Numerische und experimentelle Untersuchung einer abgehobenen Flamme unter Druck

zur Erlangung des akademischen Grades einer DOKTORIN DER INGENIEURSWISSENSCHAFTEN (Dr.-Ing.)

von der KIT-Fakultät für Chemieingenieurwesen und Verfahrenstechnik des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) genehmigte

DISSERTATION

von

Dipl.-Ing. Julia Sedlmaier aus Rotenburg an der Fulda

Tag der mündlichen Prüfung: 3. Mai 2019 Erstgutachter: Prof. Dr.-Ing. N. Zarzalis Zweitgutachterin: Prof. Dr. B. Kraushaar-Czarnetzki



Dieses Werk ist lizenziert unter einer Creative Commons Namensnennung -Weitergabe unter gleichen Bedingungen 4.0 International Lizenz (CC BY-SA 4.0): https://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/deed.de Meinen Kindern Linus und Josefine gewidmet.

Danksagung

An erster Stelle bedanke ich mich herzlich bei Herrn Prof. Dr.-Ing. Nikolaos Zarzalis, der mir diese Arbeit mit seiner Betreuung Ende 2010 beginnend am Engler-Bunte-Insitut, Bereich Verbrennungstechnik (VBT) des KIT ermöglichte. Ich bedanke mich für sein Vertrauen, seine Unterstützung und die hilfreichen Diskussionen in denen ich viel gelernt habe und neue Ideen weiterentwickeln konnte. Frau Prof. Dr. Bettina Kraushaar-Czarnetzki danke ich für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme des Korreferats.

Dr.-Ing. Peter Jansohn danke ich dafür, dass er mich Anfang 2013 für 3 Monate in sein Team am Paul-Scherrer-Institut aufgenommen hat und mir damit ermöglichte einen Teil meiner experimentellen Arbeiten dort durchführen. Die freundschaftliche Atmosphäre und die offene Zusammenarbeit mit ihm und seinem Team hat die Arbeit einen großen Schritt voran gebracht.

Am KIT gilt mein Dank den Kollegen, für die vielen Diskussionen und auch die gemeinsamen Unternehmungen, bei denen mir insbesondere Christian Kraus, Peter Habisreuther, Stefan Harth, Flavio Galeazzo, Fabian Eiberger, Christopher Wollgarten, Thomas Müller und Christof Weis in Erinnerung geblieben sind.

Unverzichtbar für den numerischen Teil der Arbeit war zuverlässige und unermüdliche Arbeit von Walter Pfeffinger und Peter Habisreuther. Das Gelingen des experimentellen Teils der Arbeit wäre ohne die Mitwirkung der technischen Angestellten H. Pabel, M. Berg, W. Linker und A. Herbst nicht möglich gewesen. Vielen Dank dafür.

Für die Unterstützung in der folgenden Zeit bis heute, sowie für das ständige Motivieren ohne das ich die Arbeit neben der Berufstätigkeit und meiner Aufgabe als Mutter nicht abgeschlossen hätte, danke ich meinem Partner Samuel Braun und unseren Eltern.

Inhaltsverzeichnis

1	Einl	eitung	1
2	Gru	ndgleichungen reagierender Gasströmungen	5
	2.1	Bilanz der Gesamtmasse	5
	2.2	Bilanz des Impulses	5
	2.3	Bilanz der Speziesmassen	6
	2.4	Bilanz der Elementmassen	7
	2.5	Bilanz der Energie	7
3	Moo	dellierung turbulenter Strömungen	11
	3.1	Reynolds-Mittelung	13
	3.2	Favre-Mittelung	14
	3.3	Favre-Filterung	15
	3.4	Gemittelte Bilanzgleichungen	15
	3.5	Gefilterte Bilanzgleichungen	16
	3.6	Turbulenz-Modelle	17
		3.6.1 RANS-Modelle	17
		3.6.1.1 Standard $k - \epsilon$ – Modell	19
		3.6.1.2 SST-Modell	20
		3.6.2 LES-Modelle	22
		3.6.2.1 Smagorinsky-Modell	22
4	The	oretische Grundlagen der Verbrennung	25
	4.1	Phänomenologie einer laminaren vorgemischten Flamme	26
	4.2	Charakterisierung turbulenter Vormischflammen - Das Borghi Dia-	
		gramm	29
	4.3	Abgehobene Verbrennung	32
5	Verl	orennungsmodell	37
	5.1	Reaktionskinetische Grundlagen	38
	5.2	Modellsysteme	39
		5.2.1 Idealer Satzreaktor	39
		5.2.2 Eindimensionale Vormischflamme	40

	5.3	Redul	ktion der Chemie	42
		5.3.1	Mischungsbruch	42
		5.3.2	Reaktionsfortschritt	44
	5.4	Mode	llierung der turbulenten Verbrennung	47
		5.4.1	Mathematische Grundlagen des Verbundwahrscheinlichkeitsdic	hte-
			Modells	47
		5.4.2	Modellierung des Reaktionsquellterms	51
			5.4.2.1 β -Verteilungsfunktion	52
			5.4.2.2 Liu-Integration	54
			5.4.2.3 Multidimensionale Integration chemischer Tabellen	55
	5.5	Anwe	ndung des Verbrennungsmodells	56
6	Exp	erimen	teller Aufbau	57
	6.1	Unter	suchte Düse	57
	6.2	Versu	chsanlagen	59
		6.2.1	Versuchsanlage für Verbrennung mit flüssigem Brennstoff	59
		6.2.2	Versuchsanlage für Verbrennung mit gasförmigem Brennstoff	61
	6.3	Messt	echnik	63
		6.3.1	Laser-Doppler-Anemometrie (LDA)	63
		6.3.2	Mie-Streuung	65
		6.3.3	Chemilumineszenz	67
		6.3.4	Laserinduzierte Fluoreszenz	69
7	Vali	dierun	g und Numerischer Aufbau	71
	7.1	Änder	rungen im JPDF-Programm	71
	7.2	Validi	erung anhand einer Modellflamme	73
		7.2.1	Numerisches Setup der Cabra-Flamme	75
		7.2.2	Ergebnisse der LES-Simulationen	79
		7.2.3	Zusammenfassung	82
	7.3	Nume	erisches Setup zur Untersuchung der abgehobenen Flammen .	84
8	Erge	ebnisse	e und Diskussion	89
	8.1	Isothe	ermes Strömungsfeld	89
		8.1.1	Stromfunktion und Frequenzanalyse	90
		8.1.2	Vergleich zwischen experimentellen und numerischen Ergeb-	
			nissen	92
		8.1.3	Zusammenfassung	100
	8.2	Reakt	ive Simulationen	103
	8.3	Exper	imentelle Bestimmung der Abhebehöhe	117
		8.3.1	Einfluss des Druckverlustes	118
		8.3.2	Einfluss des Absolutdruckes	125

	8.3.3 8.3.4	Einfluss der Stöchiometrie	128 131
9	Zusammen	fassung	137
10	Abstract		143

Nomenklatur

Abkürzungen

CCD Charged-coupled device DEHS Di-Ethyl-Hexyl-Sebacat HRCT Idealer Satzreaktor ICCD Intensified charged-coupled device JPDF Verbundwahrscheinlichkeitsdichte (joint probability density function) LDA Laser-Doppler-Anemometrie LES Großskalensimulation (Large-Eddy-Simulation) LIF Laserinduzierte Fluoreszenz PDF Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungsfunktion PREMIX Planare laminare Vormischflamme RANS Reynolds-gemittelte Navier-Stokes-Gleichung

Griechische Formelzeichen

Δ Zellweite	[<i>m</i>]
δ Dicke der laminaren vorgemischten Flamme	[<i>m</i>]
δ_{ij} Kronecker-Symbol	[-]
$\dot{\omega}_k$ Reaktionsrate der Spezies k	$\left[\frac{kg}{m^3s}\right]$
ϵ Turbulente Dissipationsrate	$\left[\frac{m^2}{s^3}\right]$
κ Isentropenexponent	[-]
λ Luftzahl	[=]
$\lambda_{\mathrm{W\ddot{a}rme}}$ Wärmeleitfähigkeit	$\left[\frac{W}{mK}\right]$
$\lambda_{Strahlung}$ Strahlungswellenlänge	[<i>m</i>]
μ Dynamische Viskosität	$\left[\frac{kg}{ms}\right]$
μ_l Laminare dynamische Viskosität	$\left[\frac{kg}{ms}\right]$
μ_t Turbulente dynamische Viskosität	$\left[\frac{kg}{ms}\right]$

μ_{eff} Effektive dynamische Viskosität	$\left[\frac{kg}{ms}\right]$
ν Kinematische Viskosität	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$
$v_{ki}^{\prime('')}$ Stöchiometrischer Koeffizient der Edukt-(Produkt-)Spezies k in der Rea	aktion
i	[-]
$ u_l$ Laminare kinematische Viskosität	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$
$ u_{sgs}$ Kinematische Viskosität im Subgrid-Bereich	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$
ω Turbulente Wirbelstärke	$\left[\frac{1}{s}\right]$
ϕ Winkel	[°]
Π_{ij} Viskoser Spannungstensor	$\left[\frac{N}{m^2}\right]$
Ψ Stromfunktion	[-]
ρ Dichte	$\left[\frac{kg}{m^3}\right]$
$ au_\eta$ Kolmogorov-Zeitmaß	[<i>s</i>]
$ au_t$ Umdrehungszeit der großen Wirbeln im turbulenten Spektrum	[<i>s</i>]
$ au_W$ Charakteristischen Zeitmaß der Wärmefreisetzung	[<i>s</i>]
$ au_{ij,lam}$ Laminarer viskoser Spannungstensor	$\left[\frac{N}{m^2}\right]$

Lateinische Formelzeichen

$\Delta p/p_0$ Druckverlust über Düse	[-]
ΔP_{RG} Wärmeverlust Brennkammer bezogen auf Leistung der Flamme	%
ΔT_{RG} Absenkung der Rauchgastemperatur aufgrund von Wärmeverlust	$\left[\frac{J}{kgK}\right]$
δ_R Dicke Reaktionszone der laminaren vorgemischten Flamme	[m]
δ_v Dicke Vorwärmzone der laminaren vorgemischten Flamme	[<i>m</i>]
\dot{D}_i Drehimpulsstrom	$\left[\frac{kgm^2}{s^2}\right]$
İ Axialimpulsstrom	$\left[\frac{kgm}{s^2}\right]$
M Massenstrom	$\left[\frac{kg}{s}\right]$
$\dot{m}_{Luft, stöchiometrisch}$ Stöchiometrischer Verbrennungsluftmassenstrom	$\left[\frac{kg}{s}\right]$
$\dot{m}_{\text{Luft, tatsächlich}}$ Tatsächlicher Verbrennungsluftmassenstrom	$\left[\frac{kg}{s}\right]$
\dot{q}_R Quellterm für Energiezufuhr	$\left[\frac{J}{m^3s}\right]$
\dot{V}_0 Volumenstrom durch die Düse	$\left[\frac{m^3}{h}\right]$
${\cal F}$ Wahrscheinlichkeit	[-]
${\cal P}$ Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	[-]
\mathcal{P}_k Quellterm der turbulenten kinetischen Energie	$\left[\frac{m^2}{s^3}\right]$
ℜ Universelle Gaskonstante	$\left[\frac{J}{molK}\right]$

\widetilde{M} Molmasse einer Mischung aus N_k Spezies	$\left[\frac{kg}{mol}\right]$
\widetilde{M}_k Molmasse der Spezies k	$\left[\frac{kg}{mol}\right]$
A Fläche	$[m^2]$
a Temperaturleitzahl	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$
A _{eff} Effektive Fläche der Düse	$[mm^2]$
$B_{i,(f,b)}$ Präexponentieller Faktor des Arrhinius-Ansatzes	$\left[\frac{mol}{m^3 sK}\right]$
$b_{i,(f,b)}$ Temperaturexponent des Arrhenius-Ansatzes	[-]
c Reaktionsfortschritt	[-]
C_k Molare Konzentration der Spezies k	$\left[\frac{kmol}{m^3}\right]$
c_p Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	$\left[\frac{J}{kgK}\right]$
$c_{p,k}$ Spezifische Wärmekapazität der Spezies k bei konstantem Druck	$\left[\frac{J}{kgK}\right]$
d Durchmesser	[<i>m</i>]
D_k Diffusionskoeffizient der Spezies k in einer Mischung	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$
Da _t Turbulente Damköhler-Zahl	[-]
e Spezifische Innere Energie	$\left[\frac{J}{kg}\right]$
$E_{A_{i,(f,b)}}$ Aktivierungsenergie in Arrhenius-Ansatz	[]]
f Frequenz	$\left[\frac{1}{s}\right]$
f Mischungsbruch	[-]
f _D Dopplerfrequenz	$\left[\frac{1}{s}\right]$
f _S Schiftfrequenz	$\left[\frac{1}{s}\right]$
f_j Äußere Feldkräfte	$\left[\frac{N}{m^3}\right]$
$f_{k,i}$ Volumenkräfte der Spezies k in Richtung i	$\left[\frac{N}{m^3}\right]$
FN Flownumber	$\left[\frac{kg}{h\sqrt{bar}}\right]$
h Spezifische Enthalpie	$\left[\frac{J}{kg}\right]$
$h_{j,k}^{\circ}$ Spezifische Standardbildungsenthalpie der Spezies k	$\left[\frac{J}{kg}\right]$
h_k Spezifische Enthalpie der Spezies k	$\left[\frac{J}{kg}\right]$
j_i^j Diffusionsstromdichte des Elements j	$\left[\frac{kg}{m^2s}\right]$
j_i^k Diffusionsstromdichte der Spezies k	$\left[\frac{kg}{m^2s}\right]$
j_x^k Diffusionsstromdichte der Spezies K in x-Richtung	$\left[\frac{kg}{m^2s}\right]$
$j_i^{q,c}$ Energiestromdichte aufgrund von Wärmeleitung	$\left[\frac{W}{m^2s}\right]$
$j_i^{q,d}$ Energiestromdichte aufgrund von Massendiffusion	$\left[\frac{W}{m^2s}\right]$

j_i^q Energiestromdichte	$\left[\frac{W}{m^2s}\right]$
k Turbulente kinetische Energie	$\left[\frac{m^2}{s}\right]$
$k_{i,f(b)}$ Geschwindigkeitskoeffizient der Hin-(Rück-)reaktion	[n.d.]
<i>Ka</i> ^{<i>t</i>} Turbulente Karlowitz-Zahl	[-]
l_t Turbulentes integrales Längenmaß	[<i>m</i>]
l_{η} Kolmogorov-Längenmaß	[<i>m</i>]
l _{char} Charakteristische Länge	[<i>m</i>]
Le _k Lewis-Zahl	[-]
<i>m</i> Masse	[kg]
n Stoffmenge	[mol]
N_i Anzahl der Reaktionen i	[-]
N_k Anzahl der Spezies	[-]
n_{lin} Anzahl der Stützstellen in den logarithmischen Intervallen für Liu Integ Algorithmus	rations- [-]
n_{log} Anzahl der Stützstellen in dem linaren Intervall für Liu Integrations-Algo	orithmus[-
P Leistung	kW
<i>p</i> Druck	[Pa]
Pr Prandtl-Zahl	[-]
<i>R_i</i> Düsenradius	[<i>m</i>]
r_i Reaktionsgeschwindigkeit der i-ten Reaktion	$\left[\frac{kg}{m^3s}\right]$
R_s Spezifische Gaskonstante	$\left[\frac{J}{k \varphi K}\right]$
<i>Re</i> Reynolds-Zahl	[-]
Re_t Turbulente Reynolds-Zahl	[-]
<i>S</i> ₁ Laminare Flammengeschwingigkeit	$\left[\frac{cm}{s}\right]$
S_p Theoretische Drallzahl der primären Luftkanäle	[-]
S_t Turbulente Flammengeschwingigkeit	$\left[\frac{cm}{s}\right]$
Sc_k Turbulente Schmidt-Zahl der turbulenten kinetischen Energie k	[-]
T Temperatur	[K]
t Zeit	[s]
T ₀ Vorwärmtemperatur	[K]
U Geschwindigkeit	$\left[\frac{m}{s}\right]$
u_0 Volumetrische Geschwindigkeit durch Düse	$\left[\frac{m}{s}\right]$
u_i Komponenten des Geschwindigkeitsvektors	$\left[\frac{m}{s}\right]$
u_t Turbulenten Schwankungsgeschwingigkeit	$\left[\frac{m}{s}\right]$

u_x Axiale Geschwindigkeit	$\left[\frac{m}{s}\right]$
u_y Radiale Geschwindigkeit	$\left[\frac{m}{s}\right]$
u_z Tangentiale Geschwindigkeit	$\left[\frac{m}{s}\right]$
u_{η} Kolmogorov-Geschwindigkeit	$\left[\frac{m}{s}\right]$
u_{\perp} Senkrechte Geschwindigkeitskomponente	$\left[\frac{m}{s}\right]$
<i>u</i> _{char} Charakteristische Geschwindigkeit	$\left[\frac{m}{s}\right]$
V Volumen	$[m^{3}]$
v Spezifisches Volumen	$\left[\frac{m^3}{kg}\right]$
$V_{k,i}$ Diffusionsgeschwindigkeit der Spezies k in Richtung i	$\left[\frac{m}{s}\right]$
x_i Komponenten des Ortsvektors	[<i>m</i>]
X_k Molenbruch der Spezies k	$\left[\frac{kmol}{kmol}\right]$
Y_k Massenbruch der Spezies k	$\left[\frac{kg}{kg}\right]$
$Y_{k,b}$ Massenbruch der Spezies k im verbranntem Gemisch	$\left[\frac{kg}{kg}\right]$
$Y_{k,u}$ Massenbruch der Spezies k im unverbranntem Gemisch	$\left[\frac{kg}{kg}\right]$
Z_j Massenbruch des Elements j	$\left[\frac{kg}{kg}\right]$

Abbildungsverzeichnis

1.1	Primärenergieverbrauch in Deutschland Stand 2013: 13.828 <i>PJ</i> (Quelle: Arbeitsgemeinschaft Energiebilanzen, Arbeitsgruppe Erneuerbare	
	Energien-Statistik).	1
1.2	Primärenergieverbrauch in Deutschland (Quelle: Arbeitsgemein-	_
	schaft Energiebilanzen).	2
3.1	Energiespektrum der isotropen Turbulenz [113]	13
4.1 4.2 4.3	Schematische Darstellung einer laminaren Flammenfront.Borghi-DiagrammAufnahme einer abgehobenen Flamme.	26 30 33
5.1	Anlage zur experimentellen Bestimmung der laminaren Flammen- geschwindigkeit anhand von planaren laminaren Vormischflammen (links) mit vergrößerter Abbildung des Brenners mit planarer lami-	
	narer Flamme (rechts) [110]	41
5.2	Darstellung zur Definition der Wahrscheinlichkeitsdichte (aus Hoff-	
F 0	$ \begin{array}{c} \text{mann} [40] \end{pmatrix} \dots $	48
5.3	β -verteilungsfunktion	54
6.1	Untersuchte Düse.	58
6.2	Untersuchte Düse im Detail-Schnitt.	59
6.3	Optisch zugängliche Brennkammer für erhöhte Drücke am Engler-	(0
6.4	Ontisch zugängliche Brennkammer für erhähte Drücke am Paul	60
0.4	Scherrer-Institut [36–16]	62
6.5	Prinzipskizze des Interferenzstreifenmodells nach Ruck [93].	64
6.6	Anordnung der Sonden des <i>LDA</i> -Messsystems [21].	65
6.7	Abhängigkeit der Lichtstreuung von Partikeldurchmesser d und	
	Strahlungswellenlänge $\lambda_{Strahlung}$ [19]	66
6.8	Diagramm des Reaktionspfades einer berechneten 1-D Methan-Luft	
	Flamme aus [72]	68
6.9	Emissionsspektrum der angeregten Radikale einer vorgemischen	
	Methan-Luft-Flamme aus [59].	68

7.1	Brenner der Cabra-Flamme [13]	74
7.2	Schematischer Aufbau der Cabra-Versuchsanordnung [13]	74
7.3	Oben: Chemische Tabelle der Reaktionsfortschrittsrate $\dot{\omega}_{Y_c}$ der Cabra Flamme ($Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2}$) (a) idealer Satzreaktor und (b) planare laminare Vormischflamme mit $Le \neq 1$. Unten: Chemische Tabelle der Reaktionsfortschrittsrate $\dot{\omega}_c$ der Cabra Flamme (c) idealer Satzreaktor und (d) planare laminare Vormischflamme mit $Le \neq 1$ aus [54]	78
7.4	Konturplot der Favre-gemittelten Temperatur der Cabra-Flamme. Für (a) und (b) wurde für die Transportgleichung der spezifische Massenbruch des Reaktionsfortschritts \tilde{Y}_c verwendet (vlg. (5.22)). (c) ist der Arbeit von Kern [54] entnommen. Als Transportgleichung wurde der Reaktionsfortschritt \tilde{c} transportiert (vgl. (7.5)). In (a) wur- de die chemische Tabelle mit dem idealen Satzreaktor erstellt. Bei (b) und (c) wurde die Chemie mit Hilfe der planaren laminaren Vormischflamme mit $Le \neq 1$ reduziert	80
7.5	Vergleich zwischen Messwerten und LES-Ergebnissen für die Favre gemittelte Temperatur (blau) und den Mischungsbruch (rot) der Cabra-Flamme auf der Symmetrie-Achse	81
7.6	Vergleich zwischen Messwerten und LES-Ergebnissen für die Favre gemittelte Temperatur der Cabra-Flamme für verschiedene radiale Positionen. LES (a) durchgezogene Linien, LES (b) gestrichelte Linien und Experiment (c) gepunktete Linien.	83
7.7	Vergleich zwischen Messwerten und LES-Ergebnissen für den Favre gemittelte Mischungsbruch der Cabra-Flamme für verschiedene ra- diale Positionen. LES (a) durchgezogene Linien, LES (b) gestrichelte Linien und Experiment (c) gepunktete Linien.	83
7.8	Rechengitter für die Simulationen der abgehobenen Flamme	85
8.1	Kontur der gemittelten Axialgeschwindigkeit mit schwarzen Iso- linien bei $\overline{u_x} = 0\frac{m}{s}$ (links) und Stromfunktion (rechts) aus LDA- Messungen des isothermen Strömungsfeldes	91
8.2	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (<i>PDF</i>) der axialen Geschwindig- keit u_x (a), der radialen Geschwindigkeit u_y (c) und der tangentialen Geschwindigkeit u_z (e) sowie der jeweils zugehörige Frequenzbereich für $R = 30 mm$ und $L = 90 mm$.	93
8.3	Vergleich zwischen Messwerten (Symbole), <i>URANS</i> - (gestrichelte Linien) und <i>LES</i> - (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die gemittelte axiale Geschwindigkeit $\overline{u_x}$ an verschiedenen axialen Positionen.	94

8.4	Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und <i>LES</i> - (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die axiale Geschwindigkeitsschwankung $\sqrt{\overline{u'_x u'_x}}$ an verschiedenen axialen Positionen	95
8.5	Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und <i>LES</i> - (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die gemittelte radiale Geschwindigkeit $\overline{u_y}$ an verschiedenen axialen Positionen.	97
8.6	Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und <i>LES</i> - (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die radiale Geschwindigkeitsschwankung $\sqrt{u'_y u'_y}$ an verschiedenen axialen Positionen	98
8.7	Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und <i>LES</i> - (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die gemittelte tangentiale Geschwindigkeit $\overline{u_z}$ an verschiedenen axialen Positionen.	99
8.8	Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und <i>LES</i> - (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die tangentiale Geschwindigkeitsschwan- kung $\sqrt{\overline{u'_z u'_z}}$ an verschiedenen axialen Positionen	100
8.9	Kontur der gemittelten Strömungsgeschwindigkeiten für die axia- le (oben) und die tangentiale (unten) Strömungsgeschwindigkeit aus den LDA-Messungen (jeweils links) und den <i>LES</i> -Rechnungen (jeweils rechts).	101
8.10	Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und <i>LES</i> - (durchgezoge- ne Linien) Ergebnissen für die Wurzel der turbulenten kinetischen Energie \sqrt{k} an verschiedenen axialen Positionen.	102
8.11	Vergleich der mit der volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 nor- mierten Axial-Geschwindigkeit $\overline{u_x}/u_0$ für die Verbrennung von Me- than bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> bei 1 % (durchgezoge- ne Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %- (gepunktete Linien) Druckverlust über die Düse.	104
8.12	Vergleich der mit der volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 nor- mierten Radial-Geschwindigkeit $\overline{u_y}/u_0$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> bei 1 % (durchgezo- gene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %- (gepunktete Linien) Druelwerlust über die Düse	105
		105

8.13	Vergleich der mit der volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 nor- mierten Tangential-Geschwindigkeit $\overline{u_z}/u_0$ für die Verbrennung von	
	4 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> bei 1 % (durchgezo- gene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %- (gepunktete Linien) Druckverlust über die Düse	106
8.14	Vergleich der mit der volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 nor-	
	mierten Quadratwurzel der turbulenten kinetischen Energie $\sqrt{k/u_0}$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> bei 1 % (durchgezogene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und	
	5 %- (gepunktete Linien) Druckverlust über die Düse.	106
8.15	Vergleich der gemittelten Luftzahl λ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 K bei 1 % (durchgezogene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %- (gepunktete Linien) Druckverlust	
	über die Düse	107
8.16	Über den Radius integrierter, zeitlich gemittelter normierter Quell- term des Reaktionsfortschritts $i = \overline{\dot{\omega}}_{Y_c}/(\overline{\dot{\omega}}_{Y_c})_{(max)}$ und Iso-Linien bei den gemittelten Reaktionsfortschritten $\overline{c} = 0, 1; 0, 5; 0, 9$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1, 9$, einem Betriebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> für verschiedene Druckverluste.	108
8.17	Vergleich des absoluten (oben) und des mit der volumetrischen Ge- schwindigkeit u_0 reduzierten (unten) gemittelten Quellterms des Re- aktionsfortschritts $\overline{\omega}_{Y_c}$ auf der Symmetrieachse für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> bei 1 % (durchgezo- gene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %- (gepunktete Linien)	
	Druckverlust über die Düse.	109
8.18	Kontur des instationären Reaktionsfortschritts <i>c</i> und die Isolinien für 10 % und 90 % des maximalen instationären Quellterms des Reaktionsfortschritts $\overline{\omega}_{Y_c}$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Luft-	
8.19	Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> für verschiedene Druckverluste Kontur der lokalen instationären Luftzahl λ und die Isolinien für 10 % und 90 % des maximalen instationären Quellterms des Re- aktionsfortschritts $\overline{\omega}_{Y_c}$ für die Verbrennung von Methan bei einer	111
	Luttzahl von $\lambda = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Lutt- Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> für verschiedene Druckverluste	114

8.20	Einordnung der untersuchten Methanflammen mit einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1, 9$, einem Betriebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> für verschiedene Druckverluste in das Borghi-Diagramm.	116
8.21	Düsenautrittsgeschwinidgkeit u_0 in Abhängigkeit vom Druckverlust $\Delta p / p_0$ für verschiedene Luft-Temperaturen.	119
8.22	Messergebnisse der normierten Intensität von OH^* für die Verbren- nung von Methan (jeweils linker Teil der Flamme) und Jet A-1 (jeweils rechter Teil der Flamme) bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Be- triebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> für verschiedene Druckverluste. Bei der Verbrennung von Jet A-1 ist der Fortschritt der Spray-Verdampfung anhand von weißen Isolinien dargestellt.	120
8.23	Einfluss des Druckverlustes auf die Abhebehöhe bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9,573$ K Luft-Vorwärmtemperatur für Methan und Jet A-1 bei verschiedenen Betriebsdrücken.	122
8.24	Messergebnisse der normierten Intensität von OH^* für die Verbren- nung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,49$, einem Betriebs- druck von 3 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> und einem Druckverlust von 3 % für verschiedene Kühlluftmassenströme	123
8.25	Messergebnisse der normierten instationären Intensität von OH^* - Chemilumineszenz (links) und der normierten instationären OH - LIF Intensität für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 <i>bar</i> , einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 <i>K</i> für verschiedene Druckverluste	125
8.26	Einfluss des Betriebsdrucks auf die Abhebehöhe bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1, 9, 3$ % Druckverlust für Methan und Jet A-1 bei unterschiedlichen Luft-Vorwärmtemperaturen.	126
8.27	Messergebnisse der normierten Intensität von OH^* für die Verbren- nung von Methan (jeweils linker Teil der Flamme) und Jet A-1 (je- weils rechter Teil der Flamme) bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Durckverlust von 3 %, einer Luftvorwärmtemperatur von 673 <i>K</i> für verschiedene Drücke. Bei der Verbrennung von Jet A-1 ist der Fortschritt der Spray-Verdampfung anhand von weißen Isolinien dargestellt.	128

8.28	Messergebnisse der normierten Intensität von OH^* für die Verbren-	
	nung von Methan (jeweils linker Teil der FLamme) und Jet A-1	
	(jeweils rechter Teil der Flamme) bei einem Betriebdruck von 5 bar,	
	einem Druckverlust von 3 % und einer Luft-Vorwärmtemperatur von	
	573 <i>K</i> bei verschiedenen Luftzahlen λ). Bei der Verbrennung von Jet	
	A-1 ist der Fortschritt der Spray-Verdampfung anhand von weißen	
	Isolinien dargestellt.	129
8.29	Berechnete laminare Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit von	
	der Luftzahl λ bei einer Vormischflamme mit einem Absolutdruck	
	von 3 <i>bar</i> und einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 K für Methan	
	(blaue Kreise) und Jet A-1 (rote Quadrate).	130
8.30	Einfluss der Luftzahl λ auf die Abhebehöhe bei einer Luft-Vorwärmtem	peratur
	von 573 K, einem Druckverlust von 3 % für Methan und Jet A-1 bei	-
	verschiedenen Drücken.	131
8.31	Messergebnisse der normierten Intensität von OH* für die Verbren-	
	nung von Methan (jeweils linker Teil der Flamme) und Jet A-1 (jeweils	
	rechter Teil der Flamme) bei $\lambda = 1,91$, einem Druckverlust von 3 %	
	über die Düse, 4 <i>bar</i> Betriebsdruck für 473, 523, 573, 623 und 673 <i>K</i>	
	(von links nach rechts). Bei der Verbrennung von Jet A-1 ist der	
	Fortschritt der Spray-Verdampfung anhand von weißen Isolinien	
	dargestellt.	132
8.32	Mittlere Düsenaustrittsgeschwindigkeit u_0 in Abhängigkeit von der	
	Luft-Vorwärmtemperatur für verschiedene Druckverluste	133
8.33	Laminare Flammengeschwindigkeit von Methan in Abhängigkeit	
	von der Luft-Vorwärmtemperatur für verschiedene Drücke.	134
8.34	Einfluss der Luft-Vorwärmtemperatur auf die Abhebehöhe bei einem	
	$\lambda = 1,91,3$ % Druckverlust für Methan und Jet A-1 bei unterschied-	
	lichen Betriebsdrücken.	135

Tabellenverzeichnis

3.1 3.2	Die dimensionslosen Koeffizienten des Standard- k - ϵ -Modells Die dimensionslosen Koeffizienten des SST-Modells	20 21
5.1 5.2	Konstanten der Transportgleichungen des Mischungsbruchs Konstanten der Transportgleichungen des charakteristischen Mas-	44
	senbruchs.	46
7.1 7.2	Randbedingungen der Cabra FlammeRandbedingungen Für die LES der Cabra-Flamme	75 77
7.3	Randbedingungen für die LES der abgehobenen Flammen	87
8.1 8.2	Physikalische Randbedingungen für die reaktiven Simulationen Instationäre Flammenoberfläche aus den reaktiven Simulationen bei verschiedenen Druckverlusten (instationäre Flammenoberfläche in	103
83	Abbildung 8.18 dargestellt).	110
0.5	digkeit aus den reaktiven Simulationen.	113
8.4	Randbedingungen und berechnete Eigenschaften der laminaren Flam- me	115
8.5	Eigenschaften der Flammenfront aus den reaktiven Simulationen.	115
8.6	Vergleich der turbulenten Flammengeschwindigkeiten aus den reak-	
	tiven Simulationen	117
8.7	Abschätzung des konvektiven Wärmeverlusts der Brennkammer bei	
	der Verbrennung mit Methan unter Variation des Druckverlustes	124
8.8	Abschätzung des konvektiven Wärmeverlusts der Brennkammer bei der Verbrennung mit Methan unter Variation des Absolutdrucks	127

1 Einleitung

Während der Primärenergieverbrauch in Deutschland seit 1990 leicht gesunken ist, nimmt der weltweite Energiebedarf stetig zu. Dabei ist die Verbrennung - eine exotherme chemische Reaktion eines brennbaren Materials mit Luft oder Sauerstoff - immer noch der meist genutzte Prozess, um elektrische Energie oder Wärme zu erzeugen und Mobilität zu ermöglichen. Trotz des umfassenden Ausbaus von erneuerbaren Energien, werden in Deutschland immer noch zu 81% fossile Energieträger umgesetzt (Abbildung 1.1 links). Neben diesem erheblichen Anteil kommt hinzu, dass auch im Bereich der sogenannten erneuerbaren Primärenergieträger feste und gasförmige Biomasse, Biokraftstoffe, sowie Abfälle und Deponiegas durch Verbrennungsprozesse in Elektrizität und Wärmeenergie umgesetzt werden (Abbildung 1.1 rechts).



Abbildung 1.1: Primärenergieverbrauch in Deutschland Stand 2013: 13.828 *PJ* (Quelle: Arbeitsgemeinschaft Energiebilanzen, Arbeitsgruppe Erneuerbare Energien-Statistik).

Die Energiegewinnung durch Verbrennungsvorgänge hat also noch lange nicht ausgedient. Der Umsatz von Mineralöl ist zwar in den letzten Jahrzehnten rückläufig, jedoch nimmt dafür der Umsatz an gasförmigen fossilen und erneuerbaren



Abbildung 1.2: Primärenergieverbrauch in Deutschland (Quelle: Arbeitsgemeinschaft Energiebilanzen).

Energieträgern zu (Abbildung 1.2). Aufgrund der wachsenden Vielfalt an Energieträgern besteht zunehmend der Bedarf an Verbrennungssystemen mit entsprechender Brennstoff-Flexibilität. In dieser Arbeit wurde daher ein Verbrennungssystem mit abgehobener Flamme untersucht, welches sowohl mit gasförmigen als auch flüssigen Brennstoffen betrieben werden kann.

Neben der Brennstoff-Flexibilität ist das wichtigste Ziel in der heutigen Verbrennungsforschung die Vermeidung von luftverunreinigenden Stoffen, die nachteilige Wirkung auf Mensch und Umwelt haben. Neben den Hauptprodukten Kohlendioxid CO_2 und Wasser H_2O enthält das Abgas der Verbrennungsreaktion unter anderem auch Kohlenmonoxid CO, Schwefeldioxid SO_2 , unverbrannte Kohlenwasserstoffe und Stickoxide NO_X . Die Politik hat es sich zur Aufgabe gemacht, die Emission von Luftschadstoffen durch Senkung der gesetzlich zugelassenen Emissionshöchstmengen zu verringern. Während für stationäre Gasturbinen eine Abgasnachbehandlung vorgesehen werden kann, müssen die Emissionsgrenzwerte bei Flugtriebwerken über eine geeignete Verbrennungsführung eingehalten werden.

In vorangegangenen Arbeiten [50, 32] konnte bereits gezeigt werden, dass das im Rahmen dieser Arbeit untersuchte Verbrennungssystem in der Lage ist, sehr niedrige NO_X -Emissionen zu erreichen. Bei abgehobenen nicht vorgemischten Flammen gibt es zwischen Düsenaustritt und Haupt-Brennstoff-Umsatzzone einen Bereich, in dem weitgehend keine Reaktion stattfindet. Somit kann, im Gegensatz zu auf der Düse aufsitzenden Flammen, in diesem Bereich flüssiger Brennstoff vorverdampfen. Weiterhin können sich flüssiger als auch gasförmiger Brennstoff vor dem Eintritt in die Hauptreaktionszone mit dem Oxidator vorvermischen. Durch diese homogenere Vermischung gibt es weniger Temperaturspitzen im Bereich der Reaktionszone, wodurch es zu geringerer thermischer NO_X -Bildung kommt.

Kasabov [50] stellte fest, dass die NO_X-Emissionen in Zusammenhang mit dem Ort der Flammenstabilisierung stehen. Um die Stickoxid-Emissionen vorhersagen zu können, muss man also den Ort der Flammenstabilisierung kennen. Obwohl schon sehr viele Forschungsarbeiten durchgeführt wurden, ist die Phänomenologie der abgehobenen Flammen vor allem in Hinblick auf das Stabilitätsverhalten noch nicht vollständig verstanden. Im Besonderen der Unterschied im Stabilitätsverhalten zwischen flüssigen und gasförmigen Brennstoffen wurde bisher noch nicht genau beschrieben. Diese Kenntnislücke soll mit der vorliegenden Arbeit geschlossen werden. Es wurde dafür der Einfluss einer Vielzahl von Betriebsbedingungen, wie der Druckverlust über die Düse, der Absolutdruck, die Vorwärmtemperatur der Verbrennungsluft und die Stöchiometrie auf die Abhebehöhe experimentell untersucht. Um über die experimentellen Untersuchungen hinaus einen besseren Einblick in das Strömungs-, Mischungs- und Temperaturfeld zu erhalten, wurden begleitende CFD-Simulationen der Flamme durchgeführt. Das Ziel dieser Arbeit ist ein phänomenologischer Vergleich der abgehobenen Verbrennung beim Einsatz flüssiger und gasförmiger Brennstoffe.

2 Grundgleichungen reagierender Gasströmungen

Zur Beschreibung der Gasphase reagierender Strömungen dienen die Bilanzgleichungen von Massen-, Impuls-, Spezies- und Energieerhaltung. In diesem Kapitel werden diese Bilanzgleichungen eingeführt. Herleitungen und Ausführungen dieser Gleichungen sind in der Literatur unter anderem bei Pope [84], Bird, Stewart und Lightfood [90], Schlichting [96], Williams [114] und Poinsot und Veynante [83] zu finden.

2.1 Bilanz der Gesamtmasse

Die Erhaltung der Gesamtmasse, auch Kontinuitätsgleichung, kann in der Index-Schreibweise unter Verwendung der einsteinschen Summenkonvention wie folgt beschrieben werden:

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

2.2 Bilanz des Impulses

Die Impulsbilanz ist für reaktive und isotherme Strömungen identisch und lautet:

$$\frac{\partial(\rho u_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_i} = -\frac{\partial p}{\partial x_j} + \frac{\tau_{ij,lam}}{\partial x_i} + f_j$$
(2.2)

Dabei werden die äußeren auf des Volumen wirkende Kräfte durch f_j beschrieben. In diesen sogenannten Navier-Stokes-Gleichungen sind die viskosen Eigenschaften eines Fluids durch den laminaren viskosen Spannungstensor $\tau_{ij,lam}$ ausgedrückt, der für Newton'sche Fluide durch Gleichung (2.3) definiert ist:

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

mit der dynamischen Viskosität μ und dem Kronecker-Symbol δ_{ij} . Durch die Temperaturabhängigkeit von dynamischer Viskosität und Dichte hat eine chemische Reaktion implizit einen großen Einfluss auf die Impulsbilanz Gleichung (2.2).

2.3 Bilanz der Speziesmassen

Die Bilanzgleichungen für die Massenbrüche Y_k der Spezies k in einem System mit N_k Spezies ergibt sich zu:

$$\frac{\partial \left(\rho Y_{k}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_{i} Y_{k}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial j_{i}^{k}}{\partial x_{i}} + \dot{\omega}_{k} \qquad k = 1, ..., N_{k}$$

$$(2.4)$$

Der Diffusionsstrom j_i^k ergibt sich unter Vernachlässigung der Diffusion aufgrund von Temperatur-Gradienten nach dem Fick'schen Gesetz der Diffusion zu:

$$j_i^k = -\frac{\mu_l}{Sc_k} \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \tag{2.5}$$

Hierin beschreibt die Schmidt-Zahl Sc_k das Verhältnis aus diffusivem Impuls- und Stofftransport:

$$Sc_k = \frac{\mu_l}{\rho \cdot D_k} \tag{2.6}$$

Die Reaktionsrate $\dot{\omega}_k$ beschreibt die Änderung der spezifischen Speziesdichte der Spezies k durch chemische Reaktion. Für ein System aus N_k Spezies gilt:

$$\sum_{k=1}^{N_k} Y_k = 1, \quad \sum_{k=1}^{N_k} Y_k j_i^k = 0, \quad \sum_{k=1}^{N_k} \dot{\omega}_k = 0$$
(2.7)

2.4 Bilanz der Elementmassen

Bei einer chemischen Reaktion werden chemische Elemente weder gebildet noch verbraucht. Daher gibt es bei der Bilanzgleichung der Elementmassen keinen Quellterm. Für die Bilanzgleichung der Massenbrüche der chemischen Elemente Z_j gilt:

$$\frac{\partial \left(\rho Z_{j}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\rho u_{i} Z_{j}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial j_{i}^{j}}{\partial x_{i}}$$

$$(2.8)$$

2.5 Bilanz der Energie

Neben der Massen- und Impulserhaltung muss bei reagierenden turbulenten Strömungen auch die Erhaltung der Energie betrachtet werden. Nach dem ersten Hauptsatz der Thermodynamik ergibt sich die innere Energie eines Volumenelements aus der Summe der zu- und abgeführten Wärme und der am Volumenelement verrichteten Arbeit. Folglich gilt für die Bilanz der inneren Energie *e*:

$$\frac{\partial(\rho e)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i e)}{\partial x_i} = -\frac{\partial j_i^q}{\partial x_i} + (\tau_{ij,lam} - p\delta_{ij})\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{q}_R + \rho \sum_{k=1}^{N_k} Y_k f_{k,i} V_{k,i}$$
(2.9)

Der letzte Summand der rechten Seite beschreibt die Leistung, welche durch viskose Kräfte und Volumenkräfte der Spezies *k* generiert wird. Diese wird im Folgenden vernachlässigt.

Die innere Energie e lässt sich über Gleichung (2.10) mit der spezifische Enthalpie h in Zusammenhang bringen.

$$h = e + \frac{p}{\rho} \tag{2.10}$$

Die spezifische Enthalpie h für ideale Gase wird für N_k Spezies nach Gleichung (2.11) berechnet.

$$h = \sum_{k=1}^{N_k} h_k Y_k \tag{2.11}$$

Die spezifische Enthalpie h_k einer Spezies k ergibt sich aus der Summe der spezifischen Bildungsenthalpie $h_{j,k}^{\circ}$ bei Standardtemperatur T° und der fühlbaren Wärme

$$h_{k} = h_{j,k}^{\circ} + \int_{T^{\circ}}^{T} c_{p,k}(T) dT, \qquad (2.12)$$

wobei $c_{p,k}$ die spezifische Wärmekapazität der Spezies k bei konstantem Druck ist. Mit der Definition (2.12) und dem Zusammenhang zwischen innerer Energie *e* und spezifischer Enthalpie *h* (2.10) folgt die Bilanzgleichung der spezifischen Enthalpie *h*:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i h)}{\partial x_i} = \frac{Dp}{Dt} - \frac{\partial j_i^q}{\partial x_i} + (\tau_{ij,lam} - p\delta_{ij})\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \dot{q}_R$$
(2.13)

Der Quellterm \dot{q}_R berücksichtigt eine Energiezufuhr oder -abfuhr, die zum Beispiel durch Stahlung verursacht wird. Die gesamte Enthalpie bleibt nach den Gleichungen (2.12) und (2.11) durch chemische Reaktion unverändert.

Der Wärmestrom j_i^q setzt sich aus einem konduktiven $j_i^{q,c}$ und einem massendiffusiven $j_i^{q,d}$ Wärmestrom zusammen.

$$j_i^q = j_i^{q,c} + j_i^{q,d} (2.14)$$

Für die Wärmeleitung nach dem Fourier'schen Wärmeleitungsgesetz gilt:

$$j_i^{q,c} = -\lambda_{\text{Wärme}} \frac{\partial T}{\partial x_i}$$
(2.15)

Der Enthalpiestrom aufgrund von Diffusion der Spezies k unterschiedlicher Enthalpie h_k wird durch folgende Gleichung berücksichtigt:

$$j_i^{q,d} = \sum_{k=1}^{N_k} h_k j_i^k$$
(2.16)

Mit der Einführung Prandtl-Zahl

$$Pr = \frac{\mu_l \cdot c_p}{\lambda_{\text{Warme}}},\tag{2.17}$$

einer dimensionslosen Kennzahl, welche die Analogie zwischen Wärme- und Impulstransport beschreibt, und den Gleichungen (2.14) bis (2.16) sowie (2.5) folgt für den Wärmestrom:

$$j_i^q = -\frac{\mu_l}{Pr} \left[\frac{\partial h}{\partial x_i} + \sum_{k=1}^{N_k} \left(\frac{Pr}{Sc_k} - 1 \right) h_k \frac{\partial Y_k}{\partial x_i} \right]$$
(2.18)

Die Lewis-Zahl $Le_k = \frac{P_r}{Sc_k}$ beschreibt die Analogie zwischen Wärme- und Stofftransport. In Verbrennungsprozessen wird häufig angenommen, dass die Lewis-Zahl eins ist. Dadurch entfällt der zweite Term von Gleichung (2.18).

3 Modellierung turbulenter Strömungen

Bei bewegten Fluiden kann man zwischen laminaren und turbulenten Strömungen unterscheiden. Um abschätzen zu können, ob es sich bei einer Strömung um eine turbulente Strömung handelt, wurde die dimensionslose Reynolds-Zahl *Re* eingeführt. Diese beschreibt das Verhältnis zwischen Trägheitskraft und Reibungskraft [88, 89]:

$$Re = \frac{u_{char} \cdot l_{char}}{\nu} \tag{3.1}$$

In Gleichung (3.1) ist u_{char} die charakteristische Geschwindigkeit, l_{char} ein charakteristisches Längenmaß und ν die kinematische Viskosität. Solange die Reynolds-Zahl einen bestimmten von der Geometrie abhängigen Wert nicht überschreitet, ist die Strömung ebenmäßig und frei von Verwirbelungen. Dieser sogenannte laminare Strömungszustand ist stationär, wenn sich die Randbedingungen nicht ändern. Überschreitet die Reynolds-Zahl einen bestimmten Wert, kommt es zu turbulenten Schwankungen in der Strömung.

Es wird angenommen, dass in turbulenten Strömungen ein großes Spektrum an wirbelähnlichen Strukturen unterschiedlicher Größen vorliegt. In diesem Zusammenhang entwickelte Kolmogorov die Theorie der turbulenten Energiekaskade [71]. Zunächst werden in turbulenten Strömungen großskalige Wirbel gebildet, deren Größe geometrieabhängig sind. Diese großen Wirbelstrukturen, die einen Großteil der turbulenten Energie transportieren, werden durch das integrale Längenmaß l_t charakterisiert. Die in größeren Wirbelstrukturen enthaltende Energie aus dem sogenannten Produktionsbereich wird zu immer kleineren Wirbelstrukturen in den Inertialbereich des Energiespektrums übertragen. Die Wirbel zerfallen zu immer kleineren Wirbeln. Die kleinsten Wirbel werden Kolmogorov Wirbel genannt und haben das Kolmogorov-Längenmaß l_η . Bei der Dissipation wird die kinetische Energie der kleinsten Wirbel in innere Energie umgewandelt. Für die Verhältnisse der Kolmogorov-Mikromaße zu den Makromaßen gilt nach Anderson [4]:

$$\frac{l_{\eta}}{l_t} = Re_t^{-\frac{3}{4}},\tag{3.2}$$

$$\frac{u_{\eta}}{u_t} = Re_t^{-\frac{1}{4}},\tag{3.3}$$

$$\frac{\tau_{\eta}}{\tau_t} = Re_t^{-\frac{1}{2}}.\tag{3.4}$$

Die turbulente Reynoldszahl Re_t wird dabei mit den Makromaßen der großskaligen Wirbelstrukturen, mit der Länge l_t und der Geschwindigkeit $u_t(l_t)$ gebildet:

$$Re_t = \frac{u_t \cdot l_t}{v_l}.\tag{3.5}$$

Die Größe der Kolmogorov Wirbel wird von den viskosen Reibungskräften vorgegeben. Bei gleicher Geometrie ergeben sich bei höheren Reynolds-Zahlen kleinere Wirbel. Hierdurch steigt der numerische Aufwand, sollen in Simulationen die kleinsten Wirbel räumlich und zeitlich aufgelöst werden.

Bei der numerischen Simulation turbulenter Strömungen gibt es verschiedene Methoden zum Umgang mit der Turbulenz. Diese Methoden können zunächst danach klassifiziert werden, ob die zugrundeliegenden Gleichungen einer Mittelung unterzogen wurden. Die Direkte Numerische Simulation (DNS) ist eine modellierungsfreie Methode, um Strömungen zu simulieren. Dabei werden die in Kapitel 2 beschriebenen Bilanzgleichungen direkt gelöst. Bis heute ist die Anwendung der DNS für technische Systeme sehr aufwendig und teuer, sie dient meist als rein akademischer Ansatz. Bei der Grobstruktursimulation, der sogenannten Large-Eddy-Simulation (LES), wird der Bereich der großen Wirbel numerisch aufgelöst, während die kleineren Wirbel modelliert werden.

Bei der LES sollte das Grobstrukturfeld, welches numerisch direkt aufgelöst wird, den Produktionsbereich und einen Inertialbereich des Energiespektrums der Turbulenz beinhalten. Die kleineren Turbulenzstrukturen können aufgrund der Isotropie der kleinen Turbulenzstrukturen modelliert werden.


Abbildung 3.1: Energiespektrum der isotropen Turbulenz [113].

Um bei der LES eine Trennung zwischen aufgelösten und nicht-aufgelösten Turbulenzstrukturen zu erreichen, werden Filterfunktionen verwendet. Wie die DNS-Methode ist die LES-Methode ein inhärent instationäres und dreidimensionales Verfahren. Jedoch sind die Anforderung der LES an die räumliche und zeitliche Auflösung geringer als bei der DNS.

Bei RANS-Simulationen wird das gesamte turbulente Spektrum modelliert. Es werden die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen (RANS) gelöst.

3.1 Reynolds-Mittelung

Bei der auf Reynolds [89] zurückgehenden Mittelung wird der Momentanwert einer fluktuierenden turbulenten Größe ϕ in einen zeitlich gemittelten Anteil $\overline{\phi}$ und einen zeitlich schwankenden Anteil ϕ' aufgeteilt

$$\phi(x_i, t) = \overline{\phi}(x_i) + \phi'(x_i, t), \tag{3.6}$$

wobei gilt:

$$\overline{\phi'(x_i,t)} = 0. \tag{3.7}$$

Führt man diese Zerlegung für die in Kapitel 2 vorgestellten Erhaltungsgleichungen ein und mittelt die Bilanzgleichungen anschließend zeitlich, so erhält man die sogenannten Reynolds-gemittelten Gleichungen. Auf die Navier-Stokes Gleichungen (Impulserhaltungsgleichungen) angewandt, ergeben sich die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes Gleichungen (RANS).

3.2 Favre-Mittelung

Da es infolge von chemischen Reaktion zu großen Dichtegradienten kommen kann und die Dichteschwankungen mit anderen fluktuierenden Größen korreliert sind, werden in der Verbrennungsmodellierung bevorzugt die dichtegwichteten Mittelwerte nach Favre [27] angewendet:

$$\widetilde{\phi} = \frac{\overline{\rho\phi}}{\overline{\rho}} \tag{3.8}$$

Analog zur Reynolds-Zerlegung kann der Momentanwert einer fluktuierenden turbulenten Größe ϕ in einen Favre-Mittelwert $\tilde{\phi}$ und einen Favre-Schwankungswert ϕ'' zerlegt werden:

$$\phi(x_i, t) = \widetilde{\phi}(x_i) + \phi''(x_i, t), \tag{3.9}$$

dabei gilt:

$$\widetilde{\phi}''(x_i, t) = 0 \tag{3.10}$$

Die Umrechnung von Favre-gemittelten in Reynolds-gemittelte Größen erfolgt nach folgenden Zusammenhängen:

$$\widetilde{\phi} = \overline{\phi} + \frac{\overline{\rho'\phi'}}{\overline{\rho}}, \qquad \overline{\phi''} = -\frac{\overline{\rho'\phi'}}{\overline{\rho}}, \qquad \overline{\phi} = \widetilde{\phi} + \overline{\phi''}, \qquad \phi'' = \phi' + \overline{\phi''} \qquad (3.11)$$

Die Einführung der Favre-Zerlegung und die anschließende zeitliche Mittelung der Bilanzgleichungen führt zu den Favre-gemittelten Bilanzgleichungen, die für RANS-Verbrennungssimulationen angewendet werden. Die Favre-gemittelten und die Reynolds-gemittelten Erhaltungsgleichungen stimmen überein, wenn die Reynolds-Mittelung der Dichtefluktuationen vernachlässigt werden kann.

3.3 Favre-Filterung

Für die LES muss eine Filterung der Bilanzgleichungen (Kapitel 2) vorgenommern werden, um die Trennung der turbulenten Skalen zu erreichen. Hierbei wird der Grobstruktur-Anteil ("grid scale") direkt aufgelöst und berechnet. Der Feinstruktur-Anteil ("sub-grid scale") hingegen wird nicht aufgelöst und muss modelliert werden. Fröhlich [33] stellt eine Übersicht verschiedener Filteroperationen vor. Der meist verwendete Ansatz ist die räumliche Filteroperation [63]. Eine Strömungsgröße ϕ kann in einen Favre-gefilterten Anteil $\tilde{\phi}$ und einen zu modellierenden fluktuierenden Anteil ϕ''_{sgs} aufgeteilt werden:

$$\phi(x_i, t) = \widetilde{\phi}(x_i, t) + \phi''_{sgs}(x_i, t)$$
(3.12)

3.4 Gemittelte Bilanzgleichungen

Durch die Anwendung der Favre-Zerlegung (Kapitel 3.2) der Momentanwerte der fluktuierenden turbulenten Größen auf die Bilanzgleichungen und eine anschließende zeitliche Mittelung ergeben sich die folgenden gemittelten Bilanzgleichungen:

Bilanz der Gesamtmasse

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \tag{3.13}$$

Bilanz des Impulses

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u}_{j})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{u}_{j})}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_{j}} + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\overline{\tau}_{ij,l} - \overline{\rho}\widetilde{u_{i}''u_{j}''}\right) + \overline{f}_{j}$$
(3.14)

Bilanz der Speziesmassen

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_{k}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{Y}_{k}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial\overline{j_{i}^{k}}}{\partial x_{i}} - \frac{\partial \left(\overline{\rho}u_{i}\widetilde{Y}_{k}''\right)}{\partial x_{i}} + \overline{\dot{\omega}}_{k} \qquad k = 1, ..., N_{k}$$
(3.15)

Bilanz der Enthalpie

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{h})}{\partial x_{i}} = \frac{D\overline{p}}{Dt} - \frac{\partial\overline{j}_{i}^{q}}{\partial x_{i}} + \overline{\tau_{ij,lam}}\frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} - \frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u_{i}''h''})}{\partial x_{i}} + \overline{\dot{q}_{R}}$$
(3.16)

mit

$$\frac{\overline{Dp}}{Dt} = \frac{\partial \overline{p}}{\partial t} + \overline{u_i \frac{\partial p}{\partial x_i}} = \frac{\partial \overline{p}}{\partial t} + \widetilde{u_i} \frac{\partial \overline{p}}{\partial x_i} + \overline{u_i'' \frac{\partial p}{\partial x_i}}$$
(3.17)

3.5 Gefilterte Bilanzgleichungen

Durch die Favre-Filterung (3.3) der in Kapitel 2 eingeführten Bilanzgleichungen werden die Variablen in den Grobstruktur-Anteil und den Feinstruktur-Anteil getrennt. Für die *LES* ist diese Auftrennung notwendig, da nur der Grobstruktur-Anteil direkt berechnet wird, während der Feinstruktur-Anteil modelliert wird.

Aus der Favre-Filterung ergeben sich folgende Gleichungen:

Bilanz der Gesamtmasse

$$\frac{\partial \overline{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial (\overline{\rho} \widetilde{u}_i)}{\partial x_i} = 0 \tag{3.18}$$

Bilanz des Impulses

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u}_j)}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u}_i\widetilde{u}_j)}{\partial x_i} = -\frac{\partial\overline{p}}{\partial x_j} + \frac{\partial\overline{\tau}_{ij,l}}{\partial x_i} - \frac{\partial\overline{\rho}\widetilde{\Pi_{ij_{sgs}}}}{\partial x_i}$$
(3.19)

Bilanz der Speziesmassen

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_{k}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{Y}_{k}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial \overline{j}_{i}^{\overline{k}}}{\partial x_{i}} - \frac{\partial (\overline{\rho}(u_{i}^{\widetilde{\prime}}\widetilde{Y}_{k}^{\prime\prime}))}{\partial x_{i}} + \overline{\omega}_{Y_{k}} \qquad k = 1, ..., N_{k}$$
(3.20)

Bilanz der Enthalpie

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{h})}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{h})}{\partial x_{i}} = \overline{\frac{Dp}{Dt}} - \frac{\partial\overline{j_{i}^{q}}}{\partial x_{i}} + \overline{\tau_{ij,lam}}\frac{\partial u_{i}}{\partial x_{j}} - \frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u_{i}''h''})}{\partial x_{i}}$$
(3.21)

3.6 Turbulenz-Modelle

In den in Kapitel 3.4 vorgestellten gemittelten Bilanzgleichungen treten unbekannte Korrelationen auf. Um diese Korrelationsterme zu schließen werden die sogenannten Turbulenz-Modelle verwendet. Für die *RANS*-Modelle müssen die Reynoldsspannungen modelliert werden. Für die *LES* werden nur die kleinskaligen, dissipativen Wirbel modelliert. Die großskaligen Wirbel werden direkt gelöst. Für die *DNS* werden die in Kapitel 2 dargestellten Bilanzgleichungen direkt gelöst, es findet keine Modellierung statt.

3.6.1 RANS-Modelle

Durch die Mittelung der Bilanzgleichungen ergeben sich zusätzliche Korrelationen. Diese sogenannten Reynolds-Spannungen und Reynold-Flüsse müssen modelliert werden. Bei der numerischen Simulation mit Hilfe der Reynoldsgemittelten Navier-Stokes-Gleichungen gibt es zwei Gruppen von statistischen Turbulenzmodellen, um den Reynolds-Spannungstensor zu berechnen: die Wirbelviskositätsmodelle und die Reynolds-Spannungsmodelle.

Die Reynolds-Spannungsmodelle basieren nicht auf der Boussinesq-Annahme. Statt dessen werden für den Spannungstensor Transportgleichungen aus den Navier-Stokes Gleichungen abgeleitet.

Bei den Wirbelviskositätsmodellen werden der Spannungstensor, beziehungsweise die Reynolds-Spannungen und Reynolds-Flüsse, direkt modelliert. Sie beruhen auf der Boussinesq-Annahme [45], nach der eine Ähnlichkeit der Reynolds-Spannungen und der molekularen Schubspannungen besteht. Analog zur molekularen Viskosität des Stokes'schen Reibungssatzes wird eine turbulente Viskosität μ_{turb} definiert, die in diesem Fall keine Stoffgröße, sondern eine Strömungsgröße darstellt. Es wird die Annahme getroffen, dass die turbulenten Schubspannungen proportional zur Wirbelviskosität und zum Gradienten der mittleren Geschwindigkeiten sind:

$$\tau_{ij,t} = -\overline{\rho} \widetilde{u_i'' u_j}'' = \mu_t \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{i,j} \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k} \right) - \frac{2}{3} \overline{\rho} k \delta_{i,j}$$
(3.22)

Durch die Boussinesq-Annahme werden die sechs unbekannten Reynolds-Spannungen durch eine unbekannte Wirbelviskosität μ_{turb} ersetzt. Durch die Einführung der Wirbelviskosität verlagert sich das Problem von der Berechnung der sechs unbekannten Korrelationen auf die Berechnung der turbulenten Wirbelviskosität, was das Schließungsmodell vereinfacht. Der Rechenaufwand sinkt im Vergleich zu anderen Modellierungsansätzen.

Es wird jedoch die Vereinfachungen getroffen, dass ein linearer Zusammenhang zwischen Reynolds-Spannungen und dem Gradient der mittleren Geschwindigkeit besteht. Zudem wird nur eine Wirbelviskosität für alle Reynolds-Spannungen modelliert und somit die Isotropie der Wirbelviskosität vorausgesetzt. Diese Vereinfachungen treffen jedoch nicht auf die Reynolds-Spannungen zu.

Die zuerst von Prandtl [86] eingeführte turbulente Viskosität μ_t wird durch ein charakteristisches Geschwindigkeits- u_t und Längenmaß l_t modelliert:

$$\mu_t \propto \overline{\rho} \cdot l_t \cdot u_t \tag{3.23}$$

Die turbulente Geschwindigkeit u_t kann dabei aus der turbulenten, kinetischen Energie k bestimmt werden:

$$u_t = \sqrt{\frac{2}{3}k} \tag{3.24}$$

Mit dem turbulenten Längenmaß

$$l_t = C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \tag{3.25}$$

folgt für die Wirbelviskosität;

$$\mu_t = \overline{\rho} C_\mu \frac{k^2}{\epsilon} \tag{3.26}$$

Die Wirbelviskositätsmodelle werden nach Anzahl der Differenzialgleichungen, die zusätzlich zu den Navier-Stokes-Gleichungen gelöst werden, unterteilt. Dabei ergeben sich die Nullgleichungsmodelle (algebraische Modelle), die Eingleichungsmodelle, die Zweigleichungsmodelle und zum Teil auch Dreigleichungsmodelle [91].

Die Nullgleichungsmodelle basieren häufig auf dem Prandtl'schen Mischungswegansatz. Für den Prandtl'schen Mischungswegansatz werden die algebraischen Zusammenhänge zwischen den mittleren Strömungsgrößen und der Wirbelviskosität bestimmt.

Bei den Eingleichungsmodellen wird neben den gemittelten Impulsgleichungen eine differentielle Transportgleichung für die Wirbelviskosität gelöst.

Bei den in dieser Arbeit verwendeten Zweigleichungsmodellen werden zwei weitere Transportgleichungen aufgestellt, um das turbulente Zeit- und Längenmaß zu bestimmen. Weit verbreitet ist hierbei das $k - \epsilon$ -Modell, bei dem davon ausgegangen wird, dass ein Gleichgewicht zwischen Produktion turbulenter kinetischer Energie k und deren Dissipation ϵ besteht. Ein weiteres bekanntes Zweigleichungsmodell, welches in dieser Arbeit verwendet und im Folgenden vorgestellt wird ist das SST-Modell (Shear-Stress-Transport-Modell).

3.6.1.1 Standard $k - \epsilon$ -Modell

Das häufig verwendete Standard-k- ϵ -Modell von Launder und Sharma [60] geht zurück auf das ursprüngliche k- ϵ -Modell von Jones und Launder [47]. Im Vergleich zum ursprünglichen Modell verfügt die neuere Formulierung über verbesserte Modellkonstanten. Zur Bestimmung der Wirbelviskosität und der damit verbundenen Schließung des Gleichungssystems werden bei diesem Modell zusätzlich zu den Erhaltungsgleichungen je eine Transportgleichung für die kinetische Energie k und die isotrope turbulente Dissipationsrate ϵ gelöst.

k-Transportgleichung

$$\frac{\partial(\bar{\rho}k)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_{i}k)}{\partial x_{i}} = \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\frac{\mu_{t}}{Pr_{k}} \left(\frac{\partial k}{\partial x_{i}} \right) \right] + \mathcal{P}_{k} - \bar{\rho}\epsilon$$
(3.27)

c-Transportgleichung

$$\frac{\partial(\overline{\rho}\epsilon)}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u}_i\epsilon)}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left[\frac{\mu_t}{Pr_\epsilon} \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial x_i} \right) \right] + C_{\epsilon 1} \mathcal{P}_k \frac{\epsilon}{k} - C_{\epsilon 2} \overline{\rho} \frac{\epsilon^2}{k}$$
(3.28)

Bei \mathcal{P}_k handelt es sich um den Quellterm der turbulenten kinetischen Energie, wobei für den Reynolds-Spannungstensor die Boussinesq-Hypothese nach Gleichung (3.22) eingesetzt wird:

$$\mathcal{P}_{k} = \tau_{ij,t} \frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}} = -\overline{\rho} \widetilde{u_{i}'' u_{j}''} \frac{\partial \widetilde{u}_{i}}{\partial x_{j}}$$
(3.29)

Im Gegensatz zur direkt aus den Transportgleichungen der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit herleitbaren Gleichung für die turbulente kinetische Energie, ist die zweite Gleichung nach Pope als rein empirisch anzusehen [84]. Launder und Sharma geben für das Standard-k- ϵ -Modell die in Tabelle 3.1 aufgeführten dimensionslosen Koeffizienten an [60].

Tabelle 3.1: Die dimensionslosen Koeffizienten des Standard-k- ϵ -Modells [60]

$C_{\epsilon 1}$	$C_{\epsilon 2}$	C_{μ}	Pr_k	Pr_{ϵ}
0,09	1,44	1,92	1	1,3

3.6.1.2 SST-Modell

Das SST-Modell geht auf Menter et al. [69] zurück. Es ist eine Kombination aus dem $k - \epsilon$ -Modell in der Form von Launder und Sharma [60] und dem von Wilcox entwickelten $k - \omega$ -Modell [113]. Das SST-Modell vereinigt die Vorteile der beiden Modelle: die Genauigkeit des $k - \omega$ -Modells in der Nähe der Wand und die guten Resultate des $k - \epsilon$ -Modells in der wandfernen freien Strömung.

Zur Bestimmung der turbulenten Viskosität wird jeweils eine Transportgleichung für die turbulent kinetische Energie k und die turbulente Wirbelstärke ω gelöst.

Die turbulente Wirbelstärke ω ist das inverse Zeitmaß der energietragenden Wirbel mit folgender Definition:

$$\omega = \frac{1}{C_{\mu}}\frac{\epsilon}{k}$$
(3.30)

k-Transportgleichung

$$\frac{\partial(\overline{\rho}k)}{\partial t} + \frac{\partial(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}k)}{\partial x_{i}} = \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\frac{\mu_{t}}{Pr_{k}} \left(\frac{\partial k}{\partial x_{i}} \right) \right] + \mathcal{P}_{k} - C_{\mu}\overline{\rho}\omega$$
(3.31)

ω-Transportgleichung

$$\frac{\partial(\bar{\rho}\omega)}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{\rho}\tilde{u}_{i}\omega)}{\partial x_{i}} = \frac{\partial}{\partial x_{i}} \left[\frac{\mu_{t}}{Pr_{\omega}} \left(\frac{\partial\omega}{\partial x_{i}}\right)\right] + \gamma \mathcal{P}_{k}\frac{\omega}{k} - \beta\bar{\rho}\omega^{2} + 2(1-F_{1})\frac{\bar{\rho}}{Pr_{\omega2}\omega}\frac{\partial k}{\partial x_{j}}\frac{\partial\omega}{\partial x_{j}} \quad (3.32)$$

Tabelle 3.2: Die dimensionslosen Koeffizienten des SST-Modells [69].

γ_1	$\frac{\beta_1}{C_{\mu}} - \frac{\kappa^2}{Pr_{\omega 1}\sqrt{C_{\mu}}}$	γ_2	$\frac{\beta_2}{C_{\mu}} - \frac{\kappa^2}{Pr_{\omega 2}\sqrt{C_{\mu}}}$
eta_1	0,075	β_2	0,0828
Pr_{k1}	1,176	Pr_{k2}	1,0
$Pr_{\omega 1}$	2,0	$Pr_{\omega 2}$	1,168
κ	0,41	C_{μ}	0,09
<i>a</i> ₁	0,31	·	

Jeder der dimensionslosen Koeffizienten der Gleichungen (3.31) und (3.32) wird durch eine lineare Überlagerung aus den Koeffizienten des k- ϵ - und des k- ω -Modells bestimmt. Für diese Blendfunktion gilt:

$$c = F_1 c_1 + (1 - F_1) c_2 \tag{3.33}$$

Der Blendparameter F_1 beschreibt den Übergang vom *k-w*-Modell ($F_1 = 0$) zum *k-\varepsilon*-Modell ($F_1 = 1$). Es gilt:

$$F_1 = \tanh\left(arg_1^4\right) \tag{3.34}$$

$$arg_1 = \min\left[\max\left(\frac{\sqrt{k}}{C_{\mu}\omega d}, \frac{500\mu}{d^2\omega\overline{\rho}}\right), \frac{4\overline{\rho}k}{CD_{k\omega}d^2Pr_{\omega^2}}\right]$$
(3.35)

21

$$CD_{k\omega} = \max\left(2\frac{\overline{\rho}}{Pr_{\omega 2}\omega}\frac{\partial k}{\partial x_j}\frac{\partial \omega}{\partial x_j}, 10^{-20}\right)$$
(3.36)

$$F_2 = \tanh\left(arg_2^2\right) \tag{3.37}$$

$$arg_2 = \max\left(2\frac{\sqrt{k}}{C_{\mu}\omega d}, \frac{500\mu}{d^2\omega\overline{\rho}}\right)$$
(3.38)

In den Gleichungen 3.35 bis 3.38 ist *d* der Abstand eines Gitterpunktes zur nächsten Wand. Mit dem Betrag der Wirbelstärke Ω wird die turbulente Viskosität über folgenden Zusammenhang bestimmt:

$$\mu_t = \frac{\overline{\rho}a_1k}{\max\left(a_1\omega,\Omega F_2\right)} \tag{3.39}$$

3.6.2 LES-Modelle

In der *LES* werden die in Kapitel 3.5 aufgeführten gefilterten Bilanzgleichungen gelöst. Zur Berechnung der kleinskaligen Turbulenzen wird ein Turbulenz-Modell benötigt.

3.6.2.1 Smagorinsky-Modell

Eines der bekanntesten LES-Modelle ist das von Smagorinsky [100]. Ursprünglich wurde es für inkompressible Strömungen entwickelt. Im Folgenden werden die in dieser Arbeit verwendeten Bilanzgleichungen für inkompressible Strömungen nach Erlebacher [26] vorgestellt. Das Smagorinsky-Modell ist ein Wirbelviskositäts-Modell, für welches nach dem Boussinesq-Ansatz [45] für den nicht aufgelösten Anteil der Reynolds-Spannungen gilt:

$$\tau_{ij_{sgs}} = -2\nu_{sgs}(\widetilde{S_{ij}} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\widetilde{S_{kk}}) + \frac{1}{3}\delta_{ij}\tau_{kk}$$
(3.40)

mit

$$\widetilde{S_{ij}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial \widetilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \widetilde{u}_j}{\partial x_i} \right) \quad \text{und} \quad \widetilde{S_{kk}} = 2 \frac{\partial \widetilde{u}_k}{\partial x_k}$$
(3.41)

Die Wirbel werden bis zur Filterweite Δ direkt berechnet. Für die Viskosität im Subgrid-Bereich gilt:

$$\nu_{sgs} = (C_S \Delta)^2 \left| \widetilde{S} \right| = (C_S \Delta)^2 \sqrt{2 \widetilde{S_{ij}} \widetilde{S_{ij}}}$$
(3.42)

Für kompressible Strömungen gilt nach Yoshizawa [116]:

$$\tau_{kk} = 2C_I \overline{\rho} \Delta^2 \left| \widetilde{S} \right|^2 = 2C_I \overline{\rho} \Delta^2 \cdot 2\widetilde{S_{ij}} \widetilde{S_{ij}}$$
(3.43)

Für die vorliegende Arbeit wird das Rechengitter als Filter verwendet. Die Filterweite Δ errechnet sich nach von Deardorf [22] mit der Zellweite Δ_i :

$$\Delta = \left(\Delta_x \Delta_y \Delta_z\right)^{\frac{1}{3}} \tag{3.44}$$

4 Theoretische Grundlagen der Verbrennung

Die Verbrennung ist eine exotherme chemische Reaktion eines brennbaren Materials mit Luft oder Sauerstoff, bei der Wärme freigesetzt wird. In dieser Arbeit wird die Verbrennung von Methan und Jet A1 mit Luft behandelt. Für die stöchiometrische Verbrennung von Methan mit Luft gilt:

$$CH_4 + 2\left(O_2 + \frac{79}{21}N_2\right) \longrightarrow CO_2 + 2H_2O + 7,52N_2$$
. (4.1)

Analog gilt für die stöchiometrische Verbrennung von Jet A1 (chemische Zusammensetzung nach Nguyen und Ying [73]) mit Luft:

$$C_{12}H_{23} + 17,75\left(O_2 + \frac{79}{21}N_2\right) \longrightarrow 12CO_2 + 11,5H_2O + 66,77N_2$$
. (4.2)

Wenn mehr Sauerstoff zur Verfügung steht als zur vollständigen (stöchiometrischen) Verbrennung benötigt wird, spricht man von magerer Verbrennung oder einem mageren Gemisch. Bei zu wenig Sauerstoff spricht man von einem fetten Gemisch. Eine Kennzahl, die die Zusammensetzung eines Luft-Brennstoff Gemisches beschreibt, ist die Luftzahl λ :

$$\lambda = \frac{\dot{m}_{\text{Luft, tatsächlich}}}{\dot{m}_{\text{Luft, stöchiometrisch}}}.$$
(4.3)

Jedoch kann nicht bei jedem Gemisch aus Luft und Brennstoff eine Verbrennungsreaktion stattfinden. Unabhängig von der Leistung der Zündquelle, wird außerhalb der sogenannten Zündgrenzen (wenn zu viel Brennstoff oder zu viel Oxidator vorliegt) zu wenig Energie durch die Verbrennung freigesetzt, um ein Frischgasgemisch auf die erforderliche Zündtemperaur zu erwärmen, damit die Flamme selbstständig weiter brennen kann.

In der Literatur werden Flammen meist nach ihrem Mischungszustand in vorgemischte oder nicht-vorgemischte Flammen eingeteilt. Zudem wird der Strömungszustand berücksichtigt, woraus die Einteilung in laminare und turbulente Flammen resultiert.

4.1 Phänomenologie einer laminaren vorgemischten Flamme

In Abbildung 4.1 sind das Temperaturprofil einer vorgemischten laminaren Flamme über der Ortskoordinate dargestellt und schematisch die Flammenfront eingetragen.



Abbildung 4.1: Schematische Darstellung einer laminaren Flammenfront.

Von links strömt ein unverbranntes Luft-Brennstoff-Gemisch mit der Enhalpie \dot{h}_{ein} , der Temperatur T_u , der Dichte ρ_{∞} und der Geschwindigkeit U_{∞} in die Flammenfront. In der Flammenfront reagiert das Gemisch und es wird Wärme freigesetzt. Aufgrund des entstehenden Temperaturgradienten entsteht ein Wärmestrom \dot{q} . Dieser erhitzt das Frischgras in der sogenannten Vorwärmzone δ_v um ΔT_v auf die Zündtemperatur T_z . Ab dem Erreichen der Zündtemperatur findet die exotherme Reaktion zwischen Luft und Brennstoff in der Reaktionszone δ_R statt, dadurch erhöht sich die Temperatur um ΔT_R . Das sich im chemischen Gleichgewicht befindliche Abgas verlässt die Flammenfront mit der Enthalpie \dot{h}_{aus} , der Temperatur T_b , der Dichte ρ und der Geschwindigkeit U.

Für die Bedingung, dass sich eine stationäre Flammenfront bildet, entspricht die laminare Flammengeschwindigkeit der Anströmgeschwindigkeit des unverbrannten Luft-Brennstoff-Gemisches. Nach dem Fourierschen Gesetz ist die durch konduktive Wärmeleitung übertragene Energie proportional zum Temperaturgradienten und zur Wärmeleitfähigkeit des Gemisches $\lambda_{Wärme}$. Unter der Annahme einer Pfropfenströmung und eines linearisierten Temperaturverlaufs gilt für die Energiebilanz über die Vorwärmzone:

$$\rho_{\infty} U_{\infty} A \bar{c}_p \Delta T_v = \bar{\lambda} A \frac{\Delta T_v}{\delta_v}.$$
(4.4)

Daraus ergibt sich für die laminare Flammengeschwindigkeit:

$$S_l = U_{\infty} = \frac{\overline{\lambda}}{\rho_{\infty}\overline{c}_p} \frac{1}{\delta_v} = \frac{\overline{a}}{\delta_v}.$$
(4.5)

Für die Dicke der Vorwärmzone gilt folglich:

$$\delta_v = \frac{\bar{a}}{S_l}.\tag{4.6}$$

In die Vorwärmzone wird der in der Reaktionszone generierte Wärmestrom zum unverbrannten Luft-Brennstoff-Gemisch weitergeleitet. Unter der Annahme des linearisierten Temperaturverlaufs folgt daher der Zusammenhang zwischen Vorwärmund Reaktionszone:

$$\rho_{\infty} U_{\infty} A \bar{c}_p \Delta T_v = \bar{\lambda} A \frac{\Delta T_R}{\delta_R}, \tag{4.7}$$

27

$$S_l = U_{\infty} = \frac{\bar{a}}{\delta_R} \frac{\Delta T_R}{\Delta T_v},\tag{4.8}$$

$$\delta_R = \frac{\bar{a}}{S_l} \frac{\Delta T_R}{\Delta T_v}.$$
(4.9)

Aus Gleichungen (4.6) und (4.9) ergibt sich die Flammenfrontdicke:

$$\delta = \delta_v + \delta_R = \frac{\overline{a}}{S_l} (1 + \frac{\Delta T_R}{\Delta T_v}) = \frac{\overline{a}}{S_l} (1 + \frac{\Delta T}{\Delta T_v}).$$
(4.10)

Damit folgt aus der Bilanz um die laminare Flammenfront für die laminare Flammengeschwindigkeit S_l :

$$S_l = \frac{\overline{a}}{\delta} (1 + \frac{\Delta T}{\Delta T_v}) \sim \frac{\overline{a}}{\delta}.$$
(4.11)

Das charakteristische Zeitmaß für die Wärmefreisetzung kann als proportional zum Verhältnis zwischen der gesamten Flammenfrontdicke δ und der laminaren Flammengeschwindigkeit S_l beschrieben werden:

$$\tau_W \sim \frac{\delta}{S_l}.\tag{4.12}$$

Mit der Beschreibung der laminaren Flammengeschwindigkeit aus der Bilanz um die laminare Flammenfront folgt, dass die laminare Flammengeschwindigkeit proportional zur Quadratwurzel aus der mittleren thermischen Diffusivität \bar{a} und dem charakteristischen Zeitmaß der Wärmefreisetzung τ_W ist:

$$S_l \sim \sqrt{\frac{\overline{a}}{\tau_W}}.$$
 (4.13)

4.2 Charakterisierung turbulenter Vormischflammen -Das Borghi Diagramm

Vorgemischte turbulente Flammen lassen sich in verschiedene Bereiche einteilen, die durch dimensionslose Kennzahlen voneinander abgegrenzt werden. Ursprünglich geht diese Einteilung auf Borghi [7, 8] zurück und wird daher auch Borghi-Diagramm genannt. Es gibt aber auch weitere Vorschläge von Barrere [5], Bray [11], Peters [75], Williams [114], Abdel-Gayed und Bradley [2], Borghi und Destriau [9] oder Peters [76]. Es wurde dazu vereinfachend angenommen, dass die turbulente Mischung und die chemische Reaktion jeweils durch nur ein charakteristisches Zeit- und Längenmaß beschreibbar ist. Als charakteristisches Zeitmaß wurde die turbulente Schwankungsgeschwindigkeit u_t mit der Brenngeschwindigkeit der ungestreckten, laminaren, vorgemischten Flamme S_l entdimensioniert. Für das charakteristische Längenmaß wurde das turbulente integrale Längenmaß l_t mit der Dicke der laminaren vorgemischten Flamme δ entdimensioniert. Im sogenannten Borghi-Diagramm (Abbildung 4.2) wird die entdimensionierte turbulente Schwankungsgeschwindigkeit u_t/S_l über dem entdimensionierten charakteristischen Längenmaß l_t/δ doppelt logarithmisch aufgetragen.

Unter der Annahme, dass die laminare kinematische Viskosität und die Temperaturleitfähigkeit gleich groß sind, also die Prandtl-Zahl Pr = 1 beträgt, kann mit Hilfe der turbulenten Reynolds-Zahl Re_t der Bereich zwischen der laminaren und der turbulenten Verbrennung abgegrenzt werden.

$$Re_{t} = \frac{u_{t} \cdot l_{t}}{\nu_{l}} = \frac{u_{t}}{S_{l}} \cdot \frac{l_{t}}{\delta} \qquad \text{bzw.} \qquad \frac{u_{t}}{S_{l}} = Re_{t} \cdot \left(\frac{l_{t}}{\delta}\right)$$
(4.14)

Durch die Einführung von zwei weiteren dimensionslosen Kennzahlen, der turbulenten Karlowitz-Zahl und der turbulente Damköhler-Zahl, können weitere Bereich zur Beschreibung der Flamme beschrieben werden.

Die turbulente Damköhler-Zahl Da_t ist das Verhältnis zwischen Umdrehungszeit der großen Wirbel im turbulenten Spektrum τ_t und dem charakteristischen Zeitmaß der Wärmefreisetzung τ_W :

$$Da_t = \frac{\tau_t}{\tau_W} = \frac{\left(\frac{l_t}{u_t}\right)}{\left(\frac{\delta}{S_l}\right)} = \frac{l_t}{\delta} \cdot \frac{S_l}{u_t}.$$
(4.15)



Abbildung 4.2: Borghi-Diagramm

Die turbulente Karlowitz-Zahl Ka_t wird zur Berücksichtigung von Streckungs-Effekten eingeführt. Sie beschreibt das Verhältnis aus dem Zeitmaß der Wärmefreisetzung durch chemische Reaktion τ_W zum Kolmogorov-Zeitmaß τ_η :

$$Ka_t = \frac{\tau_W}{\tau_\eta}.$$
(4.16)

Mit den Beziehungen aus den Gleichungen (4.14) und (3.4) kann die turbulente Karlowitz-Zahl wie folgt formuliert werden:

$$Ka_{t} = \frac{\tau_{W}}{\tau_{t} \cdot Re_{t}^{-\frac{1}{2}}} = \frac{\left(\frac{\delta}{S_{l}}\right)}{\left(\frac{l_{t}}{u_{t}}\right)} Re_{t}^{\frac{1}{2}} = \frac{\left(\frac{\delta}{S_{l}}\right)}{\left(\frac{l_{t}}{u_{t}}\right)} \left(\frac{u_{t}}{S_{l}} \cdot \frac{l_{t}}{\delta}\right)^{\frac{1}{2}}.$$
(4.17)

Daraus folgt:

$$Ka_{t} = \left(\frac{l_{t}}{\delta}\right)^{-\frac{1}{2}} \left(\frac{u_{t}}{S_{l}}\right)^{\frac{3}{2}} = \left(\frac{\delta}{\eta}\right)^{2} \qquad \text{bzw.} \qquad \frac{u_{t}}{S_{l}} = Ka_{t}^{2/3} \cdot \left(\frac{l_{t}}{\delta}\right)^{1/3}.$$
(4.18)

Mit Hilfe der turbulenten Reynolds-Zahl, der turbulenten Damköhler-Zahl und der turbulenten Karlowitz-Zahl lässt sich das Borghi-Diagramm in Abbildung 4.2 in folgende Bereiche unterteilen:

- *Ret* < 1: Bereich der laminaren Flamme. Ausgenommen von Inhomogenitäten in der laminaren Strömung gelten die in Kapitel 4.2 dargestellten Zusammenhänge der ungestreckten, laminaren, vorgemischten Flamme.
- *Re_t* > 1; *Ka_t* < 1: Flamelet-Bereich. Die chemische Reaktion ist schneller als die Zeit, die ein Wirbel der Kolmogorov-Klasse für eine Umdrehung benötigt. Die laminare Flammenfrontdicke ist kleiner als die kleinsten Wirbelgrößen, daher ist sie als dünn anzusehen. Sie wird durch die turbulente Strömung nur deformiert und konvektiv transportiert. Die innere Struktur der Flammenfront bleibt unverändert, daher kann sie wie ein laminares, aber gestrecktes Flammenelement beschrieben werden, das sogenannte "Flamelet". Nach Damköhler ist in diesem Bereich die turbulente Flammengeschwindigkeit S_t proportional der Summe aus laminarer Flammengeschwindigkeit S_l und der charakteristischen turbulenten Geschwindigkeitsschwankung u_t:

$$S_t = S_l + u_t. \tag{4.19}$$

Der Flamelet-Bereich kann noch weiter unterteilt werden:

- $Re_t > 1; u_t < S_l$: Bereich der leicht gewellten Flammenfront. Die charakteristische Schwankungsgeschwindigkeit ist zu gering, um die Flammenfront so aufzuwellen, dass die Fronten sich gegenseitig beeinflussen könnten. Die Verbrennung findet in einer dünnen, quasi-laminaren Flammenfront statt, die durch Fluktuationen im zeitlichen Mittel verdickt erscheint.
- $Re_t > 1; u_t > S_l; Ka_t < 1$: Bereich der stark gewellten Flammenfront. Benachbarte Flammenfronten werden von Wirbeln so aufgewellt, dass sie miteinander interagieren können. Diese Wirbel sind aber noch nicht energiereich genug, um in die Vorwärmzone der Flammenfront einzudringen, so dass die Flamme ihren quasi-laminaren Charakter behält.

- *Re_t* > 1; *Ka_t* > 1; *Da_t* > 1: Bereich der verdickten Flammenfront. Das charakteristische Zeitmaß für die Wärmefreisetzung ist kleiner als die Umdrehungszeit der größten Wirbel im Spektrum, aber immer noch größer als das Kolmogorov-Zeitmaß (τ_t > τ_W > τ_η).
- $Re_t > 1$; $Ka_t > 1$; $Da_t < 1$: Bereich des homogenen Reaktors. Das charakteristische Zeitmaß für die Wärmefreisetzung ist viel größer als das Zeitmaß der turbulenten Dissipation. Daher ist die Mischung sehr schnell und die Reaktionsrate wird nur durch die Chemie bestimmt. In dem Fall gilt für die turbulente Flammengeschwindigkeit S_t [15]:

$$\frac{S_t}{S_l} \approx \sqrt{1 + \frac{u_t \cdot l_t}{a_l}} = \sqrt{1 + Re_t} \quad \text{für} \quad Re_t >> 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{S_t}{S_l} \approx \sqrt{Re_t}.$$
(4.20)

4.3 Abgehobene Verbrennung

Wie zu Anfang des Kapitels schon erwähnt, können Flammen meist nach ihrem Mischungszustand in vorgemischte oder nicht vorgemischte Flammen eingeteilt werden. Obwohl nicht vorgemischte Flammen über schlechtere Emissionscharakteristiken verfügen können, werden sie aufgrund ihrer überragenden Stabilität und ihrer Sicherheit gegen Flammenrückschlag häufig in technischen Systemen verwendet. Im Gegensatz dazu verfügen Verbrennungssysteme mit vorgemischten Flammen über eine bessere Emissionscharakteristik, welche aus der homogenen Mischung resultiert. Jedoch birgt die schlechtere Flammenstabilisierung die Gefahr der Beschädigung des Systems durch Flammenrückschlag. Die Vorteile beider Flammenarten können in einem Verbrennungssystem mit abgehobener Flamme vereinigt werden.

Durch eine Düse können Brennstoff und Oxidator der Brennkammer getrennt zugeführt werden. Eine aufsitzende, nicht vorgemischte Freistrahl-Flamme hebt ab, wenn die Strömungsgeschwindigkeit der unverbrannten Edukte über einen kritischen Wert hinaus erhöht wird. Dabei entsteht eine weitgehend reaktionsfreie Zone (vgl. Abbildung 4.3) zwischen Düsenaustritt und Flamme, die eine Vorverdampfung des flüssigen Brennstoffs und eine Durchmischung von gasförmigem sowie flüssigem Brennstoff mit dem Oxidator ermöglicht.



Abbildung 4.3: Aufnahme einer abgehobenen Flamme.

In der Vergangenheit wurden verschiedene Theorien zu den Stabilisierungsmechanismen von turbulenten abgehobenen Freistrahl-Flammen vorgeschlagen. In einer kürzlich erfolgten Veröffentlichung präsentiert Lyons [68] eine Einteilung verschickender Arbeiten auf Basis einer Übersicht von Pitts [82]. Es wird vorgeschlagen, die Forschungsarbeiten zu turbulenten abgehobenen Freistrahl-Flammen in zwei Hauptgruppen zu unterteilen. Eine Gruppe misst dem Grad der Vormischung stromauf der Flammenbasis erhöhte Wichtigkeit zu, die andere Gruppe erachtet die lokalen turbulenten Strukturen nahe der Flammenbasis als entscheidend.

Die erste Gruppe umfasst Theorien der vorgemischten Flammen [115, 108, 48] und der nicht vorgemischten Flamelet Theorie [78]. Bei den vorgemischten Flammen wird angenommen, dass die Flammenbasis der abgehobenen Flamme vorgemischt ist und mit der lokalen Flammengeschwindigkeit brennt. Bei der nicht vorgemischten Flamelet Theorie wird angenommen, dass die Verlöschung von diffusiven Flamelets die Flammenstabilisierung kontrolliert.

Die zweite Gruppe betrachtet detaillierter den Einfluss der Turbulenz auf die turbulente Flammenausbreitung. Als eine Erweiterung der Theorie der vorgemischten Flammen konstatiert die Turbulenz Intensitäts Theorie [48], dass die Turbulenzintensität stromauf im Nahbereich der Flammenbasis einen großen Einfluss auf die turbulente Flammenausbreitungsgeschwindigkeit hat. Die Theorie der großen Wirbel [70, 103, 102] veranschaulicht die Wichtigkeit der großskaligen turbulenten Strukturen. Von diesen wird angenommen, dass sie die Vorderflanke der Flamme immer wieder stromauf transportieren und damit die Reaktionszone stabilisieren.

In einer der ersten Veröffentlichung, die sich mit abgehobenen Flammen beschäftigten, präsentierten Wohl et al. [115] eine Theorie, um den Grund für das Abheben von Flammen zu erklären. Sie berichteten, dass eine Flamme abhebt, wenn der Geschwindigkeitsgradient an der Kante der Düse einen spezifischen Wert erreicht. Die Autoren postulierten, dass sich eine abgehobene Flamme an der Position stabilisiert, an der die Strömungsgeschwindigkeit der Brenngeschwindigkeit entspricht. Später bestätigten Vanquickenborne und van Tiggelen [108] diese Beobachtung. Aus experimentellen Ergebnissen von Methan-Flammen schlossen sie, dass sich eine abgehobene Flamme an der Position stabilisiert, an der die mittlere Strömungsgeschwindigkeit der mittleren Position der stöchiometrischen Mischung und somit der turbulenten Brenngeschwindigkeit der stöchiometrischen Flamme entspricht. Diese Schlussfolgerung wurde in Experimenten von Eickhoff et al. [25] und Schefer et al. [95] bestätigt.

Unter der Annahme, dass die Verweilzeit nicht lang genug ist, um eine vollständige Vormischung zu realisieren, entwickelten Peters und Williams [78] eine andere Theorie. Sie nahmen an, dass eine Flamme abhebt, wenn das partielle Verlöschen eines Flamelets durch hohe Streckungsraten einen kritischen Wert überschreitet. Diese Theorie wurde ebenso durch experimentelle Ergebnisse unterstützt, die zeigten, dass das Verlöschen von Flamelets wichtig für den Mechanismus des Abhebens [77] ist, aber möglicherweise nicht den Hauptstabilisierungsfaktor darstellt.

Bei den meisten Arbeiten liegt der Schwerpunkt auf nicht verdrallten Freistahlflammen, die durch die engen Verlöschgrenzen stark limitiert sind. In technischen Systemen sind Flammen üblicherweise durch umgebende Wände eingeschlossen. Dies hat meist die Entstehung einer äußeren Rezirkulationszone zur Folge, welche die Verlöschgrenzen aufweitet und den Betriebsbereich zwischen aufsitzender Flamme und Verlöschen vergrößert. Wenn der Strömung zusätzlich zur äußeren Rezirkulationszone noch ein Drall aufgeprägt wird, vergrößert sich der Betriebsbereich zwischen aufsitzender Flamme und verlöschen noch weiter. Johnson et al. [46] verwenden einen Drallbrenner mit niedrigem Drall, um eine eingeschlossene Flamme zu erzeugen, die von der Düse abhebt. Kürzlich untersuchten Cavaliere et al. [14] das Verlöschverhalten von verdrallten vorgemischten und nicht vorgemischten Methan-Flammen und Heptan-Spray-Flammen an der Verlöschgrenze im Detail und folgerten, dass auf der Damköhler-Zahl basierende Modelle nicht ausreichend sind, um die Verlöschgrenze zu beschreiben.

Obwohl schon sehr viele Forschungsarbeiten durchgeführt wurden, ist die Phänomenologie der abgehobenen Flammen vor allem im Hinblick auf das Stabilitätsverhalten noch nicht vollständig verstanden. Im Besonderen der Unterschied im Stabilitätsverhalten zwischen flüssigen und gasförmigen Brennstoffen wurde bisher noch nicht genauer beschrieben. Daher liegt der Schwerpunkt der vorliegenden Arbeit auf der Untersuchung des Stabilitätsverhaltens von abgehobenen Flammen hinsichtlich der Brennstoffabhängigkeit. Dafür wurde der Einfluss einer Vielzahl von Betriebsbedingungen, wie der Druckverlust über die Düse, der Absolutdruck, die Vorwärmtemperatur der Verbrennungsluft und die Stöchiometrie, auf die Abhebehöhe untersucht.

5 Verbrennungsmodell

Der Verbrennungsvorgang umfasst eine große Zahl verschiedener Reaktionen und Spezies. In technischen Systemen sind die Flammen meist turbulent und nicht vorgemischt. Die Turbulenz und die Chemie der Verbrennung interagieren miteinander. Daraus ergibt sich für die Simulation von Verbrennungssystemen eine beliebig große Anzahl an Bilanzgleichungen für die Spezies, die in einem Verbrennungssystem vorkommen. Um den Rechenaufwand zu minimieren gibt es die Möglichkeit, Modelle zu nutzen.

In dieser Arbeit wird das am Engler-Bunte-Institut im Bereich Verbrennungstechnik entwickelte Verbundwahrscheinlichkeitsdichte-Modell (Joint Probability Density Function, JPDF) verwendet. Dabei wird die Verbrennung von nicht vorgemischten Flammen durch vier Variablen beschrieben. Der Verlauf der chemischen Reaktion wird durch die Reaktionsfortschrittsvariable beschrieben und die Mischung zwischen Brennstoff und Oxidator durch den Mischungsbruch. Zwei weitere Variablen ergeben sich aus der Turbulenz: die Varianz des Reaktionsfortschritts und die Varianz des Mischungsbruchs.

Die vier Variablen werden mit Transportgleichungen in der Strömungssimulation gelöst. Dabei ist der gemittelte Quellterm in der Transportgleichung für den Reaktionsfortschritt und dessen Varianz unbekannt und muss modelliert werden. Im Folgenden wird beschrieben wie dieser Quellterm vor der Simulation in Abhängigkeit der vier Variablen (Reaktionsfortschritt, Mischungsbruch und deren Varianzen) tabelliert wird.

In diesem Kapitel wird zunächst auf die reaktionskinetischen Grundlagen eingegangen. Es werden des Weiteren zwei Modellsysteme vorgestellt, mit deren Hilfe eine Reduktion der Chemie durch sogenannte chemische Tabellen erfolgen kann. Mit der Theorie des Verbundwahrscheinlichkeitsdichte-Modells kann zusätzlich die Turbulenz in dem Verbrennungsmodell berücksichtigt werden. Die praktische Umsetzung des Verbundwahrscheinlichkeitsdichte-Modells wird in Kapitel 5.4.2.3 vorgestellt. Durch die Integration entstehen integrierte chemische Tabellen, mit denen die für diese Arbeit durchgeführten Verbrennungssimulationen erfolgten. Eine ausführliche Beschreibung der Tabellierungs-Programme, der Validierung des Verbrennungsmodells und der Kopplung der Tabellen mit dem numerischen Strömungs-Löser OpenFOAM ist in der Arbeit von Kern [54] beschrieben und wird hier nicht weitergehend betrachtet.

5.1 Reaktionskinetische Grundlagen

Die in dieser Arbeit untersuchten Verbrennungsprozesse laufen in der Gasphase ab. Dabei findet eine Vielzahl von Reaktionen gleichzeitig und mit unterschiedlichen Zeitskalen statt, die zudem in Konkurrenz zueinander stehen können. Die chemische Reaktionskinetik beschreibt die Geschwindigkeit, mit der die entsprechenden Reaktionen ablaufen, sowie die jeweilige Spezieszusammensetzung, bis das chemische Gleichgewicht erreicht ist. Dieses reaktionskinetische System kann durch einen Reaktionsmechanismus beschrieben werden. Der Reaktionsmechanismus enthält eine beliebige Anzahl N_k Spezies X_k und eine beliebige Anzahl N_i an Elementarreaktionen:

$$\sum_{k=1}^{N_k} \nu'_{ki} X_k \rightleftharpoons \sum_{k=1}^{N_k} \nu''_{ki} X_k \qquad i = 1, ..., N_i$$
(5.1)

Hierbei sind v'_{ki} die stöchiometrischen Koeffizienten der Edukte und v'_{ki} die stöchiometrischen Koeffizienten der Produkte der *k*-ten Komponente in der *i*-ten Elementarreaktion.

Die Bildungsrate einer Komponente *k* ergibt sich aus der Summe der Produkte aus den stöchiometrischen Koeffizienten $(v'_{ki} - v''_{ki})$ und den Reaktionsgeschwindigkeiten r_i über alle Elementarreaktionen und entspricht dem Quellterm in Gleichung 2.4:

$$\dot{\omega}_{k} = \sum_{i=1}^{N_{i}} (\nu_{ki}^{'} - \nu_{ki}^{''}) \cdot r_{i} \qquad i = 1, ..., N_{i}$$
(5.2)

Die Reaktionsgeschwindigkeit r_i für eine Elementarreaktion kann wie folgt bestimmt werden:

$$r_{i} = k_{i,f} \prod_{k=1}^{N_{k}} C_{k}^{\nu'_{ki}} - k_{i,b} \prod_{k=1}^{N_{k}} C_{k}^{\nu''_{ki}}$$
(5.3)

 $k_{i,f}$ und $k_{i,b}$ sind die Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten der Hin- und Rückreaktion und C_k ist die Konzentration der *k*-ten Komponente.

Für eine stark nichtlineare Abhängigkeit von der Temperatur gilt für die Reaktionsgeschwindigkeitskoeffizienten $k_{i,(f,b)}$ der erweiterte Arrhenius-Ansatz:

$$k_{i,(f,b)} = B_{i,(f,b)} T^{b_{i,(f,b)}} e^{-\frac{E_{A_{i,(f,b)}}}{RT}}$$
(5.4)

Es wird berücksichtigt, dass der prä-exponentielle Faktor, der aus der Stoßtheorie abgeleitet werden kann [105], temperaturabhängig ist. Die Aktivierungsenergie $E_{A_{i,(f,b)}}$, die aufgebracht werden muss, um eine chemische Reaktion ablaufen zu lassen, ist als Differenz zwischen der mittleren Energie der reaktiven Molekülstöße zwischen den Reaktionspartnern und der mittleren Energie aller Stöße zu interpretieren. Der Frequenzfaktor $B_{i,(f,b)}$ beschreibt die Wahrscheinlichkeit, dass es zu einem Stoß kommt. Die Konstanten $E_{A_{i,(f,b)}}$, $B_{i,(f,b)}$ und $b_{i,(f,b)}$ werden meist experimentell bestimmt, da die aus der Stoßtheorie berechneten Werte häufig von der Realität abweichen.

5.2 Modellsysteme

Die in Kapitel 5.1 zusammengefasste Reaktionskinetik beschreibt die Reaktionsrate in Abhängigkeit von Temperatur, Druck und Spezieszusammensetzung. In technischen Systemen wird die Verbrennung, neben einer Vielzahl von chemischen Reaktionen, auch durch den Stoff- und Energietransport beeinflusst. Um auch diesen Einfluss auf die Verbrennung beschreiben zu können, wird in dieser Arbeit neben dem idealen Satzreaktor (HRCT für Homogeneous ReaCTor), der nur die reine Reaktionskinetik beschreiben kann, auch die eindimensionale Vormischflamme (PREMIX) betrachtet, die Transportprozesse einschließt. Diese Modellsysteme ermöglichen, den Verlauf von Spezieszusammensetzung, Temperatur, Druck, etc. als Funktion der Zeit (HRCT) oder des Ortes (PREMIX) vom vorgegebenen Anfangszustand bis zum chemischen Gleichgewicht zu ermitteln. Die beiden Modellsysteme werden in den folgenden zwei Abschnitten beschrieben.

5.2.1 Idealer Satzreaktor

Der ideale Satzreaktor ist ein abgeschlossenes System, das heißt, es werden während der Reaktion keine Stoffe und keine Energie von außen zu- oder nach außen abgeführt. Zum Zeitpunkt t_0 liegt ein unverbranntes Gemisch $Y_{k,u}$ vor, welches isobar und adiabat bis zum thermodynamischen Gleichgewichtszustand mit der Zusammensetzung des verbrannten Gemisches $Y_{k,b}$ zeitlich integriert wird. Dabei ist das System ideal durchmischt, es gibt also keine Konzentrations- und Temperaturgradienten im Verlauf der Reaktion. Somit werden auch keine Transportprozesse berücksichtigt. Der vorgegebene Druck p und die Gesamtenthalpie h des Systems bleiben während der Reaktion konstant, während sich die Spezieszusammensetzung Y_k , die Temperatur T und somit auch das Volumen V des Systems infolge der exothermen Verbrennungsreaktion im zeitlichen Verlauf ändern. Dieses Anfangswertproblem ist durch die Bilanzgleichung der Komponentenerhaltung (5.5) und durch die thermische Zustandsgleichung (5.6, 5.7) exakt beschrieben.

$$\frac{\partial Y_k}{\partial t} = \dot{\omega}_k \widetilde{M}_k v \qquad k = 1, ..., N_k$$
(5.5)

$$V(t) = \frac{n(t)\Re T(t)}{p}$$
(5.6)

$$n(t) = \frac{m}{\widetilde{M}(t)}$$
(5.7)

5.2.2 Eindimensionale Vormischflamme

Im Unterschied zum idealen Satzreaktor wird im Modell der eindimensionalen, planaren, laminaren Vormischflamme (PREMIX) der Einfluss der laminaren Diffusion und Wärmeleitung berücksichtigt. Hierbei wird der Fortschritt der Reaktion durch Differentialgleichungen der Massenerhaltung (5.8), der Energieerhaltung (5.9), der Komponentenerhaltung (5.10) und der thermischen Zustandsgleichung (5.11) ortsabhängig gelöst.

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial x} = 0 \tag{5.8}$$

$$\rho u c_p \frac{\partial T}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \right) + \sum_{k=1}^{N_k} j_x^k c_{p,k} \frac{\partial T}{\partial x} + \sum_{k=1}^{N_k} \dot{\omega}_k h_k \widetilde{M}_k = 0$$
(5.9)



Abbildung 5.1: Anlage zur experimentellen Bestimmung der laminaren Flammengeschwindigkeit anhand von planaren laminaren Vormischflammen (links) mit vergrößerter Abbildung des Brenners mit planarer laminarer Flamme (rechts) [110].

$$\rho u \frac{\partial Y_k}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho Y_k V_k \right) - \dot{\omega}_k = 0 \tag{5.10}$$

$$\rho = \frac{p\widetilde{M}}{\Re T} \tag{5.11}$$

Das Modell geht auf reale laminare, planare Vormischflammen zurück, wie sie in Abbildung 5.1 dargestellt ist. In der Praxis werden mit solchen Versuchsanordnungen laminare Flammengeschwindigkeiten bestimmt. Sie ergeben sich aus der Bedingung, dass im stationären Zustand die Flammengeschwindigkeit der Anströmgeschwindigkeit des Frischgasgemisches entspricht. Mit den unter Berücksichtigung der Wärme- und Stofftransportprozessen ermittelten laminaren Flammengeschwindigkeiten können Reaktionsmechanismen validiert werden. Diese Reaktionsmechanismen dienen wiederum dem PREMIX-Modell zur Berechnung des Reaktionspfades. In [52] ist eine ausführliche Beschreibung des verwendeten Modells zu finden.

5.3 Reduktion der Chemie

In dieser Arbeit wurde der detaillierte GRI 3.0 Mechanismus [101] mit 53 Spezies und 325 chemischen Reaktionen verwendet.

Experimentell wurden die Emissionen der angeregten OH^* -Radikale (OH^* - Chemilumineszenz) aufgenommen (vgl. Kapitel 6.3.3). Um die experimentell ermittelten Daten mit den Simulationsergebnissen vergleichen zu können, wurde der GRI 3.0 Mechanismus zusätzlich noch um 12 Reaktionen erweitert. Damit kann die Bildung des thermisch angeregten OH^* in den Simulationen berücksichtigt werden [51].

Zur Simulation technischer Verbrennungssysteme ist es möglich, für jede im verwendeten Reaktions-Mechanismus vorkommende Spezies eine Spezies-Transportgleichung zu lösen und somit die Verbrennungs-Reaktion in der Simulation abzubilden. Dies ist sehr aufwendig, da der Rechenaufwand im Vergleich zu einer isothermen Strömungssimulation erheblich vergrößert wird. Detaillierte Mechanismen werden daher hauptsächlich in Modellsystemen, wie den in Kapitel 5.2 beschriebenen, verwendet.

In dieser Arbeit werden Vereinfachungen verwendet mit dem Ziel, die Chemie zu reduzieren ohne dabei wichtige Informationen über die Zusammensetzung von Hauptkomponenten und Schadstoffen oder die Wärmefreisetzung zu vernachlässigen. Dieses Vorgehen wird auch Flame Generated Manifolds genannt [106, 107].

Dabei beschreibt eine Reaktionsfortschrittsvariable den Verlauf der Reaktion bis zum thermodynamischen Gleichgewicht. Auf den Reaktionsfortschritt und den Mischungsbruch, die eine Verbrennungsreaktion beschreiben, wird in den Kapiteln 5.3.1 und 5.3.2 eingegangen.

5.3.1 Mischungsbruch

Bei dem Mischungsbruch f handelt es sich um eine normierte Form des Elementenmassenbruchs:

$$f = \frac{Z_j - Z_{j,Oxidator}}{Z_{j,Brennstoff} - Z_{j,Oxidator}}$$
(5.12)

Unter der Annahme, dass es sich bei dem verwendetem Brennstoff um Kohlenwasserstoffverbindungen handelt, wird dieser über die Elementenmassenbrüche von Kohlenstoff Z_C und Wasserstoff Z_H in Oxidator, Brennstoff und der jeweiligen lokalen Mischung beschrieben:

$$f = \frac{(Z_C + Z_H)_j - (Z_C + Z_H)_{j,Oxidator}}{(Z_C + Z_H)_{j,Brennstoff} - (Z_C + Z_H)_{j,Oxidator}}$$
(5.13)

Demnach beschreibt ein Mischungsbruch von 0 den reinen Oxidator und ein Mischungsbruch von 1 den reinen Brennstoff. Diese Definition des Mischungsbruchs wurde in der vorliegenden Arbeit verwendet.

Da sich die Massenbrüche der chemischen Elemente nur durch Mischung, aber nicht durch chemische Reaktion ändern können, eignet sich der Mischungsbruch f zur Beschreibung der Mischung bei nicht vorgemischter Verbrennung. Eine ausführliche Einführung in die Beschreibung einer Mischung durch den Mischungsbruch ist bei Libby und Willams zu finden [65].

Als Bilanzgleichung für den Favre-gemittelten Mischungsbruch \tilde{f} ergibt sich:

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{f}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{f}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\mu_{eff}}{Sc_{f}}\frac{\partial\widetilde{f}}{\partial x_{i}}\right)$$
(5.14)

Die Transportgleichung für die Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{f''^2}$ lautet:

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{f''^{2}}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u_{i}}\widetilde{f''^{2}}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\mu_{eff}}{Sc_{\widetilde{f''^{2}}}}\frac{\partial\widetilde{f''^{2}}}{\partial x_{i}}\right) + C_{\widetilde{f''^{2}},1}\frac{\mu_{eff}}{Sc_{\widetilde{f''^{2}}}}\left|\frac{\partial\widetilde{f}}{\partial x_{i}}\right|^{2} - C_{\widetilde{f''^{2}},2}\overline{\rho}\frac{\varepsilon}{k}\widetilde{f''^{2}} \quad (5.15)$$

Die für eine LES benötigte massengewichtete Favre-gefilterte Transportgleichung für den gefilterten Mischungsbruch \tilde{f} lautet wie folgt:

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{f}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{f}\right)}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{f} - \overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{f}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\frac{\overline{\mu_{eff}}}{Sc_{f}}\frac{\partial f}{\partial x_{i}}\right)$$
(5.16)

43

Für die Subgrid-Varianz eines passiven Skalars in der LES-Modellierung wurde ein Ansatz von Pierce und Moin verwendet [81, 80]. Analog zum Smagorinsky-Ansatz der Subgrid-Viskosität wird die Varianz des Mischungsbruchs $\widetilde{f''}_{sgs}$ demnach wie folgt beschrieben:

$$\widetilde{f''}_{sgs} = C_{\widetilde{f''}_{sgs}} \Delta^2 \left(\frac{\partial \widetilde{f}}{\partial x_i}\right)^2$$
(5.17)

Die Werte der Konstanten in den Gleichungen (5.14) bis (5.17) sind in Tabelle 5.1 dargestellt.

Tabelle 5.1: Konstanten der Transportgleichungen des Mischungsbruchs.

Sc_f	$Sc_{f''}$	$C_{\widetilde{f''^2},1}$	$C_{\widetilde{f''^2},2}$	$C_{\widetilde{f''^2}_{sgs}}$
0,7	0,7	2,8	2,0	0,1

5.3.2 Reaktionsfortschritt

Neben der Beschreibung der lokalen Zusammensetzung durch den Mischungsbruch f muss zur vollständigen Beschreibung einer Verbrennungsreaktion eine Reaktionsfortschrittsvariable c definiert werden. Eine Möglichkeit für deren Definition erfolgt auf Basis der für den Reaktionsverlauf charakteristischen Speziesmassenbrüche bezogen auf den unverbrannten und den verbrannten Zustand [107, 30, 80, 42]:

$$c = \frac{Y_c - Y_{c,unverbrannt}}{Y_{c,verbrannt} - Y_{c,unverbrannt}}$$
(5.18)

Für die meisten Verbrennungsreaktionen ist es sinnvoll, den Reaktionsfortschritt durch den Umsatz von Sauerstoff darzustellen. Schon Thornton erkannte 1917 [104], dass die Wärmefreisetzungsrate unabhängig von der Komplexität der Kohlenwasserstoffverbindungen proportional zum umgesetzten Sauerstoff ist. Zurückgehend auf [64] wurde in verschiedenen Arbeiten [39, 40, 111] die folgende Definition des Reaktionsfortschritts gewählt:

$$c = \frac{Y_{O_2,gebunden} - Y_{O_2,gebunden,unverbrannt}}{Y_{O_2,gebunden,verbrannt} - Y_{O_2,gebunden,unverbrannt}}$$
(5.19)

Dabei ist $Y_{O_2,gebunden}$ der Massenbruch des lokal chemisch gebundenen Sauerstoffs, $Y_{O_2,gebunden,unverbrannt}$ der Massenbruch des chemisch gebundenen Sauerstoffs im Frischgas und $Y_{O_2,gebunden,unverbrannt}$ der Massenbruch des chemisch gebundenen Sauerstoffs im thermischen Gleichgewicht des Abgases. Demnach entspricht ein Reaktionsfortschritt von 0 einem Gemisch im unverbrannten Zustand und ein Reaktionsfortschritt von 1 einem Gemisch im verbrannten Zustand.

Die Definition des Reaktionsfortschritts durch die Temperatur des Gemisches während der Reaktion ist unzureichend. Die Temperatur wird von Wärmeverlusten beeinflusst und steigt zudem aufgrund von Pyrolysereaktionen nicht monoton an.

Um den Reaktionsfortschritt *c* zu bestimmen, werden für den definierten charakteristischen Speziesmassenbruch Y_c in den RANS-Simulationen Transportgleichungen für den Mittelwert \tilde{Y}_c und die Varianz $\tilde{Y_c''}^2$ gelöst. Analog zum Mischungsbruch folgt somit die Favre-gemittelte Gleichung für den charakteristischen Massenbruch \tilde{Y}_c

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_{c}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{Y}_{c}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\frac{\mu_{eff}}{Sc_{Y_{c}}}\frac{\partial\widetilde{Y}_{c}}{\partial x_{i}}\right) + \overline{\omega}_{Y_{c}}$$
(5.20)

und die Transportgleichung für die Varianz des charakteristischen Massenbruchs $\widetilde{Y_c''^2}$:

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{Y_{c}^{"2}}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u_{i}}\widetilde{Y_{c}^{"2}}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\mu_{eff}}{Sc_{\widetilde{Y_{c}^{"2}}}}\frac{\partial\widetilde{Y_{c}^{"2}}}{\partial x_{i}}\right) + C_{\widetilde{Y_{c}^{"2}},1}\frac{\mu_{eff}}{Sc_{\widetilde{Y_{c}^{"2}}}}\left|\frac{\partial\widetilde{Y_{c}}}{\partial x_{i}}\right|^{2} - C_{\widetilde{Y_{c}^{"2}},2}\overline{\rho}\frac{\varepsilon}{k}\widetilde{Y_{c}^{"2}} + 2\overline{Y_{c}^{"}}\dot{\omega}_{Y_{c}} \quad (5.21)$$

Die für eine LES benötigte massengewichtete Favre-gefilterte Transportgleichung für den gefilterten charakteristischen Massenbruch \tilde{Y}_c ist:

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{Y}_{c}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{Y}_{c}\right)}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{Y}_{c} - \overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{Y}_{c}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\frac{\overline{\mu}_{eff}}{Sc_{Y_{c}}}\frac{\partial Y_{c}}{\partial x_{i}}\right) + \overline{\omega}_{Y_{c}}$$
(5.22)

Dabei ist die Bildungsrate $\overline{\omega}_{Y_c}$ eine Funktion des charakteristischen Speziesmassenbruchs Y_c und des Mischungsbruchs f und deren Varianzen. Dieser Quellterm muss modelliert werden. Die Bildungsrate wird anhand eines in Kapitel 5.2 vorgestellten Modellreaktors in Abhängigkeit von Y_c und f im Voraus bestimmt und tabelliert. Des Weiteren wird die Turbulenz über das im folgenden Kapitel 5.4 dargestellte Verbundwahrscheinlichkeitsdichte-Modell berücksichtigt.

Für die Subgrid-Varianz des charakteristischen Massenbruchs $Y_c''_{sgs}$ in der LES-Modellierung wird analog zum Mischungbruch der folgende Ansatz verwendet:

$$\widetilde{Y_c''^2}_{sgs} = C_{\widetilde{Y_c''^2}_{sgs}} \Delta^2 \left(\frac{\partial \widetilde{Y_c}}{\partial x_i}\right)^2$$
(5.23)

Die Werte der Konstanten in den Gleichungen (5.20) bis (5.23) sind in Tabelle 5.2 dargestellt.

Tabelle 5.2: Konstanten der Transportgleichungen des charakteristischen Massenbruchs.

Sc_{Y_c}	$Sc_{\widetilde{Y_c''^2}}$	$C_{\widetilde{Y_c''^2},1}$	$C_{\widetilde{Y_c''^2},2}$	$C_{\widetilde{Y_c''^2}_{sgs}}$
0,7	0,7	2,8	2,0	0,1

Der für den Reaktionsverlauf charakteristische gemittelte Speziesmassenbruch \tilde{Y}_c und dessen Varianz $\tilde{Y_c}^{"2}$, die beide in der numerischen Strömungssimulation mit den aufgeführten Transportgleichungen berechnet werden, müssen zur Nutzung der integrierten chemischen Tabellen noch in den mittleren Reaktionsfortschritt \tilde{c} und dessen Varianz $\tilde{c}^{"2}$ umgerechnet werden. Dazu dienen die folgenden Zusammenhänge:

$$\widetilde{c} = \frac{\widetilde{Y}_c - \widetilde{Y}_{c_f}}{\widetilde{Y}_{c_b} - \widetilde{Y}_{c_f}}$$
(5.24)

$$\widetilde{c''^2} = \frac{\widetilde{Y_c''^2} + \widetilde{Y_c}^2 - \widetilde{Y_{c_f}^2}}{\left(\left(Y_{c_b} - Y_{c_f}\right)^2\right)} - \frac{\left(\widetilde{Y_c} - \widetilde{Y_{c_f}}\right)^2}{\left(\widetilde{Y_{c_b}} - \widetilde{Y_{c_f}}\right)^2} - 2\frac{\left(\widetilde{Y_c} - \widetilde{Y_{c_f}}\right)}{\left(\left(Y_{c_b} - Y_{c_f}\right)^2\right)}\frac{\left(\left(Y_{c_b} - \widetilde{Y_{c_f}}\right)Y_{c_f}\right)}{\widetilde{Y_{c_b}} - \widetilde{Y_{c_f}}}.$$

(5.25)

Die Herleitung dieser Zusammenhänge ist unter anderem bei Fiorina [29, 31] zu finden.

5.4 Modellierung der turbulenten Verbrennung

Für die *RANS*- bzw. die *LES*-Modellierung turbulenter isothermer Strömungen müssen die gemittelten bzw. gefilterten Bilanzgleichungen für die Gesamtmasse, den Impuls und die spezifische Enthalpie gelöst werden. Für turbulente nicht vorgemischte Flammen müssen die Mischung zwischen Brennstoff und Oxidator, sowie die chemische Reaktion und deren Interaktion mit der Turbulenz berücksichtigt werden. In dieser Arbeit wird dies durch die numerische Lösung der in Kapitel 5.3 vorgestellten Bilanzgleichungen für den Mischungsbruch und für den charakteristischen Massenbruch, der den Reaktionsfortschritt beschreibt, und deren Varianzen realisiert.

In diesem Kapitel soll nun darauf eingegangen werden, wie die Quellterme für die Bilanzgleichungen des für die chemische Reaktion charakteristischen Massenbruchs $\overline{\dot{\omega}}_{\gamma_c}$ und dessen Varianz $2\overline{Y_c''}\overline{\dot{\omega}_{\gamma_c}}$ modelliert werden.

5.4.1 Mathematische Grundlagen des Verbundwahrscheinlichkeitsdichte-Modells

In turbulenten Strömungen und Verbrennungsvorgängen können alle Feldgrößen durch stochastisch verteilte Variablen ϕ als Funktion von Ort x und Zeit t beschrieben werden. Im Verbundwahrscheinlichkeitsdichte-Modell (Joint Probability Density Function, JPDF) wird angenommen, dass die vollständige statistische Information der Zufallsvariablen ϕ durch eine Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungsfunktion (PDF) $\mathcal{P}(\varphi, x_i, t)^1$ wiedergegeben werden kann. Dabei wird für das Verbundwahrscheinlich-keitsdichte-Modell die PDF vorgegeben, welche durch den Mittelwert und den Schwankungswert bestimmt werden kann.

¹Im Folgenden wird zur besseren Übersicht auf die Kennzeichnung der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungsfunktion als Funktion des Ortes x_i und der Zeit t verzichtet.

Die Ableitung der Verteilungsdichtefunktion $\mathcal{D}(\varphi)$ definiert die PDF $\mathcal{P}(\varphi)$ einer Zufallsvariablen ϕ [85]:

$$\mathcal{P}(\varphi) = \frac{d\mathcal{D}(\varphi)}{d\varphi}$$
(5.26)



Abbildung 5.2: Darstellung zur Definition der Wahrscheinlichkeitsdichte (aus Hoffmann [40])

Der Zusammenhang zwischen der Verteilungsdichtefunktion $\mathcal{D}(\varphi)$ und deren PDF $\mathcal{P}(\varphi)$ in Abhängigkeit von Zeit *t* und Ort *x_i* ist in Abbildung 5.2 dargestellt. Demnach ist die Zufallsgröße ϕ mit einer Wahrscheinlichkeit von

$$\operatorname{Prob}(\varphi < \phi < \phi + d\varphi) = \mathcal{P}(\varphi)d\varphi \tag{5.27}$$

innerhalb des Intervalls $[\varphi: \varphi + d\varphi]$ zu finden.

Zur praktikablen Anwendung soll die Wahrscheinlichkeit, einen beliebigen Wert innerhalb des Wertebereichs der Variablen ϕ zu finden, gleich eins sein. Für diese Normierung gilt:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}(\varphi) d\varphi = 1 \tag{5.28}$$
Der Erwartungswert $Q(\phi)$ (Zentralmoment der Zufallsvariablen ϕ um den Wert Null) einer beliebigen Funktion $Q(\phi)$ erhält man über die Integration des Wertebereichs:

$$\overline{\mathcal{Q}}(\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{Q}(\phi) \mathcal{P}(\phi) d\phi$$
(5.29)

Für die Varianz (zweites zentrales Moment) gilt:

$$\overline{\mathcal{Q}^{\prime 2}}(\phi) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\mathcal{Q}(\phi) - \overline{\mathcal{Q}}(\phi) \right)^2 \mathcal{P}(\phi) d\phi$$
(5.30)

Die Standardabweichung $Q'(\phi)$ folgt aus der Quadratwurzel der Varianz:

$$Q'(\phi) = \sqrt{Q'^2}(\phi). \tag{5.31}$$

Ist die PDF einer Zufallsvariablen bekannt, können alle Momente beliebiger Ordnung bestimmt werden. Umgekehrt ist es nicht möglich, die PDF bei Kenntnis einer endlichen Anzahl Momente zu rekonstruieren [85].

Da ein komplexer Mechanismus wie die Verbrennung nicht nur durch die Funktion Q von nur einer Variablen zu beschreiben ist, wird im Folgenden die Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion (JPDF) betrachtet. Bei zwei stochastisch abhängigen Zufallsgrößen ϕ_1 und ϕ_2 ist die JPDF durch

$$\mathcal{P}_{12}(\varphi_1, \varphi_2) = \frac{\partial^2 \mathcal{D}_{12}(\varphi_1, \varphi_2)}{\partial \varphi_1 \partial \varphi_2}$$
(5.32)

gegeben. Damit ist die Wahrscheinlichkeit, dass sich die zwei Zufallsvariablen ϕ_1 und ϕ_2 im Stichprobenraum ϕ_1 und ϕ_2 befinden, gegeben durch:

$$Prob(\varphi_1 < \phi_1 < \phi_1 + d\varphi_1, \varphi_2 < \phi_2 < \phi_2 + d\varphi_2) = \mathcal{P}_{12}(\varphi_1, \varphi_2)d\varphi_1d\varphi_2 \quad (5.33)$$

Unter der Voraussetzung, dass die zwei Zufallsgrößen ϕ_1 und ϕ_2 statistisch unabhängig voneinander sind, wird die JPDF $\mathcal{P}_{12}(\varphi_1, \varphi_2)$ vereinfacht durch das Produkt aus PDF $\mathcal{P}_1(\varphi_1)$ und PDF $\mathcal{P}_2(\varphi_2)$ wiedergegeben:

$$\mathcal{P}_{12}(\varphi_1, \varphi_2) = \mathcal{P}_1(\varphi_1) \cdot \mathcal{P}_2(\varphi_2) \tag{5.34}$$

Die Randverteilung erhält man durch Integration der JPDF über nur einen Stichprobenraum:

$$\mathcal{P}_2(\varphi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{P}_{12}(\varphi_1, \varphi_2) d\varphi_1.$$
(5.35)

Analog zu den Gleichungen (5.29) und (5.30) ergeben sich für Erwartungswert und die Varianz der Funktion $Q(\phi_1, \phi_2)$:

$$\overline{\mathcal{Q}}(\phi_1,\phi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{Q}(\varphi_2,\varphi_1) \mathcal{P}_{12}(\varphi_1,\varphi_2) d\varphi_1 d\varphi_2$$
(5.36)

$$\overline{\mathcal{Q}^{\prime\prime2}}(\phi_1,\phi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\mathcal{Q}(\varphi_2,\varphi_1) - \overline{\mathcal{Q}}(\varphi_2,\varphi_1) \right)^2 \mathcal{P}_{12}(\varphi_1,\varphi_2) d\varphi_1 d\varphi_2 \quad (5.37)$$

Unter Verwendung von Gleichung (5.34) ergeben sich für Erwartungswert und Varianz der Funktion $Q(\phi_1, \phi_2)$:

$$\overline{\mathcal{Q}}(\phi_1,\phi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{Q}(\varphi_2,\varphi_1) \mathcal{P}_2(\varphi_1) \ \mathcal{P}_2(\varphi_2) \ d\varphi_1 d\varphi_2$$
(5.38)

$$\overline{\mathcal{Q}^{\prime\prime2}}(\phi_1,\phi_2) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left(\mathcal{Q}(\varphi_2,\varphi_1) - \overline{\mathcal{Q}}(\varphi_2,\varphi_1) \right)^2 \mathcal{P}_1(\varphi_1) \mathcal{P}_2(\varphi_2) \, d\varphi_1 d\varphi_2$$
(5.39)

5.4.2 Modellierung des Reaktionsquellterms

Eine Einführung in die Anwendung von PDF bzw. JPDF mit einer Reaktionsfortschrittsvariablen, um die Turbulenz-Chemie-Interaktion in der Reaktionsmodellierung zu beschreiben, findet sich unter anderem in [85, 8, 35].

Anwendung fand das JPDF-Reaktionsmodell am Engler-Bunte-Institut bei der Reduktion der Chemie in einer Globalchemie, wobei die Reaktion in zwei Bereiche aufgeteilt wurde. Zunächst wurde es für nicht vorgemischte Drallflammen von Philip [79] verwendet, wobei er den Reaktionsfortschritt über die adiabate Temperatur bestimmte. Weiterhin wurde das Modell mit der Beschreibung des Reaktionsfortschritts über den Ausbrandgrad von Habisreuther [39] und Hoffmann [40] verwendet. Die Modellerweiterung für die Berücksichtigung der Wärmeverluste, die auch in der Arbeit von Habisreuther schon beschrieben ist, wurde von Wetzel [112] realisiert.

Erst Kern [54] verwendete zur Reduktion der Chemie idealisierte Modellsysteme und benutze detaillierte Reaktionsmechanismen. Des Weiteren erweiterte er die bestehende Codebasis um die LES-Formulierung, welche auch von Galeazzo [34] verwendet wurde. Weiterhin ist es Kern zuzuschreiben, dass zusätzlich eine disperse Phase bei Verwendung des JPDF-Modells betrachtet werden kann. Dies ermöglicht Simulationen, welche die Verbrennung von flüssigem Brennstoff beschreiben. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde nur die Verbrennung gasförmiger Brennstoffe simuliert.

Die Chemie der Verbrennung wurde mit Hilfe des Mischungsbruchs f und des Reaktionsfortschritts c beschrieben. Dafür werden die in Kapitel 5.3.1 für den Mischungsbruch und in Kapitel 5.3.2 für den Reaktionsfortschritt vorgestellten Transportgleichungen gelöst. Es ergeben sich für die Transportgleichungen des spezifischen Massenbruchs Quellterme, die mit dem Verbundwahrscheinlichkeitsdichte-Modell aus Kapitel 5.4.1 in Abhängigkeit von Reaktionsfortschritt und Mischungsbruch sowie deren Varianzen modelliert werden können.

Für die Favre-Mittelung einer Größe ϕ wird die folgende Gleichung verwendet:

$$\widetilde{\phi}\left(\widetilde{f},\widetilde{f''^2},\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right) = \int_0^1 \int_0^1 \phi(f,c) \mathcal{P}_f \mathcal{P}_c \ df \ dc$$
(5.40)

Der mittlere Reaktionsquellterm $\overline{\dot{\omega}}_{Y_c}$ aus den Gleichungen (5.20) und (5.22) wird

wie folgt bestimmt:

$$\overline{\dot{\omega}}_{Y_c}\left(\widetilde{f},\widetilde{f''^2},\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right) = \overline{\rho}\left(\widetilde{f},\widetilde{f''^2},\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right) \int_0^1 \int_0^1 \frac{\dot{\omega}_{Y_c}(f,c)}{\rho(f,c)} \mathcal{P}_f \mathcal{P}_c \ df \ dc \tag{5.41}$$

Für die Transportgleichung (5.21) der Varianz des für den Reaktionspfad charakteristischen Massenbruchs $\widetilde{Y_c''}^2$ wird der Quellterm durch die folgende Gleichung berechnet:

$$\overline{\dot{\omega}_{Y_c}Y_c''}\left(\widetilde{f},\widetilde{f''^2},\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right) = \overline{\rho}\left(\widetilde{f},\widetilde{f''^2},\widetilde{c},\widetilde{c''^2},\right) \int_0^1 \int_0^1 \frac{\dot{\omega}_{Y_c}(f,c)}{\rho(f,c)} \left(Y_c(f,c) - \widetilde{Y}_c\left(\widetilde{f},\widetilde{f''^2},\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right)\right) \mathcal{P}_f \mathcal{P}_c \ df \ dc \tag{5.42}$$

Für den Favre-Mittelwert des für den Reaktionspfad charakteristischen Massenbruchs \tilde{Y}_c gilt nach Gleichung (5.40):

$$\widetilde{Y}_c\left(\widetilde{f},\widetilde{f''^2},\widetilde{c},\widetilde{c''^2}\right) = \int_0^1 \int_0^1 Y_c(f,c)\mathcal{P}_f \mathcal{P}_c \ df \ dc$$
(5.43)

5.4.2.1 β -Verteilungsfunktion

Zur Beschreibung der turbulenten Schwankung von Skalaren wird in dieser Arbeit ausschließlich die β -Verteilungsfunktion für die Wahrscheinlichkeitsdichte verwendet. Im Intervall [0 : 1] wird die β -Verteilungsfunktion durch

$$\mathcal{P}(\phi) = \frac{1}{\mathcal{B}(\alpha,\beta)} \phi^{\alpha-1} (1-\phi)^{\beta-1}$$
(5.44)

beschrieben. Dabei ergibt sich für die Normierung der β -Verteilungsfunktion:

$$\mathcal{B}(\alpha,\beta) = \int_0^1 \varphi^{(\alpha-1)} \left(1-\varphi\right)^{\beta-1} d\varphi$$
(5.45)

Der Erwartungswert und die Varianz der β -Verteilung berechnen sich über:

$$\overline{\phi} = \frac{\alpha}{\alpha - \beta} \tag{5.46}$$

$$\overline{\phi'^2} = \frac{\alpha\beta}{(\alpha+\beta+1)(\alpha+\beta)^2}$$
(5.47)

Aus den Definitionen von Erwartungswert (5.46) und Varianz (5.47) können die Parameter α und β der β -Verteilungsfunktion bestimmt werden:

$$\alpha = \overline{\phi} \left[\frac{\overline{\phi} \left(1 - \overline{\phi} \right)}{\overline{\phi'^2} - 1} \right] \tag{5.48}$$

$$\beta = (1 - \overline{\phi}) \,\overline{\phi} \left[\frac{\overline{\phi} \,(1 - \overline{\phi})}{\overline{\phi'^2} - 1} \right] \tag{5.49}$$

Die normierte Varianz ergibt sich aus

$$\overline{\phi_n'^2} = \frac{{\phi'}^2}{\overline{\phi_{max}'^2}},$$
(5.50)

wobei die maximale Varianz wie folgt bestimmt wird:

$$\overline{\phi_{max}^{\prime 2}} = \overline{\phi} \cdot (1 - \overline{\phi}) \tag{5.51}$$

In Abbildung 5.3 sind exemplarisch für drei Wertepaare aus Erwartungswert und normierter Varianz die β -Verteilungsfunktionen dargestellt. Die PDF ist also durch $\overline{\phi}$ und $\overline{\phi'_n^2}$, die durch Transportleichungen bestimmt werden, vorgegeben.



Abbildung 5.3: β -Verteilungsfunktion

5.4.2.2 Liu-Integration

Zur numerischen Integration wurde in dieser Arbeit der Integrationsalgorithmus nach Liu et al. [67] verwendet, der auf die Integration der eindimensionalen β -Funktionen spezialisiert ist. Dabei werden die Stützstellen am Rand exponentiell verteilt und die Randbereiche durch eine kumulative Verteilungsfunktion gelöst. Das Integral wird in Teilintegrale mit unterschiedlichen Integrationsgrenzen aufgeteilt:

$$\widetilde{\phi} = \int_{0}^{\delta} \phi(f) \,\mathcal{P}_{f}(f) \,df + \sum_{i=1}^{10} \int_{f_{i}}^{f_{i+1}} \phi(f) \,\mathcal{P}_{f}(f) df + \int_{1-\delta}^{1} \phi(f) \mathcal{P}_{f}(f) df \quad (5.52)$$

Jedes der Integrale wird nach der Rechteckregel bestimmt:

$$\int_{a}^{b} f(x) = \frac{b-a}{N} \sum_{i=1}^{N} f(a+ih) + \mathcal{O}(h)$$
(5.53)

Als Parameter der Integration des Liu Algorithmus wurden $n_{log} = 5$ Stützstellen für die logarithmischen Intervalle im Randbereich und $n_{lin} = 50$ Stützstellen für

die linearen Intervalle innerhalb [0, 1: 0, 9] verwendet. Als Abstand δ wurde der von Liu vorgeschlagene Wert von 10^{-6} verwendet.

5.4.2.3 Multidimensionale Integration chemischer Tabellen

Wenn eine beliebige Größe ϕ eine Funktion von *n* Variablen φ_n ist, so muss im *n*-dimensionalen Raum integriert werden. Für die mehrdimensionale Integration gilt:

$$\overline{\phi} = \int_{\varphi_n} \dots \int_{\varphi_2} \int_{\varphi_1} \phi(\varphi_1, \varphi_2, \dots \varphi_n) \mathcal{P}(\varphi_1, \varphi_2, \dots \varphi_n) d\varphi_1 d\varphi_2 \dots d\varphi_n$$
(5.54)

Unter der Voraussetzung statistischer Unabhängigkeit der Variablen kann eine mehrdimensionale Integration in *n* eindimensionale Integrationen aufgeteilt werden:

$$\overline{\phi} = \int_{\varphi_n} f_{n-1}(\varphi_1, \varphi_2, \dots \varphi_n) \mathcal{P}_n(\varphi_n) d\varphi_n$$
(5.55)

Wenn *n* Prozess-Variablen φ_n statistisch unabhängig voneinander sind, dann gilt für die Verbundwahrscheinlichkeit (vgl. Kapitel 5.4.1):

$$\mathcal{P}(\varphi_1, \varphi_2, \dots \varphi_n) = \prod_{i=1}^n \mathcal{P}_i(\varphi_i)$$
(5.56)

Somit folgt für die zu integrierende Funktion:

$$f_{n-1}(\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_n) = \int_{\varphi_{n-1}} ... \int_{\varphi_2} \int_{\varphi_1} \phi(\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_{n-1}) \mathcal{P}(\varphi_1, \varphi_2, ..., \varphi_{n-1}) d\varphi_1 d\varphi_2 ... d\varphi_{n-1}$$
(5.57)

55

5.5 Anwendung des Verbrennungsmodells

In diesem Kapitel wurden die theoretischen Grundlagen und Ansätze beschrieben, welche dem am Engler-Bunte-Institut entwickelten Modell zur Berechnung einer turbulenten Diffusionsflamme zugrunde liegen. Dieses Modell kann in zwei Teilschritte untergliedert werden. Zum einen wird eine Datenbank erstellt, welche die chemischen Informationen der Flamme enthält, zum anderen wird die Strömung berechnet.

Zur Erstellung der Datenbank wird zunächst die Chemie mit Hilfe der in Kapitel 5.2 vorgestellten Modellsysteme des idealen Satzreaktors oder der planaren laminaren Vormischflamme für Mischungsbrüche *f* zwischen 0 und 1 tabelliert. Dabei werden die Zeit bzw. die Ortskoordinate in den Raum der Reaktionsfortschrittsvariablen *c* transformiert. Die zweidimensionale Tabelle enthält die zu modellierende Bildungsrate des charakteristischen Speziesmassenbruchs $\dot{\omega}_{Y_c}$ in Abhängigkeit der Reaktionsfortschrittsvariablen *c* und des Mischungsbruchs *f*.

In einem weiteren Programm wird diese zweidimensionale Tabelle über eine β -Verteilungsfunktion integriert. Damit erhält man den mittleren Reaktionsquellterm $\overline{\omega}_{Y_c}$ und den Quellterm für die Transportgleichung der Varianz des für den Reaktionspfad charakteristischen Massenbruchs $2\overline{Y_c}''\overline{\omega}_{Y_c}$.

Neben den zum Lösen des Gleichungssystems notwendigen Reaktionsquelltermen werden auch verschiedene Speziesmassenbrüche, die Temperatur *T*, die Dichte ρ , die Temperaturleitzahl *a*, die laminare dynamische Viskosität μ_l , der charakteristische Speziesmassenbruch Y_c und die Hilfsvariablen zur Umrechnung vom charakteristischen Speziesmassenbruch Y_c in den Reaktionsfortschritt *c* tabelliert. Somit ergibt sich die Datenbank der turbulenten Chemie in Abhängigkeit der vier für die turbulente Verbrennungsreaktion charakteristischen Größen: den Favregemittelten Mischungsbruch \tilde{f} und dessen Varianz $\tilde{f''}^2$, sowie den Favre gemittelten Reaktionsfortschritt \tilde{c} und dessen Varianz $\tilde{c''}^2$.

Die notwendigen Transportgleichungen für den Favre gemittelten- Mischungsbruch \tilde{f} und dessen Varianz $\tilde{f''}^2$, sowie für den für die Reaktionspfade charakteristischen Massenbruch \tilde{Y}_c und dessen Varianz $\tilde{Y'_c}^2$ wurden in das Programmpaket OpenFO-AM 2.1.1 implementiert. Die für das Lösen der Transportgleichungen notwendigen Variablen, wie beispielsweise zusätzliche Quellterme oder die Dichten, werden aus der zuvor erstellen Datenbank ausgelesen. Eine detaillierte Beschreibung dieses Vorgehens steht in der Arbeit von Kern [54] zur Verfügung.

6 Experimenteller Aufbau

In diesem Kapitel wird die verwendeten Versuchsanlagen und die eingesetzte Messtechnik kurz vorgestellt. Zunächst wird auf die untersuchte Düse eingegangen, die eine abgehobene Flamme erzeugt. Danach wird auf die verwendeten Versuchsanlagen, die für die experimentellen Untersuchungen für flüssigen und gasförmigen Brennstoff verwendet wurden, eingegangen. Anschließend werden im letzten Teil dieses Kapitels die verwendeten Messtechniken vorgestellt.

6.1 Untersuchte Düse

Für die vorliegende Arbeit wurde eine luftgestützte Zerstäuber-Düse konzipiert, die sowohl mit gasförmigem als auch mit flüssigem Brennstoff betrieben werden kann. Eine Prinzipskizze und ein Detailbild der Düse sind in Abbildung 6.1 und 6.2 dargestellt. Die Düse basiert auf einem am Engler-Bunte-Institut entwickelten Konzept [118], welches eine abgehobene Flamme erzeugt. Die acht primären Luftkanäle sind exzentrisch angeordnet und erzeugen einen verdrallten Luftstrom. Die theoretische Drallzahl der primären Luftkanäle S_p lässt sich nach Gleichung (6.1) aus dem Verhältnis des Drehimpulsstroms \dot{D}_i zu dem Produkt aus Axialimpulsstrom \dot{I} und Düsenradius R_i bestimmen und beträgt 0,76.

$$S_p = \frac{\dot{D}_i}{\dot{I}_i R_i} \tag{6.1}$$

Die zwölf sekundären Luftkanäle sind radial angeordnet und erzeugen keinen Drall.

Zum Einbringen von flüssigem Brennstoff wurde ein Druckdrallzerstäuber der Firma Delavan verwendet. Dieser Druckzerstäuber erzeugt einen Hohlkegel mit einem



Öffnungswinkel von 70°. Die Durchflusszahl FN (Flow Number) beträgt nach Gleichung (6.2) 4,0 kg/h/ \sqrt{bar} . Sie ergibt sich aus dem Verhältnis des Massenstroms \dot{M} zur Quadratwurzel des Druckverlusts $\sqrt{\Delta p}$ über den Zerstäuber.

$$FN = \frac{\dot{M}}{\sqrt{\Delta p}} \tag{6.2}$$

Das von dem Druckdrallzerstäuber erzeugte Brennstoffspray wird auf den Filmleger aufgebracht und bildet dort einen Brennstofffilm. Dieser Film wird durch Scherkräfte des verdrallten Luftstroms aus den primären Luftkanälen zur Zerstäuberkante getrieben. Dort wird der Brennstofffilm durch die Scherkräfte zwischen der primären und der sekundären Luftströmung zerstäubt.

Für experimentelle Untersuchungen kann gasförmiger Brennstoff durch einen ringförmigen Spalt in der Zerstäuberlippe eingebracht werden.

Die effektive Fläche der Düse A_{eff} beträgt $131 \pm 4mm^2$.



Abbildung 6.2: Untersuchte Düse im Detail-Schnitt.

6.2 Versuchsanlagen

Für die experimentellen Untersuchungen mit flüssigem Brennstoff wurde eine am Engler-Bunte-Institut aufgebaute Hochdruckanlage verwendet. Es wurden die Chemilumineszenz der angeregten OH^* -Radikalen der Flamme und die Mie-Streuung der noch nicht verdampften Brennstofftröpfchen aufgenommen.

Die experimentellen Untersuchungen mit gasförmigem Brennstoff wurden am Paul-Scherrer-Institut durchgeführt. Dabei wurde ebenfalls die Chemilumineszenz der angeregten *OH*^{*}-Radikalen der Flamme aufgenommen, sowie die laserinduzierte Fluoreszenz der *OH*-Radikalen.

6.2.1 Versuchsanlage für Verbrennung mit flüssigem Brennstoff

Die von Kasabov [50] aufgebaute Versuchsanlage besteht aus einer Brennkammer mit zugehörigen Kontroll- und Regeleinrichtungen, sowie dem auf einem Traver-



Abbildung 6.3: Optisch zugängliche Brennkammer für erhöhte Drücke am Engler-Bunte-Institut [50].

sensystem montierten Messsystem zur Erfassung der Brennstofftröpfchen und der Chemilumineszenz der bei der Verbrennung entstehenden Radikalen.

Der prinzipielle Aufbau und Funktion der Brennkammer sind in Abbildung 6.3 dargestellt.

Die zu untersuchende Düse ist in einem Plenum befestigt. Dieses Plenum dient als Ausgleichsbehälter und sorgt dafür, dass die vorgewärmte Luft gleichmäßig verteilt in alle Düsenkanäle eintritt. Um den Wärmeverlust über die Außenwände zu minimieren, sind diese mit einem Isoliermaterial bedeckt.

Der Brennstoff, Kerosin vom Typ Jet-A1, wird mittels einer wassergekühlten Leitung dem Druckdrallzerstäuber zugeführt und durch diesen eingespritzt und zerstäubt. Die Kühlung der Brennstoffleitung ist erforderlich, um die Zersetzung des Jet-A1 aufgrund der hohen Umgebungstemperaturen zu verhindern und die Oberflächenspannung konstant zu halten.

Die Verbrennung findet in einem Quarzglasrohr mit einem Innendurchmesser von 94 *mm* und einer Länge von 200 *mm* statt. Um zu vermeiden, dass die Brennkammer durch die Verbrennungswärme beschädigt wird, wird der Zwischenraum mit Druckluft gekühlt. In den experimentellen Untersuchungen wurde der Kühlluftmassenstrom genauso groß eingestellt wie der zur Verbrennung durch die Düse vorgewärmte Verbrennungsluftmassenstrom. Somit wurde je nach untersuchtem Betriebspunkt der Kühlluftmassenstrom an den Verbrennungsluftmassenstrom angepasst.

Die Quarzglas-Brennkammer befindet sich in einem Stahlgehäuse. Die innere Wand des Stahlgehäuses ist schwarz beschichtet, um unerwünschtes Streulicht des Lasers während der Messungen zu absorbieren. Die Absorptionswärme wird durch Wasser abgeführt.

Eine detaillierte Beschreibung der Versuchsanlage findet sich in der Dissertation von Kasabov [50].

6.2.2 Versuchsanlage für Verbrennung mit gasförmigem Brennstoff

Die experimentelle Untersuchung der abgehobenen Verbrennung mit gasförmigem Brennstoff wurde in der Versuchsanlage mit optisch zugänglicher Brennkammer des Paul-Scherrer-Instituts durchgeführt (Abbildung 6.4).

Dieser Versuchsaufbau wurde zur Untersuchung von Flammengeschwindigkeiten vorgemischter Jet-Flammen konzipiert. Die Versuchsanlage wurde so angepasst, dass experimentelle Untersuchungen mit der in Kapitel 6.1 vorgestellten Düse durchgeführt werden konnten. Im Gegensatz zu der Brennkammer des Engler-Bunte-Instituts (vgl. Kapitel 6.2.1), wurde die vorgewärmte Verbrennungsluft axial und nicht radial der in Abbildung 6.4 als Mischstrecke beschriftetem Anlagenteil zugeführt und durch einen thermischen Massenstromregler geregelt. Ein entsprechend großes Plenum ist daher nicht notwendig. Für die Brennstoffzufuhr wurde eine neue Brennstoffleitung zur Düse gelegt.

Die zylindrische Brennkammer hat einen Innendurchmesser von 89 mm und eine Länge von 320 mm. Der Kühlluftmassenstrom außen an der Brennkammer wurde nicht an den Verbrennungsluftmassenstrom angepasst, sondern lag konstant bei 12,9 kg/h.



Abbildung 6.4: Optisch zugängliche Brennkammer für erhöhte Drücke am Paul-Scherrer-Institut [36, 16].

6.3 Messtechnik

Die in Kapitel 6.1 vorgestellte luftgestützte Zerstäuberdüse wurde in den zwei in Kapitel 6.2 vorgestellten Versuchsanlagen experimentell untersucht. Um die Phänomenologie der abgehobenen Flamme detaillierter beschreiben zu können, kamen verschiedene Messmethoden zum Einsatz, die in diesem Kapitel vorgestellt werden. Für die Untersuchung des isothermen Strömungsfeldes wurde die Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) eingesetzt. Die Mie-Streuung wurde gemessen, um den Verdampfungsfortschritt der Brennstofftröpfchen in der Brennkammer zu bestimmen. Mit der Chemilumineszenz und der laserinduzierten Fluoreszenz (LIF) wurden die Größe und die Position der Flamme innerhalb der Brennkammer eingegrenzt.

6.3.1 Laser-Doppler-Anemometrie (LDA)

Das isotherme Strömungsfeld wurde mit Hilfe der Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) bestimmt. Die LDA ist ein optisches Messverfahren zur örtlich und zeitlich hochaufgelösten Messung von Geschwindigkeiten. Damit ist es möglich, lokal nicht nur die mittlere Strömungsgeschwindigkeit zu erfassen, sondern auch die Strömungsfluktuationen und damit die Reynolds-Spannungen einer Strömung.

Nach Ruck [93] lässt sich das Messprinzip vereinfacht mit dem Interferenzstreifenmodell erklären (vgl. Abbildung 6.5). Im Schnittbereich zweier kohärenten monochromatischen Laserstrahlen, der zugleich das Messvolumen darstellt, entsteht ein Interferenzstreifenmuster. Der Abstand der Interferenzstreifen Δx kann aus dem Schnittwinkel 2 ϕ der beiden Laserstrahlen und der Wellenlänge der Strahlung $\lambda_{Strahlung}$ bestimmt werden:

$$\Delta x = \frac{\lambda_{Strahlung}}{2\sin\phi} \tag{6.3}$$

Ein der Strömung folgendes Teilchen streut beim Durchqueren des Messvolumens die Hell-Dunkel-Abschnitte des Interferenzstreifenmusters. Die Frequenz Δf der gestreuten Strahlung kann durch einen Detektor empfangen werden, um daraus die Geschwindigkeitskomponente senkrecht zu den Interferenzstreifen u_{\perp} zu bestimmen:

$$\Delta f = \frac{u_{\perp}}{\Delta x} = u_{\perp} \frac{2\sin\phi}{\lambda_{Strahlung}}$$
(6.4)



Abbildung 6.5: Prinzipskizze des Interferenzstreifenmodells nach Ruck [93].

bzw.

$$u_{\perp} = \frac{\Delta f \lambda_{Strahlung}}{2\sin\phi} \tag{6.5}$$

Der Betrag der Geschwindigkeit u_{\perp} wird mit Hilfe einer Bragg-Zelle aus der Frequenzverschiebung zwischen den beiden Laserstrahlen ermittelt. Die Phasenverschiebung Δf ergibt sich aus der Differenz der gemessenen Dopplerfrequenz f_D und der Shiftfrequenz f_S ($\Delta f = f_D - f_S$). Für eine detaillierte Beschreibung der LDA sei hier auf Ruck verwiesen [93].

Für die in dieser Arbeit durchgeführten Messungen wurde ein kommerzielles Dantec-Fiberoptics-LDA-System verwendet [21]. Als Lichtquelle dient ein Multiline Argon-Ionen-Laser Innova 70V der Marke Coherent mit einer Leistung von 400 *mW*. Das Laserlicht wird in die sogenannte Transmitterbox geleitet. Dort wird das Licht in zwei Strahlen aufgeteilt. Einer der beiden Laserstrahlen wird durch eine Bragg-Zelle um 40 *MHz* frequenzverschoben. Die beiden Strahlen werden durch Prismen in die verschiedenen Wellenlängen aufgetrennt. Für die axiale Geschwindigkeitskomponente wurden 514 *nm* (grün), für die radiale Komponente 488 *nm* (blau) und für die tangentiale Komponente 476, 5 *nm* (violett) verwendet. Damit stehen sechs Strahlen zur Verfügung, die in einen Lichtwellenleiter eingekoppelt und zu den LDA-Sonden geführt werden. Das an den Partikeln gestreute Licht wird durch eine Aufsatzlinse aufgenommen und auf eine Empfangsfaser fokussiert. Da alle drei Komponenten gleichzeitig gemessen werden, wird das Licht aus den Empfangsfasern jeweils durch Bandpassfilter geleitet, um es wieder nach Wellenlängen aufzutrennen und zu den Photomultipliern zu führen. Die erzeugten



Abbildung 6.6: Anordnung der Sonden des LDA-Messsystems [21].

elektrischen Signale werden jeweils von einem Signalprozessor ausgewertet um somit die Momentangeschwindigkeit zu berechnen.

Bei dem angewandten Messaufbau (vgl. Abbildung 6.6) wurden die drei Geschwindigkeitskomponenten in einer 150°-Vorwärtsstreuanordnung gemessen. Hierbei fungiert die erste Sonde (links im Bild) bezüglich zweier Strahlsysteme (hier: grün und blau) als Sender und gleichzeitig bezüglich des Streulichtes des dritten, gegenüberliegenden Strahlsystems (hier: violett) als Empfänger. Die in Abbildung 6.6 rechts dargestellte Sonde dient als einfacher Sender (violett) und als doppelter Empfänger des grünen und blauen Streulichts.

Der Strömung werden hinreichend kleine Tröpfchen aus Di-Ethyl-Hexyl-Sebacat (DEHS) mit einem Aerosolgenerator AGF10.0D der Firma Palas [74] zugesetzt, bei denen man aufgrund der kleinen Durchmesser davon ausgehen kann, dass sie der Strömung trägheitslos folgen.

6.3.2 Mie-Streuung

Neben den nicht-elastischen Streuprozessen, bei denen es zu einer Energieübertragung zwischen den streuenden Teilchen und dem Licht und damit zu einer Frequenzverschiebung des Streulichts kommt, gibt es auch elastische Streuprozesse, wie die Mie- bzw. Rayleigh-Streuung [19].

Die Streuung fasst Reflexion, Brechung und Beugung an Partikeln zusammen. Für die Messung des Verdampfungsfortschritts der flüssigen Brennstofftröpfchen ist die Mie-Streuung an Partikeln von Bedeutung, die größer sind als die Wellenlänge des verwendeten Lichtes $d >> \lambda_{Strahlung}$.



Abbildung 6.7: Abhängigkeit der Lichtstreuung von Partikeldurchmesser d und Strahlungswellenlänge $\lambda_{Strahlung}$ [19].

Im Sonderfall der Mie-Streuung, innerhalb des Rayleigh-Bereichs, gilt $\pi d / \lambda_{Strahlung} < 0, 3.$

Bei der Lorenz-Mie-Theorie wird von sphärischen und optisch isotropen Partikeln ausgegangen. Die Mie-Streuung wäre demnach nur abhängig von der Teilchengröße [19].

In der Praxis spielen jedoch die Form und Orientierung der Partikel eine Rolle für die Streuung des Lichts. Im Allgemeinen streuen größere Partikel mehr Licht (vgl. Abbildung 6.7). Die Partikelgröße beeinflusst aber auch die räumliche Streuung des Lichtes. Das Verhältnis zwischen nach vorne zu nach hinten abgestrahltem Licht kann im Bereich von 10² bis 10³ liegen, wobei kleinere Partikel gleichmäßiger streuen [19].

Für das in dieser Arbeit benutze Messsystem ist die Lichtintensität am aussagekräftigsten, welche seitlich streut, da die Kamera senkrecht zum Laserschnitt angeordnet ist.

Bei großen Partikeln wird das Licht hauptsächlich nach vorne gestreut und die Intensität ist näherungsweise proportional zu d^2 .

Für kleinere Partikel spielt die Beugung bei der Streuung eine Rolle und die Polarisation des einfallenden Lichtes hat einen signifikanten Einfluss, daher sollte das Laserlicht parallel zum Laserlichtband polarisiert sein, um die maximale Streulichtintensität an den Seiten zu erzeugen [19].

Die Mie-Streuung wurde in dieser Arbeit verwendet, um den Verdampfungsfortschritt der Brennstofftröpfchen zu bestimmen. Hierzu wurde ein gepulster frequenzverdoppelter Nd-YAG Laser von Quantel Brilliant mit einer Wellenlänge von 532 *nm*, einer Pulsdauer von 4 *ns* und einer Energie von bis zu 155 *mJ* pro Puls eingesetzt [87]. Der Laserstrahl wird durch ein System aus Linsen in einem sehr dünnen Lichtband mit einer Dicke von etwa 600 μm aufgespannt.

Das Stahlgehäuse der Versuchsanlage ist mit zwei schmalen Fenstern ausgestattet, die den Laserstrahl hinein und auch wieder hinaus lassen (vgl. Abbildung 6.3). Ein drittes, breiteres Fenster ist senkrecht zu den beiden anderen angebracht. Dies

ermöglicht es, mit einer Kamera Aufnahmen über das komplette Quarzrohr, in der die Flamme brennt, zu machen. Dadurch wird die Brennkammer für optische Messungen zugänglich.

Das Laserlicht wird an den Brennstofftröpfchen gestreut und das Streulicht von einer 80C60 HiSense PIV/PLIF CCD-Kamera von Dantec mit 1280 *x* 1024 Pixeln aufgenommen [20].

Um den Verdampfungsfortschritt zu ermitteln, wurden 200 Einzelbilder aufgenommen und gemittelt. Aus der örtlichen Intensität des Streulichts lässt sich schließen, ob noch Brennstofftröpfchen vorhanden sind oder ob sie bereits verdampft sind.

6.3.3 Chemilumineszenz

Um den Ort der Wärmefreisetzung und daraus die Abhebehöhe der Flamme bestimmen zu können, wurde die Eigenstrahlung der Flamme aufgenommen. Dabei wird ausgenutzt, dass die Verbrennung in vielen Elementarreaktionen abläuft, in denen Zwischenprodukte gebildet werden. Für bestimmte Bedingungen bedarf es, unabhängig von der Art des Brennstoffs, nur der Betrachtung von wenigen Elementarreaktionen, die für die Verbrennung geschwindigkeitsbestimmend sind. Najm et al. [72] zeigen eine Analyse des Reaktionsmechanismus der Oxidation von Methan in turbulent vorgemischten Flammen. Ein vereinfachter Reaktionspfad mit einer kleinen Anzahl an Zwischenprodukten ist in Abbildung 6.8 dargestellt. Die relative Menge des Kohlenstoffs in verschiedenen Reaktionswegen wurde quantifiziert. In diesen Analysen wird gezeigt, dass nur ein kleiner Teil des Kohlenstoffs Nebenreaktionswegen folgt, die CH^* -, C_2^* - und OH^* -Radikale bilden. Die am häufigsten vorkommenden angeregten CO_2^* -Moleküle werden über den Hauptreaktionsweg gebildet [59].

Kohlenwasserstoffflammen strahlen infolge von spontanen Emissionen der Moleküle im angeregten Zustand Licht im sichtbaren und nahen ultravioletten Bereich aus. Diese sogenannte Chemilumineszenz ist bei der Kohlenwasserstoffverbrennung primär auf CO_2^* -Moleküle, OH^* -, C_2^* -, CH^* - Radikale und mit kleinerem Emissionsanteil auf COH^* -, CO^* -, CH_2O^* - Radikale zurückzuführen [72]. Im Chemilumineszenz-Spektrum einer vorgemischten Methanflamme, wie es in Abbildung 6.9 zu sehen ist, ist ersichtlich, dass die engbandigen Emissionen der OH^* -, C_2^* - und CH^* -Radikale von der des CO_2^* -Radikals überlagert werden. Um eine quantitative Aussage über die relative Intensität treffen zu können, müsste demzufolge das komplette Chemi-lumineszenz-Spektrum ermittelt werden [59].

In dieser Arbeit wurden die Emissionen des OH^* -Radikals, die bei einer Wellenlänge von etwa 306 nm ein Maximum haben, aufgenommen. Dazu wurde eine



Abbildung 6.8: Diagramm des Reaktionspfades einer berechneten 1-D Methan-Luft Flamme aus [72].



Abbildung 6.9: Emissionsspektrum der angeregten Radikale einer vorgemischen Methan-Luft-Flamme aus [59].

intensivierte CCD-Kamera mit einer maximalen Auflösung von 512 x 512 Pixeln (Messung mit flüssigem Brennstoff) bzw. 1280 x 1024 Pixeln (Messung mit gasförmigem Brennstoff) verwendet. Um sicherzustellen, dass nur die Emissionen je einer Radikalenart detektiert werden, wurde ein Interferenzfilter verwendet, der Licht im Wellenlängenbereich der Emission der OH^* -Radikale transmittiert. Es wurden jeweils 200 (Messung mit flüssigem Brennstoff) bzw. 400 (Messung mit gasförmigem Brennstoff) Bilder aufgenommen, um daraus ein gemitteltes Bild zu erstellen.

6.3.4 Laserinduzierte Fluoreszenz

Die laserinduzierte Fluoreszenz (LIF) ist eine spektroskopische Messtechnik, um ausgewählte Moleküle und Radikale sichtbar zu machen. Bei der planaren LIF regt ein dünner Laserlichtschnitt eines engbandigen Lasers die mit der Wellenlänge des Lasers korrespondierenden Moleküle an. Die angeregten Moleküle emittieren die frequenzverschobene Fluoreszenzstrahlung, welche mit einer mit einem Bandpassfilter ausgestatteten intensivierten Kamera aufgenommen wird. Die grundlegenden physikalischen Phänomene der LIF sind unter anderem von Eckbreth et al. [24] ausführlich dargestellt.

In dieser Arbeit wurden OH-Radikale mit Hilfe eines Farbstofflasers mit einem frequenzverdoppelten Nd:YAG-Laser (Quantel) als Pumplaser mit einer Wellenlänge von 285 *nm* angeregt [87].

Die Fluoreszenz bei den Wellenlängen von 308 und 314 *nm* wurde senkrecht zu dem Lichtband mit einer 12-bit ICCD Kamera [92] (FlameStar 2F, LaVision) aufgenommen, die mit einem Bandpassfilter mit dem Transmissionsbereich von 304 bis 316 *nm* versehen war.

7 Validierung und Numerischer Aufbau

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde das am Engler-Bunte-Institut entwickelte JPDF-Verbrennungsmodell, welches von Kern [54] und Galeazzo [34] in OpenFOAM implementierte wurde, weiterentwickelt. Kern und Galeazzo zeigten bereits, dass das JPDF-Verbrennungsmodell abgehobene Flammen abbilden kann, im Gegensatz z.B. zum Eddy-Dissipation-Modell. In diesem Kapitel wird die modifizierte Version des JPDF-Verbrennungsmodells validiert. Da in dieser Arbeit die Phänomenologie der in Kapitel 6.1 vorgestellten Düse mit abgehobener Flamme untersucht werden sollte, wurde als Modellflamme ebenfalls eine abgehobene vollturbulente Flamme untersucht. Bei dieser zur Validierung des LES-Programms herangezogenen Modellflamme handelt es sich um eine abgehobene vorgemischte Freistrahlflamme, die von Cabra et al. [13, 12] experimentell untersucht wurde.

Des Weiteren soll auch der Einfluss der in Kapitel 5.2 vorgestellten Modellsysteme HRCT und PREMIX zur Reduktion der Chemie auf die Flammenstruktur gezeigt werden.

Am Ende des Kapitels werden das numerische Gitter und die Randbedingungen für den untersuchten luftgestützten Zerstäuber dargestellt.

7.1 Änderungen im JPDF-Programm

Das am Engler-Bunte-Institut entwickelte JPDF-Modell wurde von Kern in der OpenFOAM Version 1.5.x implementiert und in den Arbeiten von Kern und Galeazzo verwendet [54, 34]. Die Definition der Reaktionsfortschrittsvariablen ist in der modifizierten Programmversion identisch (vgl. Gleichung (5.18)).

$$c = \frac{Y_c - Y_{c,unverbrannt}}{Y_{c,verbrannt} - Y_{c,unverbrannt}}$$
(7.1)

Wie bereits in Kapitel 5.3.2 dargestellt, wurde in der vorliegenden Arbeit der charakteristische Massenbruch des Reaktionsfortschritts Y_c mit Hilfe einer Transportgleichung gelöst. In den Arbeiten von Kern und Galeazzo wurde die Transportgleichung nicht für den definierten charakteristischen Speziesmassenbruch Y_c , sondern für den normierten Reaktionsfortschritt c gelöst.

Im Folgenden werden die von Kern und Galeazzo verwendeten Gleichungen (7.2) bis (7.6) vorgestellt. Sie ergeben sich Analog zu den in Kapitel 5.3.2 vorgestellten Transportgleichungen, die in dieser Arbeit angewendet wurden.

Von Kern und Galeazzo wurden Favre-gemittelte Gleichungen für den normierten Reaktionsfortschritt \tilde{c} und für die Varianz des normierten Reaktionsfortschritts $\tilde{c''^2}$ angewendet:

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{c}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{c}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\mu_{eff}}{Sc_{c}}\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_{i}}\right) + \overline{\dot{\omega}}_{c},\tag{7.2}$$

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{c^{\prime\prime2}}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u_{i}}\widetilde{c^{\prime\prime2}}\right)}{\partial x_{i}} = -\frac{\partial}{\partial x_{i}} \left(\frac{\mu_{eff}}{Sc_{\widetilde{c^{\prime\prime2}}}}\frac{\partial\widetilde{c^{\prime\prime2}}}{\partial x_{i}}\right) + C_{\widetilde{c^{\prime\prime2}},1}\frac{\mu_{eff}}{Sc_{\widetilde{c^{\prime\prime2}}}}\left|\frac{\partial\widetilde{c}}{\partial x_{i}}\right|^{2} - C_{\widetilde{c^{\prime\prime2}},2}\overline{\rho}\frac{\varepsilon}{k}\widetilde{c^{\prime\prime2}} + 2\overline{c^{\prime\prime}}\dot{\omega}c^{\prime\prime}.$$
 (7.3)

Für die Transportgleichung (7.3) der Varianz des Reaktionsfortschritts $\widetilde{c''^2}$ wurde der Quellterm in den Arbeiten von Kern und Galeazzo durch die folgende Gleichung berechnet:

$$\overline{\dot{\omega}_{c}''c''}\left(\widetilde{f},\widetilde{f''^{2}},\widetilde{c},\widetilde{c''^{2}}\right) = \overline{\rho}\left(\widetilde{f},\widetilde{f''^{2}},\widetilde{c},\widetilde{c''^{2}},\right) \cdot \int_{0}^{1} \int_{0}^{1} \frac{\dot{\omega}_{c}(f,c) - 1}{\rho(f,c)} \left(c(f,c) - \widetilde{c}\left(\widetilde{f},\widetilde{f''^{2}},\widetilde{c},\widetilde{c''^{2}}\right)\right) \mathcal{P}_{f} \mathcal{P}_{c} df dc.$$
(7.4)

Für die massengewichtete Favre-gefilterte Transportgleichung ergab sich für den gefilterten Reaktionsfortschritt \tilde{c} , welche von Kern und Galeazzo in der LES verwendet wurde:

$$\frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{c}\right)}{\partial t} + \frac{\partial \left(\overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{c}\right)}{\partial x_{i}} + \frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\overline{\rho}\widetilde{u_{i}c} - \overline{\rho}\widetilde{u}_{i}\widetilde{c}\right) = -\frac{\partial}{\partial x_{i}}\left(\frac{\overline{\mu_{eff}}}{Sc_{c}}\frac{\partial c}{\partial x_{i}}\right) + \overline{\dot{\omega}}_{c}.$$
(7.5)

Für die Subgrid-Varianz des charakteristischen Massenbruchs $c^{"2}_{sgs}$ in der LES-Modellierung wurde von Kern und Galeazzo der folgende Ansatz verwendet:

$$\widetilde{c''^2}_{sgs} = C_{\widetilde{c''^2}_{sgs}} \Delta^2 \left(\frac{\partial \widetilde{c}}{\partial x_i}\right)^2.$$
(7.6)

Die Werte der Konstanten in den Gleichungen (7.2) bis (7.6) sind in Tabelle 5.2 dargestellt.

In einer nicht vorgemischten Flamme ändert sich der charakteristische Speziesmassenbruch im unverbrannten $Y_{c,unverbrannt}$ und verbrannten Zustand $Y_{c,verbrannt}$ örtlich aufgrund von der Änderung des Mischungszustandes zwischen Brennstoff und Oxidator. Daher wird der normierte Reaktionsfortschritt *c* je nach Zustand der Mischung mit einem anderen Wert normiert (vgl. Gleichung (7.1)). Die Änderung des normierten Reaktionsfortschritts \tilde{c} aufgrund der Änderung der Normierung ist in den Transportgleichungen (7.2), (7.3) und (7.5) nicht reflektiert und führt zu einem Fehler.

Um den Einfluss der zwei verschiedenen transportierten Größen \tilde{c} und Y_c auf die erhaltene Lösung einer abgehobenen Flamme beurteilen zu können und das angepasste Modell zu validieren, wurden LES-Simulationen durchgeführt. Dabei wurde neben der zu transportierenden für die Verbrennungsreaktion charakteristische Transportgröße auch das für die Reduktion der Chemie verwendete Modellsystem variiert. Um einen direkten Vergleich zwischen dem in [54, 34] und dem in dieser Arbeit verwendeten Programm durchzuführen, wurden die numerischen Randbedingungen und das Rechengitter von Kern [54] übernommen. Eine Ausnahme stellt das Verfahren zur Diskretisierung der Zeit dar. In der vorliegenden Arbeit wurde ein Verfahren 2. Ordnung verwendet, während Kern [54] nur auf ein Verfahren 1. Ordung zurückgegriffen hat.

7.2 Validierung anhand einer Modellflamme

Bei der von Cabra et al. [13, 12] untersuchten abgehobenen teilvorgemischten vollturbulenten Freistrahl-Flamme handelt es sich um eine hauptsächlich durch das chemische Zeitmaß bestimmte Flamme. Dabei wird durch ein Rohr ein vorgemischtes Methan/Luft-Gemisch (Jet) im Gleichstrom in einen Abgasstrom, welcher von 2200 mageren Wasserstoff/Luft-Flammen erzeugt wird, eingebracht. Abbildung 7.1 zeigt den Brennerkopf, während in Abbildung 7.2 schematisch der Versuchs-Aufbau der Cabra-Flamme zu sehen ist.



Abbildung 7.1: Brenner der Cabra-Flamme [13].



Abbildung 7.2: Schematischer Aufbau der Cabra-Versuchsanordnung [13].

	Jet	Coflow
Re [-]	28.000	23.300
$\mathcal{U}\left[\frac{m}{s}\right]$	100	5,4
d [mm]	4,57	210
T[K]	320	1350
$Y_{CH_4} \begin{bmatrix} kg \\ kg \end{bmatrix}$	0,215	—
$Y_{O_2} \left[\frac{kg}{kg}\right]$	0,195	0,142
$Y_{N_2} \left[\frac{k\bar{g}}{kg}\right]$	0, 59	0,758
$Y_{H_2O} \left[\frac{kg}{kg}\right]$	_	0,1

Tabelle 7.1: Randbedingungen der Cabra Flamme

Das Jet-Rohr hat einen inneren Durchmesser von 5,4 *mm*. Aus diesem Rohr strömt mit einer volumetrischen Geschwindigkeit von 100 $\frac{m}{s}$ ein 320 *K* kaltes unverbranntes Methan/Luft-Gemisch. Der Brennerkopf, in dessen Zentrum sich das Jet-Rohr befindet, hat einen inneren Gesamtdurchmesser von 210 *mm*. Am Eintritt des Methan/Luft-Gemisches strömt das 1350 *K* heiße Abgas der mageren Wasserstoff/Luft-Flammen mit einer volumetrischen Geschwindigkeit von 5,4 $\frac{m}{s}$. Somit handelt es sich um einen voll turbulenten Freistrahl in einer voll turbulenten Strömung.

Die für den Versuch relevanten Randbedingungen sind in Tabelle 7.1 zusammengefasst.

Die Cabra-Flamme eignet sich besonders für Validierungszwecke, da es sich aufgrund der hohen Jet-Austrittsgeschwindigkeit um eine abgehobene Flamme handelt. Durch das Einmischen von heißem mageren Abgas in den vorgemischten Methan/Luft-Freistrahl zündet die Flamme ohne externe Zündquelle aufgrund der zugeführten Wärme. Experiment und Simulationen werden im Folgenden nur anhand der Temperatur und des Mischungsbruchs verglichen, da nur diese auch experimentell untersucht wurden [13, 12].

7.2.1 Numerisches Setup der Cabra-Flamme

Die Simulationen wurden mit dem nicht-kommerziellen Programmpaket OpenFO-AM in der Version 2.1.1 durchgeführt. Bei dem verwendeten LES-Programm wird eine vollständig implizite kompressible Formulierung der in Kapitel 2 dargestellten Erhaltungsgleichungen verwendet. Für die Druckkorrektur wurde der erstmals von Issa [43] vorgeschlagene PISO-Algorithmus (Pressure-Implicit with Splitting of Operators) verwendet. Für die konvektiven und diffusiven Terme wurde ein gefiltertes zentrales Differenzenverfahren mit einem Diskretisierungsschema zweiter Ordnung verwendet. Für die Diskretisierung der Zeit wurde das Crank-Nicolson Schema verwendet. Um die Stabilität der Berechnung zu erhöhen, wurde das Crank-Nicolson Schema mit einem Faktor von 0,6 mit dem Euler Schema geblendet, woraus sich ebenfalls ein Schema zweiter Ordnung ergibt. In der Arbeit von Kern wurde bei der Simulation der Cabra-Flammen für die Diskretisierung der Zeit das reine Euler Schema, ein Verfahren erster Ordnung, verwendet. Eine ausführliche Erläuterung der verwendeten numerischen Techniken sind in der Literatur unter anderem in [28, 94] zu finden.

Für die Modellierung der turbulenten Skalen im Subgrid-Bereich wurde das in Abschnitt 3.6.2.1 eingeführte Smagorinsky-Modell mit der Smagorinsky-Konstanten $C_S = 0,1$ verwendet. Die turbulente Schmidt- und Prandtl-Zahl wurde zu $Sc_t = Pr_t = 0,7$ gesetzt. Die Filterweite Δ für die LES-Filterung wurde aus der kubischen Wurzel des Zellvolumens des Rechengitters berechnet. Zur Verbrennungsmodellierung wurde das in Kapitel 5 vorgestellt JPDF-Modell verwendet.

Für die LES-Simulationen wurde ein strukturiertes Rechengitter mit 2,1 Millionen hexaedrischen Zellen erstellt, welches die komplette dreidimensionale Geometrie umfasst. Die kleinste Zelle hat ein Volumen von $8, 6 \cdot 10^{-11} m^3$, während die größte Zelle ein Volumen von $6, 5 \cdot 10^{-8} m^3$ hat. Das maximale Seitenverhältnis zwischen längster und kürzester Kante beträgt 28.

Über ein Rohr wird ein Gemisch aus Luft und Methan zugeführt. Auf Höhe des Rohraustritts wird der Abgasstrom der Wasserstoffflammen im vollständig verbrannten Zustand aufgeprägt. Am Rand des Coflows wird das Rechengebiet durch eine Freistrahlrandbedingung begrenzt. Das Rechengebiet ist vom Rohraustritt bis zum Auslass 1 *m* lang und wird durch die Auslassrandbedingung begrenzt. Das Strömungsprofil der vollturbulenten Rohrströmung ist durch

$$u(r) = u_{max} \left(\frac{r}{R_{Jet}}\right)^{\frac{1}{7}} \text{mit } u_{max} = 1, 2u_{Jet}$$
(7.7)

gegeben. Das turbulente Längenmaß lt und die Turbulenzintensität I der Rohrströ-

Rand	$u\left[\frac{m}{s}\right]$	p [bar]	\widetilde{f}	ĩ
Rohraustritt	Gleichung (7.7)	$\nabla_n p = 0$	1	0
Rohrwand	0	$\nabla_n p = 0$	$\nabla_n f = 0$	$\nabla_n c = 0$
Coflow	5,4	$\nabla_n p = 0$	0	0
Freistrahlrand	$\nabla_n u = 0$	$ abla_n p = 0$	0	0
Auslass	$\nabla_n u = 0$	$p_{total} = 1$	$ abla_n f = 0$	$\nabla_n c = 0$

Tabelle 7.2: Randbedingungen für die LES der Cabra-Flamme.

mung wurden wie folgt vorgegeben:

$$l_t = 0,07d_h \text{ und } I = 0,16Re_{d_h}^{-\frac{1}{8}}.$$
 (7.8)

Dabei ist d_h der hydraulischen Rohrdurchmesser und Re_{d_h} ergibt sich aus der mit diesem Durchmesser d_h gebildete Reynoldszahl.

Für die LES-Simulationen wurden die turbulenten Strukturen am Rohraustritt durch ein von Klein et al. [56] entwickeltes Filterverfahren erzeugt. Dieses wurde von Galeazzo in das auf OpenFOAM basierte LES-Programm implementiert.

Die numerischen Randbedingungen sind in Tabelle 7.2 zusammengefasst.

Zur Erstellung der chemischen Tabellen wurde der GRI-3.0 Mechanismus [101] verwendet. Als Modellsysteme wurden der ideale Satzreaktor HRCT (vgl. Kapitel 5.2.1) und die eindimensionale Vormischflamme PREMIX mit $Le \neq 1$ (vgl. Kapitel 5.2.2) gewählt. Die Massenbrüche von Kohlenstoffmonoxid Y_{CO} und Kohlenstoffdioxid Y_{CO_2} sind für den Reaktionsverlauf der Cabra-Flamme entscheidend und definieren somit den für den Reaktionsfortschritt charakteristischen Speziesmassenbruch Y_c .

In Abbildung 7.3 sind oben die Kontur des Quellterms $\dot{\omega}_{Y_c}$ der Reaktionsfortschrittsvariablen $Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2}$ in Abhängigkeit vom normierten Mischungsbruch fund vom normierten Reaktionsfortschritt c für HRCT und PREMIX dargestellt.

In Abbildung 7.3 sind unten die Kontur des Quellterms $\dot{\omega}_c$ des normierten Reaktionsfortschritts

$$c = \frac{(Y_{CO} + Y_{CO_2}) - (Y_{CO} + Y_{CO_2})_{unverbrannt}}{(Y_{CO} + Y_{CO_2})_{verbrannt} - (Y_{CO} + Y_{CO_2})_{unverbrannt}}$$

in Abhängigkeit vom normierten Mischungsbruch f und vom normierten Reaktionsfortschritt c gezeigt.



Abbildung 7.3: Oben: Chemische Tabelle der Reaktionsfortschrittsrate $\dot{\omega}_{Y_c}$ der Cabra Flamme ($Y_c = Y_{CO} + Y_{CO_2}$) (a) idealer Satzreaktor und (b) planare laminare Vormischflamme mit $Le \neq 1$. Unten: Chemische Tabelle der Reaktionsfortschrittsrate $\dot{\omega}_c$ der Cabra Flamme ($c = \frac{(Y_{CO} + Y_{CO_2}) - (Y_{CO} + Y_{CO_2})_{unverbrannt}}{(Y_{CO} + Y_{CO_2})_{verbrannt} - (Y_{CO} + Y_{CO_2})_{unverbrannt}}$) (c) idealer Satzreaktor und (d) planare laminare Vormischflamme mit $Le \neq 1$ aus [54]. Im Gegensatz zum idealen Satzreaktor (Abbildung 7.3 (a) und (c)) kommt es bei der planaren laminaren Vormischflamme mit $Le \neq 1$ (Abbildung 7.3 (b) und (d)) aufgrund von Energie- und Stofftransport aus der Reaktionszone in die Vorwärmzone zu einer erhöhten Reaktionsrate mit niedrigeren *c*-Werten.

Für die Integration der chemischen Tabellen (vgl. Kapitel 5.4.2) wurde als Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion die β -Verteilung mit $n_{lin} = 50$ und $n_{log} = 20$ für die Anzahl der Stützstellen der linearen und der logarithmischen Intervalle des Liu Integrations-Algorithmus gewählt. Der Mischungsbruch wurde mit 30 Stützstellen aufgelöst, während der Reaktionsfortschritt mit 101 gleich verteilten Werten aufgelöst wurde. Es wurde eine Auflösung von 30 Stützstellen für die Varianz des Mischungsbruchs und die Varianz des Reaktionsfortschritts gewählt. Die Stützstellen für die Mischungsbruchvarianz wurden exponentiell mit einem Exponenten von 0,5 verteilt und die Stützstellen für die Reaktionsfortschrittsvarianz wurden gleichverteilt.

7.2.2 Ergebnisse der LES-Simulationen

In Abbildung 7.4 sind die gemittelten Temperaturen der Cabra-Flamme aus den LES-Simulationen dargestellt. Für (a) und (b) wurde für die Transportgleichung der spezifische Massenbruch des Reaktionsfortschritts \tilde{Y}_c verwendet (vlg. (5.22)), während (c) der Arbeit von Kern [54] entnommen wurde. Als Transportgleichung wurde in der Arbeit von Kern der Reaktionsfortschritt \tilde{c} transportiert (vgl. (7.5)). In (a) wurde die chemische Tabelle mit dem idealen Satzreaktor erstellt. Bei (b) und (c) wurde die Chemie mit Hilfe der planaren laminaren Vormischflamme mit $Le \neq 1$ reduziert.

Die Simulationen, in denen der spezifische Massenbruch des Reaktionsfortschritts \tilde{Y}_c in der Transportgleichung verwendet wurde (Abbildungen 7.4 (a) und (b)), zeigen eine nahezu identische Kontur und zünden in der Höhe von z/D = 40. Das Ergebnis der Simulation von Kern [54] in welcher der Reaktionsfortschritt \tilde{c} transportiert wird zeigt ein Zünden der Flamme in der Höhe von z/D = 55, also bei einer größeren Abhebehöhe. Das Bild der Flammenfront ist in der Simulation von Kern (a) und (b).



Abbildung 7.4: Konturplot der Favre-gemittelten Temperatur der Cabra-Flamme. Für (a) und (b) wurde für die Transportgleichung der spezifische Massenbruch des Reaktionsfortschritts \tilde{Y}_c verwendet (vlg. (5.22)). (c) ist der Arbeit von Kern [54] entnommen. Als Transportgleichung wurde der Reaktionsfortschritt \tilde{c} transportiert (vgl. (7.5)). In (a) wurde die chemische Tabelle mit dem idealen Satzreaktor erstellt. Bei (b) und (c) wurde die Chemie mit Hilfe der planaren laminaren Vormischflamme mit $Le \neq 1$ reduziert.



Abbildung 7.5: Vergleich zwischen Messwerten und LES-Ergebnissen für die Favre gemittelte Temperatur (blau) und den Mischungsbruch (rot) der Cabra-Flamme auf der Symmetrie-Achse.

In Abbildung 7.5 sind der Verlauf der Temperatur \tilde{T} in blau und des Mischungsbruchs \tilde{f} in rot dargestellt. Simulation (a) mit HRCT und \tilde{Y}_c ist durch eine durchgezogene Linie, Simulation (b) mit PREMIX $Le \neq 1$ und \tilde{Y}_c ist durch eine gestrichelte Linie, Simulation (c) mit PREMIX $Le \neq 1$ und \tilde{c} ist durch eine gepunktete Linie gekennzeichnet. Die Symbole zeigen die experimentellen Ergebnisse auf der Symmetrieachse.

Der Verlauf des Mischungbruchs \tilde{f} aus der Rechnung von Kern weicht weiter von den Messergebnissen ab als der im Rahmen dieser Arbeit berechnete Mischungbruch. Allgemein ist der Mischungsbruch in der Rechnung von Kern zu niedrig. Die Diskretisierung der Zeit nach einem Verfahren erster Ordnung, wie es von Kern verwendet wurde, ist diffusiver als ein Verfahren zweiter Ordnung [44]. Die leichten Unterschiede im Mischungsbruch sind demzufolge auf die höhere numerische Diffusion zurückzuführen.

Die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen (Abbildung 7.5 (a) und (b)) geben den Zündpunkt etwas zu niedrig wieder, zeigen aber eine gute

Übereinstimmung im Temperaturanstieg. Wie in den Konturplots schon durch eine kompakte Flammenfront aufgefallen, kann die Simulation (Abbildung 7.5 (c)) von Kern den Verlauf der Temperatur nicht gut wiedergeben. Die Temperatur zeigt einen zu steilen Anstieg und übersteigt auch die maximal gemessene Temperatur. Dieses Verhalten kann auch mit dem zu niedrig berechneten Mischungsbruch \tilde{f} zusammenhängen. Im Bereich der Flammenfront bewegt sich der gemittelte Mischungsbruch \tilde{f} zwischen 0,24 und 0,34 für (a) und (b) bzw. zwischen 0,19 und 0,31 für (c). Im Verlauf ist damit der Mischungsbruch zwischen 0,03 und 0,07 niedriger. Damit ist die Reaktionsfortschrittsrate bei (c) bis zum Faktor 10 größer als bei (a) und (b) (vgl. Abbildung 7.3). Durch die größere Reaktionsfortschrittsrate $\dot{\omega}_c$ folgt eine dünnere Flammenfront, da der Brennstoff schneller umgesetzt wird.

In Abbildung 7.6 bzw. Abbildung 7.7 sind die radialen Verläufe der Temperatur \tilde{T} und des Mischungsbruchs \tilde{f} dargestellt. Die unterschiedlichen Farben stehen in diesen beiden Abbildung für die verschiedenen axialen Positionen. Wie bereits in den vorherigen Abbildungen zu sehen, zeigen auch die radialen Verläufe (Abbildung 7.6) eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den LES (a) und (b) bei z/d = 15, z/d = 30 und z/d = 70. Da die Bereiche der Flammenfront aus den Simulationen nicht ganz mit der gemessenen Position der Flammenfront übereinstimmen, weichen in diesem Bereich (z/d = 40, z/d = 50) auch die radialen Verläufe deutlich ab. In Abbildung 7.7 sieht man, dass die Simulation (c) von Kern den Mischungsbruch leicht zu niedrig vorhersagt, was zu der leicht überhöhten Temperatur führt, die schon in Abbildung 7.5 aufgefallen ist.

7.2.3 Zusammenfassung

Mit der in diesem Kapitel durchgeführten Validierung anhand der Cabra-Flamme [13, 12] konnte bestätigt werden, dass das am Engler-Bunte-Institut entwickelte JPDF-Programm auch abgehobene Flammen gut abbildet.

In der vorliegenden Arbeit wurde der charakteristische Massenbruch des Reaktionsfortschritts \tilde{Y}_c in der Transportgleichung für die LES-Simulationen verwendet (vgl. Kapitel 7.1). Diese Simulationen zeigen eine bessere Übereinstimmung mit den von Cabra et al. [13, 12] experimentell ermittelten Temperatur- und Mischungsbruch-Verläufen als die Simulation von Kern [54].

Wahrscheinlich ist die schlechtere Übereinstimmung der Simulationsergebnisse von Kern mit den von Cabra et al. experimentell ermittelten Ergebnissen auf den zu niedrig vorhergesagten Mischungsbruch \tilde{f} zurückzuführen. Durch einen niedrigeren Mischungsbruch ergibt sich eine zu hohe Reaktionsfortschrittsrate $\dot{\omega}_c$. Aus einer höheren Reaktionsfortschrittsrate $\dot{\omega}_c$ ergibt sich eine dünnere Flammenfront,



Abbildung 7.6: Vergleich zwischen Messwerten und LES-Ergebnissen für die Favre gemittelte Temperatur der Cabra-Flamme für verschiedene radiale Positionen. LES (a) durchgezogene Linien, LES (b) gestrichelte Linien und Experiment (c) gepunktete Linien.



Abbildung 7.7: Vergleich zwischen Messwerten und LES-Ergebnissen für den Favre gemittelte Mischungsbruch der Cabra-Flamme für verschiedene radiale Positionen. LES (a) durchgezogene Linien, LES (b) gestrichelte Linien und Experiment (c) gepunktete Linien.

da der Brennstoff schneller umgesetzt wird. Für die im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Simulationen wurde daher wie bereits beschrieben für die zeitliche Diskretisierung ein Verfahren zweiter Ordnung gewählt.

Darüber hinaus wurden kaum Abweichungen zwischen den Methoden zur Reduktion der Chemie mit den verschiedenen Modellflammen festgestellt. Für den idealen Satzreaktor HRCT und die eindimensionale Vormischflamme PREMIX mit $Le \neq 1$ ist der Bereich der Flammenfront an nahezu identischer Position. HRCT zeigt eine geringfügig frühere Zündung als PREMIX mit $Le \neq 1$.

Für die im Folgenden vorgestellten Simulationen wird der idealen Satzreaktor HRCT zur Erstellung der chemischen Tabellen verwendet. In der Transportgleichung wird der charakteristische Massenbruch des Reaktionsfortschritts \tilde{Y}_c berechnet.

7.3 Numerisches Setup zur Untersuchung der abgehobenen Flammen

Sowohl für die isothermen als auch für die reaktiven adiabaten URANS und LES-Simulationen wurde das in Abbildung 7.8 dargestellte Rechengitter verwendet. Abbildung 7.8 (a) zeigt den rot markierten Auslass aus der Brennkammer (gelb). In Abbildung 7.8 (b) und (c) sind die acht primären Drallkanäle in blau und die zwölf durch Wände getrennten sekundären Luftkanäle in grün dargestellt. In Teil (b) ist ein Halbschnitt der Geometrie dargestellt. Die Luft-Eintrittsfläche in das Plenum (orange) ist rot eingefärbt. In Abbildung 7.8 (c) ist der ringförmigen Einlass für den gasförmigen Brennstoff in rot dargestellt. Auch der Platzhalter für den Druckzerstäuber ist rot dargestellt, wobei im Rahmen dieser Arbeit keine numerische Untersuchung der abgehobenen Verbrennung mit flüssigem Brennstoff durchgeführt wurde. Das Gitter besteht aus 2,3 Millionen hexaedrischen Elementen.

Die Randbedingungen sind in Tabelle 7.3 zusammengefasst. Für die LES des isothermen Strömungsfeldes wurde nur der Luftstrom und kein Brennstoffstrom simuliert. Daher wurde der für die reaktiven Simulationen definierte Einlass für den gasförmigen Brennstoff für die isotherme Simulation als Wand definiert. Als gasförmiger Brennstoff wurde in dieser Arbeit Methan (CH_4) verwendet. Damit kann der Mischungsbruch über die Elementenmassenbrüche von Kohlenstoff Z_C und Wasserstoff Z_H in Oxidator, Brennstoff und der jeweiligen lokalen Mischung


Abbildung 7.8: Rechengitter für die Simulationen der abgehobenen Flamme.

eindeutig beschrieben werden (vgl. Kapitel 5.3.1):

$$f = \frac{(Z_C + Z_H)_j - (Z_C + Z_H)_{j,Oxidator}}{(Z_C + Z_H)_{j,Brennstoff} - (Z_C + Z_H)_{j,Oxidator}}$$

Demnach beschreibt ein Mischungsbruch von 0 den reinen Oxidator und ein Mischungsbruch von 1 den reinen Brennstoff.

Der Reaktionsfortschritt wurde durch den Umsatz des Sauerstoffs beschrieben [64, 39, 40, 111] (vgl. Kapitel 5.3.2):

$$c = \frac{Y_{O_2,gebunden} - Y_{O_2,gebunden,unverbrannt}}{Y_{O_2,gebunden,verbrannt} - Y_{O_2,gebunden,unverbrannt}}$$

Dabei ist $Y_{O_2,gebunden}$ der Massenbruch des lokal chemisch gebundenen Sauerstoffs, $Y_{O_2,gebunden,unverbrannt}$ der Massenbruch des chemisch gebundenen Sauerstoffs im Frischgas (hier $Y_{O_2,gebunden,unverbrannt} = 0$) und $Y_{O_2,gebunden,verbrannt}$ der Massenbruch des chemisch gebundenen Sauerstoffs im thermischen Gleichgewicht des Abgases. Demnach entspricht ein Reaktionsfortschritt von 0 einem Gemisch im unverbrannten Zustand und ein Reaktionsfortschritt von 1 einem Gemisch im verbrannten Zustand.

Der Massenstrom an Verbrennungsluft und der Massenstrom an Methan wurden an den jeweiligen Eintrittsflächen als Dirichlet-Randbedingung (konstanter Wert) vorgegeben (Eintrittsring für Verbrennungluft in Abbildung 7.8 (b) rot und Eintrittsring für Methan auf Filmleger in Abbildung 7.8 (c) rot dargestellt). An den Wänden wurde als Geschwindigkeit der Wert Null für alle drei Geschwindigkeitskomponenten (Haftbedingung) angenommen. Für den Brennkammerauslass wurde für die Strömungsgeschwindigkeit die Neumann-Randbedingung (Gradienten von Null) verwendet. Die Strömung wird am Eintritt ohne Turbulenz aufgeprägt. Die Turbulenz entsteht am Eintritt in die Luft-Kanäle und innerhalb der Düse.

Für den Totaldruck an den Einlassrändern und an den Wänden wird ebenfalls ein Gradient von Null verwendet. Am Auslass wird der jeweilige Totaldruck über eine Totaldruckrandbedingung vorgegeben.

Für die reaktiven LES wurden adiabate Wände angenommen. Der Reaktionsfortschritt \tilde{c} beträgt an den Einlassrändern Null. Dies gilt auch für den Mischungsbruch \tilde{f} von Luft am Luft-Einlass, während der Mischungsbruch für Methan am Gas-Einlass eins ist. An den Wänden und am Auslass gilt für den Reaktionsfortschritt und den Mischungsbruch eine Nullgradientenrandbedingung. Weitere Details des numerischen Aufbaus wurden analog zu denen der Validierungsrechnung der Cabra-Flamme gewählt. Diese sind in Kapitel 7.2.1 festgehalten.

Rand	$u\left[\frac{m}{s}\right]$	p [bar]	\widetilde{f}	ĩ	T[K]
Luft-	\dot{m}_{Luft}	$\nabla_n p = 0$	0	0	573 K
Einlass Gas-	Йсц	$\nabla_n n = 0$	1	0	293 K
Einlass		• np 0	-	0	
Wände	0	$\nabla_n p = 0$	$\nabla_n f = 0$	$\nabla_n c = 0$	$\nabla_n T = 0$
Auslass	$\nabla_n u = 0$	<i>p</i> total	$\nabla_n f = 0$	$\nabla_n c = 0$	$\nabla_n T = 0$

Tabelle 7.3: Randbedingungen für die LES der abgehobenen Flammen.

8 Ergebnisse und Diskussion

Im folgenden Kapitel werden die Ergebnisse der numerischen und experimentellen Untersuchungen, welche mit der in Kapitel 6.1 beschriebenen Düse durchgeführt wurden, vorgestellt und diskutiert.

Das isotherme Strömungsfeld wurde mit Hilfe von LDA-Messungen experimentell untersucht. Begleitend wurden *URANS* und *LES* Rechnungen durchgeführt. Die Simulationen wurden anhand des experimentell ermittelten Strömungsfeldes validiert und die Anwendbarkeit des Strömungslösers auf eine reaktive Simulation wurde geprüft.

Im Anschluss werden die durchgeführten reaktiven Simulationen unter Variation des Druckverlustes vorgestellt und es wird genauer auf die Struktur der turbulenten Flamme eingegangen. Die Anwendbarkeit des verwendeten JPDF-Verbrennungsmodells auf abgehobene turbulente Flammen wurde bereits in Kapitel 7.2 nachgewiesen.

Abschließend werden die experimentellen Ergebnisse der Untersuchungen an Methan-Flammen bei verschiedenen Betriebsbedingungen gezeigt und bewertet. Neben der Untersuchung der Struktur der turbulenten Flammen im Zusammenhang mit den reaktiven *LES* liegt das Augenmerk auf dem Vergleich von flüssigem und gasförmigem Brennstoff. Die Ergebnisse der Verbrennung von Jet A-1 wurden bereits in der Dissertation von Kasabov [49] diskutiert. In dieser Arbeit wurde untersucht, inwiefern sich die Verbrennung gasförmiger Kraftstoffe hiervon unterscheidet.

8.1 Isothermes Strömungsfeld

Um das Strömungsfeld der Düse genauer zu charakterisieren, wurden LDA-Messungen an einer Reihe von Messpunkten innerhalb der Brennkammer durchgeführt. Dabei lag der Fokus auf dem Gebiet am Austritt der Düse, in welchem sich die Flammenbasis der abgehobenen Flamme befindet. Untersucht wurde eine isotherme Strömung, ohne den Einfluss der Verbrennung auf das Strömungsfeld. Der Betriebspunkt lag bei 1 *bar* Absolutdruck (atmosphärisch), 3 % Druckverlust über die Düse und 50 °C Lufttemperatur. Die Brennstoffeinlässe wurden nicht durchströmt.

Es wurden die axiale- u_x , radiale- u_y und tangentiale- u_z Strömungsgeschwindigkeit (hier handelt es sich um ein zylindrisches Koordinatensystem) an einer Reihe von Messpunkten in der Brennkammer vermessen. Dabei wurden sowohl die gemittelten Geschwindigkeiten als auch die Turbulenzparameter ermittelt. Die *LDA*-Messungen wurden mit einer Datenrate von mindestens 10 und bis zu 80 *kHz* für jeden Messpunkt für 45 *s* durchgeführt. Die Messpunkte reichten nicht bis zum äußeren Rand der Brennkammer.

Neben der experimentellen Untersuchung des isothermen Strömungsfeldes wurde auch eine numerische Untersuchung dieser Strömung durchgeführt. Es wurden eine *URANS* und eine *LES* durchgeführt. Das Rechengitter und die numerischen Randbedingungen sind in Kapitel 7.3 beschrieben. Für die *URANS* wurden 1,5 *Mio* Zeitschritte gerechnet. Für die *LES* wurden 1 *Mio* Zeitschritte mit einem Abstand von $2 \cdot 10^{-7}$ s gerechnet. Dies entspricht einer physikalischen Zeit von 0,2 s. Die physikalische Rechenzeit ist damit länger als die Verweilzeit in der Brennkammer, welche 0, 15 s beträgt. Die *LES*-Rechnungen wurde auf 128 Prozessoren durchgeführt. Die Gesamtrechenzeit betrug 140000 CPU-Stunden, was einer Netto-Rechenzeit von 45 Tagen entspricht.

8.1.1 Stromfunktion und Frequenzanalyse

Abbildung 8.1 zeigt die gemittelte Axialgeschwindigkeit mit schwarzen Isolinien bei $\overline{u_x} = 0\frac{m}{s}$ (links) und die Stromfunktion (rechts) aus LDA-Messungen des isothermen Strömungsfeldes. Die Stromfunktion Ψ bei einem bestimmten Radius rstellt das Verhältnis zwischen dem Volumenstrom, der durch die Mantelfläche mit dem Radius r geht und dem Gesamtvolumenstrom, der durch die Brennkammer mit dem Radius R_{Wand} geht, dar. Unter der Annahme einer konstanten Dichte im isothermen Strömungsfeld und dem im Experiment eingestellten Volumenstrom \dot{V}_0 , wird die Stromfunktion Ψ wie folgt gebildet:

$$\Psi(r,L) = \frac{2\pi \int_0^R \rho(r,L) U(r,L) r \, dr}{2\pi \int_0^{R_{Wand}} \rho(r,L) U(r,L) r \, dr} = \frac{2\pi \int_0^R U(r,L) r \, dr}{\dot{V}_0}.$$
(8.1)

Anhand der Kontur der Axialgeschwindigkeit kann man die Rezirkulationszone am Düsenaustritt in der Symmetrieachse der Brennkammer erkennen. Aufgrund



Abbildung 8.1: Kontur der gemittelten Axialgeschwindigkeit mit schwarzen Isolinien bei $\overline{u_x} = 0\frac{m}{s}$ (links) und Stromfunktion (rechts) aus LDA-Messungen des isothermen Strömungsfeldes.

der geringen Drallzahl der Düse ist die innere Rezirkulationszone sehr klein. Aus den *LDA*-Messungen lässt sich ermitteln, dass maximal 2 % des durch die Düse durchgesetzten Gesamtmassenstroms rezikuliert werden.

Aufgrund der äußeren Begrenzung des Strömungsfeldes durch die Brennkammerwand saugt der aus der Düse austretende Strahl im äußeren Randbereich sein eigenes Strahlmedium wieder ein. Dadurch bildet sich eine äußere Rezirkulationszone aus. Die äußere Rezirkulationszone ist maßgeblich für die Stabilität der abgehobenen Flamme verantwortlich, da dadurch Radikale und Wärme zur Flammenwurzel gelangen. Eine Zündung der untersuchten abgehobenen Flamme ohne äußere Begrenzung ist daher nicht möglich. Zwischen den beiden Rezirkulationszonen bildet sich in Düsennähe ein ringförmiger Bereich mit hoher Axialgeschwindigkeit aus, der durch hohe Gradienten der Axialgeschwindigkeit in radialer Richtung begrenzt ist. Weiter stromab hat die Strömung einen Strahlcharkater.

In den experimentellen Verbrennungsversuchen konnte beobachtet werden, dass die Flamme in der Brennkammer mit relativ niedriger Frequenz um die Symmetrieachse zu rotieren scheint. Anhand der in Abbildung 8.2 dargestellten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (*PDF*) der Geschwindigkeitskomponenten für R = 30 mmund L = 90 mm ist eine Bimodalität in der *PDF* vor allem in der axialen Geschwindigkeit u_x (a) und der tangentialen Geschwindigkeit u_z (e) zu erkennen. Diese bimodale Verteilung spiegelt die Existenz von zwei vorherrschende Strömungszuständen zu unterschiedlichen Zeiten wieder, deren Strömungsgeschwindigkeit stark schwankt. Durch eine diskreten Fourier-Transformation *FFT* konnte ein Frequenzmaximum im niederfrequenten Bereich ausgemacht werden. Der Frequnzbereich der jeweiligen Geschwindigkeitskomponente ist in Abbildung 8.2 (jeweils links) dargestellt. Danach liegt die beobachtete Umlauf-Frequenz bei etwa 3 - 4 *Hz*. Dies unterstützt die Beobachtung der Rotation der Flamme um die Symmetrieachse der Brennkammer. Damit handelt es sich um eine präzedierende Strömung.

8.1.2 Vergleich zwischen experimentellen und numerischen Ergebnissen

Das isotherme Strömungsfeld bei 1 *bar* Absolutdruck, 3 % Druckverlust über die Düse und 50 °C Lufttemperatur wurde sowohl mit einer *LDA*-Messung als auch numerisch untersucht. Es handelt sich um eine mit einer Frequenz von 3 - 4 *Hz* präzedierende Strömung. Dies wurde im vorhergehenden Kapitel 8.1.1 bereits dargestellt. Es wurde eine *URANS* durchgeführt, auch wenn nicht zu erwarten ist, dass das Strömungsfeld exakt wiedergegeben werden kann. Auch mit der durchgeführten *LES* konnten die niederfrequente Anteile der Strömung nicht vollständig aufgelöst werden. Eine analog zu den *LDA*-Messergebnissen durchgeführte diskrete Fourier-Transformation *FFT* konnte kein eindeutiges Frequenzmaximum im niederfrequenten Bereich erkennen lassen.

Im Folgenden werden die experimentellen und numerischen Ergebnisse verglichen. In den Abbildungen 8.3, 8.5 und 8.7 ist der Vergleich zwischen den Messwerten (Symbole) und der *LES*- (durchgezogene Linien) Ergebnisse für die gemittelten Geschwindigkeiten an verschiedenen axialen Positionen der Brennkammer dargestellt. Abbildung 8.3 zeigt zusätzlich die gemittelte Axialgeschwindigkeit der *URANS*-Ergebnisse (gestrichelte Linien). In den Abbildungen 8.4, 8.6 und 8.8 folgt die Darstellung verschiedener Turbulenzgrößen des Strömungsfeldes für die experimentellen- und *LES*-Ergebnisse an verschiedenen axialen Positionen.

Die gemittelte axiale Geschwindigkeit $\overline{u_x}$ (Abbildung 8.3) der *LES* stimmt sehr gut mit den Messergebnissen überein. Die für eine Drallströmung typische Rezirkulationszone im Bereich der Symmetrieachse der Strömung kann mit der *LES* gut wiedergegeben werden. Auch das Maximum der gemittelten axialen Geschwindigkeit im Übergangsbereich zwischen dem Starrkörperwirbel im inneren Bereich zum Potentialwirbel im äußeren Bereich des Drall-Strömungsfeldes kann die *LES* gut abbilden. Tendenziell ist die gemittelte axiale Geschwindigkeit $\overline{u_x}$ bei der *LES* niedriger als bei den Ergebnissen der LDA-Messungen und nimmt in Strömungsrichtung und mit zunehmendem Radius schneller ab.



Abbildung 8.2: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (*PDF*) der axialen Geschwindigkeit u_x (a), der radialen Geschwindigkeit u_y (c) und der tangentialen Geschwindigkeit u_z (e) sowie der jeweils zugehörige Frequenzbereich für $R = 30 \ mm$ und $L = 90 \ mm$.



Abbildung 8.3: Vergleich zwischen Messwerten (Symbole), *URANS*- (gestrichelte Linien) und *LES*- (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die gemittelte axiale Geschwindigkeit $\overline{u_x}$ an verschiedenen axialen Positionen.



Abbildung 8.4: Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und *LES*- (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die axiale Geschwindigkeitsschwankung $\sqrt{\overline{u'_x u'_x}}$ an verschiedenen axialen Positionen.

Die Ergebnisse der *URANS* weichen stark von den experimentell ermittelten Strömungsgrößen ab. Mit der *URANS* kann die Rezirkulationszone nicht wiedergegeben werden. Daher ergibt sich auch kein Maximimum der Strömungsgeschwindigkeit im Übergangsbereich zwischen dem Starrkörperwirbel und dem Potentialwirbel. Die hier untersuchte instabile Strömung mit einer anisotropen Wirbelviskosität kann durch die *URANS* nicht beschrieben werden. Daher werden die Ergebnisse der *URANS* im Folgenden nicht weiter diskutiert.

Die axiale Geschwindigkeitsschwankung $\sqrt{u'_x u'_x}$ (Abbildung 8.4) kann ebenfalls durch die *LES* gut wiedergegeben werden. Sie durchläuft im Bereich des Übergangs vom Starrkörper- in den Potentialwirbel ein Maximum. Ein weiteres Maximum im Verlauf von $\sqrt{u'_x u'_x}$ ist im Bereich von |R| = 8 mm zu finden. Dieses zweite Maximum in der Schwankungsgeschwindigkeit kann mit der *LES* nicht gut wiedergegeben werden. Auch im weiteren Verlauf ist die Geschwindigkeitsschwankung aus der *LES* tendenziell zu niedrig.

Im Bereich von etwa $|R| = 8 \ mm$ bis $|R| = 18 \ mm$ weicht die Geschwindigkeitsschwankung zwischen der *LES* und den experimentellen Ergebnissen in der axialen gemittelten Geschwindigkeit und der axialen Geschwindigkeitsschwankung um bis zu 50 % (bei $|R| = 13 \ mm$) ab. Die *LES* zeigt hier eine zu niedrige axiale Geschwindigkeitsschwankung $\sqrt{u'_x u'_x}$. Im Übergangsbereich zwischen den sehr hohen axialen Geschwindigkeiten zu den Geschwindigkeiten um 0 $\frac{m}{s}$ nimmt die axiale Geschwindigkeit in der *LES* schneller ab und ist daher niedriger als im Experiment.

Bei der gemittelten radialen Geschwindigkeit $\overline{u_y}$ (Abbildung 8.5) zeigt der Verlauf der Messpunkte im Bereich $|R| < 15 \ mm$ eine breitere Streuung. In Abbildung 8.6 ist die radiale Geschwindigkeitsschwankung $\sqrt{\overline{u'_y u'_y}}$ dargestellt. 6 mm über der Düse zeigt sich eine Geschwindigkeitsschwankung von fast 25 $\frac{m}{s}$, während die mittlere Geschwindigkeit nahezu 0 $\frac{m}{s}$ beträgt. Bei diesen hohen Geschwindigkeitsschwankungen sinkt die Qualität der Messergebnisse. Der Vergleich von Simulationen und Messungen zeigt starke Abweichungen. Mit der *LES* kann der erwartete Wendepunkt im Verlauf von $\overline{u_y}$ auf der Symmetrieachse wiedergegeben werden. Im Bereich $|R| > 15 \ mm$ nähert sich die mittlere radiale Geschwindigkeit bei der *LES* schneller dem Wert 0 $\frac{m}{s}$ als die experimentellen Ergebnisse dies zeigen. In der *LES* ist die radiale Geschwindigkeitsschwankung $\sqrt{u'_y u'_y}$ niedriger als im Experiment.

Hervorzuheben an den *LES* und an den experimentell ermittelten Ergebnissen der untersuchten Drallströmung sind die zwei Maxima, welche die gemittelte Tangentialgeschwindigkeit $\overline{u_z}$ durchläuft (siehe Abbildung 8.7). Normalerweise durchläuft die gemittelte Tangentialgeschwinigkeit einer Drallströmung nur ein Maximum [117]. Die primären Drallkanäle der Düse prägen der Strömung eine innere Rezirkulationszone auf, wodurch das erste Maxima in der Tangentialströmung entsteht. Die sekundären Kanäle der Düse sind nicht verdrallt. In diesem Bereich zeigt sich ein Minimum in der Tangentialgeschwindigkeit $\sqrt{u'_x u'_x}$. Das zweite Maxima in der Tangentialgeschwindigkeit entsteht durch den konvektiven Transport des Impulses über die äußere Rezirkulationszone.

Im Bereich |R| < 7 mm stimmt die gemittelte Tangentialgeschwingkeit aus der *LES* sehr gut mit den Messergebnissen überein. Im weiteren Verlauf ist aber die Tangentialgeschwindigkeit in der *LES* bis zu 40 % höher und das Minimum und das folgende Maximum in der Tangentialgeschwindigkeit sind im Vergleich zum Experiment zu kleineren Radien hin verschoben.

Ein sehr deutlicher Unterschied ergibt sich zwischen den experimentell ermittelten tangentialen Geschwindigkeitsschwankungen $\sqrt{\overline{u'_z u'_z}}$ und denen aus der *LES* (Abbildung 8.8). Die Messung zeigt auch hier deutlich höhere Werte.

Die schlechtere Übereinstimmung der Schwankungsgeschwindigkeiten ist auch auf eine geringe physikalische Zeit von 0, 2 s der *LES* zurückzuführen. Diese Zeit ist nicht ausreichend, um die niederfrequenten präzedierenden Strömung mit 3 – 4 Hz



Abbildung 8.5: Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und *LES*- (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die gemittelte radiale Geschwindigkeit $\overline{u_y}$ an verschiedenen axialen Positionen.



Abbildung 8.6: Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und *LES*- (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die radiale Geschwindigkeitsschwankung $\sqrt{u'_y u'_y}$ an verschiedenen axialen Positionen.

wiederzugeben. Die höheren Schwankungswerte der Messergebnisse ergeben sich aus dem konvektiven Transport durch die hin und her schwappende Strömung.

In Abbildung 8.9 sind die Kontur der gemittelten Strömungsgeschwindigkeitskomponenten der LDA-Messungen (jeweils links) und der *LES*-Rechnungen (jeweils rechts) dargestellt.

Im Bereich außerhalb der Kernströmung der Düse bei |R| > 8 mm ergeben sich mit der *LES* höhere Tangentialgeschwindigkeiten als bei den Messungen. Im Gegensatz dazu ist die Axialgeschwindigkeit im Bereich von etwa |R| = 8 mm bis |R| = 18 mmin der *LES* niedriger als in den experimentell ermittelten Ergebnissen. Die untersuchte Drallströmung zeigt ein zweites Maximum in der Tangentialgeschwindigkeit. Diese Besonderheit weisen sowohl *LES* als auch Experiment auf.

Die Schwankungen der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten in der *LES* sind niedriger als bei den Messungen, da die niederfrequenten Schwingungen aufgrund der geringen Rechenzeit nicht erfasst wurden. Dies spiegelt sich auch in der turbulenten kinetischen Energie k wieder. Die Wurzel der turbulenten kinetischen Energie \sqrt{k} ist in Abbildung 8.10 aufgetragen und zeigt für die *LES* niedrigere Werte als für die Ergebnisse der LDA-Messungen.



Abbildung 8.7: Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und *LES*- (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die gemittelte tangentiale Geschwindigkeit $\overline{u_z}$ an verschiedenen axialen Positionen.



Abbildung 8.8: Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und *LES*- (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die tangentiale Geschwindigkeitsschwankung $\sqrt{\overline{u'_z u'_z}}$ an verschiedenen axialen Positionen.

8.1.3 Zusammenfassung

Es wurde das isotherme Strömungsfeld bei einem Betriebspunkt (1 *bar* Absolutdruck, 3 % Druckverlust über die Düse, 50 °C Lufttemperatur) sowohl mit einer *LDA*-Messung experimentell als auch mit einer *LES* numerisch untersucht.

Mit den experimentellen Daten konnte bestätigt werden, dass es sich um eine mit einer Frequenz von 3 - 4 *Hz* präzedierende Strömung (vgl. Kapitel 8.1.1) handelt.

Zusammenfassend zeigt sich eine gute Übereinstimmung zwischen dem experimentell ermitteltem Strömungsfeld und den Ergebnissen der *LES*. Die geringeren Schwankungsgeschwindigkeiten in der *LES* im Vergleich zu den Ergebnissen der *LDA*-Messung können auf eine geringe physikalische Rechenzeit von 0,2 s der *LES* zurückgeführt werden. Die niederfrequenten Schwingungen konnten nicht in der statistischen Geschwindigkeitsauswertung der *LES* erfasst werden. Die vermeintlich höhere Turbulenz der Messergebnisse ergeben sich aus der Auswertung des hin und her schwappenden Strömungsfeldes bei einer Messdauer von 45 s.

Mit der *URANS* konnte das komplexe präzedierende isotherme Strömungsfeld nicht abgebildet werden. Daher ist diese Art der Simulation nicht geeignet, um das Strömungsfeld der untersuchten Düse darzustellen. Im Folgenden wird daher auf die Darstellung der Ergebnisse aus den reaktiven *URANS*-Simulationen verzichtet.



Abbildung 8.9: Kontur der gemittelten Strömungsgeschwindigkeiten für die axiale (oben) und die tangentiale (unten) Strömungsgeschwindigkeit aus den LDA-Messungen (jeweils links) und den *LES*-Rechnungen (jeweils rechts).



Abbildung 8.10: Vergleich zwischen Messwerten (Symbole) und *LES*- (durchgezogene Linien) Ergebnissen für die Wurzel der turbulenten kinetischen Energie \sqrt{k} an verschiedenen axialen Positionen.

8.2 Reaktive Simulationen

Für das isotherme Strömungsfeld konnte eine gute Übereinstimmung zwischen den experimentellen Ergebnissen der LDA-Messungen und den Ergebnissen der *LES* (vgl. Kapitel 8.1) gezeigt werden.

Das in Kapitel 5 vorgestellte Verbrennungsmodell wurde anhand einer abgehobenen Flamme (Kapitel 7.2) validiert.

Um auch das reaktive Stömungs-, Mischungs- und Reaktionsfeld genauer phänomenologisch zu untersuchen, wurden reaktive *LES* durchgeführt. Als Modellsystem zur Reduktion der Chemie wurde der ideale Satzrekator *HRCT* verwendet. Der numerische Aufbau wurde bereits in Kapitel 7.3 vorgestellt.

Um den Einfluss des Druckverlustes über die Düse auf das Flammenbild der in dieser Arbeit untersuchten Düse genauer zu untersuchen, wurden *LES* von der Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck p von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur T_0 von 573 *K* für unterschiedliche Druckverluste $\Delta p / p_0$ über die Düse durchgeführt. Eine Übersicht der Betriebsbedingungen mit der jeweiligen volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 und dem vorgegebenen Luft-Volumenstrom \dot{V}_0 ist in Tabelle 8.1 aufgetragen.

$\Delta p/p_0$	р	λ	T_0	$u_0\left[\frac{m}{s}\right]$	$\rho_0 \left[\frac{kg}{m^3}\right]$	$\dot{V}_0 \left[\frac{m^3}{h}\right]$
1%	4 bar	1,9	573 K	56,9	2,4	27,3
3%	4 bar	1,9	573 K	100,3	2,4	48,0
5%	4 bar	1,9	573 K	131,7	2,4	63,1

Tabelle 8.1: Physikalische Randbedingungen für die reaktiven Simulationen.

In den Abbildungen 8.11, 8.12 und 8.13 sind die mit der jeweiligen volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 normierten gemittelten Geschwindigkeiten an verschiedenen axialen Positionen der Brennkammer dargestellt. Vor allem die normierte gemittelte Axial- und Tangentialgeschwindigkeit zeigt bei der Variation des Druckverlustes ein ähnliches Strömungsbild. Aufgrund der geringen mittleren Geschwindigkeit war die physikalische Rechenzeit für diese komplexe Strömung nicht ausreichend, um den Mittelwert der radialen Geschwindigkeit zu bilden (vgl. Diskussion zum isothermen Strömungsfeld in Kapitel 8.1).

Abbildung 8.14 zeigt die mit der jeweiligen volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 normierte Quadratwurzel der turbulenten kinetischen Energie \sqrt{k}/u_0 . Auch der Verlauf der normierten turbulenten kinetischen Energie stimmt bei der Variation des Druckverlustes überein.



Abbildung 8.11: Vergleich der mit der volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 normierten Axial-Geschwindigkeit $\overline{u_x}/u_0$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* bei 1 % (durchgezogene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %- (gepunktete Linien) Druckverlust über die Düse.

Sowohl die gemittelten Geschwindigkeiten $\overline{u_x}$, $\overline{u_y}$ und $\overline{u_z}$ als auch die turbulente Geschwindigkeitsschwankung \sqrt{k} sind proportional zur jeweiligen volumetrischen Düsengeschwindigkeit der untersuchten Betriebspunkte. Mit Erhöhung der Düsenaustrittsgeschwindigkeit nehmen diese Größen im gleichen Maße zu, wie die volumetrische Geschwindigkeit. Daraus ist zu schließen, dass sich die untersuchte Strömung im Reynolds-Ähnlichkeitsbereich befindet.

Analog zur Re-Ähnlichkeit der Strömungsgrößen verhält sich auch die Mischung. In Abbildung 8.15 ist die gemittelte Luftzahl $\overline{\lambda}$ für die variierten Druckverluste an verschiedenen axialen Positionen dargestellt. Die Mischungsfelder bei unterschiedlichen Druckverlusten unterscheiden sich kaum. Dies führt letztendlich auch zu einem einheitlichen Bild im Bereich der Flammenbasis.



Abbildung 8.12: Vergleich der mit der volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 normierten Radial-Geschwindigkeit $\overline{u_y}/u_0$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* bei 1 % (durchgezogene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %- (gepunktete Linien) Druckverlust über die Düse.



Abbildung 8.13: Vergleich der mit der volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 normierten Tangential-Geschwindigkeit $\overline{u_z}/u_0$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* bei 1 % (durchgezogene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %-(gepunktete Linien) Druckverlust über die Düse.



Abbildung 8.14: Vergleich der mit der volumetrischen Düsengeschwindigkeit u_0 normierten Quadratwurzel der turbulenten kinetischen Energie \sqrt{k}/u_0 für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} =$ 1,9, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* bei 1 % (durchgezogene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %- (gepunktete Linien) Druckverlust über die Düse.



Abbildung 8.15: Vergleich der gemittelten Luftzahl $\overline{\lambda}$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1, 9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* bei 1 % (durchgezogene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %- (gepunktete Linien) Druckverlust über die Düse.

In den experimentellen Untersuchungen wurde das Eigenleuchten der angeregten OH^* -Radikale der Flamme aufgenommen. Dabei handelt es sich nicht um eine Schnittaufnahme, sondern um die Draufsicht auf die Flamme. In den experimentell aufgenommenen Bildern ist also die Summe der in der Flamme entstandenen Licht-Emissionen zu sehen (siehe z.B. Abbildung 8.22). Um eine Vergleichbarkeit zwischen experimentellen Ergebnissen und den Simulationen herzustellen, wird kein Schnittbild des Quellterms des Reaktionsfortschritts durch die Symmetrieachse der Flamme gezeigt. Stattdessen wurde der Quellterm des Reaktionsfortschritts über den Radius aufsummiert und normiert. In Abbildung 8.16 ist die über den Radius integrierte und mit dem Maximum des Quellterms des Reaktionsfortschritts normierte lokale Reaktionsrate $i = \overline{\omega}_{Y_c}/(\overline{\omega}_{Y_c})_{max}$ (analog zur normierten Chemilumineszenz) dargestellt. Die Flammenbasis ist bei allen drei untersuchten Druckverlusten auf der gleichen Höhe zu finden. Jedoch zeigt sich, dass mit zunehmendem Druckverlust das Maximum der Reaktionsrate stromab wandert. Die Flamme wird länger, aber kaum breiter. Das Flammenvolumen vergrößert sich.

Anhand des gemittelten Quellterms des Reaktionsfortschritts $\overline{\omega}_{Y_c}$ (Abbildung 8.17 oben) zeigt sich, dass auch die Reaktion auf der Symmetrielinie unabhängig vom Druckverlust am gleichen Ort von etwa L = 40 mm beginnt. Demnach ist der Ort der Flammenstabilisierung unabhängig vom Druckverlust.

Es wird aber auch deutlich, dass sich mit zunehmendem Druckverlust das Ma-



Abbildung 8.16: Über den Radius integrierter, zeitlich gemittelter normierter Quellterm des Reaktionsfortschritts $i = \overline{\omega}_{Y_c} / (\overline{\omega}_{Y_c})_{(max)}$ und Iso-Linien bei den gemittelten Reaktionsfortschritten $\overline{c} = 0, 1; 0, 5; 0, 9$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1, 9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* für verschiedene Druckverluste.



Abbildung 8.17: Vergleich des absoluten (oben) und des mit der volumetrischen Geschwindigkeit u_0 reduzierten (unten) gemittelten Quellterms des Reaktionsfortschritts $\overline{\omega}_{Y_c}$ auf der Symmetrieachse für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* bei 1 % (durchgezogene Linien), 3 %- (gestrichelte Linien) und 5 %- (gepunktete Linien) Druckverlust über die Düse.

109

ximum der Reaktionsrate stromab verlagert und sich der Verbrennungsbereich vergrößert. Die Erhöhung des Druckverlustes bei konstanter Luftzahl, konstantem Absolutdruck und konstanter Luft-Vorwärmtemperatur entspricht einer Erhöhung des Durchsatzes und somit einer Verringerung der Verweilzeit. In geringerer Zeit muss demzufolge in der Brennkammer mehr Brennstoff umgesetzt werden. Dies kann zum einen durch eine erhöhte Reaktionsgeschwindigkeit oder durch ein größeres Volumen, in dem die Reaktion stattfindet, erreicht werden.

In den gezeigten Simulationen geschieht beides. Das Flammenvolumen vergrößert sich. Mit zunehmendem Druckverlust wird die Flamme länger. In gewissem Maße nimmt auch der Wert des gemittelten Quellterms des Reaktionsfortschritts $\overline{\omega}_{Y_c}$ zu (vgl. Abbildung 8.17 oben), die turbulente Umsatzrate steigt also. Durch die Reduzierung mit der volumetrischen Geschwindigkeit (vgl. Abbildung 8.17 unten) zeigt sich, dass der Quellterm des Reaktionsfortschritts nicht in dem Maße steigt, wie der Durchsatz sich erhöht, bzw. die Verweilzeit sinkt.

Da das Strömungs- und Mischungsfeld mit zunehmendem Durchsatz ähnlich ist, die turbulente Brenngeschwindigkeit aber nicht im gleichen Maße steigt, vergrößert sich das Flammenvolumen.

Abbildung 8.18 zeigt die Kontur des instationären Reaktionsfortschritts *c* und die Isolinien für 10 % und 90 % des maximalen instationären Quellterms des Reaktionsfortschritts $\overline{\omega}_{Y_c}$ für die verschiedenen untersuchten Druckverluste. Auch hier zeigt sich, dass sich das Volumen der Flamme vergrößert.

$\Delta p/p_0$	$A[cm^2]$	$A[cm^2]$	$A[cm^2]$
	(c = 0, 1)	(c = 0, 5)	(c = 0, 9)
1%	53	110	142
3%	50	138	188
5%	52	146	214

Tabelle 8.2: Instationäre Flammenoberfläche aus den reaktiven Simulationen bei verschiedenen Druckverlusten.

In Tabelle 8.2 ist das Ergebnis der Auswertung der Flammenoberfläche dargestellt. Dazu wurde die dreidimensionale Iso-Oberfläche für den instationären Reaktionsfortschritt bei c = 0, 1, c = 0, 5 und c = 0, 9 bestimmt (dargestellt in Abbildung 8.18). Die Iso-Oberfläche bei c = 0, 1 ist für alle drei Betriebspunkte ähnlich, die maximale Abweichung liegt bei 8%. Für die ermittelten Iso-Oberflächen bei c = 0, 9 vergrößert sich die Fläche um 51% vom Betriebspunkt $\Delta p/p_0 = 1\%$ zu $\Delta p/p_0 = 5\%$. Dies



Abbildung 8.18: Kontur des instationären Reaktionsfortschritts *c* und die Isolinien für 10 % und 90 % des maximalen instationären Quellterms des Reaktionsfortschritts $\overline{\omega}_{Y_c}$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1, 9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* für verschiedene Druckverluste.

belegt die Aussage, dass sich das Flammenvolumen vergrößert. Die Größe der Iso-Oberfläche, in der die Reaktion beginnt (c = 0, 1), bleibt bei erhöhtem Düsendurchsatz annähernd konstant, während sich das Reaktionsvolumen vergrößert. Eine analoge Auswertung wurde unter anderem auch von [17, 18, 37] durchgeführt. Hier wurden aus zweidimensionalen experimentellen Untersuchungen unter Auswertung der *OH*-Laserinduzierten Fluoreszenz die "Flame Brush Thickness" bestimmt. Dabei wurde der Reaktionsfortschritt über das *OH*-Radikal definiert. Griebel et al. [37] beschreiben explizit, dass mit zunehmender Düsenaustritts-Geschwindigkeit bzw. mit zunehmendem Durchsatz einer vorgemischten Methan-Jet-Flamme das Flammenvolumen steigt.

Es gibt in der Literatur verschiedene Ansätze, mit denen die turbulente Flammengeschwindigkeit bestimmt werden kann [77, 66, 23]. Je nach Wahl des Ansatzes ergeben sich unterschiedliche turbulente Flammengeschwindigkeiten für die gleiche Flamme, was unter anderem von Lawn et al. [61] und Shepherd et al. [98] gezeigt wurde.

Bei einem dieser Ansätze wird der zugeführte globale Luft-Volumenstrom \dot{V}_0 mit einer definierten Flammenfront in Relation gesetzt, analog zu [99, 17, 18, 61, 98]:

$$S_{t,global} = u_0 \cdot \frac{\rho_0}{\rho(\overline{c})} \cdot \frac{A_e f f}{A(\overline{c})} = \frac{\dot{V}_0}{A(\overline{c})} \cdot \frac{\rho_0}{\rho(\overline{c})}.$$
(8.2)

In der vorliegenden Arbeit wurde die Flammenfront über den gemittelten Reaktionsfortschritt \overline{c} definiert. Die globale turbulente Flammengeschwindigkeit $S_{t,global}$ wurde anhand der Iso-Oberflächen bei $\overline{c} = 0, 1$ und $\overline{c} = 0, 9$ ermittelt (die entsprechenden Iso-Linien für $\overline{c} = 0, 1; 0, 5; 0, 9$ sind in Abbildung 8.16 dargestellt) und ist in Tabelle 8.3 dargestellt.

Alternativ kann die lokal vorliegende gemittelte Strömungsgeschwindigkeit orthogonal zur Flammenfront als Flammengeschwindigkeit definiert werden. Dazu wurde in dieser Arbeit die Strömungsgeschwindigkeit auf der Iso-Oberfläche für den gemittelten Reaktionsfortschritt bei $\bar{c} = 0, 1$ ausgewertet. Der über die Fläche gemittelte Mittelwert dieser Geschwindigkeiten wurde als lokale Flammengeschwindigkeit $S_{t,lokal}$ definiert und ist ebenfalls in Tabelle 8.2 dargestellt. Die Auswertung der lokalen Flammengeschwindigkeit $S_{t,lokal}$ liefert ähnliche Ergebnisse wie die ermittelte globale turbulente Flammengeschwindigkeit $S_{t,global}$.

In Abbildung 8.18 wird auch deutlich, dass sich die Form des Bereichs in dem die Reaktion stattfindet verändert. Mit zunehmender Düsenaustrittsgeschwindigkeit wird die Flamme voluminöser. Es bilden sich immer größere abgetrennte Bereiche

$\Delta p/p_0$	$A[cm^2]$ $(\bar{c} = 0, 1)$	$A[cm^2]$ $(\bar{c} = 0,5)$	$A[cm^2]$ $(\bar{c} = 0,9)$	$S_{t,global}\left[\frac{m}{s}\right]$ $(\bar{c}=0,1)$	$S_{t,global}[\frac{m}{s}]$ ($\bar{c} = 0,9$)	$S_{t,lokal}[\frac{m}{s}]$ ($\bar{c} = 0, 1$)
1%	17,6	43,3	86,2	4,8	2,4	4,4
3%	17,0	47,3	101,0	9,5	3,8	8,2
5%	18,1	53,3	119,7	10,9	3,9	10,2

Tabelle 8.3: Gemittelte Flammenoberfläche und turbulente Flammengeschwindigkeit aus den reaktiven Simulationen.

mit unverbranntem Gemisch. Dies lässt darauf schließen, dass sich das Regime der Flamme ändert. Auch wenn es sich bei der untersuchten Flamme nicht um eine reine Vormischflamme handelt, wird hier eine Einordnung der teilvorgemischten abgehoben brennenden Flamme in das von Borghi vorgeschlagene Diagramm [7, 8] zur Einteilung von turbulenten Flammen vorgenommen.

Die Berechnung der Eigenschaften einer laminaren Flamme wurde mit dem Programm PREMIX [53] und dem Mechanismus GRI3.0 [101] durchgeführt. Als Randbedingungen wurden eine Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* und ein Absolutdruck von 4 *bar* angenommen (globale Randbedingen). Borghi schlug für nicht vorgemischte Flammen vor, die stöchiometrische Luftzahl zur Berechnung der laminaren Größen zu verwenden [8]. Dieser Vorgehensweise wurde nicht entsprochen, da in den Simulationen der Bereich der Reaktionszone nicht im stöchiometrischen Gemisch zu finden ist. Dies erkennt man in Abbildung 8.19 anhand der Kontur der lokalen instationären Luftzahl λ und die Isolinien für 10 % und 90 % des maximalen instationären Quellterms des Reaktionsfortschritts $\overline{\omega}_{Y_c}$ für die verschiedenen Druckverluste. Stattdessen wurde die globale Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$ zur Berechnung der laminaren Größen verwendet. Diese Annahme wird dadurch gerechtfertigt, dass die Luftzahl in den Bereichen der Reaktion nur unwesentlich um $\lambda = 1,9$ schwankt (vgl. Abbildung 8.19). Damit erweitert sich das Gebiet, in dem die Flammenfront im Borghi-Diagramm eingeordnet werden muss.

Mit den getroffenen Annahmen ergibt sich eine laminare Brenngeschwindigkeit von 18 $\frac{cm}{s}$. Die Flammendicke wird nach Peters [77] durch

$$\delta = \frac{\lambda_{\text{Wärme, verbrannt}}}{\rho_{unverbrannt} \cdot c_{p_{unverbrannt}} \cdot S_l}$$
(8.3)

abgeschätzt. Dabei ergibt sich eine laminare Flammendicke von $\delta = 0,248 mm$ (siehe Tabelle 8.4).

Das turbulente integrale Längenmaß l_t wurde durch die Ortskorrelation auf Höhe der Flammenbasis (bei L = 30 mm) aus der Simulation berechnet und liegt zwischen



Abbildung 8.19: Kontur der lokalen instationären Luftzahl λ und die Isolinien für 10 % und 90 % des maximalen instationären Quellterms des Reaktionsfortschritts $\overline{\omega}_{Y_c}$ für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1, 9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* für verschiedene Druckverluste.

	me.						
р	T_0	λ	S_l	$\lambda_{ ext{Wärme, verbr.}}$	$ ho_{unverbr.}$	c _{punverbr} .	δ
4bar	573K	1,9	$18\frac{cm}{s}$	$0,118\frac{W}{mK}$	2, $4\frac{kg}{m^3}$	1, $1 \frac{kJ}{kgK}$	0,248 <i>mm</i>

Tabelle 8.4: Randbedingungen und berechnete Eigenschaften der laminaren Flamme.

0,42 $mm \le l_t \le 2,1 mm$. Die turbulente Geschwindigkeitsschwankung u_t konnte aus der Iso-Oberfläche bei $\overline{c} = 0, 1$ ermittelt werden.

Tabelle 8.5: Eigenschaften der Flammenfront aus den reaktiven Simulationen.

$\Delta p/p_0$	$S_l\left[\frac{cm}{s}\right]$	$\delta [mm]$	$l_t \ [mm]$	$u_t \left[\frac{m}{s}\right]$	Da _t
1%	18	0,248	0,42 - 2,1	6,2-8,6	0,035 - 0,177
3%	18	0,248	0,42-2,1	11,3 – 15,7	0,019 - 0,097
5%	18	0,248	0, 42 - 2, 1	14, 4 - 20, 0	0,015 - 0,076

Unter den gegebenen Randbedingungen und den getroffenen Annahmen lassen sich die Flammen bei den unterschiedlichen Betriebspunkten dem Bereich der homogenen Flammenfront im Borghi-Diagramm zuordnen (siehe 8.20).

Mit den ermittelten Turbulenz-Größen und der Einordung im Borghi-Diagramm können die aus den Simulationen ermittelten turbulenten Brenngeschwindigkeiten auch mit einer Korrelation aus der Literatur vergleichen werden. Es gibt verschiedene Verbrennungsmodelle, mit denen die turbulente Brenngeschwindigkeit vorhergesagt werden kann [1, 38, 97, 119, 76].

Schmid [97] leitete in seiner Arbeit eine Beziehung für die turbulente Flammengeschwindigkeit her, die für den gesamten Bereich im Borghi-Diagramm angewendet werden kann:

$$\frac{S_{t,Schmid}}{S_l} = 1 + \frac{u_t}{S_l} (1 - Da_t^{-2})^{-\frac{1}{4}}.$$
(8.4)

Die turbulente Brenngeschwindigkeit nach dem Schmid-Modell wurde mit den in Tabelle 8.5 dargestellten Werten für die Eigenschaften der Flammenfront berechnet. Eine Zusammenfassung der ermittelten turbulenten Brenngeschwindigkeiten ist in Tabelle 8.6 gegenübergestellt. Die maximale Flammengeschwindigkeit $S_{t,Schmid}$ (max. l_t und max. u_t) nach dem Schmid-Modell liegt in der Größenordnung der globalen turbulenten Brenngeschwindigkeit $S_{t,global}$.



Abbildung 8.20: Einordnung der untersuchten Methanflammen mit einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* für verschiedene Druckverluste in das Borghi-Diagramm.

$\Delta p/p_0$	$S_{t,Schmid}\left[\frac{m}{s}\right]$	$S_{t,Schmid}/u_0$	$\frac{S_{t,global}}{\overline{c}=0,1}$	$\frac{S_{t,global}}{\bar{c}=0,9}/u_0$
1%	1,6-3,8	0,027 - 0,066	0,085	0,041
3%	2, 0 - 5, 1	0,020 - 0,050	0,095	0,038
5%	2, 3 - 5, 7	0,017 - 0,043	0,083	0,029

Tabelle 8.6: Vergleich der turbulenten Flammengeschwindigkeiten aus den reaktiven Simulationen.

Die auf unterschiedliche Weise ermittelten turbulenten Flammengeschwindigkeiten wurden mit der Düsenaustrittsgeschwindigkeit u_0 normiert und ebenfalls in Tabelle 8.6 dargestellt. Die Flammengeschwindigkeit $S_{t,global}$ im Bereich der Flammenstabilisierung bei $\bar{c} = 0, 1$ nimmt gleichen Maße wie die Düsenaustrittsgeschwindigkeit u_0 zu. Entgegen der erfolgten Einordnung der Flamme in den Bereich der homogenen Flammenfront im Borghi-Diagramm, deutet diese Auswertung der Flammengeschwindigkeit darauf hin, dass die Flamme am Stabilisierungsort einen Flamelet-Charakter hat. Für den Flamelet-Bereich (Ka < 1) nahm Damköhler [15] an, dass die turbulente Brenngeschwindigkeit proportional zur Summe aus der laminaren Brenngeschwindigkeit S_l und der turbulenten Schwankungsgeschwindigkeit u_t ist:

$$S_t \propto S_l + u_t. \tag{8.5}$$

Die Flammengeschwindigkeit $S_{t,global}$ stromab bei $\bar{c} = 0,9$ und die nach Schmid ermittelte Flammengeschwindigkeit $S_{t,Schmid}$ nehmen mit zunehmendem Druckverlust in kleinerem Maße zu, als die Düsenaustrittsgeschwindigkeit u_0 zunimmt. Im äußeren Bereich der Flammenfront (bei $\bar{c} = 0,9$) zeigt die Flamme dieser Auswertung zufolge keinen Flamelet-Charakter mehr. Auch dies deutet darauf hin, dass sich das Regime der Flamme innerhalb des Reaktionsbereichs ändert.

8.3 Experimentelle Bestimmung der Abhebehöhe

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen der Verbrennung von Methan und Jet A-1 dargestellt. Dabei wurde aus dem Eigenleuchten der angeregten OH^* -Radikalen die Form der Flammen und deren Abhebehöhen abgeleitet. Dazu wurden die Intensitäten des vom OH^* emittierten Lichtes über 200 Einzelaufnahmen zeitlich gemittelt. Im Folgenden werden Konturplots für verschiedene Betriebsbedingungen mit 10 gleich verteilten, farblich getrennten Intensitäts-Bereichen gezeigt. Dazu wurde die lokale Intensität mit dem Maximum der Intensität im aufgenommenen gemittelten Bild normiert. Es ist jeweils nur eine Hälfte der achsensymmetrischen Flammen dargestellt. Auf der linken Seite ist die normierte OH^* -Intensität der Methan-Flammen und rechts der Jet A-1-Flammen abgebildet.

Die weißen horizontalen Linien markieren das Ergebnis der Auswerteprozedur für die Abhebehöhe, die Zahlen geben den Wert der Abhebehöhe in *mm* wieder. Für diese Auswertung wurde die axiale Position berechnet, an der die Intensität der Chemilumineszenz 10 % der aufsummierten Intensitäten des gesamten Bildes erreicht.

Für die Jet A-1-Flammen wurde auch die Mie-Streuung der Brennstofftröpfchen aufgenommen. Anhand der Intensität des von den Brenntofftröpfchen gestreuten Lichts wurde der Verdampfungsfortschritt abgeleitet. Dargestellt ist die Intensität der Mie-Streuung in den Konturplots der Jet A-1-Flammen in der Nähe des Düsenaustritts. Zwischen zwei benachbarten weißen Iso-Linien ändert sich die Intensität um 10 %-Punkte. Außerhalb der äußersten weißen Linien liegt die Intensität der Mie-Streuung bei < 10 % des Maximalwertes. Hier wird davon ausgegangen, dass der Brennstoff nahezu vollständig verdampft ist.

Wegen der unterschiedlichen Einflüsse auf die physikalischen Prozesse, wurden verschiedenste Betriebsbedingungen untersucht: die Erhöhung des Druckverlustes über die Düse $\Delta p/p_0$ (Steigerung der Düsenaustrittsgeschwindigkeit), die Variation des Absolutdruckes p, die Zunahme der Luftzahl λ und eine höhere Luft-Vorwärmtemperatur T_0 .

8.3.1 Einfluss des Druckverlustes

Der Druckverlust über die Düse wurde bei einer konstanten Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem konstanten Betriebsdruck von 4 *bar* und einer konstanten Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* variiert. Damit ändert sich nach der gasdynamischen Beziehung (Gleichung (8.6)) für eine isentrope Strömung aus einem Behälter bei konstanter Temperatur die volumetrische Düsenaustrittsgeschwindigkeit u_0 (vgl. Abbildung 8.21):

$$u_0 = \sqrt{\left[1 - \left(\frac{p}{p_0}\right)^{\frac{\kappa-1}{\kappa}}\right] T_0 \frac{2\kappa}{\kappa - 1} R_s}.$$
(8.6)



Abbildung 8.21: Düsenautrittsgeschwinidgkeit u_0 in Abhängigkeit vom Druckverlust $\Delta p/p_0$ für verschiedene Luft-Temperaturen.

Dabei entspricht p/p_0 dem Verhältnis aus dem Druck nach der Düse und dem Druck vor der Düse mit dem Druckverlust über die Düse $\Delta p = p_0 - p$, T_0 ist die Vorwärmtemperatur, κ ist der Isentropenexponent und R_s die spezifische Gaskonstante.

In Abbildung 8.22 sind die Konturplots der normierten Intensität der *OH** Chemilumineszenz für die Verbrennung von Methan (jeweils linker Teil der Flamme) und Jet A-1 (jeweils rechter Teil der Flamme) dargestellt. Die Messergebnisse sind von links nach rechts für einen Druckverlust von 1 %, 2 %, 3 %, 4 % und 5 % angeordnet. Bei der Verbrennung von Jet A-1 (jeweils rechts) ist der Fortschritt der Spray-Verdampfung anhand von weißen Isolinien aufgetragen. Die äußerste Isolinie markiert die nahezu vollständige Verdampfung des Brennstoffs.

Bei der Verbrennung von Methan nimmt die Abhebehöhe mit steigendem Druckverlust leicht ab. Die Flammenbasis bildet sich unabhängig vom Druckverlust bei etwa 50 *mm* aus. Auch bei der Verbrennung von Jet A-1 kann beobachtet werden, dass die Flammenbasis sich auf einer konstanten Höhe von etwa 20 *mm* ausbildet. Jedoch steigt mit erhöhtem Druckverlust die Abhebehöhe, die Reaktionszone wandert stromab und die Flammen verlängern sich leicht.

Die bereits vorgestellten Simulationsergebnisse zeigen ebenfalls, dass der Ort, an dem die Reaktion beginnt (siehe Reaktionsfortschritt $\bar{c} = 0, 1$ in Abbildung 8.16), unabhängig vom Druckverlust über die Düse ist. Mit zunehmendem Druckverlust vergrößert sich aber die Reaktionszone (siehe Reaktionsfortschritt $\bar{c} = 0, 9$ in Abbildung 8.16).

Für den Ort der Stabilisierung der Flamme wird davon ausgegangen, dass die turbulente Brenngeschwindigkeit S_t und die Strömungsgeschwindigkeit U annähernd



Abbildung 8.22: Messergebnisse der normierten Intensität von OH^* für die Verbrennung von Methan (jeweils linker Teil der Flamme) und Jet A-1 (jeweils rechter Teil der Flamme) bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* für verschiedene Druckverluste. Bei der Verbrennung von Jet A-1 ist der Fortschritt der Spray-Verdampfung anhand von weißen Isolinien dargestellt.
den gleichen Wert haben. Es konnte bereits in den Simulationen beobachtet werden, dass das Strömungsfeld bei erhöhtem Druckverlust ähnlich ist (vgl. Abbildungen 8.11, 8.12 und 8.13). Auch das Mischungsfeld bleibt gleich (vgl. Abbildung 8.15). Damit ändert sich auch die laminare Brenngeschwindigkeit mit Zunahme des Druckverlustes nicht. Da der Stabilisierungsort der Flamme ebenfalls konstant ist, muss die Flammengeschwindigkeit in diesem Bereich im selben Maße steigen, wie die Strömungsgeschwindigkeit.

Entgegen der im vorherigen Kapitel erfolgten Einordnung der Flamme in den Bereich der homogenen Flammenfront im Borghi-Diagramm, deutet dieses Verhalten darauf hin, dass sich die Flamme am Stabilisierungsort im Flamelet-Bereich befindet.

Da die laminare Brenngeschwindigkeit keine Funktion des Druckverlustes ist und sich die turbulente Schwankungsgeschwindigkeit mit zunehmendem Druckverlust proportional zur Strömungsgeschwindigkeit verhält, erklärt Gleichung (8.5) die beobachtete Abhängigkeit des Ortes der Flammenstabilisierung vom Druckverlust. Als Konsequenz bleibt der Stabilisierungs-Ort der Flamme konstant, während der Druckverlust erhöht wird. Da sich oberhalb des Stabilisierungsortes die Flammenfront mit zunehmendem Druckverlust über die Düse verändert und die Reaktionszone sich vergrößert, muss davon ausgegangen werden, dass sich das Flammen-Regime ändert. Im oberen Bereich der Reaktionszone kann also eine homogene Flammenfront vorliegen.

Die Ergebnisse der *LES* und die Messergebnisse zeigen bei der Verbrennung von Jet A-1 eine Zunahme der Flammenlänge mit zunehmendem Druckverlust, während die Hauptreaktionszone der Flamme stromab wandert (siehe Abbildung 8.16 und 8.22). Auch die Abhebehöhe bei der Verbrennung mit Jet A-1 steigt. Im Gegensatz dazu nimmt die Abhebehöhe bei der Verbrennung mit Methan leicht ab (vgl. Abbildung 8.23).

Ein Grund für die Zunahme der Abhebehöhe bei der Verbrennung mit Jet A-1 ist, dass die Tröpfchengröße mit steigender Luftgeschwindigkeit am Düsenaustritt sinkt [3, 62]. Außerdem steigt die Verdampfungsrate mit zunehmender Turbulenz [6]. Damit verdampfen die Tröpfchen schneller, das Luft-Brennstoffgemisch wird schneller abgemagert und die Flammengeschwindigkeit sinkt. Dadurch verschiebt sich der Stabilisierungsbereich der Flamme weiter stromab zu einem Bereich niedrigerer Gasgeschwindigkeit.

Ein möglicher Erklärungsversuch für das Verhalten der experimentell untersuchten Methanflamme kann über den Wärmeverlust hergeleitet werden. Für die *LES* ist der Zustand des Systems adiabat. Es sind also keine Wärmeverluste in der Simulation berücksichtigt. Bei den Messungen mit Jet A-1 wurde der außen an



Abbildung 8.23: Einfluss des Druckverlustes auf die Abhebehöhe bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1, 9, 573$ K Luft-Vorwärmtemperatur für Methan und Jet A-1 bei verschiedenen Betriebsdrücken.

der Brennkammerwand vorbei geführte notwendige Kühlluftmassenstrom mit Erhöhung des Druckverlustes im gleichen Maße erhöht, wie der Luftmassenstrom der Verbrennungsluft. Mit dieser Vorgehensweise wurde die Wärmeabfuhr aus der Brennkammer mit erhöhtem Druckverlust ebenfalls erhöht. Damit sollte die prozentuale Wärmeabfuhr zur durch den Druckverlust veränderten Brennerleistung konstant gehalten werden. Bei den experimentellen Untersuchungen der Druckverlustabhängigkeit der Methanverbrennung wurde der Kühlluftmassenstrom konstant gehalten.

Bei den experimentellen Untersuchungen mit Methan nimmt also der relative Wärmeverlust mit Erhöhung des Druckverlustes ab. Damit steigt die Temperatur und somit auch die laminare und daraus folgend die turbulente Brenngeschwindigkeit. Dies ist insbesondere weiter stromab der Düse relevant, da sich dort die Flamme der Brennkammerwand nähert. Damit verkürzt sich die Flammenlänge und die Hauptreaktionszone wandert leicht stromauf, während der Stabilisierungspunkt annähernd gleich bleibt. Dieser Effekt ist bei der Erhöhung des Druckverlustes von 1 % auf 2 % (vgl. normierte Chemilumineszenz von Methan in Abbildung 8.22) ausgeprägter als für die übrigen Betriebspunkte, da der relative Wärmeverlust für eine Flamme mit niedriger Leistung größer ist.

Um den Einfluss des Kühlluftmassenstroms bei den experimentellen Untersuchungen von Methan näher zu betrachten, wurde bei einer Flamme mit einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,49$, einem Betriebsdruck von 3 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* und einem Druckverlust von 3 % der Kühlluftmassenstrom variiert. Die Konturplots der normierten *OH*^{*} Chemilumineszenz sind in Abbildung 8.24 dargestellt. Die Flammenkontur ist bei 0 und 5 $\frac{m_n^3}{h}$ nahezu identisch. Aber mit der



8.3 Experimentelle Bestimmung der Abhebehöhe

Abbildung 8.24: Messergebnisse der normierten Intensität von OH^* für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,49$, einem Betriebsdruck von 3 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* und einem Druckverlust von 3 % für verschiedene Kühlluftmassenströme.

weiteren Zunahme des Kühlluftmassenstroms steigt die Abhebehöhe an und die Hauptreaktionszone wandert stromab. Dies zeigt, dass die Wärmeabfuhr einen großen Einfluss auf die Abhebehöhe hat.

Im Hinblick auf den Einfluss des Wärmeverlustes aus der Brennkammer wurde der konvektive Wärmeverlust abgeschätzt. Der Verlust durch Strahlung wurde nicht berücksichtigt.

Für die Abschätzung wurde die Strömung innerhalb der Brennkammer als Rohrströmung mit adiabater Flammentemperatur angenommen. Die Stoffdaten für den Wärmeübergangskoeffizienten des Rauchgases wurden bei adiabater Flammentemperatur und vorgegebenem Absolutdruck ermittelt. Der Massenstrom wurde entsprechend des Betriebspunktes angepasst. Die Kühlluft wurde als Spaltströmung im Gleichstrom zur Strömung in der Brennkammer betrachtet. Die Kühlluft-Eintrittstemperatur wurde mit 293 *K* angenommen. Die Stoffdaten für den Wärmeübergangskoeffizienten wurden beim arithmetischen Mittel zwischen Luft-Eintrittstemperatur und Luft-Austrittstemperatur und dem vorgegebenen Absolutdruck ermittelt. Die Wärmeleitfähigkeit des Quarzglases wurde mit 2 *W*/*m*/*K* angenommen. Aus der Bilanz der Wärmeübertragung von Rauchgas durch die Glas-Brennkammer an die Kühlluft, sowie der Enthalpiebilanz des Rauchgases und der Kühlluft konnten der anteilige Wärmeverlust ΔP_{RG} in Bezug auf die Brenner-Leistung *P* und die Abnahme der adiabaten Flammentemperatur ΔT_{RG} des Rauchgases abgeschätzt werden.

Die Ergebnisse aus der Abschätzung des Wärmeverlusts für die Variation des Druckverlusts sind in Tabelle 8.7 aufgelistet. Der anteilige Wärmeverlust verdoppelt sich bei der Reduktion des Druckverlusts von 5% auf 1%. Damit nimmt auch die Temperatur in der Brennkammer ab, wodurch die turbulente Brenngeschwindigkeit sinkt. Auch dieser Effekt führt dazu, dass die Flamme mit steigendem Druckverlust stromauf bei höheren Strömungsgeschwindigkeiten brennt.

Der Einfluss der Wärmeverluste auf die Flamme nimmt stromab zu, da sich die Flamme der Brennkammerwand nähert. Dadurch ist der Einfluss am Flammenfuß eher gering, während der Einfluss in der Hauptreaktionszone größer ist.

Für die Abschätzung der Wärmeverluste wurden die Strömungsverhältnisse und das Temperaturprofil in der Brennkammer stark vereinfacht. Auch der Wärmeverlust aufgrund von Strahlung wurde nicht berücksichtigt. Daher ist anzunehmen, dass die Absenkung der Temperatur in der Brennkammer größer ist, als unter den zuvor genannten Annahmen berechnet.

$\Delta p/p_0$	р	λ	T_0	Р	ΔP_{RG}	ΔT_{RG}
1%	4 bar	1,9	573 K	29 kW	4,8%	54 K
2%	4 bar	1,9	573 K	41 kW	3,6%	40 K
3%	4 bar	1,9	573 K	51 <i>kW</i>	3,0%	33 K
4%	4 bar	1,9	573 K	59 kW	2,6%	29 K
5%	4 bar	1,9	573 K	66 kW	2,4%	26 K

Tabelle 8.7: Abschätzung des konvektiven Wärmeverlusts der Brennkammer bei der Verbrennung mit Methan unter Variation des Druckverlustes.

Um die Flammenfront auch in den experimentellen Untersuchungen näher zu betrachten sind instationäre Einzelaufnahmen der laserinduzierten Fluoreszenz der *OH*-Radikale in Abbildung 8.25 dargestellt. Es deutet sich an, dass im unteren Bereich der Flamme eine relativ dünne Flammenfront vorliegt. Es hat den Anschein,



Abbildung 8.25: Messergebnisse der normierten instationären Intensität von OH^* -Chemilumineszenz (links) und der normierten instationären OH-LIF Intensität für die Verbrennung von Methan bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Betriebsdruck von 4 *bar*, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* für verschiedene Druckverluste.

dass stromab die Flammenfront immer unebener wird und einzelne unverbrannte Bereiche sich aus der Hauptflamme heraus trennen.

Ein ähnliches Verhalten in der Ausbildung der Flammenfront konnte man auch in den Simulationen beobachten (siehe Abbildung 8.18). Im unteren Bereich in der Nähe des Düsenaustritts ist die Flammenfront relativ dünn. Stromab wird die Flammenfront dicker und mit steigendem Druckverlust bilden sich immer größere, nicht vollständig verbrannte Bereiche, die sich aus der Hauptflamme heraus lösen.

Die Simulation mit dem implementierten Verbrennungsmodell zeigt in der Struktur der Flamme eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten.

8.3.2 Einfluss des Absolutdruckes

Abbildung 8.26 zeigt die Abhängigkeit der Abhebehöhe vom Druck bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$ und einem Druckverlust von 3 % über die Düse für Methan und Jet A-1 bei unterschiedlichen Luft-Vorwärmtemperaturen. Sowohl für Methan als auch für Jet A-1 sinkt die Abhebehöhe mit zunehmendem Absolutdruck.



Abbildung 8.26: Einfluss des Betriebsdrucks auf die Abhebehöhe bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9,3$ % Druckverlust für Methan und Jet A-1 bei unterschiedlichen Luft-Vorwärmtemperaturen.

Insbesondere ist die Abhebehöhe für gasförmigen und flüssigen Brennstoff nahezu identisch für eine Luft-Vorwärmtemperatur von 673 *K*. Der Einfluss der Brennstoffzerstäubung und -verdampfung auf die Abhebehöhe ist demnach bei hohen Luft-Vorwärmtemperaturen von 673 *K* vernachlässigbar.

Damit scheinen die Unterschiede zwischen der Verbrennung mit Methan und Jet A-1 auf der Zerstäubung und der Verdampfung des flüssigen Brennstoffs und damit auf den Unterschieden in der Mischung zwischen Brennstoff und Luft zu beruhen.

Die Konturplots in Abbildung 8.27 stellen die normierte Intensität der OH^* -Eigenstrahlung für eine Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Druckverlust von 3 % über die Düse und einer Luft-Vorwärmtemperatur von 673 *K* bei verschiedenen Absolutdrücken für Methan (links) und Jet A-1 (rechts) dar. Der flüssige Brennstoff ist bei Drücken zwischen 3 und 5 *bar* innerhalb von 10 bis 15 *mm* stromab des Düsenaustritts verdampft. Der Einfluss des Verdampfungsprozesses auf die Abhebehöhe, die bei 40 *mm* und höher liegt, kann als klein betrachtet werden. Der Bereich der Hauptreaktionszone und das Flammenvolumen sind für gasförmigen und flüssigen Brennstoff bei gleichem Absolutdruck ähnlich. Daher kann angenommen werden, dass der flüssige Brennstoff genug Zeit hat, um die gleiche Vormischung zu erreichen, wie bei Verbrennung des gasförmigen Brennstoffs. Bei hohen Luft-Vorwärmtemperaturen zeigen der flüssige und der gasförmige Brennstoff annähernd gleiches Verbrennungsverhalten.

Davon ausgehend, dass die Strömungsgeschwindigkeit unabhängig vom Absolutdruck ist, kann die Abnahme der Abhebehöhe bei Steigerung des Absolutdrucks

$\Delta p/p_0$	р	λ	T_0	Р	ΔP_{RG}	ΔT_{RG}
3%	3 bar	1,9	673 K	35 <i>kW</i>	3,9%	43 K
3%	4 bar	1,9	673 K	47 kW	3,3%	36 K
3%	5 bar	1,9	673 K	58 <i>kW</i>	2,9%	32 K
3%	6 bar	1,9	673 K	70 <i>kW</i>	2,5%	28 K

Tabelle 8.8: Abschätzung des konvektiven Wärmeverlusts der Brennkammer bei der Verbrennung mit Methan unter Variation des Absolutdrucks.

(vgl. Abbildung 8.26) auf eine Erhöhung der turbulenten Brenngeschwindigkeit zurückzuführen sein. Für die Verbrennung von Propan mit Luft zeigte schon eine von Khramtsov 1958 [55] durchgeführte experimentelle Studie eine positive Druckabhängigkeit der turbulenten Brenngeschwindigkeit. Dies wurde 2013 von Vukadinovic [109] bestätigt. Kobayashi et al. [58] zeigten den gleichen Zusammenhang für Ethen-Luft- und Propan-Luft-Gemische sowie 1998 [57] für die Verbrennung von Methan mit Luft. Ebenso wurde von Bradley et al. [10] eine Erhöhung der turbulenten Brenngeschwindigkeit mit zunehmendem Druck unter anderem für Iso-Oktan beobachtet. Dies stützt die oben getroffene Interpretation, dass ein Erhöhen des Absolutdrucks durch die Zunahme der turbulenten Brenngeschwindigkeit eine

Auch die unterschiedlichen Wärmeverluste in den Versuchsanlagen für Methan und Jet A-1 spielen hier eine Rolle. Mit zunehmendem Druck nimmt der Verbrennungsluftmassenstrom zu. Während der Kühlluftmassenstrom bei den Experimenten mit Methan konstant gehalten wurde, wurde der Kühlluftmassenstrom bei den Experimenten mit Jet A-1 erhöht. Bei den experimentellen Untersuchungen mit Methan nimmt also der relative Wärmeverlust mit Erhöhung des Druckes ab. In Tabelle 8.8 ist das Ergebnis der Abschätzung des konvektiven Wärmeverlustes zusammengefasst. Während die adiabate Flammentemperatur in Abhängigkeit vom Druck annähernd konstant bleiben sollte, führt die Abnahme der Wärmeverluste mit steigendem Druck zu höheren Rauchgastemperaturen. Mit dem Anstieg der Temperatur steigt die laminare und daraus folgend die turbulente Brenngeschwindigkeit. Auch dieser Effekt führt dazu, dass die Flamme mit steigendem Druck stromauf zu höheren Strömungsgeschwindigkeiten wandert.



Abbildung 8.27: Messergebnisse der normierten Intensität von OH^* für die Verbrennung von Methan (jeweils linker Teil der Flamme) und Jet A-1 (jeweils rechter Teil der Flamme) bei einer Luftzahl von $\overline{\lambda} = 1,9$, einem Durckverlust von 3 %, einer Luftvorwärmtemperatur von 673 *K* für verschiedene Drücke. Bei der Verbrennung von Jet A-1 ist der Fortschritt der Spray-Verdampfung anhand von weißen Isolinien dargestellt.

8.3.3 Einfluss der Stöchiometrie

Um den Einfluss der Luft-Brennstoff-Gemischzusammensetzung auf die Abhebehöhe zu untersuchen, wurde der Luftmassenstrom konstant gehalten und der Brennstoffmassenstrom erhöht. Somit ist das isotherme Strömungsfeld identisch. Die Konturplots in Abbildung 8.28 stellen die normierte Intensität der *OH** Eigenstrahlung der Flamme für einen Betriebsdruck von 5 *bar*, einem Druckverlust von 3 % und einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* bei verschiedenen Luftzahlen für Methan (links) und Jet A-1 (rechts) dar. Sowohl für Methan als auch für Jet A-1 resultiert aus der Abnahme der Luftzahl eine Abnahme der Abhebehöhe. Zusätzlich ist auch zu erkennen, dass das Flammenvolumen zunimmt. Diese Zusammenhän-



Abbildung 8.28: Messergebnisse der normierten Intensität von OH^* für die Verbrennung von Methan (jeweils linker Teil der FLamme) und Jet A-1 (jeweils rechter Teil der Flamme) bei einem Betriebdruck von 5 *bar*, einem Druckverlust von 3 % und einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* bei verschiedenen Luftzahlen λ). Bei der Verbrennung von Jet A-1 ist der Fortschritt der Spray-Verdampfung anhand von weißen Isolinien dargestellt.

ge konnten unter anderem auch von Griebel et al. [37] bei der experimentellen Untersuchung von vorgemischten Methan-Jet-Flammen festgestellt werden.

Dieses Verhalten kann der Zunahme der turbulenten Brenngeschwindigkeit S_t bei Abnahme der Luftzahl zugeschrieben werden. In Abbildung 8.29 ist die Abhängigkeit der laminaren Brenngeschwindigkeit S_l von der Luftzahl λ dargestellt. Die laminaren Flammengeschwindigkeiten wurden mit dem Programm PREMIX [53] und dem Mechanismus GRI3.0 [101] für Methan und dem in Aachen entwickelten Mechanismus für Jet A-1 [41] berechnet. Im über-stöchiometrischen Bereich nimmt die laminare Brenngeschwindigkeit S_l mit abnehmender Luftzahl zu. Daraus resultiert auch eine Zunahme der turbulenten Brenngeschwindigkeit S_t .



Abbildung 8.29: Berechnete laminare Flammengeschwindigkeit in Abhängigkeit von der Luftzahl λ bei einer Vormischflamme mit einem Absolutdruck von 3 *bar* und einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* für Methan (blaue Kreise) und Jet A-1 (rote Quadrate).

Da der Luftmassenstrom konstant gehalten wurde, ist davon auszugehen, dass das isotherme Strömungsfeld bei zunehmendem Brennstoffmassenstrom nahezu identisch ist. Bei Zunahme des Brennstoffmassenstroms ergibt sich eine niedrigere Luftzahl λ und damit eine höhere turbulente Brenngeschwindigkeit S_t . Daraus resultiert, dass sich die Flamme mit sinkender Luftzahl weiter stromauf stabilisiert und die Abhebehöhe sinkt.

Dies ist auch quantitativ in Abbildung 8.30 für unterschiedliche Drücke bei einem Druckverlust von 3 % und einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* zu sehen. Die Abhebehöhe nimmt für eine steigende Luftzahl λ unabhängig vom untersuchten Druck deutlich zu.

Im Bereich zwischen $\lambda = 1, 6$ und $\lambda = 2, 0$ nimmt die laminare Brenngeschwindigkeit nahezu linear zu (vgl. Abbildung 8.29). Dieser lineare Verlauf spiegelt sich auch in der Abhängigkeit zwischen Luftzahl λ und Abhebehöhe wieder. Eine Ausnahme bildet die Abhebehöhe bei der Verbrennung von Methan bei einem Betriebsdruck von 5 *bar*, einem Druckverlust von 3 %, einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K* und einer Luftzahl von $\lambda = 2,04$. Die Flamme überragt aufgrund der Länge das Aufnahmefeld der Kamera (vgl. Abbildung 8.28). Damit ist die Gesamtintensität der Aufnahme in der Berechnung der Abhebehöhe niedriger angenommen worden. Daraus resultiert eine verfälschte und somit zu niedrige Abhebehöhe.



Abbildung 8.30: Einfluss der Luftzahl λ auf die Abhebehöhe bei einer Luft-Vorwärmtemperatur von 573 *K*, einem Druckverlust von 3 % für Methan und Jet A-1 bei verschiedenen Drücken.

8.3.4 Einfluss der Luft-Vorwärmtemperatur

Abbildung 8.31 zeigt die Konturplots von OH^* Chemilumineszenz-Messungen. Es sind die normierte Intensität der OH^* Eigenstrahlung für die Verbrennung von Methan (links) und Jet A-1 (rechts) bei $\lambda = 1,91$, einem Druckverlust von 3 % über die Düse, 4 *bar* Betriebsdruck für die Luft-Vorwärmtemperaturen 473, 523, 573, 623 und 673 *K* (von links nach rechts) dargestellt. Bei den Jet A-1-Flammen ist auch die Intensität der Mie-Streuung der flüssigen Brennstofftröpfchen in Düsennähe zu sehen.



Abbildung 8.31: Messergebnisse der normierten Intensität von OH^* für die Verbrennung von Methan (jeweils linker Teil der Flamme) und Jet A-1 (jeweils rechter Teil der Flamme) bei $\lambda = 1,91$, einem Druckverlust von 3 % über die Düse, 4 *bar* Betriebsdruck für 473, 523, 573, 623 und 673 *K* (von links nach rechts). Bei der Verbrennung von Jet A-1 ist der Fortschritt der Spray-Verdampfung anhand von weißen Isolinien dargestellt.

Für Methan wandert der Bereich, in der die höchste Chemilumineszenz-Intensität gemessen wird, mit Erhöhung der Luft-Vorwärmtemperatur stromauf. Entgegen diesem Verhalten nimmt die ausgewertete Abhebehöhe von 473 zu 523 *K* zu. Bei 473 *K* wird der Bereich der mageren Verlöschgrenze erreicht und die Flamme begann bei den experimentellen Untersuchungen stark auf- und abwärts zu fluktuieren. Daher war auch die Chemilumineszenz über die gesamte Brennkammer verteilt und teilweise außerhalb des Aufnahmebereiches der Kamera. Damit ist die Gesamtintensität des Bildes zu niedrig und die Abhebehöhe wurde fälschlicherweise als zu niedrig bestimmt. Abbildung 8.31 zeigt aber, dass die Hauptreaktionszone mit steigender Luft-Vorwärmtemperatur stromauf wandert und das Flammenvolumen abnimmt. Die Abnahme der Abhebehöhe und des Flammenvolumens bei

zunehmender Vorwärmtemperatur konnten unter anderem auch von Griebel et al. [37] bei der experimentellen Untersuchung von vorgemischten Methan-Jet-Flammen festgestellt werden.

Auch bei der Verbrennung von Jet A-1 wandert die Hauptreaktionszone bei der Erhöhung der Vorwärmtemperatur von 573 auf 673 *K* stromauf und die bestimmte Abhebehöhe nimmt leicht ab.



Abbildung 8.32: Mittlere Düsenaustrittsgeschwindigkeit u_0 in Abhängigkeit von der Luft-Vorwärmtemperatur für verschiedene Druckverluste.

Nach der gasdynamischen Beziehung (Gleichung (8.6)) für eine isentrope Strömung aus einem Behälter erhöht sich die mittlere Düsenaustrittsgeschwindigkeit bei konstantem Druckverlust über die Düse mit der Wurzel aus der Luft-Vorwärmtemperatur (vgl. Abbildung 8.32).

Neben der Zunahme der mittleren Düsenaustrittsgeschwindigkeit durch die Erhöhung der Luft-Vorwärmtemperatur ändert sich auch die laminare Brenngeschwindigkeit S_l .

Die laminare Brenngeschwindigkeit steigt etwa quadratisch mit der Temperatur (Abbildung 8.33). Unter der Annahme, dass sich eine abgehobene Flamme in dem Bereich stabilisiert, an dem die Strömungsgeschwindigkeit der turbulenten Flammengeschwindigkeit entspricht, nimmt die Abhebehöhe mit steigende Temperatur ab.

Dieses Verhalten der Abhebehöhe in Abhängigkeit von der Luft-Vorwärmtemperatur ist auch in Abbildung 8.34 für verschiedene Absolutdrücke festzustellen. Die Hauptreaktionszone wandert tendenziell mit zunehmender Luft-Vorwärmtemperatur sowohl bei Methan- als auch bei Jet A-1-Flammen näher zur Düse hin.



Abbildung 8.33: Laminare Flammengeschwindigkeit von Methan in Abhängigkeit von der Luft-Vorwärmtemperatur für verschiedene Drücke.

Eine Ausnahme ergibt sich für Jet A-1-Flammen bei niedriger Luft-Vorwärmtemperatur. Bei 473 *K* zeigt sich für Jet A-1, dass die Hauptreaktionszone näher am Düsenaustritt liegt als bei 573 *K* (siehe Abbildung 8.31). Für Jet A-1 führt die Erhöhung der Luft-Vorwärmtemperatur zu rascherer Verdampfung der Brennstofftröpfchen. Somit magert das Gemisch früher ab. Bei niedrigen Temperaturen ergibt sich für Jet A-1 in Düsennähe ein sehr fettes Gemisch mit hohen Brenngeschwindigkeiten, so dass sich die Flamme dort stabilisieren kann.

Für eine Luft-Vorwärmtemperatur von 673 *K* ist die Abhebehöhe sowohl bei 4 *bar* als auch bei 5 *bar* für gasförmigen und flüssigen Brennstoff identisch (siehe Abbildung 8.34). Die Konturplots der OH^* Chemilumineszenz-Messungen sind für 673 *K* Luft-Vorwärmtemperatur in Form und Verteilung ähnlich (siehe Abbildung 8.31). Die Methan-Flamme ist jedoch etwas voluminöser als die Jet A-1-Flamme. Offenbar hat bei 673 *K* Luft-Vorwärmtemperatur die Brennstoffzerstäubung und -verdampfung des flüssigen Brennstoffs keinen Einfluss mehr auf die Abhebehöhe. Anhand der Mie-Steuung kann man auch erkennen, dass das Jet A-1 schon bei L < 10 mm nahezu vollständig verdampft ist. Damit scheinen die Unterschiede zwischen der Verbrennung mit Methan und Jet A-1 auf der Zerstäubung und der Verdampfung des flüssigen Brennstoffs und folglich auf den Unterschieden in der Mischung zwischen Brennstoff und Luft zu beruhen.



Abbildung 8.34: Einfluss der Luft-Vorwärmtemperatur auf die Abhebehöhe bei einem $\lambda = 1,91, 3$ % Druckverlust für Methan und Jet A-1 bei unterschiedlichen Betriebsdrücken.

9 Zusammenfassung

Mit dieser Arbeit wurde die Forschung von [50, 32] anhand eines Verbrennungssystems mit einer speziellen abgehobenen Flamme fortgeführt.

Die breite Basis an experimentellen Ergebnissen zu abgehobenen Flammen, welche von Kasabov [50] an einer ähnlichen Düse (siehe Abbildung 6.1, 6.2) erarbeitete wurden, konnte erweitert werden. Im Gegensatz zur vorliegenden Arbeit untersuchte Kasabov nur die Verbrennung von flüssigem Brennstoff (Jet A-1) bei erhöhtem Druck unter Variation des Absolutdruckes, der Luft-Vorwärmtemperatur, des Druckverlustes über die Düse (Variation der Düsen-Austritts-Geschwindigkeit) und der Stöchiometrie.

Die Untersuchung unter Variation der gleichen Betriebsparameter wurde in dieser Arbeit auch für gasförmigen Brennstoff (Methan) durchgeführt. Die Ergebnisse der experimentellen Untersuchungen mit flüssigem und gasförmigem Brennstoff wurden gegenübergestellt und verglichen. Ergänzt wurden die experimentellen Untersuchungen der abgehobenen Flamme durch Vermessung der Strömungsgrößen des isothermen Strömungsfeldes der Düse.

Komplettiert wurde diese Arbeit durch adiabate numerische Simulationen. Dazu musste zunächst sowohl das Reaktionsmodell als auch das Programm zum Berechnen des Strömungsfeldes validiert werden.

Das am Engler-Bunte-Institut entwickelte und in OpenFOAM implementierte Verbrennungsmodell wurde anhand der von Cabra et al. [13, 12] untersuchten abgehobenen teilvorgemischten vollturbulenten Freistrahl-Flamme validiert (vgl. Kapitel 7.2). Das Programm zum Berechnen des Strömungsfeldes wurde anhand von einem Vergleich zwischen den experimentellen LDA-Messungen mit URANS und LES Rechnungen vom isothermen Strömungsfeld der Düse validiert (siehe Kapitel 8.1).

Es konnte gezeigt werden, dass das Verbrennungsmodell in Verbindung mit einer *LES* die Reaktionszone einer ausgewählte Modellflamme vorhersagen kann. Auch das isotherme Strömungsfeld der untersuchten Düse kann durch eine LES gut wiedergeben werden. Damit ist davon auszugehen, dass die durchgeführten adiabaten

LES unter Variation des Druckverlustes belastbare Ergebnisse liefern (vgl. Kapitel 8.2).

Die Besonderheiten des isothermen Strömungsfeldes der untersuchten Düse wurden diskutiert. Anhand einer diskreten Fourier-Transformation der LDA-Ergebnisse konnte gezeigt werden, dass die untersuchte Düse eine präzedierende Strömung mit einer Umlauf-Frequenz von etwa 3 - 4 Hz erzeugt. Im Gegensatz zur LES kann eine URANS dieses komplexe präzedierende Strömungsfeld nicht abbilden.

Es wurden reaktive adiabate Simulationen bei verschiedenen Düsenaustrittsgeschwindigkeiten durchgeführt. Bei Erhöhung des Druckverlustes nimmt das Volumen, in dem die Verbrennungsreaktion stattfindet, zu. Die Flammenoberfläche wirkt mit zunehmendem Druckverlust aufgewellter und aufgerissener. In den Simulationen bilden sich bei erhöhtem Druckverlust aus der Flammenfront gelöste Bereiche mit unverbranntem Luft-Brennstoff-Gemisch. Dieser Eindruck bestätigt sich in der experimentell ermittelten normierten instationären Intensität der laserinduzierten Floureszenz der *OH*-Radikale (*OH* – *LIF*). Mit Hilfe der aus der Simulation abgeleiteten Turbulenzgrößen konnten die Flammen in das Borghi-Diagramm eingeordnet werden. Unter den getroffenen Annahmen und den gewählten Randbedingungen wurden die Flammen in den Bereich der homogenen Flammenfront eingeordnet.

Darüber hinaus wurde die turbulente Flammengeschwindigkeit aus den Simulationen ermittelt. Es wurde eine lokale turbulente Flammengeschwindigkeit $S_{t,lokal}$ und eine globale turbulente Flammengeschwindigkeit $S_{t,global}$ bestimmt. Für die $S_{t,lokal}$ wurde die Strömungsgeschwindigkeit orthogonal zur Iso-Oberfläche für den Reaktionsfortschritt von $\bar{c} = 0, 1$ bestimmt. Für die $S_{t,lokal}$ wurde der zugeführte Volumenstrom mit der Iso-Oberfläche bei $\bar{c} = 0, 1$ in Relation gesetzt. Die unterschiedlich ermittelten turbulenten Flammengeschwindigkeiten weichen nur gering voneinander ab.

Mit einem Modell von Schmid [97], welches für alle Flammen-Regime im Borghi-Diagramm gilt, wurden die aus der Simulation ermittelten Flammengeschwindigkeiten verifiziert. Die maximale Flammengeschwindigkeit $S_{t,Schmid}$ (max. l_t und max. u_t) nach dem Schmid-Modell liegt in der gleichen Größenordnung wie die aus der Simulation ermittelten Flammengeschwindigkeit.

Damit konnte gezeigt werden, dass das am Engler-Bunte-Institut entwickelte und in OpenFOAM implementierte Verbrennungsmodell in der Lage ist, die Wechselwirkung zwischen Turbulenz und Chemie gut wiederzugeben.

Einfluss des Druckverlusts

Die numerischen Simulationen und die experimentellen Ergebnisse bei der Verbrennung mit Methan zeigen mit zunehmendem Druckverlust keine Änderung in der Höhe der Flammenbasis. Im Stabilisierungsbereich der Flamme sollten die turbulente Flammengeschwindigkeit der Flamme und die Strömungsgeschwindigkeit gleich sein. Die Simulationen zeigen, dass sowohl die mit der volumetrischen Geschwindigkeit u_0 normierte Strömungsgeschwindigkeit als auch die mit u_0 normierte globale Flammengeschwindigkeit $S_{t,global}$ bei $\bar{c} = 0, 1$ konstant sind. Im Bereich der Flammenstabilisierung erhöht sich mit zunehmendem Druckverlust über die Düse die Strömungsgeschwindigkeit und die turbulente Flammengeschwindigkeit in gleichem Maße, wodurch sich die Höhe der Flammenbasis nicht ändert. Damit scheint sich die Flamme dort wo sie zu brennen beginnt Flamelet-Charakteristisch zu verhalten.

Bei den Simulationen vergrößert sich mit zunehmendem Druckverlust das Flammenvolumen und das Maximum des Quellterms des Reaktionsfortschritts wandert stromab. Das deutet darauf hin, dass sich das Flammen-Regime ändert und im Bereich stromab eine homogene Flammenfront vorliegt.

Bei den experimentellen Untersuchungen der Methan-Flammen wandert das Reaktionsmaximum aufgrund der Abnahme der Wärmeverluste im oberen Bereich der Brennkammer stromauf.

Bei der Verbrennung mit Jet A-1 wandert das Maximum der Reaktionsrate stromab. Ein Grund hierfür könnte sein, dass die Tröpfchengröße mit steigender Luftgeschwindigkeit am Düsenaustritt sinkt [3, 62]. Außerdem steigt die Verdampfungsrate mit zunehmender Turbulenz [6]. Damit verdampfen die Tröpfchen schneller, das Luft-Brennstoffgemisch wird schneller abgemagert und die Flammengeschwindigkeit sinkt. Dadurch verschiebt sich der Stabilisierungsbereich der Flamme weiter stromab zu einem Bereich niedrigerer Gasgeschwindigkeit.

Einfluss des Absolutdrucks

Mit Zunahme des Absolutdrucks nimmt die experimentell ermittelte Abhebehöhe sowohl für Methan als auch für Jet A-1 ab. Dies kann auf die Erhöhung der turbulenten Flammengeschwindigkeit bei erhöhtem Druck zurückzuführen sein. Den gleichen Effekt hat auch der Wärmeverlust aus der Brennkammer, der mit zunehmendem Absolutdruck anteilig abnimmt, wodurch sich die turbulente Flammengeschwindigkeit erhöht.

Einfluss der Stöchiometrie

Mit abnehmendem Brennstoffmassenstrom und konstantem Lufmassenstrom nimmt die experimentell ermittelte Abhebehöhe sowohl für Methan als auch für Jet A-1 zu. Das Strömungsfeld im Bereich der Flammenstabilisierung bleibt ähnlich, während die turbulente Flammengeschwindigkeit abnimmt. Dadurch stabilisiert sich die Flamme mit zunehmender Luftzahl weiter stromab bei niedrigeren Strömungsgeschwindigkeiten.

Einfluss der Luft-Vorwärmtemperatur

Allgemein wandert die Hauptreaktionszone mit zunehmender Luft-Vorwärmtemperatur stromauf, da die turbulente Flammengeschwindigkeit in höherem Maße steigt als die Strömungsgeschwindigkeit in der Brennkammer.

Eine Ausnahme zeigt sich bei der Verbrennung mit flüssigem Brennstoff bei niedriger Luft-Vorwärmtemperatur. Die Hauptreaktionszone liegt bei 473 *K* nahe am Düsenaustritt und verlagert sich bei einer Erhöhung der Luft-Vorwärmtemperatur von 473 *K* auf 573 *K* stromab. Eine Erhöhung der Luft-Vorwärmtemperatur führt für Jet A-1 zu schnellerer Verdampfung der Brennstofftröpfchen und das Gemisch magert früher ab. Bei niedrigen Luft-Vorwärmtemperaturen resultiert in Düsennähe aufgrund des sehr fettes Brennstoff-Luft Gemisches eine hohe Flammengeschwindigkeit, so dass sich die Flamme dort stabilisieren kann.

Insbesondere ist die Abhebehöhe für gasförmigen und flüssigen Brennstoff nahezu identisch für eine Luft-Vorwärmtemperatur von 673 *K*. Der Einfluss der Brennstoffzerstäubung und -verdampfung auf die Abhebehöhe ist demnach bei hohen Luft-Vorwärmtemperaturen von 673 *K* vernachlässigbar. Damit scheinen die Unterschiede zwischen der Verbrennung mit Methan und Jet A-1 auf der Zerstäubung und der Verdampfung des flüssigen Brennstoffs und folglich auf den Unterschieden in der Mischung zwischen Brennstoff und Luft zu beruhen.

Ausblick

Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen, dass die Wärmeverluste einen großen Einfluss auf die Flammenstruktur haben. Im experimentellen Aufbau zur Untersuchung der Verbrennung mit Jet A-1 konnte dies teilweise berücksichtigt werden, indem das Verhältnis von Kühlluft-Massenstrom und Verbrennungsluft-Massenstrom konstant gehalten wurde. Damit waren die anteiligen Wärmeverluste vermutlich gleich groß. Im experimentellen Aufbau zur Untersuchung mit Verbrennung von Methan musste der Kühlluft-Massenstrom konstant gehalten werden. Dadurch erhöht sich der Anteil der Wärmeverluste mit abnehmender Leistung der Flamme.

Um eine bessere Vergleichbarkeit zu schaffen, muss der anteilige Wärmeverlust konstant gehalten werden. Die Wärmeverluste sollten auch in den Experimenten genauer bestimmt und in den Simulationen mit abgebildet werden. Auch sollte ergänzend in den Simulationen der Wärmeverlust aufgrund von Strahlung mit berücksichtigt werden. Als weiterer offener Punkt sollte die Verbrennung mit flüssigem Brennstoff näher beschrieben werden. Es wurde bisher nicht untersucht, wie sich die Größe und die Größenverteilung der Brennstofftröpfchen, sowie deren Interaktion mit der Strömung, bei der Variation verschiedener Betriebsparameter ändern. Das Verhalten des tröpfchenförmig vorliegenden Brennstoffs hat einen großen Einfluss auf die Lokalität und die Form der Flamme, wenn die Luft-Vorwärmtemperatur niedriger als 673 *K* ist. Mit experimentellen und/oder numerischen Untersuchungen, die Aufschluss über die Randbedingungen des Brennstoffsprays in Abhängigkeit verschiedener Betriebsparameter geben, könnten auch reaktive LES mit flüssigem Brennstoff durchgeführt werden.

Unklar ist weiterhin, wie sich die turbulente Brenngeschwindigkeit mit zunehmendem Druck ändert. Dies lässt Raum für numerische und experimentelle Untersuchungen der Brenngeschwindigkeit von turbulenten Flammen.

10 Abstract

The present work extends the research of [50, 32] on a combustion system with a special lifted flame.

The wide range of experimental results on lifted flames obtained by Kasabov [50] at a similar nozzle (see figure 6.1, 6.2) could be extended. In contrast to the present work, Kasabov only investigated the combustion of liquid fuel (jet A-1) at elevated pressure by varying the operational pressure, the air preheating temperature, the pressure drop across the nozzle (variation of the nozzle exit velocity) and stoichiometry.

The investigation with variation of the same operating parameters was also carried out in this work for gaseous fuel (methane). The results of the experimental investigations with liquid and gaseous fuel were confronted and compared. The experimental investigations of the lifted flame were supplemented by measuring the flow quantities of the isothermal flow field of the nozzle.

This work was completed by means of adiabatic numerical simulations. Both the reaction model and the program for calculating the flow field have been validated.

The combustion model developed at the Engler-Bunte-Institute and implemented in OpenFOAM was validated using a lifted, partially premixed, fully turbulent free jet flame, that was investigated by Cabra et al. [13, 12] (see chapter 7.2). The program for calculating the flow field was validated by comparing the experimental LDA measurements with URANS and LES calculations of the isothermal flow field of the nozzle (see chapter 8.1).

It could be shown that the combustion model in combination with a *LES* can predict the reaction zone of a selected model flame. The isothermal flow field of the investigated nozzle can also be well reproduced by an LES. Thus, it can be assumed that the adiabatic LES performed with variation of the pressure drop provide reliable results (vgl. Kapitel 8.2).

The special characteristics of the isothermal flow field of the investigated nozzle were discussed. Using a discrete Fourier transformation of the LDA results, it could be shown that the investigated nozzle generates a precessing flow with a circulation

frequency of about 3 - 4 Hz. In contrast to the LES, an URANS cannot reproduce this complex precessing flow field.

Reactive adiabatic simulations were performed at different nozzle exit velocities. By increasing the pressure drop across the nozzle, the volume in which the combustion reaction takes place increases. With increasing pressure drop, the surface of the flame appears corrugated and broken. In the simulations, areas with an unburned air-fuel mixture from the flame front are formed with increased pressure drop. This impression is confirmed by the experimentally determined normalized instationary intensity of the laser-induced fluorescence of the *OH* radicals (*OH* – *LIF*). Using the turbulence variables derived from the simulation, the flames could be classified in the Borghi diagram. The flames were classified in the region of well-stirred rector.

In addition, the turbulent flame velocity was determined from the simulations. A local turbulent flame velocity $S_{t,lokal}$ and a global turbulent flame velocity $S_{t,global}$ were calculated. For the $S_{t,lokal}$ the flow velocity was determined orthogonally to the iso-surface for the reaction progress of $\bar{c} = 0.1$. For the $S_{t,lokal}$, the supplied volume flow was set in relation to the iso-surface at $\bar{c} = 0.1$. The turbulent flame velocities deviate only slightly from each other if applying different calculation methods.

Using a model by Schmid [97], which applies to all flame regimes in the Borghi diagram, the flame velocities determined from the simulation were verified. The maximum flame velocity $S_{t,Schmid}$ (max. l_t and max. u_t) according to the Schmid model is in the same order of magnitude as the flame velocity determined from the simulation.

It could be demonstrated that the combustion model developed at the Engler-Bunte Institute and implemented in OpenFOAM is capable of reproducing the interaction between turbulence and chemistry.

Influence of pressure drop

The numerical simulations and the experimental results of combustion with methane show no change in the height of the flame base with increasing pressure drop. In the stabilization region of the flame, the turbulent flame velocity of the flame and the flow velocity should be equal.

The simulations show that both the flow velocity normalized with the volumetric velocity u_0 and the global flame velocity $S_{t,global}$ normalized with u_0 are constant at $\overline{c} = 0.1$. In the area of flame stabilization, the flow velocity and the turbulent flame velocity increase at the same rate with increasing pressure drop across the nozzle.

As a result the height of the flame base does not change. Thus the flame seems to behave like a flamelet at the flame base, where the flame starts to burn.

In the simulations the flame volume increases with increasing pressure drop and the location of maximum of the source term of the reaction progress moves downstream. This indicates that the flame regime is changing and a homogeneous flame front is present in the area downstream.

In the experimental investigations of the methane flames, the reaction maximum moves upstream due to the reduction of heat losses in the upper area of the combustion chamber.

The combustion with jet A-1 causes the position of the maximum reaction rate to move downstream. One reason for this behaviour could be that the droplet size decreases with increasing air velocity at the nozzle exit [3, 62]. Moreover, the evaporation rate increases with increasing turbulence [6]. This causes the droplets to evaporate more quickly. The air-fuel mixture is leaned down more quickly and the flame speed is reduced. This causes the stabilization area of the flame to shift further downstream to an area of lower gas velocity.

Influence of operating pressure

As the absolute pressure increases, the experimentally determined lift-off height decreases for both methane and jet A-1. This may be caused by an increase in turbulent flame speed at elevated pressure. The same effect is achieved by the heat loss from the combustion chamber, which decreases proportionally with increasing absolute pressure, which increases the turbulent flame speed.

Influence of stoichiometry

With decreasing fuel mass flow and at constant air mass flow, the experimentally determined lift-off height increases for both methane and jet A-1. The flow field in the area of flame stabilization remains similar, while the turbulent flame velocity decreases. As a result, the flame stabilizes further downstream at lower flow velocities as the air factor increases.

Influence of air preheating temperature

In general, the main reaction zone moves upstream by increasing the air preheating temperature, as the turbulent flame velocity increases more than the flow velocity in the combustion chamber.

The combustion of liquid fuel shows an exception at low air preheating temperature. At a preheating temperature of 473 *K*, the main reaction zone is near the nozzle exit and shifts downstream with an increase in the air preheating temperature from

473 *K* to 573 *K*. Increasing the air preheating temperature leads to faster evaporation of the fuel droplets for jet A-1 and the mixture will become leaner earlier. At low air preheating temperatures, a high flame speed results near the nozzle due to the very rich fuel-air mixture, so that the flame can stabilize there.

In particular, the lift-off height for gaseous and liquid fuel is almost the same for an air preheating temperature of 673 *K*. The influence of fuel atomization and evaporation on the lift-off height is therefore negligible at high air preheating temperatures of 673 *K*. Thus, the differences between combustion with methane and jet A-1 seem to be caused by the atomisation and evaporation of the liquid fuel and consequently by the differences in the mixture between fuel and air.

Outlook

The results of this work show that the heat losses have a significant influence on the flame structure. In the experimental setup investigating combustion with jet A-1, this could be partially taken into account by keeping the ratio of cooling air mass flow and combustion air mass flow constant. This meant that the proportionate heat losses were likely the same. In the experimental set-up for the investigation with combustion of methane, the cooling air mass flow had to be kept constant. This increases the proportion of heat losses as the power of the flame decreases.

In order to improve comparability, the proportionate heat loss must be kept constant. The heat losses should also be determined more precisely in the experiments and reproduced in the simulations. Heat loss due to radiation should also be taken into account in the simulations.

As a further point, combustion with liquid fuel should be described in more detail. So far it has not been investigated how the size and size distribution of the fuel droplets, as well as their interaction with the flow, change with the variation of different operating parameters. The behavior of the fuel which is present as droplets has a great influence on the location and shape of the flame when the air preheating temperature is lower than 673 *K*. With experimental and/or numerical investigations, which provide information about the boundary conditions of the fuel spray depending on different operating parameters, reactive LES with liquid fuel could also be carried out.

It is still unclear how the turbulent burning velocity changes with increasing pressure. This leaves room for numerical and experimental investigations of the burning speed of turbulent flames.

Literaturverzeichnis

- RG Abdel-Gayed, D Bradley, MN Hamid, and M Lawes. Lewis number effects on turbulent burning velocity. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 20, pages 505–512. Elsevier, 1985.
- [2] R.G. Abdel-Gayed, Derek Bradley, and F.K.-K. Lung. Combustion regimes and the straining of turbulent premixed flames. *Combustion and Flame*, 76(2):213 – 218, 1989.
- [3] Manfred Aigner. Charakterisierung der bestimmenden Einflussgrössen bei der luftgestützten Zerstaäubung: Physikalische Grundlagen und messtechnische Erfassung. PhD thesis, Universität Karlsruhe (TH), 1986.
- [4] P.A. Anderson. *Turbulence*. Oxford University Press, 2004.
- [5] M. Barrere. Modeles de combustion. *Revue Generale de Thermique*, 148:295–308, 1974.
- [6] M. Birouk and et al. Droplet evaporation in a turbulent environment at elevated pressure and temperature conditions. *Combustion Science and Technology*, 180(10-11):1987–2014, 2008.
- [7] R. Borghi. On the structure and morphology of turbulent premixed flames. In Corrado Casci and Claudio Bruno, editors, *Recent Advances in the Aerospace Sciences*, pages 117–138. Springer US, 1985.
- [8] R. Borghi. Turbulent combustion modelling. *Prog. Energy Combust. Sci.*, 14:245–292, 1988.
- [9] R. Borghi and M. Destriau. *Combustion and flames, chemical and physical principles*. Editions Technip, 1998.
- [10] D. Bradley, M. Lawes, Kexin Liu, and M.S. Mansour. Measurements and correlations of turbulent burning velocities over wide ranges of fuels and elevated pressures. *Proceedings of the Combustion Institute*, 34(1):1519 – 1526, 2013.

- [11] K.N.C. Bray. Turbulent flows with premixed reactants. In Paul A. Libby and Forman A.Williams, editors, *Turbulent Reacting Flows*, volume 44 of *Topics in Applied Physics*, pages 115–183. Springer Berlin Heidelberg, 1980.
- [12] R. Cabra, J.-Y. Chen, R.W. Dibble, A.N. Karpetis, and R.S. Barlow. Lifted methane-air jet flames in a vitiated coflow. *Combustion and Flame*, 143(4):491 – 506, 2005. Special Issue to Honor Professor Robert W. Bilger on the Occasion of His Seventieth Birthday.
- [13] Ricardo Cabra. *Turbulent jet flames into a vitiated coflow*. PhD thesis, University of California, Berkeley, 2003.
- [14] DavideE. Cavaliere, James Kariuki, and Epaminondas Mastorakos. A comparison of the blow-off behaviour of swirl-stabilized premixed, non-premixed and spray flames. *Flow, Turbulence and Combustion*, 91(2):347–372, 2013.
- [15] Gerhard Damköhler. Der einfluss der turbulenz auf die flammengeschwindigkeit in Gasgemischen. Zeitschrift für Elektrochemie und angewandte physikalische Chemie, 46(11):601–626, 1940.
- [16] S Daniele, P Jansohn, and K Boulouchos. Flame front characteristic and turbulent flame speed of lean premixed syngas combustion at gas turbine relevant conditions. *Proceedings of ASME Turbo Expo 2009: Power for Land, Sea and Air*, 2009.
- [17] S Daniele, P Jansohn, J Mantzaras, and K Boulouchos. Turbulent flame speed for syngas at gas turbine relevant conditions. *Proceedings of the Combustion Institute*, 33(2):2937–2944, 2011.
- [18] Salvatore Daniele. *Lean premixed syngas combustion for Gas turbines applications*. PhD thesis, ETH Zurich, 2011.
- [19] Dantec. FlowManager software and Introduction to PIV Instrumentation (Software & User's Guide).
- [20] Dantec. HiSense PIV/PLIF Camera (Installation & User's Guide), 1998.
- [21] Dantec Dynamics. Laser Doppler Anemometry Introduction to principles and applications, 2012.
- [22] JW Deardorff. The use of subgrid transport equations in a three-dimensional model of atmospheric turbulence. *Journal of Fluids Engineering*, 95(3):429–438, 1973.

- [23] James F Driscoll. Turbulent premixed combustion: Flamelet structure and its effect on turbulent burning velocities. *Progress in Energy and Combustion Science*, 34(1):91–134, 2008.
- [24] Alan C Eckbreth. Laser diagnostics for combustion temperature and species, volume 7 of Energy and engineering science series. Abacus Press, Tunbridge Wells, Kent, UK, 1988.
- [25] H. Eickhoff, B. Lenze, and W. Leuckel. Experimental investigation on the stabilization mechanism of jet diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion*, 20(1):311–318, 1985. Twentieth Symposium (International) on Combustion.
- [26] Gordon Erlebacher, MY Hussaini, CG Speziale, and Thomas A Zang. Toward the large-eddy simulation of compressible turbulent flows. *Journal of Fluid Mechanics*, 238:155–185, 1992.
- [27] A. J. Favre. The equations of compressible turbulent gases. Contract AF61 (052)-772 AD 622097, USAF, 1965.
- [28] J. Ferziger and M. Peric. *Computational methods for fluid dynamics*. Springer, 2002.
- [29] B. Fiorina. *Turbulent combustion modeling to predict pollutant produced by industrial burners.* PhD thesis, Ecole Centrale de Paris, 2004.
- [30] B. Fiorina, R. Baron, O. Gicquel, D. Thevenin, S. Carpentier, and N. Darabiha. Modelling non-adiabatic partially premixed flames using flame-prolongation of ildm. *Combust. Theor. Model.*, 7:449–470, 2003.
- [31] B. Fiorina, O. Gicquel, L. Vervisch, S. Carpentier, and N. Darabiha. Premixed turbulent combustion modeling using tabulated detailed chemistry and {PDF}. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(1):867 – 874, 2005.
- [32] Paris A. Fokaides. Experimentelle Analyse der Stabilisierungseigenschaften von abgehobenen eingeschlossenen nicht-vorgemischten Drallflammen. PhD thesis, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2009.
- [33] Jochen Fröhlich. Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen. Teubner, 2006.
- [34] Flavio Cesar Cunha Galeazzo. Simulation of Turbulent Flows with and without Combustion with Emphasis on the Impact of Coherent Structures on the Turbulent Mixing. PhD thesis, Karlsruher Institut fur Technologie (KIT), 2013.
- [35] Peyman Givi. Model-free simulations of turbulent reactive flows. Progress in Energy and Combustion Science, 15(1):1 – 107, 1989.

- [36] P. Griebel, E. Boschek, and P. Jansohn. Lean blowout limits and NO_x emissions of turbulent, lean premixed, hydrogen-enriched methane/air flames at high pressure. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 129(2):404–410, 2007.
- [37] P. Griebel, P. Siewert, and P. Jansohn. Flame characteristics of turbulent lean premixed methane/air flames at high pressure: Turbulent flame speed and flame brush thickness. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31(2):3083 3090, 2007.
- [38] Ömer L Gülder. Turbulent premixed flame propagation models for different combustion regimes. In *Symposium (International) on Combustion*, volume 23, pages 743–750. Elsevier, 1991.
- [39] Peter Habisreuther. Untersuchung zur Bildung von thermischen Stickoxid in turbulenten Drallflammen. PhD thesis, Universität Karlsruhe (TH), 2002.
- [40] Arne B. Hoffmann. *Modellierung turbulenter Vormischverbrennung*. PhD thesis, Universität Karlsruhe (TH), 2004.
- [41] Sylvie Honnet, Kalyanasundaram Seshadri, Ulrich Niemann, and Norbert Peters. A surrogate fuel for kerosene. *Proceedings of the Combustion Institute*, 32(1):485–492, 2009.
- [42] M. Ihme and H. Pitsch. Prediction of local extinction and re ignition effects in non premixed turbulent combustion using a flamelet progress variable approach. *Proc. Combust. Inst.*, 30:793–800, 2005.
- [43] R. I. Issa. Solution of the implicitly discretised fluid flow equations by operator-splitting. *Journal of Computational Physics*, 62:40–65, 1986.
- [44] H. Jasak. *Error Analysis and Estimation for the Finite Volume Method with Applications to Fluid Flows*. PhD thesis, Imperial College of Science, Technology and Medicine, 1996.
- [45] J.Boussinesq. Théorie de l'écoulement tourbillonnant. *Mémoires présentés à l'Académie des Sciences*, 22:6, 1877.
- [46] M.R. Johnson, D. Littlejohn, W.A. Nazeer, K.O. Smith, and R.K. Cheng. A comparison of the flowfields and emissions of high-swirl injectors and lowswirl injectors for lean premixed gas turbines. *Proceedings of the Combustion Institute*, 30(2):2867 – 2874, 2005.
- [47] W. P. Jones and B. E. Launder. The prediction of laminarization with a twoequation model of turbulence. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15:301–314, 1972.

- [48] G. T. Kalghati. Lift-off heights and visible lengths of vertical turbulent jet diffusion flames in still air. *Combustion Science and Technology*, 41(1-2):17–29, 1984.
- [49] P. Kasabov, N. Zarzalis, and P. Habisreuther. Experimental study on lifted flames operated with liquid kerosene at elevated pressure and stabilized by outer recirculation. *Flow, Turbulence and Combustion*, 90(3):605–619, 2013.
- [50] Plamen Kasabov. *Experimentelle Untersuchungen an abgehobenen Flammen unter Druck*. PhD thesis, Karlsruher Institut für Technologie (KIT), 2014.
- [51] T. Kathrotia, U. Riedel, A. Seipel, K. Moshammer, and A. Brockhinke. Experimental and numerical study of chemiluminescent species in low-pressure flames. *Applied Physics B*, 107(3):571–584, 2012.
- [52] R. J. Kee, F. M. Rupley, J. A. Miller, M. E. Coltrin, J. F. Grcar, E. Meeks, H. K. Moffat, A. E. Lutz, G. Dixon-Lewis, M. D. Smooke, J. Warnatz, G. H. Evans, R. S. Larson, R. E. Mitchell, L. R. Petzold, W. C. Reynolds, M. Caracotsios, W. E. Stewart, and P. Glarborg. *CHEMKIN Collection*. Release 3.6, Reaction Design, Inc., San Diego, CA, USA, 2000.
- [53] Robert J Kee, Joseph F Grcar, MD Smooke, and JA Miller. Premix: a fortran program for modeling steady laminar one-dimensional premixed flames. *Sandia National Laboratories Report*, 1985.
- [54] Matthias Kern. Modellierung kinetisch kontrollierter, turbulenter Flammen fur Magerbrennkonzepte. PhD thesis, Karlsruher Institut fur Technologie (KIT), 2013.
- [55] V.A. Khramtsov. Investigation of pressure effect on the parameters ofturbulence and on turbulent burning. *Symposium (International) on Combustion*, 7(1):609 – 614, 1958.
- [56] M. Klein, A. Sadiki, and J. Janicka. A digital filter based generation of inflow data for spatially developing direct numerical or large eddy simulations. *Journal of Computational Physics*, 186:652–665, 2003.
- [57] Hideaki Kobayashi, Yasuharu Kawabata, and Kaoru Maruta. Experimental study on general correlation of turbulent burning velocity at high pressure. *Symposium (International) on Combustion*, 27(1):941 – 948, 1998. <ce:title>Twenty-Seventh Sysposium (International) on Combustion Volume One</ce:title>.

- [58] Hideaki Kobayashi, Takashi Tamura, Kaoru Maruta, Takashi Niioka, and Forman A. Williams. Burning velocity of turbulent premixed flames in a highpressure environment. *Symposium (International) on Combustion*, 26(1):389–396, 1996.
- [59] Martin Lauer and Thomas Sattelmayer. On the adequacy of chemiluminescence as a measure for heat release in turbulent flames with mixture gradients. *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power*, 132(6):061502, 2010.
- [60] B. E. Launder and B. I. Sharma. Application of the energy-dissipation model of turbulence to the calculation of flow near a spinning disc. *Lett. Heat Mass Transf.*, 1:131–138, 1974.
- [61] CJ Lawn and RW Schefer. Scaling of premixed turbulent flames in the corrugated regime. *Combustion and flame*, 146(1):180–199, 2006.
- [62] A. H. Lefebvre. *Atomization and Sprays*. Combustion: an international series. Hemisphere Publ., New York, 1989.
- [63] A. Leonard. Energy cascade in large-eddy simulations of turbulent fluid flows. In F.N. Frenkiel and R.E. Munn, editors, *Turbulent Diffusion in Environmental Pollution Proceedings of a Symposium held at Charlottesville*, volume 18, Part A of *Advances in Geophysics*, pages 237 – 248. Elsevier, 1975.
- [64] Wolfgang Leukel. *Skriptum zu Vorlesung Feuerungstechnik I*. Engler-Bunte-Institut, Lehrstuhl fur Verbrennungstechnik, Universitar Karlsruhe (TH), 1997.
- [65] P.A. Libby and F.A. Williams. *Turbulent Reacting Flows*. Springer-Verlag, 1980.
- [66] Andrei Lipatnikov. *Fundamentals of premixed turbulent combustion*. CRC Press, 2012.
- [67] F. Liu, H. Guo, G. J. Smallwood, Gülder Ö. L., and M. D. Matovic. A robust and accurate algorithm of the β-pdf integration and its application to turbulent methane/air diffusion combustion in a gas turbine combustor simulator. *International Journal of Thermal Science*, 41:763–772, 2002.
- [68] Kevin M. Lyons. Toward an understanding of the stabilization mechanisms of lifted turbulent jet flames: Experiments. *Progress in Energy and Combustion Science*, 33(2):211 – 231, 2007.
- [69] F. R. Menter. Two-equation eddy-viscosity models for engineering applications. *American Institute of Aeronautics and Astronautics Journal*, 32:1598–1605, 1994.

- [70] Richard C. Miake-Lye and Jay A. Hammer. Lifted turbulent jet flames: A stability criterion based on the jet large-scale structure. *Symposium (International)* on Combustion, 22(1):817 – 824, 1989.
- [71] Kolmogorov A. N. The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large reynolds numbers. *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 30:299–303, 1941.
- [72] Habib N Najm, Phillip H Paul, Charles J Mueller, and Peter S Wyckoff. On the adequacy of certain experimental observables as measurements of flame burning rate. *Combustion and Flame*, 113(3):312 – 332, 1998.
- [73] Hung Lee Nguyen and SJ Ying. Critical Evaluation of Jet-A Spray Combustion Using Propane Chemical Kinetics in Gas Turbine Combustion Simulated KIVA-II. NASA, 1990.
- [74] Palas. Bedienungsanleitung Flussigkeitszerstaüber AGF 10.0 D, 2007.
- [75] N. Peters. Laminar flamelet concepts in turbulent combustion. *Symposium* (*International*) on Combustion, 21(1):1231 – 1250, 1988. Twenty-First Symposuim (International on Combustion).
- [76] N. Peters. The turbulent burning velocity for large-scale and small-scale turbulence. *Journal of Fluid Mechanics*, 384:107–132, 4 1999.
- [77] Norbert Peters. Turbulent combustion. Cambridge University Press, 2000.
- [78] Norbert Peters and Forman A Williams. Liftoff characteristics of turbulent jet diffusion flames. *AIAA journal*, 21(3):423–429, 1983.
- [80] C. D. Pierce and P. Moin. Progress variable approach for large eddy simulation of non premixed turbulent combustion. *J. Fluid Mech.*, 504:73–97, 2004.
- [81] Charles D Pierce and Parviz Moin. A dynamic model for subgrid-scale variance and dissipation rate of a conserved scalar. *Physics of Fluids* (1994present), 10(12):3041–3044, 1998.
- [82] William M. Pitts. Assessment of theories for the behavior and blowout of lifted turbulent jet diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion*, 22(1):809 – 816, 1989.
- [83] T. Poinsot and D. Veynante. *Theoretical and Numerical Combustion*. R.T. Edwards, Inc., 2005.

- [84] S. B. Pope. Turbulent Flows. Cambridge University Press, 2000.
- [85] S.B. Pope. {PDF} methods for turbulent reactive flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 11(2):119 192, 1985.
- [86] L. Prandtl. Bericht über untersuchungen zur ausgebildeten turbulenz. Zeitschrift für angewandte Mathematik und Mechanik, 5:136–139, 1925.
- [87] Quantel. Quantel Brilliant / BrilliantB Q-Switched Nd:YAG Lasers (Instruction Manual), 2000.
- [88] O. Reynolds. An experimental investigation of the circumstances which determine whether the motion of water shall be direct or sinuous, and of the law of resistance in parallel channels. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London. A*, 174:935–982, 1883.
- [89] O. Reynolds. 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, 1895.
- [90] Edwin N. Lightfoot Robert Byron Bird, Warren E. Stewart. *Transport phenomena*. Wiley, New York, 2. ed. edition, 2002.
- [91] W. Rodi. Turbulence models and their application in hydraulics a state of the art review. Technical report, IAHR, 1993.
- [92] RS Princeton Instruments. ICCD-MAX (Operation Manual), 1999.
- [93] Bodo Ruck. Lasermethoden in der Strömungsmeßtechnik Kap.3 Laser-Doppler Anemometrie. AT-Fachverlag Stuttgart, 1987.
- [94] M. Schäfer. *Computational Engineering Introduction to Numerical Methods*. Springer, 2006.
- [95] R.W. Schefer, M. Namazian, and J. Kelly. Stabilization of lifted turbulent-jet flames. *Combustion and Flame*, 99(1):75 – 86, 1994.
- [96] Herrmann Schlichting and Klaus Gersten. *Grenzschicht-Theorie*. Springer Berlin Heidelberg, 2006.
- [97] Hans-Peter Schmid. Ein Verbrennungsmodell zur Beschreibung der Wärmefreisetzung von vorgemischten turbulenten Flammen. PhD thesis, Universität Karlsruhe (TH), 1995.
- [98] IG Shepherd and RK Cheng. The burning rate of premixed flames in moderate and intense turbulence. *Combustion and Flame*, 127(3):2066–2075, 2001.

- [99] Piotr Siewert. *Flame front characteristics of turbulent lean premixed methane/air flames at high-pressure*. PhD thesis, Swiss Federal Institute of Technology Zurich, 2006.
- [100] J. Smagorinsky. General circulation experiments with the primitive equations: I. the basic equations. *Mon. Weather Rev.*, 91:99–164, 1963.
- [101] Gregory P. Smith, David M. Golden, M. Frenklach, Nigel W. Moriarty, B. Eiteneer, M. Goldenberg, C. Thomas Bowman, Ronald K. Hanson, S. Song, William C. Gardiner, Vitali V. Lissianski, and Z. Qin. http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/.
- [102] L.K. Su, O.S. Sun, and M.G. Mungal. Experimental investigation of stabilization mechanisms in turbulent, lifted jet diffusion flames. *Combustion and Flame*, 144(3):494 – 512, 2006.
- [103] M.M. Tacke, D. Geyer, E.P. Hassel, and J. Janicka. A detailed investigation of the stabilization point of lifted turbulent diffusion flames. *Symposium (International) on Combustion*, 27(1):1157 – 1165, 1998. Twenty-Seventh Sysposium (International) on Combustion Volume One.
- [104] D. Sc. D. Eng. W. M. Thornton. The relation of oxygen to the heat of combustion of organic compounds. *Philosophical Magazine Series* 6, pages 196–203, 1917.
- [105] S. R. Turns. An Introduction to Combustion. McGraw-Hill, 2000.
- [106] J. A. van Oijen and L. P. H. De Goey. Modelling of premixed laminar flames using flamelet-generated manifolds. *Combustion Science and Technology*, 161(1):113–137, 2000.
- [107] J.A. van Oijen, F.A. Lammers, and L.P.H. de Goey. Modeling of complex premixed burner systems by using flamelet-generated manifolds. *Combustion and Flame*, 127(3):2124 2134, 2001.
- [108] L. Vanquickenborne and A. van Tiggelen. The stabilization mechanism of lifted diffusion flames. *Combustion and Flame*, 10(1):59 69, 1966.
- [109] V. Vukadinovic, N. Zarzalis, P. Habisreuther, and R. Suntz. Influence of pressure on Markstein number effects in turbulent flame front propagation. *Proceedings of ASME Turbo Expo 2013: Power for Land, Sea and Air*, 2013.
- [110] Christof Weis. Persönliche Mitteilung, 2016.

- [111] F. Wetzel, P. Habisreuther, and N. Zarzalis. Numerical investigation of lean blow out of a model gas turbine combustion chamber using a presumed jpdf-reaction model by taking heat loss processes into account. In *Proceedings* of ASME Turbo Expo, Barcelona, Spain, May 2006. ASME.
- [112] Frank Wetzel. Numerische Untersuchung der Stabilität nicht-vorgemischter, doppelt-verdrallter Flammen. PhD thesis, Universität Karlsruhe (TH), 2007.
- [113] D. C. Wilcox. Turbulence Modeling for CFD. DCW Industries, Inc., 2006.
- [114] F. A. Williams. Combustion Theory. Addison Wesley Publishing, 1988.
- [115] Kurt Wohl, Numer M. Kapp, and Carl Gazley. The stability of open flames. *Symposium on Combustion and Flame, and Explosion Phenomena*, 3(1):3 21, 1949.
- [116] Akira Yoshizawa. Statistical theory for compressible turbulent shear flows, with the application to subgrid modeling. *Physics of Fluids* (1958-1988), 29(7):2152–2164, 1986.
- [117] N. Zarzalis. Angewandte Verbrennungstechnik. Vorlesung: KIT, 2012.
- [118] N. Zarzalis, P. Fokaides, and K. Merkle. Fuel injection apparatus. de 10 2005 022 772.4, ep 06 009 563.5, 2005.
- [119] Vladimir Zimont, Wolfgang Polifke, Marco Bettelini, and Wolfgang Weisenstein. An efficient computational model for premixed turbulent combustion at high reynolds numbers based on a turbulent flame speed closure. In ASME 1997 International Gas Turbine and Aeroengine Congress and Exhibition, pages V002T06A054–V002T06A054. American Society of Mechanical Engineers, 1997.