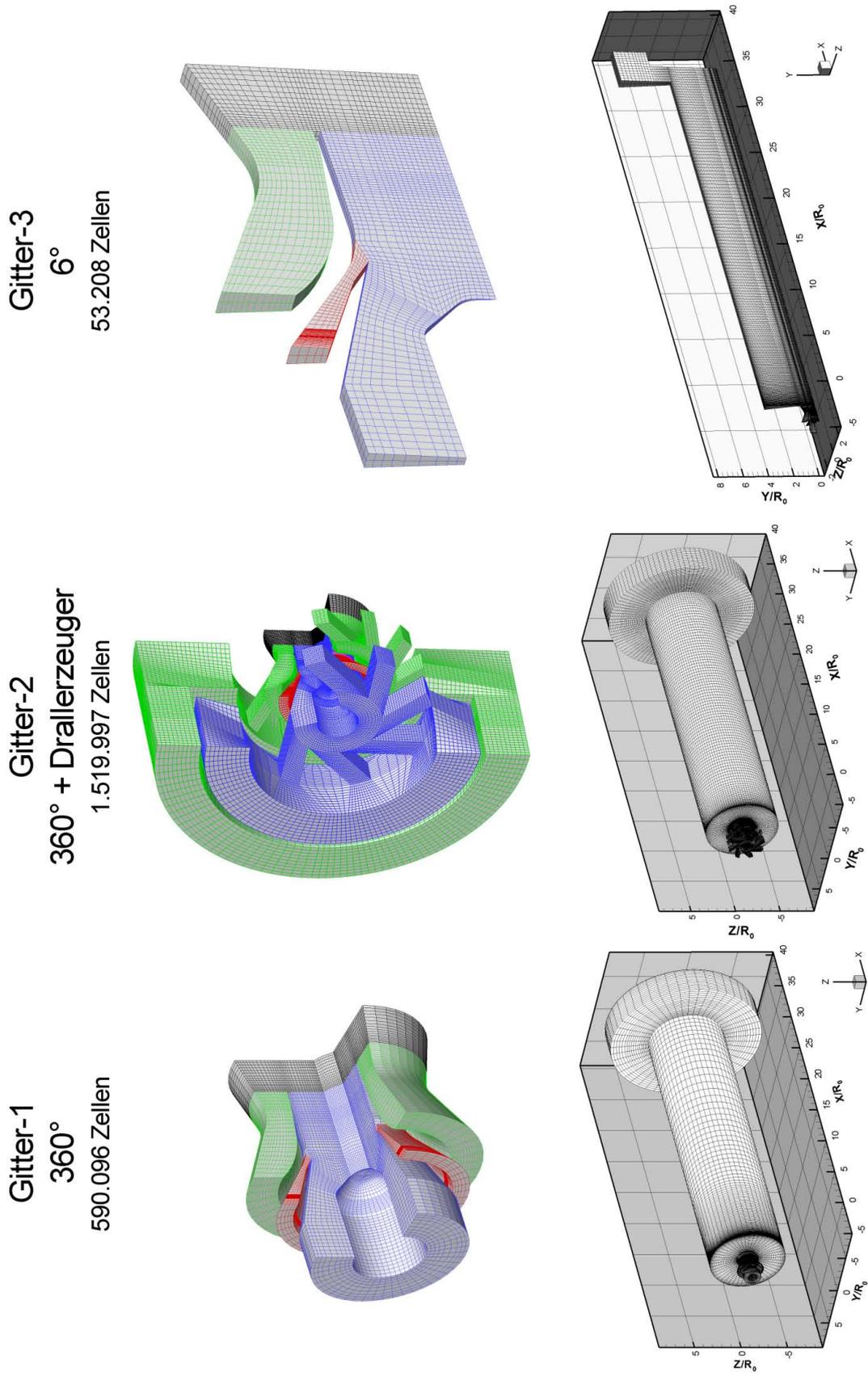


Abbildung 5.6: Verwendete Rechengitter

Auch die mittels des modifizierten  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodells nach HIRSCH [69] (MKE) erzielten Ergebnisse der stationären Strömungsfeld-Berechnungen (RANS) werden im Rahmen dieser Arbeit nicht näher diskutiert, da das MKE im Vergleich mit dem STKE, bei höherem numerischen Aufwand nahezu identische Ergebnisse aufwies [222]. Dies sollte jedoch nicht als allgemein gültige Regel interpretiert werden, unterstützt aber dennoch den Befund, dass in Fällen eingeschlossener Drallströmungen mit zentraler Auslassversperrung die Defizite des STKE von geringerer Bedeutung sind. In solchen Systemen, in denen der Drehimpuls die Brennkammer durch den wandnahen Ringspaltauslass verlassen muss und nach Verlassen des Brenners schnell zu großen Radien transportiert wird (Zweidimensionaler Zwang, s. Kap. 2.3.7), zeigt das STKE, das mitunter sogar zum Überschätzen des radialen Drehimpulsaustauschs neigt [40, 59], meist gute Resultate.

Die Ergebnisse der stationären Berechnungen unter Verwendung des Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodells werden in Kap. 6.1 und Kap. 6.2 dargestellt und diskutiert. Da die hierbei berechneten turbulenten Mischungsfelder schon in düsen nahen Bereichen starke Unterschiede im Vergleich mit den experimentell ermittelten Mischungsfeldern aufwiesen, wurden zur Ursachenklärung zusätzliche Berechnungen (Kap. 6.2.2) für die isotherme Gleichdrallkonfiguration, unter anderem Berechnungen mit allen in Kap. 5.4.1 vorgestellten Gittern, durchgeführt.

**Grobstruktursimulation (LES):** Instationäre Berechnungen unter Verwendung der in ANSYS CFX<sup>TM</sup> implementierten LES-Methode (s. auch Kap. 4.1.1) für die isotherme Gleichdrall-Konfiguration dienten ebenfalls der Untersuchung der Ursachen für die Diskrepanz zwischen experimentell und numerisch bestimmter Mischungsverteilung. Als SGS-Turbulenzmodell wurde hierbei das SMAGORINSKY-Modell [180] in seiner Standard-Formulierung mit einer festen SMAGORINSKY-Konstante  $C_S = 0,1$  angewendet und Schemata zweiter Ordnung sowohl für die räumliche (Zentralfdifferenzen-Ansatz [8, 133]) als auch für die zeitliche (“second order backward euler” [8]) Diskretisierung gewählt. Obwohl im Kontext von LES-Simulationen eher als grob zu bezeichnen, besitzt das verwendete Gitter-1 eine, mit typischen Längenmaßen um 1 mm in alle Raumrichtungen, relativ feine Auflösung in der Nähe des Brenneraustritts und bietet zudem eine optimale Vergleichbarkeit mit den durchgeführten RANS-Simulationen.

## Berechnung des Strömungs-, Mischungs- und Temperaturfeldes im Falle der reagierenden Drallströmung

Auf Grund des erhöhten numerischen Aufwandes<sup>2</sup> im Falle der Berechnung der reagierenden Drallströmung, sowie der großen Anzahl an durchzuführenden Simulationen zur Validierung des turbulenten Reaktionsmodells (s. Kap. 4.3) und zur Bestimmung der Stabilitätsgrenzen des Systems (s. Kap. 6.5), bietet sich die Verwendung eines möglichst kompakten Rechengitters zur Minimierung der Rechenzeit an. Folglich kommt im reaktiven Fall das Gitter-3, das sich bereits im Vergleich mit den beiden anderen in Kap. 5.4.1 aufgeführten Rechengittern unter isothermen Bedingungen bewährt hat (s.

---

<sup>2</sup>Im Falle der reagierenden Drallströmung müssen neben der Masse- und den Impuls-Bilanzgleichungen für das Strömungsfeld sowohl die Energiebilanzgleichung als auch die Transportgleichungen des turbulenten Reaktionsmodells gelöst werden.

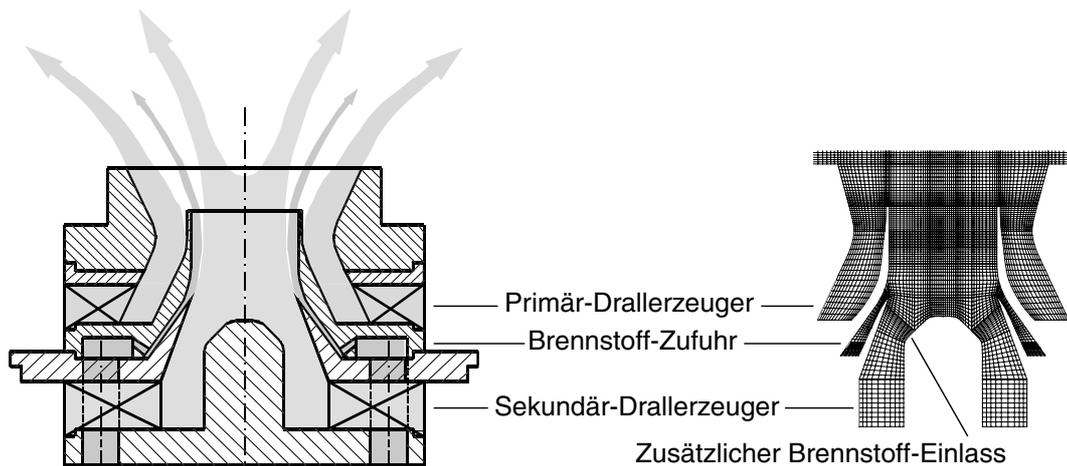


Abbildung 5.7: Zur Definition der Randbedingungen

Kap. 6.2.2), in Kombination mit der stationären RANS-Methode und dem relativ einfachen STKE-Turbulenzmodell zur Anwendung. Die Beschreibung der Interaktion von turbulentem Strömungs-/Mischungsfeld und der Verbrennungs-Chemie erfolgt mittels des in Kap. 4.3 vorgestellten nicht-adiabaten JPDP Reaktionsmodells, das sowohl die im System variierende Mischung, den Verlauf der chemischen Reaktionen als auch den Einfluss lokaler Wärmeverluste auf die chemische Reaktionskinetik zu erfassen vermag. Besondere Aufmerksamkeit wurde den thermischen Randbedingungen gewidmet, welche für die Temperaturverteilung in der Brennkammer eine wesentliche Rolle spielen, aber aus den experimentellen Datensätzen nur indirekt bestimmt werden konnten. Ihre Ableitung und Implementierung wird in Kap. 5.4.4 behandelt.

### 5.4.3 Fluidmechanische Randbedingungen

Die Einlass-Randbedingungen des Fluids wurden mittels der nach (5.5) bis (5.8) berechneten Massenströme definiert und im Falle des Gitters-2 als zu den jeweiligen Einlässen der Plenen und des Brennstoff-Einlasskanals senkrecht einströmend angenommen. Für Gitter-1 und Gitter-3, bei welchen die tangentialen Einlasskanäle der Drallerzeuger durch Ringspalte angenähert wurden (s. Abb. 5.7), wurden zusätzlich die Strömungsrichtungen der eintretenden Fluidströme aus den jeweiligen theoretischen Drallzahlen berechnet und vorgegeben. Durch diese Vorgehensweise konnten an den Rändern der Lufteinlässe zwei Bedingungen erfüllt werden: erstens die Massenbilanz, aus der sich die radiale Geschwindigkeitskomponente ergibt und zweitens die Drehimpulsbilanz, aus der die tangentiale Geschwindigkeitskomponente resultiert. Brennstoffseitig wurde im Falle der reagierenden Drallströmung ein gegenüber der realen Geometrie zusätzlicher Brennstoffeinlass verwendet, um das berechnete Mischungsfeld dem experimentell ermittelten anzunähern: eine Vorgehensweise, die in Kap. 6.2.2 näher erläutert wird. Der entsprechende Einlass ist in Abb. 5.7 abgebildet. In allen Fällen wurden die Turbulenzrandbedingungen für jeden Einlass durch einen nach (4.3) definierten Turbulenzgrad von 15% und ein turbulentes Längenmaß der Hälfte der jeweiligen kleinsten Kanalabmessung definiert.

Am Brennkammerauslass wurde bei den Unsteady-RANS/RANS-Berechnungen der konstante Gesamtmassenstrom ( $\dot{M}_{ges} = \dot{M}_{CH_4} + \dot{M}_{L,ges}$ ) als Randbedingung verwendet,

im Falle der LES eine ‐Opening-Randbedingung‐ [7, 8].

Die Behandlung der turbulenten Wandgrenzschicht erfolgte für die RANS-Berechnungen mittels des sog. ‐logarithmischen Wandgesetzes‐ [4, 150, 199] unter Annahme glatter Wände (keine Wandrauigkeit), bei der LES mittels wandnaher Dämpfung der turbulenten Viskosität [8].

#### 5.4.4 Erfassung von Wärmeverlusten durch Konvektion, Konduktion und Strahlung

Für den Fall der reagierenden Drallströmung konnte die Modellierung der im untersuchten System auftretenden Wärmeverluste durch Lösen der CFX-TASCflow<sup>TM</sup>-internen Energie-Transportgleichung realisiert werden. Konvektive und konduktive Wärmeverluste wurden hierbei mittels thermischer Randbedingungen, Strahlungswärmeverluste durch Implementierung einer Strahlungskorrektur berücksichtigt.

#### Thermische Randbedingungen

Die Fluidtemperatur der Einlass-Randbedingungen ergab sich entsprechend der Werte in Tab. 5.2.

Mit Ausnahme der zylindrischen Brennkammerwand und der Kopfplatte wurden die Wände als adiabat betrachtet. Da aus den experimentellen Ergebnissen [123] keine Wandtemperaturverteilungen hervorgehen, wurde für die Kopfplatte ein konstanter Wärmestrom in Abhängigkeit von der jeweiligen durchgesetzten thermischen Leistung vorgegeben, während die zylindrische Brennkammerwand unter Berücksichtigung der Wärmeleitung vom Fluid über die isolierte Brennkammerwand bis in den Kühlwasserstrom, dessen Temperatur in erster Näherung als konstant betrachtet werden kann [48], behandelt wurde. Hierzu wurde der turbulente Wandwärmeübergangskoeffizient des logarithmischen Wandgesetzes  $\alpha_{log}$  durch den Wärmedurchgangskoeffizienten  $k_{ges}$  ersetzt, welcher das gesamte Wärmetransport-Problem erfasst und dessen Ableitung im Folgenden dargelegt wird:

Unter der Annahme lokal-stationärer Wärmeleitung durch konzentrische, zylindrische Schichten verschiedener Materialien (d.h. die Brennkammerwand, welche gemäß Abb. 5.8 aus den Schichten  $j = 1, \dots, 3$  besteht) kann der Gesamtwärmestrom folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$\dot{Q} = k_{ges} \cdot A_i \cdot (T_i - T_W) . \quad (5.10)$$

Der Wärmedurchgangskoeffizient  $k_{ges}$  ist hierbei gemäß:

$$k_{ges} = \left( \frac{1}{\alpha_{log}} \cdot \frac{A_i}{A_i} + \frac{1}{k_1} \cdot \frac{A_i}{A_{eq,1}} + \frac{1}{k_2} \cdot \frac{A_i}{A_{eq,2}} + \frac{1}{k_3} \cdot \frac{A_i}{A_{eq,3}} + \frac{1}{\alpha_a} \cdot \frac{A_i}{A_a} \right)^{-1} , \quad (5.11)$$

mit:

$$\frac{A_i}{A_{eq,1}} = \frac{R_i \cdot \ln \left[ \frac{R_1}{R_i} \right]}{R_1 - R_i} , \frac{A_i}{A_{eq,2}} = \frac{R_i \cdot \ln \left[ \frac{R_2}{R_1} \right]}{R_2 - R_1} , \frac{A_i}{A_{eq,3}} = \frac{R_i \cdot \ln \left[ \frac{R_a}{R_2} \right]}{R_a - R_2} , \frac{A_i}{A_a} = \frac{R_i}{R_a} , \quad (5.12)$$

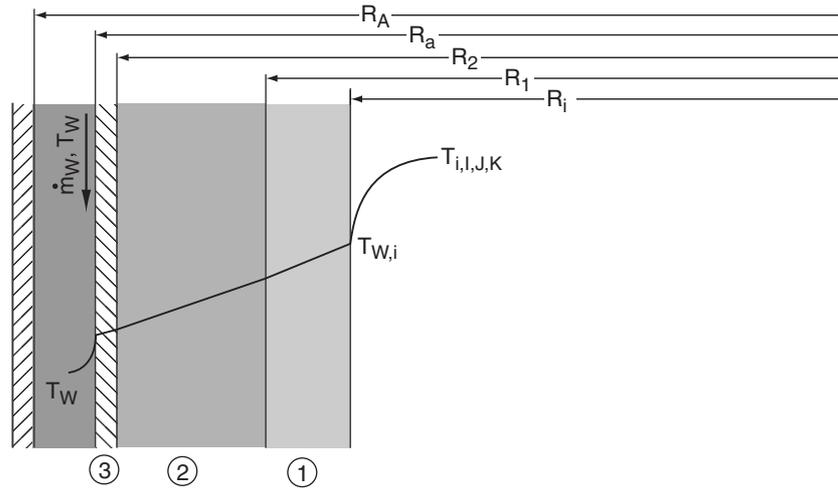


Abbildung 5.8: Zur Ableitung der thermischen Wandrandbedingung

zu definieren. Der turbulente Wandwärmübergangskoeffizient des logarithmischen Wandgesetzes  $\alpha_{log}$  steht in CFX-TASCflow<sup>TM</sup> zur Verfügung [5];  $k_1$  bis  $k_3$  können gemäß:

$$k_1 = \frac{\lambda_1}{R_1 - R_i}, k_2 = \frac{\lambda_2}{R_2 - R_1}, k_3 = \frac{\lambda_3}{R_a - R_2}, \quad (5.13)$$

berechnet werden, worin  $\lambda_j$  die thermische Leitfähigkeit des Materials der Schicht  $j$  ist. Der äußere Wandwärmübergangskoeffizient  $\alpha_a$  (Brennkammerwand  $\rightarrow$  Kühlwasser) wird entsprechend der Wärmeleitung in einen Flüssigkeitsstrom im Ringspalt mit den Daten:

- Kühlwasser-Volumenstrom:  $\dot{V}_W = 1 \text{ m}^3/\text{h}$ ,
- Stoffdaten: Wasser bei  $T_W = 323 \text{ K}$ ;  $\lambda_W \approx 645 \cdot 10^{-3} \text{ W}/(\text{m} \cdot \text{K})$ ,
- Laminare Strömung (s. VDI-Wärmeatlas [117]):  $Nu = 3.66 + 1.2 \cdot (R_a/R_A)^{-0.8}$ ,

ermittelt. Mit:

$$Nu = \frac{\alpha_a \cdot 2(R_A - R_a)}{\lambda_W}, \quad (5.14)$$

ergibt sich der äußere Wandwärmübergangskoeffizient  $\alpha_a$  zu:

$$\alpha_a = \frac{\lambda_W \cdot (3.66 + 1.2 \cdot (R_a/R_A)^{-0.8})}{2 \cdot (R_A - R_a)}. \quad (5.15)$$

Das Gleichungssystem (5.10) - (5.15) ermöglicht schließlich die analytische Beschreibung des Wärmetransportproblems durch die zylindrische Brennkammerwand und erlaubt damit die implizite Berechnung der Temperaturverteilung entlang der zylindrischen Brennkammerwand in Abhängigkeit von den Betriebsbedingungen des Systems.

## Strahlungskorrektur

Zur Behandlung von Strahlungswärmeverlusten wurde das Abgas als optisch dünn angenommen, d.h. dass jedes Volumenelement in erster Näherung direkt an die Brennkammerwand abstrahlt. Die Absorption einfallender Strahlung von den Brennkammerwänden oder anderen Volumina wird hierbei vernachlässigt und der Emissionsindex  $\varepsilon_{Gas}$  des Abgases unter Annahme kubischer Volumenelemente (Oberfläche  $A_{V,i}$ ) als Funktion der strahlungsaktiven Spezies  $H_2O$  und  $CO_2$  des Abgases nach SCHACK [166] bestimmt. Hieraus lässt sich der mittlere, lokale Strahlungsquellterm der Energie-Transportgleichung berechnen:

$$\bar{q}_{R,i} = \sigma_B \cdot \varepsilon_{Gas} \cdot A_{V,i} \cdot (T_i^4 - T_{Wand,i}^4) , \quad (5.16)$$

worin  $T_i$  die lokale Fluidtemperatur und  $T_{Wand,i}$  die Temperatur in der Wandzelle bei gleicher axialer Koordinate ist.

## 5.5 Implementierung des nicht-adiabaten JPDF Reaktionsmodells

Das zur Beschreibung der Interaktion von turbulentem Strömungs-/Mischungsfeld und Verbrennungs-Chemie verwendete, in Kap. 4.3 vorgestellte, nicht-adiabate JPDF Reaktionsmodell basiert auf der Lösung zusätzlicher Transportgleichungen (s. Kap. 5.5.2) mit Hilfe des verwendeten CFD-Codes, CFX-TASCflow<sup>TM</sup>. Die in diesen zusätzlichen Transportgleichungen als Quellterme auftretenden, mittleren Reaktionsquellterme werden zur Minimierung des Rechenaufwandes als Funktion der unabhängigen Modellvariablen in einer sog. JPDF look-up Tabelle (s. Kap. 5.5.1) vor der eigentlichen CFD-Rechnung abgelegt, sodass die zeitaufwändige Integration der JPDF-Integrale nicht online erfolgen muss. Dieses Konzept wird im Folgenden (Kap. 5.5.1) näher erläutert.

### 5.5.1 PrePDF: Erzeugung der JPDF look-up Tabelle

Da neben der Verbrennungsreaktion bei der Modellierung technisch relevanter Systeme auch andere physikalische Prozesse zu beschreiben sind, müssen alle Teilmodelle - im Hinblick auf die Praktikabilität der Berechnung praxisnaher Probleme - auf die minimal erforderliche Genauigkeit reduziert werden. Hierzu bietet es sich an, Rechenschritte, die sich im Laufe der CFD-Simulation wiederholen, in einer der Simulation vorangestellten Berechnung (sog. Preprocessing) unter Berücksichtigung des Zustandsraumes aller Parameter durchzuführen, und die erhaltenen Ergebnisse in einer Tabelle abzulegen.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde hierzu der am Engler-Bunte-Institut/Bereich Verbrennungstechnik entwickelte Präprozessor PrePDF verwendet, zu dessen eingehenderen Diskussion auf die entsprechende Dokumentation [70] verwiesen und hier nur auf die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Erweiterungen [216] eingegangen sei. Der Präprozessor PrePDF (s. Abb. 5.9) dient der Berechnung der Chemie (Kinetik Submodul) sowie der Auswertung der Integrale des nicht-adiabaten JPDF Reaktionsmodells (JPDF Modul).

**Kinetik Submodul:** Das Kinetik Submodul berechnet den Reaktionsverlauf eines reagierenden Brennstoff/Luft-Gemisches in einem homogenen System bei konstantem Druck, wobei das chemische System mit der in Kap. 4.4 behandelten 2-Bereich-1-Schritt Kinetik abgebildet wird. Unter adiabaten Bedingungen genügt zur Berechnung des homogenen Systems die Lösung der Bilanzgleichung der Spezies Sauerstoff ( $O_2$ ), da diese die Reaktionsfortschrittsvariable der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ist. Im nicht-adiabaten Fall müssen die Massen-Erhaltungsgleichungen für alle Spezies des Reaktionsmechanismus:

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = v \cdot \dot{\omega}_k \cdot W_k ; \quad k = 1, \dots, N_k , \quad (5.17)$$

sowie die Energie-Bilanzgleichung in modifizierter Form:

$$c_p \cdot \frac{\partial T}{\partial t} + v \cdot \sum_{k=1}^{N_k} \left( (h_k \cdot \dot{\omega}_k \cdot W_k) \cdot \widetilde{h}_N \right) = 0 , \quad (5.18)$$

berücksichtigt werden. In (5.18) ist der Einfluss von Wärmeverlusten durch Parametrisierung der Wärmefreisetzungsrates jeder Spezies, d.h. Multiplikation jedes Summanden  $(h_k \cdot \dot{\omega}_k \cdot W_k)$  mit dem mittleren Enthalpie-Index  $\widetilde{h}_N$  (4.60), erfasst. Da die Berechnung als Zeit-Integration ausgeführt wird, wird durch obige Vorgehensweise die Gesamtenthalpie der Mischung in jedem Zeitschritt um einen dem Enthalpie-Index entsprechenden Faktor verringert und damit in erster Näherung eine mit dem Reaktionsfortschritt linear voranschreitende Reduktion der Gesamtenthalpie erreicht. Bei vollständigem Ausbrand entspricht die Enthalpie der Mischung ihrem mit dem Enthalpie-Index skalierten Wert unter adiabaten Bedingungen.

Folglich können nach Lösung des nicht-adiabaten, homogenen Systems für verschiedene vorgegebene Mischungszustände (Mischungsbruchmittelwert  $\tilde{f}$ ) sowie verschiedene Wärmeverluste (Enthalpie-Index  $\widetilde{h}_N$ ) und anschließender Diskretisierung der Lösung im Reaktionsfortschrittsraum (Reaktionsfortschrittsvariable  $\tilde{c}$ ) die thermodynamischen Zustände des reagierenden Brennstoff/Luft-Gemischs als Funktion des Parameter-Tripels  $\tilde{c} - \tilde{f} - \widetilde{h}_N$  abgelegt werden.

**JPDF Modul:** Die mittels des Kinetik Submoduls berechneten thermodynamischen Zustände des Systems im  $\tilde{c} - \tilde{f} - \widetilde{h}_N$ -Raum werden durch das JPDF Modul unter Vorgabe der Anzahl und Verteilung der Stützstellen für die Integration eingelesen, gemäß der Gleichungen (4.62), (4.63), (4.64) und (4.65) mit den als statistisch unabhängig angenommenen PDFs für  $c$  und  $f$  gewichtet und integriert (s. Kap. 4.3.4). Die hierbei verwendeten abgeschnittenen Gaußfunktionen sind durch die jeweiligen Mittelwerte und Varianzen der unabhängigen PDF-Variablen bestimmt. Auf die Berücksichtigung einer Schwankung des Enthalpie-Index wird in erster Näherung verzichtet (s. Kap. 4.3.3.3).

Schließlich werden die Ergebnisse der Integration (mittlere Quellterme, Speziesmassenbrüche, Fluid-Dichte und -temperatur) in der sog. "JPDF look-up Tabelle" als Funktion von  $\tilde{c}$ ,  $\widetilde{c}''^2$ ,  $\tilde{f}$ ,  $\widetilde{f}''^2$  und  $\widetilde{h}_N$  abgelegt und stehen somit dem CFD-Code zur Verfügung. Zur Minimierung des Aufwandes beim Zugriff auf die Tabelle wird ein adaptiver Tabellierungsalgorithmus [57] verwendet.

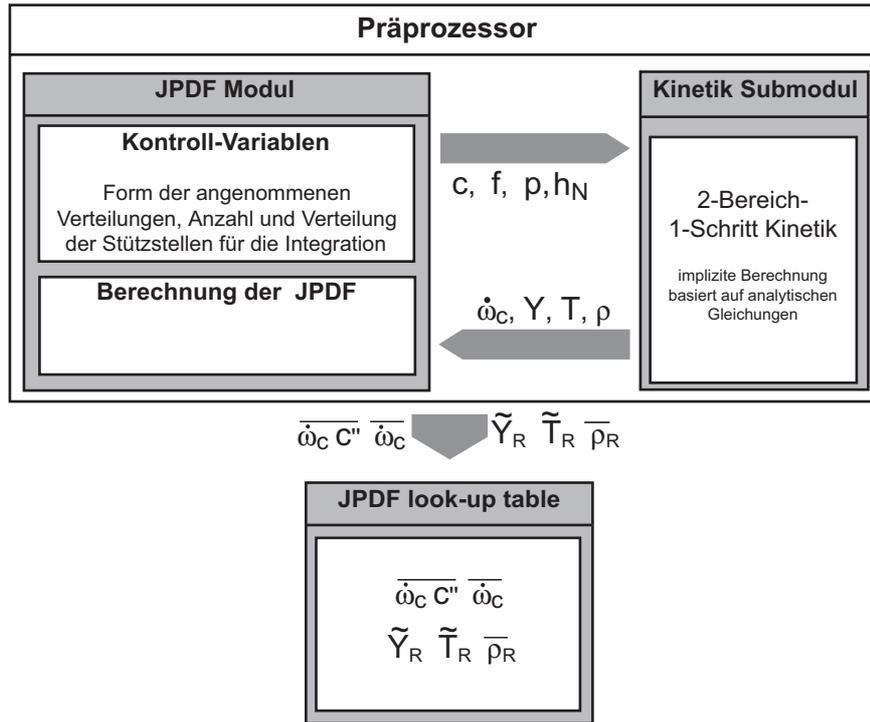


Abbildung 5.9: JPDF look-up Tabelle - Erzeugung

### 5.5.2 JPDF-Schnittstelle zu CFX-TASCflow<sup>TM</sup>

CFX-TASCflow<sup>TM</sup> stellt eine Schnittstelle bereit, mittels derer zusätzliche, vom Benutzer definierbare Transportgleichungen der Form:

$$\frac{\partial (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{\phi})}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \left( \bar{\rho} D_\phi + \frac{\mu_t}{\sigma_\phi} \right) \frac{\partial \tilde{\phi}}{\partial x_i} \right) = \bar{S}_\phi, \quad (5.19)$$

gelöst werden können (s. auch Kap. 4.1.3). Die linke Seite der hier in stationärer Formulierung dargestellten allgemeinen Transportgleichung beschreibt konvektiven und diffusiven Transport, die rechte Seite den Quellterm. Zur Anbindung des nicht-adiabaten JPDF Reaktionsmodells werden fünf zusätzliche Transportgleichungen für:

- Mischungsbruchmittelwert  $\tilde{f}$  (4.57)
- Mischungsbruchvarianz  $\tilde{f}''^2$  (4.58)
- Reaktionsfortschrittsmittelwert  $\tilde{c}$  (4.54)
- Reaktionsfortschrittsvarianz  $\tilde{c}''^2$  (4.55)
- Energie des Fluids (CFX-TASCflow<sup>TM</sup>-interne MCF-Formulierung [4])

gelöst.

Die Ableitung der Transportgleichungen für Varianzen und Mittelwerte von Mischungsbruch (4.57,4.58) und Reaktionsfortschritt (4.54,4.55) ist in Kap. 4.3 dargelegt. Die Quellterme dieser Transportgleichungen werden während der CFD-Simulation aus der a priori erstellten JPDF look-up Tabelle ausgelesen.

Die zur Behandlung von Wärmeverlusten durch Konvektion, Konduktion und Strahlung (s. Kap. 5.4.4) benutzte, CFX-TASCflow<sup>TM</sup>-interne Energie-Transportgleichung

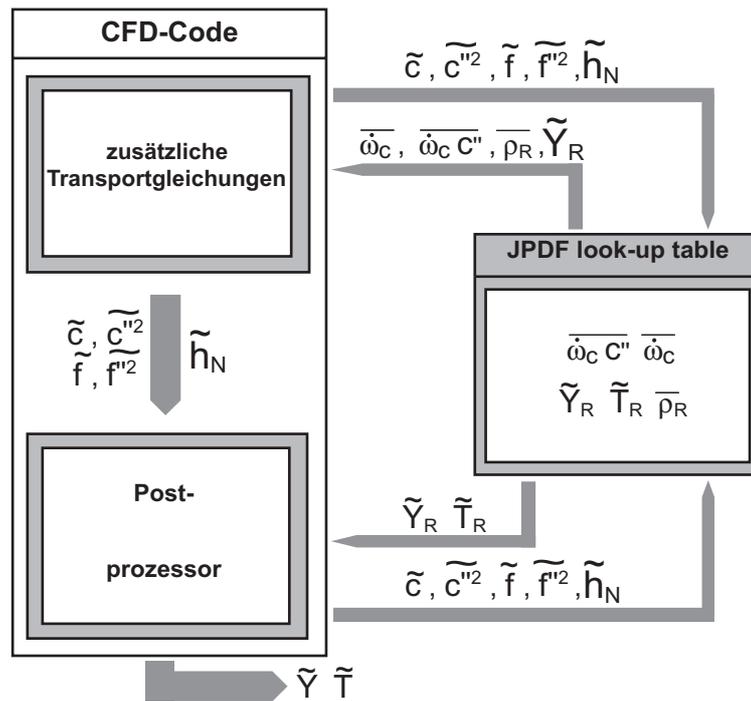


Abbildung 5.10: JPDF look-up Tabelle - Zugriff

wird in einer Formulierung verwendet, die auf einem Multi-Komponenten-Fluid-Ansatz (MCF) basiert [4]. Dabei wird die Enthalpie des Fluids aus dessen Zusammensetzung, d.h. den Massenbrüchen der stabilen Spezies des Verbrennungsprozesses, und deren spezifischen Wärmekapazitäten bestimmt. Die hierfür erforderlichen Speziesmassenbrüche werden wiederum von der JPDF look-up Tabelle bezogen.

Aus der Lösung der Energie-Transportgleichung resultiert die lokale Enthalpie der Mischung, die schließlich zur Berechnung des Enthalpie-Index  $\tilde{h}_N$  (4.60) benötigt wird. Zusammen mit den Mittelwerten und Varianzen von Mischungsbruch und Reaktionsfortschritt aus bildet der Enthalpie-Index einen Satz von fünf Variablen ( $\tilde{c}, \tilde{c}''^2, \tilde{f}, \tilde{f}''^2, \tilde{h}_N$ ). Diese sind die unabhängigen Variablen des nicht-adiabaten JPDF-Modells, mittels derer CFX-TASCflow<sup>TM</sup> auf die JPDF look-up Tabelle zugreift (s. Abb. 5.10) um die benötigten, dort abgelegten Größen (mittlere Quellterme, Speziesmassenbrüche, Fluid-Dichte und -temperatur) auszulesen.

## 5.6 Koeffizienten, Parameter, Implementierung und Validierung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

Für die angestrebte Untersuchung magerer Verbrennungsprobleme wurde die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik als Beitrag des Autors der vorliegenden Arbeit zum EU-Forschungsprojekt “Modelling of UnSteady Combustion in Low Emission Systems” (MUSCLES) speziell für magere Bedingungen angepasst und validiert. Die hierzu nötige Bestimmung des stöchiometrischen Koeffizienten von Sauerstoff sowie der Parameter der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik und die Validierung der Kinetik finden sich detailliert in den entsprechenden Berichten des Projekts MUSCLES [215, 217] dokumentiert und sollen

hier nur zusammengefasst wiedergegeben werden.

### 5.6.1 Bestimmung des stöchiometrischen Koeffizienten von O<sub>2</sub>

Ein sehr wichtiger Parameter der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ist der stöchiometrische Koeffizient des Sauerstoffs  $\nu_{O_2}$ , der den Verlauf des Brennstoffabbaus im Bereich-I der Kinetik bestimmt. Wie bereits in Kap. 4.4.4.1 dargelegt wurde, kann der stöchiometrische Koeffizient des Sauerstoffs  $\nu_{O_2}$  bei Annahme eines homogenen Systems nach (4.117) durch lineare Regression aus der Steigung  $\Delta Y_{O_2}/\Delta Y_{Br}$  bestimmt werden.

Hierzu wurden mit Hilfe des FORTRAN77 Programms HRct (s. Kap. 5.6.3) die Konzentrationsverläufe im homogenen System (s. Kap. 4.4.1.2) unter Verwendung eines wohl validierten, detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus, z.B. GRI 3.0 [181] für einen weiten Bereich an Ausgangszusammensetzungen und Vorwärmtemperaturen berechnet und aus den Ergebnissen die Steigung  $\Delta Y_{O_2}/\Delta Y_{Br}$  bestimmt. Aus den auf diese Weise gesammelten Daten konnte mittels Fehlerminimierung folgende Funktion für den stöchiometrischen Koeffizienten des Sauerstoffs  $\nu_{O_2}$  abgeleitet werden:

$$\nu_{O_2} = -1,754 \cdot \left(\frac{T^0}{T_u}\right)^{2,0-0,048} + 0,382 \cdot \exp \left[ -1,410 \cdot \lambda + \left(\frac{T^0}{T_u}\right)^{0,048} \right]. \quad (5.20)$$

Im Falle nicht-adiabater Berechnungen hängt  $\nu_{O_2}$  zusätzlich vom Enthalpie-Index  $h_N$  (s. Kap. 4.3.3.3) ab. Um dies zu berücksichtigen, muss  $\nu_{O_2}$  mittels einer Funktion  $C_{\nu_{O_2}}$  korrigiert werden, welche selbst eine Funktion der Zusammensetzung  $\lambda$ , des Enthalpie-Index  $h_N$  und der Vorwärmtemperatur  $T_{vor}$  ist. Hierzu wurden Berechnungen mit HRct (s. Kap. 5.6.3) bei festgehaltener Vorwärmtemperatur aber unterschiedlichen Zusammensetzungen und Enthalpie-Indices mit Hilfe des detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus GRI 3.0 [181] durchgeführt, nachfolgend der Quotient:

$$C_{\nu_{O_2}}(h_N) = \frac{\nu_{O_2}(h_N)}{\nu_{O_2}(h_N = 1,0)}, \quad (5.21)$$

bestimmt und durch Fehlerminimierung folgende, für die Vorwärmtemperatur  $T_{vor} = 373 \text{ K}$  gültige, Funktion abgeleitet:

$$\begin{aligned} C_{\nu_{O_2}} = & 1,70523 \\ & - 0,25503 \cdot \lambda - 0,00622 \cdot \lambda^2 + 0,01275 \cdot \lambda^3 \\ & - 1,29591 \cdot h_N + 0,77864 \cdot h_N^2 - 0,21411 \cdot h_N^3 \\ & + 0,44765 \cdot \lambda \cdot h_N - 0,12560 \cdot (\lambda \cdot h_N)^2 - 0,04640 \cdot (\lambda \cdot h_N)^3. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Der korrigierte stöchiometrische Koeffizient des Sauerstoffs ergibt sich damit zu:

$$\nu_{O_2, \text{korr}} = \nu_{O_2} \cdot C_{\nu_{O_2}}. \quad (5.23)$$

### 5.6.2 Bestimmung der Parameter der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

Außer dem stöchiometrischen Koeffizienten des Sauerstoffs, müssen die kinetischen Parameter der Brennstoffabbauzone, also die Parameter der Gleichungen (4.106) bis

(4.108) bestimmt werden, um die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik zu vervollständigen. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurden für die zu bestimmenden Parameter diejenigen aus der Arbeit von HOFFMANN [71] übernommen. So ergeben sich die Reaktionsordnungen zu  $n = 1$  für Brennstoff sowie  $m = 2$  für Sauerstoff, die Aktivierungstemperatur nach SANCHEZ et al. [183] zu  $T_A = 22850 \text{ K}$ , die Exponential-Faktoren zu  $n_1 = 0,5$  sowie  $n_2 = 2$  und der Referenz-Frequenzfaktor zu  $B^\circ = 9,0 \cdot 10^8 \frac{\text{m}^3 \cdot \text{K}}{\text{mol} \cdot \text{s}}$ , wobei der Referenzzustand durch  $\lambda = 1$  und  $T^\circ = 298 \text{ K}$  definiert ist.

### 5.6.3 Implementierung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

Die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik ist in die FORTRAN77-Programme HRct, PREMIX und PrePDF implementiert.

#### HRct

HRct ist eine modifizierte Version des FORTRAN77-Programms SENKIN [112], welches auf dem Programmpaket CHEMKIN [88] basiert. Um die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik darin zu implementieren, wurde SENKIN derart geändert, dass der ideale Kolbenströmungsreaktor (homogenes System) für eine einzige Reaktionsfortschrittsvariable  $Y_{\text{O}_2}$  gelöst und Zusammensetzung, Temperatur sowie thermochemische Größen mit Hilfe der in Kap. 4.4.4 beschriebenen Kopplungsbedingungen bestimmt werden können. [72]

#### PREMIX

Um die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik in PREMIX [87], ein Programm des CHEMKIN-Pakets zur Berechnung 1-dimensionaler, laminarer Vormischflammen (reaktiv-diffusives System) zu implementieren, genügt der Austausch des Unterprogramms CKWYP. [72]

#### PrePDF

PrePDF ist der im Rahmen dieser Arbeit verwendete Präprozessor, welcher der Berechnung der Chemie und der Auswertung der JPf-Integrale dient. Das darin implementierte Kinetik-Submodul entspricht dem Programm HRct, sodass die Implementierung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik analog zur Vorgehensweise bei HRct erfolgt. Zur Vertiefung sei an dieser Stelle auf die Dokumentation von PrePDF [70], die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Erweiterungen [216, 217] und Kap. 5.5 verwiesen.

### 5.6.4 Validierung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

Die Validierung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik wurde am Modellsystem der 1-dimensionalen, laminaren, vorgemischten Flamme (s. Kap. 4.4.1.3) mittels numerischer Berechnungen unter Verwendung des Programmpakets PREMIX [87] durchgeführt und die Ergebnisse unter Verwendung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik mit jenen des detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus GRI 3.0 [181] verglichen. Hinsichtlich der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik wurden beide Vereinfachungsansätze für die Modellierung der Ausbrandzone (s. Kap. 4.4.4.2), die Annahme partiellen Gleichgewichts der

Wassergas-Shift-Reaktion (PEQL) und die Annahme, dass sich Wasserstoff im quasistationären Zustand befindet (H2SS) verwendet. Im Hinblick auf die angestrebte, magere Verbrennung beschränken sich die Ergebnisse auf überstöchiometrische Zusammensetzungen ( $\lambda \geq 1,0$ ). Eine Berücksichtigung von Wärmeverlusten ist hierbei allerdings nicht möglich, weshalb die Validierung anhand der 1-dimensionalen, laminaren, vorge-mischten Flamme nur für adiabate Bedingungen  $h_N = 1$  erfolgte. Zur Validierung der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für nicht-adiabate Bedingungen sei an dieser Stelle auf die in Kap. 6.3.1 dargestellten Ergebnisse für das mit Hilfe des Programmpakets HRct (s. Kap. 5.6.3) berechnete homogene System (s. Kap. 4.4.1.2) verwiesen.

Die in den Abbildungen 5.11 und 5.12 in Abhängigkeit der Luftzahl  $\lambda$  dargestellten Verläufe berechneter, laminarer Flammgeschwindigkeiten  $u_{F,l,v}$  verdeutlichen, dass die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik sowohl für die PEQL-Annahme (Abb. 5.11) als auch für die H2SS-Annahme (Abb. 5.12) die als Referenz dienenden, mit dem detaillierten Reaktionsmechanismus bestimmten, laminaren Flammgeschwindigkeiten bei unterschiedlichen Vorwärmtemperaturen wiederzugeben vermag.

Auch bezüglich der Flammenstruktur kann die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik die Ergebnisse des detaillierten Reaktionsmechanismus gut reproduzieren. Hierzu sind in den Abbildungen 5.13 und 5.14 die Molenbrüche der Spezies und die Temperatur als Funktion der Flammenkoordinate  $x$  bei einer Vorwärmtemperatur von  $T_{vor} = 298\text{ K}$ , einem Druck von  $p = 1\text{ bar}$  und einer Luftzahl von  $\lambda \approx 1,8$  aufgetragen. Die Profile von Temperatur und Molenbrüchen der Spezies  $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  aus den Ergebnissen der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik kommen sowohl für PEQL als auch für H2SS mit jenen des detaillierten Mechanismus nahezu zur Deckung. Bei Annahme partiellen Gleichgewichts der Wassergas-Shift-Reaktion (Abb. 5.13) wird der CO-Molenbruch durch die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik nicht richtig wiedergegeben. Folglich unterscheidet sich auch der Verlauf des  $\text{CO}_2$ -Molenbruchs von demjenigen im Falle des detaillierten Reaktionsmechanismus. Wird jedoch die Quasistationarität des Wasserstoffs vorausgesetzt (Abb. 5.14) können die Verläufe der Molenbrüche beider Spezies, CO und  $\text{CO}_2$  mit guter Genauigkeit reproduziert werden; folglich wird diese Annahme zur Simulation der reagierenden Drallströmung (s. Kap. 6) verwendet.

## 5.7 Hilfsgrößen zur Analyse der Simulationsergebnisse

### 5.7.1 Normierte Stromfunktion

Als Darstellungsgröße für die radialen Verläufe des axialen Massenstroms kann die sog. normierte Stromfunktion herangezogen werden:

$$\Psi = \frac{2\pi \int_0^r (\rho \cdot u \cdot r \cdot dr)}{\dot{M}_{ges}} = \frac{\int_0^r (\rho \cdot \bar{u} \cdot r \cdot dr)}{\int_0^R (\rho \cdot \bar{u} \cdot r \cdot dr)}, \quad (5.24)$$

deren Isolinien in zweidimensionalen, stationären Strömungen anschaulich als Strombahnen von Teilchen gedeutet werden können, welche sich ohne Schlupf mit der mittleren Strömung mitbewegen. In rotationssymmetrischen Strömungen steht ihr lokaler Wert für den Massenstrom, der zwischen Rotationsachse und aktuellem Radius in axialer Richtung fließt. [58]

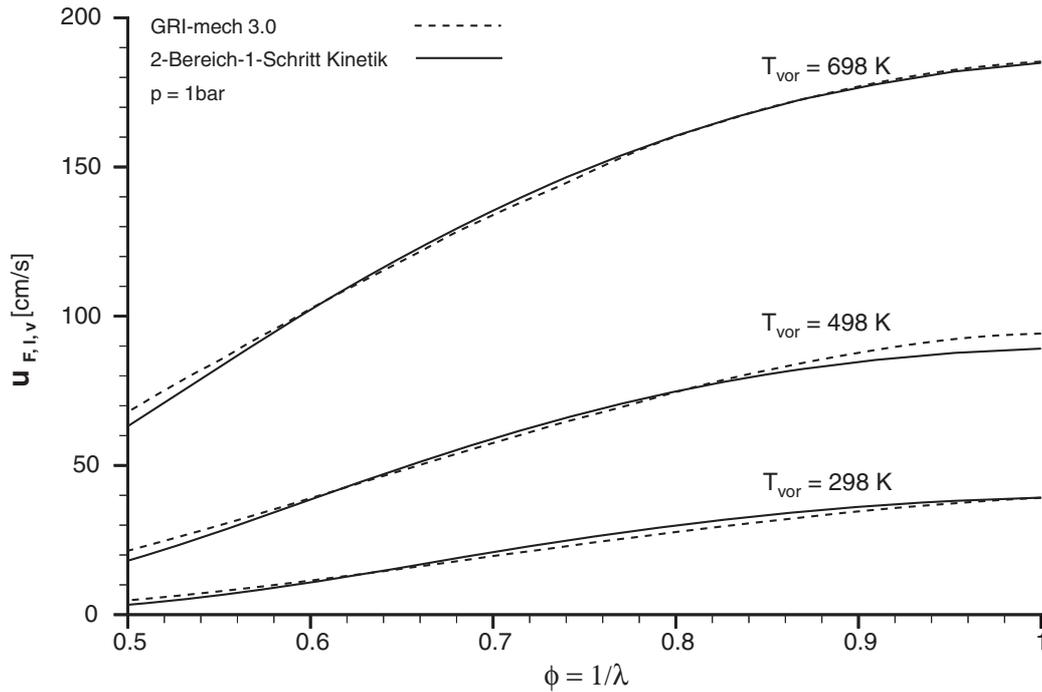


Abbildung 5.11: Vergleich berechneter, laminarer Flammgeschwindigkeiten unter Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus und der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bei Annahme partiellen Gleichgewichts der Wassergas-Shift-Reaktion

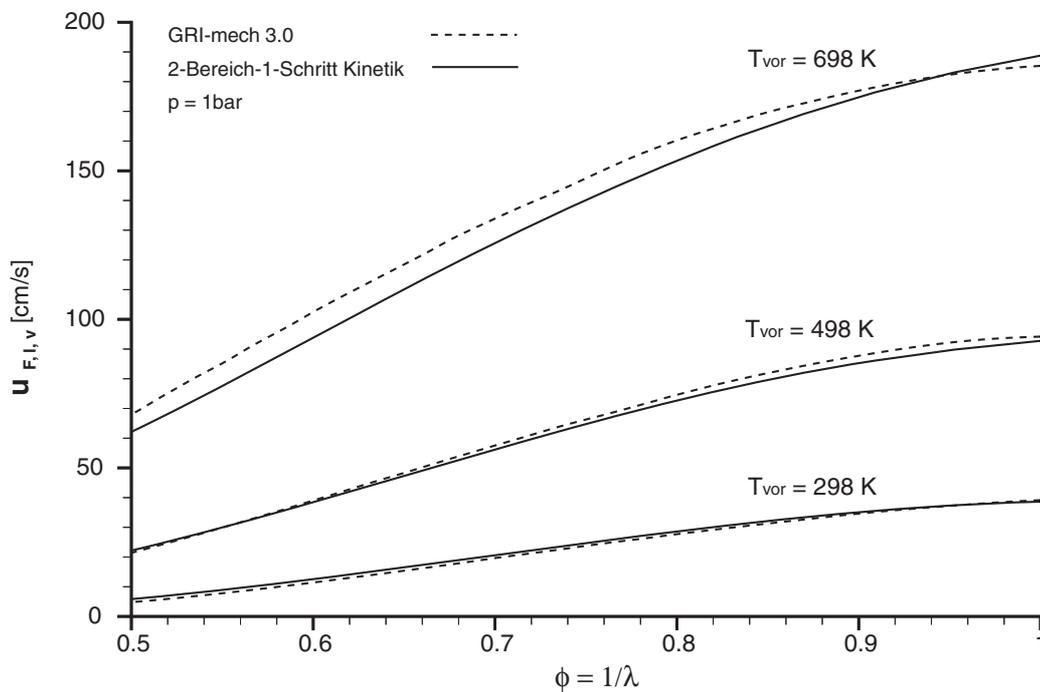


Abbildung 5.12: Vergleich berechneter, laminarer Flammgeschwindigkeiten unter Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus und der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bei Annahme der Quasistationarität des Wasserstoffs

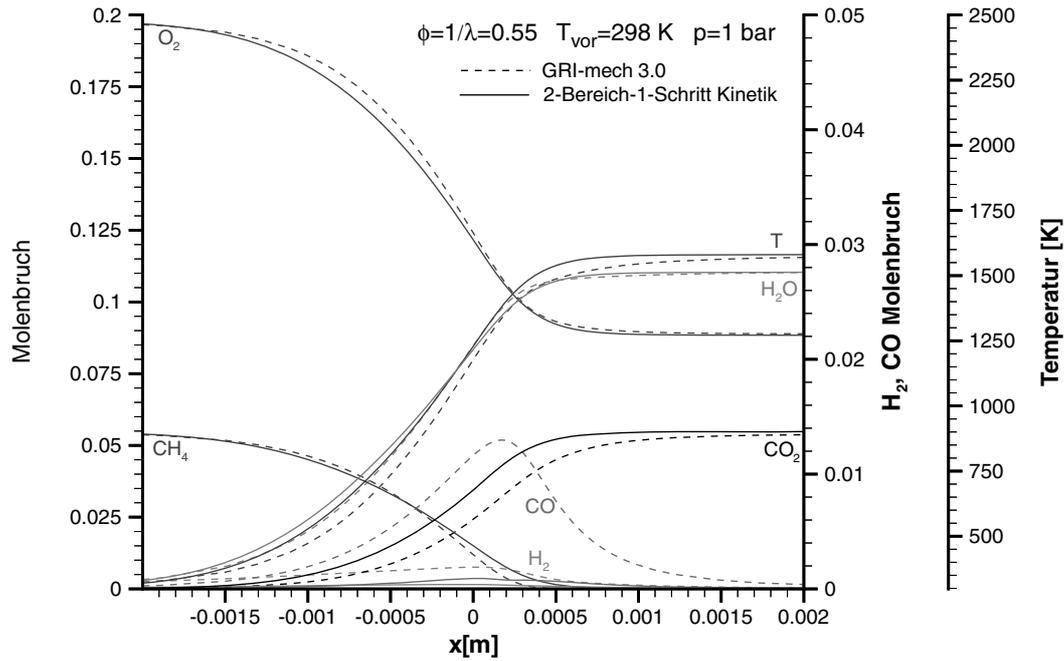


Abbildung 5.13: Berechnete Struktur der 1-dimensionalen, laminaren Vormischflamme unter Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus und der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bei Annahme partiellen Gleichgewichts der Wassergas-Shift-Reaktion

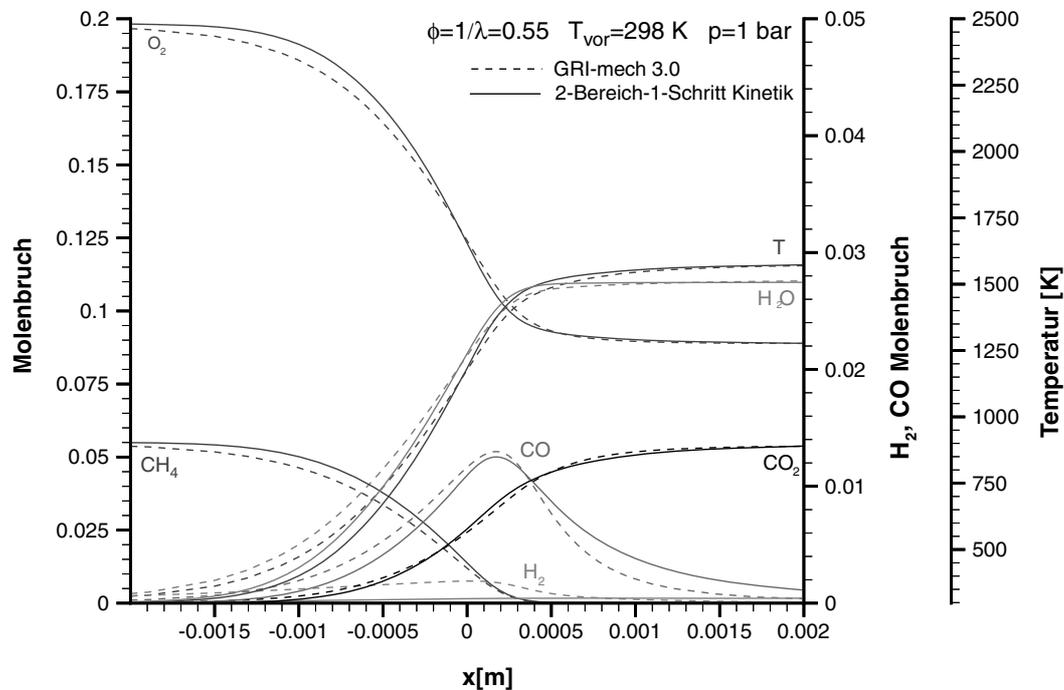


Abbildung 5.14: Berechnete Struktur der 1-dimensionalen, laminaren Vormischflamme unter Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus und der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bei Annahme der Quasistationarität des Wasserstoffs

## 5.7.2 Lokale Luftzahl und lokaler Ausbrandgrad

Basierend auf der Sauerstoffbilanz der oxidativen Verbrennungsreaktion in  $\text{CH}_4/\text{Luft}$ -Gemischen können zwei zur Auswertung der Simulationsergebnisse dienliche, feldlokale Größen abgeleitet werden: die lokale Luftzahl zur Beschreibung des Mischungszustandes und der lokale Ausbrandgrad zur Beschreibung des Reaktionsfortschritts. Unter Berücksichtigung der Spezies  $\text{CH}_4$ ,  $\text{O}_2$ ,  $\text{N}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  lassen sich hierzu verschiedene charakteristische Sauerstoffkonzentrationen definieren [58]:

- “chemisch gebundener Sauerstoff” ist der bereits in Zwischen- oder Endprodukten enthaltene Sauerstoffanteil:

$$C_{\text{O}_2,geb} = 0,5 \cdot \sum_k^{N_k} (\nu_k^j \cdot C_k) , \quad \begin{cases} k \neq \text{Sauerstoff (O}_2) \\ j = \text{Sauerstoffatom (O)} \end{cases}$$

$$C_{\text{O}_2,geb}^{\text{CH}_4} = 0,5 \cdot C_{\text{CO}} + C_{\text{CO}_2} + 0,5 \cdot C_{\text{H}_2\text{O}} , \quad (5.25)$$

- “erforderlicher Sauerstoff” ist der für die vollständige Oxidationsreaktion erforderliche Sauerstoff:

$$C_{\text{O}_2,erf} = \sum_k^{N_k} \sum_j^{N_j} (\nu_k^j \cdot \zeta_j \cdot C_k) ,$$

$$C_{\text{O}_2,erf}^{\text{CH}_4} = 2 \cdot C_{\text{CH}_4} + C_{\text{CO}} + 0,5 \cdot C_{\text{H}_2} + C_{\text{CO}_2} + 0,5 \cdot C_{\text{H}_2\text{O}} , \quad (5.26)$$

- “vorhandener Sauerstoff” ist der in der lokalen Mischung insgesamt vorhandene Sauerstoffanteil

$$C_{\text{O}_2,vorh} = 0,5 \cdot \sum_k^{N_k} (\nu_k^j \cdot C_k) , \quad \begin{cases} k : \text{alle Spezies} \\ j = \text{Sauerstoffatom (O)} \end{cases}$$

$$C_{\text{O}_2,vorh}^{\text{CH}_4} = C_{\text{O}_2} + 0,5 \cdot C_{\text{CO}} + C_{\text{CO}_2} + 0,5 \cdot C_{\text{H}_2\text{O}} , \quad (5.27)$$

worin  $N_k$  die Anzahl der Spezies  $k$ ,  $N_j$  die Anzahl der Elemente  $j$ ,  $\nu_k^j$  die Anzahl der Elemente  $j$  in der Spezies  $k$  bezeichnet.  $\zeta_j$  ist schließlich der stöchiometrische Sauerstoffbedarf des chemischen Elements  $j$  nach Tab. 5.3, wobei Stickstoff als inerte Komponente angenommen wird.

Element $j$	C	O	H	N
$\zeta_j$	1	0	0,25	0

Tabelle 5.3: Stöchiometrischer Sauerstoffbedarf verschiedener Elemente

### Lokale Luftzahl

Mit (5.27) und (5.26) lässt sich die lokale Luftzahl als Verhältnis von lokal in der Mischung vorhandenem Sauerstoff zu für die vollständige Oxidation erforderlichem Sauerstoff wie folgt darstellen:

$$\lambda_{loc} = \frac{C_{\text{O}_2,vorh}}{C_{\text{O}_2,erf}} . \quad (5.28)$$

## Lokaler Ausbrandgrad

Der lokale Ausbrandgrad ist ein Maß für den Fortschritt der Verbrennungsreaktion und kann für überstöchiometrische Mischungen nach LEUCKEL [101] als Verhältnis aus chemisch gebundenem Sauerstoff zu für die vollständige Oxidation erforderlichem Sauerstoff definiert werden:

$$\alpha_O = \frac{C_{O_2,geb}}{C_{O_2,erf}} . \quad (5.29)$$

Im Falle unterstöchiometrischer Zusammensetzungen ist der Reaktionsfortschritt jedoch nicht durch die den Edukten entsprechende erforderliche Sauerstoffmenge  $C_{O_2,erf}$  limitiert, sondern durch das Sauerstoffangebot in der lokalen Mischung  $C_{O_2,vorh}$ , weshalb der nach (5.29) definierte Ausbrandgrad im Falle unterstöchiometrischer Verbrennung nicht eins werden kann.

Um eine im gesamten Stöchiometriebereich gültige Definition des Ausbrandgrades zu erhalten, reicht eine kleine Erweiterung der Definition nach (5.29) aus:

$$\alpha = \frac{C_{O_2,geb}}{\min [C_{O_2,erf}; C_{O_2,vorh}]} . \quad (5.30)$$

Diese Definition des Ausbrandgrades ist identisch der Definition der Reaktionsfortschrittsvariablen  $c$  (4.46) und wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit als Ausbrandgrad verwendet.

## Kapitel 6

### Ergebnisse der Simulation

Das zur numerischen Untersuchung der Stabilität nicht-vorgemischter Drallflammen herangezogene System wurde im vorhergehenden Kapitel (Kap. 5) im Detail beschrieben. Die dabei dargelegten systemspezifischen Charakteristika sowie der experimentelle Befund nach MERKLE [123] dienten der Ableitung der wesentlichen Anforderungen an die numerische Simulation. Diese in Abb. 5.5 zusammengefassten Anforderungen bilden die Grundlage zur Gliederung des vorliegenden Kapitels, in dem die Ergebnisse der numerischen Simulation der isothermen und reagierenden Drallströmung dargestellt und diskutiert werden.

Hierzu behandelt Kapitel 6.1 das isotherme Strömungsfeld der Gleich- und Gegendrallkonfiguration. Die dabei präsentierten Simulationsergebnisse, die sich entsprechend der in Kap. 5.4.2 beschriebenen Vorgehensweise auf stationäre CFD-Rechnungen (RANS) unter Verwendung des Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodells sowie Gitter-1 beziehen und auf den im Rahmen der Diplomarbeit von WINDMEIER [222] durchgeführten CFD-Berechnungen aufbauen, werden in der vorliegenden Arbeit neu bewertet und mit den experimentellen Ergebnissen von MERKLE [123] verglichen. Das isotherme Mischungsfeld ist Thema in Kap. 6.2. Dort werden Schwierigkeiten der Wiedergabe der experimentell bestimmten Mischungsverteilung aufgezeigt, mögliche Einflüsse untersucht und der verwendete Lösungsansatz zur Charakterisierung des Mischungsfeldes im Hinblick auf die Simulation der Drallflammen vorgestellt.

Für den Fall der reagierenden Gleichdrallströmung werden in Kap. 6.3 die Simulationsergebnisse bei Anwendung des turbulenten Reaktionsmodells (s. Kap. 4.3) vorgestellt, die Notwendigkeit der Charakterisierung lokaler Wärmeverluste sowie deren Einflüsse auf die chemische Reaktionskinetik (s. Kap. 4.4) dargelegt und damit die in Kap. 5.4.2 beschriebene Vorgehensweise zur Berechnung des Strömungs-, Mischungs- und Temperaturfeldes im Falle der reagierenden Drallströmung begründet. Ein Vergleich der Simulationsergebnisse mit jenen der entsprechenden Experimente nach MERKLE [123] für Gleich- und Gegendrallflamme bei einer thermischen Leistung von  $P_{th} = 15 \text{ kW}$  sowie die Gegenüberstellung der Unterschiede der Gleich- und Gegendrallflamme findet sich in Kap. 6.4. Abschließend wird in Kap. 6.5 das Verhalten des Systems sowohl nahe der Verlöschgrenze als auch nahe der Stabilitätsgrenze behandelt und die unterschiedliche Stabilität von Gleich- und Gegendrallkonfiguration diskutiert.

## 6.1 Isothermes Strömungsfeld

### 6.1.1 Zeitlich mittleres Strömungsfeld

#### Charakteristika der Strömung

**Normierte Stromfunktion:** Um einen Überblick über die globalen Charakteristika der sich einstellenden Strömung zu vermitteln, sind in Abb. 6.1 die Verteilungen der normierten Stromfunktion (s. Kap. 5.7.1) der Gleich- und Gegendrallkonfiguration sowohl für die CFD-Berechnungen als auch die Experimente einander gegenübergestellt. Hierin kommt den Isolinien mit den Werten null und eins besondere Bedeutung zu. Sie grenzen den Düsenstrahl (Strömungsbereiche in grüner Farbe) von den Bereichen der inneren Rezirkulationszone ( $\Psi \leq 0$ ; Blautöne) und der äußeren Rezirkulationszone ( $\Psi \geq 1$ ; gelb bis rot) ab und weisen damit die drei durch den sog. Vortex Breakdown (s. Kap. 2.3.6) induzierten Elemente der eingeschlossenen, verdrehten Strömung aus.

Die äußere Rezirkulationszone (Eckenwirbel) resultiert aus der radialen Begrenzung des Strömungsfeldes durch die Brennkammerwand, da die Strömung in diesem Fall keine Umgebungsluft einmischen kann, sondern im äußeren Randbereich eigenes Strahlmedium zurück saugt. Ihr Zentrum fällt mit dem Maximum der normierten Stromfunktion (schwarz gedruckte Zahlenwerte) zusammen, welches den im Eckenwirbel rezirkulierten Anteil des in die Brennkammer eintretenden Massenstromes angibt. Sowohl für die Gleich- als auch für die Gegendrallkonfiguration zeigt die Rechnung eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen bezüglich der Lage und der Form der äußeren Rezirkulationszone, jedoch größere Werte in den jeweiligen Maxima der normierten Stromfunktion und den größeren Maximalwert im Falle des Gleichdralls.

Der sich zu kleineren Radien hin, an die äußere Rezirkulationszone anschließende Düsenstrahl weitet sich direkt nach dem Eintritt in die Brennkammer auf und legt sich im Falle des Gleichdralls bei einem Axialabstand von  $x/R_0 \approx 2,5$ , im Falle des Gegendralls bei  $x/R_0 \approx 2,8$  an die Brennkammerwand an. Hierbei weist die Gegendrallkonfiguration einen etwas kleineren Öffnungswinkel auf. Beide in den Experimenten festgestellten Charakteristika können durch die Rechnung richtig wiedergegeben werden.

Die innere Rezirkulationszone begrenzt den strahldominierten Bereich des Strömungsfeldes hin zum Zentrum der Brennkammer. Sie ist längs deren Symmetrieachse ausgebildet und erstreckt sich in axialer Richtung über den experimentell erfassten Bereich hinaus. Ihr Rotationszentrum ist durch das Minimum der Stromfunktion gekennzeichnet und liegt gemäß der Definition der normierten Stromfunktion (5.24) auf der Isotache  $\bar{u}/u_0 = 0$  (gestrichelte Linie) der normierten, mittleren Axialgeschwindigkeit, während die Isolinie  $\Psi = 0$  (s. Abb. 6.1) zu etwas größeren Radien hin verschoben ist. Somit ist die innere Rezirkulationszone von der durch negative Axialgeschwindigkeiten gekennzeichneten inneren Rückströmzone (s. Abb. 6.2) zu unterscheiden. Die Minima der Stromfunktion (weiß gedruckte Zahlenwerte) repräsentieren den in der inneren Rezirkulationszone umlaufenden Anteil des in die Brennkammer eintretenden Massenstromes, sind also ein Kennzeichen für die Stärke der inneren Rezirkulationszone. Im Vergleich mit dem Experiment zeigt die Rechnung eine gute Übereinstimmung in Form und Lage der jeweiligen inneren Rezirkulationszonen und trifft im Falle des Gegendralls exakt den Wert des Stromfunktionsminimums. Für die Gleichdrallkonfiguration wurde im Experiment ein gegenüber dem Gegendrall dem Betrag nach kleinerer Wert des

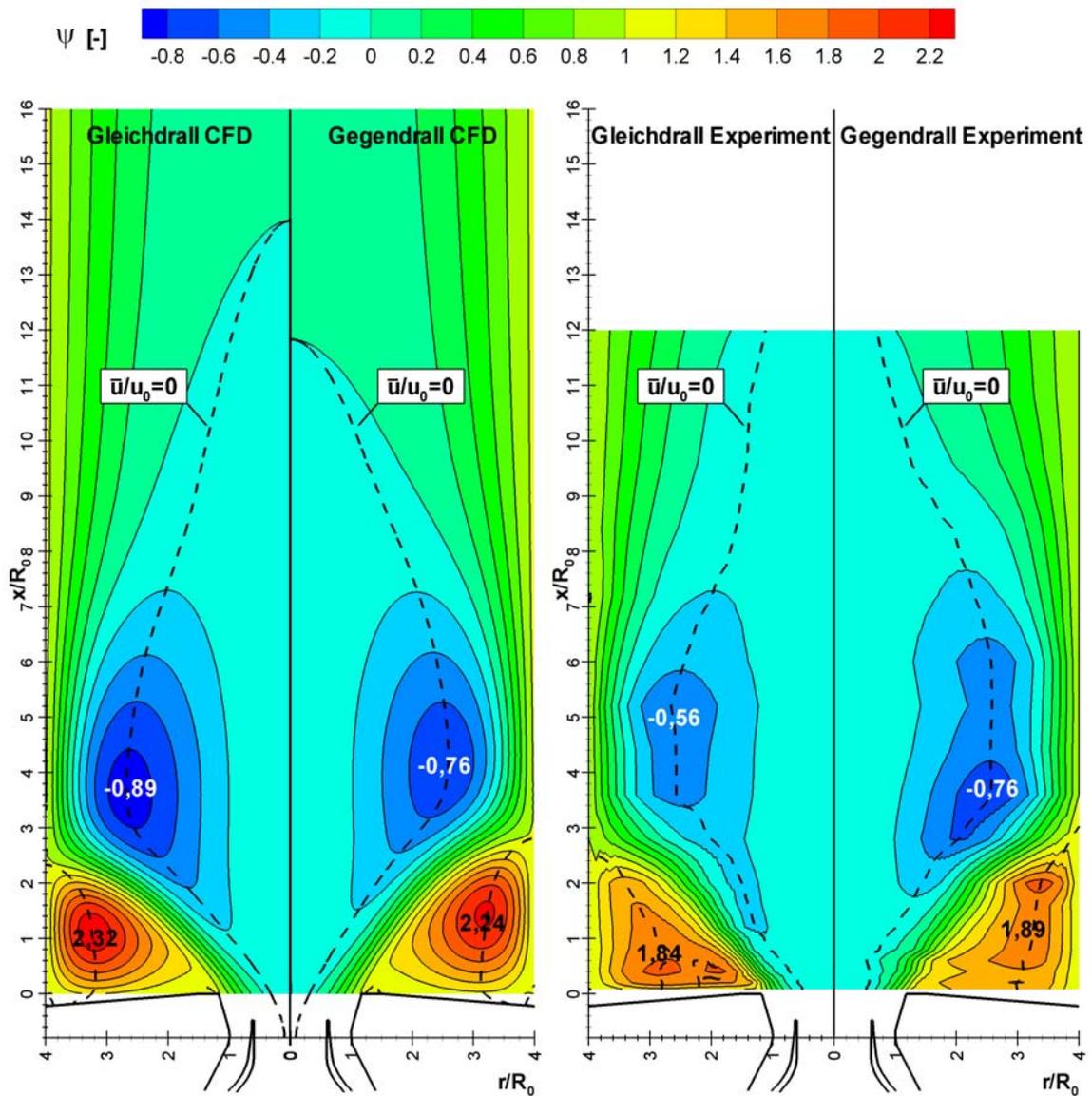


Abbildung 6.1: Berechnete und experimentell bestimmte Verteilung der normierten Stromfunktion für Gleich- und Gegendrallkonfiguration

Stromfunktionsminimums festgestellt, in der Rechnung jedoch ein größerer. Im Gegensatz zum Experiment prognostiziert die Rechnung somit eine stärkere Rezirkulation im Fall des Gleichdralls. Dieser Widerspruch soll im Rahmen dieser Arbeit nicht weiter diskutiert werden, da er im Falle der reagierenden Drallströmung nicht existent ist und somit eine Klärung keinerlei Beitrag zur Untersuchung des Stabilisierungsverhaltens des Systems erbringen würde.

**Zeitlich mittlere Axialgeschwindigkeit:** In Analogie zur Feldverteilung der normierten Stromfunktion (Abb. 6.1) zeigt Abb. 6.2 die mit dem Wert der volumetrisch gemittelten Austrittsgeschwindigkeit im Halsradius der Doppeldralldüse  $u_0$  (s. Gl. (5.9) und Tab.5.2) normierte, zeitlich mittlere Axialgeschwindigkeit im Vergleich von Gleich- und Gegendrallkonfiguration für CFD-Rechnung und Experiment. Hierin sind nega-

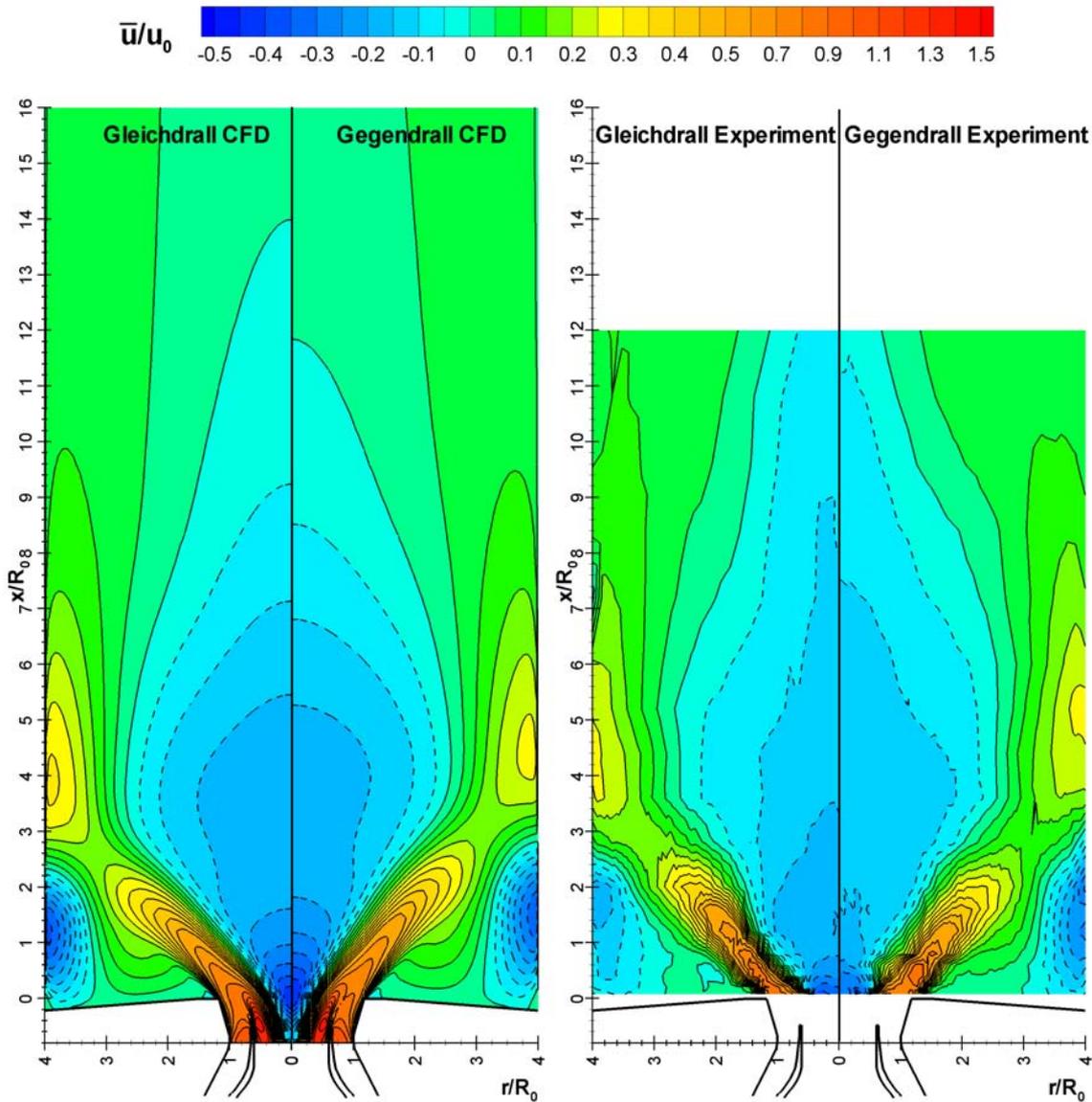


Abbildung 6.2: Berechnete und experimentell bestimmte Verteilung der mittleren Axialgeschwindigkeit für Gleich- und Gegendrallkonfiguration

tive Axialgeschwindigkeiten durch blau eingefärbte Bereiche markiert, die negativen Isotachen unterbrochen dargestellt. Im Vergleich mit der Verteilung der normierten Stromfunktion (Abb. 6.1) fällt auch hier die gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Rechnung bezüglich der Form und Lage der Eckenwirbel auf; der im Falle des Gegendralls kleinere Öffnungswinkel wird ebenfalls bestätigt. Isotachen des Wertes  $\bar{u}/u_0 = 0$  grenzen Bereiche vorwärts gerichteter von solchen rückwärts gerichteter Strömung ab, wonach aus dieser Darstellung deutlich die Form und Lage der inneren Rückströmzone  $\bar{u}/u_0 < 0$  ersichtlich ist. Die Form der inneren Rückströmzone, d.h ihre radiale und axiale Ausdehnung zeigen für Gleich- sowie Gegendrallkonfiguration eine gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Rechnung, wobei letztere zu etwas längeren, sich später schließenden Rückströmzonen tendiert.

Für düsenferne Bereiche ( $x/R_0 \geq 2,5$ ) weist der Gleichdrall bei gleichen Düsenabstän-

den dem Betrag nach größere Rückströmgeschwindigkeiten auf der Brennkammerachse auf, als der Gegendrall. Dieses Verhältnis kehrt sich bei genauer Betrachtung - im Experiment nur ansatzweise zu erkennen - für kleine Düsenabstände ( $x/R_0 < 2,5$ ) um. Da dieser Befund auch im Falle der reagierenden Drallströmung Gültigkeit besitzt, wird an dieser Stelle auf eine genauere Analyse verzichtet und auf die entsprechenden Ausführungen für den reagierenden Fall verwiesen.

### Radialprofile der zeitlich mittleren Geschwindigkeiten

Zum detaillierten Vergleich mit den experimentell ermittelten Daten sowie der Diskussion der Unterschiede von gleich- und gegensinnig verdrallter Strömung sind in Abb. 6.3 die radialen Profile der zeitlich mittleren Geschwindigkeiten für ausgewählte, axiale Ebenen dargestellt. Die Messdaten sind hierin durch gestrichelte Linien gekennzeichnet, die Simulationsergebnisse mit durchgezogenen. Die unterschiedlichen Geschwindigkeitskomponenten werden durch die Farben rot ( $\bar{u}/u_0$ ), grün ( $\bar{v}/u_0$ ) und blau ( $\bar{w}/u_0$ ) repräsentiert.

Für weiter von der Düse entfernte axiale Ebenen ( $x/R_0 \geq 1,6$ ) zeigen Simulation und Experiment eine gute Übereinstimmung bezüglich des qualitativen Verlaufs sowie des Betrags der Radialprofile aller Geschwindigkeitskomponenten. Lediglich die negativen Axialgeschwindigkeiten nahe der Brennkammerachse zeigen mit zunehmendem Düsenabstand größere Unterschiede zwischen Rechnung und Messung, insofern dass die Messung dem Betrag nach größere Rückströmgeschwindigkeiten aufweist. Im Vergleich mit der Simulation, schließen sich also die Rückströmzonen im Falle der Messungen erst bei größeren Düsenabständen. Der Hauptunterschied zwischen Gleich- und Gegendrallkonfiguration in diesem düsenfernen Bereich liegt im unterschiedlichen Vorzeichen der Tangentialgeschwindigkeit sowie den betragsmäßig größeren Tangentialgeschwindigkeiten im Falle des Gleichdralls. Dies resultiert aus der wechselseitigen Kompensation bei der additiven Überlagerung der gegensinnig orientierten Drehimpulsströme im Falle des Gegendralls, wobei der positiv orientierte sekundäre Drehimpulsstrom überwiegt und damit die positive Tangentialgeschwindigkeit bedingt.

Im Folgenden soll der düsennahe Bereich des Strömungsfeldes ( $x/R_0 \leq 0,8$ ) näher diskutiert werden, da dieser von der jeweiligen Düseninnenströmung maßgeblich beeinflusste Bereich die signifikanteren Unterschiede zwischen Gleich- und Gegendrallkonfiguration aufweist. Hierbei werden zunächst anhand der Tangentialgeschwindigkeitsverteilung, die gemäß der Ausführungen in den Kapiteln 2.3.4 und 2.3.6 maßgeblich für die Ausbildung des Drehströmungsfeldes verantwortlich ist, die wesentlichen Unterschiede zwischen Gleich- und Gegendrallkonfiguration dargelegt, nachfolgend die radiale und axiale Geschwindigkeitskomponente behandelt.

**Tangentialgeschwindigkeit:** Im Falle des Gleichdralls weist die Tangentialgeschwindigkeit, dem Drehsinn der Strömung entsprechend, im gesamten Strömungsfeld negative Werte auf. Für die betrachteten düsennahen Bereiche ( $x/R_0 \leq 0,8$ ) nimmt sie, ausgehend vom Wert Null auf der Brennkammerachse, mit zunehmendem Radius zunächst ab, durchläuft ein Minimum, steigt daraufhin sehr steil und abrupt an und verläuft schließlich linear und leicht steigend bis nahezu an die Brennkammerwand.

Hierbei ist anzumerken, dass das Abfallen<sup>1</sup> der Tangentialgeschwindigkeit im Zentrum der Drehströmung nicht streng einem dem Festkörperwirbel entsprechenden linearen Gesetz ( $\partial(-\bar{w})/\partial r \propto r$ ) folgt und auch ihr Anstieg jenseits des Minimums steiler als dem Potentialwirbel entsprechend ( $\partial(-\bar{w})/\partial r \propto 1/r$ ) verläuft. Auch können die diskreten Minima der beiden Drallkanäle weder in der Rechnung noch in der Messung eindeutig voneinander unterschieden werden, sind also schon in der ersten Messebene weitgehend miteinander verschmolzen. Die Rechnung resultiert in einer qualitativ guten Übereinstimmung mit den Experimenten, speziell bezüglich des Betrages und der radialen Lage der Minima.

Für  $x/R_0 = 0,08$  zeigt das radiale Tangentialgeschwindigkeitsprofil der Gegendrallkonfiguration bei kleinen Radien einen dem Gleichdrall sehr ähnlichen Verlauf. Durch Überlagerung mit der gegensinnig verdrallten Sekundärströmung wird das dem Primärkanal entstammende, radial abfallende Tangentialgeschwindigkeitsprofil gedämpft. Folglich weist es im Vergleich zum Gleichdrall ein weniger stark ausgeprägtes Minimum auf. Mit zunehmendem Radius überwiegt die positive Rotationsgeschwindigkeit des Sekundärdralls, sodass die Tangentialgeschwindigkeit nach Durchlaufen eines Vorzeichenwechsels, ein Maximum aufzeigt, dann zunächst abrupt und schließlich für große Radien linear und mit geringer Steigung zur Brennkammerwand hin abfällt. Im Gegensatz zum Falle des Gleichdralls ist eine Abweichung des berechneten Tangentialgeschwindigkeitsprofils von den Messergebnissen vor allem in dem vom Sekundärdrall beeinflussten Bereich, d.h. in der Dämpfung des achsnahen Minimums sowie im Betrag und in der Lage des Maximums, festzustellen. Die Simulation unterschätzt hier die wechselseitige Kompensation der additiv überlagerten, gegensinnig orientierten Drehimpulsströme. Im Falle des Experiments überwiegt die Sekundärdrallströmung schon bei  $x/R_0 = 0,8$ , was sich in einer über den gesamten Radius positiven Tangentialgeschwindigkeit äußert. Dieses spätere Verschwinden des inneren Minimums der Tangentialgeschwindigkeit in der Simulation deutet bereits auf einen zu geringfügig gewichteten turbulenten Impulsaustausch hin.

**Radialgeschwindigkeit:** Wie schon die Tangentialgeschwindigkeiten streben auch die Radialgeschwindigkeiten für beide Drallkonfigurationen zur Brennkammerachse hin gegen null und bestätigen damit die Erwartung eines rotationssymmetrischen Strömungsfeldes, das somit keinen zeitlich mittleren konvektiven Austausch über die Brennkammerachse hinweg aufweist.

Im Falle des Gleichdralls lassen sich für  $x/R_0 = 0,08$  in den Ergebnissen sowohl der Simulation als auch des Experiments tendentiell zwei lokale Maxima im radialen Verlauf der Radialgeschwindigkeitsprofile erkennen, welche das Aufplatzen der Strömung nach Eintritt in die Brennkammer, d.h. den radial nach außen gerichteten konvektiven Transport des Strahlmediums anzeigen. Ihre radiale Position korreliert mit der Düsengeometrie (Innenradius der Zerstäuberlippe:  $r/R_0 \approx 0,6$ ; Düsenaustrittsradius:  $r/R_0 \approx 1,1$ ). Das dazwischen liegende Minimum, das auf den Einfluss der die beiden Drallströmungen voneinander trennenden Zerstäuberlippe hindeutet, ist in der Simulation deutlich schwächer ausgeprägt, während diese das innere Maximum überschätzt. Die negativen Radialgeschwindigkeiten bei großen Radien ( $r/R_0 \geq 1,2$ ) belegen die Existenz der äußeren Rezirkulationszone. Für  $x/R_0 = 0,8$  resultiert die Simulation in

---

<sup>1</sup>im Gegensatz zu Kap. 2.3.4 ist hier die Tangentialgeschwindigkeit auf Grund der Definition der Drehrichtung mit umgekehrtem Vorzeichen zu verwenden.

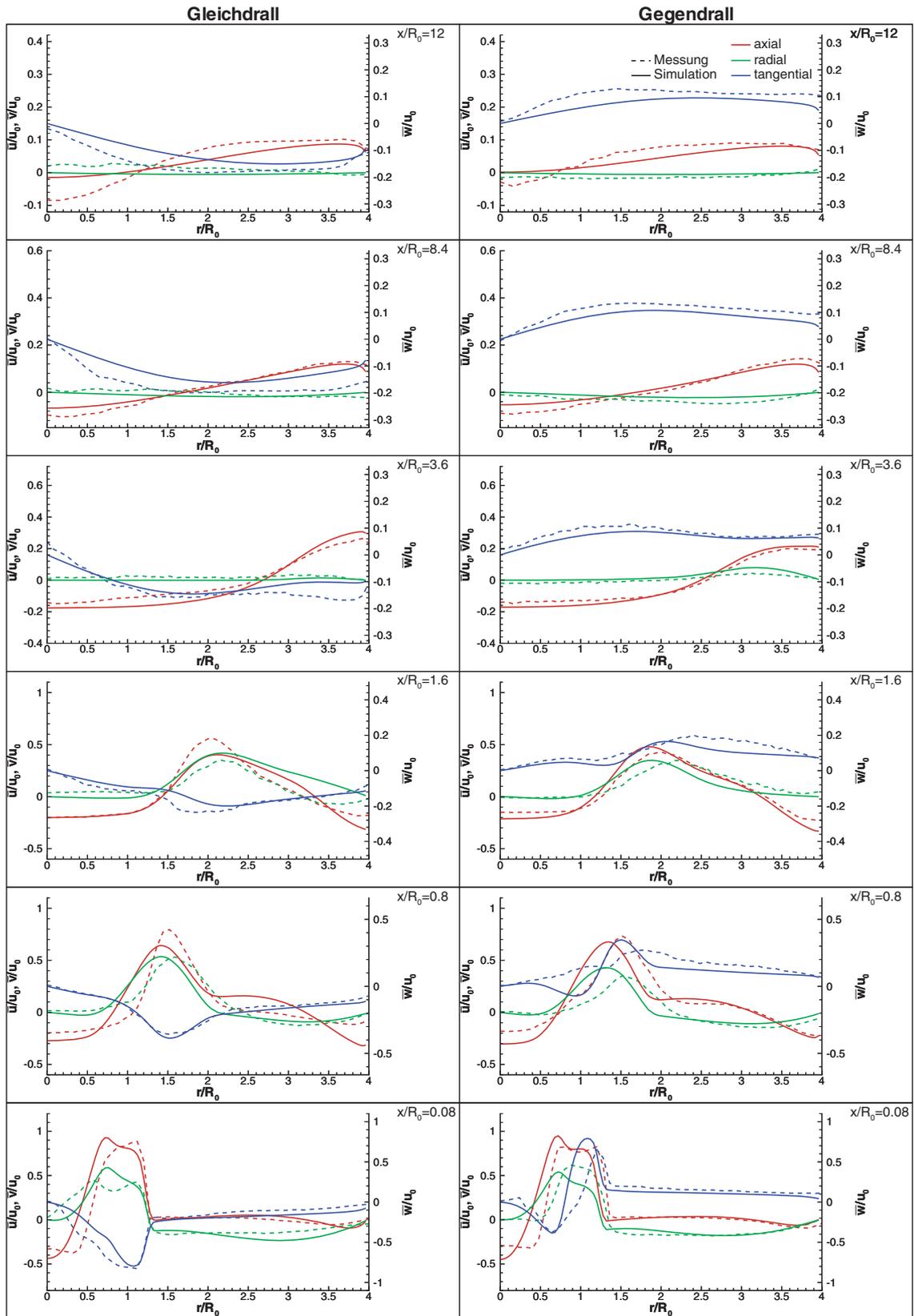


Abbildung 6.3: Radialprofile der mittleren Geschwindigkeitskomponenten für Gleich- und Gegendrallkonfiguration

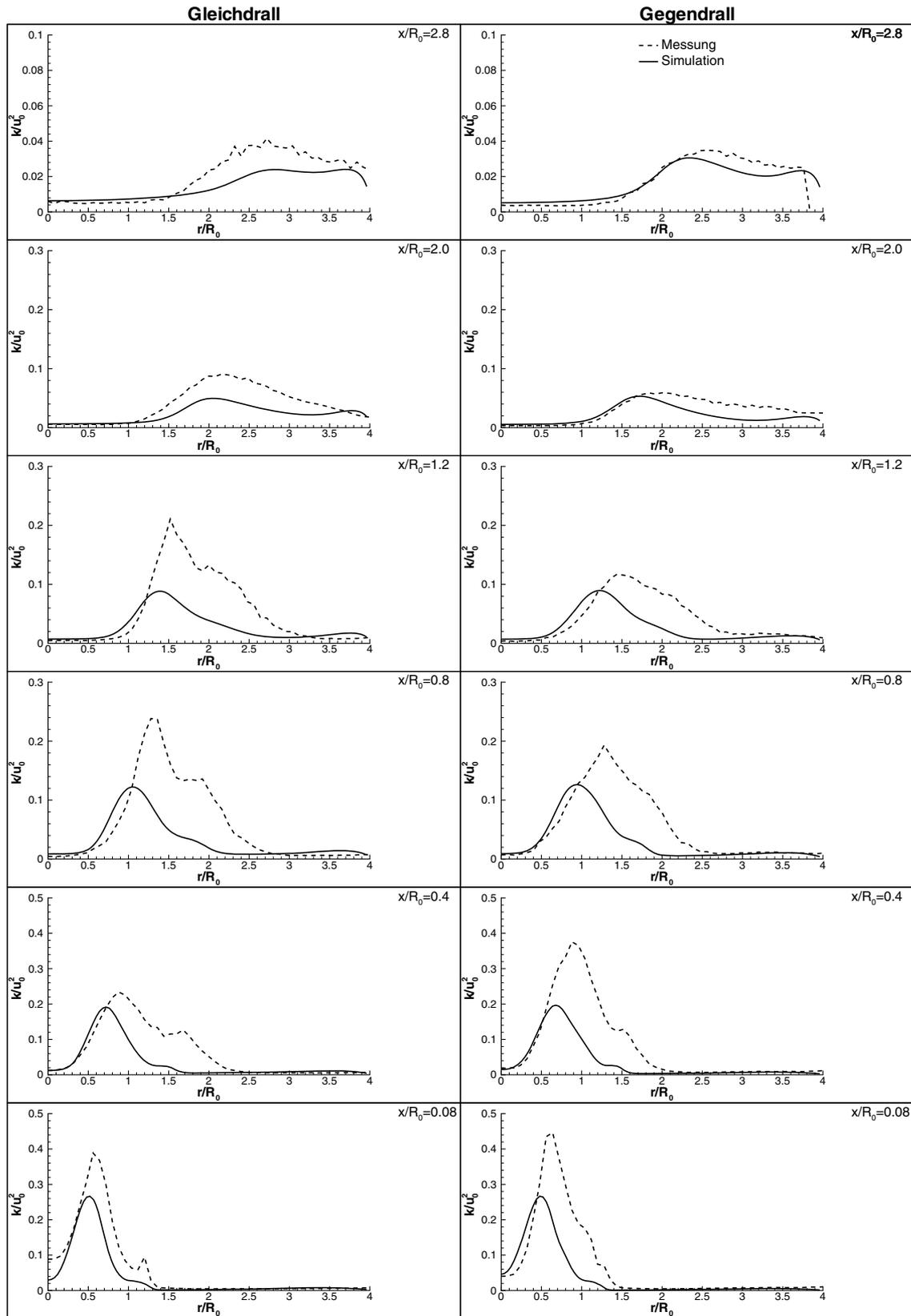


Abbildung 6.4: Radialprofile der turbulenten kinetischen Energie für Gleich- und Gegendrallkonfiguration

einer Verschiebung der Position des Radialgeschwindigkeitsmaximums hin zu kleineren Radien. Die äußere Rezirkulationszone, erkennbar am gegenüber der axialen Ebene  $x/R_0 = 0,08$  hier bei größeren Radien lokalisierten Vorzeichenwechsel ( $r/R_0 \geq 2,0$ ), hat geringeren Einfluss.

Die Messergebnisse der Gegendrallkonfiguration zeigen in direkter Düsenähe keine diskreten lokalen Maxima auf. Dahingegen sind diese in der Rechnung tendenziell zu erkennen. Dieser Unterschied resultiert aus dem in den Experimenten im Nachlauf der Zerstäuberlippe beobachteten, nach innen drehenden Mündungswirbel [123], welcher in der Simulation weder anhand negativer Radialgeschwindigkeiten noch einer Kontraktion der Stromlinien (s. Abb. 6.1) detektiert werden kann.

**Axialgeschwindigkeit:** Das Hauptcharakteristikum der radialen Axialgeschwindigkeitsprofile sind ihre negativen Werte nahe der Brennkammerachse, welche die innere Rückströmzone repräsentieren. Im Vergleich Simulation - Experiment zeigen sich hier geringfügige Abweichungen; Gleich- und Gegendrallkonfiguration besitzen sehr ähnliche Verläufe.

Für  $x/R_0 = 0,08$  ist die innere Rückströmzone zu größeren Radien hin von einer Zone hoher Axialgeschwindigkeiten umgeben, die zu beiden Seiten durch steile radiale Gradienten begrenzt ist. Sie kennzeichnet den strahldominierten Bereich des Strömungsfeldes und weist zumindest in der Simulation beider Drallkonfigurationen sowie in der Messung des Gegendralls ein lokales Minimum auf, das wie schon im Falle der Radialgeschwindigkeiten aus dem Einfluss der stromauf liegenden Zerstäuberlippe resultiert und somit die Mischzone zwischen Primär- und Sekundärluftstrom markiert. Außerhalb des strahldominierten Bereiches schließt sich in dieser Ebene direkt oberhalb der Kopfplatte eine Zone nahezu verschwindender Axialgeschwindigkeiten an.

Für  $x/R_0 = 0,8$  zeichnet sich in diesem Radienbereich der Einfluss der äußeren Rezirkulationszone in den deutlich negativen Geschwindigkeiten nahe der Brennkammerwand und dem stark verbreiterten Gebiet positiver Axialgeschwindigkeiten, im Übergang Strahl - äußere Rezirkulationszone, ab. Die Rechnung tendiert in dieser axialen Ebene zu kleineren Maximalwerten sowie zu einer Verschiebung derer Position auf kleinere Radien.

### 6.1.2 Turbulenz im isothermen Strömungsfeld

Die Diskussion der Unterschiede zwischen Gleich- und Gegendrall sowie Simulation und Experiment bezüglich der Turbulenzgrößen des isothermen Strömungsfeldes soll anhand der turbulenten kinetischen Energie  $k$ , die gemäß (4.2) als die halbe Summe der Reynolds'schen Normalspannungen definiert ist, erfolgen. Diese ist in Abb. 6.4 in normierter Form dargestellt, wobei gestrichelte Linien die experimentellen Ergebnisse und durchgezogene Linien jene der Simulation repräsentieren. Die ausgewählten axialen Ebenen beschränken sich auf den düsennahen Bereich, der hierdurch feiner aufgelöst dargestellt werden kann.

Für beide Drallkonfigurationen ist die turbulente kinetische Energie in der düsenächsten axialen Ebene im Bereich der Mischung zwischen Primär- und Sekundärluftstrom am größten. Mit zunehmendem Düsenabstand flachen die Profile unter Abnahme der Maxima und Verlagerung derer Position zu größeren Radien hin ab. Deutlich ins Auge fallen die für die Rechnung betragsmäßig erheblich kleineren Werte an den jeweiligen

Extremstellen. Letztere sind - wie auch die maximalen radialen Gradienten der Axialgeschwindigkeit ( $\partial u/\partial r$ , s. Abb. 6.3) - in der Rechnung bei tendenziell kleineren Radien zu finden als im Experiment.

Für das Experiment weisen die radialen Profile der turbulenten kinetischen Energie wesentliche Unterschiede zwischen gleich- und gegensinnig verdrallter Strömung auf. So sind im Falle des Gegendralls in direkter Düsenähe  $x/R_0 \leq 0,4$  größere Maximalwerte festzustellen, die mit zunehmendem Abstand von der Düse jedoch schneller abgebaut werden als in der Gleichdrallkonfiguration, sodass in dieser für  $x/R_0 \geq 0,8$  die größeren Maximalwerte der turbulenten kinetischen Energie vorherrschen. MERKLE [123] führt diesen "erhöhten Feldgehalt an turbulenter kinetischer Energie im Strömungsfeld der Gleichdralldüse in axialen Distanzen  $x/R_0 > 0,6$  auf eine instabilere, radiale Strömungsschichtung im Bereich des vorwärtsströmenden Ringstrahls" zurück, indem er simultan die radialen Profile von Tangentialgeschwindigkeit, Rayleigh-Kriterium ( $\partial \rho \Gamma^2 / \partial r$ , s. Kap. 2.3.7) und turbulenter kinetischer Energie der Gleich- und Gegendralldüse vergleicht. Demnach sei im Falle des Gleichdralls einerseits ein flacherer Anstieg der Tangentialgeschwindigkeit und daraus resultierend eine geringere Dämpfungswirkung auf den Turbulenzaustausch im Bereich des Festkörperwirbels zu verzeichnen, andererseits zeige sich am äußeren Strahlrand ein steileres Abfallen der Tangentialgeschwindigkeit, das mit einer stärkeren Anfachung des turbulenten Austausches gekoppelt sei, wodurch sich das langsamere Abklingen der turbulenten kinetischen Energie im Falle der Gleichdralldüse ergebe [123]. Wie auch MERKLE weiter ausführt, werde der Einfluss der Tangentialgeschwindigkeitsverteilung auf die turbulenten Austauschgrößen durch die Boussinesq-Hypothese (s. Kap. 4.1.2.3) nicht erfasst. Folglich ist es kaum verwunderlich, dass die Ergebnisse der Simulation unter Verwendung des Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodells die in den Experimenten beobachteten Unterschiede in der turbulenten kinetischen Energie nicht wiedergeben können, sogar für Gleich- und Gegendrall nahezu identische Radialprofile dieser Turbulenzgröße in den düsenächsten Ebenen aufzeigen (s. Abb. 6.4).

## 6.2 Isothermes Mischungsfeld

### 6.2.1 Vergleich mit experimentellen Ergebnissen - Unterschiede Gleich-/Gegendrall

Im Vorfeld der angestrebten Untersuchungen zum Stabilisierungsverhalten der nicht-vorgemischten Gleich- bzw. Gegendrallflamme ist in der Simulation eine möglichst genaue Charakterisierung der Brennstoffverteilung anzustreben, da diese nach MERKLE [123] maßgeblich für die Stabilität der Verbrennung in diesem System verantwortlich sei. Zur Diskussion des Mischungsverhaltens von Gleich- und Gegendrall für Simulation und Experiment zeigt Abb. 6.5 die düsennahe Verteilung des Mischungsbruches ( $\bar{f}$ ), der nach (2.25) definiert ist (s. Kap. 4.3) und die Werte eins für reinen Brennstoff, null für reine Luft bzw.  $\bar{f} = 0,055$  bei stöchiometrischen Bedingungen ( $\text{CH}_4/\text{Luft}$ ) annimmt. Damit bedeuten in Abb. 6.5 blau eingefärbte Bereiche eine geringe Brennstoffkonzentration, während rot eingefärbte Bereiche stöchiometrische und überstöchiometrische Bereiche kennzeichnen. Grüne Färbung (z.B. bei  $x/R_0 = 3,0$ ) entspricht dem Wert des globalen Mischungsbruches  $\bar{f}_{glob} = 0,028$  ( $\lambda_{glob} = 2,0$ ) und

charakterisiert damit Regionen fortgeschrittener Brennstoff/Luft-Mischung.

In den experimentell bestimmten Mischungsbruchverteilungen der Gleich- und Gegendrallkonfiguration ist der Sekundärluftstrom anhand von Mischungsbruchwerten von  $\bar{f} \leq 0,028$  erkennbar. Dahingegen treten Brennstoff und Primärluft im Nachlauf des Primärluftkanals bereits vorgemischt in die Brennkammer ein, sodass sich nahestöchiometrische Gemischzusammensetzungen im Falle des Gleichdralls in radialer Richtung bis hin zur Brennkammerachse ausdehnen. Verglichen mit der Gleichdrallkonfiguration erstreckt sich im Falle des Gegendralls der Bereich nahestöchiometrischer Zusammensetzungen tiefer in die Brennkammer hinein. MERKLE [123] führt dies auf eine verzögerte Brennstoff/Luft-Mischung zurück; ein Charakteristikum der Gegendrallanordnung, aus dem sich die Erweiterung des stabilen Betriebsbereichs dieser Konfiguration ableiten lasse.

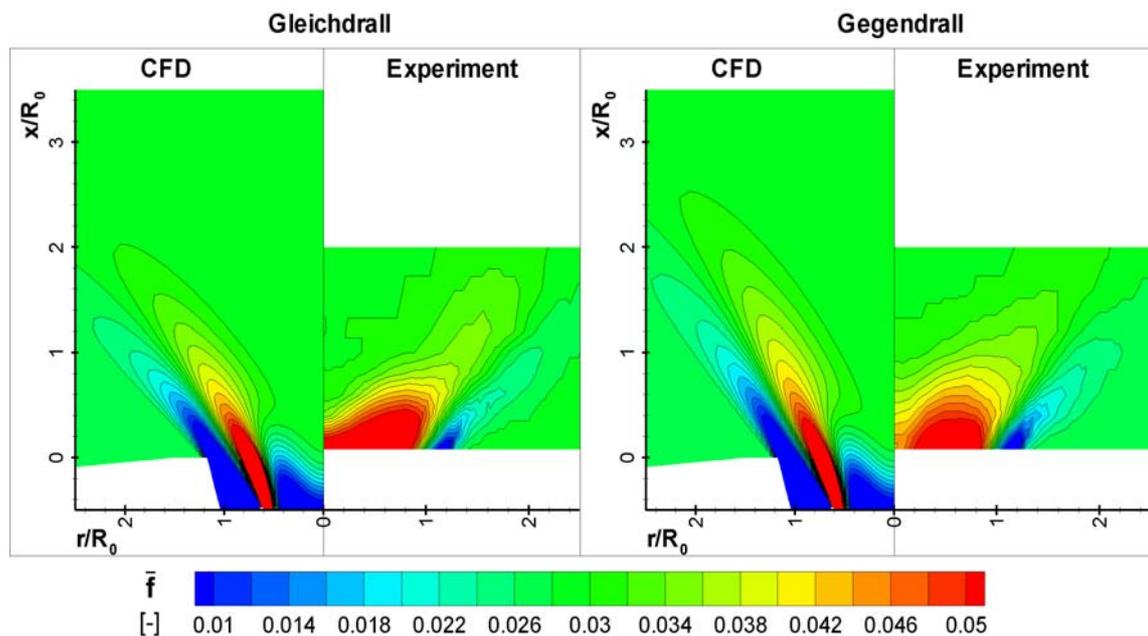


Abbildung 6.5: Mischungsbruchverteilung für Gleich- und Gegendrallkonfiguration

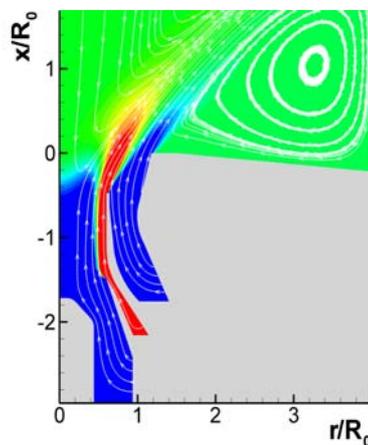


Abbildung 6.6: Strömung und Mischungsbruchverteilung in der Gleichdralldüse

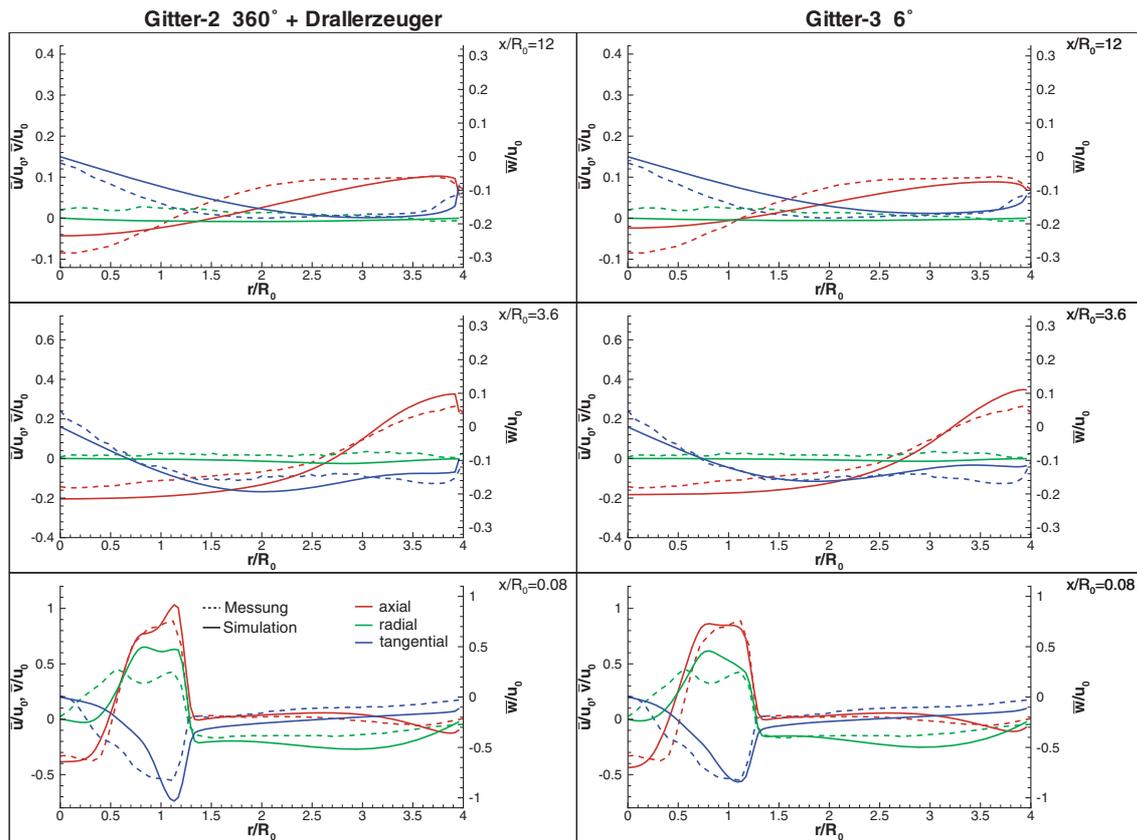


Abbildung 6.7: Radialprofile der mittleren Geschwindigkeitskomponenten für die Gleichdrallkonfiguration unter Verwendung von Gitter-2 und Gitter-3

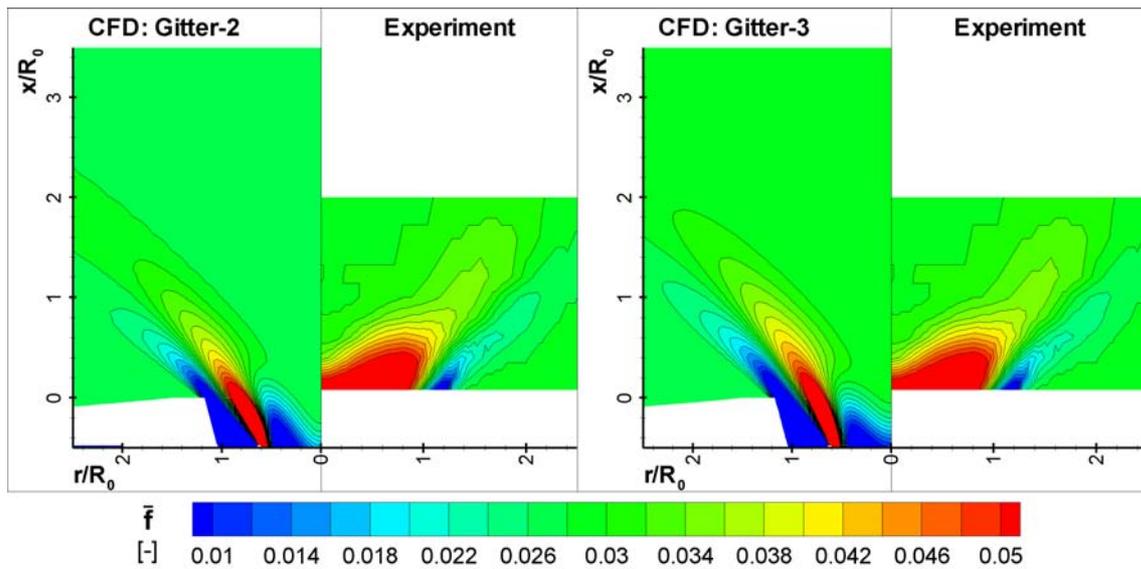


Abbildung 6.8: Mischungsbruchverteilung für die Gleichdrallkonfiguration unter Verwendung von Gitter-2 und Gitter-3

Auch die Ergebnisse der Simulation zeigen ein tieferes Eindringen von Bereichen nahestöchiometrischer Zusammensetzungen im Falle des Gegendralls und belegen damit die experimentell beobachtete Verzögerung der Brennstoff/Luft-Mischung. Gleichwohl, kann eine Vormischung im Primärkanal und damit eine Ausdehnung nahestöchiometrischer Bereiche bis hin zur Brennkammerachse von der CFD-Rechnung nicht wiedergegeben werden. So zeichnen sich in den Mischungsbruchverteilungen der Simulation deutlich voneinander unterscheidbare Strahlen von Primär-, Sekundärluft und Brennstoff ab. Ein von der Verbrennungsluft des Primärkanals abgegrenzter, sich nur teilweise mit dieser vermischender Brennstoffstrahl erscheint plausibel bei Betrachtung des zeitlich mittleren Strömungsfeldes, das innerhalb der Düse durch axiale Vorwärtsströmung geprägt ist und keine nach innen gerichtete, radiale Strömung aufweist. Zur Veranschaulichung zeigt Abb. 6.6 für die Simulation der Gleichdrallkonfiguration das der Mischungbruchverteilung überlagerte Strömungsfeld in der Düse anhand von Streichlinien im zweidimensionalen Halbschnitt, wobei die Kontur-Levels des Mischungsbruchs identisch zu Abb. 6.5 gewählt sind. Eine Konzentrationserhöhung in Achsnähe auf Grund des Rücktransports von Brennstoff aus stromab liegenden Bereichen durch die innere Rezirkulationszone kann ebenso ausgeschlossen werden, da diese lediglich Gemisch mit einer dem globalen Mischungsbruch entsprechenden Zusammensetzung rücktransportiert.

## 6.2.2 Numerische Untersuchungen zu den Einflüssen auf das Mischungsfeld

Das Phänomen der sich in Düsennähe bis auf die Brennkammerachse ausdehnenden Bereiche hoher Brennstoffkonzentration wurde bei gasbetriebenen Drallbrennern dieser und ähnlicher Bauform mehrfach experimentell nachgewiesen [119, 121, 123]. Da hierfür bislang keine geschlossene Erklärung existiert, wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit verschiedene numerische Untersuchungen exemplarisch für den Fall der isothermen Gleichdrallkonfiguration durchgeführt, auch um eventuelle Modellierungsfehler auszuschließen.

Als Ergebnis von Simulationen (RANS) mittels entsprechend modifizierter, hier nicht explizit aufgeführter Rechengitter kann eine Beeinträchtigung des experimentell bestimmten Strömungs- und Mischungsfeldes auf Grund der in der Brennkammer vorhandenen Messfenster (s. Kap. 5.1.1), sowie der Geometrie der zur Bestimmung der Mischungsfelder verwendeten Absaugesonde (s. Kap. 5.2.1) ausgeschlossen werden. Auch eine Variation der Geometrie des Brennstoffeinlasskanals zur Änderung des Brennstoffeintrittsimpulses resultierte in keiner erwähnenswerten Veränderung des Mischungsfeldes.

Um eventuelle Fehlerquellen in der Wiedergabe des Drehimpulses durch die beim Aufsetzen der Randbedingungen getroffenen Vereinfachungen oder durch unzulängliche Gitterauflösung in Umfangsrichtung auszuschließen, wurden Simulationen (RANS) unter Verwendung von Gitter-2 sowie Gitter-3 (s. Kap. 5.4.1) durchgeführt und mit den Simulationsergebnissen für Gitter-1 (s. Abb. 6.3) verglichen. Gitter-2, das Drallerzeuger und Plenen umfasst, dient hierbei der Klärung eines eventuellen Einflusses der sich einstellenden Geschwindigkeitsprofile in den Drallkanälen, welche in Gitter-1 durch Ringspalte ersetzt (s. Kap. 5.4.3) und damit implizit Gleichverteilungen entlang der

jeweiligen Einlassränder angenommen wurden. Gitter-3 weist wiederum eine erhöhte, fiktive Gitterauflösung in Umfangsrichtung auf und ermöglicht damit eine feinere räumliche Diskretisierung. Abbildung 6.7 zeigt hierzu radiale Profile der zeitlich mittleren Geschwindigkeitskomponenten für ausgewählte axiale Ebenen in analoger Darstellungsweise zu Abb. 6.3. Im direkten Vergleich der Simulationsergebnisse bezüglich Gitter-2 und Gitter-3 weisen jene mit Gitter-1 (s. Abb. 6.3) gegenüber der Messung die größte Abweichung im Tangentialgeschwindigkeitsprofil für die düsenferne Ebene  $x/R_0 = 12$  auf. In direkter Düsennähe  $x/R_0 = 0,08$  überschätzt die Rechnung mit Gitter-2 den Betrag des Tangentialgeschwindigkeitsminimums stark, prognostiziert also eine zu große Drallzahl. Gitter-3 hingegen resultiert in allen ausgewählten Ebenen in der besten Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen; ein wichtiges Ergebnis im Hinblick auf die Verwendung des hinsichtlich der numerischen Berechnung kostengünstigen Gitter-3 für die angestrebte Simulation der reagierenden Drallströmung. Der in Abb. 6.8 dargestellte Vergleich der Mischungsbruchverteilung für Gitter-2 und Gitter-3 mit der experimentell bestimmten verdeutlicht, dass mit keinem dieser Gitter der sich in Düsennähe bis auf die Brennkammerachse ausdehnende Bereich hoher Brennstoffkonzentration wiedergegeben werden kann.

Wie in Kap. 6.1 dargelegt, kann mittels der stationären CFD-Rechnung unter Verwendung des Standard  $k-\varepsilon$ -Turbulenzmodells das zeitlich mittlere Strömungsfeld der beiden Drallkonfigurationen mit vertretbaren Abweichungen wiedergegeben werden, jedoch zeigen sich nicht unerhebliche Diskrepanzen in den Turbulenzgrößen, sodass die berechnete turbulente kinetische Energie kleinere Werte aufweist als die entsprechenden Messungen. Instationäre CFD-Simulationen mittels der LES-Methode (s. Kap. 5.4.2) zeigen eine wesentlich bessere Übereinstimmung mit den experimentell ermittelten Turbulenzgrößen auf. Zum Vergleich sind in Abb. 6.9 für den Fall der isothermen Gleichdrallkonfiguration die Ergebnisse einer stationären RANS-Simulation (linke Bildhälfte) den statistisch gemittelten Ergebnissen<sup>2</sup> einer instationären LES-Simulation (rechte Bildhälfte) bez. der normierten turbulenten kinetischen Energie gegenüber gestellt. Hierin sind im Hintergrund sog. "Streamtraces" (Linien die parallel zum lokalen Strömungsvektor in der x-r-Ebene verlaufen) zur Verdeutlichung des Strömungsfeldes dargestellt; in den Teilbildern der jeweiligen Bildhälften radiale Schnitte, deren axiale Position aus dem Schnittpunkt ihrer jeweiligen Abszisse mit der Ordinate  $x/R_0$  hervorgeht. Die Skalen der Teilbilder sind am rechten Bildrand aufgetragen; hierbei besitzen die drei unteren und die beiden oberen Teilbilder jeweils die gleiche Skalenteilung. Die Messwerte sind an den diskreten Messpositionen mit offenen Kreisen markiert, die Simulationsergebnisse jeweils mit durchgezogenen Linien. Wie Abb. 6.9 deutlich zeigt, ist die LES im Gegensatz zur RANS in der Lage, die gemessene Verteilung der normierten turbulenten kinetischen Energie zu reproduzieren. Dennoch kann auch die LES das Phänomen der sich in Düsennähe bis auf die Brennkammerachse ausdehnenden Bereiche hoher Brennstoffkonzentration nicht wiedergeben, wie aus Abb. 6.10 klar hervorgeht. Für die düsenächste Ebene steigt das Mischungsbruchprofil, ausgehend von der Brennkammerachse, im Falle der LES zwar schon bei etwas kleineren Radien an als im Falle der RANS, verglichen mit den experimentellen Ergebnissen sind die Mischungsbruchwerte der LES aber für den Bereich  $r/R_0 < 0,8$  deutlich kleiner.

<sup>2</sup>Der Mittelungszeitraum betrug ca. 4 volumetrische Brennkammervverweilzeiten.

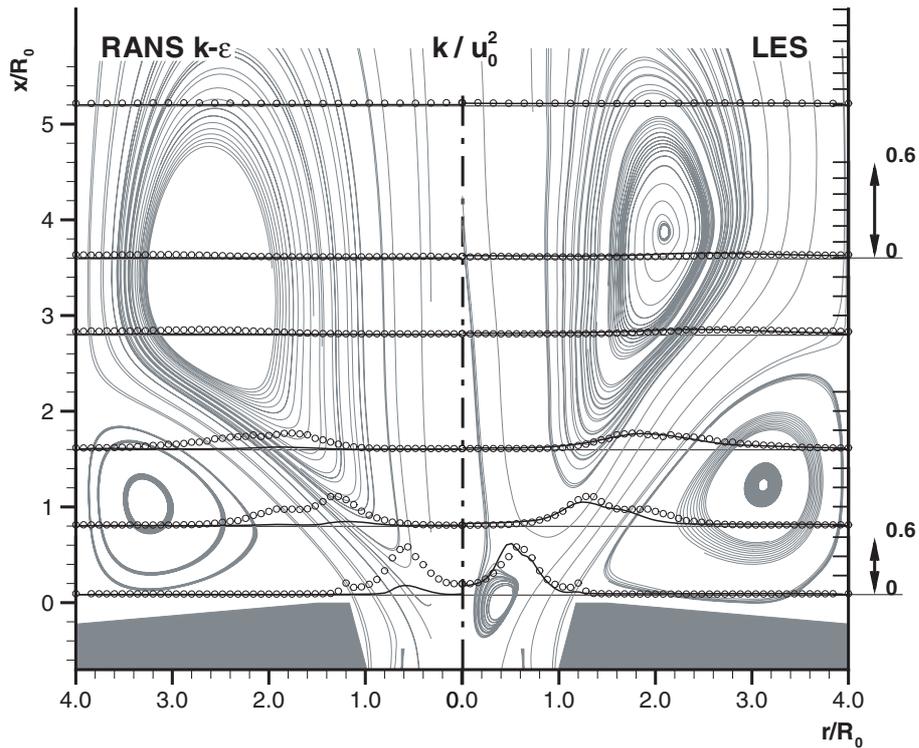


Abbildung 6.9: Turbulente kinetische Energie für die Gleichdrallkonfiguration aus RANS, LES und Messung

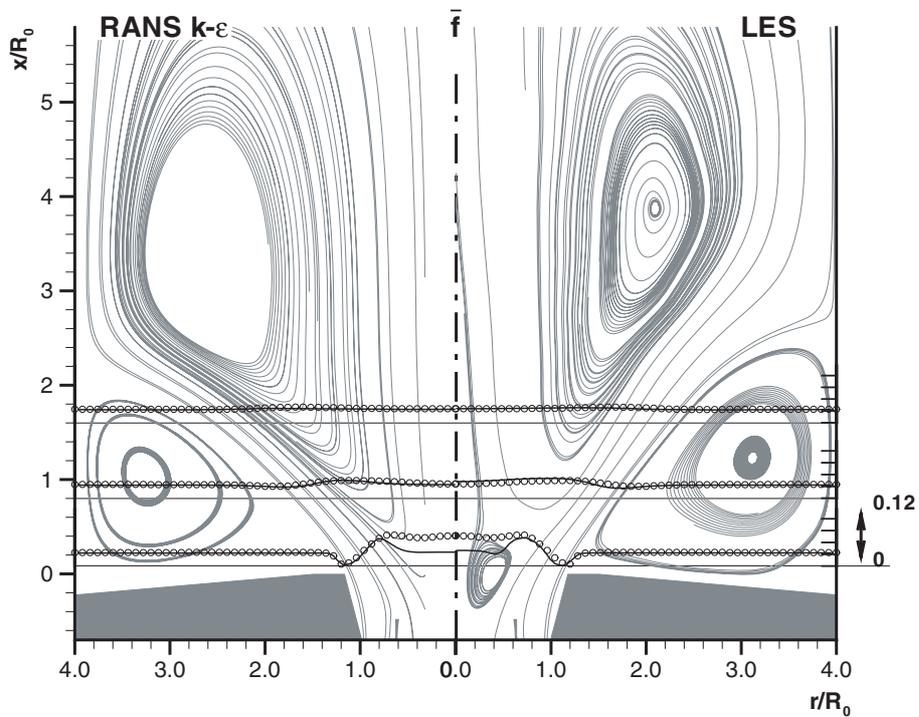


Abbildung 6.10: Mischungsbruchverteilung für die Gleichdrallkonfiguration aus RANS, LES und Messung

### 6.2.3 Modifikationen im Hinblick auf die Simulation der reagierenden Drallströmung

Die im vorangehenden Abschnitt beschriebenen Untersuchungen haben gezeigt, dass eine Charakterisierung der Mischungsfelder der gasbetriebenen Drallbrennerkonfigurationen sogar mit der numerisch aufwändigen Methode der LES nicht möglich erscheint. Um dennoch das angestrebte Ziel der Stabilitätsuntersuchung dieses Systems weiter verfolgen zu können, wird ein den experimentellen Ergebnissen zumindest näherungsweise entsprechendes Mischungsfeld benötigt. Eine Vorgabe gemessener Mischungsfelddaten als Eingabe für die CFD scheidet hierbei allerdings aus, da diese nicht für den gesamten benötigten Bereich an thermischen Leistungen verfügbar sind. Die hier verwendete Lösung des Problems basiert auf zwei Annahmen: Zum einen wird die turbulente Schmidt-Zahl (s. Kap. 4.1.3) reduziert ( $\sigma_t = 0,6$ ), um dadurch den turbulenten Skalaraustausch zu verstärken. Zum anderen ermöglicht die Definition eines zusätzlichen Brennstoffeinlasses (s. Kap. 5.4.3) die Aufteilung des Gesamtbrennstoffmassenstroms, sodass 75% über den neu definierten Einlass senkrecht zur Einlassfläche in die Düse eintreten, die verbleibenden 25% über den bisherigen Einlass. Zur Variation der thermischen Leistung des Brenners wird lediglich der Gesamtbrennstoffmassenstrom verändert, das Verhältnis der beiden Teilmassenströme aber konstant gehalten. Exemplarisch zeigt Abb. 6.11 das auf diese Weise berechnete Mischungsfeld der Gleichdrallflamme bei einer thermischen Leistung  $P_{th} = 15 \text{ kW}$  und einer global vorgegebenen Luftzahl  $\lambda_{glob} = 1,75$  im Vergleich mit der entsprechenden Messung. Da die Modifikationen lediglich vernachlässigbare Auswirkungen auf das Strömungsfeld haben, wird auf deren Darstellung an dieser Stelle verzichtet.

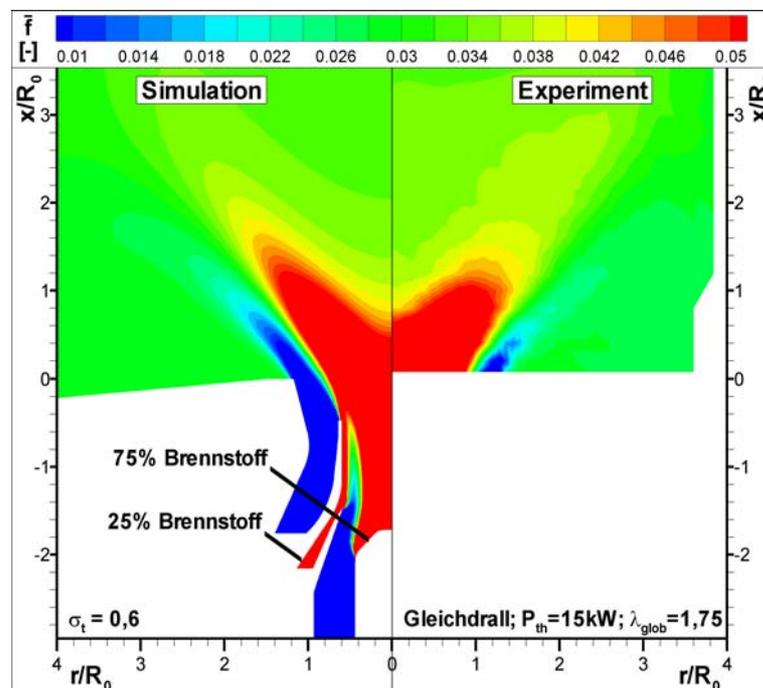


Abbildung 6.11: Mischungbruchverteilung für Gleichdrallflamme - Definition des zusätzlichen Brennstoffeinlasses

## 6.3 Wärmefreisetzung und Wärmeabgabe

Wärmeverluste über die Ränder der betrachteten Modellbrennkammer durch Konvektion, Konduktion und Strahlung (s. Kap. 5.3.1) führen lokal zu einer gegenüber einem adiabaten System erniedrigten Enthalpie, d.h. lokalen Wärmeverlusten. Der Einfluss dieser lokalen Wärmeverluste auf die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik wird zunächst durch direkte Gegenüberstellung des Reaktionsverlaufes im adiabaten und nicht-adiabaten, homogenen System aufgezeigt, welches die Grundlage zur tabellarischen Darstellung der thermodynamischen Datenbasis ist. Nachfolgend wird die Notwendigkeit der Erfassung des Einflusses lokaler Wärmeverluste auf die chemische Reaktionskinetik und damit auf die Wärmefreisetzung durch die chemischen Reaktionen anhand einer Reihe von Simulationen für die untersuchte Modellbrennkammer aufgezeigt.

### 6.3.1 Einfluss von Wärmeverlusten auf die 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

Um die, global betrachtet, mager betriebene Brennkammer zu simulieren, wurde der Parameter-Satz der in Kap. 4.4 vorgestellten 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für magere Bedingungen angepasst und der benötigte stöchiometrische Koeffizient von Sauerstoff in Abhängigkeit von Luftzahl und Enthalpie-Index für die vorgegebene Vorwärmtemperatur bestimmt (s. Kap. 5.6). Die Abbildung des chemischen Systems mittels der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik erfolgt durch Erzeugung der sog. JPDF look-up Tabelle in einem der Simulation vorangehenden Schritt (s. Kap. 5.5.1). Hierbei werden zunächst die thermodynamischen Zustände des nicht-adiabaten, homogenen Systems als Funktion des Parameter-Tripels  $\tilde{c}-\tilde{f}-\tilde{h}_N$  abgelegt. Zur Veranschaulichung des Einflusses von Wärmeverlusten auf die Reaktionskinetik sind in Abb. 6.12 die mit der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik berechneten Speziesmolenbrüche, Temperatur und spezifische Enthalpie in Abhängigkeit vom Reaktionsfortschritt  $\tilde{c}$  bei konstanter Luftzahl  $\lambda = 1,0$  als Lösung des homogenen Systems dargestellt.

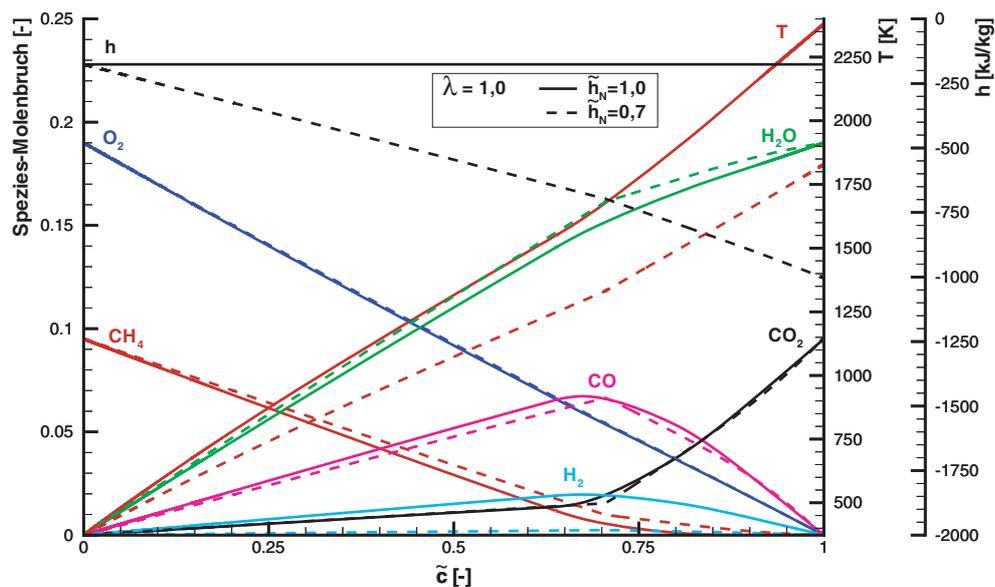


Abbildung 6.12: Einfluss von Wärmeverlusten auf die Reaktionskinetik

Verglichen mit dem adiabaten Fall ( $\widetilde{h}_N = 1,0$ ) zeigt der Verlauf der spezifischen Enthalpie im Falle eines vorgegebenen Enthalpie-Index von  $\widetilde{h}_N = 0,7$  ein nahezu lineares Abfallen mit zunehmendem Reaktionsfortschritt und gibt somit die Parametrisierung der Wärmefreisetzungsrate in Gleichung (5.18) im Verlauf der Zeitintegration bei der Lösung der Differentialgleichungen des nicht-adiabaten, homogenen Systems wieder (s. Kap. 5.5.1). Deutlich zu erkennen ist auch die im nicht-adiabaten Fall niedrigere Temperatur. Die Speziesmolenbrüche weisen erhöhte Werte für die stabilen Spezies  $\text{CH}_4$  und  $\text{H}_2\text{O}$  und erniedrigte Werte für die intermediären Spezies  $\text{CO}$  und  $\text{H}_2$  auf. Tendenziell ist eine Verschiebung der Schnittstelle zwischen Brennstoffabbau- und Ausbrandbereich zu größerem Reaktionsfortschritt festzustellen.

### 6.3.2 Lokale Wärmeverluste im untersuchten System

#### Wärmeverluste bei adiabater chemischer Reaktionskinetik

Im Unterschied zu vielen anderen Verbrennungsmodellen bietet das hier verwendete, nicht-adiabate JPDF Reaktionsmodell (s. Kap. 4.3) den Vorteil, die Turbulenz/Chemie-Interaktion zu beschreiben und ermöglicht dabei die Behandlung: 1. der Verbrennung in nicht-vorgemischten, vorgemischten und teil-vorgemischten Regionen des untersuchten Systems, 2. von Reaktionszuständen abseits des chemischen Gleichgewichts und 3. des Einflusses lokaler Wärmeverluste auf die chemischen Reaktionen. Frühere JPDF Reaktionsmodelle, die sowohl den Mischungszustand durch eine Mischungsbruchvariable als auch den Reaktionsverlauf mittels einer weiteren Variablen - z.B. einer Reaktionsfortschrittsvariablen oder der Temperatur - beschreiben, erfassen den Einfluss von Wärmeverlusten auf die chemische Reaktionskinetik meist nicht.

Zur Diskussion der Konsequenzen der Anwendung eines "adiabaten Reaktionsmodells" für die untersuchte Modellbrennkammer sind in Abb. 6.13 die Temperatur und Reaktionsrate

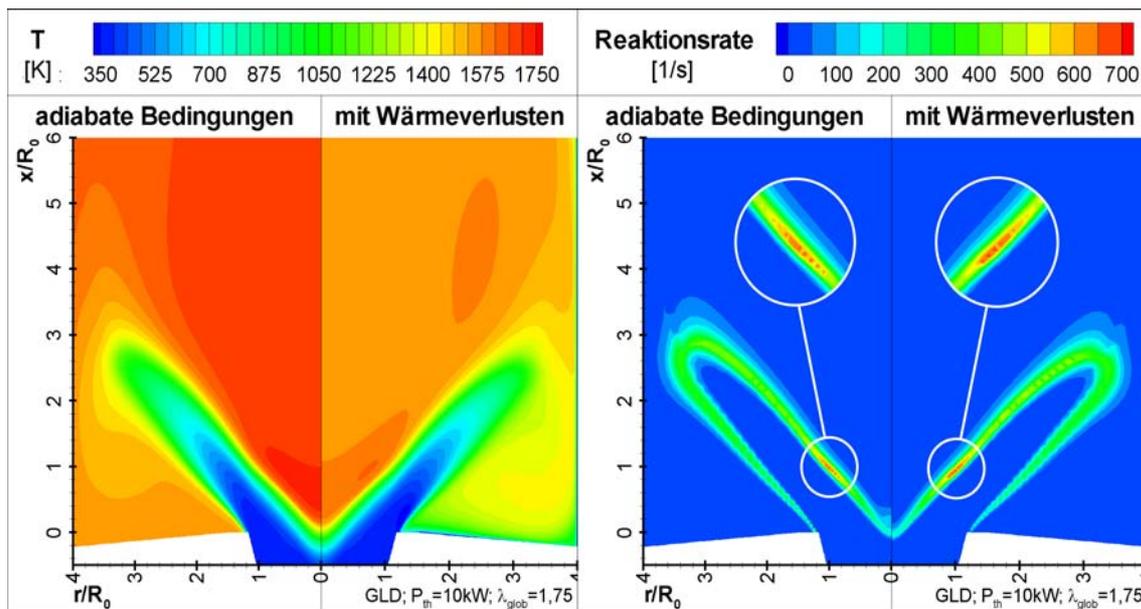


Abbildung 6.13: Temperatur und Reaktionsrate zum Vergleich von adiabater Simulation und nicht-adiabater Simulation mit adiabater chemischer Reaktionskinetik

onsrate über entdimensioniertem Brennkammerradius  $r/R_0$  und Brennerabstand  $x/R_0$  einer stabil brennenden Gleichdrallflamme (GLD;  $P_{th} = 10 \text{ kW}$ ;  $\lambda_{glob} = 1,75$ ) aufgetragen. Die jeweils linke Bildhälfte der Teilbilder zeigt Simulationsergebnisse für adiabate thermische Randbedingungen, während in der jeweils rechten Bildhälfte Ergebnisse einer Simulation dargestellt sind, die unter Vorgabe sehr großer Wärmeverluste über die Brennkammerwand aber bei Vernachlässigung derer Einflüsse auf die chemische Reaktionskinetik durchgeführt wurden. Dies erfolgte durch absichtliche Verwendung einer für adiabate Bedingungen erzeugten JPDF look-up Tabelle, in dieser nicht-adiabaten Simulation. Wie zu erwarten, ist das Temperaturniveau im Falle der nicht-adiabaten Berechnung deutlich niedriger als im adiabaten Fall. Obwohl niedrigere Temperaturen zu niedrigeren Reaktionsraten führen sollten, zeigen die Reaktionsratenverteilungen kaum Unterschiede. Dies bedeutet, dass die Temperatur im Brennraum zwar mittels thermischer Randbedingungen beeinflusst und mitunter auch z.B. für Auslegungszwecke eine der realen Temperaturverteilung angenäherte berechnet werden kann, aber durch Vernachlässigung des Einflusses lokaler Wärmeverluste auf die chemische Reaktionskinetik eine Vorhersage weder der exakten Position noch der Dicke der Flammenfront möglich ist. Der Einfluss lokaler Wärmeverluste auf die chemische Reaktionskinetik muss folglich zur angestrebten Stabilitätsuntersuchung vom Reaktionsmodell erfasst werden. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit geschieht dies durch Verwendung des nicht-adiabaten JPDF Reaktionsmodells (s. Kap. 4.3) und fünfdimensionalen JPDF look-up Tabellen, die auch Funktion des Enthalpie-Index sind.

### Enthalpie-Index - Einfluss auf die Verbrennung in der Modellbrennkammer

Um die Beeinflussung der Verbrennung in der Modellbrennkammer durch lokale Wärmeverluste, welche mittels des Enthalpie-Index quantifizierbar sind, zu illustrieren, zeigt Abb. 6.14 Ergebnisse von Simulationen, bei welchen ein künstlich festgelegter, über die gesamte Brennkammer konstanter Wert des Enthalpie-Index vorgegeben wurde. Die hierzu verwendete fünfdimensionale JPDF look-up Tabelle ermöglicht die Erfassung der Einflüsse von Wärmeverlusten auf die chemische Reaktion mittels des Enthalpie-Index  $h_N$ .

Wie in Abb. 6.13 sind die Verteilungen der Temperatur und Reaktionsrate bei identischen Kontur-Levels, jedoch in um  $90^\circ$  gedrehter Ansicht, die Brennerachse weist nach rechts, dargestellt. Als Referenz zeigt die obere Bildreihe die Ergebnisse der adiabaten Simulation einer stabil brennenden Flamme. Die Vorgabe eines im gesamten Strömungsfeld konstanten Enthalpie-Index von  $\widetilde{h}_N = 0,9$ , d.h. ein globaler Wärmeverlust von 10% gegenüber adiabaten Bedingungen, resultiert in einer Flamme, die auf die Brennkammerwand auftrifft und deren Reaktionszone sich in zwei Äste aufspaltet. Eine weitere Reduktion des Enthalpie-Index auf  $\widetilde{h}_N = 0,8$  führt zu einer weit abgehoben brennenden Flamme, die an der zylindrischen Brennkammerwand stabilisiert und keinerlei Verbrennung im Bereich der äußeren Rezirkulationszone aufweist. Die Flamme erlischt bei Steigerung der thermischen Leistung um nur  $\Delta P_{th} = 5 \text{ kW}$  unter konstanter Luftzahl. Diese künstliche Vorgabe eines im gesamten Strömungsfeld konstanten Enthalpie-Index verdeutlicht die Auswirkung lokaler Wärmeverluste auf die Verbrennung in der Modellbrennkammer und motiviert zusätzlich die Erfassung derer Einflüsse auf die chemische Reaktionskinetik im Rahmen der angestrebten Stabilitätsuntersuchung.

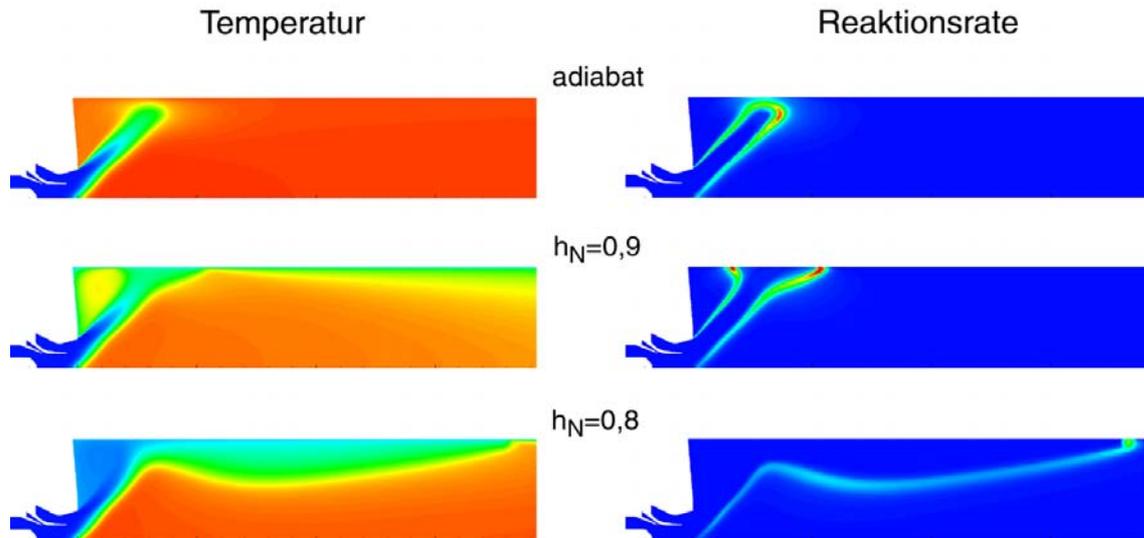


Abbildung 6.14: Künstlich vorgegebener Enthalpie-Index

### Feldlokaler, variabler Enthalpie-Index

Nach Diskussion des konstruierten Falles eines konstanten Enthalpie-Index, d.h. über die gesamte Brennkammer konstanter lokaler Wärmeverluste, soll im Folgenden der mehr realistische Fall eines feldverteilten, auf Basis der Enthalpie-Verteilung berechneten Enthalpie-Index behandelt werden. Unter Verwendung der in Kap. 5.4.4 beschriebenen thermischen Randbedingungen resultiert aus der Lösung der Energie-Transportgleichung (s. Kap. 5.5.2) die Verteilung der Enthalpie im Rechengebiet, aus welcher wiederum der feldlokale Enthalpie-Index nach (4.60) berechnet werden kann.

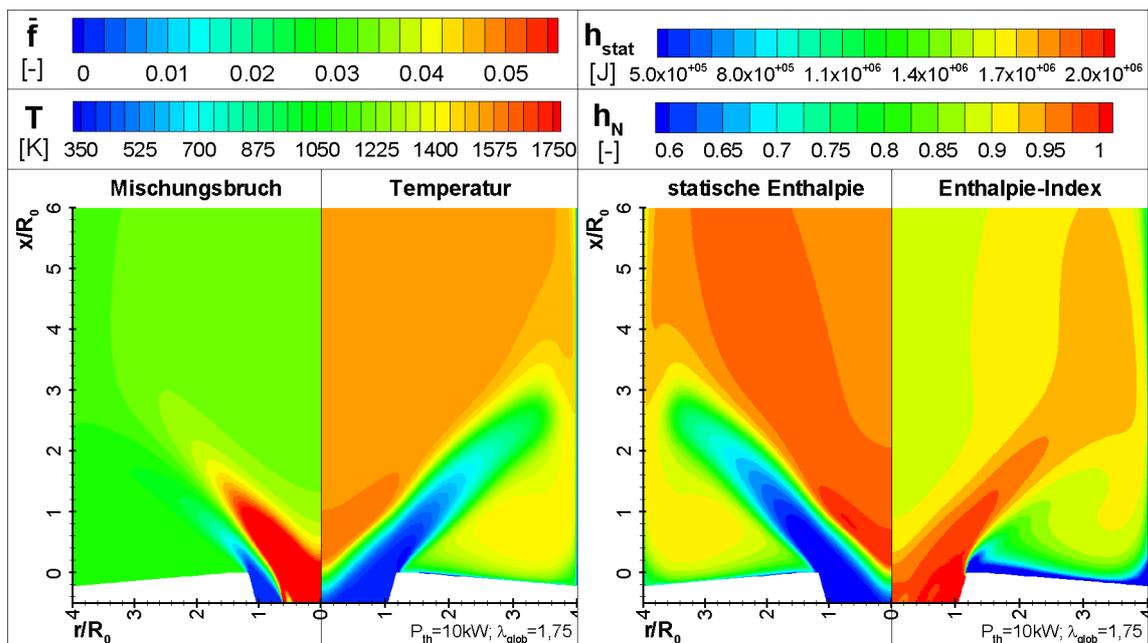


Abbildung 6.15: Mischungsbruch, Temperatur, statische Enthalpie und variabler Enthalpie-Index

Einen Eindruck über dessen Verteilung gibt Abb. 6.15. Einströmendes Frischgemisch besitzt dort per Definition einen Enthalpie-Index des Wertes  $\tilde{h}_N = 1$ . Ein Vergleich mit der in Abb. 6.15 ebenso dargestellten Enthalpie, welche eine der Temperatur ähnliche Verteilung aufweist, verdeutlicht, dass der Enthalpie-Index nicht zwangsläufig in jenen Bereichen große Werte annimmt, in denen dies auch für die Enthalpie gilt. Vielmehr zeichnet sich neben dem Einfluss der Wärmeverluste nahe der Brennkammerwände auch ein Einfluss von Strahlungswärmeverlusten nahe der Brennkammerachse ab. So können mit Hilfe des verteilten Enthalpie-Index feldlokale Wärmeverluste und bei Verwendung einer fünfdimensionalen JPDF look-up Tabelle auch ihr Einfluss auf die chemische Reaktionskinetik erfasst werden.

Im Vergleich zu den bekannten adiabaten Simulationsergebnissen zeigt Abb. 6.16 die Ergebnisse einer Simulation unter Berücksichtigung des lokalen, variablen Enthalpie-Index.

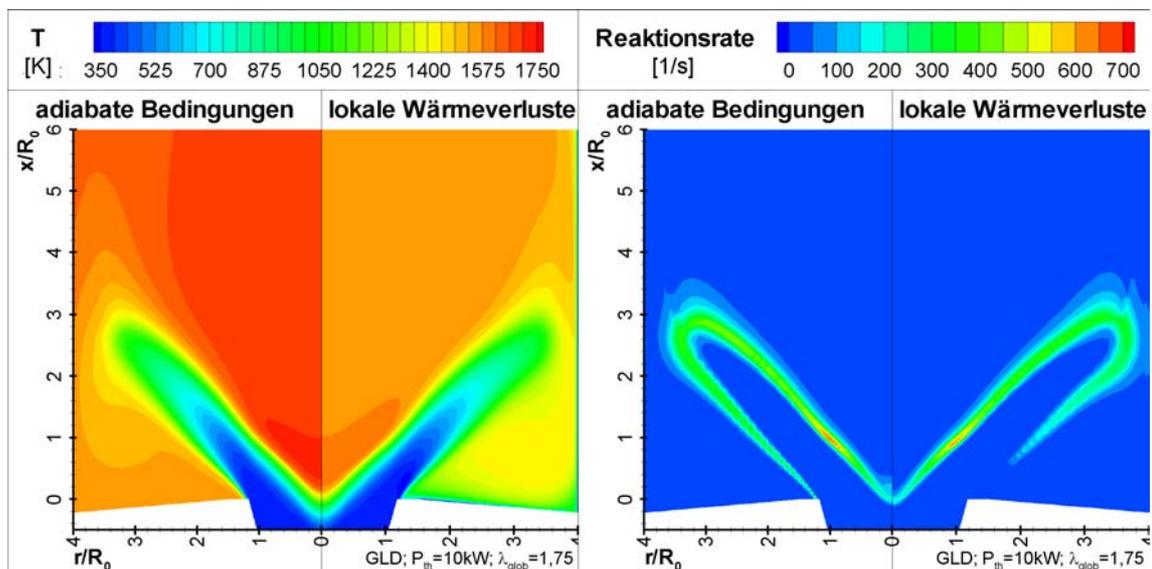


Abbildung 6.16: Temperatur und Reaktionsrate zum Vergleich von adiabater Simulation und nicht-adiabater Simulation mit variablem Enthalpie-Index

Verglichen mit dem adiabaten Fall, liegen bei der nicht-adiabaten Simulation, wie auch in Abb. 6.13 beobachtet, deutlich niedrigere Temperaturen vor. Im Gegensatz zu Abb. 6.13 zeigt die nicht-adiabate Reaktionsratenverteilung in Abb. 6.16 niedrigere Werte als die adiabate. Die Flamme hebt von der Brennermündung ab und erstreckt sich ein wenig tiefer in die Brennkammer hinein. Diese Ergebnisse bestätigen die Vermutung, dass der Einfluss lokaler Wärmeverluste nicht zu vernachlässigen ist, und begründen damit die Anwendung des nicht-adiabaten JPDF Reaktionsmodells in den Simulationen, welche die Grundlage der Darstellungen in den nachfolgenden Kapiteln bilden.

## 6.4 Charakteristika der reagierenden Drallströmung

Eine der Drehströmung überlagerte Verbrennung geht, entsprechend der in Kap. 2.4 dargelegten Ausführungen, mit vielfältigen Einflussfaktoren und Mechanismen einher.

Ein wesentlicher Effekt dieser Überlagerung resultiert aus der lokalen Wärmefreisetzung durch die chemischen Reaktionen. Diese führt zu einer lokalen Temperaturerhöhung, damit einhergehend zu einer lokalen Reduktion der Fluidichte und resultiert folglich in einer lokalen thermischen Expansion des Fluids, welche wiederum das mittlere Strömungsfeld und die statische Druckverteilung erheblich beeinflusst. Basis der Wärmefreisetzung sind die chemischen Reaktionen der Verbrennung, die eine molekulare Mischung der Reaktionspartner voraussetzen. In technisch relevanten, nicht-vorgemischten Systemen spielen hierbei der molekularen Diffusion vorangehende, makroskopische Austauschvorgänge eine entscheidende Rolle und beeinflussen ihrerseits die Feldverteilung der Temperatur wesentlich. Da das Strömungsfeld für die Einstellung des Mischungsfeldes verantwortlich ist, lässt sich schließlich ein geschlossener Kreis der wechselseitig aufeinander einwirkenden Verteilungen von "Strömung - Mischung - Temperatur (Wärmefreisetzung)" formulieren, dessen Auswirkungen auf die untersuchten, reagierenden Drallströmungen nachfolgend dargelegt werden sollen.

In einem, wie dem im Rahmen dieser Arbeit behandelten, eingeschlossenen, einseitig offenem System führt eine lokale thermische Expansion des Fluids zu einer Beschleunigung der Strömung in axialer Richtung. Gemäß der Ausführungen in Kap. 2.4.4.3 nimmt folglich die Axialgeschwindigkeit und damit der Axialimpulsstrom mit steigender Temperatur zu, während der Drehimpulsstrom nahezu unbeeinflusst bleibt. Hieraus resultiert als dominanter Unterschied zur isothermen Strömung eine lokale Reduktion der Drallzahl.

### 6.4.1 Zeitlich mittleres Strömungsfeld

#### Axialgeschwindigkeitsverteilung

Eine deutliche, betragsmäßige Zunahme der axialen Geschwindigkeit gegenüber dem isothermen Fall lässt sich rasch durch einen Vergleich der in Abb. 6.17 dargestellten Verteilung der normierten Axialgeschwindigkeit aus Simulation und Experiment der Gleich- und Gegendrallflamme mit den entsprechenden Verteilungen im isothermen Fall (s. Abb. 6.2) belegen. Hierzu sind in beiden Abbildungen identische Kontur-Levels gewählt; ein direkter Vergleich wird durch die normierte Darstellungsweise ermöglicht.

In den experimentellen Ergebnissen zeigen die reagierenden Drallströmungen gegenüber den jeweiligen isothermen stark verkürzte Rückströmzonen, während dieser Unterschied zum isothermen Fall in der Simulation nicht so stark ausgeprägt ist. Die radiale Ausdehnung der inneren Rückströmzone ist in den Drallflammen kleiner als in der jeweiligen isothermen Strömung. Die Simulation vermag dies gut wiederzugeben, wohingegen der in den experimentellen Ergebnissen der Gegendrallflamme zusätzliche Mündungswirbel (MERKLE [123]) sowie die durch diesen hervorgerufenen Einschnürung der Rückströmzone in Düsennähe durch die Simulation nicht erfasst werden kann.

Im Gegensatz zum Experiment sagt die Simulation eine längere Rückströmzone für die Gleichdrallflamme voraus. So weist hier der Gleichdrall, wie auch in der isothermen Drallströmung, für düsenferne Bereiche ( $x/R_0 \geq 2,5$ ) bei gleichen Düsenabständen dem Betrag nach größere Rückströmgeschwindigkeiten als im Falle des Gegendralls auf. Gemäß der Simulationsergebnisse kehrt sich dieses Verhältnis jedoch für kleine Düsenabstände ( $x/R_0 < 2,5$ ) um. Eine Erklärung dieser Umkehrung erschließt sich anhand der Diskussion des Vortex Breakdown.

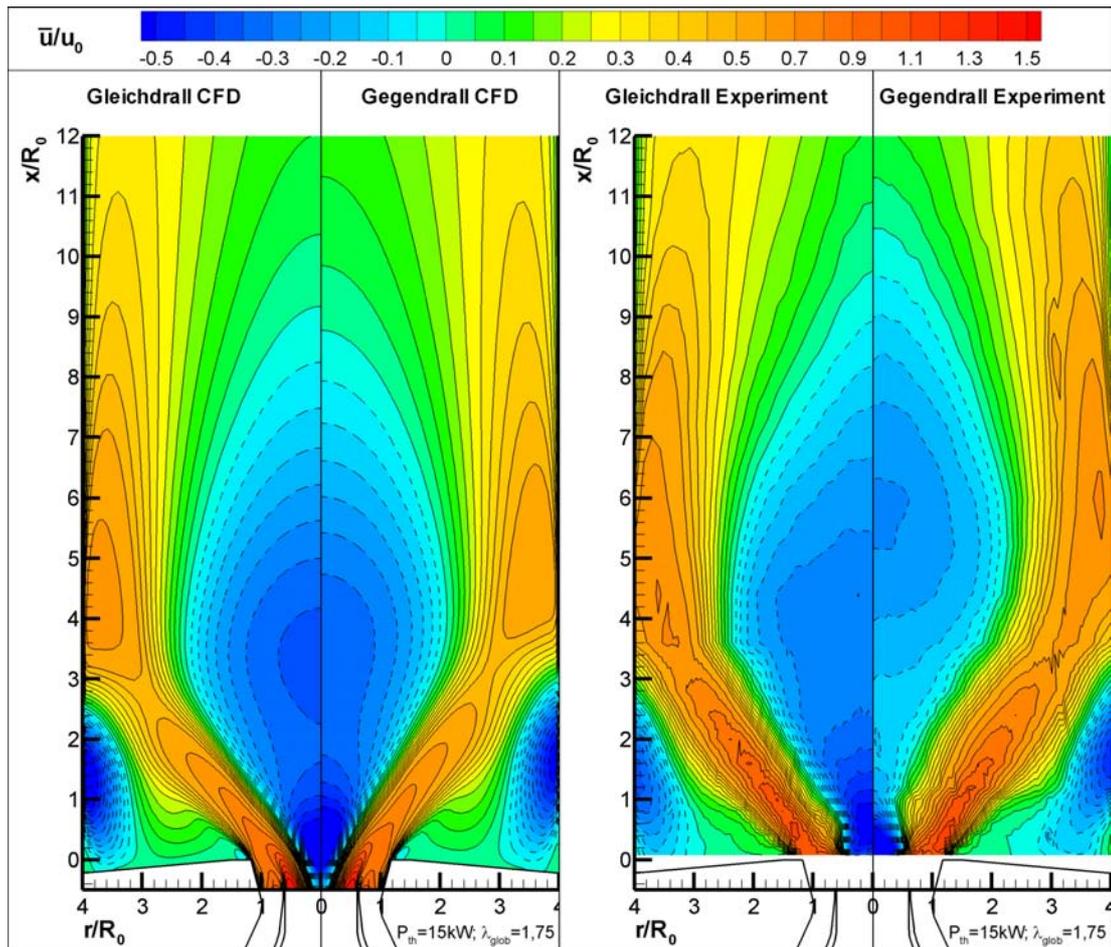


Abbildung 6.17: Berechnete und experimentell bestimmte Verteilung der normierten Axialgeschwindigkeit der Gleich- und Gegendrallflamme

### Wirbelform und Vortex Breakdown

Eine geschlossene Darstellung der Vorgänge, die zum Vortex Breakdown (s. Kap. 2.3.6) führen, bedarf zunächst der Diskussion der sich im Verlauf der Strömung einstellenden Wirbelform. Abb. 6.18 zeigt hierzu radiale Profile des zum Umgebungsdruck relativen statischen Drucks  $\Delta p$  sowie der normierten Tangentialgeschwindigkeit aus den Simulationsergebnissen der Gleich- und Gegendrallflamme in ausgewählten axialen Ebenen.

Die unterste Ebene ( $x/R_0 = -0,48$ ) entspricht einer axialen Position in der Doppeldralldüse, in der Primär- und Sekundärluftstrom gerade noch durch die Zerstäuberlippe voneinander getrennt sind. Die in dieser Ebene dem Primärluftkanal entstammenden Tangentialgeschwindigkeitsprofile zeigen nahezu identische Verläufe in Gleich- und Gegendrallkonfiguration, können also näherungsweise als vom Sekundärluftstrom unbeeinflusst betrachtet werden. Die Tangentialgeschwindigkeitsprofile der Sekundärluftströme der beiden Düsenkonfigurationen weisen zwar gegensätzliche Vorzeichen, aber dem Betrag nach identische Verläufe auf; eine Folge der zum Primärdrallerzeuger spiegelbildlich ausgeführten Geometrie des Sekundärdrallerzeugers. In der axialsymmetrischen Strömung induziert die tangential Bewegung des Fluides Zentrifugalkräfte, die nach (2.68) im Gleichgewicht zum radialen Gradienten des statischen Druckes stehen.

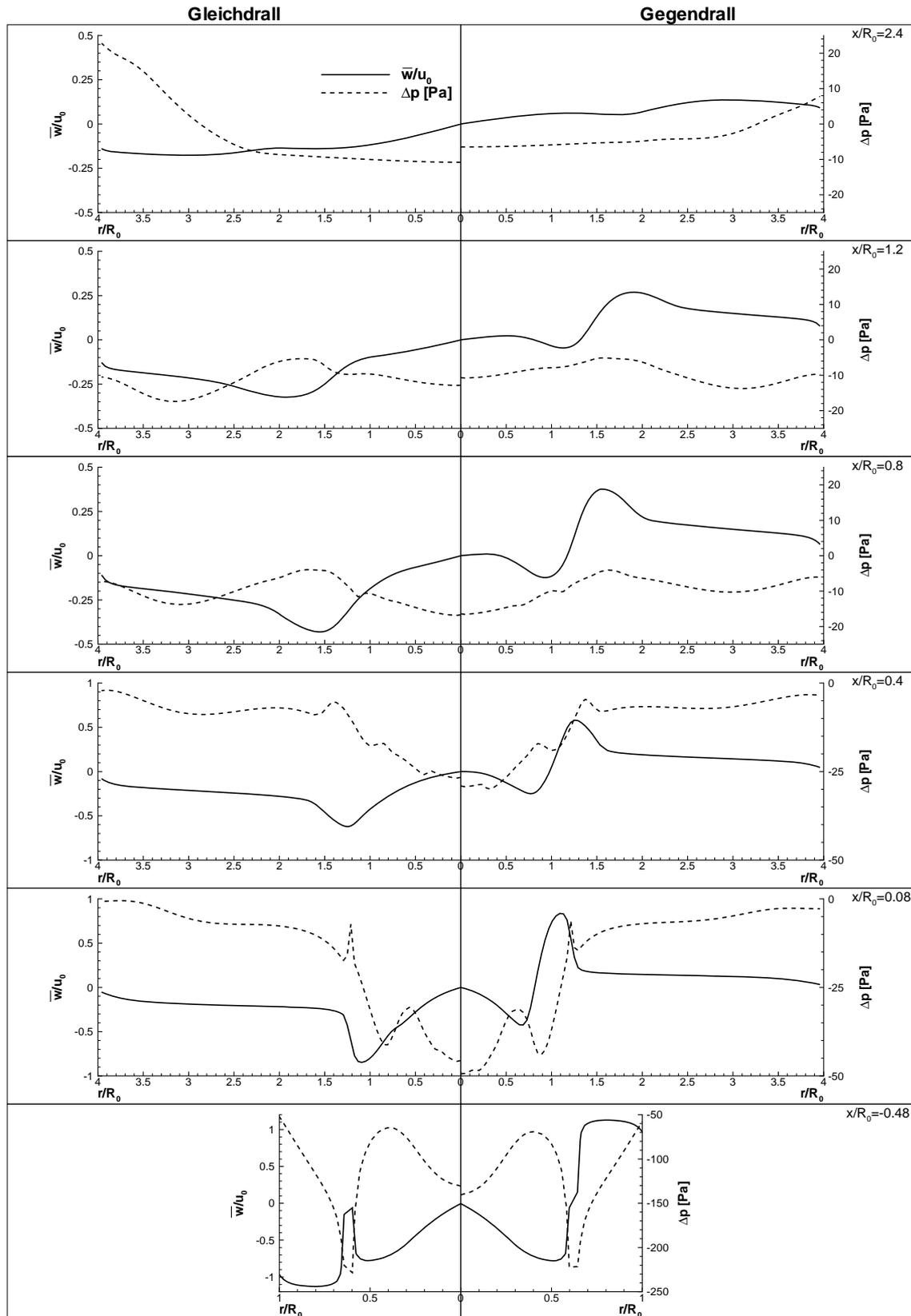


Abbildung 6.18: Berechnete Radialprofile des statischen Drucks sowie der Tangentialgeschwindigkeit in Gleich- und Gegendrallflamme

Folglich bedingt das in der Strömung vorliegende Tangentialgeschwindigkeitsprofil ein Druckminimum auf der Symmetrieachse und einen positiven Druckgradienten in Richtung der Berandung der Strömung. Das Auftreten zweier Druckminima in der axialen Ebene  $x/R_0 = -0,48$  resultiert aus der Separation der beiden verdrehten Luftströme durch die Zerstäuberlippe.

Stromab des engsten Querschnitts des Diffusors, v. a. aber nach Eintritt in die Brennkammer divergieren die Stromlinien zunehmend. Die Radialprofile in axialen Ebenen  $x/R_0 \geq 0,08$  (s. Abb. 6.18) belegen den damit einhergehenden Transport des Tangentialgeschwindigkeitsminimums zu größeren Radien. Entsprechend der Beschreibungen zum Phänomen des Vortex Breakdown (s. Kap. 2.3.6) nimmt das Tangentialgeschwindigkeitsminimum bei Verlagerung auf einen größeren Radius auf Grund der Drehimpulserhaltung ab und demnach der statische Druck auf der Achse zu. Es resultiert schließlich ein positiver Druckgradient entlang der Symmetrieachse, welcher bei Überschreiten eines charakteristischen Wertes zur Umkehrung der Strömungsrichtung führt, sodass negative Axialgeschwindigkeiten auftreten.

Im Falle der Gegendrallkonfiguration wird das durch die Divergenz der Strömung bedingte Abklingen des Tangentialgeschwindigkeitsminimums verstärkt, da sich die gegensinnig orientierten Drehimpulsströme aus Primär- und Sekundärluftkanal teilweise kompensieren. So resultiert, wie aus Abb. 6.19 ersichtlich ist, entlang der Symmetrieachse für den Gegendrall zunächst ein größerer axialer Druckgradient ( $\partial p/\partial x$ ) und damit dem Betrag nach größere Rückströmgeschwindigkeiten auf der Symmetrieachse als für den Gleichdrall. Mit zunehmendem Düsenabstand nimmt jedoch die Steigung des axialen Axialdruckverlaufs im Falle des Gegendralls stärker ab als beim Gleichdrall, sodass die Gleichdrallflamme ab  $x/R_0 = 1,8$  die betragsmäßig höheren axialen Rückströmgeschwindigkeiten aufweist.

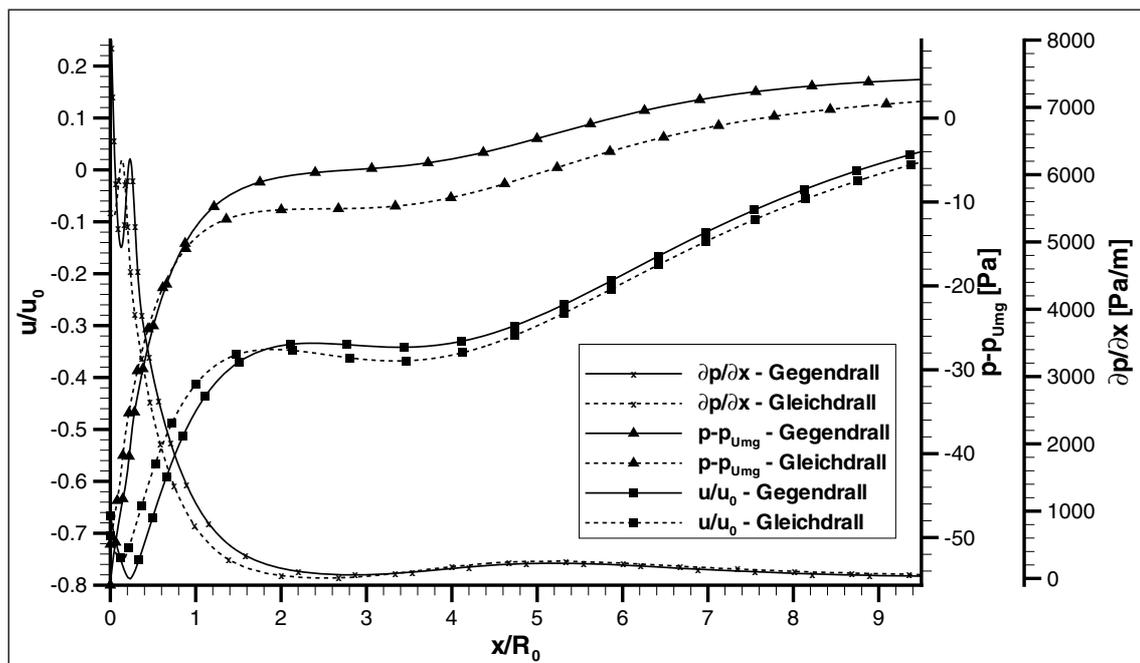


Abbildung 6.19: Berechnete Axialprofile des statischen Drucks sowie der Axialgeschwindigkeit in Gleich- und Gegendrallflamme

## Normierte Stromfunktion

Wie schon in der entsprechenden Darstellung für die isotherme Drallströmung (s. Abb. 6.1) können auch anhand der Verteilung der normierten Stromfunktion der Drallflammen (s. Abb. 6.20) der Düsenstrahl, die innere und die äußere Rezirkulationszone mittels der Isolinien der Werte null und eins voneinander abgegrenzt werden. Hierzu sind in Abb. 6.20 die Kontur-Levels wiederum so gewählt, dass strahldominierte Bereiche durch grüne Farbtöne, die innere Rezirkulationszone durch Blautöne und die äußere Rezirkulationszone durch die Farben Gelb bis Rot repräsentiert werden.

Im Vergleich mit den isothermen Drallströmungen (s. Abb. 6.1) weisen die Verteilungen der normierten Stromfunktion im Falle der Drallflammen (s. Abb. 6.20) verkürzte innere Rezirkulationszonen von geringerer radialer Ausdehnung auf. Dies geht einher mit einer deutlichen Reduktion des dort umlaufenden Massenstroms (Minimum der Stromfunktion, d.h. weiß gedruckte Zahlenwerte), welcher die Stärke der inneren Rezirkulationszone repräsentiert und ist somit eine Folge der aus der thermischen Expansion des Fluids resultierenden Verringerung der Drallzahl. Hierin liegt auch der wesentliche Unterschied zwischen Gleich- und Gegendrallflamme. Die Gegendrallflamme, deren Gesamtdrallzahl mit  $S_{0,th,ges,GGD} = -0,48$  einen deutlich geringeren Betrag als diejenige der Gleichdralldüse ( $S_{0,th,ges,GLD} = 0,81$ ) aufweist, besitzt verglichen mit der Gleichdrallflamme eine in axialer (zumindest in der Simulation) und radialer Richtung weniger ausgedehnte Rezirkulationszone mit geringerer Rezirkulationsintensität. Im direkten Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen vermögen die Simulationen der Drallflammen die globalen Minima der Stromfunktion (weiß gedruckte Zahlenwerte) nahezu exakt vorauszusagen. Wie bereits anhand der Axialgeschwindigkeitsverteilung diskutiert, kann die Simulation der Gegendrallflamme die experimentell beobachtete Einschnürung auf Grund des zusätzlichen Mündungswirbels auch im reagierenden Fall nicht erfassen. Im Gegensatz zu den experimentellen Ergebnissen sagen die Simulationen eine kürzere innere Rezirkulationszone im Falle der Gegendrallflamme vorher.

Im Unterschied zu den isothermen Strömungen (s. Abb. 6.1) aber miteinander übereinstimmend, zeigen Simulation und Experiment der Drallflammen (s. Abb. 6.20) einen sich weniger stark aufweitenden Düsenstrahl, der zudem bei größeren axialen Düsenabständen auf die Brennkammerwand auftrifft. Hierbei weist wiederum die Gegendrallkonfiguration, entsprechend der hier geringeren Gesamtdrallzahl, den etwas kleineren Strahlöffnungswinkel auf.

Auch die Rezirkulation in den Eckenwirbeln ist im Falle der reagierenden Drallströmung (s. Abb. 6.20), verglichen mit der isothermen Strömung (s. Abb. 6.1), von geringerer Intensität (schwarz gedruckte Zahlenwerte). Analog zum Einsaugverhalten eines in ruhende Umgebung ausströmenden, runden Freistrahls kann auch hier der vom in die Brennkammer eintretenden Strahl angesaugte Massenstrom im Bereich des äußeren Eckenwirbels als abhängig sowohl vom Verhältnis der Dichte des Umgebungsmediums  $\varrho_U$  zur Dichte des Strahlmediums  $\varrho_S$  als auch von der Eindringtiefe  $x$  des Strahls betrachtet werden:

$$\frac{\dot{M}_{angesaugt}}{\dot{M}_{Strahl}} \propto \frac{x}{R_0} \cdot \sqrt{\frac{\varrho_U}{\varrho_S}} \quad (6.1)$$

So nimmt nach LEUCKEL [101] der Anteil des angesaugten Massenstromes mit abnehmendem Dichteverhältnis  $\varrho_U/\varrho_S$  ab. Damit lasse sich nach MERKLE [123] die gegenüber dem isothermen Fall kleinere Rezirkulationsintensität des Eckenwirbels der jeweiligen

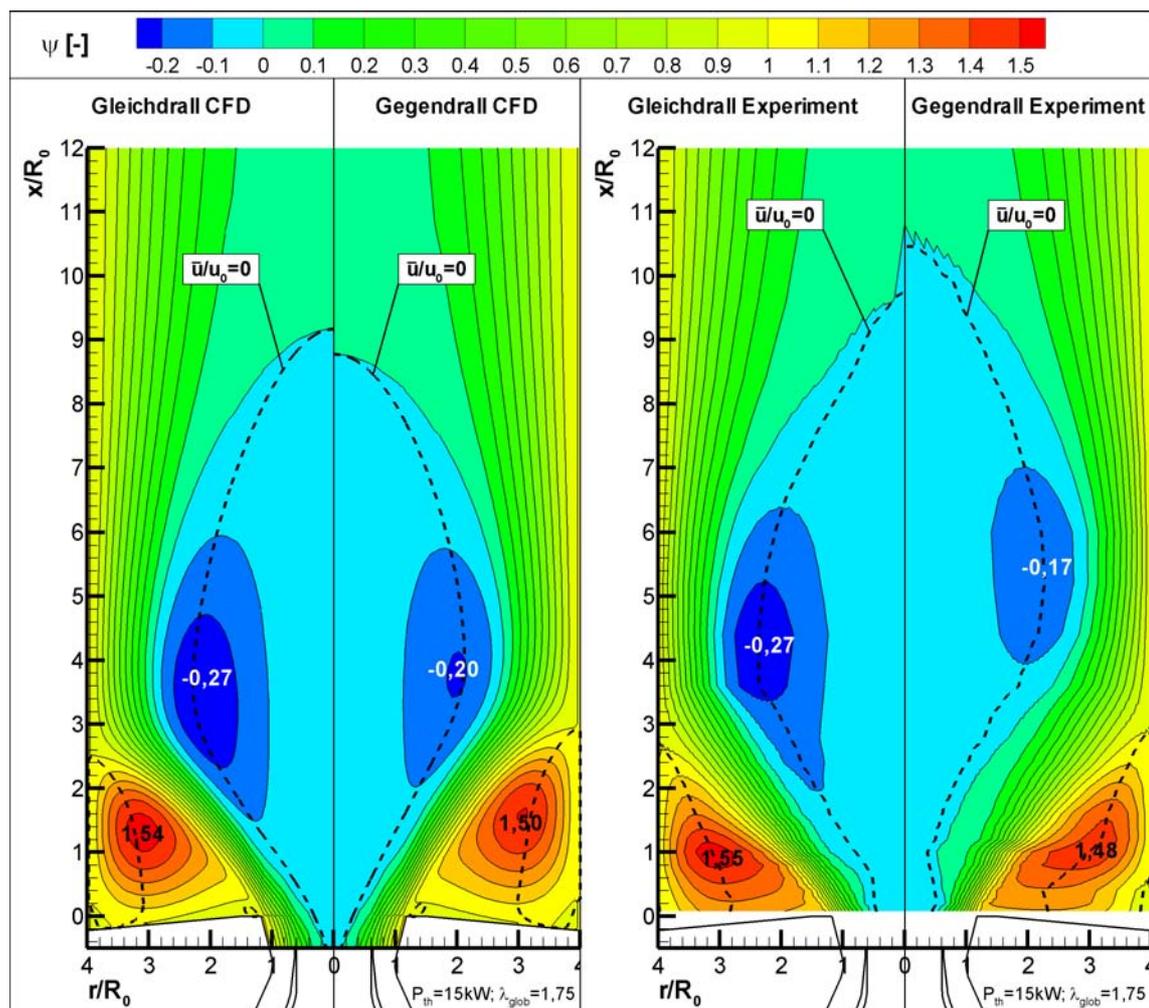


Abbildung 6.20: Berechnete und experimentell bestimmte Verteilung der normierten Stromfunktion der Gleich- und Gegendrallflamme

Drallflamme mittels des kleineren Dichteverhältnisses des Mediums im Eckenwirbel und des Strahlmediums erklären. Die gegenüber der isothermen Strömung geringere Abnahme der Rezirkulationsstärke des Eckenwirbels im Falle Gegendrallanordnung resultiert aus der im Vergleich zur Gleichdrallflamme größeren Eindringtiefe des Strahls (s. Abb. 6.27).

### Radialprofile der Geschwindigkeitskomponenten

Zum detaillierten Vergleich mit den experimentell ermittelten Daten und der Diskussion der Unterschiede zwischen Gleich- und Gegendrallflamme sind in Abb. 6.21 die radialen Profile der normierten, zeitlich mittleren Geschwindigkeitskomponenten in axialer (rot), radialer (grün) und tangentialer (blau) Richtung der Simulation (durchgezogene Linien) den experimentellen Ergebnissen (gestrichelte Linien) gegenübergestellt. Um die Vergleichbarkeit mit den entsprechenden Ergebnissen der isothermen Strömungen (s. Abb. 6.3) zu gewährleisten, wurden in Abb. 6.21 und Abb. 6.3 identische axiale Ebenen ausgewählt und identische Achsenskalierungen verwendet.

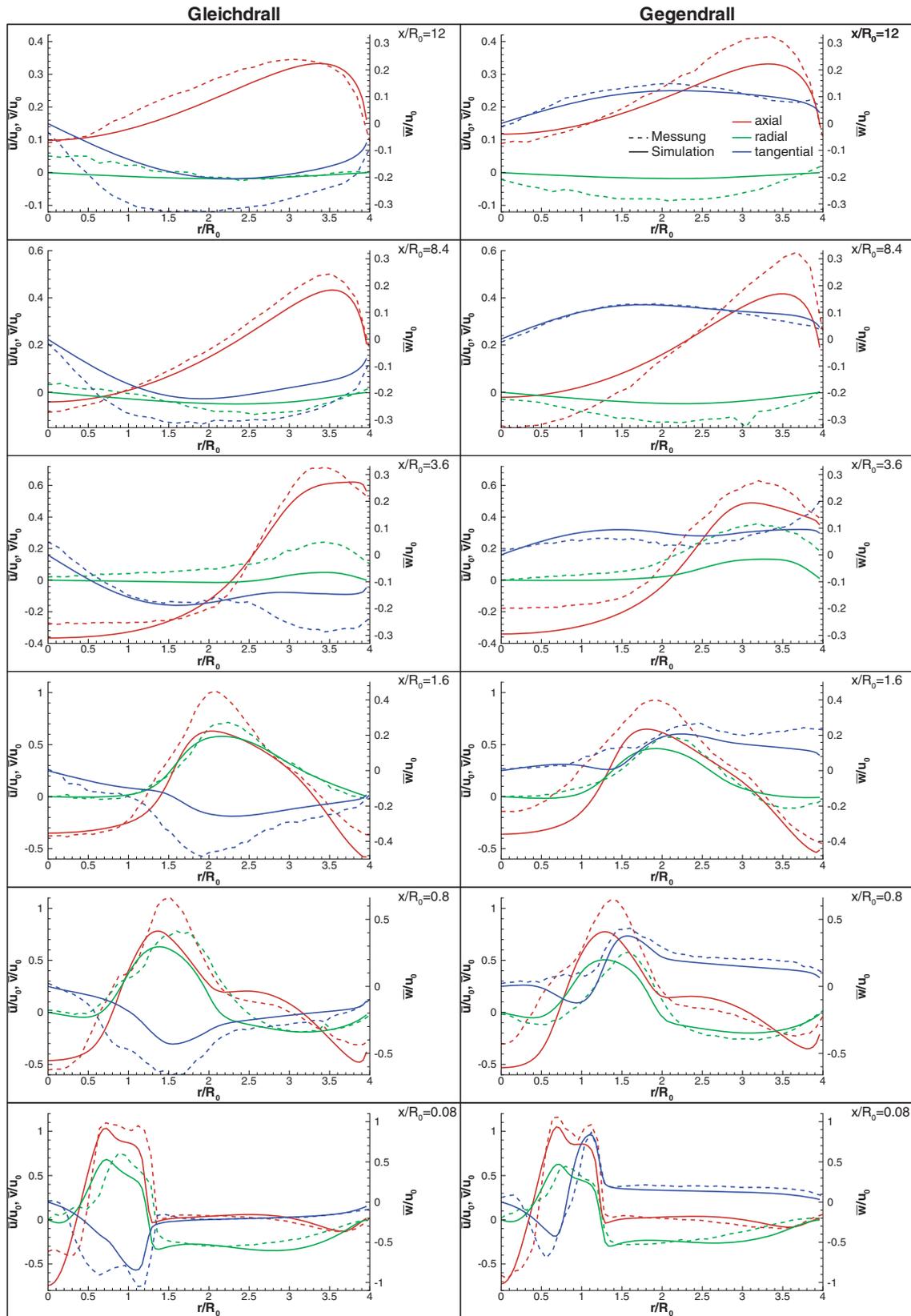


Abbildung 6.21: Radialprofile der mittleren Geschwindigkeitskomponenten für Gleich- und Gegendrallflamme

**Tangentialgeschwindigkeit:** Der Vergleich der Radialprofile der normierten Tangentialgeschwindigkeit beider Drallflammen mit den entsprechenden Profilen bei isothermen Bedingungen ergibt qualitativ einen sehr ähnlichen Verlauf. Quantitativ betrachtet, zeigt die Gegendrallflamme gegenüber der isothermen Strömung tendenziell eine geringe Erhöhung der Tangentialgeschwindigkeitsbeträge, wohingegen die Tangentialgeschwindigkeitsprofile der Gleichdrallflamme vor allem im Experiment zu deutlich höheren Beträgen verschoben sind. MERKLE [123] führt die Betragserhöhung der Tangentialgeschwindigkeit in der Gleichdrallflamme auf eine bereits in der Düse stattfindende Einmischung heißen Fluids durch die in dieser Konfiguration bis in die Düse hineinreichende Rückströmzone zurück. In diesem Bereich auftretende negative Axialgeschwindigkeiten großen Betrages führen bei Berücksichtigung der Drehimpulserhaltung nach (2.64) zu einer Erhöhung der Tangentialgeschwindigkeitsbeträge. Bestätigt wird dies durch die gegenüber der isothermen Strömung bereits in der düsenächsten Ebene ( $x/R_0 = 0,08$ ) stark erhöhten Tangentialgeschwindigkeitsbeträge im Falle der Gleichdrallflamme.

Im Vergleich mit den experimentellen Ergebnissen der Gegendrallflamme weisen die in Abb. 6.22 dargestellten Axial-Verläufe des Drehimpulsstromes dem Betrag nach deutlich größere Werte für die Gleichdrallflamme auf. Dass dieser Unterschied bereits in der düsenächsten Messebene ausgeprägt ist, deutet darauf hin, dass nicht nur von einer entsprechend der Ausführungen MERKLES 'Erhöhung der Tangentialgeschwindigkeit unter Berücksichtigung der Drehimpulserhaltung' auszugehen ist, sondern sogar von 'Erzeugung von Drehimpuls' in der Düse der Gleichdrallkonfiguration.

Die Simulation vermag diese Drehimpuls-Erzeugung sowie die Erhöhung der Tangentialgeschwindigkeit in der Gleichdrallflamme nicht wiederzugeben und weist bezüglich der Gegendrallflamme eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Ergebnissen als im isothermen Fall auf; möglicherweise eine Konsequenz einer gegenüber den Experimenten geringeren radialen Ausdehnung der Rückströmzone stromauf der Düsenmündung. Als Folge ergeben sich für die gleichsinnige Verdrallung größere Abweichungen zwischen Simulation und Experiment, v. a. auch in den Ebenen  $x/R_0 > 3,6$ .

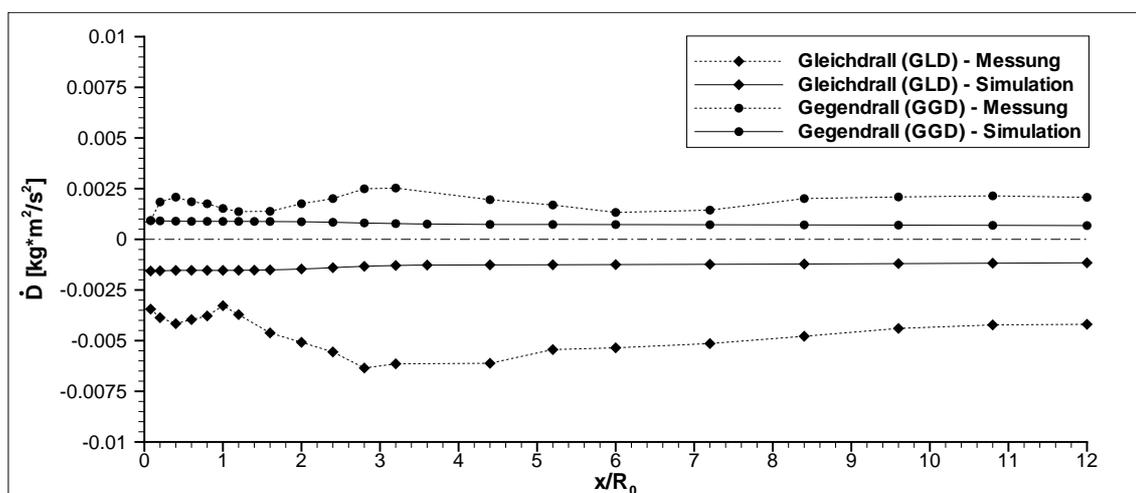


Abbildung 6.22: Axialprofile der mittleren Drehimpulsströme für Gleich- und Gegendrallflamme

Tendenziell zeigen die Tangentialgeschwindigkeitsprofile der Drallflammen eine Verbreiterung des Bereichs höherer Geschwindigkeitsbeträge gegenüber dem isothermen Fall, welche wiederum in den experimentell bestimmten Daten deutlicher hervortritt als in den Simulationsergebnissen. Die diskreten Extrema der beiden Drallkanäle sind in den Experimenten sowohl der Gleichdrall- als auch der Gegendrallflamme deutlicher zu erkennen als im Fall der isothermen Strömung; die Simulationen zeigen hier kaum Unterschiede. Das im Fall der isothermen Gleichdrallkonfiguration beobachtete langsamere Verschwinden des inneren Minimums der Tangentialgeschwindigkeit in der Simulation tritt auch im reaktiven Fall auf und deutet wiederum auf einen in der Simulation zu geringfügig gewichteten turbulenten Impulsaustausch hin.

**Radialgeschwindigkeit:** Wie schon die Tangentialgeschwindigkeitsprofile zeigen die Radialgeschwindigkeitsprofile der Drallflammen sehr ähnliche Verläufe im Vergleich zu den jeweiligen isothermen Strömungen. In der düsenächsten Ebene ( $x/R_0 = 0,08$ ) ist eine Beeinflussung durch die thermische Expansion des Fluides kaum merklich, so zeigen die Radialgeschwindigkeiten im reaktiven Fall gegenüber der isothermen Strömung lediglich geringfügig erhöhte Werte. Dennoch weisen hier die Simulationen eine bessere Übereinstimmung mit den Experimenten auf. Weiter stromab ( $0,8 \leq x/R_0 \leq 3,6$ ) zeichnet sich im strahldominierten Bereich des Strömungsfeldes eine Beschleunigung der Strömung in radialer Richtung auf Grund der Einmischung heißer Flammengase ab. Die Simulation gibt dies in guter Näherung wieder, jedoch mit tendenziell zu kleineren Radien verschobenen Radialgeschwindigkeitsmaxima. Für  $x/R_0 \geq 3,6$  zeigen die Simulationen stets kleinere Werte der Radialgeschwindigkeit als die Experimente; ein Hinweis auf ein bei kleineren axialen Düsenabständen einsetzendes Schließen der inneren Rezirkulationszone im Falle der Simulation.

**Axialgeschwindigkeit:** Schon in der düsenächsten Ebene ( $x/R_0 = 0,08$ ) ist in den reagierenden Drallströmungen eine leichte Erhöhung der Axialgeschwindigkeit gegenüber den isothermen Strömungen im Bereich des Düsenstrahls festzustellen. Diese kann durch die Einmischung über die innere Rezirkulationszone rücktransportierter Gase stromauf der Brennermündung und den Wärmestrom über die Kopfplatte in den Frischluftstrom erklärt werden [123]. Die achsnahe Rückströmgeschwindigkeit zeigt im Falle der Drallflammen ebenfalls erhöhte Werte; eine Folge der auf Grund der niedrigen Fluidichte der rückströmenden Gase kontinuierlich bedingt höheren Strömungsgeschwindigkeiten. Für beide Düsenkonfigurationen weisen die Simulationen eine bessere Übereinstimmung mit den Experimenten als bei isothermen Bedingungen auf.

In den stromab gelegenen Ebenen ( $x/R_0 \geq 0,8$ ) zeigt sich im Vergleich mit den isothermen Strömungen eine deutliche Verschiebung der Axialgeschwindigkeitsprofile zu höheren Beträgen und damit ein deutlicher Einfluss der thermischen Expansion des Fluids im Bereich der Hauptreaktionszone, die in diesem Bereich lokalisiert ist (s. Abb. 6.27). Als Konsequenz der geringeren Wärmefreisetzungsdichte im Falle der Simulation (s. Kap. 6.4.4) ergibt sich für beide Düsenkonfigurationen ein verzögertes Einsetzen der Axialgeschwindigkeitserhöhung, die sich in den im Vergleich zum Experiment niedrigeren Maximalwerten in den Ebenen  $0,8 \leq x/R_0 \leq 1,6$  äußert.

Ein deutlicher Unterschied zu den jeweiligen isothermen Strömungen ist durch die nahe der Brennkammerachse deutlich höheren Rückströmgeschwindigkeiten in Düsen-

nähe gegeben, deren Beträge mit zunehmendem axialen Düsenabstand v. a. in der Gegendrallflamme stärker abnehmen als unter isothermen Bedingungen, wonach sich die Rückströmzone früher schließt. Die nach obiger Diskussion der normierten Stromfunktion relativ kleinen zentral rezirkulierten Massenströme resultieren trotz der in diesem Bereich des Strömungsfeldes vorherrschenden hohen Rückströmgeschwindigkeiten aus der durch die hohe Temperatur bedingten niedrigeren Fluidichte.

## 6.4.2 Turbulenz in der reagierenden Drallströmung

Analog der Auswertung im isothermen Fall (s. Abb. 6.4), sollen auch die Eigenschaften der reagierenden Drallströmung bezüglich der Turbulenzgrößen anhand der turbulenten kinetischen Energie  $k$  diskutiert werden, wozu Abb. 6.23 deren Radialprofile aus Simulation (durchgezogene Linien) und Experiment (gestrichelte Linien) einander gegenüberstellt. In beiden Abbildungen sind der besseren Vergleichbarkeit wegen identische axiale Ebenen dargestellt. Die Skalierung der Ordinaten einer jeden axialen Ebene deckt bei überlagerter Verbrennung den doppelten Wertebereich der entsprechenden Darstellung im isothermen Fall ab.

Der Vergleich mit den isothermen Strömungen ergibt bezüglich der experimentellen Daten eine deutliche Erhöhung der turbulenten kinetischen Energie bei überlagerter Verbrennung, womit die Erwartung bestätigt ist, dass durch lokale Temperaturerhöhung bedingte, lokal größere Geschwindigkeitsgradienten eine Verstärkung der Turbulenz verursachen. In ihrem radialen Verlauf zeigen die Profile der turbulenten kinetischen Energie ein globales Maximum, das mit dem Bereich intensiver Mischung entlang der inneren Berandung des vorwärts strömenden Düsenstrahls korreliert. In düsennahen Ebenen zeichnet sich, im Experiment deutlicher als in der Simulation, ein weiteres lokales Maximum bei größeren Radien ab, das im Außenbereich des Ringstrahls lokalisiert ist. Dieses Sekundärmaximum bleibt im Verlauf der reagierenden Drallströmung länger erhalten als im isothermen Fall.

Verglichen mit den experimentellen Ergebnissen fallen die vor allem in düsenhöhe deutlich niedrigeren Beträge turbulenter kinetischer Energie im Falle der Simulationen von Gleich- und Gegendrallflamme auf. Einerseits weist der im Fall der isothermen Gleichdrallkonfiguration durchgeführte Vergleich der stationären (Standard  $k - \varepsilon$ -Turbulenzmodell) mit einer instationären CFD-Simulation (LES-Methode) in Kap. 6.2.1 auf eine Unterschätzung der Turbulenzgrößen in der stationären CFD-Simulation hin. Andererseits treten nach den Erkenntnissen neuerer experimenteller [48] und numerischer [89] Untersuchungen, vom Primärdrallerzeuger ausgehende, periodische hochfrequente Phänomene auf, die hauptsächlich den Düsennahbereich beeinflussen und die Struktur eines PVC (s. Kap. 2.3.7) besitzen. Da die zur Detektion dieser Phänomene mittels der LDA-Messtechnik notwendige Datenrate zu Zeiten der Messungen von MERKLE [123] nicht erreicht werden konnte, bleibt ungeklärt, inwieweit die aus diesen experimentellen Daten hervorgehenden Turbulenzgrößen durch periodische, hochfrequente Phänomene beeinflusst sind. Die stationäre Simulation vermag periodische Strukturen in der turbulenten Strömung nicht zu erfassen.

Für die düsen nächste Ebene ( $x/R_0 = 0,08$ ) weisen die experimentellen Ergebnisse im Falle der Gleichdrallflamme ein höheres globales Maximum der turbulenten kinetischen Energie als in der Gegendrallkonfiguration und damit ein gegenüber den isothermen Messungen (s. Abb. 6.4) umgekehrtes Verhältnis auf. Hierin spiegelt sich die im Falle

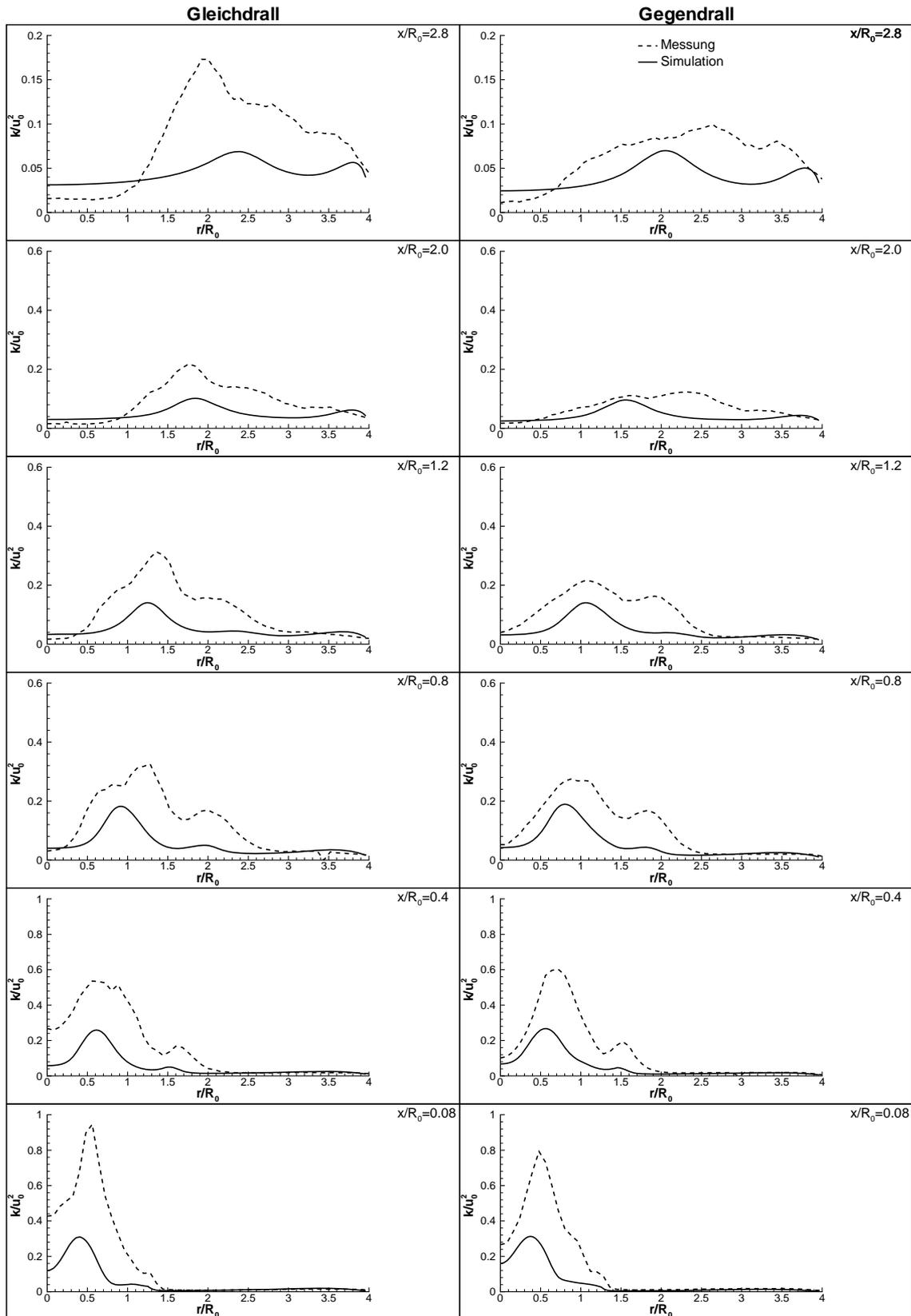


Abbildung 6.23: Radialprofile der turbulenten kinetischen Energie für Gleich- und Gegendrallflamme

der Gleichdrallflamme vermutete, bereits stromauf der Düsenmündung stattfindende Einmischung heißer, rezirkulierter Gase in die Vorwärtsströmung wieder, die schon in diesem Bereich zu einer lokalen Erhöhung der Geschwindigkeitsgradienten und damit einer Verstärkung der turbulenten kinetischen Energie führt. Eine weitere Ursache für die lokal stark erhöhte turbulente kinetische Energie mag, so MERKLE [123], auch in der Tatsache liegen, dass die hier betrachtete Gleichdrallflamme einem Betriebszustand entspricht, der nahe der Stabilitätsgrenze dieser Konfiguration liegt und daher die Strömung, trotz der grundsätzlich am Düsenmund aufsitzenden Flamme, den Einflüssen lokaler Verlösch- und Wiederzündvorgänge unterworfen ist, welche turbulente Fluktuationen von Temperatur und Dichte verursachen, aus denen schließlich lokal erhöhte Axialgeschwindigkeitsfluktuationen resultieren. Im weiteren Verlauf der Strömung weisen die experimentellen Daten der Gleichdrallkonfiguration auch im reagierenden Fall ein gegenüber der Gegendrallflamme langsames Abklingen der turbulenten kinetischen Energie mit zunehmendem Düsenabstand auf. Nach MERKLE [123] lässt sich der daraus resultierende höhere Feldgehalt turbulenter kinetischer Energie in der Gleichdrallflamme - wie auch im isothermen Fall (s. Kap. 6.1.2) - auf die in der Gleichdrallflamme vorliegende, instabilere radiale Strömungsschichtung im Bereich des vorwärtsströmenden Ringstrahls zurückführen, und anhand des Rayleigh-Kriteriums belegen.

Da die Tangentialgeschwindigkeitsverteilung in der turbulenten Drallströmung wegen ihrer turbulenzdämpfenden bzw. turbulenzverstärkenden Eigenschaften (s. Kap. 2.3.7) eine Anisotropie der turbulenten Austauschgrößen bedingt, liegt es nahe, dass diese wegen der unterschiedlichen Tangentialgeschwindigkeitsverteilungen auch in Gleich- und Gegendrallflamme unterschiedlich ausgeprägt und verteilt ist. Eine Anisotropie der turbulenten Austauschgrößen wird in der Simulation durch Anwendung der Boussinesq-Hypothese, welche nach den Ausführungen in den Kapiteln 4.1.2.3 und 4.1.2.5 auf einer zwar feldverteilen, aber isotropen Wirbelviskosität basiert, vernachlässigt. Folglich können Effekte unterschiedlicher Anisotropie der turbulenten Austauschgrößen in der Simulation nicht erfasst werden, sodass die Simulationsergebnisse, sowohl qualitativ als auch quantitativ, nahezu identische Verläufe der turbulenten kinetischen Energie für Gleich- und Gegendrallflamme zeigen.

### 6.4.3 Zeitlich mittleres Mischungsfeld

Im Verlauf der Diskussion des zeitlich mittleren Mischungsfeldes für die isothermen Drallströmungen in Kap. 6.2 konnte aus den experimentellen Daten geschlossen werden, dass Brennstoff und Primärluft im Nachlauf des Primärluftkanals bereits vorgemischt in die Brennkammer eintreten, sodass sich nahestöchiometrische Gemischzusammensetzungen in radialer Richtung bis hin zur Brennkammerachse ausdehnen. Dies ist in Anbetracht der bis in die Doppeldralldüse hineinreichenden Rückströmzone ein scheinbarer, in der Literatur mehrfach beschriebener, aber nicht geschlossen erklärbarer Widerspruch, der von der Simulation nicht wiedergegeben wird. Anhand einer Reihe numerischer Untersuchungen konnten im Rahmen dieser Arbeit einige mögliche Ursachen für die im Vergleich zum Experiment unterschiedlichen Simulationsergebnisse bezüglich der Mischungsverteilung ausgeschlossen werden. Um, im Hinblick auf die angestrebte Simulation der reagierenden Drallströmung, dennoch ein den Messungen möglichst getreues Mischungsfeld zu erhalten, wurde schließlich u. a. eine Modifika-

tion der Randbedingungen bezüglich des Brennstoffeinlasses durchgeführt. Demnach basieren die Simulationen der reagierenden Drallströmungen auf den in Kap. 6.2.3 beschriebenen Modifikationen, die zudem unabhängig von der durchgesetzten thermischen Leistung und der Art der Verdrallung anwendbar sind.

Zur Diskussion der Mischungsfelder der reagierenden Drallströmungen zeigt Abb. 6.24 die zeitlich mittleren Mischungsbruchverteilungen der reagierenden Gleich- und Gegendrallflamme aus Simulation und Experiment. Die Kontur-Levels sind jenen in Kap. 6.2 identisch, sodass blau eingefärbte Bereiche eine geringe Brennstoffkonzentration bedeuten, während rot eingefärbte Bereiche stöchiometrische und überstöchiometrische Bereiche kennzeichnen. Die Globalstöchiometrie mit  $\lambda_{glob} = 1,75$  entspricht hierbei einem Mischungsbruch von  $\bar{f}_{glob} = 0,032$  und wird in Abb. 6.24 durch grüne Bereiche wiedergegeben.

Wie schon im isothermen Fall beobachtet, verläuft der Prozess der Makromischung im Falle der Gegendrallflamme gegenüber der Gleichdrallkonfiguration stark verzögert ab. Den experimentellen Ergebnissen zufolge ist dies eine Konsequenz gedämpften turbulenten Austausches in der gegensinnig verdrallten Anordnung und bei überlagerter Verbrennung stärker ausgeprägt als unter isothermen Bedingungen. MERKLE [123] führt dies zum einen auf eine Überdeckung der radialen Lage der steilsten Gradienten des Mischungsfeldes mit Radienabschnitten gedämpfter turbulenter Geschwindigkeitsfluktuationen zurück, sodass der turbulente Stoffaustauschkoeffizient in der Gegendrallflamme dort reduziert wird, wo er größten Einfluss auf die Ausbildung des Mischungsfeldes ausübt. Zum anderen sei die vorzugsweise Einmischung des Brennstoffs in die Strömung des Primärluftkanals durch einen in den Messungen beobachteten, im reagierenden Fall stärker ausgeprägten Mündungswirbel begünstigt.

Die Simulation kann weder eine im reaktiven gegenüber dem isothermen Fall verstärkte Dämpfung des turbulenten Austausches für die Gleichdrallkonfiguration wiedergeben (s. Kap. 6.4.2), noch einen zusätzlichen Mündungswirbel detektieren. So können

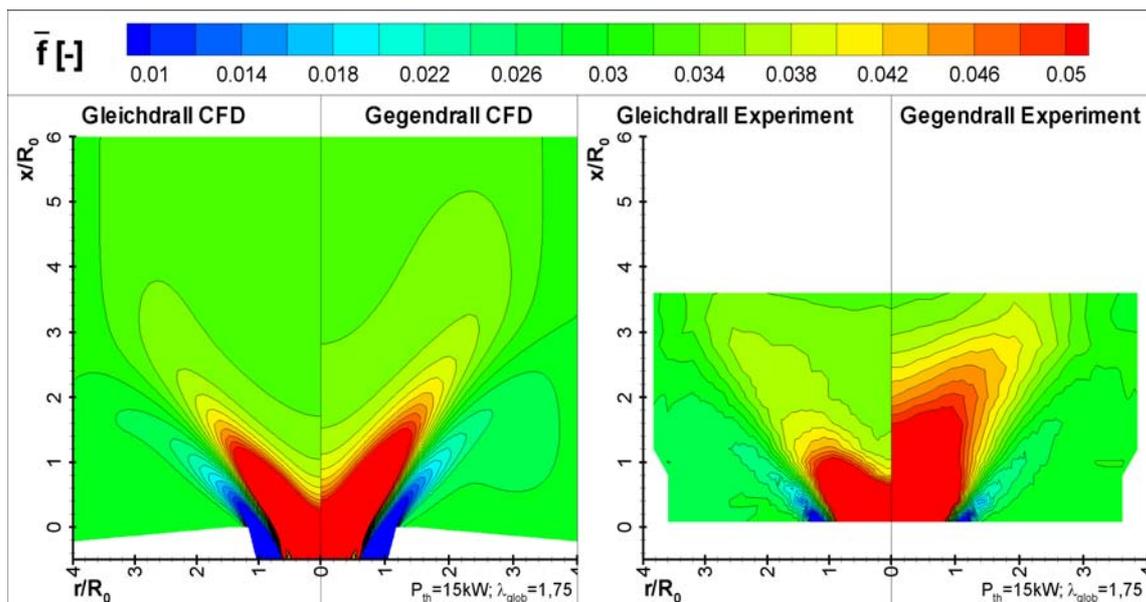


Abbildung 6.24: Berechnete und experimentell bestimmte Mischungsbruchverteilung der Gleich- und Gegendrallflamme

die Simulationsergebnisse das tiefere Eindringen von Bereichen nahestöchiometrischer Zusammensetzung im Fall der Gegendrallflamme zwar wiedergeben, doch ist das unterschiedliche Mischungsverhalten der beiden Drallflammen in der Simulation nicht so stark ausgeprägt wie in den Experimenten.

### Beitrag des turbulent diffusiven Austausches zum Mischungsbruchtransport

Da die Turbulenzgrößen aus den Simulationen für Gleich- und Gegendrallflamme nahezu identische Verläufe besitzen (s. Kap. 6.4.2), kann in guter Näherung angenommen werden, dass sie keinen Beitrag zu den Unterschieden im Mischungsverhalten der beiden Drallflammen leisten. Zur Verdeutlichung sind in Abb. 6.25 der aus den Gradienten berechnete turbulent diffusive Transport des Mischungsbruchs als Konturbild und die Mischungsbruchverteilung anhand ausgewählter Isolinien (aus Abb. 6.24) der Gleich- und Gegendrallflamme dargestellt. Der Vergleich Gleich-/Gegendrall zeigt bezüglich des turbulent diffusiven Mischungsbruchtransports lediglich eine leichte Stromabverschiebung der diskreten Kontur-Levels analog derer des Mischungsbruchs selbst, ansonsten aber keine wesentlichen Unterschiede.

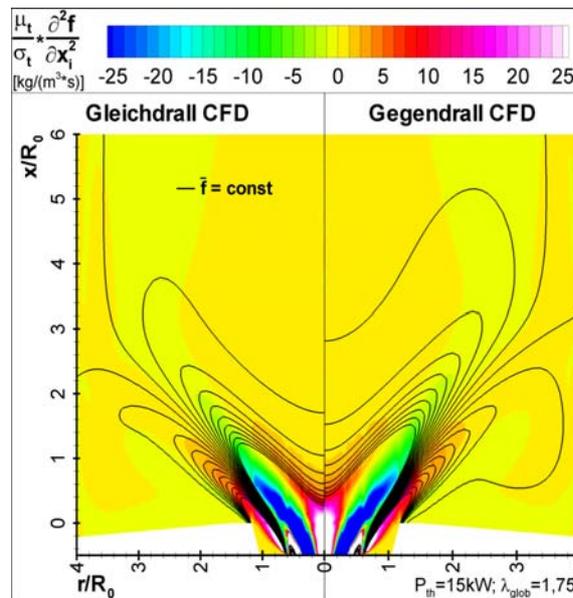


Abbildung 6.25: Zum Einfluss des turbulenten diffusiven Austausches auf die Mischungsbruchverteilung

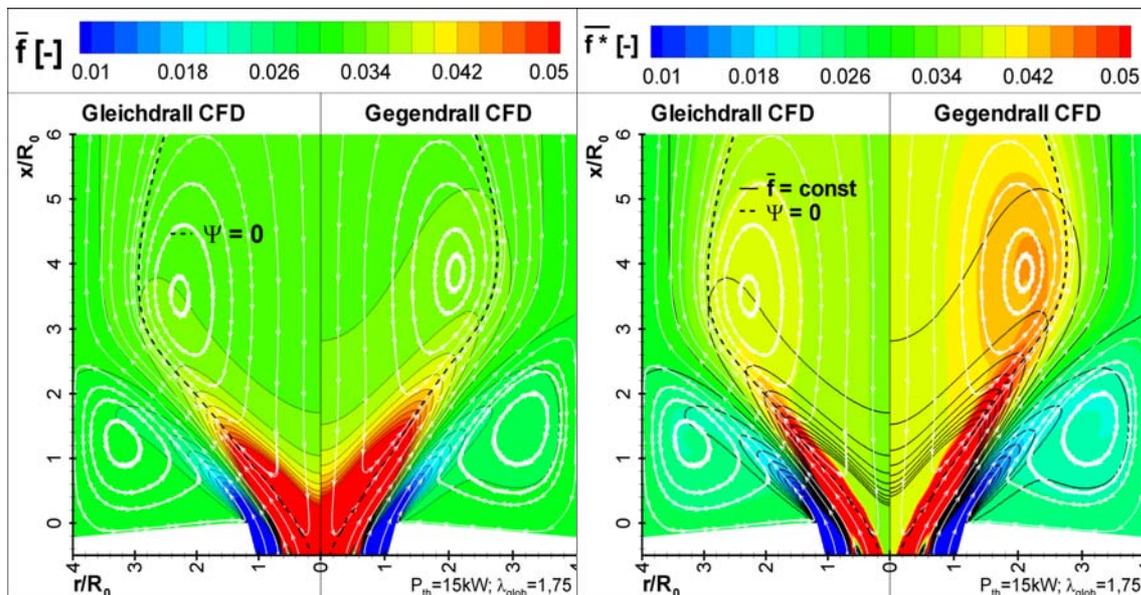
### Konvektiver Austausch und Mischungsbruchverteilung

Zur Diskussion des konvektiven Austauschverhaltens der Gleich- und Gegendrallflamme sind in Abb. 6.26 (a) außer der bereits bekannten Mischungsbruchverteilung (Konturbild) die Kontur der inneren Rezirkulationszone ( $\Psi = 0$ ) dargestellt und das Strömungsfeld anhand sog. “Streamtraces” (Linien die parallel zum lokalen Strömungsvektor in der x-r-Ebene verlaufen) veranschaulicht.

Die Überlagerte Darstellung dieser Größen lässt bereits einen Mechanismus erahnen, der zum tieferen Eindringen von Bereichen nahestöchiometrischen Mischungsbruchs in

die Brennkammer und damit einer, im Mittel gesehen, brennstoffreicheren, d.h. fetteren Rezirkulationszone im Falle der Gegendrallflamme führt. So weist die innere Rezirkulationszone der Gleichdrallflamme eine größere Ausdehnung in radialer Richtung sowie eine stärkere Rezirkulationsintensität auf. Das in der Rezirkulationszone umlaufende Fluid durchläuft daher einen größeren Bereich niedrigeren Mischungsbruchs, sodass die innere Rezirkulationszone der Gleichdrallflamme, integral betrachtet, mehr Luft ansaugt als diejenige der Gegendrallkonfiguration.

Dieser in Teilbild (a) der Abb. 6.26 nur in der Tendenz erkennbare Mechanismus soll durch ein numerisches Experiment belegt werden. Hierzu wird die in der Simulation zur Bestimmung der mittleren Mischungsbruchverteilung verwendete Transportgleichung des Mischungsbruchmittelwertes (4.57) herangezogen. In dieser lassen sich konvektive und turbulente Transportterme voneinander unterscheiden, sodass mittels Variation der turbulenten Schmidt-Zahl dieser Transportgleichung ( $Sc_f$ ) der turbulente Mischungsbruchtransport verstärkt oder gedämpft werden kann. Durch Lösen der Mischungsbruchmittelwerttransportgleichung bei festgehaltenem Strömungs- und Temperaturfeld und gleichzeitiger Erhöhung der turbulenten Schmidt-Zahl auf  $Sc_f = 10^{10}$  kann folglich eine fiktive Mischungsbruchverteilung ( $\bar{f}^*$ ) berechnet werden, welche ein Mischungsbruchfeld wiedergibt, wie es bei nahezu unterdrücktem turbulenten Austausch und gleichzeitiger Vernachlässigung seiner Rückwirkung auf Strömungs- und Temperaturfeld aussähe. Die Verteilung des auf diese Weise erhaltenen fiktiven Mischungsbruchs für die Gleich- und Gegendrallflamme ist in Abb. 6.26 (b) dargestellt. Die Unterdrückung des turbulenten Austausches äußert sich darin, dass die Isoflächen des fiktiven Mischungsbruchs in der inneren Rezirkulationszone nahezu dem Verlauf der Hauptströmung entsprechen. Die niedrigeren Mischungsbruchwerte in der inneren Rezirkulationszone Gleichdrallflamme belegen schließlich, dass diese rein konvektiv bedingt Fluid niedrigeren Mischungsbruchs ansaugt.



(a) Mittlerer berechneter Mischungsbruch

(b) Fiktive Mischungsbruchverteilung

Abbildung 6.26: Zum konvektiven Austauschverhalten der Gleich- und Gegendrallflamme

### 6.4.4 Ausbrand und Temperatur

Zur Diskussion des letzten Gliedes des oben formulierten Wirkungskreises “Strömung - Mischung - Temperatur” sind in Abb. 6.27 die Verteilungen der Temperaturen in Simulation und Experiment für Gleich- und Gegendrallflamme dargestellt.

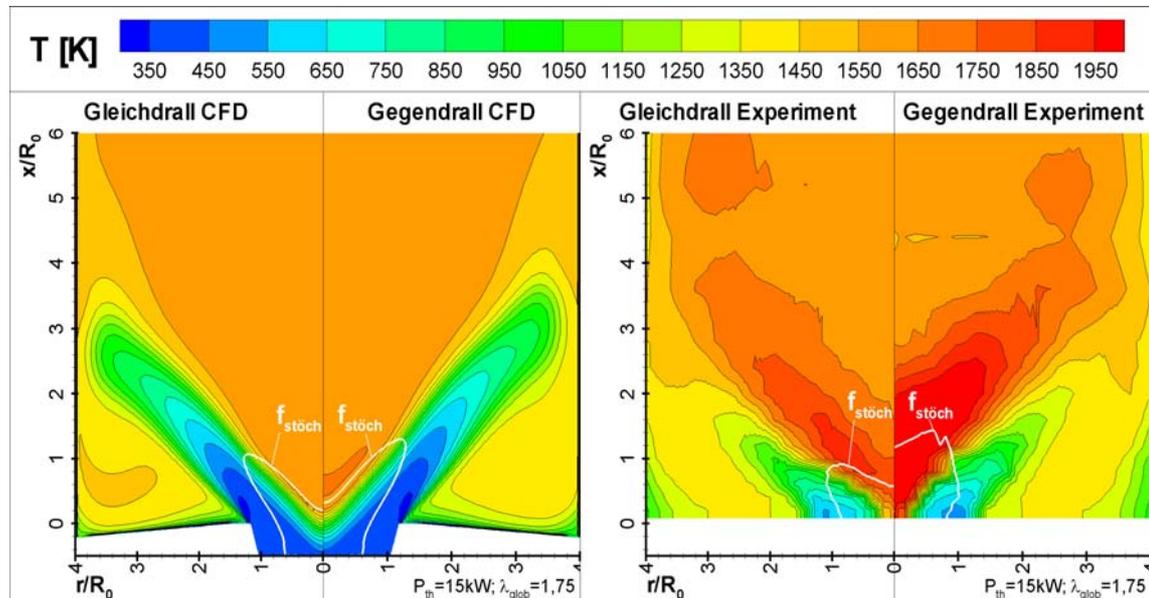


Abbildung 6.27: Berechnete und experimentell bestimmte Temperaturverteilung der Gleich- und Gegendrallflamme

Simulation und Experiment zeigen für Gleich- und Gegendrallflamme ähnliche Charakteristika. So besitzen die aus der Doppeldralldüse ausströmenden Gase eine niedrige Temperatur (blau bis grün), wohingegen die maximalen Temperaturen (rot) entlang des äußeren Rands der inneren Rezirkulationszone auftreten. Die Reaktionszone ist im Bereich der größten Temperaturgradienten zu lokalisieren. Im Verlauf der äußeren Rezirkulationszone zeichnen sich deutliche Wärmeverluste über die Kopfplatte ab, die anhand der zu dieser hin abnehmenden Temperaturen auszumachen sind. Niedrigere Temperaturen nahe der zylindrischen Brennkammerwand verdeutlichen Wärmeverluste über diese Wand hinweg. Für hinreichend große Abstände von der Düse ( $x/R_0 \geq 6$ ) stellt sich in radialer Richtung eine recht homogene Verteilung der Temperatur ein, deren über den Radius gemittelter Wert um ca. 100 K unterhalb der theoretischen Verbrennungstemperatur eines Brennstoff/Luft-Gemischs gleicher Globalstöchiometrie ( $\lambda_{glob} = 1,75$ ) von  $T_{ad,CH_4,\lambda=1,75} \approx 1670 K$  liegt.

Die Ergebnisse der Simulationen zeigen niedrigere Maximaltemperaturen sowie ein niedrigeres Temperaturniveau im Bereich des äußeren Rands der inneren Rezirkulationszone als die entsprechenden Experimente. Auf den ersten Blick scheinen die niedrigeren Temperaturen in der Simulation auf eine geringere Wärmefreisetzung durch die chemischen Reaktionen hinzudeuten, sind aber vermutlich eine Folge der einander überlagerten Prozesse:

- Wärmefreisetzung: abhängig von Strömungs- und Mischungsfeld,
- Wärmeabfuhr durch Strahlung und Konvektion.

Bezieht man die entsprechenden Mischungsfelder (s. Abb. 6.24 bzw. Konturlinie  $f_{\text{stöch}}$  in Abb. 6.27) in die Diskussion der Temperaturverteilungen mit ein, fällt auf, dass die Konturen nahestöchiometrischer Zusammensetzungen in den Simulationen sich tendenziell weniger tief in den Bereich der verbrennungsstabilisierenden inneren Rückströmzone hinein erstrecken, sodass hier ein geringeres Reaktionsvolumen bei nahestöchiometrischen Zusammensetzungen zur Verfügung steht und folglich geringere Spitzentemperaturen resultieren. Desweiteren ist im Falle der Simulation eine stärker ausgedehnte Reaktionszone festzustellen, die sich mittels der in Abb. 6.28 dargestellten Verläufe des nach (5.30) definierten lokalen Ausbrandgrades, nachvollziehen lässt. So wird, verglichen mit den Experimenten, ein lokaler Ausbrandgrad des Wertes  $\alpha = 1$  (vollständiger Reaktionsumsatz) in den Simulationen jeweils erst bei größeren axialen Düsenabständen erreicht; Bereiche nicht vollständigen Umsatzes ( $\alpha \leq 1$ ) erstrecken sich entlang des Düsenstrahls tiefer in die Brennkammer hinein. Dieser langsamere Reaktionsverlauf resultiert mitunter auch aus den in Kap. 6.4.2 beschriebenen Diskrepanzen der Simulation in der Vorhersage der Turbulenzgrößen, welche in die Transportgleichungen des Reaktionsfortschrittsmittelwerts (4.54) sowie der Reaktionsfortschrittsvarianz (4.55) eingehen. So bedingen kleinere Turbulenzgrößen eine langsamere Mischung, damit eine Verzögerung des Ausbrandes und führen zu einer Ausweitung der Reaktionszone in Gebiete, in denen in der Simulation keine nahestöchiometrischen Bedingungen vorhanden sind. Ein Reaktionsumsatz in diesen Bereichen resultiert schließlich in niedrigeren Verbrennungstemperaturen.

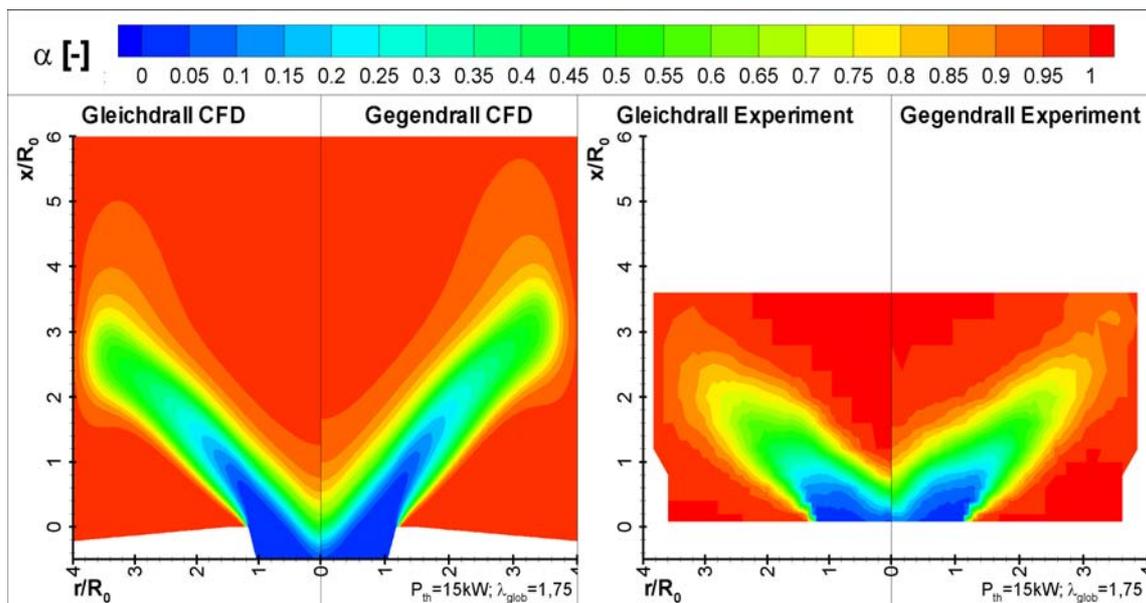


Abbildung 6.28: Berechnete und experimentell bestimmte Verteilung des lokalen Ausbrandgrades für Gleich- und Gegendrallflamme

Eine wesentliche Voraussetzung zu einer realitätsgetreuen Wiedergabe des Temperaturfeldes ist eine möglichst genaue Erfassung von Wärmeverlusten durch Konvektion und Strahlung. Vor allem eine Modellierung der Wärmestrahlung erweist sich als schwierig und numerisch extrem aufwändig. Die im Rahmen dieser Arbeit verwendete, numerisch kostengünstige Strahlungskorrektur liefert sicherlich richtige Tendenzen, sollte aber zukünftig durch ein detailliertes Strahlungsmodell, z.B. auf Basis der sog. "Monte Carlo

Methode" [184], ersetzt werden. Mit solch einer detaillierten Beschreibung der Wärmestrahlung ist zu erwarten, dass die experimentell ermittelte Temperaturverteilung, v. a. im Bereich der Brennkammerachse bei kleinen Düsenabständen, durch die Simulation besser wiedergegeben werden kann [26].

Im direkten Vergleich beider Düsenkonfigurationen zeigen die experimentellen Ergebnisse in Düsennähe deutlich größere Bereiche höherer Temperaturen für die Gegendrallflamme. Auch die aus den Messungen hervorgehende Maximaltemperatur in der Gegendrallflamme ist mit  $T_{max,GGD} \approx 2250\text{ K}$  deutlich höher als jene der Gleichdrallflamme mit  $T_{max,GLD} \approx 1950\text{ K}$  [123]. MERKLE [123] begründet diesen Unterschied durch den in der Gegendrallkonfiguration niedrigeren turbulenten Austausch und dem damit einhergehenden erweiterten Gebiet nahestöchiometrischer Gemischzusammensetzung, bei welcher maximale theoretische Verbrennungstemperaturen zu erwarten sind. Zur Verdeutlichung ist in Abb. 6.27 jeweils die Konturlinie stöchiometrischer Mischung ( $f_{st\ddot{o}ch}$ ) dargestellt.

Die Simulationen weisen bezüglich des Vergleichs Gleich-/Gegendrall den Experimenten entsprechende Charakteristika auf. So treten im Falle der Gegendrallflamme höhere Maximaltemperaturen im Düsennahbereich auf (s. Abb. 6.27). Auch die Tendenz der Gegendrallkonfiguration zur Ausbildung einer etwas längeren Flamme wird durch die Rechnung wiedergegeben (s. Abb. 6.28).

## 6.5 Stabilitätsuntersuchung

Die bereits in Kap. 5.3.2 umrissenen Ergebnisse der experimentellen Stabilitätsuntersuchungen von MERKLE [123] erklären das Stabilisierungsverhalten in den hier untersuchten, nicht-vorgemischten Drallflammen mittels der zeitgleichen, örtlichen Überlappung von Bereichen im Strömungsfeld, in denen strömungsmechanisch und reaktionskinetisch für eine Zündstabilisierung besonders günstige Bedingungen herrschen. Durch Vergleich von gleich- und gegensinnig verdrallter, reagierender Strömungen anhand von Stabilitätsgrenzkurven (s. Abb. 5.4) konnte MERKLE [123] gegenüber der Gleichdrallflamme eine deutliche Erweiterung des stabilen Betriebsbereichs bei gegensinnig verdrallter Luftführung nachweisen. Zur näheren Untersuchung dieses unterschiedlichen Stabilisierungsverhaltens ermittelte er detaillierte experimentelle Daten jeweils einer stabil brennenden Flamme und einer Flamme nahe der Stabilitätsgrenze für Gleich- und Gegendrallkonfiguration. Die entsprechenden Betriebsbedingungen (10 kW/15 kW GLD und 15 kW/29 kW GGD) wurden in Kap. 5.2.2 zusammenfassend dargestellt.

Das aktuell vorliegende Kapitel ist nun der Untersuchung der Vorgänge in der Flamme bei Annäherung an die Stabilitätsgrenze und der Erfassung der Stabilitätsgrenze mittels der in den vorangehenden Kapiteln beschriebenen und validierten numerischen Vorgehensweisen unter Anwendung des nicht-adiabaten JPDF Reaktionsmodells (s. Kap. 4.3) gewidmet. Als Diskussionsbasis hierzu werden zunächst die makroskopischen Erscheinungsformen der sich einstellenden Flammen - der Übersichtlichkeit halber beschränkt auf die Gleichdrallflamme - diskutiert, um ein den Experimenten möglichst getreues Stabilitätskriterium für die Simulation abzuleiten. Daraufhin werden die mit Hilfe der Simulationen bestimmten Stabilitätskurven dargelegt und den experimentell ermittelten gegenüber gestellt. Schließlich gilt es, den Mechanismus der Stabilisierung zu formulieren, um damit sowohl die Einflüsse auf die Stabilität durch Steigerung der

thermischen Leistung bei konstanter Globalstöchiometrie als auch das unterschiedliche Stabilisierungsverhalten der Gleich- und Gegendrallflamme zu beschreiben.

### 6.5.1 Kriterien zur Beurteilung der Stabilität des Systems

Die Bestimmung eines Kriteriums zur Charakterisierung des Übergangs einer stabilen in eine instabile Verbrennung ist eine wesentliche Schwierigkeit bei der Beschreibung des Stabilitätsverhaltens eines Verbrennungssystems. MERKLE definiert im Rahmen seiner Arbeit [123] die Stabilitätsgrenze als diejenige Grenze, bei deren Überschreiten die Verbrennung, ausgehend von einer aufsitzenden, pulsationsfrei brennenden Flamme, einen Übergang in eine andere Stabilisierungsform vollzieht, wie dies in den Fotos in Abb. 5.4 dargestellt ist. Diesen Übergang detektiert er zum einen rein visuell über die Messfenster des Systems zum anderen anhand akustischer Rückkopplungen, die durch Druckpulsationen zustande kommen. Aus den experimentellen Daten geht somit kein an einer definierten Größe festzumachendes Stabilitätskriterium hervor, das auch in der Simulation verwendbar wäre, sodass auch hierin die äußere Erscheinungsform der Flamme zur Definition eines vergleichbaren Stabilitätskriteriums herangezogen wird.

Zur Bestimmung einer Stabilitätsgrenze wird in den Simulationen ausgehend von einem stabilen Betriebszustand die thermische Leistung bei konstanter globaler Luftzahl sukzessive erhöht. Hierdurch verändert sich die äußere Erscheinungsform der Flamme, sodass diese bei entsprechenden thermischen Leistungen verschiedene charakteristische Zustände aufweist, welche nachfolgend beschrieben werden.

#### Flame-Wall-Breakup (FWB)

Um die Reaktion der Flamme auf eine Steigerung der thermischen Leistung zu diskutieren, sind in Abb. 6.29 die Verteilungen von Mischungsbruch, Temperatur, Ausbrandgrad und Reaktionsrate aus Simulationen der Gleichdrallflamme bei verschiedenen thermischen Leistungen dargestellt. Auffällig ist, dass hierbei deutliche Veränderungen in den Verteilungen des Ausbrandgrades sowie der Temperatur und Reaktionsrate auftreten, während die Mischungsbruchverteilung nahezu unverändert bleibt; eine Beobachtung auf die in Kap. 6.5.3 näher eingegangen wird.

Die oberste Bildreihe in Abb. 6.29 zeigt die Gleichdrallflamme ( $\lambda_{glob} = 1,75$ ) bei einer thermischen Leistung von  $P_{th} = 10 \text{ kW}$ , d.h. Betriebsbedingungen, die MERKLE [123] als stabil bezeichnet; die zweite Bildreihe entspricht einem Betriebspunkt ( $P_{th} = 15 \text{ kW}$ ) nahe der experimentell bestimmten Stabilitätsgrenze. Im Gegensatz zu den Experimenten, vollzieht die Gleichdrallflamme in den Simulationen erst bei einer thermischen Leistung zwischen  $P_{th} = 23 \text{ kW}$  und  $P_{th} = 25 \text{ kW}$  einen Übergang in eine andere Stabilisierungsform, der dem in den Experimenten für  $P_{th} \geq 15 \text{ kW}$  beobachteten vergleichbar ist. Bei  $P_{th} = 23 \text{ kW}$  (dritte Bildreihe) ist die Reaktionszone bereits sehr nahe an der zylindrischen Brennkammerwand. Eine weitere Steigerung der thermischen Leistung zu  $P_{th} = 25 \text{ kW}$  führt zu einer Flamme, die auf die zylindrische Brennkammerwand auftrifft und deren Reaktionszone sich in zwei Äste aufteilt. Dieser Übergang wird im Folgenden "Flame-Wall-Breakup" (FWB) genannt und zur Definition der Stabilitätsgrenze des Systems herangezogen. Zur Eintragung einer Stabilitätsgrenzkurve in ein Stabilitätsdiagramm (s. Abb. 6.31) wird derjenige Betriebspunkt gewählt

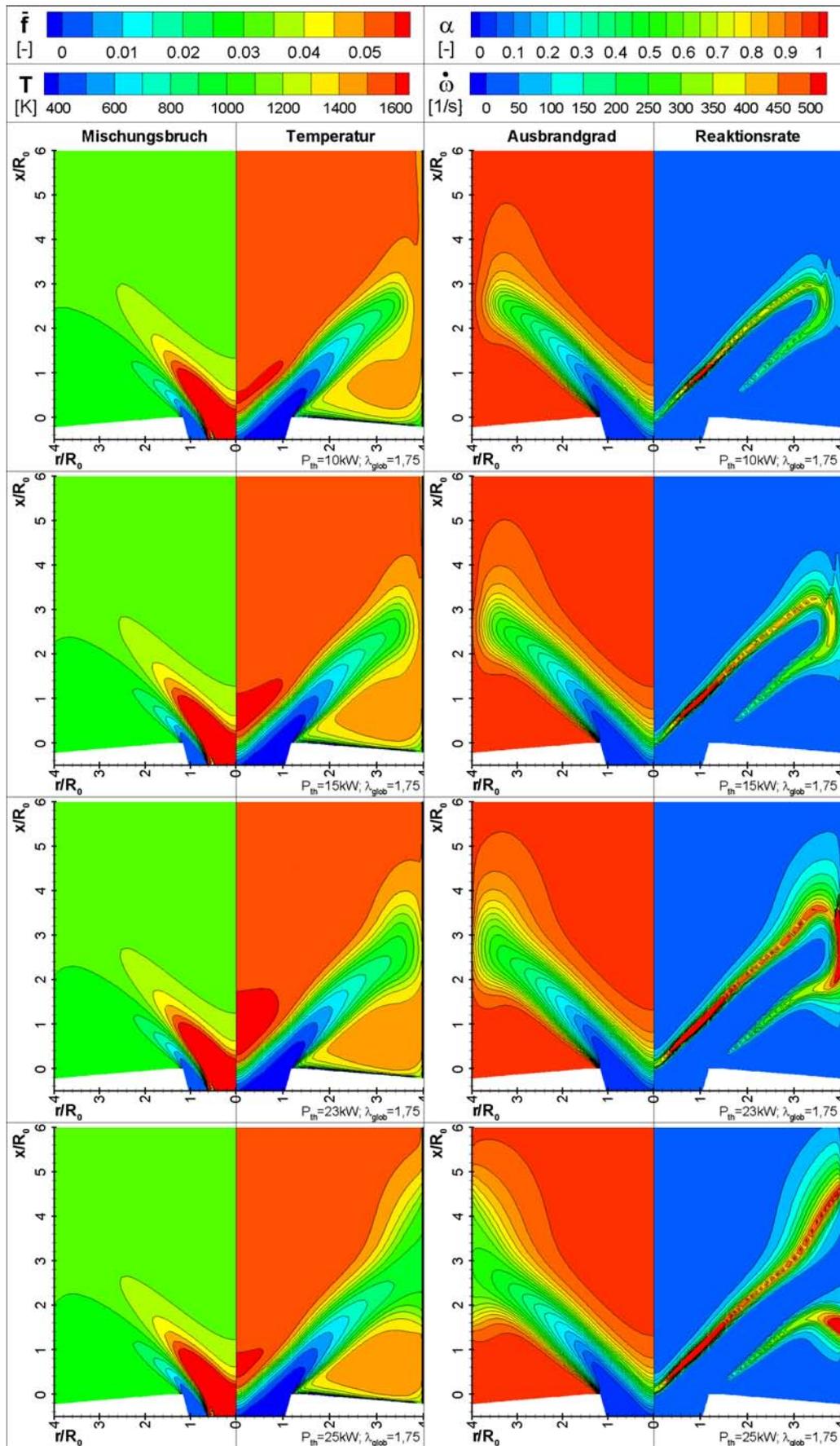


Abbildung 6.29: Der Übergang vom stabilen Betriebszustand zum Flame-Wall-Breakup

bei dem die Flammenfront gerade noch geschlossen ist, die Aufteilung der Reaktionszone in zwei Äste noch nicht stattgefunden hat. Im hier diskutierten Beispiel ist dies das Wertepaar  $P_{th} = 23 \text{ kW}$  und  $\lambda_{glob} = 1,75$ .

### Lean-Blow-Out (LBO)

Bei weiterer Steigerung der thermischen Leistung stabilisiert die Flamme zunächst an einem stromab gelegenen Punkt an der Brennkammerwand, der mit zunehmender thermischer Leistung weiter stromab wandert, bis die Flamme schließlich verlöscht. Wegen der hier mageren Betriebsbedingungen wird der Vorgang des Verlöschens ‘Lean-Blow-Out’ (LBO) genannt; die zugehörige Grenzkurve ‘magere Verlöschgrenze’. Für einen Betriebszustand der Gleichdrallflamme nahe aber unterhalb der mageren Verlöschgrenze ( $P_{th} = 95 \text{ kW}$ ;  $\lambda_{glob} = 1,75$ ) zeigt Abbildung 6.30 signifikante Unterschiede in Temperatur, Ausbrandgrad und Reaktionsrate zu den entsprechenden Verteilungen in Abb. 6.29. So treten nahe der mageren Verlöschgrenze deutlich niedrigere Temperaturen auf. Eine Verbrennung im Bereich der äußeren Rezirkulationszone ist nicht mehr festzustellen. Die Flamme brennt abgehoben und die Brennkammerwand wird durch Überströmen mit kaltem Frischgemisch gekühlt. Eine weitere Steigerung der thermischen Leistung um  $\Delta P_{th} = 1 \text{ kW}$  führt zu sofortigem Verlöschen.

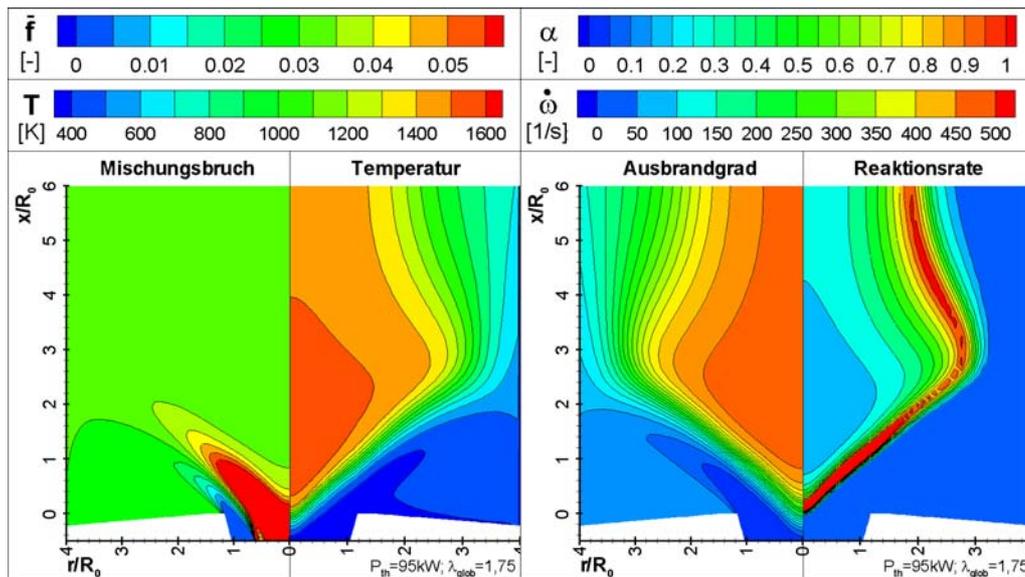


Abbildung 6.30: Gleichdrallflamme nahe des mageren Verlöschens

### 6.5.2 Betriebsbereiche und Stabilitätsdiagramm

Mit Hilfe eines Stabilitätsdiagramms lassen sich für ein Verbrennungssystem stabile von instabilen Betriebsbereichen unterscheiden. Hierzu werden in der Regel durch Auftragung der in der Brennkammer umgesetzten thermischen Leistung über der global vorgegebenen Luftzahl die Betriebspunkte gekennzeichnet, bei welchen gerade noch eine stabile Verbrennung möglich ist. In Abb. 6.31 sind neben der von MERKLE [123] experimentell ermittelten Stabilitätskurve der Gleichdrallkonfiguration auch diejenigen verschiedener Simulationen dargestellt.

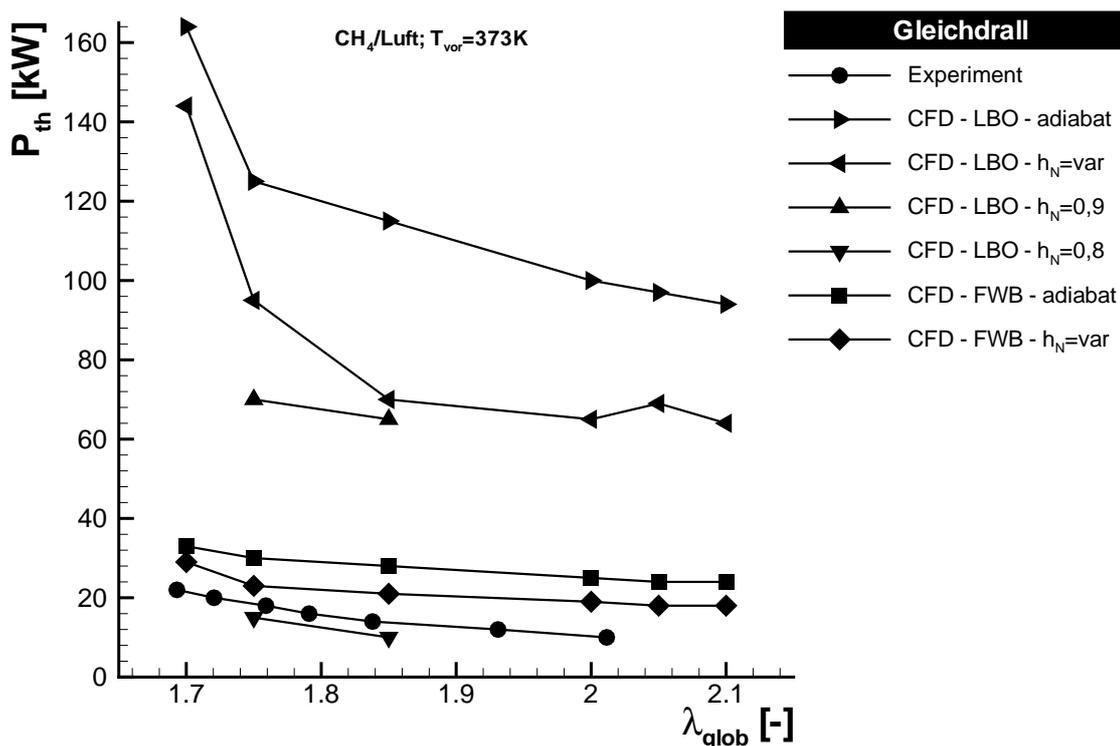


Abbildung 6.31: Stabilitätsdiagramm des untersuchten Systems

### Grenzkurven verschiedener Stabilitätskriterien

Zur Vorhersage experimentell bestimmter Stabilitätsgrenzen erweisen sich die CFD-Simulationen mageren Verlöschens unter adiabaten Bedingungen (CFD-LBO-adiabat) als ungeeignet; die entsprechenden Verlöschkurven liegen bei viel zu großen thermischen Leistungen. Die Anwendung des nicht-adiabaten JPDF Reaktionsmodells (feldverteilter, variabler Enthalpie-Index) zusammen mit entsprechenden Randbedingungen (CFD-LBO- $\widetilde{h}_N = var$ ) führt nachweislich zu einer Verschiebung der mageren Verlöschkurve in Richtung kleinerer thermischer Leistungen, die dennoch weit von der experimentell ermittelten Stabilitätskurve entfernt ist; eine Konsequenz dessen, dass hier mageres Verlöschen mit dem Auftreten instabiler Verbrennung verglichen wird. Dennoch reflektiert die Betrachtung der beiden LBO-Kurven der Simulation den immensen Einfluss von Wärmeverlusten auf das System.

Auch die Bedeutung der Erfassung des Einflusses lokaler Wärmeverluste auf die chemische Reaktionskinetik und damit das Verbrennungssystem kann anhand dieser Darstellung nochmals betont werden. So resultiert die absichtliche Vorgabe eines über die gesamte Brennkammer konstanten Enthalpie-Index (s. Kap. 6.3.2) in magerem Verlöschen bei deutlich kleineren thermischen Leistungen (CFD-LBO- $\widetilde{h}_N = 0,9$  bzw. CFD-LBO- $\widetilde{h}_N = 0,8$ ) als im adiabaten Fall.

Selbst die Stabilitätskurve, die sich durch Anwendung des Flame-Wall-Breakup Limits aus den Simulationen ergibt, liegt, verglichen mit den experimentellen Ergebnissen, bei zu großen thermischen Leistungen, wenn Wärmeverluste vernachlässigt werden (CFD-FWB-adiabat). Aber durch das nicht-adiabate JPDF Reaktionsmodell (s. Kap. 4.3 und 6.3.2) ergibt sich eine vielversprechende Annäherung (CFD-FWB- $\widetilde{h}_N = var$ ) an

die experimentell bestimmte Stabilitätskurve.

### Stabilitätskurven für Gleich- und Gegendrall

Um die gegensinnig verdrallte Konfiguration in die Diskussion mit einzubeziehen, sind deren experimentell sowie durch Simulationen bestimmte Stabilitätskurven (FWB) in Abb. 6.32 mit denjenigen der Gleichdrallkonfiguration verglichen. Zur genaueren Betrachtung erstreckt sich darin die Skalierung der Ordinate über einen kleineren Wertebereich als in Abb. 6.31.

Alle dargestellten Kurven weisen einen monoton fallenden Verlauf auf, zeigen also eine zunehmende Einschränkung des Betriebsbereiches mit steigender globaler Luftzahl. Wie auch im Experiment, liegt die Stabilitätskurve der Gleichdrallkonfiguration unterhalb derer der gegensinnig verdrallten und gibt damit die Erweiterung des Betriebsbereich in Falle des Gegendralls wieder. Die Tatsache, dass dieser Unterschied in der Simulation weniger stark ausgeprägt ist als in der Messung, spiegelt die in Kap. 6.4 diskutierten, gegenüber den experimentell ermittelten Daten, geringeren Unterschiede zwischen beiden Düsenkonfigurationen wieder, die sich in den dort diskutierten Verläufen der mittleren Geschwindigkeiten und der Turbulenzgrößen, sowie den Verteilungen des Mischungsbruches, des Ausbrandgrades und der Temperatur nachweisen lassen.

Die verbleibenden Abweichungen zwischen den Stabilitätskurven der Simulation und des Experiments einer jeweiligen Düsenkonfiguration beruhen einerseits auf Ungenauigkeiten der Modellierung, seien diese in den Modellen selbst, der Erfassung der Randbedingungen oder den dabei getroffenen Vereinfachungen und Annahmen begründet. Eine Diskussion dieser Ungenauigkeiten würde an dieser Stelle sicherlich den Rahmen

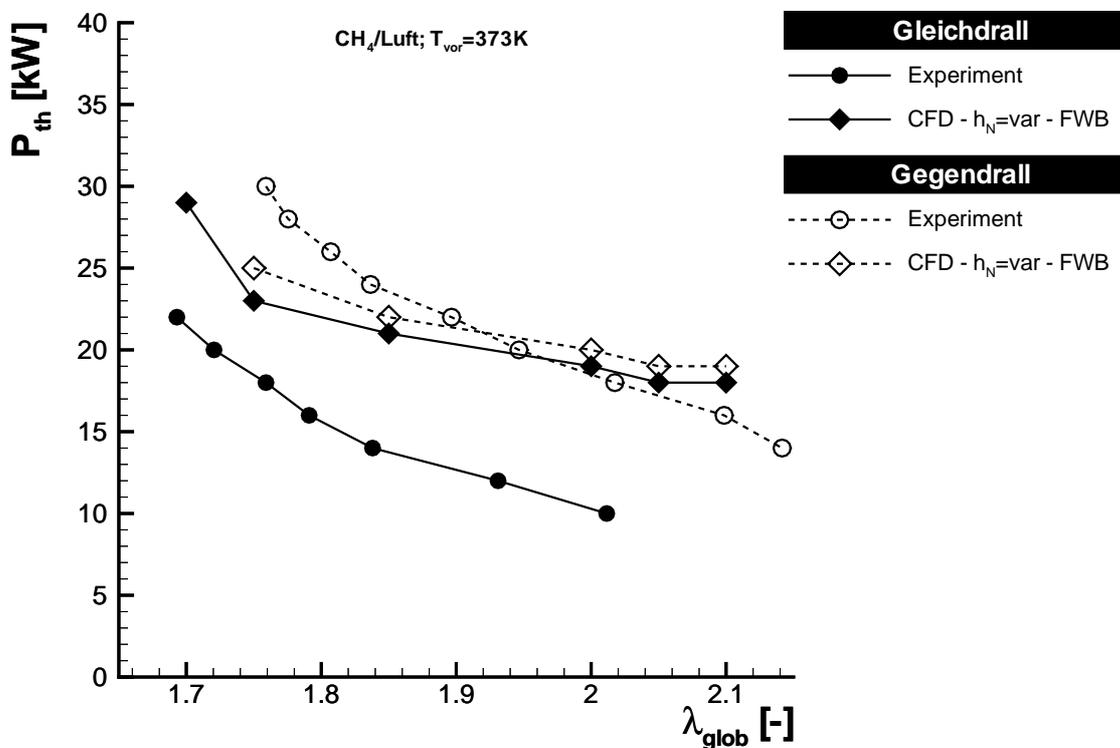


Abbildung 6.32: Stabilitätsdiagramm der Gleich- und Gegendrallkonfiguration

dieser Arbeit sprengen, sodass hier auf die jeweiligen Kapitel verwiesen sei, in denen die Modelle (Kap. 4) und Randbedingungen (Kap. 5) beschrieben sowie die Simulationsergebnisse mit jenen der Experimente verglichen (Kap. 6.1 und 6.4) werden. Andererseits liegt ein Großteil der Abweichungen in der fehlenden Definition eines Stabilitätskriteriums (Kap. 6.5.1) anhand einer messbaren Größe begründet, welche sowohl aus der Simulation als auch dem Experiment zuverlässig abgeleitet werden kann und somit die Vergleichbarkeit von Simulation und Experiment gewährleistet.

### 6.5.3 Mechanismus der Stabilisierung

Nachdem in den beiden vorangehenden Abschnitten zum einen die makroskopische Erscheinungsform der stabilen Flamme mit jenen nahe bzw. jenseits der Stabilitätsgrenze verglichen und zum anderen die resultierenden Einschränkungen des stabilen Betriebsbereichs des Systems anhand von Stabilitätskurven zusammenfassend diskutiert wurden, sollen im Folgenden die Vorgänge und Bedingungen behandelt werden, welche die Stabilität des Systems maßgeblich bestimmen. Wie bereits in Kap. 3.2 dargelegt, müssen, um eine Zündstabilisierung der Flamme zu gewährleisten, in der Stabilisierungszone bestimmte Voraussetzungen erfüllt sein. Dies sind:

- niedrige mittlere Strömungsgeschwindigkeiten, die eine große Verweilzeit der chemischen Reaktionspartner in der Stabilisierungszone bedingen,
- hohe, Mischungsfördernde Turbulenz, die zur lokalen Erhöhung der turbulenten Flammengeschwindigkeit beiträgt,
- ausreichend hohe Temperatur zur Initiierung/Aufrechterhaltung der chemischen Verbrennungsreaktionen und
- nahestöchiometrische Gemischzusammensetzungen, bei welchen maximale Brenngeschwindigkeiten herrschen.

Je nachdem, ob das Erreichen der Stabilitätsgrenze durch Steigerung der thermischen Leistung bei konstanter Globalstöchiometrie oder aber der Einfluss von gleich- bzw. gegensinniger Verdrallung auf die Stabilität des Systems untersucht werden soll, müssen diese Voraussetzungen entsprechend ihrer Beeinflussung durch den jeweiligen Vorgang separat diskutiert werden.

#### Steigerung der thermischen Leistung bei konstanter Globalstöchiometrie

Der Einfluss, welchen eine Steigerung der thermischen Leistung bei konstanter globaler Luftzahl auf die makroskopische Erscheinungsform einer Flamme ausübt, wurde bereits in Kap. 6.5.1 am Beispiel der Gleichdrallflamme dargelegt. So zeichnet sich bei erneuter Betrachtung von Abb. 6.29 eine sukzessive weiter in die Brennkammer eindringende Flamme ab, deutlich zu erkennen in den Verteilungen von Temperatur, Ausbrandgrad und Reaktionsrate.

Steigende thermische Leistung bei konstanter Globalstöchiometrie bedeutet eine Zunahme der Massenströme von Brennstoff und Verbrennungsluft unter Beibehaltung ihres Verhältnisses. Mit zunehmenden Massenströmen steigen die mittleren Geschwindigkeiten, dennoch bleibt das mittlere Strömungsfeld selbstähnlich, die Drallzahl konstant. Demgegenüber nehmen auf Grund der höheren mittleren Geschwindigkeiten die

Geschwindigkeitsgradienten zu:  $u_t \propto \bar{u}$  und führen zu einer Abnahme des turbulenten Mischungszeitmaßes  $\tau_t \propto k/\varepsilon \propto l_t/u_t$ , da in erster Näherung  $l_t$  als konstant angenommen werden kann. Mit abnehmendem Mischungszeitmaß, welches implizit z.B. über die skalare Dissipationsrate  $\chi_\phi \propto \varepsilon/k \propto \tau_t^{-1}$  in die Transportgleichungen der Reaktionsfortschrittsvariablen eingeht, steigt die Reaktionsrate, sodass ihre Verteilung mit zunehmender thermischer Leistung deutlich steigende Werte entlang der Kontur der Flamme aufweist und die Flamme somit einerseits tiefer in die Brennkammer eindringt, sich andererseits über ein größeres Volumen erstreckt. Im Gegensatz zu den Experimenten, in welchen diese Stromabverlagerung der Reaktionszone auch hervortrat, kommt es in der Simulation nicht zu einer Verkleinerung, sondern zu einer Ausdehnung der Zonen maximaler Temperaturen ( $10 \text{ kW} \leq P_{th} \leq 23 \text{ kW}$ ). Mit Überschreiten der Stabilitätsgrenze ( $P_{th} = 25 \text{ kW}$ ) nimmt diese Ausdehnung wieder ab.

Einem tieferen Eindringen von Brennstoff und Verbrennungsluft in die Brennkammer auf Grund des durch höhere Geschwindigkeiten verstärkten konvektiven Transports, steht eine mit zunehmender thermischer Leistung verstärkte turbulente Mischung gegenüber. In den Experimenten überwiegt die Verstärkung des turbulenten jene des konvektiven Transports, sodass mit steigender thermischer Leistung eine Beschleunigung der Makromischung zu verzeichnen ist. Die Simulationen, die, wie in Kap. 6.4.2 gezeigt wurde, tendenziell die turbulente Mischung unterschätzen, vermögen diesen experimentellen Befund nicht wiederzugeben. Hier hält die Verstärkung des turbulenten jener des konvektiven Transports die Waage, mit der Folge, dass in der Simulation kein systematischer Einfluss des Durchsatzes auf das reagierende Strömungsfeld zu beobachten ist.

Ein wesentlicher Einfluss auf die Stabilität resultiert aus der mit zunehmendem Durchsatz abnehmenden mittleren Verweilzeit der Reaktionspartner innerhalb der Stabilisierungszone der Flamme. Zur Veranschaulichung sind in Abb. 6.33 die Verteilungen der lokalen, mittleren Aufenthaltszeit des Fluids (s. Kap. 4.1.4) für die Gleichdrallflamme bei  $\lambda_{glob} = 1,75$  und verschiedenen thermischen Leistungen dargestellt sowie die Kontur der inneren Rezirkulationszone anhand der Isolinie  $\Psi = 0$  der normierten Stromfunktion analog zu Abb. 6.20 als Orientierungshilfe. Demnach nimmt mit steigender thermischer Leistung die lokale, mittlere Aufenthaltszeit des Fluids im gesamten Strömungsfeld und damit auch in der Stabilisierungszone der Flamme ab. Die Verwendung der lokalen, mittleren Aufenthaltszeit des Fluids zur Abschätzung dessen Verweilzeit in der Stabilisierungszone der Flamme bedingt eine Normierung der lokalen, mittleren Aufenthaltszeit mit ihrem Wert bei Eintritt in die Stabilisierungszone. Dies setzt voraus, dass die Lage der Stabilisierungszone in der jeweiligen Flamme bekannt ist oder abgeschätzt werden kann. Um mit einer solchen Abschätzung einhergehende Fehler zu vermeiden, wird im Folgenden auf eine Betrachtung der lokalen, mittleren Aufenthaltszeit verzichtet; stattdessen die lokale Verweilzeit in der Stabilisierungszone durch Bereiche im Strömungsfeld nahe der Kontur der inneren Rezirkulationszone charakterisiert, in welchen die lokale, mittlere Axialgeschwindigkeit betragsmäßig den Wert  $|\bar{u}| = 4 \text{ m/s}$  nicht überschreitet.

Eine anschauliche Darstellung zur Diskussion des Stabilisierungsmechanismus resultiert aus der graphischen Überlagerung derjenigen Zonen im Strömungsfeld, in denen für eine Stabilisierung besonders günstige Bedingungen herrschen. In Abb. 6.34 ist dies für jeweils einen Betriebspunkt weit innerhalb des stabilen Betriebsbereichs sowie einen weiteren nahe der jeweiligen Stabilitätsgrenze der beiden Düsenkonfigurationen

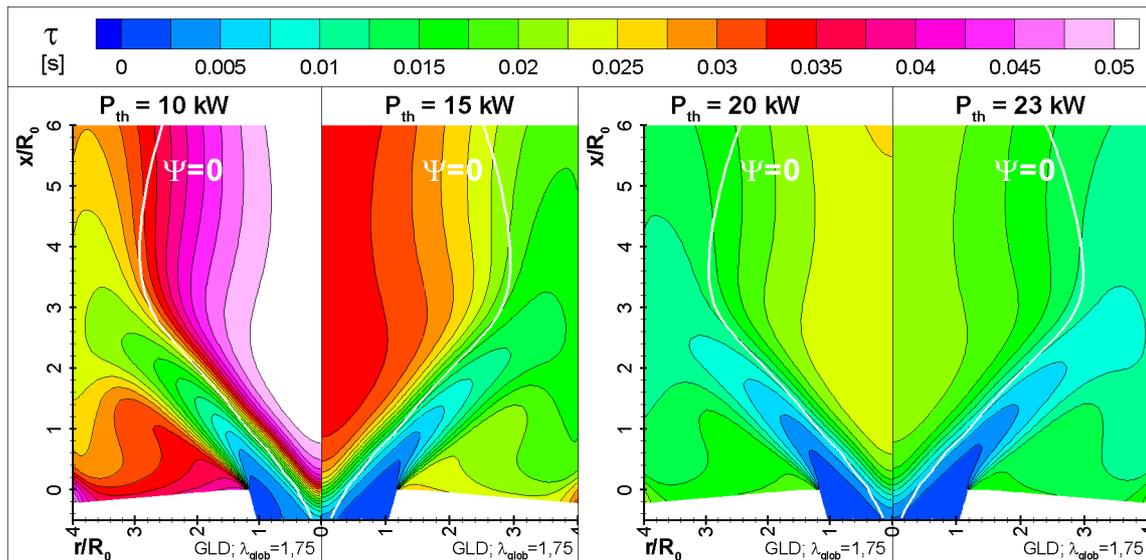


Abbildung 6.33: Lokale mittlere Aufenthaltszeit für Gleichdrallflammen bei Annäherung an die Stabilitätsgrenze

realisiert. Den Stabilitätsgrenzen der Simulation entsprechend sind dies im Falle des Gleichdralls die thermischen Leistungen  $P_{th} = 20 \text{ kW}$  bzw.  $P_{th} = 23 \text{ kW}$ ; bei der Gegendrallkonfiguration  $P_{th} = 20 \text{ kW}$  bzw.  $P_{th} = 25 \text{ kW}$ . Stellvertretend für eine Betrachtung der mittleren Verweilzeit in der Stabilisierungszone wird das oben beschriebene Kriterium moderater mittlerer Axialgeschwindigkeiten  $|\bar{u}| \leq 4 \text{ m/s}$  verwendet. Als weitere Anforderungen an die Stabilisierungszone wurden zum einen lokal nahestöchiometrische Gemischzusammensetzungen, repräsentiert durch einen lokalen Mischungsbruch  $\bar{f} \leq 0,046$  ( $\lambda \leq 1,2$ ), gewählt, zum anderen Bereiche hinreichend geringer Zeitmaße der Wärmefreisetzung mit Verbrennungstemperaturen  $T \geq 1500 \text{ K}$ . Nur in der grau hinterlegten Schnittmenge der drei genannten Kriterien existieren optimale Zündbedingungen, sodass dort die Stabilisierungszone der Flamme lokalisiert ist.

Die Erhöhung der thermischen Leistung äußert sich bei Betrachtung der Darstellungen für beide Düsenkonfigurationen in einem Anstieg der mittleren Axialgeschwindigkeit, sodass sich der Bereich moderater mittlerer Axialgeschwindigkeiten jeweils verengt und folglich die Stabilisierungszone schrumpft. Mit kleiner werdender Stabilisierungszone sinkt die Verweilzeit der Reaktionspartner in dieser. Erreicht diese strömungsmechanisch bestimmte Verweilzeit die Größenordnung des Zeitmaßes der Wärmefreisetzung, treten zunehmend Einflüsse endlich schneller Chemie in den Vordergrund. Hierdurch wird der Ausbrand nachweislich (s. Abb. 6.29) verzögert. Die Reaktionszone verlagert sich stromab bis sie bei Erreichen der Stabilitätsgrenze an der Brennkammerwand auftrifft, aufplatzt und sich in zwei Äste aufteilt.

### Stabilität der Gleich- und Gegendrallkonfiguration

Die in Kap. 6.5.2 dargelegte Gegenüberstellung der aus den Simulationsergebnissen abgeleiteten Stabilitätskurven der Gleich- und Gegendrallflamme weist eine Erweiterung des Betriebsbereichs des Systems bei Anwendung der gegensinnigen Verdrallung auf und liefert damit die Motivation für die Untersuchung der unterschiedlichen Sta-

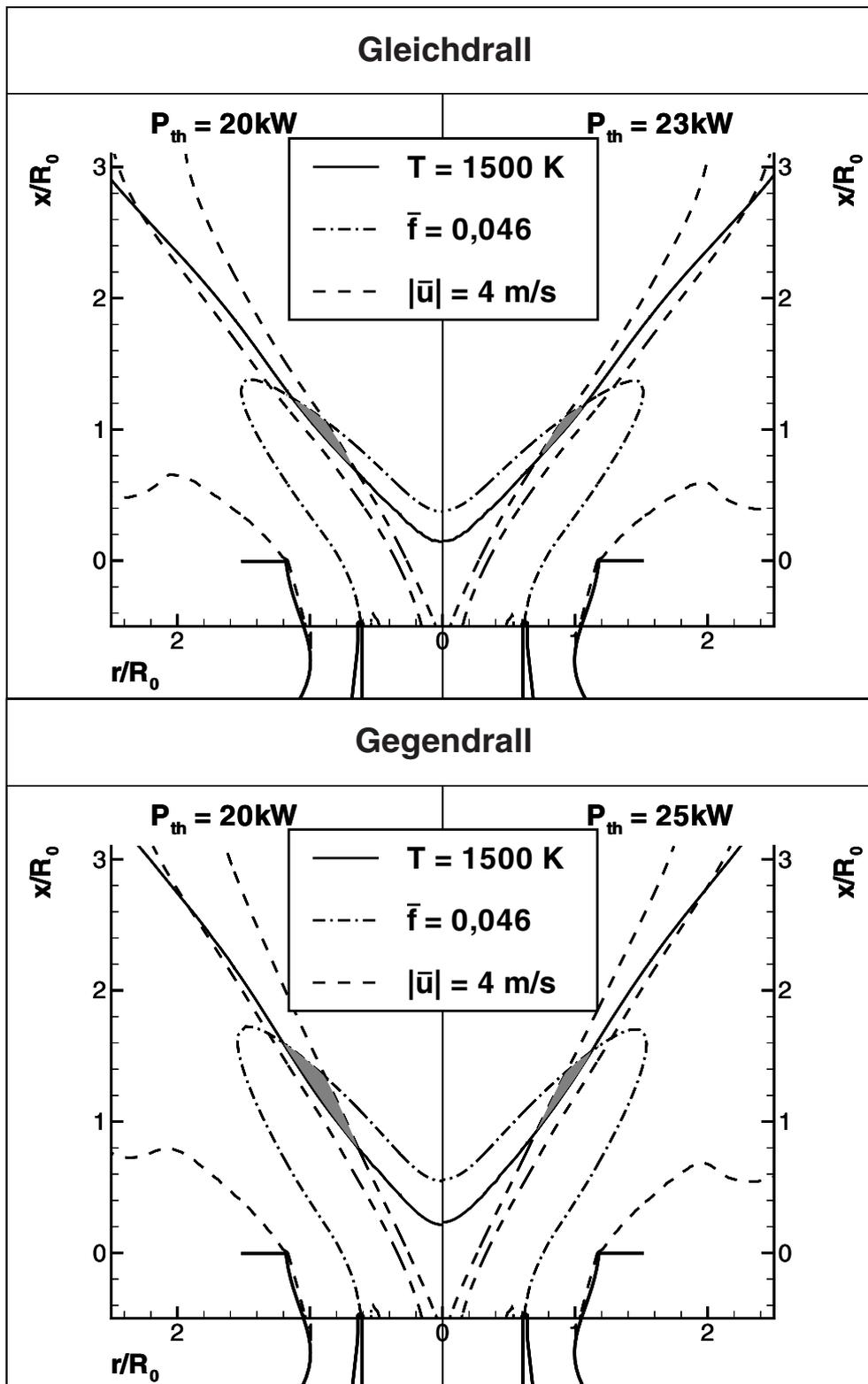


Abbildung 6.34: Stabilisierungszonen der Gleich- und Gegendrallflamme

bilisierungseigenschaften der beiden Düsenkonfigurationen. Bereits die Diskussion der Charakteristika der reagierenden Drallströmung am Beispiel der Gleich- und Gegendrallflamme bei  $\lambda_{glob} = 1,75$  und  $P_{th} = 15 \text{ kW}$  (s. Kap. 6.4) ergab einige wesentliche Unterschiede zwischen den beiden Konfigurationen, die sich aber alle auf deren unterschiedliches Mischungsverhalten zurückführen ließen. Dieses unterschiedliche Mischungsverhalten, das in den experimentellen Untersuchungen im Rahmen der Arbeit von MERKLE [123] auf Unterschiede im Turbulenzfeld der beiden Konfigurationen zurückgeführt wurde, tritt in den Simulationen weniger hervor, ist aber dennoch vorhanden und lässt sich anhand der Unterschiede im konvektiven Transport der reagierenden Gleich- und Gegendrallströmung erklären (s. Kap. 6.4.3).

Der Vergleich der Teilbilder der Gleich- und Gegendrallflamme bei  $P_{th} = 20 \text{ kW}$  in Abb. 6.34 liefert schließlich den fehlenden Baustein zur Klärung der Erweiterung des Betriebsbereiches der Gegendrallflamme. Hinsichtlich der Kriterien “moderate mittlere Axialgeschwindigkeiten” sowie “ausreichend hohe Temperaturen” sind darin zwar nur marginale Unterschiede zu verzeichnen, doch weist die Gegendrallflamme eine deutlich größere Erstreckung des Gebietes nahestöchiometrischer Zusammensetzungen auf. Hieraus resultiert, im Vergleich zum Gleichdrall, eine wesentlich größere Zone optimaler Zündbedingungen (grau hinterlegte Bereiche), d.h. eine größere Stabilisierungszone.

Die Tatsache, dass die Gegendrallflamme ihre Stabilitätsgrenze erst bei höheren thermischen Leistungen erreicht, leitet sich aus diesen Zusammenhängen direkt ab. Die größere Zone nahestöchiometrischer Zusammensetzungen bedeutet, da bei diesen Bedingungen maximale Flammengeschwindigkeiten zu erwarten sind, gleichermaßen eine größere Zone minimaler Zeitmaße der Wärmefreisetzung. Folglich ist die Gegendrallflamme weniger anfällig gegen strömungsmechanisch bedingt sinkende Verweilzeiten des Fluids sowie gegen eine Verlagerung der Reaktionszone und besitzt damit gegenüber der Gleichdrallflamme einen stabileren Charakter.



# Kapitel 7

## Zusammenfassung

Thema der vorliegenden Arbeit ist die numerische Untersuchung der Stabilität nicht-vorgemischter, doppelt-verdrallter Flammen. Dieser Flammentyp zeichnet sich vor allem durch die Ausbildung einer drall-induzierten inneren Rezirkulationszone aus, die auf Grund niedriger mittlerer Strömungsgeschwindigkeiten entlang ihres äußeren Randes, turbulenz-bedingter Steigerung der Wärmefreisetzungsrate in Brenneraustrittsnähe und der Rückführung heißer Abgase zur Flammenwurzel eine brennernahe Stabilisierung der Flamme sogar bei mittleren Brenneraustrittsgeschwindigkeiten, die um ein vielfaches über der turbulenten Brenngeschwindigkeit liegen, ermöglicht. Neben der Stärke der Verdrallung, erweist sich - bei Aufteilung der Verbrennungsluft in zwei separate Teilströme - der Drehsinn dieser Teilluftströme als wesentlicher Freiheitsgrad zur Beeinflussung der Zündstabilität des Verbrennungssystems und damit dessen Betriebsbereichs. Wegen der Komplexität sowie der wechselseitigen Beeinflussung der physikalischen und chemischen Prozesse, die speziell nahe der Stabilitätsgrenze nicht-vorgemischter, doppelt-verdrallter Flammen zum Tragen kommen, können mittels klassischer Stabilitätsmodelle, die meist integralen Charakter besitzen, keine quantitativen Aussagen zur Stabilität des jeweiligen Systems getroffen werden. Gegenüber aufwändigen experimentellen Untersuchungen, welche in der Vergangenheit die einzige Quelle für detaillierte Daten darstellten, bieten numerische Methoden zudem den Vorteil, durch gezielte Variation von Parametern die Sensitivität des Systems bezüglich einzelner Teilprozesse zu ermitteln, worin sich die Motivation der vorliegenden Arbeit widerspiegelt.

### Modellsystem der numerischen Untersuchungen

Das Modellsystem der numerischen Untersuchungen bildet eine Doppeldrall-Gasfilmdüse, die sowohl die gleich- als auch die gegensinnige Verdrallung ihrer beiden Teilluftströme ermöglicht und in eine zylindrische Brennkammer integriert ist. Ihre Konstruktion ist an diejenige der in Fluggasturbinen eingesetzten, mit Kerosin betriebenen, Airblast-Zerstäuber-Düsen angelehnt. Um die aerodynamischen und thermodynamischen Einflüsse auf das Stabilisierungsverhalten dieses Verbrennungssystems isoliert von den komplexen Prozessen der Zerstäubung und Verdampfung im Falle flüssigen Brennstoffs untersuchen zu können, wird das untersuchte System mit gasförmigem Brennstoff betrieben. Aus früheren Arbeiten am Engler-Bunte-Institut existieren zu diesem System detaillierte experimentelle Daten sowohl der Isothermen als auch der reagierenden Strömung bei verschiedenen Betriebsbedingungen, auf welche zur Vali-

dierung des numerischen Modells und der Diskussion der Ergebnisse dieser Arbeit zurückgegriffen wird.

### Numerisches Modell

Die Kenntnis der Charakteristika und der experimentellen Ergebnisse des untersuchten Systems ermöglicht es, die wesentlichen Anforderungen an die numerische Simulation abzuleiten. Im Einzelnen sind dies die:

- zuverlässige Berechnung des 3-dimensionalen, turbulenten Strömungsfeldes.
- Bestimmung des Mischungsfeldes in der turbulenten Strömung.
- Beschreibung der Wärmefreisetzung, d.h. der Interaktion von turbulentem Strömungs-/Mischungsfeld und der Verbrennungs-Chemie.
- Erfassung der Wärmeabgabe durch Konvektion, Konduktion und Strahlung.

Die Berechnung des 3-dimensionalen, turbulenten Strömungs- und Mischungsfeldes sowie die Erfassung der Wärmeabgabe durch Konvektion, Konduktion und Strahlung erfolgt mit Hilfe kommerzieller CFD-Codes und entsprechender Randbedingungen.

Besondere Aufmerksamkeit ist der Beschreibung der Turbulenz/Chemie-Interaktion gewidmet. Um die vielfältigen turbulenten Reaktionsstrukturen erfassen, d.h. die Zeit- bzw. Längenmaße der Wärmefreisetzung und der turbulenten Strömung miteinander in Bezug setzen zu können, wird ein Verbundwahrscheinlichkeitsdichtemodell (JPDF-Reaktionsmodell) verwendet. Ausgehend von einem am Engler-Bunte-Institut existierenden JPDF-Reaktionsmodell für adiabate Bedingungen, stellt die Entwicklung des "nicht-adiabaten JPDF-Reaktionsmodells" einen wesentlichen Teil der vorliegenden Arbeit dar und ist durch das Ziel motiviert, die Rückwirkung lokaler Wärmeverluste auf die chemischen Reaktionen zu berücksichtigen. Das nicht-adiabate JPDF-Reaktionsmodell basiert auf der Annahme der Form der Verteilungsdichtefunktionen und drei stochastischen Variablen zur Beschreibung des Mischungszustandes, des Reaktionsfortschritts und der Abweichung von adiabaten Bedingungen. Somit ermöglicht es die Erfassung von:

- nicht-vorgemischter, teilweise vorgemischter und vorgemischter Verbrennung,
- lokalen Wärmeverlusten sowie deren Auswirkungen auf die chemischen Reaktionen und
- Effekten endlich schneller Chemie durch Auflösen des Reaktionsverlaufes,

erfordert aber eine chemische Reaktionskinetik auf Basis einer einzigen Reaktionsfortschrittsvariablen. Dieser Forderung wird durch die Anwendung der sog. "2-Bereich-1-Schritt Kinetik" nachgekommen. Sie unterteilt den Verbrennungsverlauf in zwei Bereiche und bildet die chemischen Reaktionen eines jeden Bereichs mittels einer 1-Schritt Kinetik ab, wodurch im Gegensatz zu 1-Schritt Globalkinetiken auch die Konzentrationen stabiler Zwischenprodukte wie CO und H<sub>2</sub> zugänglich sind.

## **Isothermes Strömungs- und Mischungsfeld**

Schon für die isotherme Strömung zeigen die Ergebnisse der numerischen Simulationen einen erheblichen Einfluss der Drehrichtung der beiden Düseinteilluftströme auf das Strömungs- und Mischungsfeld des untersuchten Systems auf. Aus der wechselseitigen Kompensation bei der additiven Überlagerung der gegensinnig orientierten Drehimpulsströme des Primär- und Sekundärluftstroms resultiert eine geringere Gesamtdrallzahl, demzufolge ein geringerer axialer Druckgradient und schließlich eine Rezirkulationszone geringerer Intensität. Dieser Sachverhalt spiegelt sich im kleineren rezirkulierten Massenstrom sowie der geringeren Strahlaufweitung im Falle der Gegendrallkonfiguration wieder.

Die Berechnung der turbulenten Mischungsfelder erweist sich als besonders problematisch. Zwar kann die im Experiment beobachtete Charakteristik, einer sich tiefer in die Brennkammer hinein erstreckenden Zone nahestöchiometrischer Zusammensetzungen im Falle der Gegendrallkonfiguration wiedergegeben werden, dennoch vermag es die Simulation nicht, die für beide Konfigurationen aus den experimentellen Daten hervorgehende Ausdehnung dieser Zonen bis auf die Brennkammerachse hin zu reproduzieren. Eingehende numerische Studien zur Sensitivität des berechneten Mischungsfeldes bezüglich Randbedingungen, Rechengitter und numerischer Methode erbringen keine konkrete Lösung dieses Problems. Selbst mit der numerisch aufwändigen LES-Methode kann keine wesentlich bessere Vorhersage der experimentell bestimmten Mischungsfelder erzielt werden. Die Änderung der Brennstoffeinlassgeometrie ermöglicht schließlich eine von Durchsatz und Drehrichtung unabhängige, den experimentellen Ergebnissen getreue Wiedergabe des Mischungsfeldes im Hinblick auf dessen Bedeutung für die Simulation der reagierenden Strömung.

## **Berücksichtigung lokaler Wärmeverluste**

Um den Einfluss lokaler Wärmeverluste auf die Verbrennungschemie und damit auf Strömungs-, Mischungs- und Temperaturfeld des Systems zu veranschaulichen, werden verschiedene Varianten der Behandlung lokaler Wärmeverluste untersucht. Im Vergleich zu Simulationsergebnissen unter adiabaten Bedingungen ergibt die Vorgabe großer Wärmeverluste bei Vernachlässigung derer Einflüsse auf die chemische Reaktionskinetik zwar eine Absenkung des Temperaturniveaus in der Brennkammer, aber kaum Unterschiede in der Verteilung der Umsatzrate der chemischen Reaktionen. Die künstliche Vorgabe eines feldkonstanten, globalen Wärmeverlustes und die Erfassung seiner Rückwirkung auf die chemische Reaktionskinetik mittels des eingeführten Enthalpie-Index, zeigt seinen erheblichen Einfluss auf die Verbrennung im untersuchten System auf. Erst eine Betrachtung der Feldverteilung des Enthalpie-Index ermöglicht die Berücksichtigung des Einflusses von Wärmeverlusten durch Konduktion, Konvektion und Strahlung auf den feldlokalen Energieinhalt und damit auf die Verbrennungschemie. Die entsprechenden Simulationsergebnisse bestätigen die Annahme, dass der Einfluss lokaler Wärmeverluste nicht zu vernachlässigen ist, und begründen damit die Anwendung des nicht-adiabaten JPFD-Reaktionsmodells.

## Reagierende Drallströmung

Die der Strömung überlagerte Verbrennung führt durch die thermische Expansion des Fluids in einem einseitig offenem System zu einer Beschleunigung der Strömung in axialer Richtung. Da somit der Axialimpulsstrom im Gegensatz zum Drehimpulsstrom steigt, resultiert im Falle der reagierenden Drallströmung gegenüber der isothermen Strömung eine geringere Drallzahl, die sich in einer kleineren axialen sowie radialen Ausdehnung der Rezirkulationszone und einem geringeren, in dieser umlaufenden Massenstrom äußert. Aus dem durch die wechselseitige Kompensation der gegensinnig orientierten Drehimpulsströme verstärkten Abklingen des Maximums im Tangentialgeschwindigkeitsprofil resultiert im Falle der Gegendrallströmung für kleine axiale Düsenabstände zunächst ein größerer axialer Druckgradient und - daran gekoppelt - dem Betrag nach höhere Rückströmgeschwindigkeiten auf der Symmetrieachse als für den Gleichdrall. Mit zunehmendem Düsenabstand nimmt jedoch die Steigung des axialen Axialdruckverlaufs im Falle des Gegendralls stärker ab als beim Gleichdrall, sodass die Gegendrallflamme entsprechend ihrer betragsmäßig geringeren Gesamtdrallzahl für größere Düsenabstände dem Betrag nach kleinere axiale Rückströmgeschwindigkeiten aufweist.

Im Vergleich mit entsprechenden isothermen Ergebnissen ergeben sich für die turbulente kinetische Energie im Falle der reagierenden Strömung deutlich höhere Werte, womit die Erwartung bestätigt ist, dass durch lokale Temperaturerhöhung bedingte, lokal größere Geschwindigkeitsgradienten eine Verstärkung der Turbulenz verursachen. Unterschiede in der turbulenten kinetischen Energie zwischen Experiment und Simulation können im Rahmen dieser Arbeit nicht vollständig erklärt werden. Einerseits mögen diese Unterschiede auf eine Unterschätzung der Turbulenzgrößen in der stationären CFD-Simulation beruhen, andererseits ist nicht endgültig geklärt, inwiefern die experimentell ermittelten Turbulenzgrößen durch periodische instationäre Phänomene beeinflusst sind; neuere Untersuchungen am Engler-Bunte-Institut / Bereich Verbrennungstechnik belegen die Existenz periodischer hochfrequenter Strukturen, die hauptsächlich den Düsenbereich beeinflussen und die Struktur eines PVC besitzen. Das im Experiment beobachtete, im Vergleich zum Gegendrall mit zunehmendem Düsenabstand langsamere Abklingen der turbulenten kinetischen Energie kann durch eine ebenfalls experimentell bestimmte, instabilere radiale Strömungsschichtung in der Gleichdrallflamme mit Hilfe des Rayleigh-Kriteriums erklärt werden. Die damit einhergehenden unterschiedlichen Tangentialgeschwindigkeitsverteilungen in Gleich- und Gegendrallflamme bedingen eine unterschiedliche Beeinflussung der Anisotropie der turbulenten Austauschgrößen. Da Effekte der Anisotropie turbulenter Austauschgrößen bei Anwendung der Boussinesq-Hypothese vernachlässigt werden (es wird eine isotrope Wirbelviskosität vorausgesetzt), zeigen die Simulationsergebnisse nahezu identische Verteilungen der turbulenten kinetischen Energie für Gleich- und Gegendrallflamme.

Demnach kann auch das tiefere Eindringen von Bereichen nahestöchiometrischer Zusammensetzungen im Falle des Gegendralls, das in der Simulation zwar schwächer ausgeprägt als im Experiment, aber dennoch vorhanden ist, nicht anhand der Verteilung der turbulenten kinetischen Energie erklärt werden. Es beruht vielmehr auf konvektionsbedingt unterschiedlichem Ansaugverhalten der Rezirkulationszonen der Gleich- bzw. Gegendrallkonfiguration, insofern die innere Rezirkulationszone der Gleichdrallflamme, integral betrachtet, mehr Luft ansaugt und damit brennstoffärmer als diejeni-

ge der Gegendrallflamme ist.

Entsprechend der größeren Ausdehnung nahestöchiometrischer Zusammensetzungen, bei welchen maximale Verbrennungstemperaturen zu erwarten sind, treten in der Gegendrallflamme höhere Maximaltemperaturen als in der Gleichdrallkonfiguration auf.

### Stabilitätsuntersuchung

Um die (Zünd-)Stabilisierung der Verbrennung durch drallinduzierte Rezirkulation zu gewährleisten, müssen in der Stabilisierungszone folgende Bedingungen herrschen:

- niedrige mittlere Strömungsgeschwindigkeiten,
- hohe, Mischungsfördernde Turbulenz,
- ausreichend hohe Temperaturen und
- nahestöchiometrische Gemischzusammensetzungen.

Während das mittlere Strömungsfeld bei Steigerung der thermischen Leistung, d.h. Erhöhung der Massenströme von Brennstoff und Verbrennungsluft unter Beibehaltung ihres Verhältnisses, selbständig bleibt, steigen die mittleren Geschwindigkeiten wonach die mittlere Verweilzeit der Reaktionspartner innerhalb der Stabilisierungszone sinkt. Erreicht diese strömungsmechanisch bestimmte Verweilzeit die Größenordnung des Zeitmaßes der Wärmefreisetzung, treten zunehmend Einflüsse endlich schneller Chemie in den Vordergrund, wodurch der Ausbrand verzögert wird und sich die Reaktionszone bis zum Erreichen der Stabilitätsgrenze stromab verlagert.

Der direkte Vergleich einer Gleich- mit einer Gegendrallflamme bei gleicher thermischer Leistung zeigt hinsichtlich der zur stabilen Verbrennung notwendigen Voraussetzungen die größten Unterschiede in der Ausdehnung des Bereiches nahestöchiometrischer Gemischzusammensetzungen auf. Da die Gegendrallflamme eine deutlich größere Zone nahestöchiometrischer Zusammensetzungen und damit minimaler Zeitmaße der Wärmefreisetzung als die Gleichdrallflamme aufweist, ist sie weniger anfällig gegen strömungsmechanisch-bedingt sinkende Verweilzeiten der Reaktionspartner sowie gegen eine Verlagerung der Stabilisierungszone, woraus sich direkt der erweiterte Betriebsbereich dieser Düsenkonfiguration ableiten lässt.



---

## Literaturverzeichnis

- [1] Abdel-Gayed, R. G., Al-Khishali, K. J. & Bradley, D. (1984): *Turbulent Burning Velocities and Flame Straining in Explosions*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 391, 393–414.
- [2] Abdel-Gayed, R. G., Bradley, D., Hamid, M. N. & Lawess, M. (1984): *Lewis Number Effects on Turbulent Burning Velocity*. 20th Symposium (International) on Combustion .
- [3] Abdel-Gayed, R. G., Bradley, D. & Lung, F. K.-K. (1989): *Combustion Regimes and the Straining of Turbulent Premixed Flames*. Combustion and Flame 76, 213–218.
- [4] AEA Technology Engineering Software, Ltd., 555 Parkside Drive Unit 4, Waterloo, Ontario N2L 5Z4, Canada (2002): *CFX-TASCflow: Computational Fluid Dynamics Software - Theory Documentation - Version 2.12*.
- [5] AEA Technology Engineering Software, Ltd., 555 Parkside Drive Unit 4, Waterloo, Ontario N2L 5Z4, Canada (2002): *CFX-TASCflow: Computational Fluid Dynamics Software - User Documentation - Version 2.12*.
- [6] Al-Abdeli, Y. M. & Masri, A. R. (2004): *Precession and recirculation in turbulent swirling jets*. Combustion Science and Technology 176, 645–665.
- [7] ANSYS Canada Ltd., 554 Parkside Drive, Waterloo, Ontario, Canada (2005): *ANSYS CFX, Release 10.0: CFX-Pre*.
- [8] ANSYS Canada Ltd., 554 Parkside Drive, Waterloo, Ontario, Canada (2005): *ANSYS CFX, Release 10.0: CFX-Solver Theory*.
- [9] Bafuwa, G. G. & Maccallum, N. R. L. (1973): *Flame Stabilisation in Swirling Jets*. European Symposium on Combustion .
- [10] Batchelor, G. K. (1969): *Computation of the energy spectrum in homogeneous two-dimensional turbulence*. Physics of Fluids 12, 235–239.
- [11] Büchner, H. (2000): *Strömungs- und Verbrennungsinstabilitäten in technischen Verbrennungssystemen*. Habilitation, Universität Karlsruhe, Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik.
- [12] Bechtold, J. K. & Law, C. K. (1994): *The Structure of Premixed Methane-Air Flames with Large Activation Energy*. Combustion and Flame 97, 317–338.

- 
- [13] Beér, J. M., Chigier, N. A., Davies, T. W. & Bassindale, K. (1971): *Laminarisation of turbulent Flames in rotating environment*. Combustion and Flame 16, 39–45.
- [14] Bilger, R. W. (1975): *A Note on Favre Averaging in Variable Density Flows*. Combustion Science and Technology 11.
- [15] Bilger, R. W. (1980): *Turbulent flows with nonpremixed reactants*. In Libby, P. A. & Williams, F. A. (Herausgeber.) *Turbulent Reacting Flows*, Kap. 3, 65–113 (Springer-Verlag, Berlin).
- [16] Bird, R. B., Stewart, W. E. & Lightfoot, E. N. (2002): *Transport Phenomena* (John Wiley Sons, Inc), 2. Auflage.
- [17] Blint, R. (1986): *The Relationship of the Laminar Flame Width to Flame Speed*. Combustion Science and Technology 49, 79–82.
- [18] Borghi, R. (1984): *On the Structure and Morphology of Turbulent Premixed Flames*. In Casci, C. (Herausgeber) *Recent Advances in the Aerospace Sciences* (Plenum Publishing Corporation).
- [19] Borghi, R. (1988): *Turbulent Combustion Modelling*. Progress in Progress in Energy and Combustion Science 14, 245–292.
- [20] Bossel, H. H. (1968): *Stagnation Criterion for Vortex Flows*. AIAA Journal 6, 1192–1193.
- [21] Boussinesq, J. (1877): *Théorie de l'écoulement tourbillant*. Mém. Prés. Acad. Sci. 22, 46.
- [22] Bradshaw, P. (1971): *An Introduction to Turbulence and its Measurements* (Pergamon Press).
- [23] Bradshaw, P. (1973): *Effects of Streamline Curvature on Turbulent Flow*. Technischer Bericht AGARD-AG-169, NATO - Advisory Group for Aerospace Research and Development (AGARDograph).
- [24] Bray, K. N. C. (1980): *Turbulent flows with Premixed Reactants*. In Libby, P. & Williams, F. (Herausgeber.) *Turbulent Reacting Flows*, Kap. 4, 115–183 (Springer-Verlag, Berlin).
- [25] Bray, K. N. C. & Peters, N. (1994): *Laminar Flamelets in turbulent Flames*. In Libby, P. & Williams, F. (Herausgeber.) *Turbulent Reacting Flows*, 63–113 (Academic Press, London).
- [26] Brunn, O., Wetzel, F., Habisreuther, P. & Zarzalis, N. (2006): *Investigation of a Combustor using a presumed JPDF Reaction Model applying Radiative Heat Loss by the Monte Carlo Method*. Proceedings of the 25th International Congress of the Aeronautical Sciences .

- [27] Brutscher, T. (2003): *Experimentelle und theoretische Untersuchungen zur Entflammung und Flammenausbreitung bei funkengezündeten Brenngas-Luft-Gemischen unter besonderer Berücksichtigung bevorzugter Diffusion*. Dissertation, Universität Karlsruhe.
- [28] Buckmaster, J. (1996): *Edge-flames and their stability*. Combustion Science and Technology 115, 41–48.
- [29] Bui-Pham, M., Seshadri, K. & Williams, F. A. (1992): *The asymptotic Structure of Premixed Methane-Air Flames with Slow CO Oxidation*. Combustion and Flame 89, 343–362.
- [30] Burgers, J. M. (1948): *A Mathematical Model Illustrating the Theory of Turbulence*. Advances in Applied Mechanics 1, 171–196.
- [31] Burke, S. P. & Schumann, T. E. W. (1928): *Diffusion Flames*. 1st Symposium (International) on Combustion (The Combustion Institute).
- [32] Candel, S. & Poinso, T. (1990): *Flame Stretch and the Balance Equation for the Flame Area*. Combustion Science and Technology 70, 1–15.
- [33] Canuto, V. M. (1997): *Sub-Grid Scale Modeling: Correct Models and Others*. The Astrophysical Journal 478, 322 – 325.
- [34] Cassidy, J. J. & Falvey, H. T. (1970): *Observations of unsteady flow arising after vortex breakdown*. Journal of Fluid Mechanics 41, 727–736.
- [35] Chen, Y., J (1988): *A General Procedure for Constructing Reduced Reaction Mechanisms with Given Independent Relations*. Combustion Science and Technology 57, 89–94.
- [36] Cho, P., Law, C. K., Cheng, R. K. & Shepherd, I. G. (1988): *Velocity and Scalar Fields of Turbulent Premixed Flames in Stagnation Flow*. 22nd Symposium (International) on Combustion .
- [37] Clavin, P. (1985): *Dynamic Behaviour of Premixed Flame Fronts in Laminar and Turbulent Flows*. Progress in Energy and Combustion Science 11, 1–59.
- [38] Daly, B. J. & Harlow, F. H. (1970): *Transport Equations in Turbulence*. Physics of Fluids 13, 2634–2649.
- [39] Damköhler, G. (1940): *Der Einfluß der Turbulenz auf die Flammengeschwindigkeit in Gasgemischen*. Zeitschrift für Elektrochemie 46.
- [40] Döbbling, K. (1990): *Experimentelle und theoretische Untersuchungen an stark verdrallten, turbulenten isothermen Strömungen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [41] Delery, J. M. (1994): *Aspects of Vortex Breakdown*. Progress in Aerospace Sciences 30, 1–59.
- [42] Dold, J. W. (1989): *Flame Propagation in a Nonuniform Mixture: Analysis of a Slowly Varying Triple Flame*. Combustion and Flame 76, 71–88.

- [43] Domingo, P. & Vervisch, L. (1996): *Triple Flames and Partially Premixed Combustion in Autoignition of Non-Premixed Turbulent Mixtures*. 26th Symposium (International) on Combustion (The Combustion Institute).
- [44] Dopazo, C. (1994): *Recent developments in pdf methods*. In *Turbulent Reacting Flows*, Kap. 7, 375–474 (Libby, P. A. and Williams, F. A.).
- [45] Emmons, H. W. & Ying, S. J. (1966): *The Fire Whirl*. 11th Symposium (International) on Combustion 475–488.
- [46] Faler, J. H. & Leibovich, S. (1977): *Disrupted states of vortex flow and vortex breakdown*. *The Physics of Fluids* 20, 1385 – 1400.
- [47] Favre, A. J. (1965): *The Equations of Compressible Turbulent Gases*. Contract AF61 (052)-772 AD 622097, USAF.
- [48] Fokaides, P. (2007): *Persönliche Mitteilung*. Universität Karlsruhe (TH) - Engler-Bunte-Institut , Bereich Verbrennungstechnik.
- [49] Gerlinger, W. (2002): *Direkte numerische Simulation der Wechselwirkung von chemischen Reaktionen, Vermischungsvorgängen und Transportprozessen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [50] Ghosal, S. & Vervisch, L. (2000): *Theoretical and Numerical Study of a Symmetrical Triple Flame Using the Parabolic Flame Path Approximation*. *Journal of Fluid Mechanics* 45, 227–260.
- [51] Givi, P. (1989): *Model-free Simulations of Turbulent Reactive Flows*. *Progress in Energy and Combustion Science* 15, 1–107.
- [52] Günther, R. (1974): *Verbrennung und Feuerungen* (Springer-Verlag).
- [53] Greenspan, H. P. (1969): *The Theory of Rotating Fluids* (Cambridge University Press).
- [54] Großschmidt, D., Hoffmann, A. & Bockhorn, H. (2002): *Final JPDF module for the model and validation report*. Deliverable Report 1.19, European Community, Framework 5 Project CFD4C, G4RD-CT-1999-00075.
- [55] Gupta, A. & Lilley, D. (1985): *Flowfield Modeling and Diagnostics* (Abacus Press).
- [56] Gupta, A. K., Lilley, D. G. & Syred, N. (1984): *Swirl Flows*. Energy and Engineering Science Series (Abacus Press).
- [57] Habisreuther, P. (2002): *ADAPTAB: Tabulation of Scalar Variables with Adaptive Grid Generation*. Persönliche Mitteilung. Universität Karlsruhe (TH) - Engler-Bunte-Institut , Bereich Verbrennungstechnik.
- [58] Habisreuther, P. (2002): *Untersuchungen zur Bildung von thermischem Stickoxid in turbulenten Drallflammen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).

- [59] Habisreuther, P., Schmittel, P., Idda, P., Eickhoff, H. & Lenze, B. (1997): *Experimentelle und numerische Untersuchungen an einer eingeschlossenen Drall-Diffusionsflamme*. VDI Berichte 1313, VDI. In Verbrennungen und Feuerungen - 18. Deutsch-Niederländischer Flammentag.
- [60] Haessler, H. (2002): *Einfluss gleich- und gegensinniger Vordrallung auf das isotherme Strömungs- und Mischungsfeld einer zweiflutigen Airblastdüse*. Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (TH), Engler-Bunte-Institut, Lehrstuhl und Bereich Verbrennungstechnik.
- [61] Hall, M. G. (1972): *Vortex Breakdown*. Annual Review of Fluid Mechanics 4, 195 – 217.
- [62] Hanjalic, K. (2005): *Will RANS survive LES? A View of Perspectives*. Journal of Fluids engineering 127, 831–839.
- [63] Harlow, F. H. & Nakayama, P. I. (1967): *Turbulence Transport Equations*. Physics of Fluids 10, 2323–2332.
- [64] Hartick, J. W., Neuber, A. A., Früchtel, G., Hassel, E. P. & Janicka, J. (1995): *Turbulence-radiation interaction in confined combustion systems*. Forschung im Ingenieurwesen 61, 67–73.
- [65] Hartley, L. J. & Dold, J. W. (1991): *Flame propagation in a nonuniform mixture: analysis of a propagating triple flame*. Combustion Science and Technology 80, 23–46.
- [66] Hettel, M., Bockhorn, H., Lenze, B., Zarzalis, N. & Büchner, H. (2002): *Untersuchung von Flammen am EBI - persönliche Mitteilung*.
- [67] Hillemanns, R. (1988): *Das Strömungs- und Reaktionsfeld sowie Stabilisierungseigenschaften von Drallflammen unter dem Einfluss der inneren Rezirkulationszone*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [68] Hinze, J. O. (1975): *Turbulence* (McGraw-Hill), 2. Auflage.
- [69] Hirsch, C. (1995): *Ein Beitrag zur Wechselwirkung von Turbulenz und Drall*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [70] Hoffmann, A. (2002): *PrePDF: A FORTRAN Program for the Generation of Adaptive Chemistry and Pdf Look-Up Tables*. Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik, Universität Karlsruhe (TH).
- [71] Hoffmann, A. (2004): *Modellierung turbulenter Vormischverbrennung*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [72] Hoffmann, A., Großschmidt, D., Hoffmann, A. & Bockhorn, H. (2001): *P/T extension for methane combustion*. Deliverable Report D2.4, European Community, Framework 5 Project CFD4C, G4RD-CT-1999-00075.
- [73] Hoffmann, A. & Leuckel, W. (1998): *Final Report on Theme Advanced CFD Task2: Reduced Reaction Mechanisms*. Technischer Bericht, European Community, Brite-EuRam BRPR CT 95-0122 "Low NO<sub>x</sub> - III".

- [74] Hoffmann, S. (1994): *Untersuchungen des Stabilitätsverhaltens und der Stabilitätsgrenzen von Drallflammen mit innerer Rückströmzone*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [75] Holzäpfel, F. (1996): *Zur Turbulenzstruktur freier und eingeschlossener Drehströmungen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [76] Holzäpfel, F., Lenze, B. & Leuckel, W. (1999): *Quintuple Hot-Wire Measurements of the Turbulence Structure in Confined Swirling Flows*. Journal of Fluids Engineering 121, 517 – 525.
- [77] Hopfinger, E. J., Mory, M. & Gagne, Y. (1984): *Two-Dimensionalisation by Rotational Constraints of Homogeneous 3D Turbulence*. Turbulence and Chaotic Phenomena in Fluids .
- [78] Ibbertson, A. & Tritton, D. J. (1975): *Experiments on turbulence in a rotating fluid*. Journal of Fluid Mechanics 68, 639–672.
- [79] Ishizuka, S. (2002): *Flame propagation along a vortex axis*. Progress in Energy and Combustion Science 28, 477 – 542.
- [80] Jacquin, L., Leuchter, O., Cambon, C. & Mathieu, J. (1990): *Homogeneous turbulence in the presence of rotation*. Journal of Fluid Mechanics 220, 1–52.
- [81] Jones, W. P. (1994): *Turbulence Modelling and Numerical Simulation Methods for Variable Density and Combusting Flows*. In Libby, P. & Williams, F. (Herausgeber.) *Turbulent Reacting Flows*, Kap. 6, 309–374 (Academic Press).
- [82] Jones, W. P. & Launder, B. E. (1972): *The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence*. International Journal of Heat and Mass Transfer 15, 301–314.
- [83] Jones, W. P. & Musonge, P. (1988): *Closure of Reynolds Stress and Scalar Flux Equations*. Physics of Fluids 31, 3589–3604.
- [84] Karlovitz, B., Denniston, D., Knapschaefer, D. & Wells, F. (1953): *Studies on Turbulent Flames: A. Flame Propagation across Velocity Gradients B. Turbulence Measurement in Flames*. 4th Symposium (International) on Combustion .
- [85] Karlovitz, B., Denniston, D. W. & Wells, F. E. (1951): *Investigation of turbulent Flames*. The Journal of Chemical Physics 19, 541–547.
- [86] Keck, O., Meier, W., Stricker, W. & Aigner, M. (2002): *Establishment of a Confined Swirling Natural Gas/Air Flame as a Standard Flame: Temperature and Species Distribution From Laser Raman Measurements*. Combustion Science and Technology 174, 117–151.
- [87] Kee, J. F., Grcar, J. F., Smooke, M. D. & Miller, J. A. (1985): *PREMIX: A FORTRAN Program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames*. Report, Sandia National Laboratories, Livermore, CA.

- [88] Kee, J. F., Rupley, F. M. & Miller, J. A. (1991): *CHEMKIN-II A Fortran Chemical Kinetics Package for the Analysis of Gas-Phase Chemical Kinetics*. Report SAND89-8009B, Sandia National Laboratories, Livermore, CA.
- [89] Kern, M. (2007): *Persönliche Mitteilung*. Universität Karlsruhe (TH) - Engler-Bunte-Institut, Bereich Verbrennungstechnik.
- [90] Kiewewetter, F. (2005): *Modellierung des verbrennungsinduzierten Wirbelaufplatzens in Vormischbrennern*. Dissertation, Technische Universität München.
- [91] Kioni, P. N., Rogg, B., Bray, K. N. C. & Linan, A. (1993): *Flame Spread in Laminar Mixing Layers: The Triple Flame*. Combustion and Flame 95, 276–290.
- [92] Kollmann, W. (1990): *The pdf Approach to Turbulent Flow*. Theoretical and Computational Fluid Dynamics 1, 249–285.
- [93] Kolmogorov, A. N. (1941): *The local Structure of Turbulence in Incompressible Viscous Fluid for Very Large Reynolds' Numbers*. Comptes Rendus (Doklady) de l'Académie des Sciences de l'URSS XXX, 301–304.
- [94] Kolmogorov, A. N. (1942): *Equation of turbulent motion of an incompressible fluid*. Izvestija Akademii Nauk SSSR. Serija fiziéceskaja. 6.
- [95] Launder, B. E., Reece, G. J. & Rodi, W. (1975): *Progress in the Development of a Reynolds-stress Turbulence Closure*. Journal Fluid Mechanics 68, 537 – 566.
- [96] Leibovich, S. (1983): *Vortex Stability and Breakdown: Survey and Extension*. AIAA Journal 22, 1192 – 1206.
- [97] Leisenheimer, B. (1997): *Zum Ausbreitungsverhalten von Deflagrationsfronten in laminaren und turbulenten Brenngas/Luft-Gemischen innerhalb geschlossener Behälter*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [98] Leuckel, W. (1967): *Swirl Intensities, Swirl Types and Energy Loss of different Swirl Generating Devices*. IFRF Document G 02/a/16, International Flame Research Foundation.
- [99] Leuckel, W. (1970): *Meßergebnisse von Drallflammen und zugehörigen Strömungsuntersuchungen*. IFRF Document K20/a/51, International Flame Research Foundation.
- [100] Leuckel, W. (1972): *Einfluß der Verdrallung auf die Eigenschaften turbulenter Diffusionsflammen*. Archiv für das Eisenhüttenwesen 43, 189 – 200.
- [101] Leuckel, W. (1997): *Feuerungstechnik 1*. Vorlesung, Universität Karlsruhe (TH). Engler-Bunte-Institut / Lehrstuhl und Bereich Feuerungstechnik.
- [102] Leuckel, W. & Fricker, N. (1976): *The Characteristics of Swirl-Stabilized Natural Gas Flames Part I: Different Flame Types and their Relation to Flow and Mixing Patterns*. Journal of the Institute of Fuel 103 – 158.

- [103] Leuckel, W. & Zarzalis, N. (2003): *Theorie turbulenter Strömungen ohne und mit überlagerter Verbrennung*. Vorlesung, Universität Karlsruhe (TH). Engler-Bunte-Institut / Lehrstuhl und Bereich Feuerungstechnik.
- [104] Lewis, B. & von Elbe, G. (1951): *Combustion, Flames and Explosions of Gases* (Cambridge, Cambridge), 2.. Auflage.
- [105] Libby, P. A. & Bray, K. N. C. (1981): *Countergradient Diffusion in Premixed Turbulent Flames*. AIAA Journal 19, 205–213.
- [106] Libby, P. A. & Williams, F. A. (1994): *Turbulent Reacting Flows* (Academic Press Ltd.).
- [107] Liu, Y. (1991): *Untersuchungen zur stationären Ausbreitung turbulenter Vormischflammen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [108] Lockwood, F. C. & Naguib, A. S. (1975): *The Prediction of the Fluctuations in the Properties of Free, Round-Jet, Turbulent Diffusion Flames*. Combustion and Flame 24, 109–124.
- [109] Louch, D. S. & Bray, K. N. C. (2001): *Vorticity in Unsteady Premixed Flames: Vortex Pair-Premixed Flame Interactions Under Imposed Body Forces and Various Degrees of Heat Release and Laminar Flame Thickness*. Combustion and Flame 125, 1279–1309.
- [110] Lucca-Negro, O. & O’Doherty, T. (2001): *Vortex Breakdown: a review*. Progress in Energy and Combustion Science 27, 431–481.
- [111] Lugt, H. J. (1983): *Vortex Flow in Nature and Technology* (Wiley, New York).
- [112] Lutz, A. E., Kee, J. & Miller, J. A. (1988): *SENKIN: A Fortran Program for predicting homogeneous Gas Phase Chemical Kinetics with Sensitivity Analysis*. Report SAND87-8248, Sandia National Laboratories, Livermore, CA.
- [113] Maas, U. & Pope, S. B. (1992): *Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space*. Combustion and Flame 88, 239–264.
- [114] Maier, P. (1967): *Untersuchungen turbulenter, isothermer Drallfreistrahlen und turbulenter Drallflammen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [115] Mantel, T. & Samaniego, J. M. (1999): *Fundamental Mechanisms in Premixed Turbulent Flame Propagation via Flame-Vortex Interactions - Part II: Numerical Simulation*. Combustion and Flame 118, 557–582.
- [116] Markstein, G. H. & Polanyi, M. (1947): *Flame propagation: a critical review of existing theories*. Report 61, Cornell Aeronautic Lab.
- [117] Martin, H. *et al.* (2002): *VDI-Wärmeatlas* (Verein Deutscher Ingenieure).
- [118] McEwan, A. D. (1976): *Angular momentum diffusion and the initiation of cyclones*. Nature 260, 126–128.

- [119] Meier, W., Duan, X. R. & Weigand, P. (2004): *Reaction Zone Structures and Mixing Characteristics of Partially Premixed Swirling CH<sub>4</sub>/Air Flames in a Gas Turbine Model Combustor*. 30th Symposium (International) on Combustion Proceedings of the Combustion Institute, 30th.
- [120] Meier, W., Duan, X. R. & Weigand, P. (2006): *Investigations of Swirl Flames in a Gas Turbine Model Combustor II. Turbulence-chemistry Interactions*. Combustion and Flame 144, 225–236.
- [121] Meier, W., Keck, O., Noll, B., Kunz, O. & Stricker, W. (2000): *Investigations in the TECFLAM swirling diffusion flame: Laser Raman measurements and CFD calculations*. Applied Physics B - Laser and Optics 71, 725–731.
- [122] Menter, F. R. & Kuntz, M. (2003): *Development and application of a zonal DES turbulence model for CFX-5*. Technischer Bericht, ANSYS.
- [123] Merkle, K. (2006): *Einfluss gleich- und gegensinniger Drehrichtung der Verbrennungsluftströme auf die Stabilisierung turbulenter Doppeldrall-Diffusionsflammen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [124] Merkle, K., Büchner, K., Zarzalis, N. & Sara, O. N. (2003): *Influence of Co and Counter Swirl on Lean Stability Limits of an Airblast Nozzle*. Proceedings of ASME Turbo Expo 2003 (ASME).
- [125] Merkle, K., Haessler, H., Büchner, H. & Zarzalis, N. (2002): *Effect of Co- and Counter- Swirl on the Isothermal Flow- and Mixture- Field of an Airblast Atomizer Nozzle*. 5th International Symposium on Engineering Turbulence Modelling and Measurement .
- [126] Merkle, K., Haessler, H., Büchner, H. & Zarzalis, N. (2003): *Effect of co- and counter-swirl on the isothermal flow- and mixture-field of an airblast atomizer nozzle*. International Journal of Heat and Fluid Flow 24, 529–537.
- [127] Minx, E. (1969): *Über die Staukörperstabilisierung turbulenter Diffusionsflammen*. Dissertation, Universität Aachen.
- [128] Morgan, G. W. (1951): *A Study of Motions in a Rotating Liquid*. Proceedings of the Royal Society of London A 206, 108–130.
- [129] Muñoz, L. & Mungal, M. G. (1997): *Instantaneous flame-stabilization velocities in lifted-jet diffusion flames*. Combustion and Flame 111, 16–31.
- [130] Mueller, C. J., Driscoll, J. F., Reuss, D. L., Drake, M. C. & Rosalik, M. E. (1998): *Vorticity generation and attenuation as vortices convect through a premixed flame*. Combustion and Flame 112, 342–346.
- [131] Mundus, B. & Kremer, H. (1991): *Untersuchung des Strömungs- und Verbrennungsverlaufs verdrallter Diffusionsflammen in Abhängigkeit von der Art der Drallerzeugung*. Gaswärme International 40, 545–556.
- [132] Nikitin, N. V., Wasistho, B., Squires, K. D. & Spalart, P. R. (2000): *An approach to wall modeling in large-eddy simulations*. Physics of Fluids 12, 1629–1632.

- [133] Noll, B. (1993): *Numerische Strömungsmechanik* (Springer-Verlag).
- [134] O'Brien, E. E. (1980): *The Probability Density Function (PDF) Approach to Reacting Turbulent Flows*. In Libby, P. & Williams, F. (Herausgeber.) *Turbulent Reacting Flows*, Kap. 5, 185–218 (Springer-Verlag, Berlin).
- [135] Patankar, S. V. (1980): *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow* (McGraw-Hill).
- [136] Peters, N. (1986): *Laminar Flamelet Concepts in Turbulent Combustion*. 21st Symposium (International) on Combustion .
- [137] Peters, N. (1991): *Reduced Kinetic Mechanism and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames*. In Berlin/Heidelberg, S. V. (Herausgeber) *Lecture Notes in Physics*, Vol. 384 (Smooke, M.D.).
- [138] Peters, N. (1992): *Fifteen Lectures on Laminar and Turbulent Combustion*. Ercoftac Summer School (Peters, N.).
- [139] Peters, N. (1997): *Four Lectures on Turbulent Combustion*. Ercoftac Summer School (Peters, N.).
- [140] Peters, N. (2000): *Turbulent Combustion* (Cambridge University Press).
- [141] Peters, N. & Kee, R. J. (1987): *The computation of stretched laminar methane-air diffusion flames using a reduced four-step mechanism*. *Combustion and Flame* 68, 17–29.
- [142] Peters, N. & Rogg, B. (1993): *Reduced Kinetic Mechanisms for Applications in Combustion Systems* (Springer-Verlag).
- [143] Peters, N. & Williams, F. A. (1987): *The Asymptotic Structure of Stoichiometric Methane-Air Flames*. *Combustion and Flame* 68, 185–207.
- [144] Philipp, M. (1991): *Experimentelle und theoretische Untersuchungen zum Stabilitätsverhalten von Drallflammen mit zentraler Rückströmzone*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [145] Philipp, M., Hoffmann, S., Habisreuther, P., Lenze, B. & Eickhoff, H. (1992): *Experimental and numerical study concerning stabilisation of strongly swirling premixed and nonpremixed flames*. 24th Symposium (International) on Combustion (The Combustion Institute).
- [146] Phillips, H. (1965): *Flame in a Buoyant Methane Layer*. 10th Symposium (International) on Combustion (The Combustion Institute).
- [147] Poinso, T. & Veynante, D. (2001): *Theoretical and Numerical Combustion* (R.T. Edwards).
- [148] Pope, S. B. (1981): *A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reactive Flow*. *Combustion Science and Technology* 25, 159–174.
- [149] Pope, S. B. (1985): *Pdf methods for turbulent reacting flows*. *Progress in Energy and Combustion Science* 11, 119–192.

- [150] Pope, S. B. (2000): *Turbulent Flows* (Cambridge University Press).
- [151] Prandtl, L. (1925): *Bericht über Untersuchungen zur ausgebildeten Turbulenz*. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik 5, 136–139.
- [152] Prandtl, L. (1945): *Über ein neues Formelsystem für die ausgebildete Turbulenz*. Nachrichten der Akademie der Wissenschaften in Göttingen, Mathematisch-Physikalische Klasse 6–19.
- [153] Proudman, J. (1916): *On the Motion of Solids in a Liquid Possessing Vorticity*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A 92, 408 – 424.
- [154] Rawe, R. (1978): *Über die Drallstabilisierung freibrennender, turbulenter Diffusionsflammen mit zentraler, radialer Gaszufuhr*. Dissertation, Universität Bochum.
- [155] Rayleigh, L. (1916): *On the Dynamics of Revolving Fluids*. Proceedings of the Royal Society 148 – 154.
- [156] Reynolds, O. (1883): *An Experimental Investigation of the Circumstances Which Determine Whether the Motion of Water Shall be Direct Sinuous, and of the Law of Resistance in Parallel Channels*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London 174, 935–982.
- [157] Reynolds, O. (1895): *On the Dynamical Theory of Incompressible Viscous Fluids and the Determination of the Criterion*. Philosophical Transactions of the Royal Society of London. A. 186, 123–164.
- [158] Ribert, G., Champion, M., Gicquel, O., Darabiha, N. & D., V. (2005): *Modeling nonadiabatic turbulent premixed reactive flows including tabulated chemistry*. Combustion and Flame 141, 271–280.
- [159] Rodi, W. (1980): *Turbulence Models and their Applications in Hydraulics*. Delft.
- [160] Rodi, W. (1993): *Turbulence Models and their application in hydraulics - a state of the art review*. 104 (Bakelma, A. A.).
- [161] Rotta, J. C. (1951): *Statistische Theorie nichthomogener Turbulenz*. Zeitschrift für Physik 129, 547–572.
- [162] Rotta, J. C. (1972): *Turbulente Strömungen* (Teubner, Stuttgart).
- [163] Ruetsch, G. R., Vervisch, L. & Linan, A. (1995): *Effects of Heat Release on Triple Flames*. Physics of Fluids 7, 1447–1454.
- [164] Rung, T. (2003): *Statistische Turbulenzmodellierung*. Vorlesung, Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsforschung, Technische Universität Berlin.
- [165] Sarpkaya, T. (1971): *On stationary and traveling vortex breakdowns*. Journal of Fluid Mechanics 45, part 3, 545 – 559.
- [166] Schack, K. (1971): *Zur Berechnung der Strahlung von Wasserdampf und Kohlendioxid*. Chemie Ingenieur Technik 43, 1151–1153.

- [167] Schefer, R. W., Namazian, M., Kelly, J. & Perrin, M. (1996): *Effect of Confinement on Bluff-Body Burner Recirculation Zone Characteristics and Flame Stability*. Combustion Sci. and Tech. Combustion Science and Technology 120, 185 – 211.
- [168] Schiestel, R. & Dejoan, A. (2005): *Towards a New Partially Integrated Transport Model for Coarse Grid and Unsteady Turbulent Flow Simulations*. Theoretical and Computational Fluid Dynamics 18, 443–468.
- [169] Schlichting, H. (1949): *Boundary Layer Theory - Part II - Turbulent Flows*. Technical Memorandum 1217, National Advisory Committee For Aeronautics, Washington. Translation of "Vortragsreihe" W.S. 1941/42, Luftfahrtforschungsanstalt Hermann Göring, Braunschweig.
- [170] Schlichting, H. & Gersten, K. (1997): *Grenzschicht-Theorie* (Springer-Verlag), 9. Auflage.
- [171] Schmid, C. (1991): *Drallbrenner-Simulation durch Starrkörperwirbel-Strömungen unter Einbeziehung von drallfreier Primärluft und Verbrennung*. Dissertation, Universität karlsruhe (TH).
- [172] Schmid, H. P. (1995): *Ein Verbrennungsmodell zur Beschreibung der Wärme-freisetzung von vorgemischten turbulenten Flammen*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [173] Schmid, H. P. (1995): *Korrektur des k-e-Modells für Drallströmungen*. Interner Bericht, Universität Karlsruhe (TH) - Engler-Bunte-Institut - Lehrstuhl für Feuerungstechnik.
- [174] Schmittl, P. (2001): *Untersuchungen zum Stabilisierungsmachanismus von eingeschlossenen turbulenten Flammen mit innerer Rückströmzone*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [175] Scurlock, A. C. & Grover, J. H. (1952): *Propagation of Turbulent Flames*. 4th Symposium (International) on Combustion .
- [176] Seshadri, K. & Peters, N. (1988): *Asymptotic Structure and Extinction of Methane-Air Diffusion Flames*. Combustion and Flame 73, 23–44.
- [177] Seshadri, K. & Peters, N. (1990): *The Inner Structure of Methane-Air Flames*. Combustion and Flame 81, 96–118.
- [178] Shy, S. S., Lin, W. J. & Wei, J. C. (2000): *An Experimental Correlation of Turbulent Burning Velocities for Premixed Turbulent Methane-Air Combustion*. Mathematical, Physical and Engineering Sciences. The Royal Society 456, 1997–2019.
- [179] Sloan, D. G., Smith, P. J. & Smoot, L. D. (1986): *Modelling of Swirl in Turbulent Flow Systems*. Progress in Energy and Combustion Science 12, 163–250.
- [180] Smagorinsky, J. (1963): *General Circulation Experiments with the Primitive Equations*. Monthly Weather Review 91, 99–164.

- [181] Smith, G. *et al.* (2000): *GRI-Mech 3.0* (Berkeley University).
- [182] Smooke, M. D. *et al.* (1991): *Reduced Kinetic Mechanisms and Asymptotic Approximations for Methane-Air Flames* (Springer-Verlag).
- [183] Sánchez, A. L., Lépinette, A., Bollig, M., Linan, A. & Lázaro, B. (2000): *The Reduced Kinetic Description of Lean Premixed Combustion*. *Combustion and Flame* 123, 436–464.
- [184] Snegirev, A. (2003): *Monte-Carlo Modelling of Radiative Heat Transfer in Unconfined Buoyant Turbulent Diffusion Flames*. *Proceedings of Computational Thermal Radiation in Participating Media II* 259–270.
- [185] Spalding, D. B. (1953): *Theoretical Aspects of Flame Stabilisation*. *Aircraft Engineering* 25, 264.
- [186] Stapf, D. (1998): *Experimentell basierte Weiterentwicklung von Berechnungsmodellen der NO<sub>x</sub>-Emission technischer Verbrennungssysteme*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [187] Strelets, M. (2001): *Detached Eddy Simulation of Massively Separated Flows*. AIAA Paper 2001-0879, American Institute of Aeronautics and Astronautics. 39th AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit.
- [188] Swithenbank, J., Poll, I., Vincent, M. W. & Wright, D. D. (1972): *Combustion Design Fundamentals*. 14th Symposium (International) on Combustion (The Combustion Institute).
- [189] Syred, N. (2006): *A Review of Oscillation Mechanismus and the Role of the Precessing Vortex Core (PVC) in Swirl Combustion Systems*. *Progress in Energy and Combustion Science* 32, 93–161.
- [190] Syred, N. & Beer, J. M. (1973): *Vortex Breakdown and Flow Stabilization in Swirl Combustors*. *Combustion Institute - European Symposium* .
- [191] Syred, N. & Beer, J. M. (1974): *Combustion in Swirling Flows: A Review*. *Combustion and Flame* 23, 143 – 201.
- [192] Syred, N. & Beér, J. M. (1973): *Effect of combustion upon precessing vortex cores generated by swirl combustors*. 14th Symposium (International) on Combustion .
- [193] Syred, N., Fick, W., O’Doherty, T. & Griffiths, A. J. (1996): *The effect of the precessing vortex core on combustion in a swirl burner*. *Combustion Science and Technology* 125, 139–157.
- [194] Syred, N., O’Doherty, T. & Froud, A. (1994): *The interaction of the precessing vortex core and the reverse flow zone in the exhaust of a swirl burner*. *Proceedings of the Institution of Mechanical Engineers* .
- [195] Takagi, T., Okamoto, T., Taji, M. & Nakasuji, Y. (1984): *Retardation of Mixing and Counter - Gradient Diffusion in a Swirling Flame*. 20th Symposium (International) on Combustion 251 – 258 (The Combustion Institute).

- [196] Taylor, G. I. (1921): *Experiments with Rotating Fluids*. Proceedings of the Royal Society of London A 100, 114 – 121.
- [197] Taylor, G. I. (1935): *Statistical Theory of Turbulence*. Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences 151.
- [198] Temmerman, L., Leschziner, M. A., Hadziabdic, M. & Hanjalic, K. (2005): *A Hybrid Two-Layer URANS-LES Approach for Large-Eddy Simulation at High Reynolds Numbers*. International Journal of Heat and Fluid Flow 26, 173–190.
- [199] Tennekes, H. & Lumley, J. L. (1972): *A first course in turbulence* (The Massachusetts Institute of Technology).
- [200] Tilston, J. *et al.* (2003): *Future Engine Cycle Prediction and Emissions Study - Final Publishable Report*. Technischer Bericht, European Commission: CYPRESS G4RD-CT-2000-00383.
- [201] Traugott, S. C. (1958): *Influence of Solid-Body rotation on screen-produced turbulence*. Technischer Bericht, National Advisory Committee for Aeronautics.
- [202] Tritton, D. J. (1978): *Turbulence in Rotating Fluids*. In Roberts, P. & Soward, A. (Herausgeber.) *Rotating fluids in Geophysics* (Academic Press Inc. (London) Ltd.).
- [203] Turns, S. R. (2000): *An Introduction to Combustion*. 2. Auflage.
- [204] Vanoverberghe, K., Van Den Bulck, E. & Tummers, M. (2004): *Flow Structure of Lifted Swirling Jet Flames*. Flow, Turbulence and Combustion 73, 25–47.
- [205] Vasilescu, D. (1977): *Ein Beitrag zur Drallströmung im Rohr hinter dem unstetigen Übergang von einem Ringquerschnitt in einen Kreisquerschnitt*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [206] Versteeg, H. K. & Malalasekera, W. (1995): *An introduction to Computational Fluid Dynamics* (Longman Group Ltd.).
- [207] Veynante, D., Trounev, A., Bray, K. N. C. & Mantel, T. (1997): *Gradient and Counter-Gradient Scalar Transport in Turbulent Premixed Flames*. Journal of Fluid Mechanics 332, 263–293.
- [208] Veynante, D. & Vervisch, L. (2002): *Turbulent Combustion Modelling*. Progress in Energy and Combustion Science 28, 193–266.
- [209] Warnatz, J. (1984): *Chemistry of High Temperature Combustion of Alkanes up to Octane*. 20th Symposium (International) on Combustion (The Combustion Institute).
- [210] Warnatz, J. (1984): *Rate Coefficients in the C/H/O system*. In *Combustion Chemistry*, Lecture Notes in Physics, 197–360 (Gardiner W. C. Jr.).
- [211] Warnatz, J., Maas, U. & Dibble, R. W. (1997): *Verbrennung* (Springer-Verlag), 2. Auflage.

- [212] Weber, R. & Dugué, J. (1989): *The Effect of Combustion on Swirling Expanding Flows*. IFRF-Document F 59/a/6, International Flame Research Foundation.
- [213] Weber, R. & Dugué, J. (1992): *Combustion Accelerated Swirling Flows in High Confinements*. Progress in Energy and Combustion Science 18, 349–367.
- [214] Weigand, P., Meier, W., Duan, X. R., Stricker, W. & Aigner, M. (2006): *Investigations of Swirl Flames in a Gas Turbine Model Combustor I. Flow Field, Structures, Temperature, and Species Distributions*. Combustion and Flame 144, 205–224.
- [215] Wetzel, F. & Zarzalis, N. (2002): *Extension of kinetic scheme to highly diluted Combustion*. Deliverable Report D2.4, European Community, Framework 5 Project MUSCLES, G4RD-CT-2002-00644.
- [216] Wetzel, F. & Zarzalis, N. (2004): *Preliminary Version of JPDF software module*. Deliverable Report D2.6, European Community, Framework 5 Project MUSCLES, G4RD-CT-2002-00644.
- [217] Wetzel, F. & Zarzalis, N. (2005): *Final report on Validation of JPDF Module and LBO Calculations*. Deliverable Report D2.7a, European Community, Framework 5 Project MUSCLES, G4RD-CT-2002-00644.
- [218] Wilcox, D. (1988): *Reassessment of the Scale-Determining Equation for Advanced Turbulence Models*. AIAA Journal 26, 1299–1310.
- [219] Wilcox, D. (1998): *Turbulence Modelling for CFD* (DCW Industries, Inc.), 2. Auflage.
- [220] Williams, F. A. (1975): *Recent advances in theoretical description of turbulent diffusion flames*. In Murthy, S. N. B. (Herausgeber) *Turbulent mixing in nonreactive and reactive flows*, 189–208 (Plenum Press, New York).
- [221] Williams, F. A. (1988): *Combustion Theory* (Addison-Wesley Publishing Company), 2. Auflage.
- [222] Windmeier, C. (2003): *Theoretische Erfassung des Einflusses gleich- und gegensinniger Verdrallung auf das Strömungs- und Mischungsfeld einer doppelblutigen Brennstoffdüse*. Diplomarbeit, Universität Karlsruhe (TH), Engler-Bunte-Institut, Lehrstuhl und Bereich Verbrennungstechnik.
- [223] Zarzalis, N. (1986): *Berechnung des instationären Strömungsfeldes und der Flammenausbreitung im Zylinderraum eines Otto-Motors*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [224] Ziegler, M. (1998): *Untersuchungen zur Ausbreitung stationärer, turbulenter Vormischflammen unter besonderer Berücksichtigung bevorzugter Diffusion*. Dissertation, Universität Karlsruhe (TH).
- [225] Zierep, J. (1997): *Grundzüge der Strömungslehre* (Springer Verlag), 6. Auflage.

- [226] Zimont, V. L. (1979): *Theory of Turbulent Combustion of a Homogeneous Fuel Mixture at High Reynolds Numbers*. Combustion, Explosions and Shock waves 15, 305–311.

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Normierte, spektrale Energieverteilung als Funktion der Wellenzahl $\kappa$ nach LEUCKEL & ZARZALIS [103]	10
2.2	Axialgeschwindigkeitsverteilung des Drallfreistrahls bei zunehmender Drallstärke (nach MAIER [114])	17
2.3	Wirbelform und Vortex Breakdown	18
2.4	Rayleigh-Kriterium	19
2.5	Kategorisierung allgemeiner Verbrennungsvorgänge (nach HETTEL et al. [66])	22
2.6	Struktur einer adiabaten, mageren $\text{CH}_4$ /Luft-Flamme unter Standardbedingungen: Profile von Temperatur, stabilen Zwischen- und Endprodukten sowie Vergleich konvektiver, diffusiver und chemischer Beiträge zur Energiebilanz (nach HOFFMANN [71])	23
2.7	Dreidimensionales, gekrümmtes Flammenfrontoberflächenelement (nach HOFFMANN [71])	24
2.8	Struktur der laminaren, nicht-vorgemischten, eindimensionalen Flamme im Mischungsbruchraum; isotherme Mischungslinien und experimentelle Anordnung der Gegenstrom-Diffusionsflamme	27
2.9	Wärmefreisetzung einer laminaren, nicht-vorgemischten Flamme in Abhängigkeit von der skalaren Dissipationsrate	28
2.10	Struktur der nicht-vorgemischten, gestreckten, laminaren Methan/Luft-Flamme (nach PETERS [141])	29
2.11	Struktur einer isolierten, fortschreitenden "triple-flame" als Lösung einer Direkt-Numerischen-Simulation (DNS); Isolinien der Wärmefreisetzung nach RUETSCH et al. [163]	31
2.12	Regime der turbulenten, vorgemischten Verbrennung (nach BORGHI [19])	33
2.13	Regime der turbulenten, nicht-vorgemischten Verbrennung (nach PETERS [139, 140])	37
2.14	Überlagerung der Mechanismen des verbrennungsinduzierten Wirbelaufplatzens (nach KIESEWETTER [90])	40
2.15	Schematische Strömungsfelder der Typ-I und Typ-II Drallflamme	41
3.1	Flammenstabilisierung durch Drall	44
3.2	Reaktornetzwerk zur Beschreibung einer Gasturbinenbrennkammer (aus TILSTON et al. [200])	47

3.3	Bilanzierung der ausgetauschten Energieströme . . . . .	47
4.1	Zur Definition der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (aus HOFFMANN [71])	63
4.2	Zur Veranschaulichung der abgeschnittenen Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion (nach HOFFMANN [71]) . . . . .	67
4.3	$T - f$ - Raman-Scatter-Plot: Messungen in der TECFLAM Standard-Diffusionsflamme (nach KECK et al. [86]) . . . . .	69
4.4	$\alpha - f$ - Raman-Scatter-Plot: Messungen in der TECFLAM Standard-Diffusionsflamme (nach KECK et al. [86]) . . . . .	69
4.5	$h_N - f$ - Raman-Scatter-Plot: Messungen in der TECFLAM Standard-Diffusionsflamme (nach KECK et al. [86]) . . . . .	70
4.6	Zur Veranschaulichung der Reaktionsfortschrittsvariablen . . . . .	72
4.7	Thermodynamischer Zustand eines adiabaten, nicht-vorgemischten Systems bei Annahme infiniter Chemie als Funktion des Mischungsbruchs .	74
4.8	Einfluss nicht-adiabater Effekte auf die Temperatur . . . . .	76
4.9	Reaktionsflussdiagramm der $\text{CH}_4$ -Oxidation in einer stöchiometrischen $\text{CH}_4$ /Luft-Flamme (nach WARNATZ [209]) . . . . .	83
4.10	Struktur einer laminaren, vorgemischten $\text{CH}_4$ /Luft-Flamme unter Annahme partiellen Gleichgewichts der Wassergasreaktion in der Oxidationszone (nach HOFFMANN [71]) . . . . .	88
4.11	Struktur einer laminaren, vorgemischten $\text{CH}_4$ /Luft-Flamme unter Annahme der Quasistationarität für $\text{H}_2$ in der Oxidationszone (nach BUI-PHAM et al. [29]) . . . . .	90
4.12	Zum Konzept der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik (nach HOFFMANN [71]) .	91
4.13	Zur Verbesserung der Vorhersagequalität der Wasserstoffatomkonzentration (aus HOFFMANN [71]) . . . . .	99
5.1	Doppeldralldüse, Düsenstock und Brennkammer des untersuchten Systems (nach Merkle [123]) . . . . .	102
5.2	Normierungsradius und geometrische Daten des Drallerzeugers zur Bestimmung der Drallzahl (aus MERKLE [123]) . . . . .	103
5.3	Zur Diskussion der Systemcharakteristika . . . . .	107
5.4	Experimentell ermitteltes Stabilitätsdiagramm der Gleich- und Gegen-drallflamme (aus MERKLE [123]) . . . . .	107
5.5	Anforderungen an die numerische Simulation . . . . .	109
5.6	Verwendete Rechengitter . . . . .	111
5.7	Zur Definition der Randbedingungen . . . . .	113
5.8	Zur Ableitung der thermischen Wandrandbedingung . . . . .	115
5.9	JPDF look-up Tabelle - Erzeugung . . . . .	118
5.10	JPDF look-up Tabelle - Zugriff . . . . .	119
5.11	Vergleich berechneter, laminarer Flammengeschwindigkeiten unter Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus und der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bei Annahme partiellen Gleichgewichts der Wassergas-Shift-Reaktion . . . . .	123

5.12	Vergleich berechneter, laminarer Flammgeschwindigkeiten unter Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus und der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bei Annahme der Quasistationarität des Wasserstoffs . . . . .	123
5.13	Berechnete Struktur der 1-dimensionalen, laminaren Vormischflamme unter Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus und der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bei Annahme partiellen Gleichgewichts der Wassergas-Shift-Reaktion . . . . .	124
5.14	Berechnete Struktur der 1-dimensionalen, laminaren Vormischflamme unter Verwendung eines detaillierten chemischen Reaktionsmechanismus und der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik bei Annahme der Quasistationarität des Wasserstoffs . . . . .	124
6.1	Berechnete und experimentell bestimmte Verteilung der normierten Stromfunktion für Gleich- und Gegendrallkonfiguration . . . . .	129
6.2	Berechnete und experimentell bestimmte Verteilung der mittleren Axialgeschwindigkeit für Gleich- und Gegendrallkonfiguration . . . . .	130
6.3	Radialprofile der mittleren Geschwindigkeitskomponenten für Gleich- und Gegendrallkonfiguration . . . . .	133
6.4	Radialprofile der turbulenten kinetischen Energie für Gleich- und Gegendrallkonfiguration . . . . .	134
6.5	Mischungsbruchverteilung für Gleich- und Gegendrallkonfiguration . . . . .	137
6.6	Strömung und Mischungsbruchverteilung in der Gleichdralldüse . . . . .	137
6.7	Radialprofile der mittleren Geschwindigkeitskomponenten für die Gleichdrallkonfiguration unter Verwendung von Gitter-2 und Gitter-3 . . . . .	138
6.8	Mischungsbruchverteilung für die Gleichdrallkonfiguration unter Verwendung von Gitter-2 und Gitter-3 . . . . .	138
6.9	Turbulente kinetische Energie für die Gleichdrallkonfiguration aus RANS, LES und Messung . . . . .	141
6.10	Mischungsbruchverteilung für die Gleichdrallkonfiguration aus RANS, LES und Messung . . . . .	141
6.11	Mischungsbruchverteilung für Gleichdrallflamme - Definition des zusätzlichen Brennstoffeinlasses . . . . .	142
6.12	Einfluss von Wärmeverlusten auf die Reaktionskinetik . . . . .	143
6.13	Temperatur und Reaktionsrate zum Vergleich von adiabater Simulation und nicht-adiabater Simulation mit adiabater chemischer Reaktionskinetik	144
6.14	Künstlich vorgegebener Enthalpie-Index . . . . .	146
6.15	Mischungsbruch, Temperatur, statische Enthalpie und variabler Enthalpie-Index . . . . .	146
6.16	Temperatur und Reaktionsrate zum Vergleich von adiabater Simulation und nicht-adiabater Simulation mit variablem Enthalpie-Index . . . . .	147
6.17	Berechnete und experimentell bestimmte Verteilung der normierten Axialgeschwindigkeit der Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	149

---

6.18	Berechnete Radialprofile des statischen Drucks sowie der Tangentialgeschwindigkeit in Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	150
6.19	Berechnete Axialprofile des statischen Drucks sowie der Axialgeschwindigkeit in Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	151
6.20	Berechnete und experimentell bestimmte Verteilung der normierten Stromfunktion der Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	153
6.21	Radialprofile der mittleren Geschwindigkeitskomponenten für Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	154
6.22	Axialprofile der mittleren Drehimpulsströme für Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	155
6.23	Radialprofile der turbulenten kinetischen Energie für Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	158
6.24	Berechnete und experimentell bestimmte Mischungsbruchverteilung der Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	160
6.25	Zum Einfluss des turbulenten diffusiven Austausches auf die Mischungsbruchverteilung . . . . .	161
6.26	Zum konvektiven Austauschverhalten der Gleich- und Gegendrallflamme	162
6.27	Berechnete und experimentell bestimmte Temperaturverteilung der Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	163
6.28	Berechnete und experimentell bestimmte Verteilung des lokalen Ausbrandgrades für Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	164
6.29	Der Übergang vom stabilen Betriebszustand zum Flame-Wall-Breakup	167
6.30	Gleichdrallflamme nahe des mageren Verlöschens . . . . .	168
6.31	Stabilitätsdiagramm des untersuchten Systems . . . . .	169
6.32	Stabilitätsdiagramm der Gleich- und Gegendrallkonfiguration . . . . .	170
6.33	Lokale mittlere Aufenthaltszeit für Gleichdrallflammen bei Annäherung an die Stabilitätsgrenze . . . . .	173
6.34	Stabilisierungszonen der Gleich- und Gegendrallflamme . . . . .	174

---

## Tabellenverzeichnis

4.1	Konstanten des Standard $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodells . . . . .	55
4.2	Analogie zwischen Skalar-, Wärme- und Stofftransport . . . . .	57
4.3	Konstanten der Transportgleichungen der Reaktionsfortschrittsvariablen	73
4.4	Konstanten der Transportgleichungen des Mischungsbruchs . . . . .	75
4.5	Rumpfmechanismus der $\text{CH}_4$ -Oxidation (aus SMOOKE et al.[182]) . . .	84
5.1	Drallzahlen und Luftmassenstromverhältnis der untersuchten Doppeldrall- düse . . . . .	104
5.2	Betriebsparameter der im Detail untersuchten Konfigurationen . . . . .	105
5.3	Stöchiometrischer Sauerstoffbedarf verschiedener Elemente . . . . .	125



# Nomenklatur

## Lateinische Symbole

$a$	$m^2/s$	Temperaturleitfähigkeit
$A$	$m^2$	Fläche
$B$	$m$	Breite der Drallkanäle
$B_i$	$\frac{mol}{m^3 \cdot s \cdot K}$	präexponentieller Faktor des Arrhenius-Ansatzes
$b_i$	–	Temperaturexponent des Arrhenius-Ansatzes
$C_{c',1}$	–	Konstante in der Varianztransportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariablen.
$C_{c',2}$	–	Konstante in der Varianztransportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariablen.
$C_{f'',1}$	–	Konstante in der Varianztransportgleichung des Mischungsbruchs.
$C_{f'',2}$	–	Konstante in der Varianztransportgleichung des Mischungsbruchs.
$C_k$	$kmol/m^3$	molare Konzentration der Spezies $k$
$C_{Z,C}$	–	Zusammensetzung des Brennstoffs
$C_{\varepsilon 1, \varepsilon 2}$	–	Modellkonstanten im Standard $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell
$C_\mu$	–	Anisotropieparameter
$C_{\nu O_2}$	–	Korrekturfunktion für den stöchiometrischen Koeffizienten des Sauerstoffs
$c$	–	Reaktionsfortschrittsvariable
$c_{mol}$	$m/s$	Molekülgeschwindigkeit
$c_p$	$J/(kg \cdot K)$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck
$c_{p,k}$	$J/(kg \cdot K)$	spezifische Wärmekapazität der Spezies $k$ bei konstantem Druck
$c_{v,k}$	$J/(kg \cdot K)$	spezifische Wärmekapazität der Spezies $k$ bei konstantem Volumen
$D_0$	$m$	Halsdurchmesser des Diffusors der Doppeldralldüse
$D_{CC}$	$m$	Durchmesser der Brennkammer
$\dot{D}$	$(kg \cdot m^2)/s^2$	Drehimpulsstrom
$D_k$	$m^2/s$	Diffusionskoeffizient der Spezies $k$ in der Mischung

$d$	–	Reaktionsfortschrittsvarianz
$d$	$m$	Durchmesser
$E$	$J$	Energie
$E_{A,i}$	$J$	Aktivierungsenergie im Arrhenius-Ansatz
$e$	$m$	flammenfrontbezogenes Koordinatensystem $e(e_\xi, e_\psi, e_\zeta)$
$e$	$J/kg$	spezifische innere Energie
$e_k$	$J/kg$	spezifische innere Energie der Spezies $k$
$erf$	–	Error-Funktion (Fehlerfunktion)
$f$	–	Mischungsbruch
$f_i$	$N/(m^3 \cdot s)$	äußere Feldkräfte
$f_{k,i}$	$N/(m^3 \cdot s)$	Volumenkräfte der Spezies $k$ in Richtung $i$
$(\Delta f)_F$	–	Flammenfrontdicke im Mischungsbruchraum
$(\Delta f)_R$	–	Dicke der Reaktionszone im Mischungsbruchraum
$\Delta_R G_i^\circ$	$J/(mol \cdot K)$	freie molare Reaktionsenthalpie
$g$	–	Mischungsbruchvarianz
$H$	$m$	Höhe der Drallaknäle
$h$	$J/kg$	spezifische Enthalpie
$h_{ad}$	$J/kg$	spezifische Enthalpie bei adiabaten Bedingungen
$h_N$	–	Enthalpie-Index
$h_k$	$J/kg$	spezifische Enthalpie der Spezies $k$
$h_{f,k}^\circ$	$J/kg$	spezifische Standardbildungsenthalpie der Spezies $k$
$h_{ref}$	$J/kg$	spezifische Enthalpie bei Referenzbedingungen
$h_{s,k}$	$J/kg$	spezifische, fühlbare Enthalpie der Spezies $k$
$\dot{I}$	$(kg \cdot m)/s^2$	Impulsstrom
$j_i^f$	$kg/(m^2 \cdot s)$	Diffusionsstromdichte des Mischungsbruchs $f$
$j_i^j$	$kg/(m^2 \cdot s)$	Diffusionsstromdichte des chemischen Elements $j$
$j_i^k$	$kg/(m^2 \cdot s)$	Diffusionsstromdichte der Spezies $k$
$j_i^q$	$W/(m^2 \cdot s)$	Energiestromdichte
$j_i^{q,c}$	$W/(m^2 \cdot s)$	Energiestromdichte auf Grund von Wärmeleitung
$j_i^{q,d}$	$W/(m^2 \cdot s)$	Energiestromdichte auf Grund von Massendiffusion
$j_i^\Phi$	$[\Phi]/(m^2 \cdot s)$	Fluss der skalaren Größe $\Phi$
$j_i^\Phi$	$s/(m^2 \cdot s)$	Fluss der lokalen, mittleren Aufenthaltszeit
$K$	$1/s$	Stretchrate
$K_S$	$1/s$	Streckungsrate
$K_C$	$1/s$	Stretchanteil durch Flammenfrontkrümmung
$K_{C,i}$	$mol/m^3$	Gleichgewichtskonstante der Reaktion $i$
$k$	$m^2/s^2$	kinetische Energie der Turbulenz
$k$	$W/(m^2 \cdot K)$	Wärmedurchgangskoeffizient
$k_{f(b),i}$	$mol/(m \cdot K)$	Geschwindigkeitskoeffizient der Hin-(Rück-)reaktion

$L_{CC}$	$m$	Länge der Brennkammer
$L_M$	$m$	Marksteinlänge
$l_{char}$	$m$	charakteristische Länge
$l_{F,l,v}$	$m$	Flammenfrontdicke der laminaren vorgemischten Flamme
$l_{F,l,d}$	$m$	Flammenfrontdicke der laminaren nicht-vorgemischten Flamme
$l_{min}$	—	Mindestluftbedarf
$l_t$	$m$	Makrolängenmaß (integrales, äußeres Längenmaß), Prandtl'sche Mischungslänge
$l_\delta$	$m$	Dicke der Reaktionszone
$l_\eta$	$m$	Kolmogorov-Mikrolängenmaß (inneres Längenmaß)
$M$	$kg$	Masse
$\dot{M}$	$kg/s$	Massenstrom
$m$	—	Reaktionsordnung des Sauerstoffs
$N_i$	—	Anzahl der Reaktionen $i$
$N_j$	—	Anzahl der chemischen Elemente $j$
$N_k$	—	Anzahl der chemischen Spezies $k$
$N_{PDF}$	—	Anzahl an Stützstellen zur Diskretisierung der PDF
$N_{\Delta x}$	—	Anzahl der Gitterzellen je Raumrichtung
$N_{\Delta t}$	—	Anzahl an Zeitschritten
$\mathbf{n}$	—	Einheits-Normalenvektor des Flammenfrontoberflächenelements
$n$	—	Anzahl der Drallkanäle
$n$	—	Reaktionsordnung des Brennstoffs
$P_k$	$m^2/s^3$	Produktionsterm der turbulenten kinetischen Energie $k$ im Standard $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell
$P_{th}$	$W$	thermische Leistung des Brenners
$p$	$N/m^2$	Druck
$Pr_t$	—	turbulente Prandtl-Zahl
$Q(\phi)$	—	beliebige Funktion der skalaren Variable $\phi$
$q_i$	$kg/(m^3 \cdot s)$	Reaktionsgeschwindigkeit der Reaktion $i$
$\dot{q}_R$	$J/(m^3 \cdot s)$	Quellterm für Energiezufuhr durch Fernwirkung
$R$	$m$	Radius
$R_0$	$m$	Halsradius des Diffusors der Doppeldralldüse (Normierungsradius)
$R_k$	$kmol/(m^3 \cdot s)$	Reaktionsrate der Spezies $k$
$r$	$m$	Radius
$S_{ij}$	$N/m^2$	zeitlich mittlerer Spannungstensor
$S_\tau$	$(s \cdot kg)/(m \cdot s)$	Quellterm der Transportgleichung der lokalen, mittleren Aufenthaltszeit

$S_{\Phi}$	$\frac{[\phi] \cdot kg}{m \cdot s}$	Quellterm der allgemeinen skalaren Transportgleichung
$Sc_c$	–	turbulente Schmidt-Zahl der Mittelwerttransportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariablen $c$ .
$Sc_{c''}$	–	turbulente Schmidt-Zahl der Varianztransportgleichung der Reaktionsfortschrittsvariablen $c$ .
$Sc_{f'}$	–	turbulente Schmidt-Zahl der Mittelwerttransportgleichung des Mischungsbruchs $f$ .
$Sc_{f''}$	–	turbulente Schmidt-Zahl der Varianztransportgleichung des Mischungsbruchs $f$ .
$Sc_k$	–	turbulente Schmidt-Zahl der turbulenten kinetischen Energie $k$ .
$Sc_t$	–	turbulente Schmidt-Zahl
$Sc_{\varepsilon}$	–	turbulente Schmidt-Zahl der Dissipationsrate $\varepsilon$ .
$Sc_{\tau}$	–	turbulente Schmidt-Zahl der lokalen, mittleren Aufenthaltszeit $\tau$
$s_k^{\circ}$	$J / (mol \cdot K)$	spezifische Standard-Entropie der Spezies $k$
$T$	$K$	Temperatur
$T_{A,i}$	$K$	Aktivierungstemperatur im Arrhenius-Ansatz
$T_{ref}$	$K$	Temperatur bei Referenzbedingungen
$t$	$s$	Zeit
$Tu$	–	Turbulenzgrad
$\mathbf{u}$	$m/s$	Strömungsgeschwindigkeit (vektoriell)
$u$	$m/s$	Axialgeschwindigkeit
$u_0$	$m/s$	Normierungsgeschwindigkeit: volumetrisch gemittelte Geschwindigkeit im Halsquerschnitt des Diffusors der Doppeldralldüse
$u_{char}$	$m/s$	charakteristische Geschwindigkeit
$u_i$	$m/s$	Komponenten des Geschwindigkeitsvektors, $i = 1, \dots, 3$
$u_F$	$m/s$	Flammengeschwindigkeit
$u_{F,l,v}^{\circ}$	$m/s$	laminare Flammengeschwindigkeit der vorgemischten Flamme (ungestreckt)
$u_{F,l,v}$	$m/s$	laminare Flammengeschwindigkeit der vorgemischten Flamme (gestreckt)
$u_{F,l,d}$	$m/s$	laminare Flammengeschwindigkeit der nicht-vorgemischten Flamme
$u_{F,t,v}$	$m/s$	turbulente Flammengeschwindigkeit der vorgemischten Flamme
$u_t$	$m/s$	Makro-Geschwindigkeitsmaß (integrales, äußeres Geschwindigkeitsmaß)
$u_{\eta}$	$m/s$	Kolmogorov-Mikrogeschwindigkeitsmaß (inneres Geschwindigkeitsmaß)

$V$	$m^3$	Volumen
$\dot{V}$	$m^3/s$	Volumentstrom
$V_{k,i}$	$m/s$	Diffusionsgeschwindigkeit der Spezies $k$ in Richtung $i$
$v$	$m/s$	Radialgeschwindigkeit
$v$	$m^3/kg$	spezifisches Volumen
$W_j$	$kg/mol$	Molmasse der chemischen Elements $j$
$W_k$	$kg/mol$	Molmasse der Spezies $k$
$\mathbf{w}$	$m/s$	Absolutgeschwindigkeit des Flammenfrontoberflächenelements (vektoriell)
$w$	$m/s$	Umfangsgeschwindigkeit
$w_c$	$kg/(m^3 \cdot s)$	Reaktionsrate bez. der Reaktionsfortschrittsvariablen
$w_k$	$kg/(m^3 \cdot s)$	Reaktionsrate der Spezies $k$
$X_k$	$kmol/kmol$	Molenbruch der Spezies $k$
$x$	$m$	$x$ -Komponente des Ortsvektors ( $x \equiv x_1$ )
$x_i$	$m$	Komponenten des Ortsvektors, $i = 1, \dots, 3$
$x_{pri}$	—	Primärluftmassenstromverhältnis
$Y_k$	$kg/kg$	Massenbruch der Spezies $k$
$y$	$m$	$y$ -Komponente des Ortsvektors ( $y \equiv x_2$ )
$Z_j$	$kg/kg$	Elementmassenbruch - Massenbruch des chemischen Elements $j$
$z$	$m$	$z$ -Komponente des Ortsvektors ( $z \equiv x_3$ )

## Griechische Symbole

$\alpha$	$W/(m^2 \cdot K)$	Wandwärmeübergangskoeffizient
$\alpha$	—	Parameter der abgeschnittenen Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion
$\alpha$	—	Reagiertheit, in dieser Arbeit als Ausbrandgrad bezeichnet
$\alpha_o$	—	Ausbrandgrad
$\beta$	—	Parameter der abgeschnittenen Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion
$\chi$	—	skalare Größe
$\chi$	$1/s$	skalare Dissipationsrate
$\chi_c$	$1/s$	skalare Dissipationsrate der Reaktionsfortschritts-Fluktuation
$\chi_f$	$1/s$	skalare Dissipationsrate der Mischungsbruch-Fluktuation
$\chi_k$	—	chemisches Symbol der Spezies $k$
$\delta$	—	Expansionsfaktor der Reaktionszone

$\delta$	–	Dirac-Funktion der stochastischen Variable $\phi$
$\delta_{ij}$	–	Kronecker-Symbol
$\Phi$	–	Korrekturfunktion in der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik für die Wasserstoffatomkonzentration am Übergang von Bereich-I nach Bereich-II
$\Phi$	–	skalare Größe
$\phi$	–	skalare Größe
$\varphi$	–	stochastische Variable
$\Gamma$	$m^2/s$	Zirkulation
$\Gamma_t$	$kg/(m \cdot s)$	turbulente Diffusivität
$\gamma$	–	Normierungskonstante der abgeschnittenen Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion
$\varepsilon$	$m^2/s^3$	Dissipationsrate der kinetischen Energie
$\varepsilon_{Gas}$	–	Emissionskoeffizient der Gasmischung
$\zeta_j$	–	stöchiometrischer Sauerstoffbedarf zur Oxidation des chemischen Elements $j$ zu seinem thermodynamisch stabilen Zustand
$\phi$		skalare Größe
$\lambda$	$W/(m \cdot K)$	Wärmeleitfähigkeit
$\lambda$	–	Luftzahl
$\lambda_{glob}$	–	globale Luftzahl
$\lambda_{loc}$	–	lokale Luftzahl
$\lambda_{mol}$	$m$	mittlere freie Weglänge
$\mu$	–	Mittelwert der Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion
$\mu_l$	$kg/(m \cdot s)$	laminare dynamische Viskosität
$\mu_t$	$kg/(m \cdot s)$	Wirbelviskosität
$\nu_{ki}^{(n)}$	–	Stöchiometrischer Koeffizient der Edukt-(Produkt-)Spezies $k$ in der Reaktion $i$
$\nu_k^j$	–	Anzahl der Atome des chemischen Elements $j$ in der Spezies $k$
$\nu_l$	$m^2/s$	kinematische Viskosität
$\xi$	–	entdimensionierte Wegkoordinate im Reaktiv-diffusiven System
$\varrho$	$kg/m^3$	Dichte
$\sigma$	–	Varianz der Gauß'schen Verteilungsdichtefunktion
$\sigma_B$	$W/(m^2 \cdot K^4)$	Stefan-Boltzmann-Konstante
$\sigma_k$	$kmol/kg$	Molzahl einer Spezies $k$
$\sigma_t$	–	Proportionalitätsfaktor aus turbulentem Impulsaustausch und turbulentem Austausch eines Skalars (s. turbulente Prandtl- bzw. Schmidt-Zahl)
$\tau$	$s$	Zeitmaß; lokale, mittlere Aufenthaltszeit

$\tau_c$	$s$	Zeitmaß der Wärmefreisetzung durch chemische Reaktionen
$\tau_{F,l,v}$	$s$	Zeitmaß der Wärmefreisetzung der laminaren, vorgemischten Flamme
$\tau_{F,l,d}$	$s$	Zeitmaß der Wärmefreisetzung der laminaren, nichtvorgemischten Flamme
$\tau_{ij}$	$N/m^2$	Gesamtspannungstensor
$\tau_{ij,l}$	$N/m^2$	viskoser Spannungstensor
$\tau_{ij,t}$	$N/m^2$	turbulenter Spannungstensor, Reynolds'scher Spannungstensor
$\tau_t$	$s$	Makro-Zeitmaß (integrales, äußeres Zeitmaß)
$\tau_\chi$	$s$	Transport-Zeitmaß (proportional dem Kehrwert der skalaren Dissipationsrate $\chi$ )
$\tau_\eta$	$s$	Kolmogorov-Mikrozeitmaß (inneres Zeitmaß)
$\Psi$	—	normierte Stromfunktion
$\psi$	—	stochastische Variable
$\psi_k$	$kmol/kg$	molapezifische Konzentration
$\Omega$	—	entdimensionierte Reaktionsrate
$\omega$	$1/s$	Frequenz der energietragenden Wirbel ( $k$ - $\omega$ -Turbulenzmodell)
$\dot{\omega}_k$	$mol/(m^3 \cdot s)$	molare Produktionsrate der Spezies $k$

## Lateinische kaligraphische Symbole

$\mathcal{D}$	$m^2/s$	Diffusionskoeffizient
$\mathcal{D}$	—	Verteilungsfunktion
$\mathcal{G}$	—	Gauß'sche Verteilungsdichtefunktion
$\mathcal{H}$	—	Heaviside-Funktion
$\mathcal{L}$	—	Transportoperator
$\mathcal{O}$	—	Ordnung
$\mathcal{P}$	—	Wahrscheinlichkeitsdichte
$\mathcal{R}$	$J/(mol \cdot K)$	ideale Gaskonstante
$\mathcal{T}$	—	Glättungsfunktion

## Subskripte

<i>A</i>	bez. der Fläche
<i>A</i>	Aktivierungs-
<i>Arrh</i>	Arrhenius-
<i>Auslass</i>	bez. des Auslasses
<i>ad</i>	adiabat
<i>b</i>	bez. der Rückreaktion
<i>b</i>	verbannt
<i>Br</i>	bez. des Brennstoffs
<i>C</i>	bez. der Krümmung
$CH_4$	bez. Methan ( $CH_4$ )
<i>c</i>	bez. chemischer Reaktionen
<i>c</i>	bez. des Mittelwerts der Reaktionsfortschrittsvariablen
<i>CC</i>	bezüglich der Abmaße der Brennkammer
<i>char</i>	charakteristisch
<i>crit</i>	kritisch
<i>d</i>	nicht-vorgemischt, diffusiv
<i>EBU</i>	bez. des Eddy-Break-Up Reaktionsmodells
<i>Einlass</i>	bez. des Einlasses
<i>erf</i>	erforderlich
<i>F</i>	bez. der Flamme
<i>f</i>	bez. der Hinreaktion
<i>f</i>	bez. des Mittelwerts des Mischungsbruchs
<i>geb</i>	chemisch gebunden
<i>ges</i>	gesamt
<i>i</i>	bei Zündbedingungen
<i>i</i>	räumliche Koordinaten
<i>i</i>	Reaktion <i>i</i>
<i>j</i>	chemisches Element <i>j</i>
<i>k</i>	Spezies <i>k</i>
<i>korr</i>	korrigiert
<i>L</i>	bez. Luft
<i>l</i>	laminar
<i>Magn</i>	bez. des Reaktionsmodells nach Magnussen
<i>max</i>	Maximalwert
<i>min</i>	Minimalwert
<i>N</i>	Normalbedingungen ( $p^\circ = 1 \text{ bar}$ , $T^\circ = 273,15 \text{ K}$ )
<i>Ox</i>	bez. des Oxidators

<i>PSR</i>	idealer Rührkesselreaktor (PSR: perfectly stirred reactor)
<i>pri</i>	bez. des Primärdrallerzeugers
<i>ref</i>	bez. Referenzbedingungen
<i>S</i>	bez. der Streckung
<i>sek</i>	bez. des Primärdrallerzeugers
<i>st</i>	bei stöchiometrischer Zusammensetzung
<i>t</i>	turbulent
<i>th</i>	thermisch
<i>u</i>	unverbrannt
<i>V</i>	Verlöschen
<i>v</i>	vorgemischt
<i>vorh</i>	vorhanden
<i>Z</i>	Zünden
<i>x</i>	bez. der skalaren Dissipationsrate

## Superskripte

0	Bedingungen in der Reaktionszone
◦	Standardzustand ( $p^\circ = 1 \text{ bar}$ , $T^\circ = 298 \text{ K}$ ) bzw. ungestreckte Flamme
,	bez. der Edukte
''	bez. der Produkte
PEQL	im partiellen Gleichgewicht (partial equilibrium)
QSSA	im quasistationären Zustand (quasi steady state assumption)
X	bez. des Übergangs von Vorwärm- zu Reaktionszone in der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik
Z	bez. des Übergangs von Bereich-I zu Bereich-II in der 2-Bereich-1-Schritt Kinetik

## Operatoren

$(\cdot)'$	Reynolds-Schwankungswert
$(\cdot)''$	Favre-Schwankungswert
$\overline{(\cdot)}$	Reynolds-Mittelwert
$\widetilde{(\cdot)}$	Favre-Mittelwert

## Dimensionslose Kennzahlen

$Da$	$Da = \frac{\tau_t}{\tau_c}$	Damköhler-Zahl: Verhältnis aus Zeitmaß der (turbulenten) Mischung zum Zeitmaß der Wärmefreisetzung
$Ka$	$Ka = K \cdot \tau_c$	Karlovitz-Zahl: Verhältnis aus Zeitmaß der Wärmefreisetzung $\tau_c$ und Zeitmaß der Stretchrate $K$
$Le_k$	$Le_k = \frac{a}{D_k} = \frac{Sc}{Pr}$	Lewis-Zahl der Spezies $k$ : Verhältnis aus Temperaturleitfähigkeit $a$ und Diffusionskoeffizient der Spezies $k$
$Ma$	$Ma = \frac{L_M}{l_{F,l,v}}$	Markstein-Zahl: Verhältnis aus Markstein-Länge $L_M$ und Dicke der laminaren Flammenfront der Vormischflamme $l_{F,l,v}$
$Pe$	$Pe = \frac{u_{char} \cdot l_{char}}{a}$	Peclet-Zahl: Verhältnis aus konvektivem zu konduktivem Wärmetransport mit: $u_{char}$ : charakteristische Geschwindigkeit $l_{char}$ : charakteristisches Längenmaß $a$ : Temperaturleitfähigkeit
$Pe_\Delta$	$Pe_\Delta = \frac{\rho \cdot u}{\Gamma / \Delta x}$	Gitter-Peclet-Zahl: Verhältnis aus konvektivem zu diffusivem Transport mit: $\Gamma$ : Diffusivität $\Delta x$ : Gitterabstand
$Pr$	$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda}$	Prandtl-Zahl: Verhältnis aus diffusivem Transport von Impuls und Temperatur
$Re$	$Re = \frac{u_{char} \cdot l_{char}}{\nu_l}$	Reynolds-Zahl: Verhältnis aus Trägheitskräften und Zähigkeitskräften mit: $u_{char}$ : charakteristische Geschwindigkeit $l_{char}$ : charakteristisches Längenmaß $\nu_l$ : kinematische Viskosität
$S$	$S = \frac{\dot{D}}{\dot{I} \cdot R_0}$	Drallzahl: Verhältnis aus Drehimpulsstrom und Axialimpulsstrom, entdimensioniert mit einer charakteristischen Länge
$Sc_k$	$Sc_k = \frac{\mu_l}{\rho D_k} = \frac{\nu_l}{D_k}$	Schmidt-Zahl der Spezies $k$ : Verhältnis aus diffusivem Transport von Impuls zu diffusivem Transport von Masse





# Lebenslauf

## **Persönliche Daten:**

---

Name Frank Wetzel  
Geburtsdatum 15. Dezember 1974  
Geburtsort Bensheim a. d. Bergstraße  
Familienstand verheiratet

## **Schulbildung:**

---

1981 - 1985 Grundschule in Laudenbach a. d. Bergstraße  
1985 - 1994 Gymnasium in Hemsbach a. d. Bergstraße  
21. Juni 1994 Abschluss: Abitur

## **Zivildienst:**

---

1994 - 1995 Zivildienst bei der Stadt Heppenheim a. d. Bergstraße  
Bereich Kulturamt / Stadtjugendpflege

## **Studium:**

---

1995 - 2001 Studium des Chemieingenieurwesens  
an der Universität Karlsruhe (TH)  
30. Mai 2001 Abschluss: Diplom (Dipl.-Ing.)

## **Berufliche Tätigkeiten:**

---

2001 - 2006 Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Lehrstuhl für Verbrennungstechnik des Engler-Bunte-Instituts der Universität Karlsruhe (TH)  
seit August 2006 Mitarbeiter der Mineraloelraffinerie Oberrhein GmbH & Co. KG in Karlsruhe

ISBN: 978-3-86644-154-5

---

[www.uvka.de](http://www.uvka.de)