

# Beschreibung der Selbstzündung in turbulenter Strömung unter Einbeziehung ternärer Mischvorgänge

Martin Brandt



Lehrstuhl für Thermodynamik  
Technische Universität München

Beschreibung der Selbstzündung in turbulenter  
Strömung unter Einbeziehung ternärer  
Mischvorgänge

Martin Brandt

Vollständiger Abdruck der von der Fakultät für Maschinenwesen  
der Technischen Universität München  
zur Erlangung des akademischen Grades eines  
DOKTOR – INGENIEURS  
genehmigten Dissertation

Vorsitzender: Univ.-Prof. Dr.-Ing. Georg Wachtmeister  
Prüfer der Dissertation: 1. Univ.-Prof. W. Polifke Ph.D. (CCNY)  
2. Univ.-Prof. Dr. Patrick Jenny  
ETH-Zürich (CH)

Die Dissertation wurde am xx.xx.2005 bei der Technischen  
Universität München eingereicht und durch die Fakultät für  
Maschinenwesen am xx.xx.2005 angenommen.

Für Sara

## Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Angestellter am Lehrstuhl für Thermodynamik der Technischen Universität München im Rahmen des durch ALSTOM Power (Schweiz) geförderten Forschungsvorhabens „Investigation of Flashback in high pressure and high preheat temperature gas turbine combustors“.

Mein herzlicher Dank gilt Herrn Professor Wolfgang Polifke, Ph.D. für die Betreuung meiner Arbeit, die intensiven und inspirierenden Diskussionen, aber auch für die Freiheiten bei der wissenschaftlichen Arbeit und die Übernahme des Hauptreferats. Herrn Professor Dr. Patrick Jenny danke ich für die freundliche Übernahme des Koreferats und Herrn Professor Dr.-Ing. Georg Wachtmeister für den Vorsitz bei der mündlichen Prüfung.

Auch gilt mein Dank allen Kolleginnen und Kollegen des Lehrstuhls für Thermodynamik für die direkte Unterstützung bei der fachlichen Arbeit, aber auch für die Gestaltung der angenehmen Atmosphäre am Lehrstuhl. Den Studentinnen und Studenten, die durch ihre tatkräftige Unterstützung in Form von Semesterarbeiten oder Diplomarbeiten an der vorliegenden Arbeit beteiligt sind, sei ebenfalls gedankt. Hervorzuheben sind hierbei vor allem die Arbeiten von Dipl.-Ing. Jutta Pieringer, Dipl.-Ing. Christoph Heinz, Dipl.-Ing. Stefan Siegert und Dipl.-Ing. Simon Schneider. Dem Sekretariat sei an dieser Stelle auch für die Unterstützung bei den vielen administrativen Problemen gedankt.

Bedanken möchte ich mich auch bei der Firma ALSTOM Schweiz Ltd. für die finanzielle Unterstützung meiner Arbeit sowie bei den Mitarbeitern der Abteilung TGTB Combustor Technology des ALSTOM Forschungszentrums Baden-Dättwil (CH). Dr.-Ing. Peter Flohr danke ich für die Übernahme der Betreuung von Seiten des Industriepartners und die richtungweisenden Diskussionen. Auch den Herren Dr.-Ing. Blazenko Ivancic und Dr.-Ing. Fernando Biagoli sei

an dieser Stelle dafür gedankt, dass sie mir stets als Diskussionspartner zur Verfügung standen und mich mit Vorschlägen unterstützt haben.

Meiner Familie gilt für den mir während meiner gesamten Ausbildungszeit gegebenen Rückhalt ein besonderer Dank. Ein herzliches Dankeschön für das Korrekturlesen dieser Arbeit geht auch an meine Schwester Christel Hilgert. Nicht zuletzt gilt mein herzlicher Dank meiner lieben Frau Sara, die mich während des Entstehens dieser Arbeit durch ihre Geduld, manche Entbehrung und ihr großes Verständnis unterstützt hat.

Bietigheim-Bissingen, 12.07.2005

Martin Brandt

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Grundlagen der Fluidmechanik</b>	<b>8</b>
2.1	Charakteristika turbulenter, reagierender Strömungen	8
2.2	Strategien bei der numerischen Strömungssimulation	11
2.3	Gemittelte Form der Erhaltungsgleichungen . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Modellierung der Verbrennung im Regime der Selbstzündung</b>	<b>18</b>
3.1	Chemische Kinetik der Kohlenwasserstoff-Oxidation .	19
3.1.1	Grundlagen der Reaktionskinetik . . . . .	19
3.1.2	Zündung von Brennstoff-Luft-Gemischen . . .	20
3.1.3	Das Phänomen der Selbstzündung . . . . .	21
3.1.4	Experimentelle Bestimmung von Zündverzugszeiten . . . . .	30
3.1.5	Numerische Berechnung der Zündverzugszeiten	32
3.1.6	Einflussgrößen auf die Zündverzugszeit . . . .	39
3.1.7	Korrelationen zur Bestimmung der Zündverzugszeiten . . . . .	52
3.1.8	Modelle zur Beschreibung der Selbstzündung und Verbrennung bei nicht vorgemischter Brennerströmung . . . . .	53
3.2	Modelle zur Beschreibung der Turbulenz-Chemie Interaktionen . . . . .	69
3.2.1	Die Notwendigkeit von Modellen zur Berücksichtigung der Turbulenz-Chemie Interaktionen	69
3.2.2	Bestimmung mittlerer Reaktionsraten . . . . .	71
3.2.3	PDF-Ansätze . . . . .	76
3.2.4	PDF-Ansätze bei der Grobstruktursimulation	82
3.2.5	Zusammenfassende Bewertung der Ansätze . .	83
<b>4</b>	<b>Formulierung und Validierung der Teilmodelle</b>	<b>84</b>
4.1	Diskretes Distributionsmodell zur Beschreibung von Mischungsfeldern . . . . .	88

4.1.1	Überführung der kontinuierlichen PDF in eine diskrete PDF . . . . .	88
4.1.2	Anforderungen an das Distributionsmodell . .	90
4.1.3	Erzeugung der Distributionen mit einem Zufallszahlengenerator . . . . .	93
4.1.4	Korrektur durch Verschiebung . . . . .	96
4.1.5	Korrektur durch Neugenerierung . . . . .	98
4.1.6	Vergleich der Korrekturverfahren . . . . .	99
4.1.7	Erzeugung Gleichverteilungs-basierter jPDDs .	100
4.1.8	Erzeugung der Distributionen mit Mischungsmodellen . . . . .	104
4.1.9	Einfluss der (Ko-)Varianzen auf die Reaktionsraten . . . . .	108
4.1.10	Validierung anhand von LES-Daten . . . . .	111
4.1.11	Validierung mit transportierter Mischungsbruch-PDF . . . . .	118
4.1.12	Abschließende Bewertung der Verfahren . . .	121
4.1.13	Approximationsfehler . . . . .	124
4.2	Zündung . . . . .	126
4.2.1	Anforderungen an einen idealen Zündfortschrittsindikator . . . . .	127
4.2.2	Reaktormodell zur Auswahl der Schlüsselspezies	129
4.2.3	Lineares Zündmodell . . . . .	137
4.2.4	Chemie-Turbulenz-Interaktionen während der Induktionsphase . . . . .	142
4.3	Kopplung von Zündung und Wärmefreisetzung . . . .	144
4.3.1	Die dispergierte Zündfläche . . . . .	145
4.3.2	Modellierung der dispergierten Zündfläche . .	146
4.4	Wärmefreisetzung . . . . .	149
4.4.1	Formulierung des Wärmefreisetzungsmodells .	149
4.4.2	Chemie-Turbulenz-Interaktion während der Wärmefreisetzungsphase . . . . .	154
<b>5</b>	<b>Struktur und Realisierung des Gesamtmodells</b>	<b>156</b>
5.1	Aufbau des Modells . . . . .	156

---

5.2	Lagrange vs. Euler-Formulierung . . . . .	159
5.3	Adaptive Tabellengenerierung . . . . .	160
<b>6</b>	<b>Ergebnisse</b>	<b>163</b>
6.1	Überprüfung der Vereinfachungen . . . . .	163
6.2	Validierung des Gesamtmodells am SEV-Brenner . . .	166
6.2.1	Aufbau des atmosphärischen Versuchsstands .	167
6.2.2	Definition der Vergleichsgrößen . . . . .	167
6.2.3	Vergleich der Ungemischtheit . . . . .	171
6.2.4	Vergleich der Flammpositionen . . . . .	173
6.2.5	Sensitivität der Flammposition bezüglich mitt- lerer Zündverzugszeiten . . . . .	181
6.2.6	Flammdicken . . . . .	182
6.2.7	Materialtemperaturen . . . . .	184
6.2.8	Einfluss der Reaktionsmechanismen . . . . .	186
<b>7</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>189</b>
	<b>Literatur</b>	<b>194</b>

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematischer Aufbau der ALSTOM GT24/26 Gasturbinenfamilie. . . . .	3
1.2	Brennstofflanze und Injektorkonzept beim SEV-Brenner. . . . .	4
3.1	Schematischer Temperaturverlauf bei der Zündung. .	24
3.2	Modell des idealen Rohrreaktors (PFR). . . . .	24
3.3	Spezies- und Temperaturverlauf während der Selbstzündung eines stöchiometrischen $\text{CH}_4$ -Luft Gemisches mit $T_0 = 1300\text{K}$ und $p = 1\text{bar}$ . . . . .	26
3.4	Reaktionspfade bei der Oxidation von Methan; Links: während der Induktionsphase, Rechts: während der Wärmefreisetzungsphase. . . . .	28
3.5	Geschwindigkeitskoeffizienten wichtiger Reaktionen während der Induktionsphase. . . . .	30
3.6	Aufbau eines Stoßrohr experiments. . . . .	31
3.7	Druck- und OH-Emissionsverlauf im Stoßrohr [KS01].	32
3.8	Vergleich der Reaktionsmechanismen anhand der Zündverzugszeiten eines stoichiometrischen $\text{CH}_4$ -Luft Gemisches bei $p \approx 16\text{bar}$ . . . . .	37
3.9	Einfluss von Starttemperatur und Luftzahl auf die Zündverzugszeiten bei $p = 20\text{ bar}$ . . . . .	40
3.10	Einfluss des Druckes auf die Zündverzugszeiten bei einer Luftzahl von $\lambda = 2$ . . . . .	41
3.11	Einfluss von $\text{C}_3\text{H}_8$ -Erdgasbestandteilen auf die Zündverzugszeit bei $p = 20\text{ bar}$ und $\lambda = 2$ . . . . .	42
3.12	Einfluss von $\text{C}_2\text{H}_6$ -Erdgasbestandteilen auf die Zündverzugszeit bei $p = 20\text{ bar}$ und $\lambda = 2$ . . . . .	43
3.13	Einfluss von $\text{C}_2\text{H}_4$ -Erdgasbestandteilen auf die Zündverzugszeit bei $p = 20\text{ bar}$ und $\lambda = 2$ . . . . .	44
3.14	Reaktionspfad während der Induktionsphase bei der Oxidation von $\text{CH}_4/\text{C}_2\text{H}_4$ -Gemischen. . . . .	45
3.15	Reaktionspfad während der Induktionsphase bei der Oxidation von $\text{CH}_4/\text{C}_3\text{H}_8$ -Gemischen. . . . .	46

3.16	Reaktionspfad während der Induktionsphase bei der Oxidation von $\text{CH}_4/\text{C}_2\text{H}_6$ -Gemischen. . . . .	47
3.17	Einfluss des Inertanteils im Frischgas auf die Zündverzugszeiten bei $\lambda = 2.0$ bei konstantem Partialdruck der Reaktanden. . . . .	50
3.18	Einfluss von OH-Radikalen im Frischgas auf die normierte Zündverzugszeiten bei $T = 1300$ K und $p = 20$ bar. . . . .	51
3.19	Temperaturverlauf und Verteilungsfunktion eines Gauss'schen Prozesses . . . . .	70
3.20	Einfluss der Temperaturverteilung auf die mittlere Reaktionsrate. . . . .	71
3.21	Modellvorstellung einer fluktuierenden instantanen Flammfront. . . . .	74
3.22	Verschiedene Verteilungsfunktionen, links: clipped-Gauss Verteilung; rechts: $\beta$ -Verteilung . . . . .	79
4.1	Mischungsbruchverteilung und lokale PDFs des Mischungsbruchs $f$ . . . . .	91
4.2	Streudiagramm einer korrelierten Gaussverteilung mit Korrelationsellipsen. . . . .	95
4.3	Streudiagramm der Verteilung und Erwartungswertgeraden zur Verschiebung „unzulässiger“ Zufallszahlenpaare. Links: Verschiebungsrichtung für $f_i < 0$ ; Rechts: Verschiebungsrichtung für $\sum f_i > 1$ . . . . .	96
4.4	Vergleich der Verteilungen, links: Verschiebung, rechts: Neugenerierung . . . . .	99
4.5	Korrelationsellipse für die Herleitung der korrelierten Gleichverteilung. . . . .	101
4.6	Prozedere zur Erzeugung einer korrelierten Gleichverteilung. . . . .	103
4.7	Negativ korrelierte Gleichverteilungs-basierte jPDDs nach Anwendung des Korrekturverfahrens. . . . .	103
4.8	Algorithmus zur Erzeugung von Verteilungen mit einem Mischungsmodell. . . . .	104

4.9	Verlauf der Mischungsbruchvarianzen während der Anwendung des adaptierten Modified-Curl Mischungsmodells. . . . .	108
4.10	Einfluss der (Ko-)Varianzen auf die Reaktionsrate für $\overline{f_F} = 0.1$ und $\overline{f_H} = 0.8$ . . . . .	110
4.11	Validierung der Verteilungen mit Daten aus einer LES bei großer Varianz für $f_H$ und kleiner Varianz für $f_F$ . . . . .	113
4.12	Validierung der Verteilungen mit Daten aus einer LES. . . . .	115
4.13	Validierung der Verteilungen mit Daten aus einer LES bei stark negativer Korrelation und mittlerer Varianz für $f_H$ . . . . .	116
4.14	Mischungsbruch-PDF mit großer Varianz für $f_H$ und $f_F$ berechnet mit einer PDF-Transportgleichung. . . . .	119
4.15	Vergleich der jPDDs mit einer transportierten PDF für eine Verteilung mit großer Varianz. . . . .	121
4.16	Vergleich der generierten PDF's mit einer transportierten PDF für eine Verteilung mit mittlerer Varianz. . . . .	122
4.17	Erforderliche Ensemblegröße in Abhängigkeit der gewünschten Genauigkeit und des Konfidenzintervalls. . . . .	125
4.18	Reaktormodell zur Identifizierung einer geeigneten Spezies als Repräsentant des Radikalenpools. . . . .	129
4.19	Speziesprofile für $\text{CH}_2\text{O}$ , berechnet mit dem Reaktormodell. . . . .	131
4.20	Speziesprofile für $\text{CH}_3$ , berechnet mit dem Reaktormodell. . . . .	132
4.21	Ausschnitt aus Abb. 4.19: Definition der Zeiten für die Berechnung der Fehler. . . . .	135
4.22	Fehler bei Verwendung von $\text{CH}_2\text{O}$ als Repräsentant des Radikalenpools. . . . .	136
4.23	Fehler bei Verwendung von $\text{CH}_3$ als Repräsentant des Radikalenpools. . . . .	137
4.24	Vergleich der Reaktionsraten (oben) und Reaktivitäten (unten) bei linearem Modell und Radikalenpoolmodell. . . . .	138

4.25	Lineares Modell: Mit dem Reaktormodell berechneter Verlauf der Reaktivitäten. . . . .	140
4.26	Fehler bei Verwendung des linearen Zündmodells. . .	141
4.27	Bildungsrate $\dot{\omega}_{YR}$ von CH <sub>2</sub> O als Funktion des CH <sub>2</sub> O-Massenbruchs. . . . .	144
4.28	Modellvorstellung der dispergierten Zündfläche. . . .	146
4.29	Angenommene PDF für die Reaktivität. . . . .	147
4.30	Vergleich der Wärmefreisetzung berechnet mit einem detaillierten Reaktionsmechanismus und dem $\tau_{ch}$ Modell. . . . .	150
4.31	Temperaturverlauf bei gleichzeitiger Wärmefreisetzung und Mischung. . . . .	152
4.32	Fehler des Wärmefreisetzungsmodells als Funktion der Temperatur der Reaktoren 1 und 2 vor dem Mischvorgang. . . . .	154
5.1	Implementierung und Aufbau des Zünd- und Wärmefreisetzungsmodells. . . . .	157
5.2	Flussdiagramm des Modells: Tabellengenerierung und Interaktion mit dem Strömungslöser. . . . .	158
5.3	Verfahren zur adaptiven Verfeinerung bei der Tabulierung. . . . .	162
6.1	Ersatzmodell für die Überprüfung der Annahme gleicher Zusammensetzung des Hauptgasstroms und der Trägerluft. . . . .	164
6.2	Überprüfung der Vereinfachung: Zündverzugszeiten für verschiedene Mischtemperaturen. . . . .	165
6.3	Aufbau des SEV Teststands bei ALSTOM in Baden-Dättwil für die Durchführung atmosphärischer Versuche.	168
6.4	Definition der Vergleichsgrößen anhand des Verlaufs der Wärmefreisetzung entlang der Brennerachse. . . .	169
6.5	Auswertung der Ungemischtheit entlang der Brennerachse. . . . .	170
6.6	Vergleich der experimentell und numerisch ermittelten Ungemischtheit für verschiedene Impulsverhältnisse. .	172

6.7	Flammposition als Funktion der normierten Heißgas-Temperatur und verschiedener Propan-Anteile. . . . .	175
6.8	Verlauf der dimensionslosen Temperatur $\Theta$ und des normierten $\text{CH}_2\text{O}$ Massenbruches für unterschiedliche Starttemperaturen $T/T_{H,N}$ bei Berechnung einer vorgemischten Flamme. . . . .	177
6.9	Zeiten zwischen Beginn der Reaktion und Zündung des Gemisches, bestimmt mit SENKIN und PREMIX Reaktoren. . . . .	179
6.10	Normierte Flammposition und Zündverzugszeit in Abhängigkeit der Heißgastemperatur bei einem Propananteil von 7,5 %. . . . .	182
6.11	Flammdicken in Abhängigkeit der Flammposition bei atmosphärischen Bedingungen. . . . .	184
6.12	Normierte Materialtemperaturen der Brennerwand am Austritt in die Brennkammer. . . . .	185
6.13	Einfluss des verwendeten Reaktionsmechanismus auf die Position und Dicke der Flamme bei atmosphärischen Bedingungen und einem Propan-Anteil des Brennstoffs von 30 %. . . . .	187
6.14	Einfluss des verwendeten Reaktionsmechanismus auf die Position und Dicke der Flamme bei Maschinen-druck und einem Propan-Anteil des Brennstoffs von 30 %. . . . .	188

# Nomenklatur

## Lateinische Buchstaben

$A$	$[m^3/kmols]$	Präexponentieller Faktor
$A$	$[m^2]$	Fläche
$a, b, c$	$[-]$	Konzentrationsexponenten
$C_{EBU}$	$[-]$	Konstante EBU-Modell
$C_\mu$	$[-]$	Konstante Turb. Viskosität
$C_\phi$	$[-]$	Konstante Modified Curl Modell
$c$	$[-]$	Fortschrittsvariable
$c_p$	$[J/kgK]$	spezifische Wärmekapazität
$c_Z$	$[-]$	Zündfortschritt
$D$	$[m^2/s]$	Diffusion
$D(\vec{x})$	$[-]$	Dimensionalität von $\vec{x}$
$E_A$	$[J/kmol]$	Aktivierungsenergie
$f$	$[-]$	Mischungsbruch
$F$	$[-]$	Fehler
$F_W$	$[-]$	Fehler bei der Wärmefreisetzung
$h$	$[J/kg]$	Enthalpie
$J$	$[-]$	Impulsverhältnis
$k$	$[1/s]$	Geschwindigkeitskoeffizient
$k$	$[m^2/s^2]$	Turb. kinetische Energie
$L$	$[m]$	Charakteristische Länge
$\dot{m}$	$[kg/s]$	Massenstrom
$N$	$[-]$	Ensemblegröße
$\vec{n}$	$[-]$	Vektor Normalverteilter Zahlen
$P(x)$		Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion von x
$p$	$[bar]$	Druck
$\dot{q}$	$[j/m^3s]$	Wärmefreisetzungsrage
$R$	$[J/kmolK]$	Allg. Gaskonstante
$R_Y$	$[-]$	Reaktivität basierend auf Speziesmassenbruch
$R_\tau$	$[-]$	Reaktivität basierend auf Zündverzugszeit

$\overline{R''^2}$	[–]	Varianz der Reaktivität
$S$		Quellterm
$S$		Kovarianzmatrix
$T$	[K]	Temperatur
$T$		Transformationsmatrix
$t$	[s]	Zeit
$U$	[m/s]	Charakteristische Geschwindigkeit
$u_i$	[m/s]	Geschwindigkeit in i-Richtung
$\vec{u}$	[–]	Vektor gleichverteilter Zahlen
$X$	[–]	Molenbruch
$x$	[m]	Koordinate
$x$	[–]	Anteil
$x_k$	[m]	Koordinate in k-Richtung
$Y$	[–]	Massenbruch
$y$	[–]	Schiefe einer Verteilung
$Y_R$	[–]	Massenbruch des Radikalenpools

## Griechische Buchstaben

$\delta$	[m]	Flammdicke
$\epsilon$	[m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup> ]	Dissipationsrate
$\epsilon$		Approximationsfehler
$\eta_K$	[m]	Kolmogorov-Längenmaß
$\Theta$	[–]	Entdimensionierte Temperatur
$\lambda$	[–]	Luftzahl
$\nu$	[m <sup>2</sup> /s]	Kinematische Viskosität
$\rho$	[kg/m <sup>3</sup> ]	Dichte
$\tau_{ch}$	[s]	Chemische Zeit
$\tau_{res}$	[s]	Aufenthaltszeit
$\tau_Z$	[s]	Zündverzugszeit
$\phi$	[–]	Skalare Größe
$\dot{\omega}$	[kmol/m <sup>3</sup> s]	Bildungsrate

## Mathematische Symbole

$-$	Mittelwert
$'$	Fluktuationswert
$\sim$	Favre-Mittelwert
$''$	Favre-Fluktuationswert
$\delta$	Kronecker Delta
$\delta$	Delta-Funktion
$\overline{''^2}$	Varianz
$\widetilde{''^2}$	Varianz bei Favre-Mittelung
$\langle \dots \rangle$	Erwartungswert
$\langle \dots   \dots \rangle$	Bedingter Erwartungswert

## Indizes

0	Anfangszustand
ad	adiabat
C	Chemisch
ch	Chemisch
EBU	Eddy-Break-Up Modell
H, F, C	Heißgas, Brennstoff, Trägerluft
M	Mischungsevent
MZ	Zwischen Mischung und Zündung
mix	Mischung
N	Diskret
N	Normiert
R	Referenzzustand
R	Radikalenpool
T	Turbulent
Z	Zündung

**Ähnlichkeitskennzahlen**

Da	Damköhler-Zahl
Le	Lewis-Zahl
Pr	Prandtl-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Sc	Schmid-Zahl

# 1 Einleitung

Weltweit beträgt noch heute der Anteil der fossilen Energieträger an den insgesamt umgesetzten Primärenergieformen über 80 % [AGB04], [BO03]. Andere, vor allem regenerative Primärenergieformen, gewinnen zwar stark an Bedeutung, stellen aber mit derzeit ca. 12% am Gesamtumsatz nur eine Nebenrolle dar. Damit wird die Notwendigkeit, die vorhandenen Konvertierungsmethoden fossiler Energieträger hinsichtlich Wirkungsgrad und Emissionen zu optimieren, deutlich. Zudem erschließt sich hiermit derzeit auch das größte Potenzial zur Minderung der CO<sub>2</sub>-Emissionen.

In den meisten Fällen erfolgt eine Konvertierung der im Brennstoff enthaltenen Energie durch einen Verbrennungsprozess. Die dabei freigesetzte Wärme steht dabei je nach Anwendung bei Umgebungsdruck (z.B. Hochofen, Feuerungsanlage im Dampfkraftwerk, etc.) oder bei einem erhöhten Druckniveau zur Verfügung (z.B. stationäre oder Fluggasturbine). Zur Optimierung der dabei angewandten Brennerkonzepte werden heutzutage neben experimentellen vermehrt numerische Methoden eingesetzt. Insbesondere CFD Methoden erlauben hier einen detaillierten Einblick in die ablaufenden physikalischen und chemischen Prozesse und fördern so das Verständnis der involvierten Phänomene.

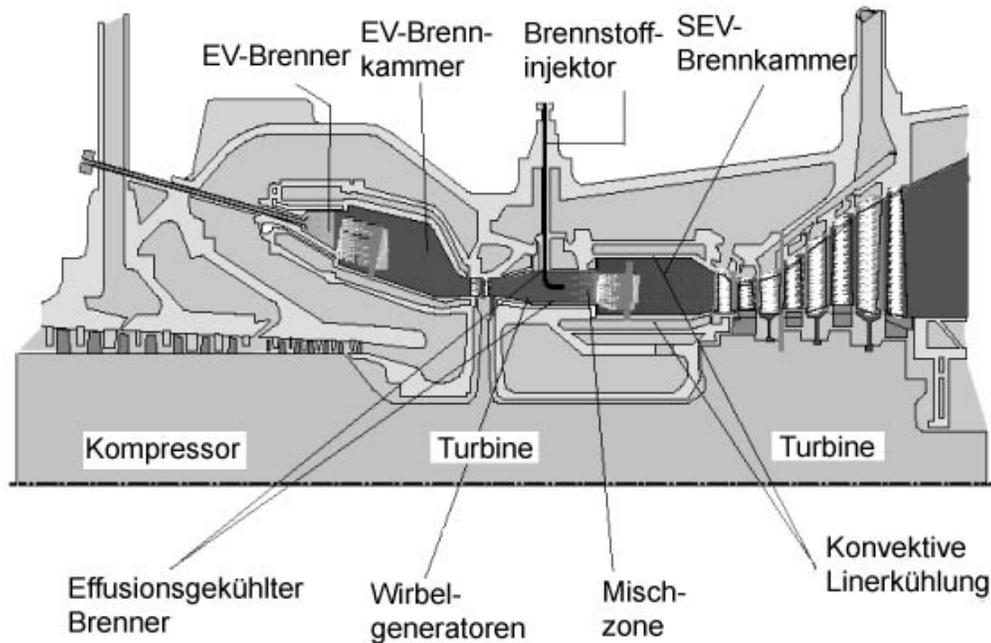
Die vorliegende Arbeit befasst sich im Wesentlichen mit den Phänomenen Selbstzündung und Turbulenz-Chemie-Interaktionen, deren Modellierung zur adäquaten Beschreibung der Strömung in der zweiten Brennerstufe (SEV-Brenner) der ALSTOM Gasturbine GT 24/25 notwendig sind. Kennzeichnend für den genannten Brenner ist, dass die zugeführte Verbrennungsluft ein hohes Temperaturniveau aufweist, so dass die Verbrennung durch Selbstzündung eingeleitet wird. Zum anderen sind aufgrund der in der Brennerströmung vorherrschenden hohen Reynolds-Zahlen Turbulenz-Chemie-Interaktionen zu berücksichtigen. Die Modellierung dieser wird dadurch erschwert, dass im vorliegenden Fall eine statistische Beschreibung der Mischung dreier Ströme ( $\rightarrow$  *ternäre Mischung*) not-

wendig ist. Hingegen werden die Berechnungen der Selbstzündung dadurch verkompliziert, dass die Zusammensetzung der eingesetzten Erdgase einen starken Einfluss auf die Zündkinetik aufweist und damit die Erdgasqualität als Einflussgröße zu berücksichtigen ist.

Ziel der Arbeit war die Entwicklung eines Simulationsmodells für die Beschreibung der im SEV-Brenner ablaufenden Prozesse. Dieses Modell dient zum einen dazu, die Entwicklung und Konstruktion neuer Brenner zu unterstützen, als auch Bewertungen vorhandener Brenner hinsichtlich ihrer Einsatzmöglichkeit bei Betrieb mit unterschiedlichen Erdgasqualitäten durchzuführen. Kenntnisse über die lokale Mischung und die Position der Flamme sind hierbei von besonderem Interesse, da nur so die optimale Auslegung eines Brenners hinsichtlich Emissionen und Betriebssicherheit gewährleistet ist. Findet z.B. die Wärmefreisetzung bereits in Bereichen statt, in denen Brennstoff und Verbrennungsluft noch nicht ausreichend durchmischt sind, so treten lokal erhöhte Temperaturen und damit einhergehend erhöhte NO<sub>x</sub> Emissionen auf. Zudem sind durch eine geeignete Auslegung der Brennerströmung Flammrückschläge zur Brennstofflanze oder an die Brennerwand zu verhindern, da diese zu einer Zerstörung des Brenners und damit zu einem Ausfall der gesamten Anlage führen können.

Abb. 1.1 zeigt den schematischen Aufbau der genannten Gasturbinenbaureihe. Durch den Kompressor wird die Verbrennungsluft auf das Druckniveau der ersten Brennstufe verdichtet. Bei dieser Brennstufe handelt es sich um einen mager betriebenen Vormischbrenner (EV-Brenner). Nach Expansion in der Hochdruckturbine tritt das noch sehr heiße Abgas in die zweite Brennerstufe (SEV-Brenner) ein. Aufgrund der hohen Eintrittstemperatur stehen für die Mischung von Brennstoff und Luft nur sehr kurze Zeiten zur Verfügung, bevor das Gemisch von selbst zündet und die Reaktion von Brennstoff und Restsauerstoff stattfindet. In einer mehrstufigen Turbine erfolgt schließlich die Entspannung der Abgase auf Umgebungsdruck.

Durch die zweistufige Ausführung lassen sich bei sonst gleichen Brenneraustrittstemperaturen aufgrund der Carnotisierung des Ar-

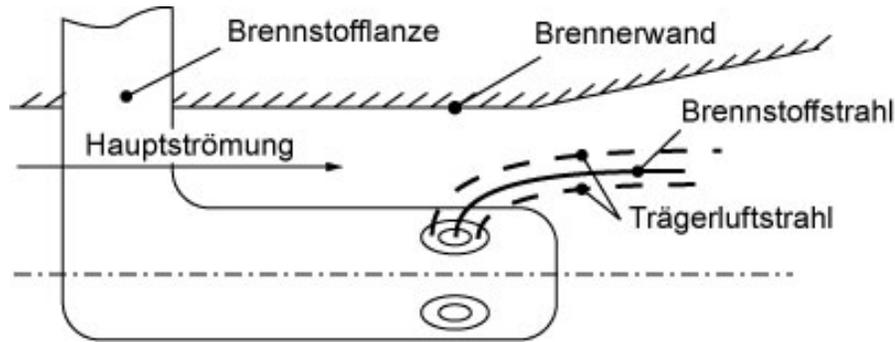


**Abbildung 1.1:** Schematischer Aufbau der ALSTOM GT24/26 Gasturbinenfamilie.

beitsprozesses höhere Wirkungsgrade erreichen. Diese Art der Prozessführung lässt sich auch unter dem Begriff der Zwischenüberhitzung beim Dampfturbinenprozess finden.

Der Betrieb des SEV-Brenners im Regime der Selbstzündung erfordert eine schnelle Durchmischung des Brennstoffs mit dem noch vorhandenen Restsauerstoff, welche hier mit so genannten Wirbelgeneratoren realisieren wird. Die dabei erzeugten großen Wirbel sorgen zunächst für eine großskalige Verteilung des eingedüsten Brennstoffs. Anschließend erfolgt aufgrund des Zerfalls der großen Wirbel in immer kleinere Wirbelstrukturen ( $\rightarrow$  *Wirbelkaskade*) die Durchmischung auf den feineren Längenskalen.

Abbildung 1.2 zeigt das bei der Brennstofflanze eingesetzte Injektorkonzept. Eine Verzögerung der Selbstzündung und damit eine Verlängerung der für die Durchmischung zur Verfügung stehenden Zeit wird durch einen koaxial zum Brennstoffstrahl angeordneten Strahl kalter Luft („Stützluft“ oder „Trägerluft“) erreicht. Gleichzeitig erhöht sich der Strahlimpuls, was zu einer besseren Penetration



**Abbildung 1.2:** Brennstoffflanze und Injektorkonzept beim SEV-Brenner.

des Brennstoff-Luft-Strahls in die Hauptströmung führt. Da die ablaufenden Mischvorgänge zwischen Abgas der ersten Brennerstufe, Brennstoff und Trägerluft den Ort der Selbstzündung wesentlich beeinflussen, ist bei einer Modellierung der Brennerströmung die Mischung im vorliegenden Drei-Strom-System sorgfältig zu beschreiben.

Zur Erfassung der in Drei- und Mehr-Strom-Systemen auftretenden Turbulenz-Chemie-Interaktionen sind derzeit nur unzureichende oder aber sehr aufwändige Verfahren bekannt. Hier sind zum einen die Wirbelzerfallsmodelle (z.B. EBU-Modell von Spalding [Spa71]) zu nennen, die aber nicht in der Lage sind, die chemischen Prozesse zu berücksichtigen. Zur Berechnung der Reaktionsraten werden ausschließlich Kenngrößen der Turbulenz herangezogen. Zum anderen existieren so genannte Faltungsansätze, bei denen die mittlere Reaktionsrate durch Faltung über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl. **P**robability **D**ensity **F**unction oder kurz PDF) bestimmt wird. Ansätze mit transportierter PDF [JPMC01] sind derzeit noch sehr zeit- und speicherintensiv und daher auf kleinere Applikationen begrenzt. Hingegen besitzen die gern verwendeten PDF-Ansätze mit angenommener Form [PV01] den Nachteil, dass sinnvolle Funktionale im Allgemeinen nur für Probleme existieren, die sich mit einer Größe beschreiben lassen. Schon im vorliegenden Fall der ternären Mischung sind aber für die statistische Beschreibung der Mischung zwei Variablen notwendig. Das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Distributionsmodell stellt die PDF nicht durch ein Funktional dar,

---

sondern approximiert diese, ähnlich den transportierten PDFs, mit Hilfe einer diskreten Verteilung. Im Gegensatz zu transportierten PDFs werden aber gewisse Annahmen über die Form getroffen, so dass die PDFs entkoppelt von der Berechnung des Strömungsfeldes erzeugt werden können und damit eine Bestimmung und Tabulierung der Reaktionsraten vorab möglich ist. Das entwickelte Distributionsmodell wird damit der gestellten Forderung nach einem effektiven und im industriellen Umfeld einsetzbaren Verfahren gerecht und leistet somit einen interessanten Beitrag für die Berechnung turbulenter reaktiver Strömungen.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass für die Berechnung der reaktiven Strömung im SEV-Brenner zum einen geeignete Modelle zur Beschreibung der Selbstzündung und Wärmefreisetzung als auch der Turbulenz-Chemie-Interaktionen zu formulieren sind. Aufgrund des geplanten industriellen Einsatzes des Modells lässt sich die Forderung ableiten, dass effektive Modellformulierungen zu wählen sind, um so z.B. umfangreiche Variantenrechnungen zu ermöglichen.

Der Betrieb im Bereich der Selbstzündung ist für Gasturbinenbrenner eher untypisch. Hingegen kommt dieser Betriebsmodus in zahlreichen anderen Fällen zur Anwendung. Bei der Befeuerung von Öfen findet teilweise ein Verfahren Anwendung, bei dem mit heißen Abgasen wabenförmige Metallstrukturen aufgeheizt werden. Alternierend werden diese von Frischluft und Abgas durchströmt, so dass ein Teil der im Abgas enthaltenen Energie für die Vorheizung der Verbrennungsluft nutzbar wird. Aufgrund der hohen Vorheiztemperaturen von bis zu 1200 °C wird hierbei im Englischen Sprachgebrauch auch von High-Temperature-Air-Combustion (HiTAC) [LBM<sup>+</sup>02] [SMR02] gesprochen. Eine Flammstabilisierung aufgrund von Selbstzündung stellt sich auch bei dem unter dem Markennamen FLOX (*F*lameless *o*xidation) [Mil] bekannten Brennverfahren ein. Hier werden durch geeignete Brenner- und Brennraumgeometrien extrem hohe interne Rückführraten der heißen Abgase erreicht, so dass die Mischungstemperaturen oberhalb der Selbstzündtemperatur zu liegen kommen. Da dabei intensive chemische Reaktionen nicht auf eine Flammfront

begrenzt sind, wird hier im Englischen Sprachgebrauch auch oftmals von „Volume combustion“ gesprochen. Aus dem Bereich der Verbrennungsmotoren lassen sich ähnliche Verbrennungsmodi unter anderem bei direkt einspritzenden Dieselmotoren und beim CAI-Betrieb eines Ottomotors (*Controlled Auto-Ignition*) [MSSO04] beobachten.

Kennzeichnend für einige der obig beschriebenen Brennverfahren ist, dass durch den gegenüber der Umgebungsluft erhöhten Inertanteil der Frischluft eine Reduktion der Flammentemperatur erreicht wird, wodurch sich die  $\text{NO}_x$  Emissionen effektiv reduzieren lassen.

Bezüglich des in dieser Arbeit entwickelten Distributionsmodells muss ebenfalls angemerkt werden, dass dieses grundsätzlich auch bei zahlreichen anderen Problemen angewendet werden kann, welche mit Hilfe von zwei oder mehr Variablen zu beschreiben sind. Dies ist unter anderem bei der detaillierten Modellierung chemischer Reaktionen notwendig, bei der mehrere Fortschrittsvariablen zum Einsatz kommen (z.B. ILDM Verfahren mit Fortschrittsvariablen für CO und  $\text{H}_2\text{O}$  [Lan99]). Denkbar ist auch der Einsatz des Distributionsmodell zur Beschreibung der PDF von Mischungsbruch und Reaktionsfortschritt oder aber zur Berechnung der  $\text{NO}_x$ -Bildung als Funktion der Massenbrüche von OH,  $\text{N}_2$  und  $\text{O}_2$ . Während die grundsätzliche Idee des Distributionsmodells ohne weiteres übertragen werden kann, müssen ggf. die Methoden zur Generierung der Distributionen an den jeweiligen Anwendungsfall adaptiert werden.

An dieser Stelle sollte auch auf den modularen Charakter der gewählten Formulierung hingewiesen werden. Das Gesamtmodell wurde hierzu in vier Teile für die Modellierung der folgenden Aspekte gegliedert: Mischung, Selbstzündung, Kopplung von Zündung und Wärmefreisetzung sowie der Wärmefreisetzung. Dieser Aufbau ermöglicht eine schnelle Übertragung der Teilmodelle, insbesondere des Distributionsmodells, auf andere Anwendungsgebiete.

Die Arbeit beginnt mit der Einführung der für die Beschreibung turbulenter reaktiver Strömungen notwendigen Grundlagen. Auf die speziellen Phänomene der Turbulenz in reaktiven Systemen und der

chemischen Prozesse im Regime der Selbstzündung wird im darauf folgenden Kapitel eingegangen. Dieses schließt mit einem Überblick über die in der Literatur vorhandenen Formulierungen. Eine Bewertung der Modelle hinsichtlich ihrer Anwendbarkeit auf die den SEV-Brenner kennzeichnende Strömungskonfiguration findet im Anschluss statt. Aufbauend aus den daraus gewonnenen Erkenntnissen werden in Kapitel 4 die notwendigen Teilmodelle formuliert und einzeln detailliert validiert. Der Beschreibung des Gesamtmodells und dessen Implementierung in einen kommerziellen Strömungslöser folgt in Kapitel 6. Die Arbeit schließt mit einer Validierung des Gesamtmodells am SEV-Brenner.

## 2 Grundlagen der Fluidmechanik

Neben den speziellen Eigenschaften turbulenter, reagierender Strömung und den für die vorliegende Arbeit relevanten dimensionslosen Kenngrößen werden in dem vorliegenden Kapitel die strömungsmechanischen Grundgleichungen in gemittelter Form eingeführt.

### 2.1 Charakteristika turbulenter, reagierender Strömungen

In der Regel sind die sich in industriellen Anlagen einstellenden Strömungsformen im turbulenten Strömungsregime angesiedelt. Starke Fluktuationen der Geschwindigkeiten sowie der Zustandsgrößen charakterisieren diesen Strömungstyp. Aufgrund dieser findet ein verstärkter Stoff- und Impulsaustausch statt, der oft zur intensiven Durchmischung erwünscht ist, die numerische Beschreibung aber erheblich erschwert.

Instabilitäten der im Fluid wirkenden Kräfte führen dazu, dass sich ab einer bestimmten Grenze eine turbulente Strömungsform ausbildet. Die über:

$$Re = \frac{UL}{\nu} \quad (2.1)$$

gebildete Reynolds-Zahl lässt Aussagen über die in einer Strömung zu erwartenden Turbulenzstärke zu, indem sie die Trägheitskräfte zu den dissipativen Reibungskräften ins Verhältnis setzt.  $L$  und  $U$  entsprechen dabei einem für die Strömung charakteristischen Längen- bzw. Geschwindigkeitsmaß sowie  $\nu$  der kinematischen Viskosität.

Bei genauer Betrachtung der Strömung kann festgestellt werden, dass sich Strukturen mit einem großen Spektrum an Längen- und Zeitskalen (Energiekaskade) ausbilden. Die größten Strukturen (z.B. Ablöse-

wirbel hinter einem Querschnittssprung) werden durch die geometrischen Gegebenheiten vorgegeben, und weisen daher bezüglich ihrer Ausrichtung Vorzugsrichtungen auf. Zu kleineren Skalen hin wird der Einfluss der Hauptströmung immer geringer, so dass sich hauptsächlich Strukturen isotroper Natur beobachten lassen. Nach der Theorie von Kolmogorov findet ein Transfer der kinetischen Energie von den großen zu den kleineren Skalen entlang der Energiekaskade statt. Am Ende dieser stehen Trägheitskräfte und Reibungskräfte im Gleichgewicht und es erfolgt die Dissipation der kinetischen Energie in Wärmeenergie.

Ferner liegt der Theorie von Kolmogorov zugrunde, dass der Energiefluss von einer Skala zur nächsten konstant ist, so dass sich die Dissipationsrate  $\epsilon$  über die großen Skalen abschätzen lässt:

$$\epsilon = \frac{k}{\tau_T} \quad (2.2)$$

Dabei entspricht  $k$  der turbulenten kinetischen Energie und  $\tau_T$  dem turbulenten Zeitmaß. Die Definition der Reynolds-Zahl in Gl. (2.1) lässt sich auf alle Skalen übertragen. Für das integrale bzw. turbulente Längenmaß  $L_T$  und die Fluktuation der Geschwindigkeit  $u'$  ergibt sich damit die turbulente Reynolds-Zahl  $Re_T$  zu:

$$Re_T = \frac{u' L_T}{\nu}. \quad (2.3)$$

Mit weiteren dimensionsanalytischen Überlegungen lässt sich schließlich unter Verwendung der turbulenten Reynolds-Zahl  $Re_T$  eine Abschätzung für die kleinste Längenskala, dem Kolmogorov-Maß  $\eta_K$ , herleiten:

$$\eta_K \propto L_T Re_T^{-3/4}. \quad (2.4)$$

Bei typischen Anwendungen liegen die turbulenten Reynoldszahlen im Bereich von 100 bis 2000 [PV01], so dass sich für  $\eta_K$  im Ver-

gleich zu  $L_T$  sehr kleine Werte ergeben. Dies hat zur Folge, dass zur Auflösung des gesamten Spektrums turbulenter Strukturen in einer numerischen Simulation äußerst feine Gitter notwendig wären. Bei der **direkten numerischen Simulation** (DNS) einer Strömung kommt eine Auflösung bis zu den kleinsten Längen- und Zeitskalen zur Anwendung. Aufgrund der begrenzten Rechnerleistung stellt sich dieser Ansatz aber in der Regel als nicht praktikabel da, so dass gewöhnlich bei der Berechnung turbulenter Strömungen zumindest ein großer Teil der turbulenten Strukturen mit sog. Turbulenzmodellen erfasst wird [Phi91], [SLP<sup>+</sup>02]. Im Gebiet der Turbulenzforschung kommt hingegen der DNS eine große Bedeutung zu, da sich hiermit wichtige Erkenntnisse zur Entwicklung von z.B. Turbulenzmodellen gewinnen lassen.

Neben den Zeitmaßen zur Beschreibung der Turbulenz sind im Bereich turbulenter, reagierender Strömungen auch Aussagen über die Reaktionsgeschwindigkeiten bzw. die Zeitmaße der chemischen Prozesse zu deren Charakterisierung notwendig. Je nachdem in welchem Verhältnis turbulentes und chemisches Zeitmaß zueinander stehen, ergeben sich unter Umständen Möglichkeiten zur Vereinfachung. Die Damköhler-Zahl bildet hierfür den Quotienten aus turbulentem  $\tau_T$  und chemischen Zeitmaß  $\tau_C$ :

$$Da = \frac{\tau_T}{\tau_C}. \quad (2.5)$$

Im Fall schneller Chemie nimmt die Damköhler-Zahl große Werte an ( $Da \gg 1$ ), die chemischen Prozesse werden hauptsächlich durch die Mischgeschwindigkeit limitiert, so dass sich der Reaktionsumsatz in guter Näherung über das turbulente Zeitmaß bestimmen lässt. Eine zusätzliche detaillierte Betrachtung der ablaufenden reaktionskinetischen Prozesse führt zu keiner nennenswerten Steigerung der Genauigkeit. Hingegen begrenzen bei sehr kleinen Damköhler-Zahlen ( $Da \ll 1$ ) ausschließlich die chemischen Reaktionen die Umsetzung der Reaktanden, so dass Modelle für die Beschreibung der chemischen Vorgänge notwendig werden. Eine Durchmischung der Reak-

tanden und Produkte findet im Vergleich zu den chemischen Zeitskalen instantan statt, so dass oftmals hierbei auch von perfekt gemischten Rührreaktoren gesprochen wird [PV01]. Für den Bereich  $Da \approx 1$  lässt sich eine genaue Beschreibung der Reaktionsraten nur unter gleichzeitiger Betrachtung der chemischen Prozesse und der Turbulenz-Chemie-Interaktionen erreichen.

## 2.2 Strategien bei der numerischen Strömungssimulation

Bereits zuvor wurde erwähnt, dass eine direkte numerische Simulation (DNS) aufgrund des intensiven Speicher- und Rechenzeitbedarfs im Allgemeinen nur in der Turbulenzforschung (z.B. [NK01]) zur Anwendung kommt. Da bei der DNS alle relevanten Längen- und Zeitskalen explizit aufgelöst werden, sind keine Modelle für z.B. die Turbulenz notwendig, so dass die DNS als allgemein gültige Formulierung zu betrachten ist.

Im Falle der LES (**L**arge **E**ddy **S**imulation) wird nur noch ein Teil der Turbulenz direkt aufgelöst. Aufgelöst werden die großen turbulenten Strukturen, welche noch stark von der jeweiligen Strömungsgeometrie abhängen. Hingegen kommen für die kleinen Strukturen Turbulenzmodelle zum Einsatz, die aber aufgrund der weitestgehend isotropen Struktur der kleinen Skalen allgemeingültig formuliert werden können. Pope stellt an eine „gute“ LES die Forderung, dass ca. 80 % der turbulenten kinetischen direkt aufzulösen sind [Pop00]. Im Gegensatz zur DNS kommt die LES bereits für ausgewählte Anwendungen auch in der Industrie zum Einsatz. Aufgrund der aber dennoch notwendigen relativ feinen örtlichen und zeitlichen Auflösung sind die Rechenzeiten für den breiten Einsatz nicht akzeptabel.

Auch heute kommen bei der industriellen Anwendung der CFD zur Simulation der turbulenten Strömung in komplexen Strömungskonfigurationen meist RANS-Modelle (**R**eynolds-**A**veraged-**N**avier-**S**tokes) zum Einsatz. Im Gegensatz zur DNS und LES wird da-

bei nicht die zeitliche Entwicklung der Strömung, sondern nur ein mittleres stationäres Strömungsfeld berechnet. Alle nicht-aufgelösten räumlichen und die gesamten zeitlichen Fluktuationen werden mit Turbulenzmodellen erfasst. Im folgenden Kapitel wird auf die Herleitung der benötigten Erhaltungsgleichungen und den notwendigen Turbulenzmodellen genauer eingegangen. Da sich eigentlich keine allgemeingültigen Turbulenzmodelle formulieren lassen, muss bei der RANS-Modellierung mit gewissen Fehlern gerechnet werden. Vorteilhaft sind aber die im Vergleich zu DNS und LES um Größenordnungen geringeren Rechenzeiten.

Die in der vorliegenden Arbeit beschriebenen Modellansätze wurden für die Berechnung der komplexen SEV-Brennerströmung entwickelt, so dass sich die Abhandlung im Folgenden auf den Einsatz der Modelle im RANS-Kontext begrenzt.

### 2.3 Gemittelte Form der Erhaltungsgleichungen

Anstelle der Herleitung der Erhaltungsgleichungen soll an dieser Stelle auf die entsprechende Literatur verwiesen werden [VM95]. In den folgenden Abschnitten wird daher nur auf die Verfahren zur Überführung der Erhaltungsgleichungen in die in der CFD übliche Form der **gemittelten** Erhaltungsgleichungen eingegangen. Hierzu werden zunächst die notwendigen Mittelungsansätze eingeführt und auf die Erhaltungsgleichungen angewendet.

Zur Herleitung der gemittelten Erhaltungsgleichungen sind zunächst die auftretenden Größen  $\phi$  in einen Mittelwert  $\bar{\phi}$  und einen Fluktuationwert  $\phi'$  aufzuspalten:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi', \quad (2.6)$$

wobei gilt:

$$\bar{\phi} = \frac{1}{t} \int_0^t \phi(\tau) d\tau. \quad (2.7)$$

Die dargestellte Methode der zeitlichen Mittelung ist als Reynolds-Mittelung bekannt. Da aber insbesondere bei reaktiven Strömungen starke Änderungen der Dichte auftreten, ergeben sich bei Anwendung der Reynolds-Mittelung zur Herleitung der gemittelten Erhaltungsgleichungen Korrelationen zwischen den Fluktuationen der Dichte und der betrachteten Größe, für deren Schließung weitere Modellansätze notwendig wären. Um diese Korrelationen zu vermeiden, werden daher oftmals massengewichtete Mittelungen durchgeführt. Dieses Verfahren ist auch unter dem Begriff der Favre-Mittelung bekannt. Eine Favre-gemittelte Größe lässt sich über die Vorschrift

$$\tilde{\phi} = \frac{\overline{\phi\rho}}{\bar{\rho}} \quad (2.8)$$

bestimmen, die Aufspaltung der Größe  $\phi$  erfolgt dann analog zu Gl. (2.6), so dass sich

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' \quad (2.9)$$

ergibt. Zur Unterscheidung der Favre-gemittelten Größen von den Reynolds-gemittelten Größen ist bei ersteren der Mittelwert mit einer Tilde und der Fluktuationwert mit zwei Strichen gekennzeichnet.

Durch Anwendung der folgen

Die für die Berechnung der mittleren Größen in turbulenter, reaktiver Strömungen notwendigen Gleichungen lassen sich mit Hilfe der Favre-Mittelung aus den in [VM95] detailliert hergeleiteten Erhaltungsgleichungen gewinnen. Im Fall hoher  $Re$ -Zahlen lassen sich die auf molekularer Ebene ablaufenden Prozesse vernachlässigen. Der molekulare Transport von Impuls, Spezies und Energie fällt aufgrund starker turbulenter Austauschprozesse nicht mehr ins Gewicht und wird daher gerne vernachlässigt. Weitere Vereinfachungen ergeben

sich durch Annahme einer inkompressiblen Strömung für den Bereich niedriger Mach-Zahlen, wodurch sich in der Energiegleichung die Terme zur Berücksichtigung der Druckenergie streichen lassen, so dass sich die folgenden Gleichungen ergeben:

- **Masse:**

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0. \quad (2.10)$$

- **Impuls:**

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_i} (-\overline{\rho u_i'' u_j''}). \quad (2.11)$$

- **Enthalpie  $h$ :**

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_i} (-\overline{\rho u_i'' h''}) + \bar{S}_h. \quad (2.12)$$

- **Massenbruch  $Y_j$ :**

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} (-\overline{\rho u_i'' Y_j''}) + \bar{S}_Y. \quad (2.13)$$

- **Mischungsbruch  $f_j$ :**

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{f}_j}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{f}_j) = \frac{\partial}{\partial x_i} (-\overline{\rho u_i'' f_j''}). \quad (2.14)$$

Bedingt durch die Mittelung treten in den obigen Gleichungen zusätzliche Korrelationen, die so genannten Reynolds-Flüsse  $\overline{u'' \phi''}$ , auf. Im Fall der Impulserhaltung wird dabei auch oft der Begriff der Reynolds-Spannung  $\overline{u_i'' u_j''}$  verwendet. Da diese Flüsse nicht direkt Teil der Lösung sind, müssen zusätzliche Annahmen getroffen werden. Aufgrund der zu Diffusionsprozessen ähnlichen Wirkung der Reynolds-Flüsse wird zur Schließung oftmals ein Ansatz verwendet, der sich der so genannten turbulenten Viskosität  $\nu_T$  bedient. Damit lassen sich die Reynolds-Spannungen über

$$-\overline{\rho u_i'' u_j''} = \bar{\rho} \nu_T \left( \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left( \bar{\rho} \tilde{k} + \bar{\rho} \nu_T \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \quad (2.15)$$

berechnen. Die turbulente kinetische Energie  $\tilde{k}$  fasst die Geschwindigkeitsfluktuationen unter Annahme isotroper Turbulenz zu einer Größe zusammen:

$$\tilde{k} = \frac{\frac{1}{2} \overline{\rho u_k'' u_k''}}{\bar{\rho}}. \quad (2.16)$$

Im Falle der skalaren Größen Energie, Massenbruch und Mischungsbruch lassen sich obige Erhaltungsgleichungen durch die Beziehungen („Gradientenansätze“):

$$-\overline{\rho u_i'' h''} = \frac{\bar{\rho} \nu_T}{Pr_T} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i}, \quad (2.17)$$

$$-\overline{\rho u_i'' Y_j''} = \frac{\bar{\rho} \nu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{Y}_j}{\partial x_i}, \quad (2.18)$$

$$-\overline{\rho u_i'' f_j''} = \frac{\bar{\rho} \nu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{f}_j}{\partial x_i} \quad (2.19)$$

schließen. Ähnlich der Betrachtung molekularer Transportprozesse lassen sich turbulenter Impuls- und Stofftransport bzw. Impuls- und Energietransport über die turbulente Schmidt  $Sc_T$  bzw. Prandtl-Zahl  $Pr_T$  ins Verhältnis setzen. In guter Näherung können diese mit  $Sc_T = 0,7$  und  $Pr_T = 0,85$  [VKFS03] als konstant angenommen werden. Es soll aber an dieser Stelle angemerkt werden, dass neben diesen recht weit verbreiteten Parametersätzen auch zahlreiche andere Werte veröffentlicht wurden. So ermittelte z.B. He et al. [HGH99] für den speziellen Fall des turbulenten Querstrahls mit  $Sc_T = 0,2$  beste Übereinstimmungen mit experimentellen Daten.

Obiges Schließungsproblem lässt sich mit den angegebenen Gleichungen auf die Suche nach geeigneten Modellen für die Bestimmung der turbulenten Viskosität  $\nu_T$  und der turbulenten kinetischen Energie  $k$  reduzieren. Wird  $\nu_T$  proportional dem Produkt aus turbulentem Längenmaß  $L_T$  und turbulenter Geschwindigkeitsskala  $u_T$  angenommen:

$$\nu_T \propto L_T u_T, \quad (2.20)$$

so lässt sich mit

$$L_T \propto \frac{\tilde{k}^{3/2}}{\epsilon} \quad (2.21)$$

und

$$u_T \propto \sqrt{\tilde{k}} \quad (2.22)$$

$\nu_T$  über

$$\nu_T = C_\mu \frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\epsilon}} \quad (2.23)$$

aus  $k$  und  $\epsilon$  bestimmen, wobei für  $C_\mu$  gewöhnlich der Wert  $C_\mu = 0,09$  verwendet wird.

Für die beiden die turbulente Strömung charakterisierenden Größen  $k$  und  $\epsilon$  lassen sich zusätzliche Transportgleichungen herleiten. Diese führen zu dem aufgrund seiner einfachen Struktur und hohen Stabilität recht stark verbreiteten  $k$ - $\epsilon$  Turbulenzmodell. Da bei diesem u.a. für die Terme höherer Ordnung (Tripelkorrelationen der Geschwindigkeitsfluktuationen) ebenfalls Schließungsansätze notwendig sind, existieren zahlreiche Modellvarianten, so dass an dieser Stelle ein Verweis auf die entsprechende Literatur ([Pop00], [EG95]) ausreichend sein soll.

Der Vollständigkeit wegen sei an dieser Stelle noch darauf verwiesen, dass neben dem aufgezeigten Weg des Einsatzes eines 2-Gleichungs-Turbulenz-Modells (hier dem  $k$ - $\epsilon$  Modell) noch zahlreiche weitere Möglichkeiten existieren, Schließungsansätze für die Gleichungen (2.10) - (2.14) zu finden. Unter anderem sei hier noch das Reynolds-Spannungs-Modell und dessen Varianten erwähnt [Pfu97], das ohne die Annahme isotroper Turbulenz auskommt, in seiner Formulierung aber bedeutend aufwändiger ausfällt und die Lösung 6 weiterer Transportgleichungen erfordert.

### 3 Modellierung der Verbrennung im Regime der Selbstzündung

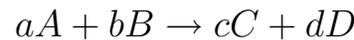
Die folgenden Abschnitte geben einen Überblick über die während der Zündverzugsphase und der anschließenden Wärmefreisetzung von Brennstoff-Luft Gemischen ablaufenden Prozesse. Darauf aufbauend folgt eine Zusammenfassung der derzeit verwendeten Methoden für die Modellierung der Verbrennung im Regime der Selbstzündung. Während einige der erläuterten Modelle vom Konzept her bereits für turbulente Strömung formuliert sind, ist bei anderen noch eine Erweiterung auf diesen Strömungstyp notwendig. Daher werden im Anschluss Modelle zur Beschreibung der Chemie-Turbulenz-Interaktionen vorgestellt. Mit einer Diskussion inwieweit sich diese Modelle für die Simulation der Strömung im SEV-Brenner eignen und der Auswahl der weiterzuentwickelnden Basismodelle schließt das vorliegende Kapitel.

## 3.1 Chemische Kinetik der Kohlenwasserstoff-Oxidation

### 3.1.1 Grundlagen der Reaktionskinetik

Zum Verständnis der bei der Selbstzündung ablaufenden Prozesse ist es notwendig, die grundsätzlichen Theorien der Reaktionskinetik zu kennen. In den folgenden Abschnitten werden die notwendigen Grundgleichungen kurz erörtert, zum tieferen Verständnis sei hier aber auf die weiterführende Literatur (z.B. [Tur00]) verwiesen.

Für die folgenden Überlegungen sei angenommen, dass sich die ablaufenden Prozesse grundsätzlich mit Elementarreaktionen der Form



beschreiben lassen, wobei die Koeffizienten  $a$ ,  $b$ ,  $c$  und  $d$  jeweils den stöchiometrischen Koeffizienten der Spezies A, B, C und D entsprechen. Für diese Reaktion folgt nach [Tur00] die Bildungsrate der Produktspezies C zu:

$$\dot{\omega}_C = c k(T)[A]^a[B]^b. \quad (3.1)$$

Obige Gleichung lässt sich mit Hilfe der Kollisionstheorie herleiten, die die Berechnung der Frequenz ermöglicht, mit der die Reaktionspartner aufeinander stoßen. Die eckigen Klammern symbolisieren hier die molare Konzentration der Spezies A resp. B. Die ausschließlich von der Temperatur  $T$  abhängige Geschwindigkeitskonstante  $k$  kann über den Arrhenius-Ansatz zu

$$k(T) = AT^n \exp\left(\frac{-E_A}{RT}\right) \quad (3.2)$$

bestimmt werden, wobei  $A$  dem Präexponentiellen Faktor,  $n$  dem Temperaturexponenten,  $E_A$  der Aktivierungsenergie und  $R$  der allgemeinen Gaskonstante entspricht. Der Präexponentielle Faktor  $A$

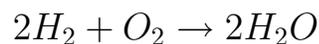
gibt die Frequenz an, mit der die Moleküle A und B kollidieren. Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Stoß der Reaktionspartner auch zu einer Reaktion führt, wird mit Hilfe der Exponentialfunktion berücksichtigt.

Obige Gleichungen berücksichtigen ausschließlich Vorwärtsreaktionen. Mit einem nur aus Vorwärtsreaktionen bestehenden Reaktionsmechanismus würden die Reaktanden komplett in Produkte umgewandelt. Produkte, Zwischenprodukte und Reaktanden könnten daher nach Ablauf einer unendlich langen Zeitspanne nie gleichzeitig auftreten. Dies steht aber im Gegensatz zu Beobachtungen realer Reaktionssysteme. Beispielsweise kann bei der Verbrennung von Methan unter Umgebungsbedingungen nach abgeschlossener Reaktion u. a. CO in den Verbrennungsprodukten detektiert werden. Dies lässt darauf schließen, dass die ablaufenden Reaktionen auch in umgekehrte Richtung stattfinden können. Vor- und Rückwärtsreaktionen stehen ständig in Konkurrenz zueinander, während die Reaktionen aber nach außen hin nach Erreichen des Gleichgewichtszustandes als abgeschlossen erscheinen.

Bei der Umsetzung der Reaktanden zu Produkten sind in der Regel mehrere 100 oder gar 1000 Elementarreaktionen beteiligt. Mögliche Vereinfachungen dieser komplexen Abläufe werden in Kap. 3.1.8 diskutiert.

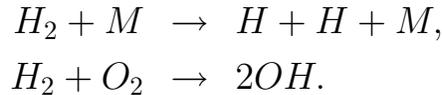
### 3.1.2 Zündung von Brennstoff-Luft-Gemischen

Bei der Zündung von Kohlenwasserstoff-Luft und Wasserstoff-Luft Gemischen werden die ablaufenden Prozesse durch so genannte Radikalkettenreaktionen kontrolliert. Der Einfachheit wegen soll das Prinzip der Radikalkettenreaktion anhand des Reaktionsschemas für die Oxidation von Wasserstoff erläutert werden. Es sei

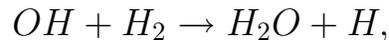


die Globalreaktion des betrachteten Reaktionsschemas. Die Einlei-

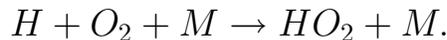
tung der Radikalkettenreaktionen erfolgt gewöhnlich durch einen Stoß mit einem beliebigen Drittkörper M:



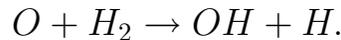
Kennzeichnend für die anschließende Kettenfortpflanzung sind Reaktionen, bei denen ein neues Radikal durch Verbrauch eines Existierenden gebildet wird:



Der Abschluss des Reaktionspfades wird durch Kettenabbruchreaktionen eingeleitet, bei denen Radikale zu stabilen Molekülen reagieren:



Eine weitere wichtige Rolle spielen die Kettenverzweigungsschritte, bei denen ein Radikal durch Reaktion mit einem stabilen Molekül zwei neue Radikale bildet:



Treten Kettenverzweigungsschritte im Reaktionsmechanismus auf, so limitieren nicht mehr die Ketteneinleitungsschritte den globalen Reaktionsumsatz. Die Konzentration der Radikale kann aufgrund der Kettenverzweigung explosionsartig anwachsen und damit den globalen Reaktionsumsatz deutlich erhöhen.

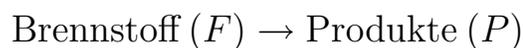
### 3.1.3 Das Phänomen der Selbstzündung

Wie aus den Gleichungen der Reaktionsraten (Gl. (3.1)) entnommen werden kann, finden selbst bei Temperaturen weit unterhalb

der Zündgrenze Stöße zwischen den Reaktionspartnern statt. Aus der kinetischen Gastheorie [Stö94] ist bekannt, dass die Geschwindigkeit der Moleküle eine starke Temperaturabhängigkeit aufweist. Bei Umgebungstemperatur treffen die Moleküle mit einer so niedrigen Relativgeschwindigkeit aufeinander, dass die Wahrscheinlichkeit, dass bei einem Stoß der beiden Reaktanden die Reaktion eingeleitet wird, äußerst gering ausfällt. Die Bildung von Radikalen ist zwar prinzipiell nicht ausgeschlossen, allerdings ist die Lebensdauer dieser reaktiven Spezies gering. Durch Rekombination der Radikale z.B. an der Gefäßoberfläche [WM92] bleibt die Konzentration stets unterhalb einer kritischen Größe, so dass sich das Gemisch nicht selbst entzündet. Nur durch äußere Energiezufuhr, z.B. dem Funken einer Zündkerze, beginnt das Gemisch so stark zu reagieren, dass es für einen Betrachter sichtbar wird.

Durch Erhöhung der Gemischtemperatur treffen die Moleküle der Reaktionspartner mit einer höheren Relativgeschwindigkeit aufeinander, so dass sich die Wahrscheinlichkeit einer Reaktion deutlich erhöht. Das Gemisch zündet nach Überschreiten einer Temperaturschwelle, der sog. Zündtemperatur, ohne zusätzlich von außen eingebrachte Energie.

Schon sehr früh wurden verschiedene Theorien zur Beschreibung der Vorgänge bei der Explosion bzw. Selbstzündung entwickelt. Als einer der ersten beschäftigte sich Semenov (1928) [ZBLM85] mit der Beschreibung von Explosion und Selbstzündung. Für seine Untersuchungen betrachtet er einen räumlich homogenen Reaktor. Die darin ablaufenden Reaktionen werden mit der Globalreaktion



abgebildet, deren Reaktionsgeschwindigkeit über einen Arrhenius-Ansatz berechnet werden kann. Zur weiteren Vereinfachung wird angenommen, dass der Brennstoffverbrauch vernachlässigt werden kann. Dies ermöglicht, das System mit Hilfe einer einzigen Differentialgleichung für die Temperatur eindeutig zu beschreiben, für welche

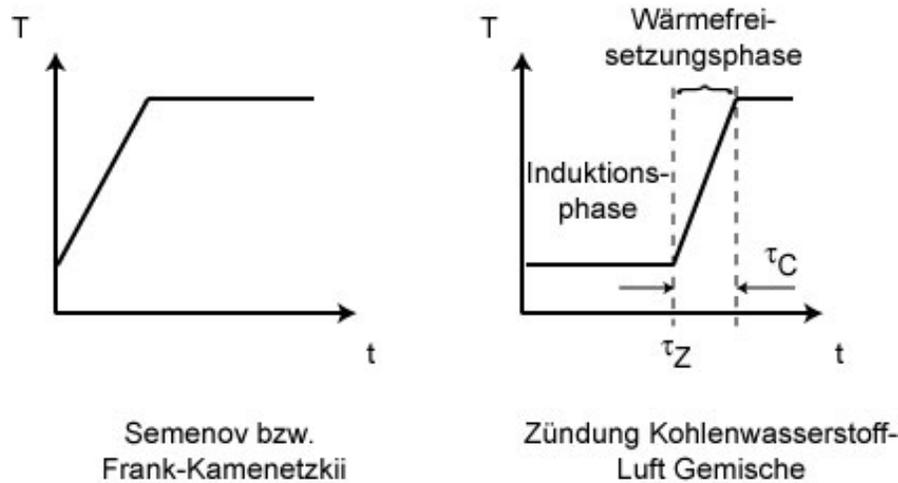
relativ einfach eine analytische Lösung gefunden werden kann.

Bei der Berechnung der zeitlichen Temperaturentwicklung steht die durch Reaktion freigesetzte Wärme in Konkurrenz zu dem über die Gefäßwände abfließenden Wärmestrom. Da bei diesem Modell nur eine Globalreaktion zur Anwendung kommt und für die Brennstoffkonzentration während des gesamten Reaktionszyklus ein konstanter Wert angenommen wird, muss damit gerechnet werden, dass sich im Vergleich zu einer heute möglichen detaillierten Betrachtung der Vorgänge starke Abweichungen der berechneten Temperatur- und Speziesprofile ergeben. Trotzdem soll erwähnt werden, dass mit Hilfe dieser Überlegungen die Erklärung wichtiger Prozesse, z.B. der Zündgrenzen, bedingt möglich wurde.

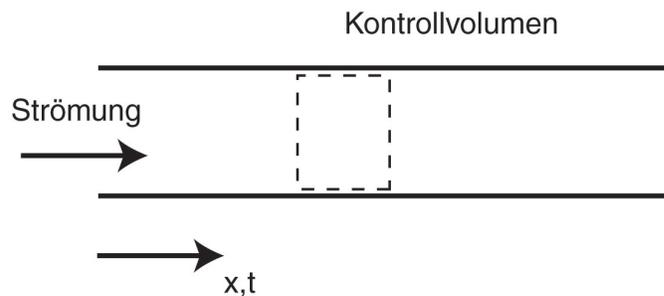
Während die rein thermischen Theorien der Selbstzündung von Semenov und später von Frank-Kamenetzki [WM92] sofort nach Start der Reaktionen eine Temperaturerhöhung voraussagen, kann bei der Selbstzündung von Kohlenwasserstoff-Luft Gemischen eine Explosion bzw. starke Temperaturerhöhung erst nach einer Zündverzugszeit  $\tau_Z$  (auch Induktionszeit genannt) beobachtet werden. Abbildung 3.1 zeigt hierzu den schematischen Temperaturverlauf eines Kohlenwasserstoff-Luft-Gemischs im Vergleich zu der Theorie von Semenov bzw. Frank-Kamenetzki. Des Weiteren sind noch die entsprechenden Phasen der Induktion und Wärmefreisetzung eingezeichnet.

Die verzögerte Wärmefreisetzung ist charakteristisch für Reaktionsabläufe, bei denen Kettenverzweigungen auftreten. Während der Induktionsphase werden reaktive Spezies gebildet, nach Überschreiten einer bestimmten Konzentration an Radikalen wird die Mischung so reaktiv, dass eine explosionsartige Temperaturerhöhung stattfindet. Hingegen lässt sich während der Induktionsphase keine merkliche Änderung der Temperatur feststellen.

Zum detaillierten Studium der Selbstzündung werden heute gerne **Plug Flow Reaktor Simulationen** durchgeführt. Als gängigste Simulationswerkzeuge sind hier zum einen das im CHEMKIN Paket [KMJ80] enthaltene SENKIN Modul [LKM87] und zum anderen die



**Abbildung 3.1:** Schematischer Temperaturverlauf bei der Zündung.



**Abbildung 3.2:** Modell des idealen Rohrreaktors (PFR).

Simulationsplattform CANTERA [Ca103] zu nennen.

Abbildung 3.2 zeigt hierzu das angewandte Modell eines idealen Rohrreaktors. Kennzeichnend für Plug-Flow Reaktoren ist, dass die ablaufenden Vorgänge mit einem quasi 1D Modell unter Vernachlässigung von Reibung sowie Diffusion und Wärmeleitung berechnet werden.

Die räumliche Formulierung der beschreibenden Differentialgleichungen kann aufgrund der Vernachlässigung von Diffusion bzw. Wärmeleitung durch Multiplikation mit der lokalen Geschwindigkeit auch in den Zeitbereich transformiert werden. Impulsbilanz und die Massenbilanz müssen in dieser Formulierung nicht mehr gelöst werden.

Durch die Transformation wird zudem die kinetische Energie bei der Energiebilanz vernachlässigt. Da diese aber bei moderaten Geschwindigkeiten nur unwesentlich zur Gesamtenergie beiträgt, ist eine Beeinflussung der Ergebnisse ausgeschlossen. Das in SENKIN gelöste Reaktormodell entspricht der Formulierung der Differentialgleichungen für die Temperatur  $T$  und den Speziesmassenbruch  $Y_i$  im Zeitbereich:

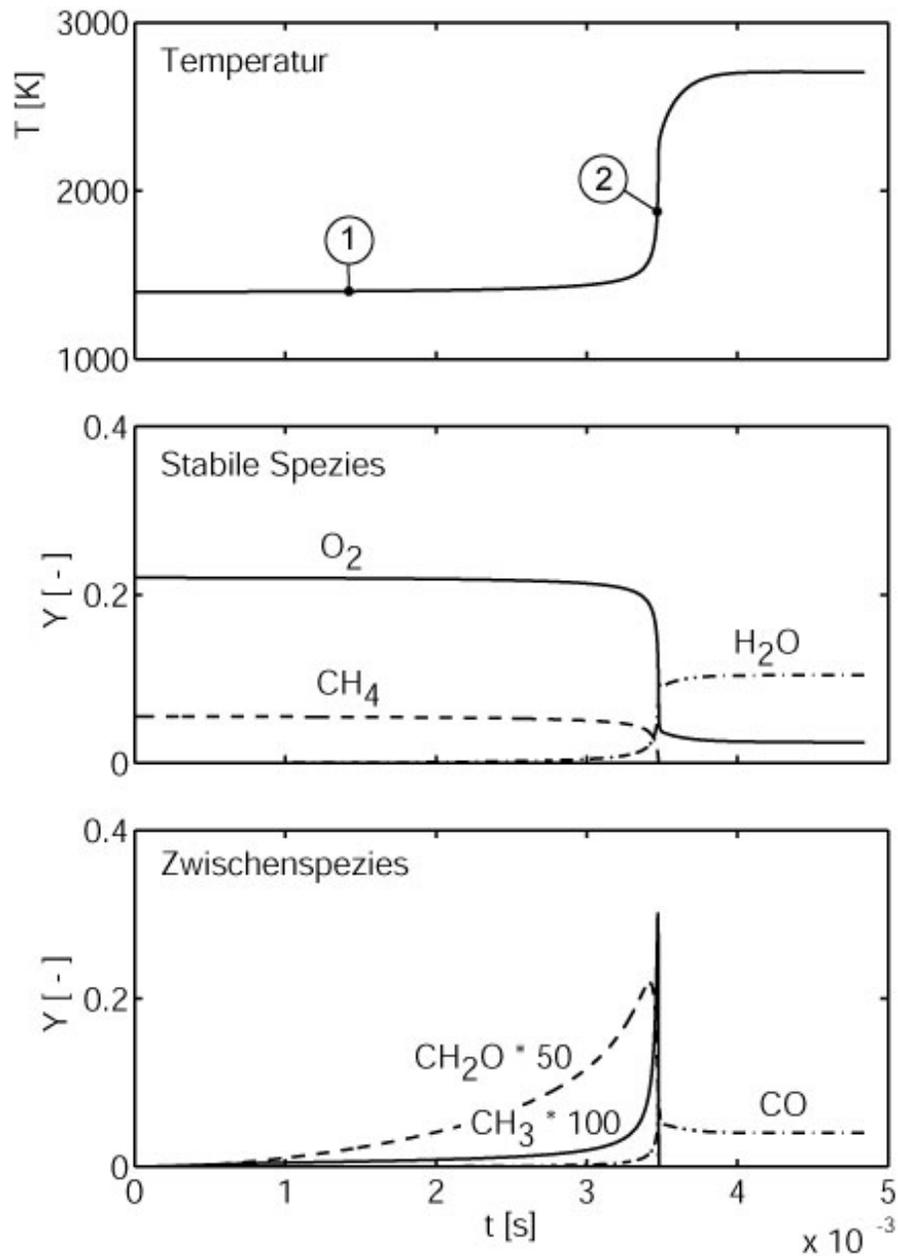
$$\frac{dT}{dt} = \dot{q} \frac{1}{c_p \rho}, \quad (3.3)$$

$$\frac{dY_i}{dt} = \dot{\omega} \frac{M_i}{\rho}. \quad (3.4)$$

In den beiden Gleichungen bezeichnet  $\dot{q}$  die Wärmefreisetzungsrate,  $c_p$  die spezifische Wärmekapazität,  $\rho$  die Dichte,  $\dot{\omega}$  die Bildungsrate und  $M_i$  das Molekulargewicht der  $i$ -ten Spezies.

Abbildung 3.3 zeigt den Verlauf der Temperatur und der Massenbrüche ausgewählter Spezies bei der Selbstzündung eines stöchiometrischen Methan-Luft Gemisches. Der Simulation liegt ein detaillierter Reaktionsmechanismus (GRI 3.00 [Smi99]) zugrunde, der die Oxidation von Methan mit mehr als 200 Elementarreaktionen beschreibt. Ein Überblick über weitere Reaktionsmechanismen findet sich in Kap. 3.1.5.

Wie bereits zuvor erwähnt, lässt sich während der Induktionsphase kein nennenswerter Temperaturanstieg feststellen. Auch die Massenbrüche der beiden Reaktionspartner  $\text{CH}_4$  und  $\text{O}_2$  können in guter Näherung als konstant betrachtet werden. In der an die Induktionsphase anschließenden Wärmefreisetzungsphase steigt explosionsartig die Temperatur an. Aufgrund der in immer geringerer Anzahl für die Reaktionen zur Verfügung stehenden Reaktionspartner verzögert sich kurz vor Erreichen des Gleichgewichtszustandes die Wärmefreisetzung. Zudem gewinnen bei höheren Temperaturen auch die Rückreaktionen zunehmend an Bedeutung, was ebenfalls zu einer Ab-



**Abbildung 3.3:** Spezies- und Temperaturverlauf während der Selbstzündung eines stöchiometrischen  $CH_4$ -Luft Gemisches mit  $T_0 = 1300K$  und  $p = 1bar$ .

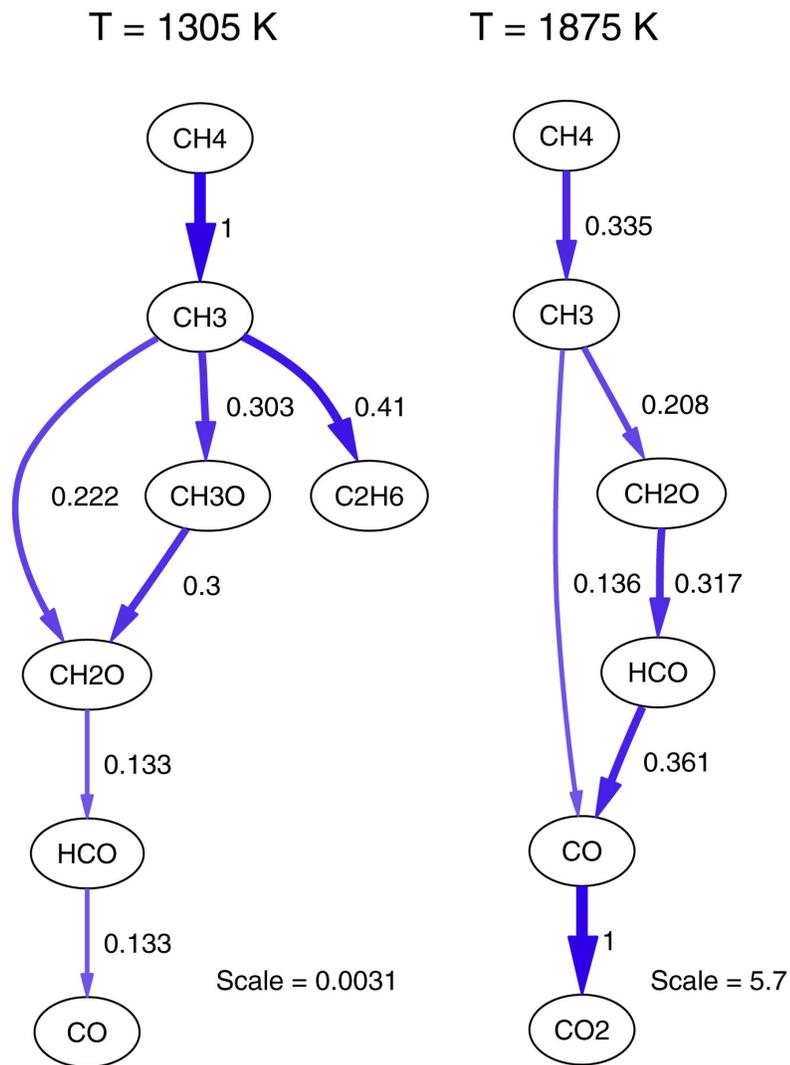
bremsung der Wärmefreisetzungsrate führt. Ferner ist zu erkennen, dass auch die Bildung der Reaktionsendprodukte ( $H_2O$  und  $CO_2$ ) vornehmlich während der Wärmefreisetzungsphase stattfindet.

Bei genauerer Betrachtung des Reaktors kann hingegen schon frühzeitig ein Anstieg der Konzentration der Radikale beobachtet werden. Das unterste Diagramm in Abb. 3.3 zeigt die Massenbrüche einiger charakteristischer Zwischenspezies. Zwar wird zunächst aus Methan durch Abtrennen eines H-Atoms das  $\text{CH}_3$ -Radikal gebildet, die Konversion von  $\text{CH}_3$  zu Formaldehyd ( $\text{CH}_2\text{O}$ ) findet allerdings so rasch statt, dass erst am Ende der Induktionsphase eine merkliche Konzentration an  $\text{CH}_3$ -Radikalen festgestellt werden kann. Auch ist zu erkennen, dass die Bildung des in der üblichen 2-Schritt-Kinetik auftretenden Zwischenproduktes CO erst sehr spät unter starker Wärmefreisetzung stattfindet.

Die beschriebenen Beobachtungen lassen sich elegant an den in Abb. 3.4 gezeigten Reaktionspfaddiagrammen erklären. Während die linke Bildhälfte die wichtigsten Reaktionspfade der Induktionsphase ((1) in Abb. 3.3) zeigt, sind in der rechten Bildhälfte die Hauptpfade während der Wärmefreisetzungsphase ((2) in Abb. 3.3) wiedergegeben. Die Zahlen neben den Pfeilen geben Informationen über die relativen Nettoraten der Konversion. Für die Berechnung der absoluten Nettorate sind im unteren Bereich der Abbildung die Skalierungsfaktoren der beiden Reaktionspfade angegeben. Zum besseren Vergleich sind die Raten jeweils mit der maximalen Konversionsgeschwindigkeit normiert. Neben den gezeigten Reaktionspfaden existieren noch zahlreiche Nebenpfade, über die aber keine signifikanten Umsätze stattfinden.

Grundsätzlich lässt sich feststellen, dass sich für den Skalierungsfaktor der Konversionsraten während der Induktionsphase ein bedeutend geringerer Wert ergibt, als dies während der Wärmefreisetzungsphase der Fall ist. Aufgrund der starken Temperaturabhängigkeit der involvierten Reaktionen muss dieses Verhalten auch erwartet werden.

Abbildung 3.4 (links) zeigt, dass nahezu die gesamte Menge an gebildetem  $\text{CH}_3$  sofort wieder in weitere Spezies umgesetzt wird. Dem Zufluss  $F_{\text{CH}_3}^+ = 1$  steht die Summe der Flüsse durch die Verbrauchs-

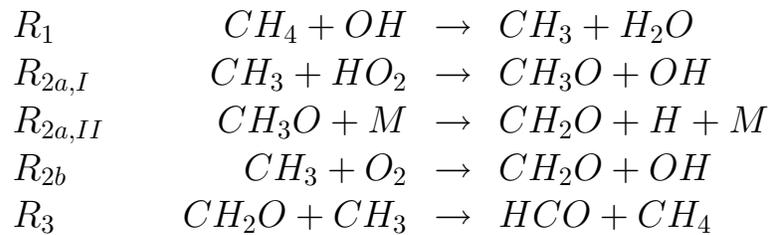


**Abbildung 3.4:** Reaktionspfade bei der Oxidation von Methan; Links: während der Induktionsphase, Rechts: während der Wärmefreisetzungsphase.

reaktionen  $F_{\text{CH}_3}^- = 0,22 + 0,30 + 0,41 = 0,93$  gegenüber. Hingegen kann bei Formaldehyd  $\text{CH}_2\text{O}$  eine starke Akkumulation festgestellt werden ( $F_{\text{CH}_2\text{O}}^+ = 0,52$  vs.  $F_{\text{CH}_2\text{O}}^- = 0,13$ ), was den frühen Anstieg des Formaldehyd-Massenbruches während der Induktionsphase erklärt. Die Folgereaktionen setzen während der Induktionsphase nur in sehr geringen Mengen das gebildete  $\text{CH}_2\text{O}$  in  $\text{HCO}$  und schließlich  $\text{CO}$  um. Mit steigender Temperatur stellen sich die Reaktionen gemäß dem in der rechten Bildhälfte gezeigte Reaktionspfad ein. Der

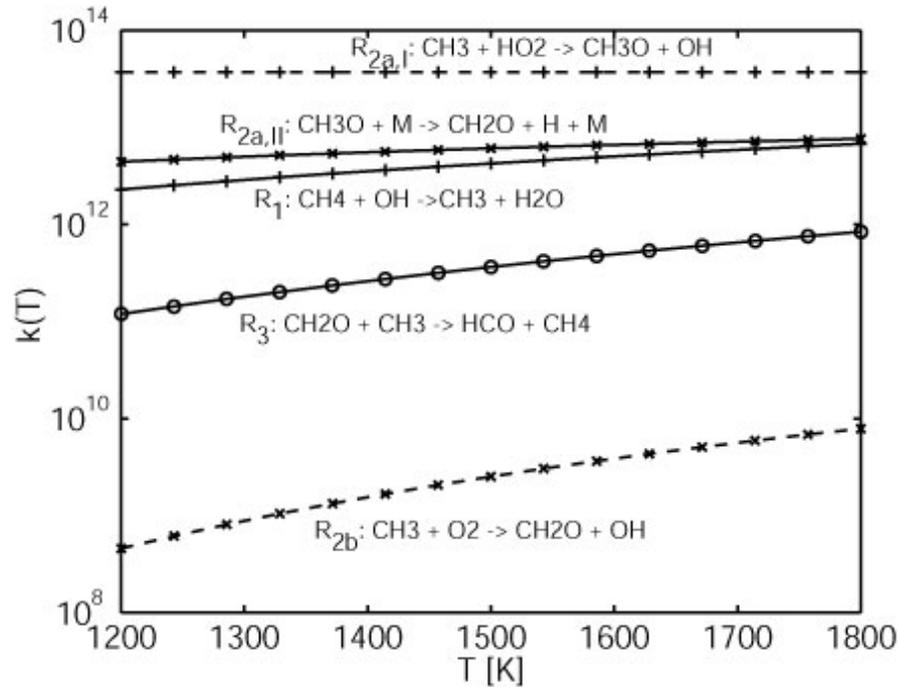
Zwischenschritt der Konversion von  $\text{CH}_3$  zu  $\text{CH}_2\text{O}$  über  $\text{CH}_3\text{O}$  verschwindet. Zusätzlich eröffnet sich ein Nebenpfad, der direkt  $\text{CH}_3$  in  $\text{CO}$  umsetzt.

Anhand weiterer detaillierter Untersuchungen kann festgestellt werden, dass der Hauptreaktionspfad zwischen  $\text{CH}_4$  und  $\text{CH}_2\text{O}$  während der Induktionsphase (linker Reaktionspfad in Abb. 3.4) maßgeblich durch die folgenden Reaktionen abgebildet werden kann:



Die Indizierung der Reaktionen durch arabische Ziffern gibt die globale Reihenfolge wieder, die Buchstaben 'a' und 'b' stehen für die beiden Reaktionspfade. Innerhalb des Reaktionspfades '2a' laufen die durch römische Ziffern indizierten Reaktionen nacheinander ab.

Abbildung 3.5 zeigt die Geschwindigkeitskoeffizienten  $k_f(T)$  als Funktion der Temperatur für die genannten Reaktionen. Hieraus lässt sich auch erkennen, dass die Bildung von  $\text{CH}_3$  durch die Reaktion  $R_1$  zwar sehr rasch stattfindet, da aber die Verbrauchsreaktion  $R_{2a,I}$  sofort die Konversion von  $\text{CH}_3$  zu  $\text{CH}_3\text{O}$  durchführt, tritt  $\text{CH}_3$  während der Induktionsphase nur mit äußerst geringen Massenbrüchen auf. In einem weiteren Schritt ( $R_{2a,II}$ ) findet schließlich die Reaktion zu  $\text{CH}_2\text{O}$  statt. Die parallel zum Reaktionspfad  $R_{2a}$  liegende Reaktion  $R_{2b}$  besitzt eine deutlich geringere Geschwindigkeitskonstante als die der Parallelreaktionen. Da Reaktion  $R_{2b}$  nur  $\text{O}_2$  als Reaktionspartner benötigt, dieses bei magerer Verbrennung aber als Reaktant im Überschuss vorliegt, muss davon ausgegangen werden, dass  $R_{2b}$  auch wesentlich zur Bildung von  $\text{CH}_2\text{O}$  beiträgt. Ebenfalls kann aus dem gezeigten Diagramm entnommen werden, dass die Verbrauchsreaktion  $R_3$  eine deutlich geringere Geschwindigkeitskonstante aufweist. Zudem benötigt  $R_3$   $\text{CH}_3$  als Reaktionspartner für  $\text{CH}_2\text{O}$ . Da die  $\text{CH}_3$  Konzentration während der Induktions-



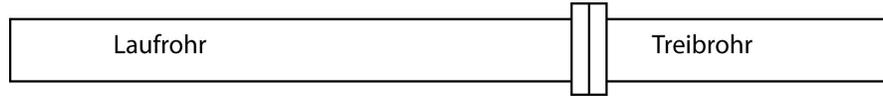
**Abbildung 3.5:** Geschwindigkeitskoeffizienten wichtiger Reaktionen während der Induktionsphase.

phase aber sehr gering ist (großer Verbrauch durch  $R_{2a,I}$ ), führt dies zusammen mit der geringen Geschwindigkeitskonstante von  $R_3$  zu einer Akkumulation von  $CH_2O$  während der Induktionsphase.

### 3.1.4 Experimentelle Bestimmung von Zündverzugszeiten

Generell bestehen die Möglichkeiten, Zündverzugszeiten mit Hilfe von Stoßrohrexperimenten als auch mit reaktionskinetischen Simulationen zu bestimmen. Im Folgenden schließt sich eine Übersicht relevanter experimenteller Ergebnisse an, denen eine Zusammenfassung der wichtigsten Modellierungsarbeiten folgt.

Bei der klassischen Methode der Zündverzugszeitmessung finden gewöhnlich Stoßrohre Anwendung. Ein solches Stoßrohr ist schematisch in Abb. 3.6 dargestellt. Zwischen dem in der Regel mit Helium befüllten Treibrohr und dem das Testgas enthaltende Laufrohr befindet sich eine Berstmembran. Nach Platzen der Membran läuft eine

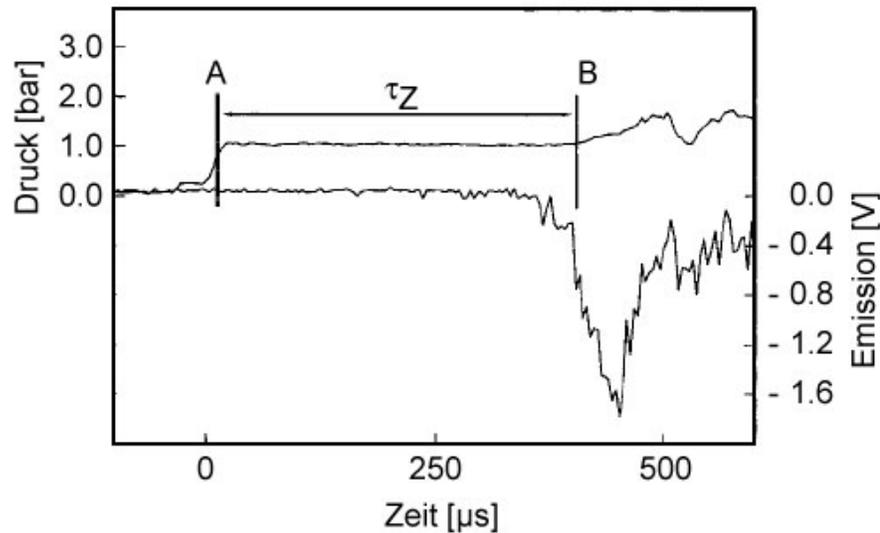


**Abbildung 3.6:** Aufbau eines Stoßrohr-experiments.

Stoßwelle im Laufrohr in Richtung des Endflansches. Diese wird dort reflektiert, um schließlich in das auf sie zuströmende Gas zurückzulaufen. Im Raum hinter der reflektierten Stoßwelle ist das Gas zur Ruhe gekommen und es haben sich die für das Experiment gewünschten Druck- und Temperaturbedingungen eingestellt. Herrschen die für eine Selbstzündung erforderlichen Bedingungen, so kann nach einer gewissen Zeit eine OH-Emission detektiert werden. Abhängig von den sich einstellenden Ausbreitungsgeschwindigkeiten der Stöße wird die Messzeit dadurch beendet, dass in das zur Ruhe gekommene Teilgasvolumen erneut eine reflektierte Stoßfront hineinläuft und so dort eine Veränderung der thermodynamischen Zustandsgrößen hervorruft.

Abbildung 3.7 zeigt den Verlauf des Druckes im ruhenden Gas und der OH-Emission während des Versuches. Das Zeitintervall nach Detektion des Druckanstiegs (A) bis hin zur Messung einer OH-Emission (B) entspricht der Zündverzugszeit  $\tau_Z$ .

Seery und Bowman [SB70] führten als eine der ersten zahlreiche Messkampagnen an Stoßrohren zur Bestimmung von Zündverzugszeiten unter Variation der Gemischzusammensetzung, der Temperatur und des Druckes durch. Als weitere Messungen sind die von Lifshitz et al. [LSBS71], Spadacini et al. [SC94], Petersen et al. [PDH99a] zu nennen. Die meisten der genannten Untersuchungen wurden aber für einen Temperaturbereich  $T > 1300K$  durchgeführt, so dass eine Übertragung auf gasturbinentypische Bedingungen schwierig ist. Aufgrund dieses Umstandes veröffentlichte zuerst Goy et al. [GMT01] Messungen für den Temperaturbereich  $950K \leq T \leq 1500K$ . Allerdings sind diese Daten insbesondere für den Niedertemperaturbereich umstritten, da nur eine unerwartet schwache Abhängigkeit der Zündverzugszeiten von der Temperatur festgestellt wird und



**Abbildung 3.7:** Druck- und OH-Emissionsverlauf im Stoßrohr [KS01].

die gemessenen Zeiten im Bereich der typischen Beobachtungszeiten (2-4 ms [NBUG<sup>+</sup>03]) von Stoßrohren liegen. Bessere Übereinstimmung mit bisher bekannten Trends liefern die von Huang et al. [HHBM04] durchgeführten Messungen für maschinenrelevante Bedingungen. Speziell für die in der SEV-Brennkammer vorliegenden Druck- und Temperaturbedingungen wurden die Experimente von Naumann et al. [NBUG<sup>+</sup>03] durchgeführt. Eine Erweiterung der Messzeit hin zu längeren Beobachtungszeiten (ca. 25 ms) wurde bei dieser Versuchsreihe durch eine Impedanzanpassung („tailored-interference“) erreicht. Bei diesem Verfahren sind aufgrund der nicht mehr vernachlässigbaren gasdynamischen Einflüsse Druck und Temperatur während der Beobachtungszeit nicht mehr konstant und müssen bei der Datenauswertung berücksichtigt werden.

### 3.1.5 Numerische Berechnung der Zündverzugszeiten

Wie bereits angesprochen, lassen sich Zündverzugszeiten auch mittels Reaktorsimulationen ermitteln. Gewöhnlich findet hierfür ein PFR (**P**lug **F**low **R**eactor) z.B. SENKIN aus der CHEMKIN Code-

Mechanismus	Anz. Spezies	Anz. Reaktionen	Chemie	Bemerkung
GRI 3.0	53	325	C1 - C3	14 C3 Reaktionen
RAMEC	47	190	C1 - C2	
WANG	71	469	C1 - C4	147 C3 Reaktionen
ENSIC	63	439	C1 - C2	
NIST	34	240	C1 - C2	zus. Br, F Chemie
LLNL	155	689	C1 - C4	
BGC	19	57	C1 - C2	Niedertemp.

**Tabelle 3.1:** Übersicht relevanter Reaktionsmechanismen.

Umgebung [LKM87] Anwendung. Die dabei ablaufenden Elementarreaktionen werden mit den Reaktionsparametern in einem Reaktionsmechanismus zusammengefasst. Eine Übersicht der gängigsten Reaktionsmechanismen, die für die Modellierung der Zündung von Erdgas-Luft Gemischen verwendet werden, ist in Tabelle 3.1 zu finden. Neben den hier aufgeführten Reaktionsmechanismen existieren noch zahlreiche weitere Arbeiten, die u. a. im Übersichtsartikel von Simmie [Sim03] zusammengefasst sind.

Im Folgenden werden weitere Besonderheiten der aufgeführten Reaktionsmechanismen diskutiert. Inwieweit sich die einzelnen Reaktionsmechanismen für die Berechnung der Zündung und Verbrennung von realen Erdgas-Luft Gemischen eignen, wird ebenfalls erörtert.

- *GRI 3.0* [SGF<sup>+</sup>]: Der am Gas Research Institute entwickelte GRI 3.0 Mechanismus ist der am weitesten verbreitete Mechanismus. Er basiert auf einer C1 - C3 Chemie und enthält zusätzlich noch die Reaktionen einer Stickstoff-Chemie. Die 14 vorhandenen C3 Reaktionen ermöglichen den bedingten Einsatz des Mechanismus für die Berechnung von Methan-Propan Gemischen. Innerhalb gewisser Grenzen wurden bei der Erstellung des Mechanismus die Reaktionsparameter mittels eines genetischen Algorithmus so optimiert, dass eine Vielzahl ausgewählter experimenteller Daten mit guter Übereinstimmung wiedergegeben werden können. Im Einzelnen wurden für die Optimierung Daten aus Stoßrohrversuchen (Zündverzugszeiten, Speziesprofile), laminaren Flammen (Flammgeschwindigkeiten, Speziesprofile)

sowie Messungen der Stickoxidemissionen verwendet. Es muss aber erwähnt werden, dass für die Optimierung und Validierung des Mechanismus Zündverzugszeiten - mit einer Ausnahme - nur Daten für geringe Drücke  $p < 20\text{bar}$  und hohe Temperaturen  $T > 1350\text{K}$  verwendet wurden. Für weitere Informationen hinsichtlich der Validierung sei auf [SGF<sup>+</sup>] verwiesen.

- *RAMEC* [PDH99b]: Petersen et al. erweiterte den Basismechanismus GRI 1.2 um Reaktionen aus einer Studie von Hunter et al. und einen Teilmechanismus für das Azetaldehyd ( $\text{CH}_3\text{HCO}$ ). Insbesondere Azetaldehyd spielt bei einer kalten Flamme ( $T < 900\text{K}$ ) eine signifikante Rolle, die ablaufenden Mechanismen sind auch unter dem Begriff *higher hydrocarbon phenomena* bekannt. Ausführliche Validierungen des Reaktionsmechanismus sind nur für Zündverzugszeiten bekannt. Insbesondere für hohe Drücke und fette Brennstoff-Luft Gemische ( $p > 40\text{bar}$ ,  $\phi = 0,3$ ) konnte mit dem weiterentwickelten Reaktionsmechanismus eine bessere Übereinstimmung der vorhergesagten Zündverzugszeiten mit experimentellen Daten festgestellt werden als dies mit Reaktionsmechanismen, die das Azetaldehyd nicht enthalten, der Fall ist. Bei der Berechnung der Zündverzugszeiten magerer Gemische ergeben sich aber nur geringfügige Verbesserungen. Aufgrund der Tatsache, dass der Mechanismus keine Reaktionen für Propan enthält, höhere Kohlenwasserstoffe aber schon in geringen Konzentrationen Zündverzugszeiten drastisch verringern, ist er nur bedingt für die Simulation der Zündung von Erdgas-Luft Gemischen geeignet.
- *WANG* [DLW99]: Ein sehr umfangreicher Propan-Mechanismus wurde von Wang et al. bei seinen Studien der Pyrolyse und Oxidation von Propen ( $\text{C}_3\text{H}_6$ ) entwickelt. Propen gilt als eine wichtige Zwischenspezies bei der Verbrennung höherer Kohlenwasserstoffe. Der Wang Mechanismus umfasst die Reaktionen aus dem Basismechanismus GRI 1.2, einige Erweiterungen bei der C1/C2 Chemie und eine umfangreiche C3 Chemie. Die Validierung des Mechanismus fand mit Hilfe zahlreicher experimen-

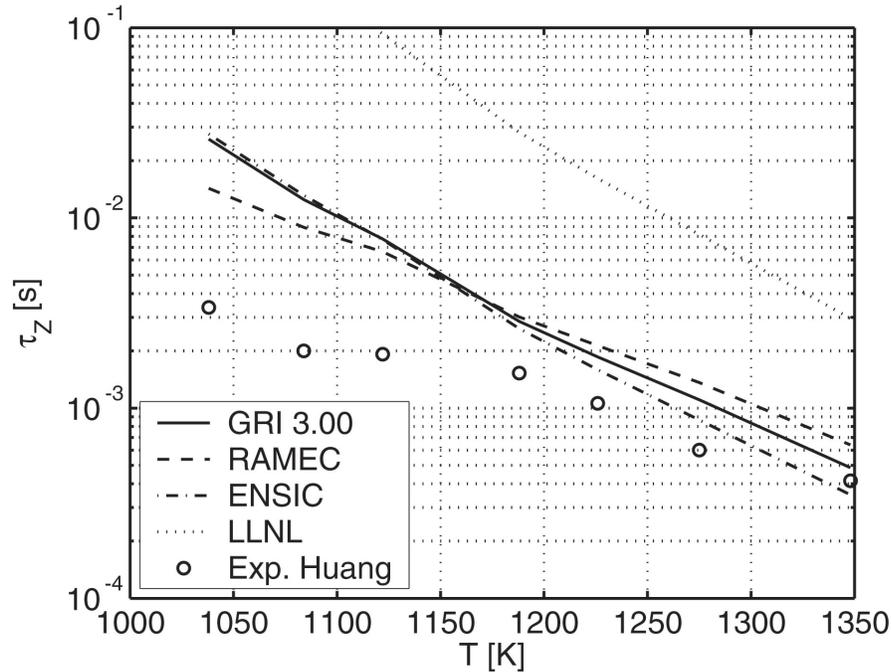
teller Daten statt, die den Vergleich laminarer Flammgeschwindigkeiten, Zündverzugszeiten und Speziesprofile umfasst.

- *ENSIC* [BBLC95]: Barbe et al. entwickelte einen sehr umfangreichen Reaktionsmechanismus für die Beschreibung der chemischen Prozesse bei der Oxidation von  $\text{CH}_4$  und  $\text{C}_2\text{H}_6$ . Die eingesetzte Methode basiert auf einer systematischen Generierung des Reaktionsmechanismus. In einer Matrixform werden zunächst alle zu berücksichtigenden Reaktionspartner aufgetragen, um anschließend die möglichen Reaktionen hinsichtlich ihrer Bedeutung zu bewerten. Barbe et al. verwendet bei der Entwicklung des Mechanismus ausschließlich Reaktionen, die bereits im Schrifttum veröffentlicht wurden. Insbesondere sind dabei als Quellen die Arbeiten von Tsang et al. [TH86], Baulch et al. [BCC<sup>+</sup>94] und Ranzi et al. [RSG<sup>+</sup>94] zu nennen. Für die Validierung des Mechanismus wurden ausschließlich experimentelle Daten atmosphärischer Versuche verwendet. Vandebroek et al. [VWB] stellt in seinem Vergleich verschiedener Reaktionsmechanismen bei der Berechnung der Zündgrenzen fest, dass die mit dem Mechanismus von Barbe et al. bestimmten Zündtemperaturen im untersuchten Druckbereich (1 - 50 bar) um ca. 80 K zu niedrig ausfallen.
- *NIST* [BBTM95]: Der von Babushok et al. entwickelte Reaktionsmechanismus eignet sich ebenfalls für die Berechnung der chemischen Prozesse während der Zündung der Brennstoffe Methan und Ethan und basiert auf den Arbeiten von Miller und Bowman [MB89] sowie Egolfopoulos et al. [EDL92]. Aufgrund neuerer Erkenntnisse wurden einige der Reaktionsparameter der Grundmechanismen modifiziert. Zusätzlich zu der  $\text{C}_1$  und  $\text{C}_2$  Chemie enthält der Mechanismus noch Reaktionen mit Flamm-inhibitoren (z.B. Brom und Fluor), die aber bei der vorliegenden Anwendung nicht von Bedeutung sind und daher entfernt werden könnten. Der Arbeit von Vandebroek et al. [VWB] kann entnommen werden, dass bei der Verwendung des Mechanismus zu Bestimmung der Zündgrenzen mit etwas zu hohen Zündtem-

peraturen ( $\Delta T \approx 30 - 50K$ ) zu rechnen ist.

- *LLNL* [MPW<sup>+</sup>98]: Zur Modellierung von Butan- und Propan-Flammen mit Brennstoffüberschuss wurde ein Basismechanismus mit den von Tsang vorgeschlagenen Propan-Reaktionen und dem von Westbrook-Pitz entwickelten n-Butan Teilmechanismus erweitert. Zusätzlich sind noch Erweiterungen für Toluol und Benzol implementiert, die als Zwischenprodukte bei der Oxidation von Butan entstehen. Da Butan in der Regel nur in sehr geringen Molanteilen im Erdgas vorhanden ist, erscheint der signifikante Mehraufwand (über 150 Spezies und  $> 600$  Reaktionen) zur Behandlung der C4 Chemie nicht gerechtfertigt.
- *BGC* [RRS84]: Speziell für den Niedertemperaturbereich ( $T_0 < 1000K$ ) entwickelte Reid et al. einen mit 19 Spezies und 57 Reaktionen relativ kleinen Reaktionsmechanismus. Zwar beinhaltet dieser auch einige C<sub>2</sub>-Reaktionen, allerdings muss damit gerechnet werden, dass die Berechnung von Methan/Ethan Mischungen auf geringe Ethan Konzentrationen limitiert ist. Charakteristisch für einen Niedertemperaturmechanismus ist auch die Berücksichtigung des bei niedrigen Starttemperaturen immer wichtiger werdenden Nebenpfades  $CH_3 \rightarrow CH_3O_2 \rightarrow CH_3O_2H \rightarrow CH_3O$ . Beachtenswert ist, dass trotz des relativ kurzen Reaktionsmechanismus dieser Pfad mit 7 zusätzlichen Reaktionen sehr ausführlich betrachtet wird. Der von Vandebroek et al. [VWB] durchgeführte Vergleich der Reaktionsmechanismen attestiert dem BGC-Mechanismus insbesondere bei niedrigen Temperaturen eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten.

Die in Abb. 3.4 gezeigten Reaktionspfade werden in der Regel von allen Reaktionsmechanismen berücksichtigt. Insbesondere bei der Zündung von Brennstoff-Luft Gemischen mit niedriger Starttemperatur ( $T_0 < 1100K$ ) gewinnt ein zusätzlicher Nebenpfad bei der Konversion von  $CH_3$  zu  $CH_3O$  immer mehr an Bedeutung. Die hierfür zusätzlichen notwendigen Reaktionsschritte werden mehr oder weni-



**Abbildung 3.8:** Vergleich der Reaktionsmechanismen anhand der Zündverzugszeiten eines stoichiometrischen  $\text{CH}_4$ -Luft Gemisches bei  $p \approx 16\text{bar}$ .

ger detailliert nur von den Mechanismen WANG, RAMEC, ENSIC, BGC berücksichtigt.

Abbildung 3.8 zeigt zum Vergleich ausgewählter Reaktionsmechanismen die berechneten Zündverzugszeiten eines stöchiometrischen Methan-Luft Gemisches. Als Vergleichsdaten sind die von Huang et al. experimentell ermittelten Zündverzugszeiten aufgetragen. Da sich im Experiment innerhalb einer Messkampagne bei Variation der Starttemperatur nur schwer ein konstantes Druckniveau einstellen lässt, wurden für die Berechnungen die individuellen Drücke aus den Experimenten verwendet. Bei den von Huang et al. durchgeführten Stoßrohrexperimenten stellten sich für das gewünschte Druckniveau  $p = 16\text{bar}$  jeweils Drücke im Bereich  $15\text{bar} < p < 17\text{bar}$  ein. Dies bedingt auch den etwas buckeligen Verlauf der Kurven in Abb. 3.8.

Besonders auffallend sind die um ca. eine Größenordnung längeren Zündverzugszeiten des LLNL-Mechanismus. Auch Vandebroek

et al. [VWB] ermittelte in seiner Vergleichsstudie für den LLNL-Mechanismus um ca. 100 K zu hohe Zündtemperaturen, was ebenfalls auf eine insgesamt langsamere Kinetik schließen lässt. Zudem kann festgestellt werden, dass im Niedertemperaturbereich alle Mechanismen generell zu lange Zündverzugszeiten liefern. Am geeignetsten erscheint für den Bereich  $T < 1150K$  der RAMEC-Mechanismus, da mit diesem die kürzesten Zündverzugszeiten berechnet werden. Trotz der sehr aufwändigen Formulierung der  $CH_3O_2$ -Kinetik im ENSIC-Mechanismus können im Vergleich zum GRI-Mechanismus keine Verbesserungen bei der Vorhersage der Zündverzugszeiten festgestellt werden. Oberhalb der Temperatur  $T = 1200K$  kann eine gute Übereinstimmung der mit den Mechanismen GRI, RAMEC und ENSIC bestimmten Zündverzugszeiten erreicht werden.

Wie zu Beginn der Arbeit erwähnt, besteht die Anforderung an das zu entwickelnde Zündmodell, dass dieses dem Einfluss der verschiedenen Erdgasqualitäten Rechnung tragen muss. Insbesondere Erdgasqualitäten, die neben Methan noch höhere Kohlenwasserstoffe wie Ethan und Propan enthalten, kennzeichnen sich durch verkürzte Zündverzugszeiten aus. Da von den vorgestellten Mechanismen nur der GRI- und der LLNL-Mechanismus eine  $C_3$  Chemie enthalten, findet der GRI-Mechanismus für die folgenden Untersuchungen Anwendung.

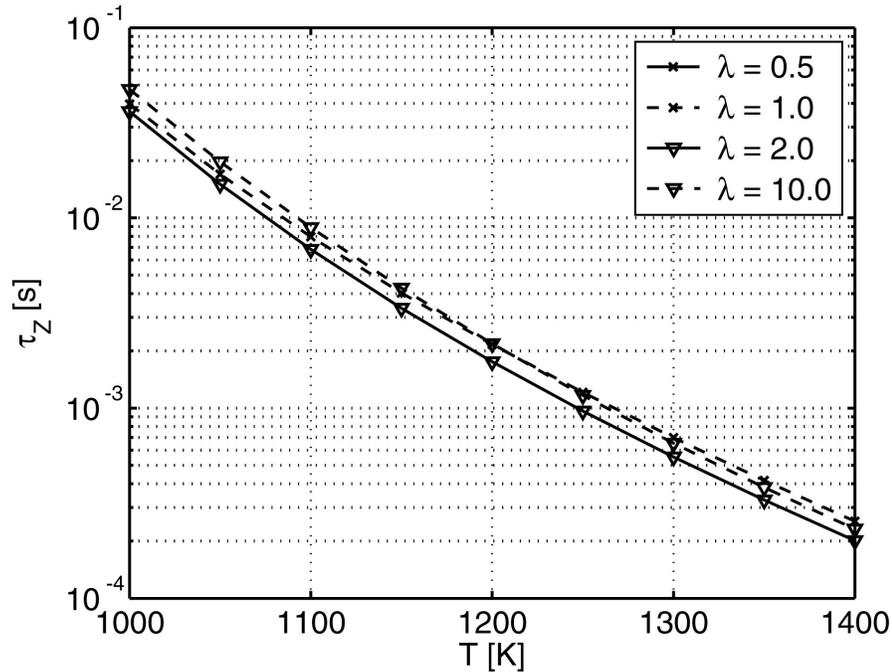
Wie in Kap. 1 beschrieben, soll das zu entwickelnde Simulationsmodell zur Berechnung der Strömung in einem Gasturbinenbrenner (SEV-Brenner) verwendet werden. Typische Eintrittstemperaturen der Verbrennungsluft liegen bei diesem Brenner im Bereich von  $1150K \leq T \leq 1350K$ . Anhand Abb. 3.8 lässt sich daher die Aussage ableiten, dass die mit dem GRI 3.0 Mechanismus durchgeführten Reaktorsimulationen zu sinnvollen Ergebnissen führen. Für  $T \geq 1150K$  liegen die mit dem GRI 3.0 Mechanismus berechneten Zündverzugszeiten zwischen den mit den Mechanismen RAMEC und ENSIC bestimmten Zeiten. Durch eine Optimierung der Mechanismen (z.B. Erweiterung um zusätzliche Reaktionen) kann zwar erwartet werden, dass eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten

erreicht wird. Dies ist aber nicht Teil der vorliegenden Arbeit, so dass für die folgenden Untersuchungen und Berechnungen der GRI 3.0 Mechanismus verwendet wird. Da das Simulationsmodell nicht an einen speziellen Reaktionsmechanismus gebunden ist, können später auch leicht andere Mechanismen zur Anwendung kommen.

### 3.1.6 Einflussgrößen auf die Zündverzugszeit

Mit Hilfe numerischer Untersuchungen lässt sich einfach durch Variation der Parameter wie Starttemperatur, Druck, Gasqualität und Frischgaszusammensetzung sowie dem Brennstoff-Luft Verhältnis die Sensitivität der Zündverzugszeit auf die einzelnen Parameter ermitteln. Aufgrund des geplanten Einsatzes des Modells für die Simulation der Strömung im SEV-Brenner (ALSTOM Gasturbine GT24/26) sollen an dieser Stelle zunächst die typischen Betriebsbedingungen dieses Brenners erarbeitet werden. Eingebaut in eine Gasturbine wird der SEV Brenner unter einem erhöhtem Druckniveau  $p \approx 17\text{bar}$  betrieben. Allerdings muss es mit dem Modell auch möglich sein, Vergleichsrechnungen für die unter atmosphärischen Bedingungen am Prüfstand ermittelten Daten durchzuführen. Aufgrund der Vorverbrennung in der ersten Brennerstufe ist ein Teil des Luft-Sauerstoffs in der Verbrennungsluft verbraucht. Diese enthält nun zusätzlich die stabilen Verbrennungsprodukte  $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$  sowie ggf. noch einige Zwischenspezies (z.B. OH). Zudem sei noch daran erinnert, dass je nach Region, in der die Gasturbine betrieben wird, unterschiedlichen Erdgasqualitäten (Zusammensetzungen) für den Betrieb zum Einsatz kommen.

Abbildung 3.9 zeigt die Zündverzugszeit als Funktion der Starttemperatur bei verschiedenen Luftzahlen. Deutlich ist eine starke Abhängigkeit der Zündverzugszeiten bezüglich der Starttemperatur zu erkennen. Dabei ist anzumerken, dass sich die Zündverzugszeiten bei einer wiederholten Erhöhung der Starttemperatur um  $\Delta T$  jeweils um einen nahezu konstanten Faktor reduzieren, wobei die Faktoren zu höheren Temperaturen hin leicht abnehmen. Gleiches



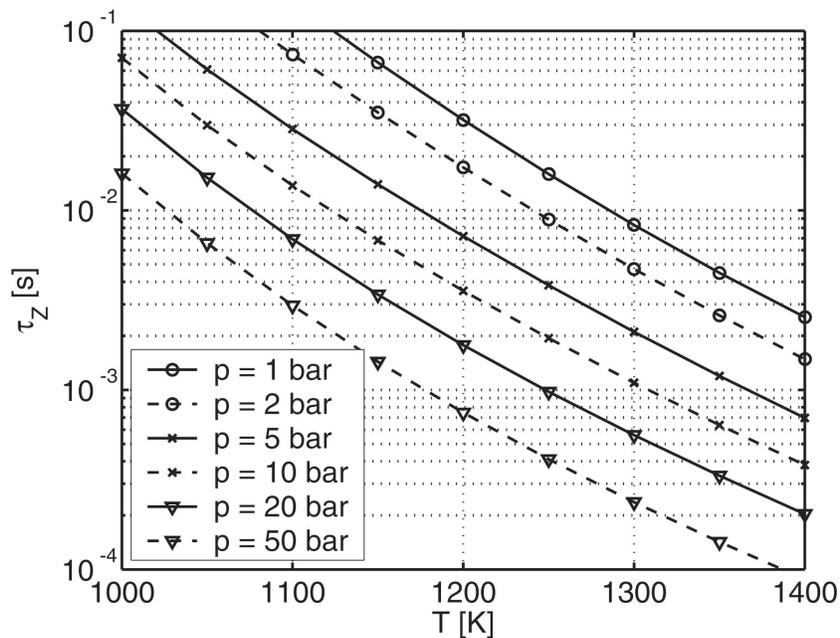
**Abbildung 3.9:** Einfluss von Starttemperatur und Luftzahl auf die Zündverzugszeiten bei  $p = 20$  bar.

Verhalten zeigt auch die Exponentialfunktion. Dies sollte aber nicht überraschen, da bei der Berechnung der Reaktionsraten über den Arrhenius-Ansatz die Exponentialfunktion zur Berücksichtigung der Temperatur eingesetzt wird. Als Näherung kann damit mit guter Näherung die Abhängigkeit

$$\tau_Z \propto \exp\left(\frac{-B}{T}\right) \quad (3.5)$$

angegeben werden [WM92].

Im Gegensatz zur Temperatur beeinflusst die Luftzahl  $\lambda$ , d.h. die Brennstoffkonzentration, die Zündkinetik nur sehr schwach. Im gesamten dargestellten Bereich der Luftzahlen ( $0,5 \leq \lambda \leq 10$ ) ändert sich die Zündverzugszeit nur unwesentlich. Weitere Berechnungen für extrem magere Mischungen zeigen ebenfalls keine deutliche Zunahme der Zündverzugszeit. Hingegen kann bei sehr fetten Gemischen  $\lambda \leq 0,1$  eine deutliche Verzögerung der Zündkinetik festgestellt wer-

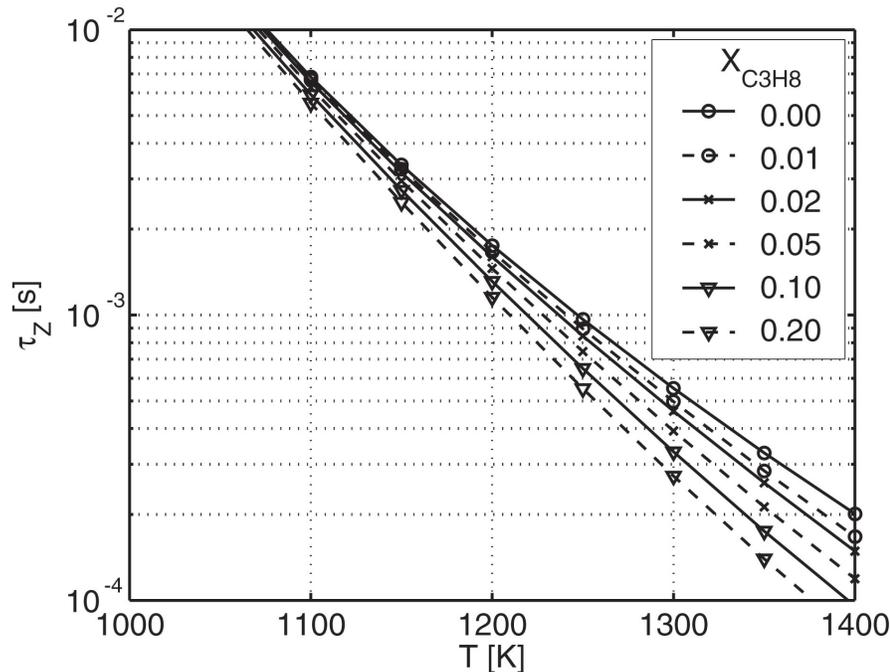


**Abbildung 3.10:** Einfluss des Druckes auf die Zündverzugszeiten bei einer Luftzahl von  $\lambda = 2$ .

den. Allerdings muss angemerkt werden, dass die verwendeten Reaktionsmechanismen in der Regel nur für Luftzahlen  $\lambda \geq 0,5$  ausreichend validiert sind und daher den unter extrem fetten Bedingungen ermittelten Zündverzugszeiten nur bedingt vertraut werden darf.

Einen ebenfalls hohen Einfluss auf die Zündkinetik besitzt der Systemdruck. Aus Abb. 3.10 kann entnommen werden, dass der Erhöhung des Druckes um eine Größenordnung eine Verkürzung der Zündverzugszeiten um ebenfalls nahezu eine Größenordnung folgt. Dies lässt auf eine globale Reaktionsordnung von ca. -1 schließen. Gleiches Verhalten spiegeln auch gängige Korrelationen (z.B. [LW00a]) zur Berechnung der Zündverzugszeiten wieder.

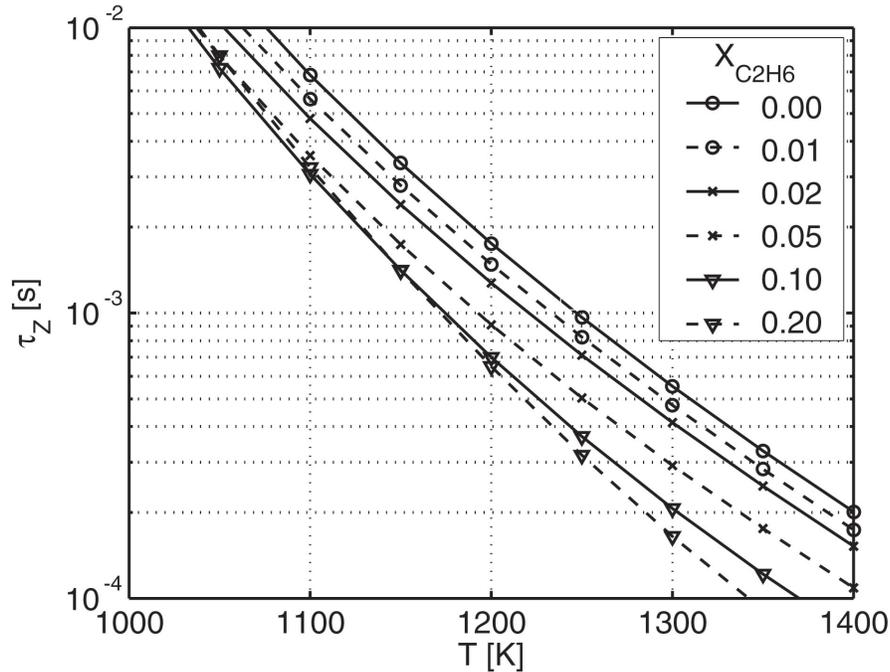
Bereits bei der Zielsetzung der Arbeit wurde erwähnt, dass die Zusammensetzung der Erdgase je nach Herkunftsort sehr stark variiert. So können neben höheren Kohlenwasserstoffen wie Ethan, Ethen und Propan auch Inerte wie  $\text{CO}_2$  und  $\text{N}_2$  auftreten. Anhand der in Abb. 3.11 gezeigten Zündverzugszeiten lässt sich der Einfluss von Pro-



**Abbildung 3.11:** Einfluss von  $C_3H_8$ -Erdgasbestandteilen auf die Zündverzugszeit bei  $p = 20$  bar und  $\lambda = 2$ .

pan diskutieren. Für die Berechnungen wurde der Propan-Molanteil  $X_{C_3H_8}$  im Brennstoff in einem weiten Bereich variiert. Während bei niedrigen Starttemperaturen kein nennenswerter Einfluss zu erkennen ist tritt bei hohen Starttemperaturen eine deutliche Abnahme der Zündverzugszeiten mit steigendem Propan-Anteil auf. Beispielsweise lässt sich bei  $T = 1300K$  die Zündverzugszeit durch Verwendung eines Brennstoffes mit  $X_{C_3H_8} = 0,2$  auf den halben Wert reduzieren.

Etwas stärkeren Einfluss auf die Zündkinetik besitzen die Ethan-Bestandteile ( $C_2H_6$ ) des Erdgases. Abbildung 3.12 zeigt hierzu die Zündverzugszeiten in Abhängigkeit des Ethan-Anteils im Brennstoff. Auch hier ist mit steigender Temperatur ein stärkerer Einfluss zu erkennen. Im Vergleich zu reinem Methan lässt sich die Zündverzugszeit eines Methan/Ethan-Brennstoffgemisches mit einem Ethan-Anteil von 20 %<sub>vol</sub> bei  $T = 1300$  K auf etwa ein Drittel reduzieren. Gleiches bestätigen u. a. auch die Messungen von Griffiths et al. [GCP<sup>+</sup>90] an Methan-Ethan-Mischungen, bei denen durch Zugabe

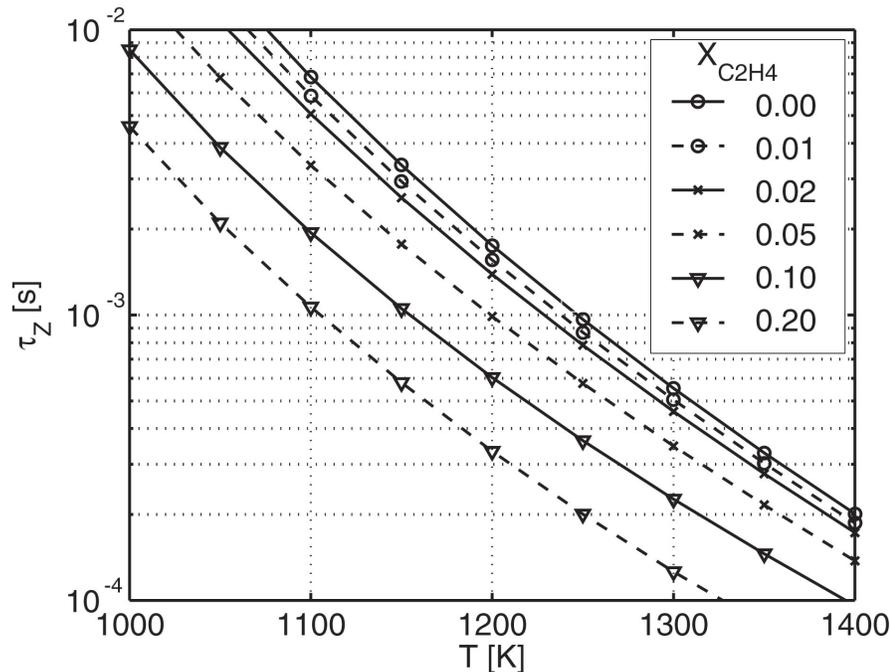


**Abbildung 3.12:** Einfluss von  $C_2H_6$ -Erdgasbestandteilen auf die Zündverzugszeit bei  $p = 20$  bar und  $\lambda = 2$ .

von wenigen Prozenten Ethan zum Brennstoff eine starke Reduktion der Selbstzündtemperatur beobachtet werden konnte.

Einen wesentlich stärkeren Einfluss auf die Zündverzugszeiten besitzen die Ethen-Bestandteile ( $C_2H_4$ ) des Erdgases. Insbesondere Erdgase aus dem asiatischen Raum weisen mit maximal 10 % einen sehr hohen Ethen-Anteil auf. In Abb. 3.13 sind für eine Variation der Ethen-Anteile die Zündverzugszeiten aufgetragen. Im Gegensatz zu Propan besitzen die Ethen-Bestandteile auf die Zündverzugszeiten über den gesamten Temperaturbereich einen etwa konstanten Einfluss.

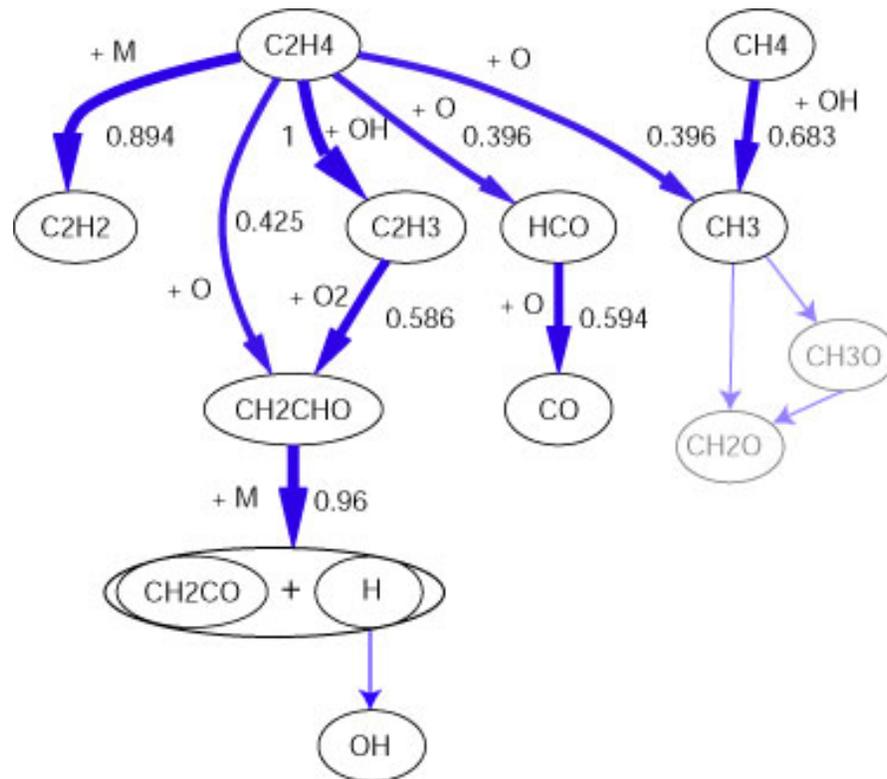
Anhand der in Abb. 3.14 bis 3.16 gezeigten Reaktionspfade für unterschiedliche Brennstoffgemische lässt sich das beobachtete Verhalten weiter diskutieren. Alle drei Abbildungen wurden für Brennstoffgemische erstellt, die jeweils zu gleichen Anteilen aus Methan und jeweils einem der höheren Kohlenwasserstoffe Ethan, Propan sowie Ethen bestehen. Damit lässt sich ein einfacherer Vergleich der neben



**Abbildung 3.13:** Einfluss von  $\text{C}_2\text{H}_4$ -Erdgasbestandteilen auf die Zündverzugszeit bei  $p = 20$  bar und  $\lambda = 2$ .

den Pfeilen angegebenen Flüsse beider Reaktionspfade durchführen. Es muss angemerkt werden, dass sich zwar die Flüsse während der Induktionsphase ändern, die grundsätzliche Aufteilung der Reaktionsströme aber fast während des gesamten Zeitraums nahezu ähnlich bleibt. Um in den folgenden Abbildungen der Reaktionspfade trotz der vielen bei der Zündung beteiligten Spezies den Überblick zu wahren, sind nur die C-haltigen Spezies eingezeichnet. Der besseren Orientierung wegen wurden die Reaktionspfade teilweise um einige Pfade aus Abb. 3.4 (links) ergänzt. Die Zahlen neben den Verbindungslinien geben den Nettofluss an, mit dem eine Spezies in die jeweils folgende konvertiert. Dieser ist mit dem in der jeweiligen Abbildung maximalen Nettofluss normiert. Ferner ist der für die Umwandlung wichtigste Reaktionspartner angegeben.

Wie aus den Abbildungen entnommen werden kann, spielen insbesondere die Radikale OH, HO<sub>2</sub> als Reaktionspartner eine wichtige Rolle. Aus diesem Grund sind in die Abbildungen zusätzlich noch die für die Bildung von OH und HO<sub>2</sub> verantwortlichen Reaktionspfade

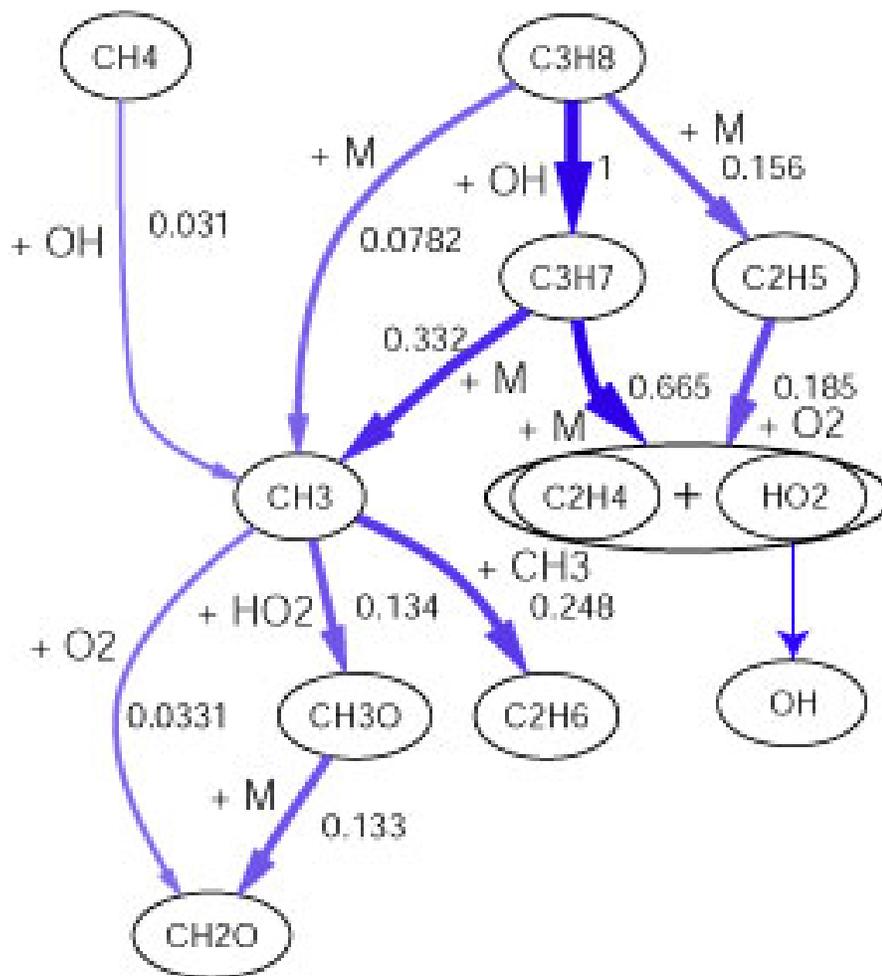


**Abbildung 3.14:** Reaktionspfad während der Induktionsphase bei der Oxidation von CH<sub>4</sub>/C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>-Gemischen.

de eingezeichnet.

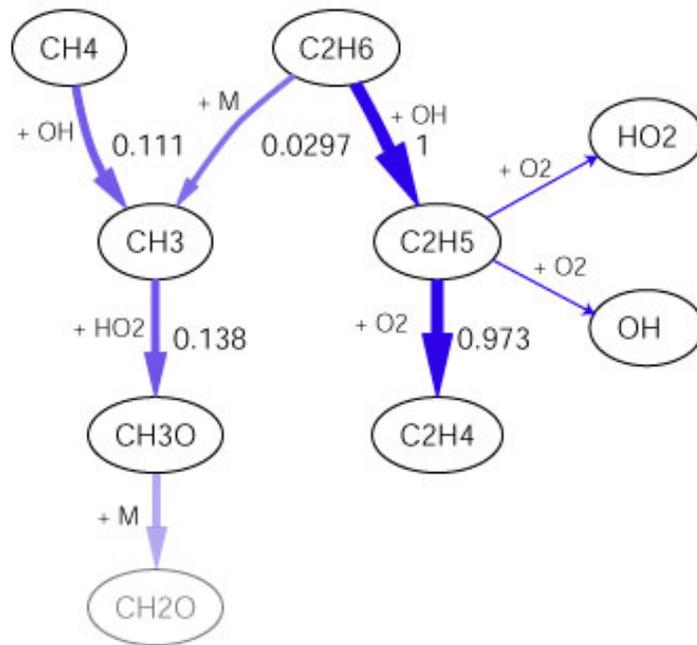
Abbildung 3.14 zeigt den Reaktionspfad für Methan/Ethen-Gemische. Auffällig ist, dass die Oxidation des Ethens zum größten Teil nicht über den Reaktionspfad des Methans stattfindet. Nur ein sehr kleiner Teil (< 10%) des Ethens wird über den Methan-Pfad umgesetzt. Die Abbildung zeigt zwei weitere Hauptpfade, die sich bei der Oxidation von Ethen eröffnen. Zum einen ist dies die Umsetzung von C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> zu CO über eine einzige Zwischenspezies HCO und zum anderen die Konversion über den mit CH<sub>2</sub>CHO eingeleiteten Reaktionspfad. Letzter trägt auch über einen Zwischenschritt massiv zur Bildung des Radikals OH bei, welches maßgeblich an der Aufspaltung von C<sub>2</sub>H<sub>4</sub> und CH<sub>4</sub> beteiligt ist.

Die Analyse der Reaktionspfade bei der Oxidation von Methan/Propan-Gemischen erklärt den im Vergleich zu Ethen



**Abbildung 3.15:** Reaktionspfad während der Induktionsphase bei der Oxidation von  $\text{CH}_4/\text{C}_3\text{H}_8$ -Gemischen.

nicht so starken Einfluss der Propan-Anteile bezüglich der Zündverzugszeiten. Aus Abb. 3.15 kann entnommen werden, dass etwa ein Drittel des Propan-Umsatzes über den Methan-Pfad stattfindet. Der restliche Teil des Propans reagiert über eine Zwischenspezies zu Ethen und kann somit dem schnellen Pfad der Ethen-Oxidation folgen. Dies spiegelt sich auch in den reduzierten Zündverzugszeiten wieder. Da allerdings zum einen ein großer Teil des Propan-Umsatzes über den Methan-Reaktionspfad abläuft und zum anderen vor dem Start des Ethen-Reaktionspfades Propan erst zu Ethen konvertiert werden muss, ergeben sich im Vergleich zu Methan/Ethen-Gemischen insgesamt längere Induktionsphasen.



**Abbildung 3.16:** Reaktionspfad während der Induktionsphase bei der Oxidation von  $\text{CH}_4/\text{C}_2\text{H}_6$ -Gemischen.

Wie den Diagrammen in Abb. 3.12 und 3.11 entnommen werden kann, bewirken Ethan-Anteile eine stärkere Verkürzung der Zündverzugszeiten als Propan-Anteile. Aus dem in Abb. 3.16 gezeigten Reaktionspfad für Methan/Ethan-Gemische wird ersichtlich, dass im Gegensatz zu Propan Ethan fast ausschließlich über den Ethen-Pfad umgesetzt wird. Nur ein zu vernachlässigender Anteil wird durch Aufspaltung des Ethans in zwei  $\text{CH}_3$  Moleküle über den Methan-Pfad oxidiert. Die starke Verkürzung der Zündverzugszeiten bei Methan/Ethan-Mischungen lässt sich daher mit der Oxidation des Ethans über den schnellen Ethen-Pfad begründen.

Aus allen drei Abbildungen ist ersichtlich, dass die Bildung der Radikale  $\text{OH}$  und  $\text{HO}_2$  im wesentlichen in dem Reaktionspfad des entsprechenden höheren Kohlenwasserstoffes stattfindet, was zu der starken Reduktion der Zündverzugszeiten führt. Zudem sind die durch die höheren Kohlenwasserstoffe zusätzlich eröffneten Reaktionspfade bedeutend aktiver als der Methan-Reaktionspfad. Dies kann den ange-

Kohlenwasserstoff	Reaktionspartner	Aktivierungsenergie [kal/mol]
CH <sub>4</sub>	OH	3120
C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>	OH	2500
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	OH	870
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	OH	934

**Tabelle 3.2:** Aktivierungsenergien der wichtigsten Startreaktion für die untersuchten Kohlenwasserstoffe (entnommen aus dem GRI 3.00 Mechanismus [SGF<sup>+</sup>])

gebenen Flüssen entnommen werden.

Des Weiteren kommt hinzu, dass aufgrund der äußerst stabilen tetrahedralen Struktur des CH<sub>4</sub> Moleküls und der starken C-H Bindungen zur Initiierung der ablaufenden Radikalkettenreaktionen eine extrem hohe Startenergie notwendig ist. Bei reinen Methan-Luft Gemischen stellen sich daher im Vergleich zu anderen Brennstoffen relativ hohe Zündtemperaturen und lange Zündverzugszeiten sowie geringe Flammgeschwindigkeiten [Tur00] ein. Alle höheren Kohlenwasserstoffe weisen einen weniger symmetrischen Molekülaufbau auf, so dass Stöße zwischen den Reaktionspartnern mit einer höheren Wahrscheinlichkeit zu einer anschließenden Reaktion führen. Im Wesentlichen spielen bei Beginn der Umsetzung der Kohlenwasserstoffe Methan, Ethan, Propan und Ethen Stöße mit OH-Radikalen eine dominante Rolle. Die in Tab. 3.2 aufgeführten Aktivierungsenergien der entsprechenden Reaktion  $C_xH_y + OH$  geben diese Tendenz wieder.

Weiteren Einfluss auf die Zündkinetik besitzt die Zusammensetzung des Frischgases bzw. der Verbrennungsluft. Dieses entstammt bei der Hochtemperaturverbrennung zumeist einer vorgeschalteten Brennerstufe, was auch für den SEV-Brenner zutrifft. Aufgrund der Oxidation des Brennstoffs in der ersten Stufe ist ein Teil des Sauerstoffs verbraucht, so dass für die nachfolgend ablaufende Reaktion ein Frischgas mit einem reduzierten Sauerstoffanteil sowie einem erhöhten Inertanteil zur Verfügung steht. Zudem befinden sich selbst nach Erreichen des Gleichgewichtszustandes im Frischgas der Hochtemperaturverbrennungsstufe noch Radikale (z.B. OH), die sich auf den

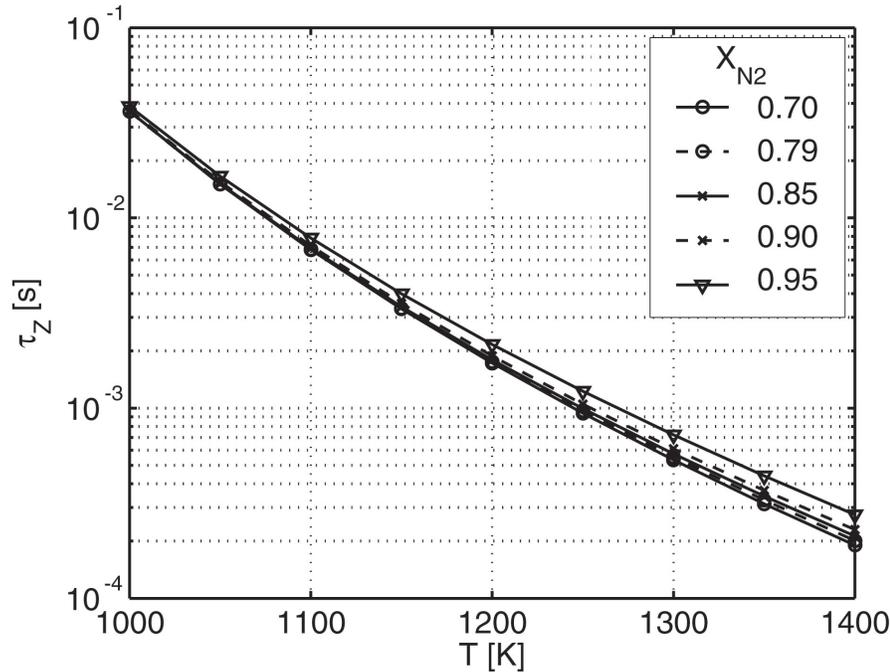
Zündprozess unter Umständen beschleunigend auswirken können.

Der verringerte Sauerstoffanteil im Frischgas bewirkt eine Verzögerung der chemischen Prozesse in doppelter Weise. Zum einen stellt sich bei sonst konstanten Bedingungen ein geringerer Partialdruck des Sauerstoffs sowie des Brennstoffs ein, was gemäß den bekannten Ansätzen aus der Reaktionskinetik zu einer Reduktion der Reaktionsgeschwindigkeiten führt. Zum anderen bewirkt der höhere Inertanteil einen Anstieg des thermischen Ballasts, was zu einer geringeren adiabaten Flammtemperatur führt. Bezüglich der Zündkinetik kann aber davon ausgegangen werden, dass diese durch den erhöhten thermischen Ballast nicht beeinflusst wird, so dass sich der Einfluss des Sauerstoff-Partialdrucks über eine entsprechende Änderung des Systemdrucks abschätzen lässt (vergl. Abb. 3.10). Hierzu zeigt Abb. 3.17 das Verhalten der Zündverzugszeiten bei Variation des Inertanteils. Um den Sauerstoff-Partialdruck konstant zu halten, wird der Systemdruck bei Variation des Inertanteils entsprechend angepasst.

Dem Diagramm in Abb. 3.17 kann entnommen werden, dass sich bei konstantem Partialdruck der Reaktanden eine Veränderung des Inertanteils nur unwesentlich auf die Zündverzugszeiten auswirkt. Insbesondere bei niedrigen Starttemperaturen kann kein Einfluss festgestellt werden. Bei hohen Starttemperaturen ( $T \approx 1400K$ ) lässt sich eine leichte Verlängerung der Zündverzugszeiten erst bei einer Erhöhung des  $N_2$ -Anteils im Frischgas auf  $X_{N_2} = 0,95$  beobachten. Zweistufige Verbrennungsprozesse weisen aber in der Regel Inertanteile mit  $X_{Inert} < 0,9$  auf und liegen damit in einem Bereich, in dem kein signifikanter Einfluss zu erwarten ist.

Durch die Verbrennung in der ersten Brennstufe treten in der Frischluft der zweiten Stufe neben  $N_2$  noch die Reaktionsprodukte  $CO_2$  und  $H_2O$  auf. Da diese aber ebenfalls ein inertes Verhalten aufweisen, wurden diese für die Durchführung der Untersuchung durch  $N_2$  ersetzt.

Des Weiteren bestätigt diese Untersuchung, dass die Zündung im Wesentlichen durch die Geschwindigkeit des Radikalenpoolaufbaus

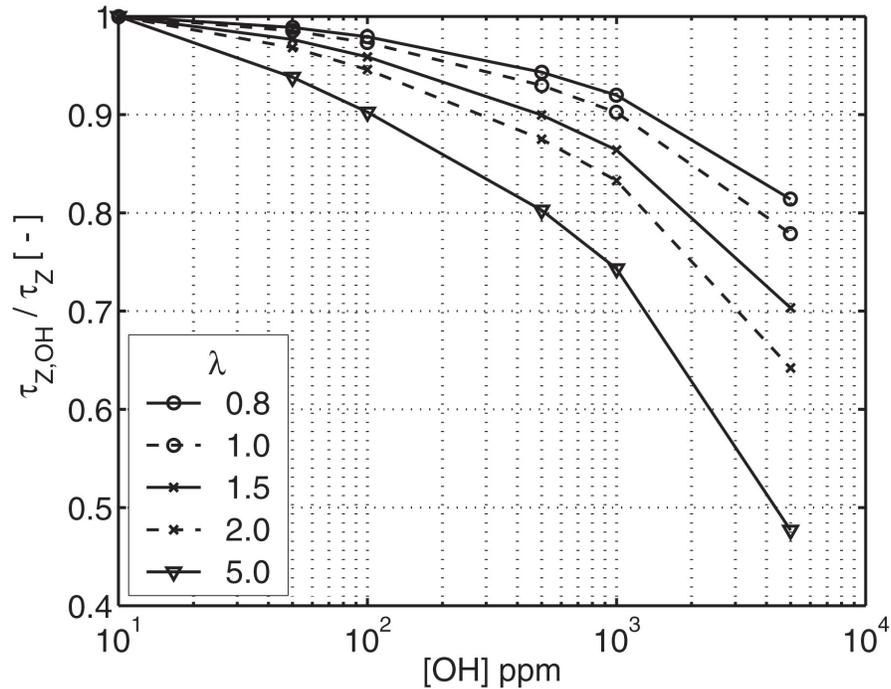


**Abbildung 3.17:** Einfluss des Inertanteils im Frischgas auf die Zündverzugszeiten bei  $\lambda = 2.0$  bei konstantem Partialdruck der Reaktanden.

bestimmt wird. Die zum Ende der Zündung einsetzende Wärme-freisetzung zieht bei Gemischen mit einem höheren Inertanteil eine geringere Temperaturerhöhung nach sich, beeinflusst aber nicht die chemischen Raten während der Induktionsphase.

Die Identifikation der wichtigsten Reaktionspfade zeigt, dass die Oxidation des Brennstoffs durch dessen Reaktion mit OH eingeleitet wird. Aufgrund der Tatsache, dass im Frischgas der Hochtemperaturbrennstufe noch durchaus signifikante OH-Konzentrationen auftreten können, müssen die dabei möglichen Auswirkungen auf die Zündverzugszeiten untersucht werden. Die in Abb. 3.18 gezeigten Ergebnisse zeigen Reaktorberechnungen bei einer Starttemperatur von  $T = 1300$  K sowie einem Druck von  $p = 20$  bar. Zum besseren Vergleich sind die Zündverzugszeiten normiert aufgetragen. Als Normierungsgröße dient die Zündverzugszeit  $\tau_Z$  des Gemisches bei OH-freiem Frischgas.

Aus dem Diagramm kann entnommen werden, dass im Frischgas



**Abbildung 3.18:** Einfluss von OH-Radikalen im Frischgas auf die normierte Zündverzugszeiten bei  $T = 1300$  K und  $p = 20$  bar.

enthaltene OH Radikale die Zündverzugszeiten deutlich reduzieren können. Der Einfluss der OH-Radikale nimmt mit steigender Luftzahl stark zu. Insbesondere im Bereich magerer Zonen muss daher mit einem starken Einfluss gerechnet werden. Von Gutheil [Gut] durchgeführte Berechnungen mit einem einfachen Reaktornetzwerk als Ersatzmodell für die Gasturbine GT 24/26 ergaben, dass typische OH-Konzentrationen am Austritt der ersten Brennstufe je nach Systemdruck typischerweise im Bereich einiger hundert ppm liegen. Allerdings verschiebt sich durch die Entspannung der Abgase in der Hochdruckturbine das Gleichgewicht zur Reaktandenseite, so dass beim Eintritt in die zweite Brennstufe mit einer deutlich geringeren OH-Konzentration gerechnet werden kann. Aufgrund der nur endlich schnellen Kinetik muss diese aber nicht notwendigerweise der OH-Gleichgewichtskonzentration des niedrigeren Druckniveaus entsprechen. Weitere Reaktorsimulationen mit unterschiedlichen Starttemperaturen zeigten für einen Luftzahlbereich von  $0,8 \geq \lambda \geq 2,0$  nur

einen schwachen Einfluss der Temperatur auf die normierten Zündverzugszeiten, so dass von einem nahezu temperaturunabhängigen Faktor ausgegangen werden kann, mit dem sich die Zündverzugszeit bei OH-Radikalen in der Verbrennungsluft reduziert

### 3.1.7 Korrelationen zur Bestimmung der Zündverzugszeiten

Anhand experimenteller Daten und numerischer Reaktorsimulationen haben zahlreiche Forschergruppen Korrelationen zur Berechnung der Zündverzugszeit als Funktion der wichtigsten Einflussgrößen entwickelt. Generell besitzen diese Korrelationen die Form

$$\tau_Z = \frac{1}{A} [CH_4]^a [O_2]^b e^{\frac{E_A}{RT}}, \quad (3.6)$$

die eine deutliche Ähnlichkeit mit der Inversen der Arrhenius-Rate aufweist. In Abhängigkeit des untersuchten Druck- und Temperaturbereichs existieren zahlreiche Parametersätze für die Konstanten  $a$ ,  $b$ ,  $A$  und  $E_A$ . Einen guten Überblick hierüber gibt die Arbeit von Huang et al. [HHBM04], wobei vor allem für die Parameter  $A$  und  $E_A$  eine breite Streuung beobachtet werden kann. Neben den von Huang et al. zusammengefassten Parametersätzen sind noch die Arbeiten von Spadaccini und Colket [SC94] sowie von Lisochkin et al. [LMP04] zu nennen. Spadaccini et al. befassten sich mit der Zündung realer Erdgase verschiedenster Zusammensetzung und erweiterten Gl. (3.6) um einen zusätzlichen Term, in welchem die höheren Kohlenwasserstoffe zusammengefasst sind:

$$\tau_Z = \frac{1}{A} [CH_4]^a [O_2]^b [HC]^c e^{\frac{E_A}{RT}}. \quad (3.7)$$

An dieser Stelle muss auch die Arbeit von Li et al. [LW00b] genannt werden, dem es bemerkenswerterweise gelang, eine Korrelation ausschließlich durch Vereinfachung eines detaillierten Reaktionsmecha-

nismus zu erhalten:

$$\tau_Z = 2,610^{-15} \frac{1}{T_0^{-0,92}} [CH_4]^{1/3} [O_2]^{-4/3} e^{\frac{13180K}{T_0}}. \quad (3.8)$$

Diese Korrelation enthält im Vergleich zu den beiden anderen Gleichungen einen zusätzlichen Term, mit dem die Temperatur ein zweites Mal in die Zündverzugszeit eingeht. Der angegebene Parametersatz besitzt aufgrund der eingeführten Vereinfachungen bei der Reduktion des Reaktionssystems eine Gültigkeit für Starttemperaturen  $T_0 < 1300K$ . Deutlich zeigen die Werte der Parameter  $a$  und  $b$  in Gl. (3.8) auch die zuvor ermittelte Drucksensitivität bzw. Gesamtreaktionsordnung von -1.

Aufgrund der heute zur Verfügung stehenden Rechnerleistung ist es leicht möglich, zur Bestimmung von Zündverzugszeiten Reaktorsimulationen für eine Vielzahl verschiedener Starttemperaturen und Gemischzusammensetzungen durchzuführen und in einer Datenbank abzulegen. Unter Verwendung solcher Datenbanken gelang es Heinz et al. [HBP05] mit genetischen Algorithmen die Parametersätze der Gleichung (3.6) für eingeschränkte Gültigkeitsbereiche genau zu bestimmen.

### 3.1.8 Modelle zur Beschreibung der Selbstzündung und Verbrennung bei nicht vorgemischter Brennerströmung

Schon sehr früh wurden von einigen Forschergruppen gekoppelte Berechnungen des Strömungsfelds und der bei der Zündung ablaufenden chemischen Prozesse durchgeführt. Um einen Überblick über die verschiedenen Modellierungsstrategien zu geben, sollen die wichtigsten Arbeiten auf den folgenden Seiten kurz zusammengefasst werden.

- **Detaillierte chemische Kinetik:** Auch wenn sich global betrachtet die ablaufenden Reaktionen mit einer einzigen Global-

reaktion beschreiben lassen, sind an der Umsetzung der Reaktanden zu Produkten in der Regel mehrere 100 oder gar 1000 Elementarreaktionen beteiligt. Im Wesentlichen ist der Einsatz solcher detaillierter Reaktionsmechanismen auf einfache ein- bzw. zweidimensionale Strömungen beschränkt. Die Berechnung komplexer 3D-Strömungen ist aufgrund der extensiven Anforderungen an die Computerhardware nicht mehr mit vernünftigen Mitteln realisierbar. Zudem wird in der CFD in der Regel eine deutlich gröbere Gitterauflösung als in einer OD- oder 1D-Simulation verwendet. Bei Lösung des steifen chemischen Systems muss daher mit erheblichen numerischen Fehlern gerechnet werden. Zudem kommt hinzu, dass Ansätze zur Modellierung der Turbulenz-Chemie Interaktionen für detaillierte Mechanismen nur sehr schwer zu formulieren sind. Die Faltung der Raten über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (vergl. Kap. 3.2) kann sinnvoll nur noch in einem Post-Prozessing Schritt durchgeführt werden, führt aber aufgrund der vielen Spezies zu nicht mehr handhabbaren Tabellengrößen.

Bi et al. [HB98] verwendet eine detaillierte chemische Kinetik für die Simulation der Zündung in einem mit Erdgas betriebenen Diesel-Motor. Der von Westbrook und Pitz entwickelte Reaktionsmechanismus diente dabei als Basis für die Modellierung. Da das verwendete Testgas nur maximal  $C_2$  Kohlenwasserstoffe enthielt, wurde der Reaktionsmechanismus um die Propan-Reaktionen reduziert. Auch nach der Reduktion setzt sich der Mechanismus aber immer noch aus 125 Reaktionen und 31 Spezies zusammen, was eine sehr detaillierte chemische Betrachtung der Vorgänge ermöglicht. Trotz der sehr hohen Re-Zahl des eintretenden Brennstoffstrahls wurde die Berechnung ohne Berücksichtigung der Turbulenz-Chemie Interaktionen durchgeführt. Da Bi et al. nur eine Parameterstudie der wichtigsten Einflussgrößen durchführte, die Ergebnisse aber nicht mit experimentellen Daten verglich, kann keine Aussage über die Qualität der Modellierung getroffen werden.

Ebenfalls einen detaillierten Reaktionsmechanismus für die

mehrdimensionale Simulation verwendet Agarwal et al. [AA01]. zur Beschreibung der Zündung und Wärmefreisetzung in einem Explosionsbehälter, in welchen über einen Injektor ein kalter Brennstoffstrahl eingedüst wird. Mit über 100 Reaktionsschritten und 22 Spezies handelt es sich aber ebenfalls um eine sehr aufwändige Modellierung. Allerdings gelingt es Agarwal et al. zu zeigen, dass die räumlich aufgelöste Betrachtung der chemischen Prozesse bei nicht-vorgemischten Systemen notwendig ist und eine erheblich bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Daten liefert, als dies bei einer Approximation mit einem einfachen homogenen Reaktormodell der Fall ist.

- **Reduzierte Reaktionsmechanismen:** Da die in Kap. 3.1.5 vorgestellten Reaktionsmechanismen allesamt auf einer sehr detaillierten Beschreibung der chemischen Prozesse beruhen, ist der Einsatz in einer 3D CFD-Simulation nicht praktikabel. In zahlreichen Arbeiten ist daher die Reduktion der Mechanismen unter Annahme von partiellem Gleichgewicht und Quasistationarität (QSA) beschrieben. Hierzu existieren sogar Programmsysteme, die bei der Identifikation derjenigen Spezies, die im partiellen Gleichgewicht sind bzw. für die die Quasistationarität-Annahme gerechtfertigt ist, behilflich sind. Eine sehr große Verbreitung besitzt dabei die CARM (Computed-Assisted Reduction Method) Software [Che97], welche mit Hilfe von PSR (Perfectly Stirred Reactor) Berechnungen die Identifikation signifikanter Reaktionsschritte erreicht. Anhand der gewonnenen Informationen lässt sich ein Reaktionsmechanismus entwickeln, der die QSA-Spezies nicht mehr explizit enthält.

Im Gegensatz zu den später erläuterten Globalkinetiken, die teilweise auch über Annahmen von partiellem Gleichgewicht und Quasistationarität aus umfangreicheren Mechanismen gewonnen werden, existiert bei den reduzierten Mechanismen weiterhin die Möglichkeit, die Konzentration der eliminierten Spezies über ein System algebraischer Gleichungen als Funktion der Zusammensetzung zu bestimmen. Dies ist auch für die Berech-

nung der Bildungsraten der verbleibenden Spezies notwendig. Die Lösung des Gleichungssystems ist aufgrund der meist nicht-linearen Kopplung der Bestimmungsgleichungen und dem damit bedingten Einsatz numerischer Methoden sehr aufwändig. Da der reduzierte Mechanismus sämtliche Reaktionen des Originalmechanismus zumindest implizit enthält, erübrigt sich bei der Verwendung von CARM im Gegensatz zu anderen Reduktionsmethoden (z.B. Globalkinetiken) die Neubestimmung der Reaktionsparameter.

Speziell für die Kinetik im Regime der Selbstzündung vereinfachten Sung et al. [SLC98] den GRI1.2 Reaktionsmechanismus mit Hilfe von CARM. Mit dem in [SLC98] beschriebenen reduzierten 12-Schritt Mechanismus kann nicht nur für Zündverzugszeiten, sondern auch für Flammgeschwindigkeiten über einen weiten Temperaturbereich eine gute Übereinstimmung mit dem Originalmechanismus (GRI 1.2) festgestellt werden. Neben der Reduktion auf 12 Reaktionsschritte beschreiben Sung et al. auch weitere reduzierte Reaktionsmechanismen mit 10 und 4 Reaktionsschritten. Während mit der 10-Schritt Kinetik eine Vorhersage der Zündverzugszeiten sinnvoll erscheint, ergeben sich für die mit dem 4-Schritt Mechanismus bestimmten Zündverzugszeiten Abweichungen von ein bis zwei Größenordnungen. Zusätzliche Validierungsrechnungen, bei denen neben dem Vergleich der Zündverzugszeiten auch die Übereinstimmung der Speziesprofile untersucht wurden, sind in [SLC00] zu finden. Während die Konzentrationsverläufe der Hauptspezies mit einer guten Übereinstimmung zum Originalmechanismus wiedergegeben werden können, ergeben sich bei der Vorhersage der Zwischenprodukte mitunter erhebliche Abweichungen.

Nachteilig bei der Verwendung reduzierter Reaktionsmechanismen ist, dass zur Berechnung der Konzentrationen der QSA-Spezies ein nicht-lineares Gleichungssystem gelöst werden muss. Dies erfordert aber den Einsatz aufwändiger numerischer Verfahren.

- **Global-Kinetiken:** Im Gegensatz zu reduzierten Reaktionsmechanismen können Reaktionsraten bei Global-Kinetiken wie auch bei detaillierten Reaktionsmechanismen direkt über den Arrhenius-Ansatz bestimmt werden. Die Lösung aufwändiger Gleichungssysteme für die Bestimmung der nicht über Differentialgleichungen bestimmten Spezieskonzentrationen (vergl. QSA-Spezies) ist bei Einsatz von Globalkinetiken nicht notwendig. Zum einen werden bei der Entwicklung von Global-Kinetiken ebenfalls Annahmen über Quasistationarität oder partiellem Gleichgewicht getroffen, zum anderen werden Globalmechanismen auch intuitiv entwickelt. Während detaillierte Reaktionsmechanismen Gültigkeit über einen weiten Bereich der Einflussgrößen besitzen, ist bei Verwendung von Global-Kinetiken darauf zu achten, für welchen Bereich mit einer zuverlässigen Bestimmung der Reaktionsraten gerechnet werden kann.

Zur Berechnung der Reaktionsraten der Globalreaktionen können die gleichen Ansätze wie für Elementarreaktionen verwendet werden. Allerdings stehen die Koeffizienten  $a$  und  $b$  in Gl. (3.1) nicht mehr in direktem Zusammenhang mit den stöchiometrischen Koeffizienten und können daher so eingestellt werden, dass sich eine möglichst gute Übereinstimmung zwischen den Ergebnissen des detaillierten Reaktionsmechanismus und dem Globalmechanismus ergibt [WD81]. Für die Berechnung turbulenter vorgemischter Flammen ist u.a. ein Koeffizientensatz von Westbrook und Dryer [WD81] bekannt. Auch Polifke et al. [PGD98] entwickelten eine Methode zur Anpassung der Koeffizienten. Mit Hilfe eines genetischen Optimierungsalgorithmus passten Polifke et al. die Koeffizienten so an, dass sich eine möglichst gute Übereinstimmung der Reaktionsraten des Globalmechanismus mit denen eines detaillierten Reaktionsmechanismus ergibt. Ein anschließender Vergleich von mit dem detaillierten und dem Globalmechanismus berechneten Flammgeschwindigkeiten zeigt viel versprechende Ergebnisse.

Bei Globalkinetiken kann aufgrund der sehr starken Vereinfachung

chung der tatsächlich ablaufenden chemischen Reaktionen nicht damit gerechnet werden, dass sich die gleiche Kinetik für die Berechnung vorgemischter Flammen als auch der Selbstzündung eignet. Speziell für das Verbrennungsregime oberhalb der Zündtemperatur optimierte Heinz et al. [HBP05] mit Hilfe eines genetischen Algorithmus die Reaktionsparameter der gängigen 2-Schritt Kinetik mit CO als Zwischenspezies. Im Vergleich mit einem detaillierten Reaktionsmechanismus ergibt sich trotz der sehr einfachen Formulierung des Reaktionssystems auch für Temperaturen unter- bzw. oberhalb des Designpunktes eine recht gute Übereinstimmung der Zündverzugszeiten. Allerdings ist das Reaktionsmodell nicht zur Vorhersage der Konzentrationen in der Flamme geeignet, insbesondere bei der Berechnung der CO-Konzentration ergeben sich große Abweichungen zum detaillierten Mechanismus.

Aufgrund des großen Interesses aus dem Bereich der innermotorischen Verbrennung existieren zahlreiche Reaktionsmechanismen für die Beschreibung der Zündung höherer Kohlenwasserstoffe. Das von Halstead et al. [HKQ77] entwickelte Shell-Modell setzt sich aus 8 Reaktionen und 6 Spezies zusammen. Bei den Zwischenprodukten werden keine real existierenden Spezies verwendet, sondern Spezies mit ähnlichen Eigenschaften zu einer repräsentativen Gruppe zusammengefasst. Die Reaktionsparameter müssen entsprechend dem verwendeten Brennstoff angepasst werden; allerdings ist derzeit kein Parametersatz für Methan bekannt. Speziell für die Oxidation von n-Heptan entwickelte Müller [Mül93] durch intuitive Vereinfachung eines bereits reduzierten Reaktionsmechanismus eine 4-Schritt-Kinetik. Auch hier ist eine Anpassung der Reaktionsparameter durchzuführen, so dass sich eine möglichst gute Übereinstimmung mit experimentellen Werten ergibt. Bemerkenswert ist, dass das Modell trotz der starken Vereinfachung die bei höheren Kohlenwasserstoffen im Bereich niedriger Temperaturen auftretende Zweistufenzündung richtig wiedergibt.

Ein Problem bei der Verwendung von Globalkinetiken ist, dass

Reaktionsmechanismen zwar für unterschiedliche Brennstoffe zur Verfügung stehen, Brennstoffgemische aber in der Regel nicht berücksichtigt werden können. Das Verhalten realer Erdgase wird aber signifikant durch Bestandteile höherer Kohlenwasserstoffe beeinflusst. Denkbar wären zwar die Bildung eines individuellen Ersatzbrennstoffs und die Anpassung der Reaktionsparameter; da aber bei der Anpassung der Reaktionsparameter gleichzeitig eine Vielzahl von Parametern (schon bei einer 2-Schritt-Kinetik sind es 10 Parameter) optimiert werden müssen, sind hierfür aufwändige Optimierungswerkzeuge notwendig.

- **Ein-Schritt-Kinetik:** An einer turbulenten Mischungsschicht führte Mastorakos [MBP97] et al. eine DNS zur Untersuchung der bei der Zündung ablaufenden Prozesse durch. Die Berechnungen ergaben, dass eine Zündung vornehmlich in Gebieten auftritt, in denen der Mischungsbruch einen bestimmten Wert  $f = f_{MR}$  (MR: Most Reactive) einnimmt und lokale Wärmeverluste aufgrund kleiner Dissipationsraten gering sind.

Einfache 0D-Reaktorsimulationen zeigen bei Verwendung der 1-Schritt-Kinetik ebenfalls minimale Zündverzugszeiten, wenn für den Mischungsbruch  $f$  der Wert  $f = f_{MR}$  gewählt wird. Während geringe Brennstoffkonzentrationen bei mageren Mischungen zu längeren Zündverzugszeiten führen, limitiert bei der Zündung fetterer Gemische die sich durch Mischung des kalten Brennstoffs mit heißer Luft ergebende niedrigere Temperatur die Reaktionskinetik.

Auf Basis der durchgeführten DNS entwickelten Mastorakos et al. [MCBP97] ein Modell für die Zündung turbulenter, nicht-vorgemischter Brennstoff-Luft Systeme. Dieses Modell beruht auf der Annahme, dass Zündung nur in Gebieten auftritt, in denen der Mischungsbruch  $f$  den Wert  $f = f_{MR}$  annimmt. Zur Modellierung der Turbulenz-Chemie Interaktionen berücksichtigt das Modell zusätzlich den Einfluss der Temperatur- und Dissipationsfluktuationen auf die Wärmefreisetzung. Für die in den Gleichungen auftretenden Korrelationen zwischen

den Temperatur- und Dissipationsratenfluktuationen werden aus den DNS-Daten einfache Näherungen bestimmt. Ob diese einen allgemeingültigen Charakter aufweisen, ist aber zunächst noch an weiteren Konfigurationen zu verifizieren.

Problematisch an der geschilderten Modellierungsstrategie ist, dass die chemischen Prozesse durch den Einsatz einer 1-Schritt-Kinetik sehr stark vereinfacht werden. Um ein weniger steifes Gleichungssystem zu erhalten, verwendet Matorakos entgegen den Empfehlungen von Westbrook und Dryer [WD81] eine geringere Aktivierungsenergie. Eigene Berechnungen mit einem detaillierten Reaktionsmechanismus zeigen aber, dass der Verlauf der Zündverzugszeit als Funktion des Mischungsbruchs kein klares Minimum aufweist, wie dies bei der von Mastorakos verwendeten 1-Schritt-Kinetik der Fall ist. Der Mischungsbruch  $f_{MR}$  lässt sich daher nur schwer und ungenau bestimmen.

- **Lineares Zündfortschrittsmodell:** Wakisaka et al. [WKN<sup>+</sup>01] sowie Hesselt [Hes98] bauen unabhängig voneinander die schon in den 50er Jahren von Livengood und Wu [LW55] gemachten Überlegungen zur Vorhersage des Motorklopfens zu einem CFD-Modell aus. Livengood und Wu postulierten, dass Klopfen bzw. Selbstzündung dann auftritt, wenn sich

$$1 = \int_{t=0}^{t=t_Z} \frac{dt}{\tau_Z} \quad (3.9)$$

einstellt. Durch Integration einer für den momentanen Zustand repräsentativen Zündverzugszeit  $\tau_Z$  über die Zeit berechneten sie die Zeit  $t_Z$ , nach der sich das Gemisch im Zylinder selbst entzündet. Dabei wird angenommen, dass der Zündfortschritt linear mit der Zeit ansteigt, d.h. dass die Reaktionsrate während der Induktionsphase nur von den „äußeren“ Parametern (z.B. Temperatur, Druck, etc.) abhängt und nicht vom Zündfortschritt selber.

Während Livengood und Wu die Berechnungen mit den räumlich gemittelten Daten für Temperatur und Druck durchführten, fand in den neueren Arbeiten eine Erweiterung auf ein räumlich aufgelöstes Modell statt. Hesselt löst hierzu eine Transportgleichung für eine so genannte Indikatorspezies  $I$ , deren Quellterm dem Inversen der lokalen Zündverzugszeit entspricht. Erreicht die Indikatorspezies den Wert  $I = 1$ , so zeigt dies die Selbstzündung des Gemisches an. Mit Hilfe eines weiteren Modells für die Wärmefreisetzung lässt sich der daraufhin anschließende Verbrennungsprozess beschreiben. Auch diesem Modell liegt die berechnete Annahme zugrunde, dass während der Induktionsphase weder Wärme freigesetzt noch Brennstoff bzw. Oxidator verbraucht wird.

Die eingehenden Zündverzugszeiten lassen sich als Funktion der Einflussgrößen (vergl. Kap. 3.1.6) entweder über Korrelationen (z.B. [SC94]) oder durch Reaktorsimulationen und anschließende Tabulierung der ermittelten Zeiten bestimmen. Aufgrund der einfachen Formulierung des Modells muss nur eine zusätzliche passive Transportgröße, die Indikatorspezies  $I$ , berechnet werden. Ferner ermöglichen detaillierte Reaktionsmechanismen nicht nur die Berechnung der Zündverzugszeiten als Funktion von Druck und Temperatur, sondern auch die Berücksichtigung der genauen Zusammensetzung des Brennstoffs. Aufgrund der Möglichkeit, die Berechnungen von Strömungsfeld und chemischen Zeitmaßen (hier Zündverzugszeiten) zu entkoppeln, können diese ohne einen großen Verlust an Performance mit einem sehr umfangreichen Reaktionsmechanismus bestimmt werden. Daraus ergibt sich ein großer Vorteil im Vergleich zu anderen Modellformulierungen.

Hesselt [Hes98] verwendet die vorgestellte Modellformulierung zur Berechnung der Zündung in einem Dieselmotor mit Direkteinspritzung. Zur Modellierung der an die Zündung anschließenden Wärmefreisetzung verwendet sie ein Flamelet-Modell, welches mit dem Zündmodell gekoppelt ist. Vergleiche der berechneten Zylinderdruckverläufe mit experimentellen Daten zei-

gen eine sehr gute Übereinstimmung. Weitere mit deutlich aufwändigeren Modellen, wie z.B. dem Shell-Modell durchgeführte Berechnungen weisen bei der Bestimmung des Zündzeitpunktes hingegen größere Abweichungen auf.

Eine im vorliegenden Fall notwendige Berücksichtigung der Turbulenz-Chemie Interaktionen ließe sich durch Faltung der Zündverzugszeit über die PDF der wichtigsten Einflussgrößen realisieren.

- **Radikalenpool und ILDM:** Correa et al. [CSW01] verwendet zur Repräsentation des Radikalenpools den CO-Massenbruch. CO liegt während der Induktionsphase in äußerst geringen Konzentrationen vor. Die Zündung und anschließende Wärmefreisetzung ist aber durch einen explosionsartigen Anstieg der CO-Konzentrationen gekennzeichnet. Mit Hilfe eines detaillierten Reaktionsmechanismus lässt sich die CO-Bildungsrate als Funktion lokaler Größen, wie Druck, Temperatur, Mischungsbruch und CO-Konzentration in 0D-Reaktorsimulationen bestimmen. Die Turbulenz-Chemie Kopplung wird über die Faltung der Reaktionsrate über die PDF des Mischungsbruches, der Temperatur und des CO-Massenbruches erreicht. Aufgrund fehlender Modellierungsansätze für die Verbundwahrscheinlichkeitsdichte (jPDF) muss aber statistische Unabhängigkeit zwischen den ratenbestimmenden Größen vorausgesetzt werden, so dass sich die jPDF als Produkt der einzelnen PDFs schreiben lässt.

Im Anschluss an die Zündung wird für die Bestimmung der Reaktionsraten während der Wärmefreisetzung die ILDM-Methode (**I**ntrinsic **L**ow-**D**imensional **M**anifold) [MP92] eingesetzt. Diese ermöglicht die automatische Reduktion eines detaillierten Reaktionsmechanismus auf eine beliebige Anzahl von Reaktionsfortschrittsvariablen (hier CO<sub>2</sub>) und die a priori Tabulierung der Raten und Zustandsvariablen. Zur Erweiterung der ILDM-Methode auf turbulente Strömung werden die mittleren Größen durch Faltung der laminaren Größen über eine PDF bestimmt.

Vergleiche mit experimentellen Daten zeigen für die berechneten Zylinderdruckverläufe eine gute Übereinstimmung. Prinzipiell lässt sich das Modell auch für die Vorhersage der Zündung in Methan-Luft Gemischen verwenden, allerdings muss damit gerechnet werden, dass wegen des numerisch ungünstigen Verhaltens von CO mit numerischen Fehlern zu rechnen ist. Die geringe CO-Konzentration während der Induktionsphase kann aufgrund numerischer Ungenauigkeiten leicht zu einer fehlerhaften Berechnung des Zündfortschritts führen. Dies wird noch dadurch verstärkt, dass die lokale CO-Konzentration in die Bestimmung der CO-Bildungsrate eingeht, so dass kleine Variationen bzw. Fehler bei der Berechnung des CO-Massenbruches während der CFD Simulation zu großen Fehlern bei der Bestimmung des Zündzeitpunktes führen können. Anhand Abb. 3.3 lässt sich dies leicht nachvollziehen. Des Weiteren erscheint die korrekte Abbildung der hohen CO-Bildungsrate bei Zündung innerhalb einer CFD Simulation mit der in der Regel zur Verfügung stehenden Gitterauflösung problematisch.

- **Gleichgewichtschemie mit Mischungsbruch-PDF:** Ishii et al. [IZS98] verwendet für die Modellierung der Verbrennung in einem Industrieofen einen einfachen Flamelet-Ansatz, wie er auch bei der Berechnung turbulenter Diffusionsflammen zu Anwendung kommt. Obwohl die Vorheiztemperatur mit ca. 1500 K schon weit oberhalb der Zündtemperatur liegt, werden die Zustandsgrößen als Funktion des Brennstoff-Mischungsbruchs unter Annahme eines chemischen Gleichgewichts berechnet. Turbulenz-Chemie Interaktionen wird mit einem PDF-Ansatz Rechnung getragen.

Da bei diesem Modell keinerlei Kinetik enthalten ist, die chemischen Prozesse im Bereich der Selbstzündung aber sehr stark durch die Kinetik determiniert werden, kann mit diesem Ansatz nur sehr bedingt eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Daten erwartet werden. Zwar zeigen die mit der Simulation ermittelten Materialtemperaturen eine sehr gute Über-

einstimmung mit dem Experiment; die örtlich aufgelösten Gas-temperaturen weisen aber signifikante Abweichungen auf.

Die gleiche Modellierungsstrategie wird auch von Orsino et al. [OWB01] für die Berechnung einer zweistufigen Verbrennung eingesetzt. Da für den untersuchten Ofen detaillierte experimentelle Daten vorliegen, kann ein genauer Vergleich der Temperaturen und Spezieskonzentrationen stattfinden. Insbesondere im Bereich der Reaktionszone ergeben sich zwischen den numerisch und experimentell ermittelten Temperaturen erhebliche Abweichungen von mehreren 100 K. Auch ein Vergleich der Profile des Zwischenproduktes CO zeigt auf, dass die Flammposition mit dem eingesetzten Modell nicht korrekt bestimmt werden kann.

Bruel et al. [BRB90] merkt in seiner Arbeit bezüglich des Einsatzes eines laminaren Flamelet-Modells für die Beschreibung der Selbstzündung in nicht-vorgemischten Systemen an, dass die laminaren Zündverzugszeiten kleiner als die Mischzeiten sein müssen.

- **Representative Interactive Flamelet (RIF):** Pitsch [Pit98] und Hasse et al. [HP03] verwenden zur Beschreibung der Zündung und Verbrennung das von Peters entwickelte RIF-Modell, welches bereits auch in kommerziellen Strömungslösern (z.B. CFX) implementiert wurde. Bei der Eindüsung des Brennstoffs in den Brennraum lässt sich entlang des Strahls ein Abfall der Dissipationsrate feststellen. Mauß et al. [MKP90] konnte mit Hilfe instationärer Flamelets zeigen, dass sich bei schneller Variation der Dissipationsrate erst nach einer Verzögerung der neue Gleichgewichtszustand einstellt. Aus diesem Grunde basiert die Formulierung des RIF-Modells auf den instationären Flamelet-Gleichungen, die, um eine aufwändige Tabulierung zu vermeiden, interaktiv während der Lösung des Strömungsfeldes berechnet werden. Zur Reduktion des Rechenaufwands findet eine räumliche Mittelung der Flamelet-Parameter über einzelne Teilgebiete statt. Diese sind für das entsprechende Teilgebiet repräsentativ und werden dem Flamelet-Löser zur Berechnung

der Zustandsgrößen übergeben. Dabei ist die Größe der Teilgebiete so anzupassen, dass die Flamelet-Parameter noch mit ausreichender Genauigkeit bestimmt werden können. Ähnlich der Standard-Flamelet-Formulierung wird zur Ermittlung der mittleren Zustandsgrößen eine Faltung über die Mischungsbruch-PDF durchgeführt.

Die Verwendung des RIF-Modell erfordert die instationäre Berechnung der Strömung. Zwar lassen sich auch stationäre Probleme mit Hilfe eines instationären Löser berechnen, allerdings müssen dabei erheblich längere Rechenzeiten als bei der stationären Lösung in Kauf genommen werden.

- **Eddy-Breakup-Modell:** Neben dem obig beschriebenen PDF Modell führte Orsino et al. [OWB01] noch Berechnungen mit dem Eddy-Breakup-Modell (EBU) (vergl. Kap. 3.2) durch. Da die Modellformulierung aber auf der Annahme beruht, dass sich die Reaktionsgeschwindigkeit durch die Mischungsrate bestimmen lässt, kann der Einfluss der Kinetik nicht berücksichtigt werden. Der Einfluss der Temperatur sowie der Erdgaszusammensetzung auf die Selbstzündkinetik lässt sich daher mit diesem einfachen Modell nicht adäquat erfassen. Ein Vergleich der experimentell und numerisch ermittelten Temperaturprofile zeigen ähnlich große Abweichungen wie bei Verwendung der Gleichgewichtschemie mit PDF-Ansatz.

Das EBU-Modell enthält zwei Modellparameter, über die sich die Reaktionsraten beeinflussen lassen. Während mit dem einen Parameter Reaktionen in Bereichen niedriger Temperaturen unterdrückt werden können, lässt sich mit dem zweiten Modellparameter die Verbrauchsrate des Brennstoffs einstellen. Da bei der Berechnung der Verbrennung in Gemischen mit einer Temperatur oberhalb der Zündgrenze nicht mit einer Limitierung aufgrund der Temperatur gerechnet werden muss, kann der Einfluss des ersten Parameters vernachlässigt werden. Zahlreiche experimentelle Arbeiten [Gup00] postulieren, dass bei der Hochtemperaturverbrennung die chemischen Prozesse aufgrund

der geringeren Sauerstoffkonzentration im Frischgas langsamer als bei herkömmlicher Verbrennungsführung ablaufen, was eine Anpassung des zweiten Parameters nahe legt. Weihong et al. [WB] führt daher bei seinen Berechnungen eine Variation des zweiten Parameters durch und erreicht damit eine qualitativ gute Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment. Da für die Bewertungen der Modelle nur Vergleiche der Simulationsergebnisse mit Flammfotographien vorliegen, können keine weiteren quantitativen Aussagen über die Genauigkeit getroffen werden.

In der obigen Beschreibung der Modelle wurde bereits eine Bewertung der Ansätze durchgeführt. Die Diskussion soll mit einer kurzen Zusammenfassung, insbesondere unter Berücksichtigung der Eingangs definierten Anforderungen an das zu entwickelnde Modell, schließen.

Ziel der Arbeit ist die Entwicklung eines Modells für die Berechnung der Verbrennung bei Vorheiztemperaturen oberhalb der Zündtemperatur. Aufgrund der hohen Re-Zahlen im Brenner muss mit starken Turbulenz-Chemie Interaktionen gerechnet werden. Da kalter Brennstoff in das heiße Abgas der ersten Verbrennungsstufe eingedüst wird, ist die Berücksichtigung der Temperaturfluktuationen von besonderem Interesse. Neben dem Einsatz bei der Bewertung verschiedener Brennerkonfigurationen während der Entwicklungsphase soll das zu formulierende Modell dazu verwendet werden, den Einfluss der Brennstoffzusammensetzung (Gasqualität) auf die Flammposition zu ermitteln.

Detaillierte und reduzierte Reaktionsmechanismen enthalten zwar (zumindest teilweise) neben den Reaktionen für die Oxidation von Methan auch Untermechanismen für höhere Kohlenwasserstoffe, kommen aber aufgrund des großen Rechenaufwandes für das zu formulierende Modell nicht in Frage. Die bedeutend einfacher zu handhabenden Global-Kinetiken sind in der Regel nur in der Lage, die Oxidation reiner Kohlenwasserstoffe wiederzugeben. Gemische ver-

schiedener Kohlenwasserstoffe können nur durch Anpassung der Reaktionsparameter berücksichtigt werden. Zudem ergeben sich bei einer Veränderung der Temperatur unter Umständen große Abweichungen, wenn der Gültigkeitsbereich des Parametersatzes verlassen wird. Dies erfordert die sehr aufwändige Neubestimmung der Reaktionsparameter, was den Einsatz bedeutend verkompliziert. Turbulenz-Chemie Interaktionen können zwar über einen PDF-Ansatz berücksichtigt werden, die Berechnung der mittleren Raten während der Lösung des Strömungsfelds verlängert aber die Rechenzeiten erheblich.

Ein-Schritt-Kinetiken stellen eine weitere Vereinfachung der beschriebenen Global-Kinetiken dar und enthalten daher noch weniger Informationen über die in der Realität ablaufenden Prozesse, was bei der Berechnung der Selbstzündung in realen Erdgasen ebenfalls eine Anpassung der Reaktionsparameter an die jeweilige Erdgaszusammensetzung erfordert.

Die Beschreibung mittels Gleichgewichtschemie und Mischungsbruch-PDF stellt für den vorliegenden Fall eine nicht zulässige Vereinfachung da. Zudem lassen sich die Einflüsse der Erdgasbestandteile auf die Zündkinetik nicht berücksichtigen, da das Modell auf der Annahme einer unendlich schnellen Chemie beruht. Da das RIF-Modell instationäre Flamelets verwendet, kann es die chemische Kinetik berücksichtigen. Es stellt aber für die Beschreibung der Verbrennung in Gasturbinenbrennern wegen des Einsatzes einiger weniger repräsentativer Flamelets für den gesamten Brenner eine starke Vereinfachung da. Da die Flamelet-Gleichungen parallel zu den Strömungsgleichungen gelöst werden, muss zudem mit einer erheblichen Verlängerung der Rechenzeit gerechnet werden.

Auch das EBU-Modell bietet keine Möglichkeit, der individuellen Erdgaszusammensetzung und damit den stark unterschiedlichen Reaktionsraten Rechnung zu tragen. Reaktionsraten werden beim EBU-Modell ausschließlich über die Mischungsgeschwindigkeiten vorgegeben.

Das lineare Zündfortschrittmodell stellt aufgrund seiner einfachen Formulierung einen sehr effektiven Modellansatz dar. Da es möglich ist, Zündverzugszeiten entkoppelt von der CFD-Simulation zu berechnen, können diese mit einem sehr detaillierten Reaktionsmechanismus unter Berücksichtigung der genauen Brennstoffzusammensetzung bestimmt werden. Wie später in Kap. 4.2 gezeigt, stellt die Linearisierung des Zündfortschritts allerdings eine starke Vereinfachung der realen Prozesse dar. Eine Verbesserung kann durch Verwendung einer realen Spezies als Zündfortschrittsindikator erreicht werden. Correa et al. [CSW01] verfolgt bei seinem Radikalenpool-Modell diesen Ansatz, verwendet aber als Repräsentant des Radikalenpools CO. Während der Induktionsphase liegt CO nur in sehr geringen Konzentrationen vor; hingegen steigt die CO-Konzentration zu Beginn der Wärmefreisetzung um mehrere Größenordnungen an. Dies kann schon bei geringen numerischen Ungenauigkeiten leicht zu erheblichen Fehlern bei der Reaktivität führen. Das in Kap. 4.2 neu formulierte Zündmodell kann damit als eine Verbesserung des linearen Zündfortschrittmodells bzw. des Radikalenpoolansatzes von Correa et al. angesehen werden.

## 3.2 Modelle zur Beschreibung der Turbulenz-Chemie Interaktionen

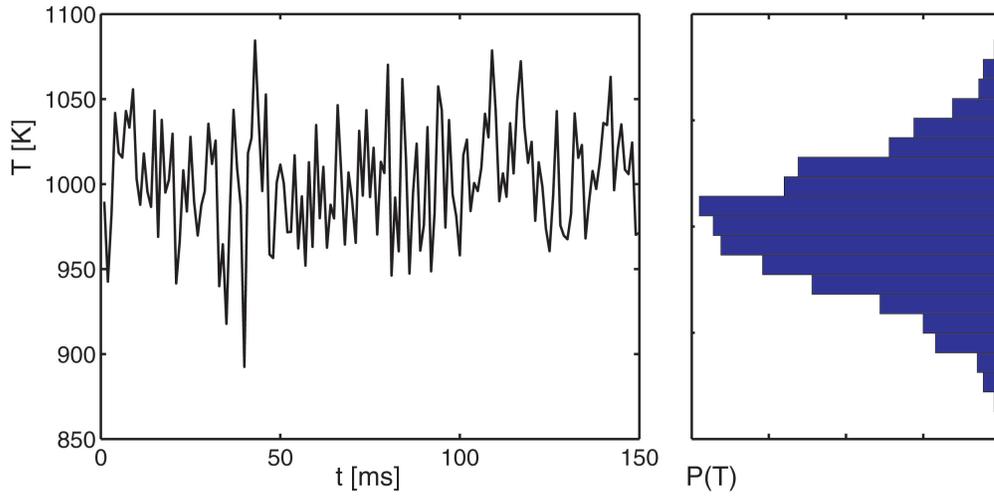
Die folgenden Abschnitte erläutern zunächst anhand eines einfachen Beispiels, wieso Turbulenz-Chemie-Interaktionen in turbulenten reaktiven Systemen zu berücksichtigen sind. Dieser Darstellung folgt im Anschluss eine kurze Übersicht über den derzeitigen Entwicklungsstand der Ansätze für die Turbulenz-Chemie Interaktionen.

### 3.2.1 Die Notwendigkeit von Modellen zur Berücksichtigung der Turbulenz-Chemie Interaktionen

Wie in Kap. 2 erwähnt, sind bei einer turbulenten Strömung die beschreibenden Größen (Geschwindigkeit, Druck, Mischungsbrüche, etc.) nicht konstant, sondern fluktuieren mehr oder weniger stark. Selbst bei einer statistisch stationären Strömung schwanken die momentanen Strömungsgrößen um einen Mittelwert. Im Falle einer RANS Rechnung sind diese Schwankungen aber nicht explizit Teil der Lösung und müssen mit geeigneten Modellen bestimmt werden. Generell ist der instantane Wert einer statistisch stationären Strömung nicht von Interesse, so dass in der Regel die Berechnung der ersten statistischen Momente ausreichend ist. Abbildung 3.19 zeigt den Temperaturverlauf, wie er sich für einen so genannten Gauss'schen Prozesses ergibt. Die rechts neben dem Momentanverlauf gezeigte PDF der Temperatur besitzt erwartungsgemäß die für den gewählten Prozess typische Form einer Gauss-Verteilung.

Während der zeitliche Mittelwert des gezeigten Verlaufs konstant ist, sind die Momentanwerte starken Schwankungen von bis zu  $\pm 80K$  unterworfen. Unter Zuhilfenahme einer einfachen Korrelation für die Zündverzugszeit [SC94]

$$\tau_Z \propto \exp(22500K/T_0) \quad (3.10)$$



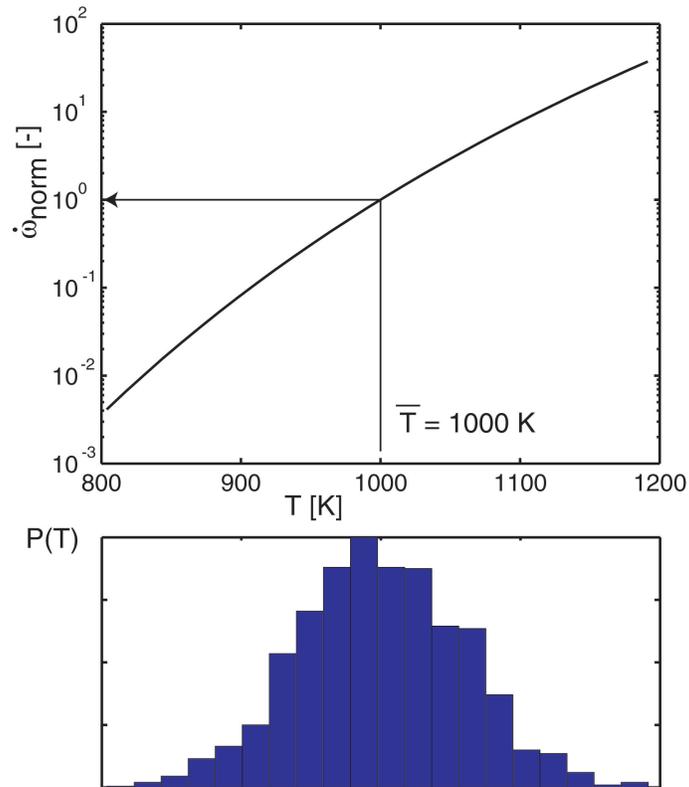
**Abbildung 3.19:** Temperaturverlauf und Verteilungsfunktion eines Gauss'schen Prozesses

lässt sich zeigen, wie stark bereits Schwankungen dieser Größenordnung die Reaktionsraten beeinflussen können. Hierzu ist in Abb. 3.20 der Verlauf der Reaktionsrate, die sich in dem hier dargestellten Fall über die inverse Zündverzugszeit bestimmt, als Funktion der Temperatur aufgetragen.

Um eine bessere Vergleichsmöglichkeit zu erreichen, ist der Verlauf mit der Reaktionsrate bei  $T = 1000K$  normiert aufgetragen. Unterhalb der Reaktionsrate befindet sich die Verteilung  $P(T)$  aus Abb. 3.19. Die mittlere Reaktionsrate  $\bar{\omega}_N$  bestimmt sich formal durch Faltung der Reaktionsrate  $\omega_N$  über die gezeigte Temperatur-PDF  $P(T)$ :

$$\bar{\omega}_N = \int_{T_{min}}^{T_{max}} \omega_N(T) P(T) dT \quad (3.11)$$

und beträgt für den hier gezeigten Fall  $\bar{\omega}_N \approx 2.1$ . Wird hingegen die mittlere Temperatur  $\bar{T} = 1000K$  zur Berechnung der Reaktionsrate verwendet, so ergibt sich lediglich eine Reaktionsrate von  $\bar{\omega}_N = 1.0$ , was einer Abweichung von über 50 % entspricht. Diese Abweichung resultiert aus der starken Nichtlinearität der Reaktionsrate bezüglich der Temperatur. Ähnliche Abhängigkeiten existieren auch hinsicht-



**Abbildung 3.20:** Einfluss der Temperaturverteilung auf die mittlere Reaktionsrate.

lich der Massenbrüche bzw. Konzentrationen der an der Reaktion beteiligten Spezies, so dass es sich in der Regel bei der zu berücksichtigenden PDF um eine multivariate Verteilungsfunktion (jointPDF)  $P(T, Y_i, \dots)$  handelt.

### 3.2.2 Bestimmung mittlerer Reaktionsraten

Für die Bestimmung mittlerer Reaktionsraten in turbulenten Strömungen existieren grundsätzlich verschiedene Ansätze. Eine Auswahl davon soll im Folgenden kurz erläutert werden. Einige der üblichen Ansätze wurden bereits schon in Kap. 3.1.8 diskutiert. Der Vollständigkeit wegen werden diese hier nochmals kurz wiederholt.

- **PDF bzw. Faltungsansätze:** Bei den PDF-Modellen wird die mittlere Reaktionsrate formal durch Faltung über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF) berechnet. Dieser Ansatz lässt sich aus der Definition des Mittelwertes einer beliebigen Funktion  $Q(x)$  ableiten:

$$\bar{Q} = \int_{-\infty}^{\infty} Q(\vec{x})P(\vec{x})d\vec{x}. \quad (3.12)$$

Die Funktion  $Q(\vec{x})$  kann z.B. eine über den Arrhenius-Ansatz berechnete Reaktionsrate der Eingangsgrößen  $\vec{x} = (T, Y_1, Y_2, \dots)$  sein; für  $P(\vec{x})$  ist eine geeignete Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zu wählen. Diese Methode ist ohne Einschränkungen immer gültig, da sie auf einer mathematischen Definition beruht und daher im eigentlichen Sinne kein Modell ist. Turbulente Fluktuationen der Temperatur und der Zusammensetzung können adäquat berücksichtigt werden, wenn sie in der PDF enthalten sind.

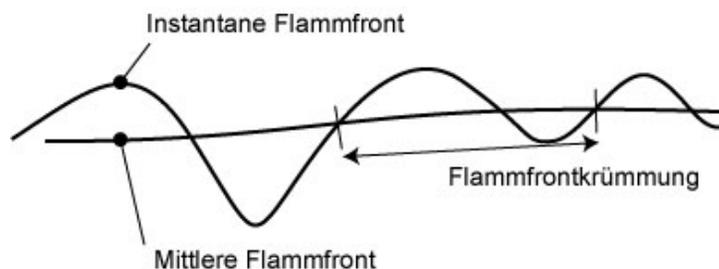
- **Wirbelzerfallsmodelle:** Einer der bekanntesten Vertreter dieser Klasse von Schließungsmodellen ist das EBU Modell (Eddy Break Up Modell). Gemäß Spalding [Spa71] wird zur Herleitung die Turbulenz als eine Überlagerung von Wirbeln unterschiedlicher Größe und Intensität betrachtet. Großskalige Wirbel beziehen ihre Energie aus der Hauptströmung und zerfallen kaskadenförmig in immer kleinere Wirbel, um schließlich vollständig in innere Energie (Wärme) zu dissipieren. Kann für die chemische Reaktion angenommen werden, dass diese unendlich schnell abläuft ('mixed is burnt'), so bestimmt die Mischungsgeschwindigkeit die Reaktionsrate. Veranschaulichen lässt sich dies anhand der Vorstellung, dass bei der Drehung eines Wirbels um die eigene Achse dieser Reaktanden zur Reaktionszone hin bzw. die Produkte von ihr weg transportiert. Da chemische Reaktionen auf den kleinsten Skalen ablaufen, ergibt sich für die Reaktionsrate die Abhängigkeit  $\dot{\omega}_{EBU} \propto \epsilon/k$ . Zusätzlich wird die Reaktionsrate noch durch die Fluktuationen der Tempe-

ratur (bzw. des Reaktionsfortschritts  $c$ ) beeinflusst. Unter Annahme einer unendlich dünnen Flamme kann erwartet werden, dass die Fluktuationen maximal sind, so dass sich die Bedingung  $c''^2 = c''_{max}^2 = c(1 - c)$  ableiten lässt. Basierend auf diesen Überlegungen ergibt sich die Reaktionsrate zu:

$$\bar{\omega}_{EBU} = C_{EBU} \bar{\rho} \tilde{c} (1 - \tilde{c}) \frac{\tilde{\epsilon}}{\tilde{k}}. \quad (3.13)$$

Formal lassen sich die EBU-Modelle ebenfalls als Faltung über eine PDF beschreiben. Diese Ansätze basieren aber auf der Annahme, dass die Fluktuationen des Reaktionsfortschritts  $c$  maximal sind. Diese Annahme ist bei großer Damköhler-Zahl, d.h. bei sehr dünner Flamme auch berechtigt.

Weitere Vertreter dieser Klasse sind das EDM (Eddy Dissipation Modell) und das EDC-Modell (Eddy Dissipation Concept). Bei der Beschreibung von Prozessen, die durch Selbstzündung dominiert werden, ist das EBU Konzept nicht anwendbar, da die Annahme einer unendlich dünnen Reaktionszone nicht länger gerechtfertigt ist. Chemische Raten limitieren in diesem Fall den Reaktionsfortschritt. Das EDC Modell von Magnussen [Mag89] betrachtet das Rechengebiet als Reaktornetzwerk, wobei zwischen den einzelnen Reaktoren ein Energie- und Speziesaus-tausch stattfindet. Die Reaktorgröße bestimmt sich aus den Turbulenzgrößen  $k$  und  $\epsilon$  und steht in Relation zu den Feinstrukturen der Strömung, in denen die Reaktionen ablaufen. Innerhalb der einzelnen Reaktoren wird eine homogene Verteilung von Spezies und Temperatur angenommen. Diese Formulierung ermöglicht die detaillierte Betrachtung der chemischen Prozesse. Die Applikation dieses Verfahrens auf den vorliegenden Fall ist nicht ohne weiteres möglich. Zur Erfassung der chemischen Vorgänge wird ein Reaktionsmechanismus benötigt. Wie bereits in Kap. 3.1 erwähnt, umfasst ein geeigneter Reaktionsmechanismus zur Beschreibung der Selbstzündung mehrere 100 Reaktionen, so dass eine Anwendung nicht praktikabel ist. Zum anderen können turbulente Fluktuationen der Tem-



**Abbildung 3.21:** Modellvorstellung einer fluktuierenden instantanen Flammfront.

peratur, die die Selbstzündkinetik signifikant beeinflussen, nicht adäquat berücksichtigt werden. Dies wird erst mit der Kopplung des EDC Modells mit einer PDF Transportgleichung ermöglicht [FLU02], was aber einen immensen Rechenaufwand mit sich bringt.

- **BML-Modell:** Auch das von den Autoren Bray, Moss und Libby entwickelte BML-Modell [BCL88] unterliegt der Annahme unendlich schneller Chemie. Die Flamme wird dabei als Diskontinuität betrachtet, die das Frischgas von den Verbrennungsprodukten trennt. Gemäß der Modellvorstellung setzt sich die Flammfront aus zahlreichen einzelnen „Flamelets“ zusammen, die einen laminaren Charakter aufweisen. Abbildung 3.21 zeigt die dem Modell zugrunde liegende Vorstellung einer um die mittlere Flammfront fluktuierenden instantanen Flammfront.

Der lokale Reaktionsfortschritt wird durch Lösen einer Transportgleichung bestimmt. Die durch die einzelnen Flamelets gebildete Flammenfrontoberflächendichte bestimmt den Reaktionsumsatz bzw. den Quellterm der Transportgleichung und lässt sich über algebraische Gleichungen als Funktion der Turbulenzgrößen  $k$  und  $\epsilon$ , des Reaktionsfortschritts und der Flammfrontkrümmung bzw. Faltungslänge berechnen.

Die in der Formulierung am Anfang der Herleitung enthaltene laminare Flammgeschwindigkeit wird nach Einführen eines Ansatzes für die integrale Flammfrontkrümmung eliminiert, so dass das Modell nicht in der Lage ist, den Einfluss einer end-

lich schnellen Reaktionskinetik zu berücksichtigen. Damit besitzt das BML-Modelle die ähnlichen Vor- und Nachteile der EBU-Modelle.

- **Flammfrontmodelle:** Flammfrontmodelle, wie beispielsweise das TFC Modell von Zimont et al. [ZPBW98] oder das Schmid-Modell [Sch95] wurden für die Berechnung vorgemischter bzw. teilvorgemischter [PFB99] Flammen entwickelt.

Die Modelle bestimmen den lokalen Reaktionsfortschritt durch Lösen einer Transportgleichung. Signifikante Unterschiede zwischen den Modellen bestehen aber bei der Berechnung der in den Quellterm der Transportgleichung eingehenden turbulenten Flammgeschwindigkeit. Diese wird auf Basis der laminaren Flammgeschwindigkeit und der Turbulenzparameter  $k$  und  $\epsilon$  bestimmt. Mit Hilfe der Reynolds- und Damköhler-Zahl lässt sich die vorgemischte Verbrennung in unterschiedliche Regimes unterteilen. Die verschiedenen Flammfrontmodelle besitzen teilweise einen eingeschränkten Gültigkeitsbereich, so dass in Abhängigkeit des jeweiligen Regimes ein entsprechendes Modell auszuwählen ist.

Problematisch beim Einsatz von Flammfrontmodellen zur Berechnung der Verbrennung im Regime der Selbstzündung ist aber, dass hier im eigentlichen Sinne keine laminaren Flammgeschwindigkeiten mehr existieren. Prinzipiell lassen sich zwar auch im Regime der Selbstzündung laminare Flammgeschwindigkeiten bestimmen (z.B. mit dem PREMIX-Modul [KGSM85] aus dem CHEMKIN-Paket), allerdings weisen diese eine starke Sensitivität bezgl. der gewählten Koordinate des Eintrittsrandes auf. Dies liegt daran, dass im Gegensatz zur Verbrennung unterhalb der Selbstzündgrenze chemische Reaktionen ausschließlich in der Flammfront statt finden. Hingegen können oberhalb der Selbstzündgrenze bereits bei der Vermischung der Reaktanden Reaktionen beobachtet werden. In Kap. 6.2.4 wird dieses Phänomen ausführlich diskutiert.

- **Gleichgewichtschemie mit Mischungsbruch-PDF:** Dieser

Ansatz ist bei der Berechnung von Diffusionsflammen weit verbreitet. Durch Lösen der Transportgleichungen für die ersten beiden statistischen Momente des Mischungsbruchs und Annahme einer bestimmten Form der PDF lässt sich anhand des Gleichgewichtszustands die lokale Temperatur und Zusammensetzung berechnen. Da von einer unendlich schnellen Chemie ausgegangen wird, ist dieser Ansatz nicht für die Berechnung von Flammen im Regime der Selbstzündung geeignet.

Für eine weiterführende Diskussion dieses Ansatzes sei auf Kap. 3.1.8 verwiesen.

Im vorliegenden Fall wird erwartet, dass die Fluktuationen der Mischungsbrüche und damit auch der Temperatur den stärksten Einfluss auf die ablaufenden chemischen Prozesse besitzen. Diese Fluktuationen lassen sich bestens mit Hilfe von PDF-Ansätzen quantifiziert berücksichtigen, so dass dieser Ansatz im Folgenden bei der Berechnung mittlerer turbulenter Reaktionsraten zur Anwendung kommen soll. Die ebenfalls diskutierten Wirbelzerfallsmodelle sowie das BML-Modell gehen von der Annahme einer unendlich schnellen Chemie aus. Im Falle der Selbstzündung stellt dies aber eine nicht zulässige Vereinfachung dar. Flammfrontmodelle sind zwar in der Lage, eine endlich schnelle Chemie zu berücksichtigen, allerdings kann bei der Selbstzündung nicht mehr davon ausgegangen werden, dass die chemischen Reaktionen auf die Flammfront beschränkt sind.

In Kap. 4 wird der PDF-Ansatz entsprechend den vorliegenden Bedürfnissen weiterentwickelt. Zunächst sollen in den folgenden Abschnitten aber weitere Grundlagen und die speziellen Eigenschaften von PDF-Ansätzen diskutiert werden.

### 3.2.3 PDF-Ansätze

Wie zuvor erwähnt, können mittlere Reaktionsraten durch Faltung der *laminaren* Reaktionsrate über eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion der turbulenten Schwankungen bestimmt werden. Im all-

gemeinen Fall ist die Reaktionsrate eine Funktion der Temperatur  $T$  und der lokalen Zusammensetzung  $Y_i$ , so dass Gl. (3.12) in die folgende Form zu bringen ist:

$$\bar{\omega} = \int_{T=0}^{T=\infty} \int_{Y_1=0}^{Y_1=1} \cdots \int_{Y_n=0}^{Y_n=1} \dot{\omega}(T, Y_1, \dots, Y_n) P(T, Y_1, \dots, Y_n) dT dY_1 \dots, dY_n. \quad (3.14)$$

Während für die Reaktionsrate  $\dot{\omega}(T, Y_1, \dots, Y_n)$  beispielsweise ein Arrhenius-Ansatz angewendet werden kann, ist die PDF  $P(T, Y_1, \dots, Y_n)$  weitaus schwieriger zu beschreiben, da sie keinem allgemein gültigen physikalischen Phänomen zugrunde liegt. Neben den ablaufenden Reaktionen selber beeinflussen vor allem auch konvektive und diffusive Mischungsvorgänge die PDF maßgeblich. Verschiedene Ansätze zur Bestimmung bzw. Modellierung der PDF sollen im folgenden vorgestellt werden.

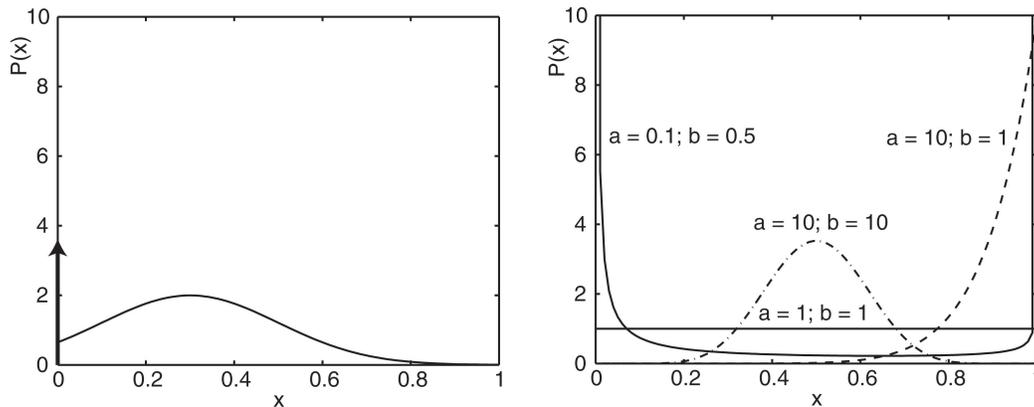
Unabhängig vom zu beschreibenden System kommen zwei verschiedene Methoden zur Anwendung. Zum einen sind dies PDF Modelle mit angenommener Verteilungsfunktion [PV01], [KF96] und zum anderen die exakte Ermittlung der PDF durch Lösung einer PDF-Transportgleichung [WNPR98], [JPMC01]. Einen guten Überblick über zahlreiche PDF Ansätze gibt Pope in [Pop85]. Anhand einer eingeschlossenen Diffusionsflamme führen Repp et al. [RSS<sup>+</sup>02] einen Vergleich der beiden Methoden durch. Für weite Betriebsbereiche des untersuchten Brenners ergeben sich für beide Methoden ähnliche Ergebnisse. Starke Turbulenz-Chemie Interaktionen, die u.U. zum lokalen Erlöschen der Flamme führen, können allerdings mittels einer angenommenen Verteilungsfunktion nicht adäquat abgebildet werden.

In zahlreichen Arbeiten wird der Ansatz der **angenommenen Verteilungsfunktion** (presumed PDF) verfolgt. Der Einsatz angenommener Verteilungsfunktionen ermöglicht die Integration und Tabulierung von Gl. (3.14) vor der eigentlichen CFD-Simulation. Damit lassen sich wesentlich kürzere Rechenzeiten erreichen, was zu einer

weiten Verbreitung dieser Methode führte. Die meisten PDFs angemessener Form lassen sich durch ein bzw. zwei Kenngrößen parametrisieren, welche in der Regel eine Funktion des Mittelwertes und der Varianz sind. In der anschließenden CFD Simulation werden für die Mittelwerte und Varianzen der entsprechenden Größen Transportgleichungen gelöst und die Reaktionsraten als Funktion dieser anhand der tabulierten Werte bestimmt.

Zur Anwendung kommen dabei einfache PDFs, die sich aus einigen  $\delta$ -Peaks [LW00b] zusammensetzen, als auch Gleich-, Gauss- [BP94] oder  $\beta$ -Verteilungen [BKR03]. Eine Approximation der PDF mit Hilfe von  $\delta$ -Peaks ist dann gerechtfertigt, wenn, wie z. B. bei einem Flamelet-Modell, die Annahme getroffen werden kann, dass die Reaktion in sehr dünnen Schichten stattfindet und entweder Gemisch im unverbrannten oder verbrannten Zustand vorliegt. In diesem Fall kann die PDF des Reaktionsfortschrittes  $c$  durch zwei  $\delta$ -Peaks an den Positionen  $c = 0$  und  $c = 1$  angenähert werden. Sind ebenfalls Zwischenwerte zu erwarten, so sind komplexere PDF Formen zu wählen. Bei nicht limitierten Größen, z.B. der Geschwindigkeit, findet vielfach die Gauss-Verteilung Anwendung. Ist die zu beschreibende Größe hingegen auf einen bestimmten Wertebereich limitiert (z.B. gilt für den Mischungsbruch:  $0 \leq f \leq 1$ ), so wird oftmals auf die  $\beta$ -Verteilung zurückgegriffen. Diese ist nur für  $0 \leq x \leq 1$  definiert und eignet sich daher für normierte Größen. Eine andere Möglichkeit besteht darin, die Gauss-Verteilung auf den zulässigen Bereich zu beschränken („clippen“). Wahrscheinlichkeiten außerhalb des Definitionsbereiches werden durch  $\delta$ -Peaks an den physikalischen Rändern ersetzt. Durch die Manipulation der Verteilung ändern sich aber die statistischen Momente (Mittelwert und Varianz) der Verteilung, wodurch sich die Berechnung einer PDF mit vorgegebenem Mittelwert und Varianz erschwert.

Abbildung 3.22 zeigt einige Formen, die sich bei Wahl unterschiedlicher Parametersätze für die clipped Gauss und die  $\beta$ -Verteilungen ergeben. Insbesondere bei der  $\beta$ -Verteilung wird die Vielfalt der realisierbaren Formen erkennbar. Während sich für  $a > 1$  und



**Abbildung 3.22:** Verschiedene Verteilungsfunktionen, links: clippedGauss Verteilung; rechts:  $\beta$ -Verteilung

$b > 1$  die  $\beta$ -Verteilung immer mehr der Gauss-Verteilung annähert, sind bei Wahl von  $a < 1$  und  $b < 1$  auch bimodale Verteilungen möglich. Aus diesem Grunde eignet sich die  $\beta$ -PDF ausgezeichnet zur Approximation diverser Verteilungen (z.B. Mischungsbruch-PDF, Reaktionsfortschritts-PDF, etc.).

Bei den bisher diskutierten Verteilungsfunktionen handelt es sich um univariate Verteilungen, welche sich für die statistische Beschreibung einzelner Größen z.B. der Temperatur  $P(T)$  eignen. Sind für die Charakterisierung des Systems mehrere Größen notwendig, z.B. Mischungsbruch  $f$  und Temperatur  $T$ , so sind zur statistischen Beschreibung Verbundwahrscheinlichkeiten (jointPDFs)  $P(f, T)$  notwendig. Diese enthalten zusätzlich noch Informationen über mögliche Korrelationen zwischen den einzelnen Parametern. Während für univariate Verteilungen zahlreiche funktionale Formen bekannt sind, existieren aber nur wenige Ansätze für multivariate Verteilungen.

Gauss-Verteilungen sind für beliebig viele Dimensionen realisierbar. Für jede Dimension ist die Angabe eines Mittelwertes und der Varianz möglich. Zudem können beliebige Korrelationen eingestellt werden. Allerdings besitzt auch die multivariate Gauss-Verteilung den erwähnten Nachteil, dass der Definitionsbereich nicht limitiert ist und somit unzulässige Realisierungen auftreten können.

Als multivariate Variante der  $\beta$ -Verteilung ist die Dirichlet-Verteilung [JK72] zu nennen, die ebenfalls für den Bereich  $0 \leq x_i \leq 1$  definiert ist. Diese Verteilung besitzt im  $N$ -Dimensionalen Fall  $N + 1$  Parameter, so dass sich für die Varianzen Zwangsbedingungen einstellen. Die unabhängige Beeinflussung der Varianzen jeder Dimension ist nicht möglich; gleiches gilt für die Kovarianzen. Girimaji [Gir91] vereinfachte die Dirichlet-Verteilung für den speziellen Fall  $\sum x_i = 1$ . Diese Randbedingung folgt, wenn die Dirichlet-Verteilung zur statistischen Beschreibung von Mischungs- bzw. Massenbrüchen verwendet werden soll. Die Gesamtheit der Fluktuationen aller Skalare bestimmt Girimaji mit einer Transportgleichung für die *turbulente skalare Energie*. Dies setzt aber voraus, dass die Varianzen aller Größen von vergleichbarer Größenordnung sind, was nicht notwendigerweise der Fall sein muss. Wird beispielsweise in ein Gemisch aus zwei bereits weitgehend vermischten Komponenten eine dritte Komponente eingedüst, so können die auftretenden Varianzen ohne weiteres um einige Größenordnungen variieren.

Für den speziellen Fall der statistischen Unabhängigkeit lässt sich die Verbundwahrscheinlichkeit durch ein Produkt aus den einzelnen Wahrscheinlichkeiten ersetzen bzw. entkoppeln [WM92]:

$$P(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n) = P(\phi_1)P(\phi_2) \dots P(\phi_n). \quad (3.15)$$

Für die Einzel-PDFs  $P(\phi_i)$  lassen sich die bekannten univariaten Verteilungen verwenden. Aufgrund der dargestellten Hinlänglichkeiten der Funktionen für die Verbundwahrscheinlichkeitsdichten findet diese Näherung oft Anwendung. Existieren allerdings Korrelationen zwischen den einzelnen Größen, so ergeben sich durch diese Vereinfachung oftmals fehlerhafte Reaktionsraten. Im Ergebnisteil dieser Arbeit wird für den hier vorliegenden Fall der Doppel-Strahl-Eindüsung gezeigt, dass eine Entkopplung aufgrund der existierenden Korrelationen zwischen den Mischungsbrüchen nicht zulässig ist.

Weichen die realen PDFs stark von den mit den bekannten Ansätzen darstellbaren Formen ab, so kann dies u. U. den Einsatz einer **trans-**

**portierten PDF** rechtfertigen. Wie zuvor erwähnt, tritt dies insbesondere in Bereichen auf, in denen z.B. lokale Flammlöschung aufgrund starker Turbulenz-Chemie-Interaktionen zu beobachten ist. Entgegen der übrigen Transportgleichungen (z.B. Impulstransport) handelt es sich bei der PDF-Transportgleichung um eine hochdimensionale Gleichung, was das Lösen der PDF-Transportgleichung mit einem enormen Zeitaufwand verbindet und den industriellen Einsatz derzeit verwehrt. Im Vergleich zu Rechenzeiten bei Verwendung einer angenommenen PDF-Form erfordert das Lösen der PDF-Transportgleichung ein Mehrfaches an CPU-Zeit. Repp et al. [RSS<sup>+</sup>02] berichten von einer Verlängerung der Rechenzeit um den Faktor 8 – 9.

In der Regel wird die transportierte PDF durch Ensembles massebehafteter Partikel dargestellt. Speicher- und Rechenzeit limitieren gewöhnlich die Ensemblegröße. Typischerweise liegt diese im Bereich von 50 bis 100 Partikeln pro Zelle [RSS<sup>+</sup>02]. Da solch relativ kleine Ensemblegrößen jedoch große statistische Fluktuationen (vergl. Kap. 4.1.13) bedingen, wird in der Regel eine künstliche Vergrößerung der Ensemblegröße durch Akkumulation der Partikeleigenschaften einer Zelle während mehrerer Schritte durchgeführt [Hin00], was der Berechnung eines gleitenden Mittelwertes entspricht.

Zum Lösen der PDF-Transportgleichung findet im Allgemeinen ein Monte-Carlo Verfahren Anwendung. Die einzelnen Prozesse, wie Konvektion, Mischung und Reaktion werden mit einem so genannten Teilschrittverfahren [Pop81] berücksichtigt.

Da eine genaue Beschreibung der Herleitung der PDF-Transportgleichung und deren Lösung zum Verständnis der vorliegenden Arbeit nicht notwendig ist und auch deren Rahmen sprengen würde, sei an dieser Stelle auf das Schrifttum, u.a. [Pop00], [PV01], verwiesen.

### 3.2.4 FDF-Ansätze bei der Grobstruktursimulation

Die folgenden Abschnitte geben einen kurzen Überblick über die aus den PDF-Ansätzen für den LES-Kontext abgeleiteten FDF-Ansätze (**F**iltered **D**ensity **F**unction). Zwar ist eine Implementierung der zu entwickelnden Modelle nicht für einen LES-Löser geplant, dieses Kapitel soll aber weitere Einsatzgebiete des im Kap. 4.1 vorgestellten Verfahrens zur Approximation der Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion (jointPDF) aufzeigen.

Im Gegensatz zu RANS Berechnungen wird bei einer Grobstruktursimulation (kurz: LES **L**arge **E**ddy **S**imulation) ein Großteil der in den turbulenten Fluktuationen enthaltenen turbulenten Energie bereits explizit aufgelöst. Da damit alle großskaligen Strukturen Teil der Lösung sind, lässt sich eine bedeutend bessere Vorhersage der Strömung und der daraus abgeleiteten Größen (z.B. Mischungsbrüche) erreichen. Während die großskaligen Strukturen stark von der Hauptströmung beeinflusst werden und somit die Entwicklung allgemein gültiger Turbulenzmodelle für den RANS-Kontext erschweren, sind die kleinen turbulenten Strukturen weitgehend frei von kohärenten Strukturen und weisen einen viel allgemeineren Charakter (z.B. Isotropie) auf. Dies ermöglicht die Entwicklung bedeutend einfacherer Turbulenzmodelle für den Einsatz in einer Grobstruktursimulation.

Im Gegensatz zur Turbulenz, die von Prozessen auf den Makroskalen dominiert wird, laufen chemischen Reaktionen aber auf den auch bei einer LES nicht-aufgelösten Mikroskalen ab, so dass die Betrachtung reaktiver Systeme Modellansätze für die Beschreibung der Mischungszustände auf den Mikroskalen erfordert. Faltungsansätze haben sich daher auch im Bereich der Grobstruktursimulationen etabliert.

Prinzipiell stehen auch hier die von der RANS-Modellierung bekannten PDF bzw. FDF Ansätze zur Verfügung. Der Transport der Geschwindigkeits-Skalar-FDF wird näher in [Hei03] beschrieben. Der

Einsatz einer  $\beta$ -FDF zur Abbildung der nicht-aufgelösten Mischungsbruchfluktuationen bei der Modellierung einer reaktiven Strömung wird in [BKR03] von de Bruyn Kops et al. verwendet.

### 3.2.5 Zusammenfassende Bewertung der Ansätze

Die in der obigen Diskussion der Modellansätze getroffenen Aussagen sollen im Folgenden kurz für eine abschließende Bewertung zusammengefasst werden.

Da die anfangs beschriebenen Wirbelzerfallsmodelle und das BML-Modell in der Regel die chemischen Prozesse vernachlässigen ( $Da \gg 1$ ) und Reaktionsraten mit Hilfe turbulenter Zeitmaße bestimmen, ist eine Berücksichtigung der individuellen Erdgasqualität ausgeschlossen. Flammfrontmodelle berücksichtigen zwar eine endlich schnelle Chemie, eignen sich aber aufgrund ihrer Formulierung nicht für die Beschreibung der chemischen Prozesse im Bereich der Selbstzündung. Im vorliegenden Fall erscheinen daher die PDF-Ansätze am geeignetsten für die Modellierung der Turbulenz-Chemie Interaktionen. Da insbesondere Temperaturfluktuationen - im vorliegenden Fall über die Mischungsbruchfluktuationen dargestellt - einen großen Einfluss auf die Zündkinetik aufweisen, erscheint ein Modellansatz mit Mischungsbruch-PDF sinnvoll. Faltungsansätze, die die PDF mit Hilfe einer PDF-Transportgleichung bestimmen, stellen sehr hohe Anforderungen bezüglich der Rechenzeit. Daraus folgt, dass eine Weiterentwicklung der PDF-Ansätze mit angenommener Form der PDF (presumedPDF) am zweckmäßigsten ist.

## 4 Formulierung und Validierung der Teilmodelle

Aufbauend auf dem in Kap. 3.1 beschriebenen Zündmodell von Hesselt [Hes98] wird in den folgenden Abschnitten ein Modell formuliert, welches den Fortschritt der Zündung bzw. die Reaktivität des Brennstoff-Luft-Gemisches mit einer Fortschrittsvariablen beschreibt. Zur besseren Unterscheidung von den bei der vorgemischten Verbrennung oftmals verwendeten Fortschrittsvariablen wird im Folgenden die Reaktivität zu

$$R = \frac{X}{X_Z} \quad (4.1)$$

definiert.  $X$  bezeichnet hierbei eine zur Charakterisierung des Zündfortschritts sinnvolle Größe, z.B. den Massenbruch eines bestimmten Radikals, der bei der eigentlichen Zündung, d.h. bei Start intensiver Wärmefreisetzung den Wert  $X_Z$  annimmt. Damit erreicht  $R$  beim Start intensiver Wärmefreisetzung gerade den Wert  $R = 1$ . Da mit Hilfe des Zündmodells nur die chemischen Vorgänge bis zur Zündung zu beschreiben sind, muss der Abbau der gewählten Spezies während der anschließenden Wärmefreisetzung nicht berücksichtigt werden. Die Reaktivität soll daher auch in der Wärmefreisetzungsphase und stromab der Flamme den Wert  $R = 1$  aufweisen. Die lokale Verteilung von  $X$  lässt sich durch Lösen der Transportgleichung für  $X$  bestimmen:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{X}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{X}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\bar{\rho} \nu_T}{Sc_T} \frac{\partial \tilde{X}_j}{\partial x_i} \right) + \bar{S}_X. \quad (4.2)$$

Der Quellterm  $\bar{S}_X$  in Gl. (4.2) soll mit Hilfe eines Mischungsbruch-PDF-Ansatzes berechnet werden. Um die im SEV-Brenner auftretende ternäre Mischung zu beschreiben, werden die drei Mischungsbrüche  $f_H$ ,  $f_F$  und  $f_C$  (Heißgas, Brennstoff und Stützluft) eingeführt.

Da die Summe aus allen drei Mischungsbrüchen den Wert Eins ergeben muss, sind nur für die ersten beiden genannten Mischungsbrüche Erhaltungsgleichungen zu lösen. Damit kann der Quellterm in Gl. (4.2) wie folgt formuliert werden:

$$\overline{S_X} = \bar{\rho} \int_0^1 \int_0^1 \dot{\omega}_X P(f_H, f_F) df_H df_F, \quad (4.3)$$

wobei  $\dot{\omega}_X$  der Reaktionsrate des Zündindikators entspricht.

Anschließend an die Induktionsphase wird die Verbrennungswärme freigesetzt. Die Freisetzung der Wärme erfolgt dabei nicht instantan, so dass die Temperatur bei Erreichen von  $R = 1$  nicht einfach der adiabaten Verbrennungstemperatur gleich gesetzt werden kann. Aufgrund der in Kap. 3.2.2 geführten Diskussion eignen sich im vorliegenden Fall für die Beschreibung der Wärmefreisetzung weder die sog. Wirbelzerfallsmodelle noch Flammfrontmodelle. Um die lokale Temperaturverteilung im Brenner bestimmen zu können, muss daher eine zusätzliche Transportgleichung für die Enthalpie gelöst werden. Anhand von Gl. (2.12) und (2.17) lässt sich diese wie folgt schreiben:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{h}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\bar{\rho} \nu_T}{Pr_T} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i} \right) + \overline{S_h}. \quad (4.4)$$

Mit Hilfe des Quellterms  $\overline{S_h}$  wird die freigesetzte Reaktionswärme berücksichtigt. Ähnlich zu Gl. (4.3) lässt sich dieser mit der Wärmefreisetzungsrates  $\dot{q}$  zu:

$$\overline{S_h} = \bar{\rho} \tilde{c}_Z \int_0^1 \int_0^1 \dot{q} P(f_H, f_F) df_H df_F \quad (4.5)$$

formulieren. Zur Kopplung der Wärmefreisetzung an die Zündung wird die Skalierungsvariable  $c_Z$  eingeführt. Diese Skalierungsvariable soll während der Induktionsphase den Wert  $c_Z = 0$  und während der Wärmefreisetzungsphase den Wert  $c_Z = 1$  annehmen.

Während für eine Kopplung der beiden Phasen in laminarer

Strömung die Modellierung mit Hilfe der Sprungfunktion  $H$

$$c_Z = H(R - 1) = \begin{cases} 0 & R < 1 \\ 1 & R \leq 1 \end{cases} \quad (4.6)$$

ausreicht, muss in turbulenter Strömung eine aufgedickte bzw. dispergierte Zündfläche erwartet werden. Dies resultiert daher, dass aufgrund der Turbulenz auch der Zündindikator bzw. die Reaktivität fluktuiert und daher an einem bestimmten Punkt in der Zündfläche nicht zu jedem Zeitpunkt Wärme freigesetzt wird. Für diesen Übergangsbereich müssen daher für den Zündfortschritt  $c_Z$  auch Werte im Intervall  $0 < c_Z < 1$  möglich sein. In Kap. 4.3 wird bei der Entwicklung eines Modells für die Zündfortschrittsvariable  $c_Z$  auf das Phänomen der aufgedickten Zündfläche noch detaillierter eingegangen.

Anhand der durchgeführten Überlegungen lässt sich die Entwicklung eines Modells für die Beschreibung der reaktiven Strömung in Brennern, die mit Frischlufttemperaturen oberhalb der Selbstzündgrenze betrieben werden, in vier Teilprobleme bzw. Untermodelle aufteilen, für die jeweils Lösungsansätze zu entwickeln sind:

- *Turbulenz-Chemie Interaktionen:* Aufgrund der hohen Re-Zahlen ist mit hohen Turbulenzintensitäten und damit starken Fluktuationen des Geschwindigkeits- und Mischungsfeldes zu rechnen. Wie in Kap. 3 gezeigt, ist es bei der Bestimmung mittlerer Reaktionsraten wichtig, Fluktuationen der Mischungsbrüche und damit im vorliegenden Fall auch der Temperatur zu berücksichtigen. Dies erfordert die Formulierung eines Modells für die PDF  $P(f_H, f_F)$  zur statistischen Beschreibung des ternären Mischungsfeldes.
- *Zündung:* Nach Eindüsung des Brennstoffs in den Brenner starten die ersten Vorreaktionen unter Bildung von Radikalen. Aufgrund von Kettenverzweigungen erhöht sich während dieser Phase die Anzahl der Radikale überproportional zur Reakti-

---

onszeit. Nach Erreichen einer kritischen Radikalenmenge folgt schließlich der eigentliche Wärmefreisetzungsprozess. Ziel ist es, eine Spezies zu identifizieren, die den Fortschritt der Zündung während der Induktionsphase mit ausreichender Genauigkeit wiedergibt und auf deren Basis die Reaktionsrate  $\dot{\omega}_X$  in Gl. (4.3) bestimmt werden kann.

- *Kopplung Zündung und Wärmefreisetzung:* Aufgrund turbulenter Fluktuationen des Geschwindigkeitsfeldes ergibt sich eine dispergierte Zündfläche, zu deren Beschreibung ein eigenes Untermodell notwendig ist. Dieses dient zur Berechnung der Skalierungsvariablen  $c_Z$ , mit welcher die Kopplung zwischen Zünd- und Wärmefreisetzungsmodell realisiert werden soll.
- *Wärmefreisetzung:* Während der zweiten Phase der chemischen Reaktionen eines Selbstzündprozesses findet die eigentliche Wärmefreisetzung  $\dot{q}$  statt. Um möglichst genaue Aussagen über die lokale Wärmefreisetzung machen zu können, kommt dabei eine detaillierte Betrachtung nach Gl. (4.5) zum Einsatz.

## 4.1 Diskretes Distributionsmodell zur Beschreibung von Mischungsfeldern

In den folgenden Abschnitten wird ein Verfahren beschrieben, das es ermöglicht, die PDF  $P(f_1, f_2)$  der Mischungsbrüche ohne Vernachlässigung etwaiger Korrelationen zwischen den Mischungsbrüchen zu approximieren. Ähnlich der Verfahren mit angenommener Form der PDF lassen sich mit dem neuen Ansatz Reaktionsraten vorab berechnen und in einer Tabelle als Funktion der ersten und zweiten statistischen Momente der eingehenden physikalischen Größen für nachfolgende CFD-Simulationen abspeichern. Die Berechnung von Strömungsfeld und chemischen Raten wird damit entkoppelt, wodurch die Formulierung eines effektiven Modells zur Modellierung chemischer Prozesse in turbulenter Strömung möglich wird.

Im Gegensatz zu den Verfahren mit angenommener Form der PDF („presumed PDF“) wird im Folgenden die PDF nicht durch eine Funktion (z.B.  $\beta$ - oder Gauss-PDF), sondern durch diskrete Verteilungen (jPDD **j**oint **p**resumed **d**iscrete **d**istributions) approximiert. Diese lassen sich mit Hilfe der in den Kapiteln 4.1.3 bis 4.1.8 beschriebenen Verfahren für beliebige erste und zweite Momente der Verteilung erzeugen.

Das Kapitel schließt mit einer Validierungsstudie. Anhand der mit einer LES sowie einer PDF-Transportgleichung bestimmten Verteilungen der Mischungsbrüche werden die vorgestellten Verfahren zur Generierung der diskreten Verteilung (jPDDs) überprüft und bewertet.

### 4.1.1 Überführung der kontinuierlichen PDF in eine diskrete PDF

Neben der Möglichkeit eine PDF mittels analytischer Gleichungen zu beschreiben, kann diese auch durch eine diskrete Verteilung ap-

proximiert werden. Da bei letzterer die Formfunktion nicht mehr in geschlossener analytischer Form bekannt sein muss, sondern nur ein Verfahren zur Erzeugung der Verteilung notwendig ist, erschließt dies weitere Anwendungsmöglichkeiten. Der Einfachheit wegen wird im Folgenden das diskrete Distributionsmodell für die statistische Beschreibung eines tri-skalaren Mischungsfelds hergeleitet. Zustände des Mischungsfelds sind durch die drei Mischungsbrüche  $f_H$ ,  $f_F$  und  $f_C$  beschreibbar. Aufgrund der Normierungsbedingung der Mischungsbrüche lässt sich der lokale Mischungszustand über die beiden Mischungsbrüche  $f_H$  und  $f_F$  eindeutig beschreiben. Über die Beziehung:

$$f_C = 1 - (f_H + f_F) \quad (4.7)$$

lässt sich der Wert des dritten Mischungsbruchs einfach bestimmen.

Eine diskrete Verteilung der beiden Mischungsbrüche  $f_H$  und  $f_F$  lässt sich mathematisch durch eine Anzahl  $\delta$ -Peaks ausdrücken:

$$P_N(f_H, f_F) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(f_F - f_F^{(i)}) \delta(f_H - f_H^{(i)}). \quad (4.8)$$

Diskrete Verteilungen werden zur Unterscheidung mit einem  $N$  indiziert. Jede der  $N$  Realisierungen  $(f_H^{(i)}; f_F^{(i)})$  entspricht einem  $\delta$ -Peak. Gleichung (4.48) lässt sich somit für eine diskrete Verteilung in die folgende Form überführen:

$$\begin{aligned} \bar{\omega}_N &= \int_0^1 \int_0^1 \dot{\omega}(f_H, f_F) P_N(f_H, f_F) df_h df_F \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \int_0^1 \int_0^1 \dot{\omega}(f_H, f_F) \delta(f_F - f_F^{(i)}) \delta(f_H - f_H^{(i)}) df_h df_F \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \dot{\omega}(f_H^{(i)}, f_F^{(i)}). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Aus der Integration der Reaktionsrate über die PDF folgt also bei Einsatz einer diskreten Verteilung eine gewöhnliche Ensemble-Mittelung. Dabei ist es unwesentlich, ob es sich bei der zu modellierenden PDF um eine Favre- oder Reynolds-gemittelte PDF handelt.

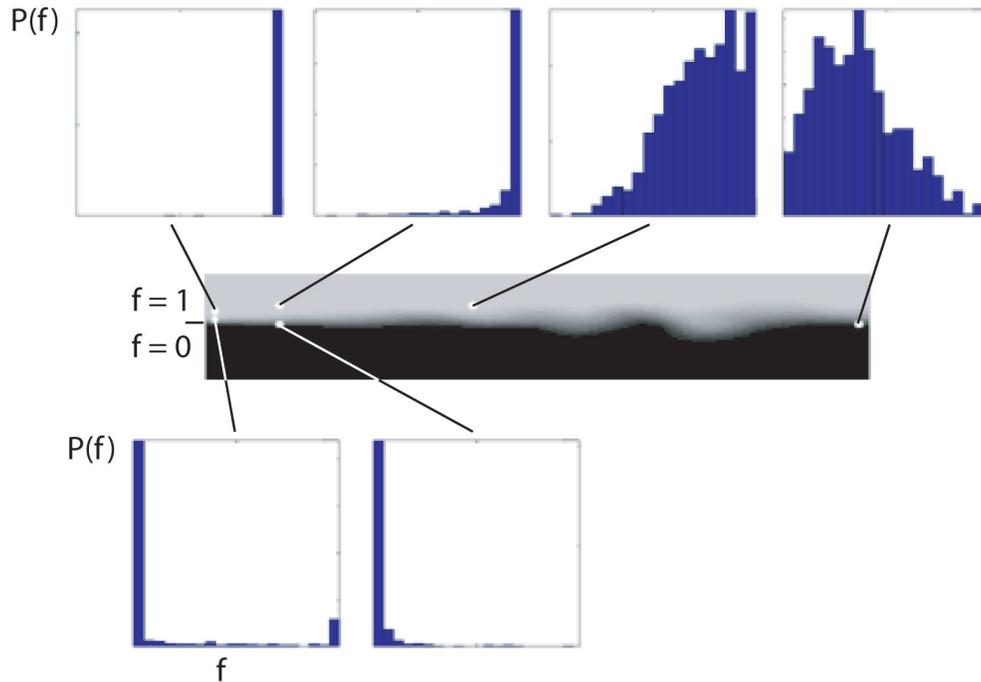
#### 4.1.2 Anforderungen an das Distributionsmodell

In der vorliegenden Arbeit soll die PDF zur statistischen Beschreibung des lokalen Mischungszustandes und den daraus resultierenden Reaktionsraten verwendet werden. Für die Charakterisierung des Mischungsfeldes sind aufgrund der vorliegenden 3-Strom-Mischung zwei Mischungsbrüche notwendig, was im Gegensatz zur 2-Strom-Mischung zu einem zusätzlichen Freiheitsgrad führt. Während bei der 2-Strom-Mischung die Korrelation zwischen den beiden Strömen aus einer Zwangsbedingung heraus immer negativ ist, kann sie bei der 3-Strom-Mischung beliebige positive als auch negative Werte annehmen. Daher wird eine Erweiterung herkömmlicher Ansätze notwendig. Die speziell bei Mischungsbrüchen auftretenden Anforderungen an die mit dem Distributionsmodell approximierte PDF sollen in diesem Abschnitt entwickelt und erläutert werden.

Zum einen existieren Anforderungen hinsichtlich der Form und zum anderen bezüglich des Definitionsbereiches:

- *Form:* Experimentelle und Simulations-Ergebnisse zeigen während des Mischungsprozesses unterschiedliche Formen der PDF. Abbildung 4.1 zeigt die momentane Verteilung des Mischungsbruches für eine einfache Mischerkonfiguration.

In dem gezeigten Beispiel strömt ein Fluid durch den linken Rand in das Rechengebiet ein, wobei für den oberen Teil der Eintrittsfläche der Mischungsbruch auf  $f = 1$  gesetzt wird. Um eine Scherschicht und damit eine intensivere Durchmischung zwischen den beiden Strömen zu erhalten, ist das Geschwindigkeitsverhältnis der unteren zur oberen Strömung am Eintritt auf  $v_u/v_o = 2$  eingestellt. Neben der Mischungsbruchverteilung



**Abbildung 4.1:** Mischungsbrechverteilung und lokale PDFs des Mischungsbrech  $f$

zeigt die Abbildung auch die PDFs des Mischungsbrech an verschiedenen Positionen. Diese wurden durch Lösen einer PDF-Transportgleichung und Akkumulation der transportierten Partikel während mehrerer Iterationen bestimmt. Die beiden linken PDFs zeigen deutlich, dass eine Durchmischung noch nicht stattgefunden hat. Es existieren nur  $\delta$ -Peaks an den physikalischen Grenzen  $f = 0$  bzw.  $f = 1$  des Mischungsbrechraums. Mit größer werdender Mischstrecke beginnen sich diese  $\delta$ -Peaks langsam zu verschmieren. Weiter stromab stellt sich schließlich die erwartete Gauß-förmige Verteilung ein.

Quantifizieren lässt sich die Form der PDF auch durch deren statistischen Momente. Während bei der Approximation der PDF mit Hilfe des Distributionsmodells die ersten beiden statistischen Momente aus der CFD ermittelt werden, lassen sich die höheren statistischen Momente nicht ohne weiteres bestimmen. Bei Kenntnis der beiden ersten statistischen Momente sind

noch sehr viele Freiheitsgrade der PDF undefiniert. Nur implizit, durch Wahl eines bestimmten Verfahrens zur Erzeugung der jPDDs, kann auf die höheren statistischen Momente Einfluss genommen werden. Dies gilt auch für die herkömmlichen Ansätze mit angenommener Form der PDF. Durch Auswahl einer bestimmten Form (z.B. Gauss- oder  $\beta$ -PDF) werden hierbei die höheren Momente implizit festgelegt. Dass die höheren statistischen Momente die mittels der jPDD berechneten mittleren Raten beeinflussen, lässt sich zunächst nur vermuten. Eine quantitative Aussage darüber, welchen Einfluss die höheren Momente auf die mittleren Raten aufweisen, lässt sich aber anhand der in den Kap. 4.1.10 und 4.1.11 durchgeführten Validierungen machen.

Zusammenfassend lässt sich festhalten, dass bei der Mischung zweier Ströme zum einen bimodale und zum anderen unimodale Verteilungen auftreten können. Beide Verteilungstypen müssen von dem Verfahren zur Generierung der Distributionen beherrscht werden. Zudem sollten die mit dem Distributionsmodell darstellbaren Formen der jPDDs den bei Mischungsproblemen auftretenden PDFs ähneln, so dass höhere statistische Momente zumindest implizit berücksichtigt werden.

- *Definitionsbereich:* Gemäß der Definition des Mischungsbruches kann dieser nur Werte zwischen 0 und 1 einnehmen:

$$0 \leq f_i \leq 1. \quad (4.10)$$

Weiterhin folgt aus der Normierungsbedingung der Mischungsbrüche, dass die Summe aller Mischungsbrüche den Wert 1 ergibt:

$$\sum_{i=1}^N f_i = 1. \quad (4.11)$$

Für die Erzeugung der Distributionen wurden zwei verschiedene Ansätze entwickelt. In den folgenden Abschnitten werden die hierbei

zur Anwendung kommenden Verfahren näher erläutert.

### 4.1.3 Erzeugung der Distributionen mit einem Zufallszahlengenerator

Distributionen werden oft mit Zufallszahlengeneratoren erzeugt. Für diverse Verteilungsformen, wie z.B. die multivariate Gaußverteilung existieren bereits Verfahren. Zumeist werden in einem ersten Schritt unkorrelierte gleichverteilte Zufallszahlen generiert und diese dann in die gewünschte Verteilung transformiert.

Zur Erzeugung multivariater Gauß-Verteilungen findet das Box-Muller Verfahren [SL76] Anwendung. Ausgehend von zwei Vektoren unkorrelierter und gleichverteilter Zufallszahlen

$$\vec{u}_1 = \begin{pmatrix} u_1^{(1)} \\ u_1^{(2)} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

$$\vec{u}_2 = \begin{pmatrix} u_2^{(1)} \\ u_2^{(2)} \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (4.13)$$

wird eine erste Transformation in unkorrelierte Standardnormalverteilte Zufallszahlen durchgeführt. Zur Generierung der Ausgangsverteilung kann der systemeigene Zufallszahlengenerator aufgerufen werden. Für die Transformation sind die Vorschriften

$$\vec{n}_1 = \sqrt{-2 \ln \vec{u}_1} \cos 2\pi \vec{u}_2, \quad (4.14)$$

$$\vec{n}_2 = \sqrt{-2 \ln \vec{u}_1} \sin 2\pi \vec{u}_2 \quad (4.15)$$

zu verwenden. Die beiden Vektoren  $\vec{n}_1$  und  $\vec{n}_2$  enthalten die transformierten Zufallszahlen und sind im Idealfall völlig unkorreliert. Zu-

fallszahlen mit den gewünschten Mittelwerten  $\mu_i$  und (Ko-)Varianzen  $\sigma_{ij}$  können durch eine zweite Transformation generiert werden:

$$(\vec{n}\vec{c}_1, \vec{n}\vec{c}_2) = T \cdot (\vec{n}_1, \vec{n}_2) + [\mu_1, \mu_2]. \quad (4.16)$$

Die Transformationsmatrix  $T$  enthält die Informationen über die gewünschten (Ko-)Varianzen und berechnet sich über die Cholesky-Zerlegung der Kovarianzmatrix  $S$ . Für den hier speziellen Fall der bivariaten Verteilung lässt sich diese auch in der Form:

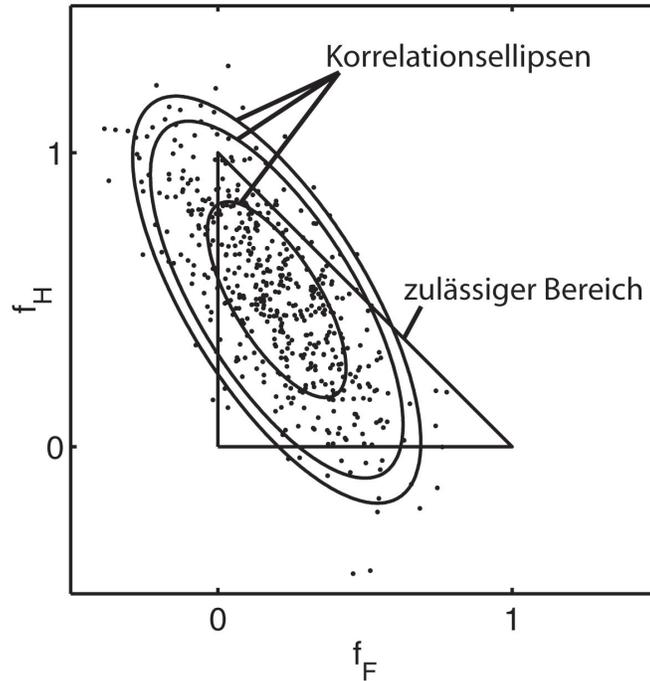
$$S = \begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix}, \quad (4.17)$$

angeben, wobei  $\sigma_{12} = \sigma_{21}$  gilt. Varianzen besitzen zur Kennzeichnung die gleichen Indexes (z.B.  $\sigma_{11}$ ), während bei den Kovarianzen gemischte Indexes auftreten ( $\sigma_{12}$ ).

Abbildung 4.2 zeigt das Streudiagramm (Scatterplot) einer mit dem beschriebenen Verfahren erzeugten Distribution der beiden Mischungsbrüche  $\vec{f}_H = \vec{n}\vec{c}_1$  und  $\vec{f}_F = \vec{n}\vec{c}_2$ .

Neben den Zufallszahlenpaaren ( $f_H^{(i)}, f_F^{(i)}$ ) sind auch die Isolinien der Wahrscheinlichkeit bzw. die Korrelationsellipsen eingezeichnet. Weiterhin ist der Definitionsbereich (Gleichungen (4.10) und (4.11)) der beiden Mischungsbrüche als Dreiecksfläche eingetragen. Wie aus der Abbildung zu entnehmen ist, existieren zahlreiche „unzulässige“ Zufallszahlenpaare, die außerhalb des erlaubten Bereichs liegen und mit einem der im folgenden vorgestellten Verfahren zu korrigieren sind.

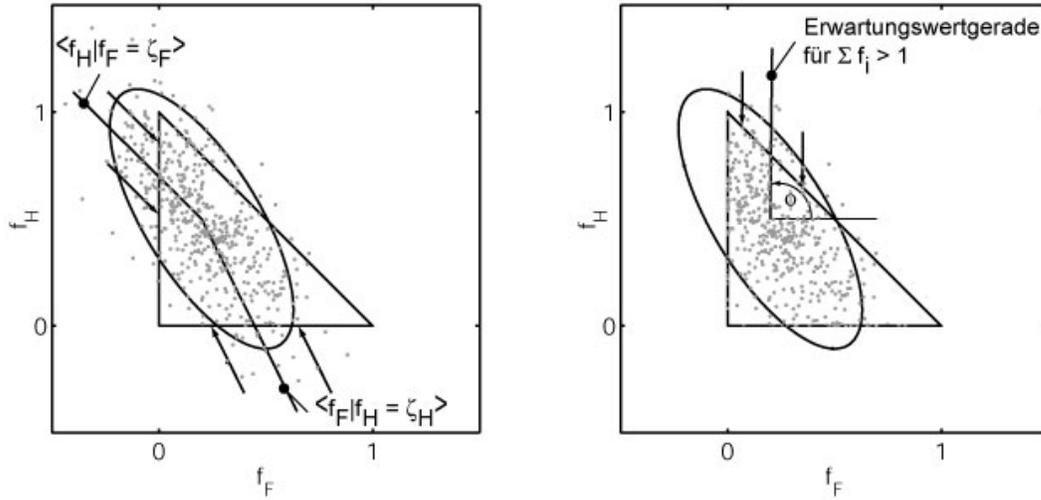
- *Löschen:* Um die Randbedingungen einzuhalten, können unzulässige Zufallszahlenpaare gelöscht werden, wodurch eine multivariate clipped Gauß-Verteilung entsteht. Diese Methode ermöglicht aber nicht die Generierung multi-modaler Distributionen, so dass sie für die vorliegende Anwendung nicht geeignet ist.



**Abbildung 4.2:** Streudiagramm einer korrelierten Gaussverteilung mit Korrelationsellipsen.

- *Verschieben:* Unzulässige Zufallszahlenpaare werden auf geeignete Weise so auf der  $f_H f_F$ -Ebene verschoben, dass sie im Bereich zulässiger Wertepaare zu liegen kommen. Dadurch entstehen an den Rändern unter Umständen Punkthäufungen, was zu den gewünschten multi-modalen Verteilungen führen kann.
- *Neugenerierung:* Zufallszahlenpaare außerhalb des Definitionsbereiches werden auf dem am nächsten liegenden Rand des Definitionsbereichs neu generiert. Dies führt aufgrund der zusätzlich auf den Rändern erzeugten Realisierungen zu Punkthäufungen, so dass sich ggf. auch bei Anwendung dieses Verfahrens multi-modale Verteilungen ergeben.

Wie aus der kurzen Diskussion ersichtlich, eignet sich beide Methoden für die Korrektur unzulässiger Zufallszahlenpaare. Beide werden daher im Folgenden weiter entwickelt und anhand der damit generierten Distributionen bewertet.



**Abbildung 4.3:** Streudiagramm der Verteilung und Erwartungswertgeraden zur Verschiebung „unzulässiger“ Zufallszahlenpaare. Links: Verschiebungsrichtung für  $f_i < 0$ ; Rechts: Verschiebungsrichtung für  $\Sigma f_i > 1$

#### 4.1.4 Korrektur durch Verschiebung

Zur Korrektur unzulässiger Zahlenpaare ist zunächst die Verschiebungsrichtung zu bestimmen. Zweckmäßig erscheint dabei unzulässige Zufallszahlenpaare entlang der Erwartungswertgeraden zu verschieben. Diese ist für  $f_H$  durch den Verlauf der konditionierten Erwartungswerte  $\langle f_H | f_F = \zeta_F \rangle$  definiert und bestimmt sich gemäß [GHSW98] zu:

$$\langle f_H | f_F = \zeta_F \rangle = \langle f_H \rangle + \rho_{F,H} \frac{\sigma_H}{\sigma_F} \cdot (f_F - \langle f_F \rangle) \quad (4.18)$$

Für den Erwartungswert  $\langle f_F | f_H = \zeta_H \rangle$  kann die Gleichung durch Austauschen der Indexes ermittelt werden. Es ist anzumerken, dass Erwartungswertgeraden nicht identisch mit den Achsen der Korrelationsellipse sind. Anhand Abb. 4.3 soll das Verfahren näher erläutert werden.

Zufallszahlenpaare, für die  $f_H < 0$  bzw.  $f_F < 0$  gilt, werden in Richtung der Erwartungswertgeraden  $\langle f_H | f_F = \zeta_F \rangle$  bzw.  $\langle f_F | f_H = \zeta_H \rangle$

bis zur physikalischen Grenze  $f_H = 0$  bzw.  $f_F = 0$  verschoben. Die Verschiebungsrichtung ist in der linken Bildhälfte durch Pfeile angedeutet. Nach dieser ersten Korrektur ergibt sich die in der rechten Bildhälfte gezeigte Verteilung. Zufallszahlenpaare, für die vor der Korrektur  $f_H < 0$  bzw.  $f_F < 0$  galt, liegen nun auf der entsprechenden Grenzlinie  $f_H = 0$  bzw.  $f_F = 0$ . Im zweiten Schritt der Korrektur sind nun noch Zufallszahlenpaare mit  $\sum f_i > 1$  entlang der in der rechten Bildhälfte eingezeichneten Erwartungswertgeraden zu verschieben. Zur Ermittlung dieser sind zunächst die Schnittpunkte der Korrelationsellipse mit der Geraden  $f_H = 1 - f_F$  zu bestimmen. Anschließend kann durch Halbierung der Strecke zwischen den beiden Schnittpunkten ein Punkt auf der Geraden  $f_H = 1 - f_F$  gefunden werden, durch welchen die Gerade zur Verschiebung verläuft. Diese schließt mit einer Waagrechten den Winkel  $\phi$  ein, der über

$$\phi = \arctan \frac{\sigma_2(\sin(\delta) - \cos(\delta)) + \sigma_1(\sin(\delta) + \cos(\delta))}{\sigma_2(\sin^2(\delta) - \sin(\delta)\cos(\delta)) + \sigma_1(\cos^2(\delta) - \sin(\delta)\cos(\delta))} \quad (4.19)$$

bestimmt werden kann. Die Halbachse der Korrelationsellipse schließt mit einer Waagrechten den Winkel  $\delta$  ein, der sich als Funktion der Varianzen  $\sigma_H^2$  und  $\sigma_F^2$  sowie des Korrelationskoeffizienten  $\rho_{H,F}$  schreiben lässt:

$$\delta = 0.5 \cdot \arctan \frac{2\rho_{H,F}\sigma_H\sigma_F}{\sigma_F^2 - \sigma_H^2}. \quad (4.20)$$

Die Koeffizienten  $\sigma_1^2$  bzw.  $\sigma_2^2$  bestimmen sich, ebenfalls nach [GHSW98], über:

$$\sigma_{1/2}^2 = \frac{1}{2} (\sigma_F^2 + \sigma_H^2) \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\sigma_F^2 + \sigma_H^2)^2 + 4\rho_{H,F}^2\sigma_H^2\sigma_F^2}. \quad (4.21)$$

Wie auch aus dem vorliegenden Beispiel ersichtlich, kann die Steigung der Verschiebungsgeraden unter bestimmten Bedingungen gegen 0

bzw.  $\pm\infty$  streben. Daher ist es zweckmäßig, die Winkel zu berechnen, um welche die Geraden zur Waagrechten gedreht sind, und die Verschiebung anschließend in Polarkoordinaten durchzuführen.

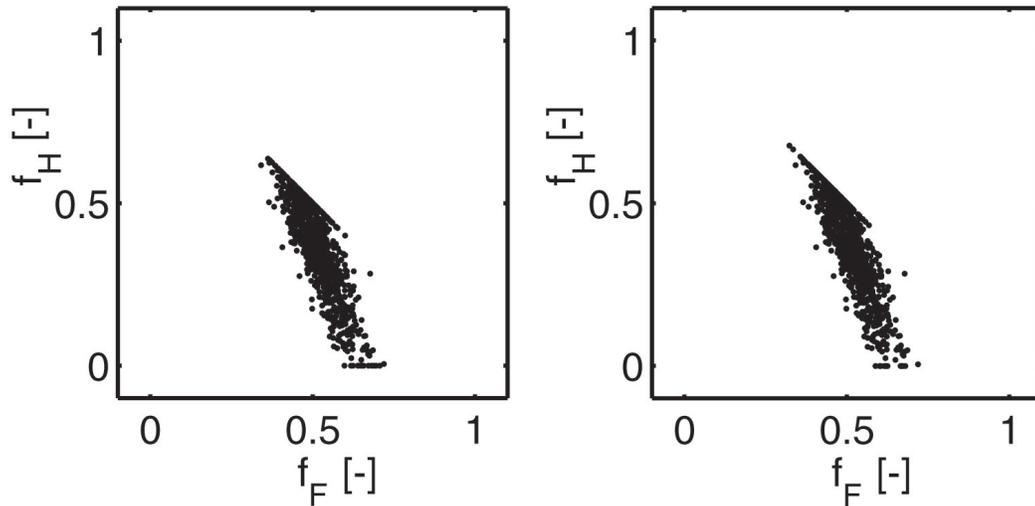
Zufallszahlenpaare, die nach Verschiebung entlang einer der 3 Geraden noch keinen zulässigen Werte annehmen, werden auf den nächstgelegenen Eckpunkt verschoben. Insbesondere trifft dies für Zufallszahlenpaare zu, die sich im Bereich der Ecken des Diagramms in Abb. 4.3 befinden.

#### 4.1.5 Korrektur durch Neugenerierung

Eine weitere Möglichkeit besteht darin, Zufallszahlenpaare mit zulässigen Wertekombinationen auf dem am nächsten gelegenen Rand neu zu generieren. Weist z.B. ein Zufallszahlenpaar für  $f_F$  einen Wert  $f_F < 0$  auf, so ist dieses durch einen neuen Einzelwert zu ersetzen, für den  $f_F = 0$  gilt. Während der Wert für  $f_F$  damit vorgegeben ist, muss der Wert für  $f_H$  mit Hilfe eines Zufallszahlengenerators neu bestimmt werden. Hierzu ist es notwendig, die bedingten Varianzen und Mittelwerte auf den Grenzen des Definitionsbereichs zu kennen. Während die bedingten Mittelwerte über die Erwartungswertgeraden (Gl. (4.18)) berechnet werden können, sind für die bedingten Varianzen zusätzliche Gleichungen erforderlich. Gemäß [GHSW98] ergibt sich für den Rand  $f_H = 0$  die bedingte Varianz zu:

$$\sigma_{H|f_F=\zeta_F}^2 = \sigma_H^2(1 - \rho_{H,F}^2). \quad (4.22)$$

Die bedingte Varianz  $\sigma_{F|f_H=\zeta_H}^2$  kann durch Austauschen der Indexes in Gl. (4.22) ermittelt werden. Entlang der Geraden  $f_H = 1 - f_F$  kann der Mittelwert über das in Kap. 4.1.4 beschriebene Verfahren berechnet werden. Die Herleitung einer Gleichung für die bedingte Varianz entlang der Geraden  $f_H = 1 - f_F$  ist ebenfalls durch Drehung des Koordinatensystems und umfangreiche Umformungen möglich. Da bedingte Varianzen aber nur von der Schnittrichtung und nicht von der Position des Schnittes abhängig sind, besteht die



**Abbildung 4.4:** Vergleich der Verteilungen, links: Verschiebung, rechts: Neugenerierung

einfachere Möglichkeit, die Varianz der erzeugten Zufallszahlen entlang einer zu  $f_H = 1 - f_F$  parallelen Geraden zu ermitteln und für die Neugenerierung zu verwenden.

#### 4.1.6 Vergleich der Korrekturverfahren

Vergleiche der beiden Verfahren wurden anhand eines weiten Bereichs für mögliche Mittelwerte und (Ko-)Varianzen durchgeführt. Abbildung 4.4 zeigt hieraus exemplarisch die Gegenüberstellung der beiden generierten Verteilungen.

Die Varianz für  $f_H$  und  $f_F$  sind für das Streudiagramm so gewählt, dass Korrekturen der Zufallszahlenpaare außerhalb der Grenzen  $f_H < 0$  und  $f_H = 1 - f_F$  erforderlich sind. An diesen Rändern ist im Streudiagramm der korrigierten Verteilungen eine Häufung der Realisierungen zu erkennen. Beide Verteilungen sind auf Basis der gleichen Zufallszahlenpaare erzeugt, so dass im inneren Bereich die Verteilungen identisch sind. Aufgrund der unterschiedlichen Korrekturverfahren können an den Rändern Abweichungen zwischen den beiden Verteilungen auftreten. Anhand der Streudiagramme lassen

sich aber qualitativ keine signifikanten Unterschiede erkennen. Auch für die statistischen Momente (Mittelwert, Varianz und Schiefe) der Verteilungen ergeben sich nahezu identische Werte.

Die durchgeführten Studien zeigen, dass beide Verfahren zur Korrektur der Verteilung verwendet werden können. Es soll aber erwähnt werden, dass die Methode der Verschiebung unzulässiger Zufallszahlenpaare aufgrund ihrer Formulierung numerisch robuster ist, so dass diese für die folgenden Untersuchungen zur Anwendung kommt.

#### 4.1.7 Erzeugung Gleichverteilungs-basierter jPDDs

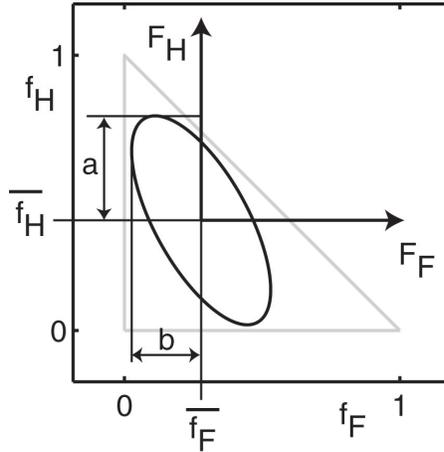
Neben der multivariaten Gauß-Verteilung kann auch die multivariate Gleichverteilung als Basisverteilung dienen. Wie bei der Gauß-Verteilung treten auch bei der korrelierten Gleich-Verteilung Einzelwerte auf, die die physikalischen Randbedingungen des zu beschreibenden Problems verletzen, so dass ebenfalls eines der in den Kapiteln 4.1.4 bzw. 4.1.5 beschriebenen Korrekturverfahren zur Anwendung kommen muss. In den folgenden Abschnitten wird das Verfahren zur Generierung einer korrelierten multivariaten gleichverteilten Basisverteilung beschrieben.

Abbildung 4.5 zeigt die Korrelationsellipse für die Herleitung der korrelierten Gleichverteilung. In der von der Ellipse umschlossenen Fläche sollen alle Einzelwerte der Verteilung angeordnet sein.

Zur Herleitung der notwendigen Gleichungen ist es zweckmäßig, das Koordinatensystem so zu verschieben, dass der Mittelpunkt der Korrelationsellipse im Ursprung des Koordinatensystems liegt. Im  $(F_F, F_H)$ -Koordinatensystem kann die Korrelationsellipse durch die Gleichung

$$\frac{F_F^2}{\sigma_F^2} - 2\rho \frac{F_F \cdot F_H}{\sigma_F \cdot \sigma_H} + \frac{F_H^2}{\sigma_H^2} = C \quad (4.23)$$

beschrieben werden. Die Konstante  $C$  ist dabei so zu wählen, dass



**Abbildung 4.5:** Korrelationsellipse für die Herleitung der korrelierten Gleichverteilung.

die erzeugte Verteilung die Varianzen  $\sigma_F^2$  und  $\sigma_H^2$  besitzt. Die Bestimmungsgleichung für die Konstante  $C$  lässt sich mit einigen Umformungen aus Gl. (4.23) und der Definition einer Gleichverteilung herleiten.

Durch Auflösung der Gl. (4.23) nach  $F_H$  ist zunächst der Definitionsbereich der Gleichung und damit der Korrelationsellipse zu bestimmen. Aus der für quadratische Gleichungen der Form  $\alpha x^2 + \beta x + \gamma = 0$  bekannten Lösung

$$x_{1/2} = \frac{-\beta \pm \sqrt{\beta^2 - 4\alpha\gamma}}{2\alpha} \quad (4.24)$$

lässt sich der Definitionsbereich aufgrund der Bedingung  $\beta^2 - 4\alpha\gamma \geq 0$  für  $F_F$  nach einigen Umformungen zu

$$|F_F| \leq \sqrt{\frac{C\sigma_F^2}{1 - \rho^2}} \quad (4.25)$$

bestimmen. Ferner ist bekannt [Stö95], dass die Varianz einer Gleichverteilung der Breite  $2b$  sich über

$$\sigma^2 = \frac{(2b)^2}{12} \quad (4.26)$$

bestimmt. Die Ausdehnung  $2b$  der Korrelationsellipse in  $F_F$ -Richtung lässt sich demnach einerseits über die Ungleichung (4.25) und andererseits über Gl. (4.26) bestimmen, so dass sich die Konstante  $C$  über folgende Gleichung ergibt:

$$C = 3(1 - \rho^2). \quad (4.27)$$

Zur Generierung der korrelierten Gleichverteilung innerhalb der Ellipse ist zunächst eine gleichverteilte Zufallszahl  $F_F^{(i)}$  im Intervall  $-b \leq F_F \leq b$  zu erzeugen. Durch Auflösen der Gl. (4.26) nach  $b$  kann dieses Intervall auch in Abhängigkeit der Varianz  $\sigma_H^2$  des Mischungsbruchs  $f_H$  wie folgt ausgedrückt werden:

$$-3\sigma_F^2 \leq F_F \leq 3\sigma_F^2. \quad (4.28)$$

In Abb. 4.6 ist die Position von  $F_F^{(i)}$  durch eine senkrechte Linie gekennzeichnet. Die Schnittpunkte dieser Geraden mit der Korrelationsellipse können durch Auflösen von Gl. (4.23) nach  $F_H$  bestimmt werden und geben die untere bzw. obere Grenze für eine zweite in diesem Intervall gleichverteilte Zufallszahl  $F_H^{(i)}$  an. Ist das Einzelwertepaar  $(F_F^{(i)}, F_H^{(i)})$  erzeugt, erfolgt durch Addieren der Mittelwerte  $(\overline{f_F}, \overline{f_H})$  die Rücktransformation in das  $(f_F, f_H)$ -Koordinatensystem.

Abbildung 4.7 zeigt die sich für zwei unterschiedliche Mittelwerte  $\overline{f_F}$  und  $\overline{f_H}$ , sowie Varianzen  $\sigma_F^2$  und  $\sigma_H^2$  ergebenden Verteilungen nach Anwendung des in Kap. 4.1.4 beschriebenen Korrekturverfahrens.

Die Verteilung links in Abb. 4.7 erfordert Korrekturen nur im Bereich  $f_F < 0$ , so dass sich bei  $f_F = 0$  ein deutlicher Peak im Histogramm der Randverteilung ergibt. Hingegen sind alle Einzelwerte mit  $f_F > 0$  nahezu gleichverteilt. Auch die Randverteilung von  $f_H$  zeigt in dem von der Korrektur nicht betroffenen Bereich die erwartete Gleich-

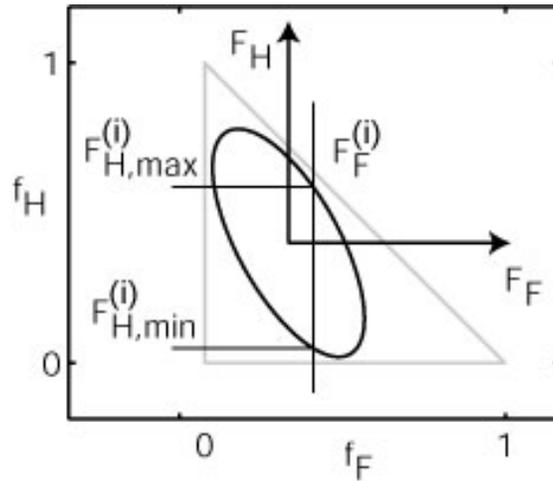


Abbildung 4.6: Prozedere zur Erzeugung einer korrelierten Gleichverteilung.

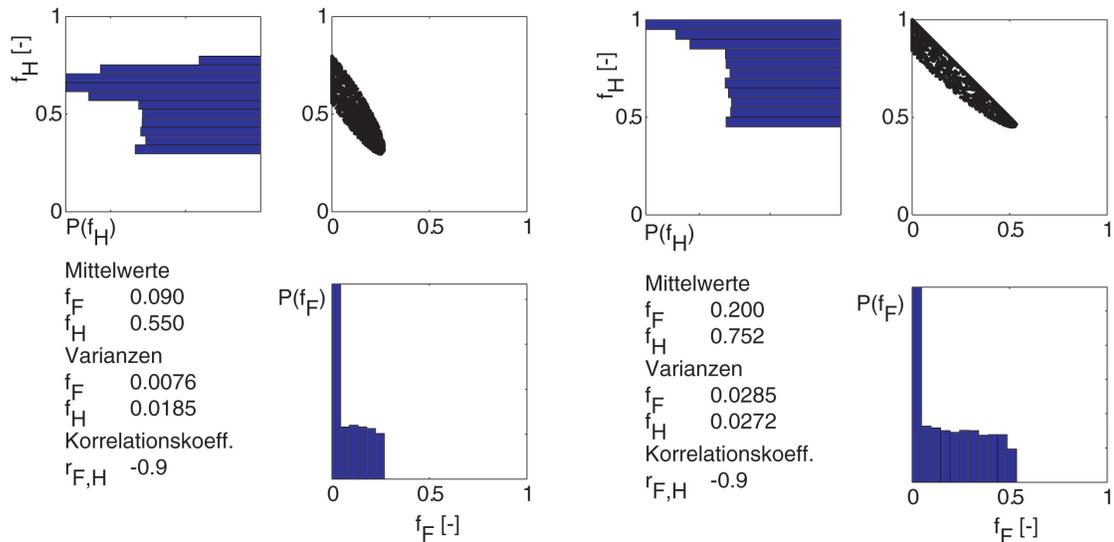
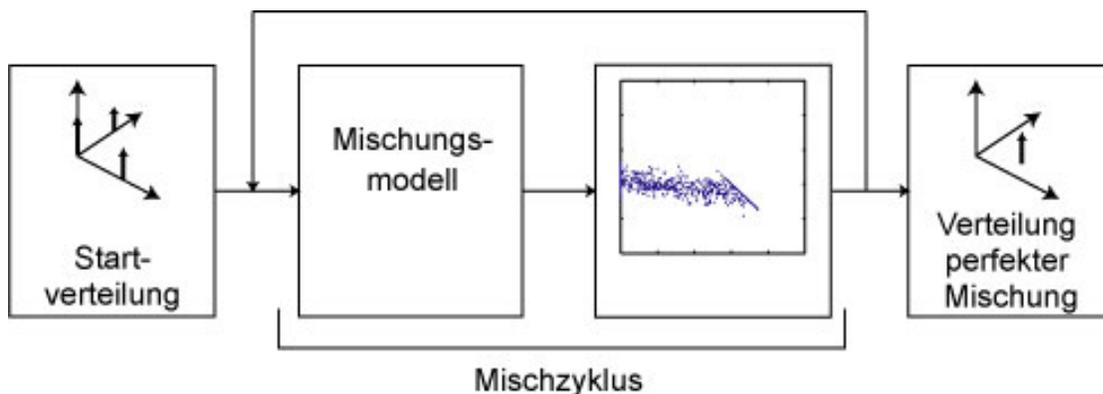


Abbildung 4.7: Negativ korrelierte Gleichverteilungsbasierte jPDDs nach Anwendung des Korrekturverfahrens.

verteilung. Die verschobenen Einzelwerte bedingen aber für größere Werte von  $f_H$  eine Anhäufung von Einzelwerten auf dem Rand.



**Abbildung 4.8:** Algorithmus zur Erzeugung von Verteilungen mit einem Mischungsmodell.

#### 4.1.8 Erzeugung der Distributionen mit Mischungsmodellen

Distributionen durch Zufallszahlengeneratoren zu erzeugen, erscheint nur in sehr geringem Maß physikalisch motiviert. Sie nutzt lediglich die aus Versuchen bzw. Berechnungen bekannten Informationen über die Eigenschaften der realen PDF und versucht diese so gut wie möglich mit einer synthetischen PDF zu approximieren.

Physikalisch motivierter erscheint aber die jPDD (zur Approximation der Mischungsbruch-PDF) mit einem Verfahren zu generieren, das die Mischungsvorgänge selber nachbildet. Hierfür ist die Formulierung von Mischungsmodellen erforderlich, mit deren Hilfe die Mischung in der Verteilung durchgeführt wird. Das zu entwickelnde Mischungsmodell berechnet hierzu anhand der in der Verteilung enthaltenen Einzelwerte den neuen Zustand der Verteilung nach Durchführung eines Mischungsvorgangs. Der Begriff Mischungsvorgang oder wie im Folgenden verwendet Mischungszyklus erscheint hier etwas abstrakt. Mit der in Abb. 4.8 gezeigten Skizze und mit Hilfe des folgenden Gedankenexperiments soll dies besser nachvollziehbar werden.

In einem Behälter befinden sich drei Stoffe in zunächst vollkommen ungemischtem Zustand. Für eine bestimmte Zeit werden die

im Behälter befindlichen Stoffe gemischt. Anschließend wird der Behälter in einzelne Kontrollvolumen unterteilt, für welche jeweils die mittleren Mischungsbrüche bestimmt werden. Die Mischungsbruch-PDF lässt sich dann über die Zusammenfassung der Zustände in allen Kontrollvolumen des Behälters ermitteln. Diese Mischungsbruch-PDF kann in einem weiteren Schritt dazu dienen, Reaktionsraten für ein bestimmtes chemisches System zu berechnen und als Funktion der ersten beiden statistischen Momente der Verteilung für eine nachfolgende CFD abzuspeichern. Die Dauer der einzelnen Mischungszyklen hat dabei keine Bedeutung, sondern beeinflusst nur die Dichte der Stützpunkte in der Tabelle.

Anhand Abb. 4.8 lässt sich auch die Implementierung eines solchen Verfahrens erläutern. Beginnend mit einer Verteilung mit großen Varianzen ist wiederholt ein Mischungsmodell anzuwenden. Während dieses Vorgangs verringern sich stetig die Varianzen der Verteilung. Eine geeignete Basisverteilung kann beispielsweise aus einigen wenigen  $\delta$ -Peaks auf den physikalischen Rändern des Problems bestehen. In der hier entwickelten Formulierung basieren alle gezeigten Verteilungen auf drei  $\delta$ -Peaks, die in den Ecken des Definitionsbereiches angeordnet sind, so dass die Startverteilung den Zustand vollständiger Ungemischtheit bei jeweils unterschiedlichen Mittelwerten repräsentiert. Nach Generierung der Basisverteilung wird ein aus der Modellierung von PDF-Transportgleichungen bekanntes molekulares Mischungsmodell auf die Distribution angewendet.

Das IEM (*Interaction by Exchange with the Mean*) Modell [Dop94] ist hierfür aufgrund seiner deterministischen Formulierung aus folgendem Grund nicht geeignet: Nach Vereinfachung des IEM Modells für die vorliegende Anwendung lässt sich der Zustand der Größe  $\phi$  nach dem Mischprozess über die Gleichung

$$\phi^1 = \phi^0 - (1 - e^{-C})(\phi^0 - \bar{\phi}). \quad (4.29)$$

bestimmen. Hierbei entspricht der Index 0 bzw. 1 dem Zustand vor bzw. nach Anwendung des Mischmodells und  $\bar{\phi}$  dem Mittelwert der

Verteilung. Die Mischungsintensität kann über den Parameter  $C$  eingestellt werden. Aus obiger Gleichung wird ersichtlich, dass alle Zahlenpaare stets die gleiche Änderung erfahren, so dass sich die Verteilung auch nach Anwendung mehrerer Mischprozesse durch  $\delta$ -Peaks darstellen lässt.

Das Modified-Curl Modell [Dop94] verwendet bei der Manipulation der Verteilung Zufallszahlen als Wichtungskoeffizienten, um einen zufällig verteilten Zustand zwischen den aktuellen Werten und dem Zustand vollständiger Mischung eines Einzelwertpaares zu erhalten. In der bei PDF-Transportgleichungen zur Anwendung kommenden Formulierung des Modified Curl Modells wird zunächst die Anzahl der zu mischenden Partikelpaare  $N_P$  aus der zur Verfügung stehenden Gesamtmenge  $N$  bestimmt:

$$N_P = \frac{1.5C_\phi N}{\tau_t}. \quad (4.30)$$

Ein turbulentes Zeitmaß  $\tau_t$  dient zur Skalierung der Mischungsintensität,  $C_\phi$  ist ein Modellkoeffizient, mit dem sich das Modell kalibrieren lässt. Die Manipulation der Partikeleigenschaften  $\phi$  der beiden zu mischenden Partikel mit den Indexes  $i$  und  $j$  und den Massen  $m_i$  und  $m_j$  folgt der Vorschrift:

$$\phi_{i/j}^1 = (1 - \zeta)\phi_{i/j}^0 + \zeta \frac{\phi_i^0 m_i + \phi_j^0 m_j}{m_i + m_j}. \quad (4.31)$$

Der Gewichtungsfaktor  $\zeta$  ist eine gleichverteilte Zufallszahl im Intervall  $[0; 1]$ . Es ist anzumerken, dass sich durch die Anwendung dieser Vorschrift die Varianz erniedrigt, der Mittelwert aber konstant bleibt. Bevor das Modified-Curl Modell für den vorliegenden Anwendungsfall eingesetzt werden kann, sind einige Anpassungen notwendig. Gleichung (4.30) kann zu

$$N_P = C \cdot N \quad (4.32)$$

vereinfacht werden, da bei einer a priori Erzeugung der Distribution keine Informationen über die in der CFD zu erwartenden turbulenten Zeitskalen vorhanden sind. Dies stellt keinen Nachteil dar, da sich hiermit nur die Dauer der Mischungszyklen bzw. die Dichte der Stützpunkte, an denen die Reaktionsraten berechnet werden können, verändern lässt.

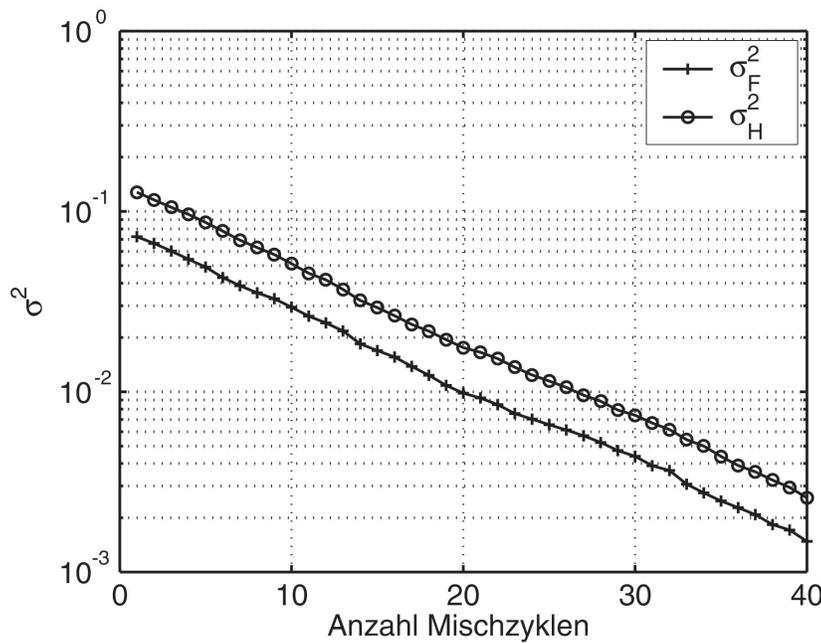
Da in der erzeugten Verteilung alle Einzelwerte die gleiche Gewichtung besitzen, lassen sich die Partikelmassen bzw. Gewichtungsfaktoren in Gl. (4.31) herauskürzen, so dass sich der Zustand nach der Mischung durch gewöhnliche Mittelung ergibt:

$$\phi_{i/j}^1 = (1 - \zeta)\phi_{i/j}^0 + \zeta\frac{1}{2}(\phi_i^0 + \phi_j^0). \quad (4.33)$$

Abb. 4.9 zeigt den Verlauf der Varianzen der beiden Mischungsbrüche als Funktion der Anzahl durchgeführter Mischzyklen. Ein Mischzyklus entspricht dabei der einmaligen Auswahl einer Anzahl von  $N_P$  Zahlenpaaren  $(f_H, f_F)$  und der anschließenden Anwendung von Gl. (4.33).

Wie erwartet fallen die Varianzen  $\sigma_F^2$  und  $\sigma_H^2$  mit steigender Anzahl der Mischungszyklen ab. Ferner ist anzumerken, dass die Entwicklung der Varianzen bei Wiederholung des Experiments reproduzierbar ist, so dass sich die Anzahl der Mischungszyklen, die zum Erreichen gewünschter Varianzen benötigt werden, im Voraus bestimmen lassen. Abb. 4.9 zeigt zudem, dass die sich einstellenden Varianzen  $\sigma_F^2$  und  $\sigma_H^2$  aneinander gekoppelt sind. Sollen Verteilungen mit davon abweichenden Varianzen generiert werden, so lässt sich dies beispielsweise durch eine zusätzliche Gewichtung der Mischungsintensität in Gl. (4.33) erreichen.

Zahlreiche selbst durchgeführte Experimente haben gezeigt, dass sich der Korrelationskoeffizient durch Anwendung von Gl. (4.33) nur sehr geringfügig ändert. Eine gezielte Beeinflussung des Korrelationskoeffizienten lässt sich durch Sortieren einer Teilmenge von Einzelwerten  $(f_H, f_F)$  erreichen. Negativere Korrelationskoeffizienten stellen sich



**Abbildung 4.9:** Verlauf der Mischungsbruchvarianzen während der Anwendung des adaptierten Modified-Curl Mischungsmodells.

bei einer gegensinnigen Sortierung ein, während für positivere Korrelationskoeffizienten eine gleichsinnige Sortierung durchzuführen ist. Über die Größe der zu sortierenden Teilmenge lässt sich gezielt die Stärke der Veränderung beeinflussen.

#### 4.1.9 Einfluss der (Ko-)Varianzen auf die Reaktionsraten

Der Einfluss der Varianzen und des Korrelationskoeffizienten auf die Reaktionsraten lässt sich am besten anhand von Verteilungen untersuchen, die mit dem angepassten Modified-Curl Ansatz generiert wurden. Dieses Verfahren stellt sicher, dass der Mittelwert der Mischungsbrüche  $f_F$  und  $f_H$  während der wiederholten Anwendung der Mischungsvorschrift konstant bleibt. Abbildung 4.10 zeigt neben der Entwicklung der Varianzen als Funktion der Anzahl durchgeführter Mischungszyklen auch die sich für die aktuelle Verteilung ergebende Reaktionsrate. Um den Einfluss des Korrelationskoeffizienten auf die

Reaktionsrate zu untersuchen, wurden die Berechnungen zum einen für unkorrelierte und zum anderen für negativ korrelierte Verteilungen durchgeführt.

Die Reaktionsraten werden hierfür im Folgenden für ein einfaches Zünd-Modell berechnet. Hesselt [Hes98] (vergl. Kap. 4.2.3) schlägt zur Modellierung der Selbstzündung in einem Diesel-Motor vor, eine Transportgleichung für den Zündfortschritt zu lösen. Der Quellterm dieser Gleichung enthält die Reaktionsrate  $\dot{\omega}$ , für welche eine Abhängigkeit von der Inversen der Zündverzugszeit  $\tau_Z$  in der folgenden Form angenommen wird:

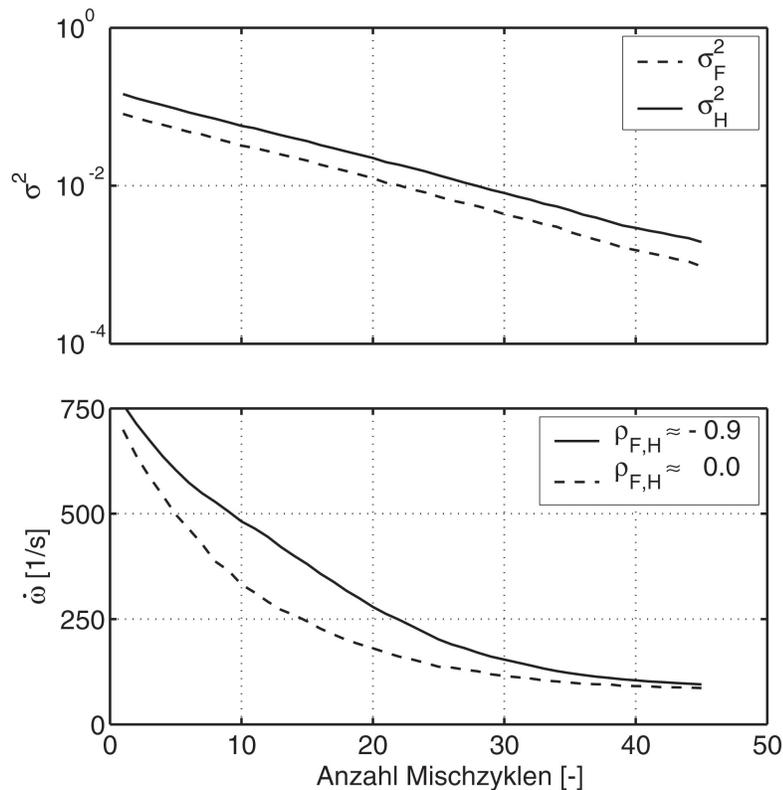
$$\dot{\omega} = \frac{1}{\tau_Z}. \quad (4.34)$$

Dieser Ansatz lässt sich durch Faltung der Reaktionsrate  $\dot{\omega}$  über eine PDF auf die Beschreibung turbulenter Strömung erweitern, so dass sich für die Berechnung der mittleren Reaktionsrate die folgende Gleichung ergibt:

$$\bar{\dot{\omega}} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \dot{\omega}(f_H^{(i)}, f_F^{(i)}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{1}{\tau_Z(f_H^{(i)}, f_F^{(i)})}. \quad (4.35)$$

Für die 3 Ströme H, C und F werden unterschiedliche Temperaturen mit einem Verhältnis von  $T_H : T_C : T_F = 4 : 2 : 1$  angenommen. Der Einfluss der Temperatur auf die Zündverzugszeit resp. Reaktionsrate wird indirekt über die Mischungsbrüche berücksichtigt.

Für den hier dargestellten Fall ( $\bar{f}_F = 0.1$  und  $\bar{f}_H = 0.8$ ) ergibt sich mit geringer werdender Varianz auch eine Reduktion der Reaktionsrate. Dies deckt sich auch mit der Untersuchung in Kap. 3.2.1, bei der sich für eine stark fluktuierende Verteilung der Temperatur eine signifikante Erhöhung der Reaktionsrate einstellte. Ferner ist zu bemerken, dass die Reaktionsrate einen stetigen monoton abfallenden Verlauf aufweist. Der Einfluss des Korrelationskoeffizienten lässt sich anhand des gezeigten Diagramms zeigen. Stark negative Kor-



**Abbildung 4.10:** Einfluss der (Ko-)Varianzen auf die Reaktionsrate für  $\overline{f}_F = 0.1$  und  $\overline{f}_H = 0.8$ .

relationen zwischen dem Heißgas- und dem Brennstoffstrom führen zu höheren Reaktionsraten. Insbesondere im Bereich mittlerer Varianzen (nach 10 - 20 durchgeführten Mischzyklen) ist eine deutliche Erhöhung der Reaktionsrate feststellbar. Mit kleiner werdender Varianz verschwindet dieser Einfluss, da die Streuung der Verteilung geringer wird und damit die Ausprägung der Korrelation nur noch eine untergeordnete Rolle spielt. Die Reaktionsrate strebt schließlich gegen den Wert, der sich bei Berechnung der Reaktionsrate für die mittleren Werte der Mischungsbrüche  $\overline{f}_F = 0.1$  und  $\overline{f}_H = 0.8$  ergibt.

Die Verstärkung der Reaktion durch negative Korrelation zwischen Heißgas und Brennstoff erscheint auf den ersten Blick widersinnig. Allerdings ist für den vorliegenden Fall zu beachten, dass bei negativer Korrelation für einen Mischungsbruch  $f_H$  mit  $f_H > \overline{f}_H$  folgt, dass der Brennstoffmassenbruch  $f_F$  einen Wert annimmt, der klei-

ner als der Mittelwert  $\overline{f_F}$  ist. Negative Korrelation zwischen dem Heißgas- und dem Brennstoff-Strom hat zur Folge, dass der Mischungsbruch des dritten Stroms tendenziell höhere Werte annehmen kann als bei nicht vorhandener bzw. positiver Korrelation. Ob im Einzelnen der Mischungsbruch  $f_C$  allerdings oberhalb dessen Mittelwert  $\overline{f_C}$  liegt, hängt von den Varianzen des Heißgas- und Brennstoff-Mischungsbruches ab. Da das Temperaturverhältnis zwischen Trägerluft und Brennstoff in etwa  $T_C/T_F \approx 2$  beträgt, erhöht sich somit die Mischungstemperatur für diesen Zustand. Da im Allgemeinen die bei der Verbrennung ablaufenden chemischen Prozesse bedeutend stärker durch die Starttemperatur als durch die Startkonzentration des Brennstoffs bestimmt werden, führt eine negative Korrelation zwischen  $f_F$  und  $f_H$  zu einer tendenziell höheren Reaktionsrate.

#### 4.1.10 Validierung anhand von LES-Daten

Anhand des im vorherigen Kapitel eingeführten Zünd-Modells soll der Einfluss der Verteilung auf die Reaktionsraten genauer untersucht werden. Spezielles Augenmerk soll dabei auf den Einfluss der höheren statistischen Momente auf die berechneten Reaktionsraten gelegt werden. Wie bereits erwähnt, werden diese beim entwickelten Distributionsmodell in der CFD nicht erfasst. Durch Auswahl geeigneter Verfahren zur Genrierung der jPDDs können die höheren Momente aber implizit so beeinflusst werden, dass sich plausible Formen für die jPDDs ergeben. Dies kann aber nur anhand einer LES bzw. durch Lösen einer PDF-Transportgleichung verifiziert werden.

Die Abbildungen 4.11 bis 4.13 zeigen die mit dem Gauß- und dem Modified-Curl Verfahren generierten Verteilungen im Vergleich mit denen aus einer LES. Bei der LES handelt es sich um die Berechnung des Mischungsfeldes eines an das SEV-Injektorkonzept angelehnten Mischers, die im Rahmen einer Kooperation von ALSTOM (Baden CH) mit dem Forschungsinstitut CERFACS (Toulouse FR) durchgeführt wurden. Da mit kleiner werdenden Varianzen der Einfluss

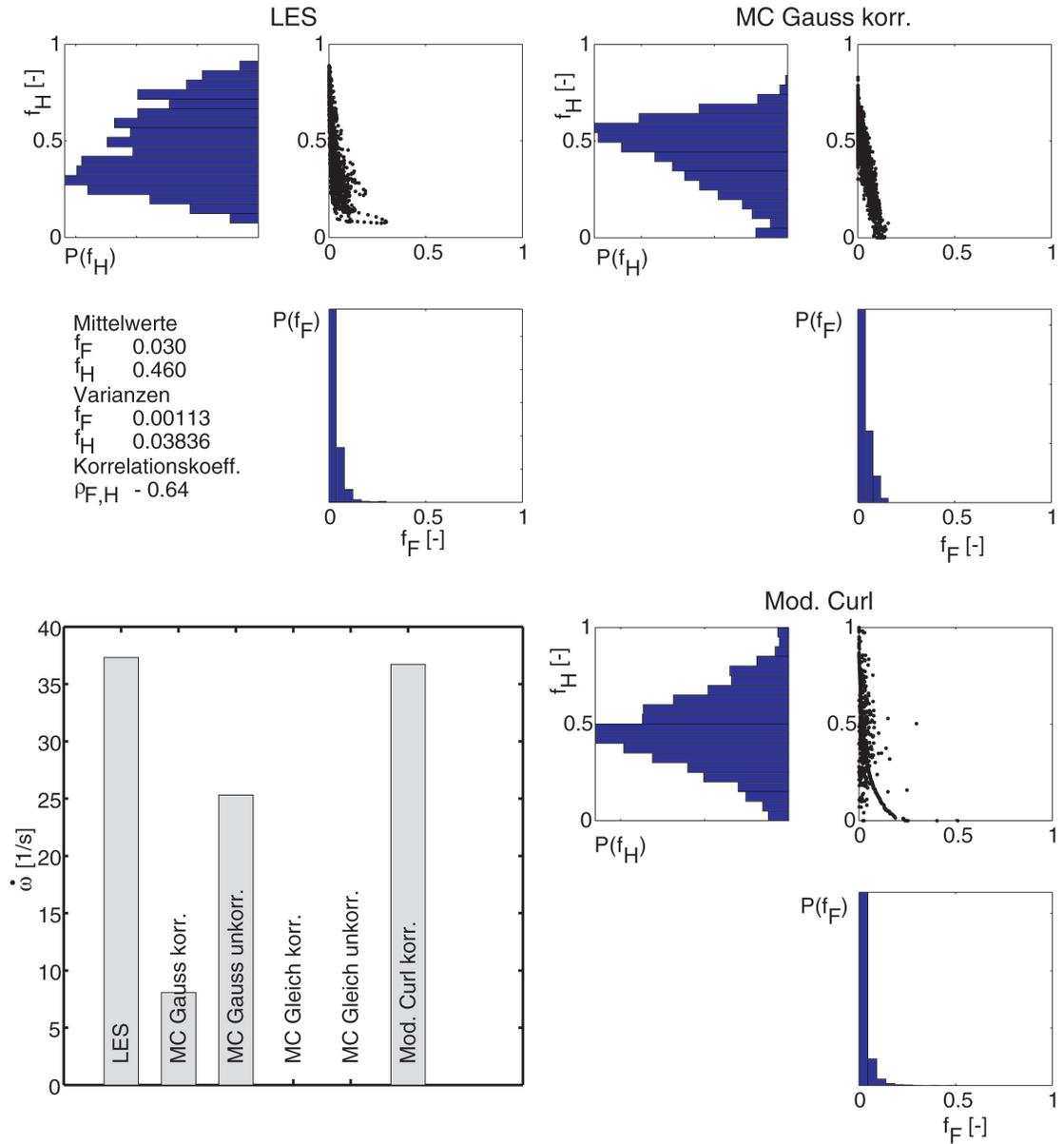
der Verteilungsform vernachlässigbar wird, erstreckt sich der Vergleich nur auf Verteilungen mit mittleren und großen Varianzen. Der besseren Vergleichsmöglichkeit wegen sind in den Abbildungen links unten jeweils Balkendiagramme mit den sich für die verschiedenen Verteilungen ergebenden Reaktionsraten gezeigt.

Zur Durchführung des Vergleichs sind für die LES Daten zunächst direkt die Reaktionsraten zu berechnen. In einem weiteren Schritt erfolgt eine Reduktion der LES Daten auf die ersten beiden statistischen Momente (Mittelwert und (Ko-)Varianzen) und der Generierung der entsprechenden synthetischen Verteilungen (jPDDs) mittels der vorgestellten Methoden.

Die Verteilung in Abb. 4.11 besitzt in Richtung des Mischungsbruchs  $f_H$  eine sehr starke Streuung, während  $f_F$  nur eine geringe Varianz aufweist. Bei der Betrachtung der resultierenden Reaktionsraten lassen sich große Abweichungen zwischen der LES und der korrelierten Gauß-basierten jPDD erkennen. Anhand der Histogramme für  $f_H$  kann festgestellt werden, dass bei der LES der Anteil der Wertepaare mit einem Mischungsbruch von  $f_H > 0.8$  deutlich größer ist als bei der korrelierten Gauß-basierten jPDD. Da chemische Prozesse in Gasen im Allgemeinen eine hohe Sensitivität bezüglich der Temperatur aufweisen, erhöht der Anteil der Wertepaare, die einen großen Wert für  $f_H$  aufweisen, die Reaktionsrate signifikant. Aufgrund des Verfahrens zur Generierung der Zufallszahlen ergibt sich bei der unkorrelierten Gauß-basierten jPDD ebenfalls ein höherer Anteil an Wertepaaren mit  $f_H > 0.8$ .

Eine deutlich bessere Übereinstimmung lässt sich beim Vergleich der Reaktionsraten aus der LES mit der Mischungsmodell-basierten Verteilung beobachten. Hier sind die Abweichungen vernachlässigbar. Dies liegt vor allem daran, dass, wie in der LES, auch bei dieser Verteilung ein ähnlicher Anteil der Zahlenpaare hohe Werte für  $f_H$  aufweist.

Zur Quantifizierung dieser Asymmetrien der gezeigten PDFs lässt sich der Begriff der *Schiefte* aus der Statistik verwenden. Die Schiefe



**Abbildung 4.11:** Validierung der Verteilungen mit Daten aus einer LES bei großer Varianz für  $f_H$  und kleiner Varianz für  $f_F$ .

einer Größe  $\phi$  ist definiert über:

$$y = \frac{1/N \sum (\bar{\phi} - \phi_i)^3}{\sigma_\phi^3}, \quad (4.36)$$

LES	Gauss korr.	Gauss unkor.	Mod. Curl
0,2	-0,6	0,0	0,1

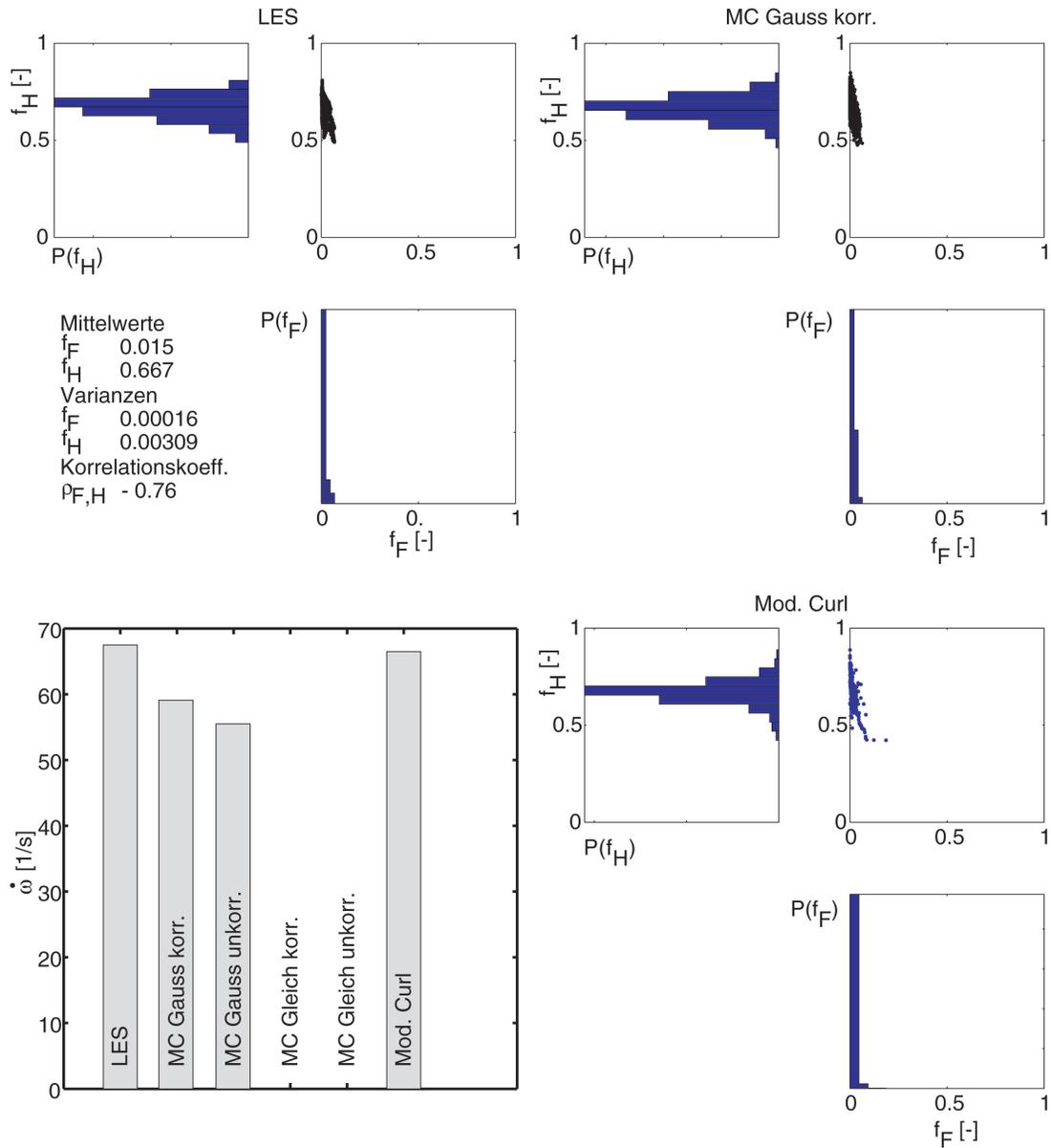
**Tabelle 4.1:** Schiefe der Verteilungen aus Abb. 4.11.

wobei  $1/N \sum (\bar{\phi} - \phi_i)^3$  dem dritten Moment,  $N$  der Ensemblegröße und  $\sigma_\phi$  der Standardabweichung der Verteilung entspricht. Für symmetrische Verteilungen nimmt die Schiefe den Wert  $y = 0$  ein. Verteilungen, deren Streuung hin zu größeren Werten stärker ist als zu kleineren Werten, besitzen eine positive Schiefe. Entsprechendes gilt für den umgekehrten Fall.

Für die verschiedenen Verteilungen aus Abb. 4.11 ist die Schiefe in Tab. 4.1 zusammengefasst. Die ermittelten Werte untermauern die obig beschriebene Hypothese. Die korrelierte Gauß-basierte jPDD besitzt mit  $y = -0.6$  eine sehr starke Streuung hin zu kleineren Werten, so dass sich auch nur eine sehr geringe Reaktionsrate ergibt. Hingegen nimmt die Schiefe der Mischungsmodell-basierten jPDD einen ähnlichen Wert ein wie die Verteilung aus den LES-Daten, so dass auch für beide Verteilungen ähnliche Reaktionsraten folgen.

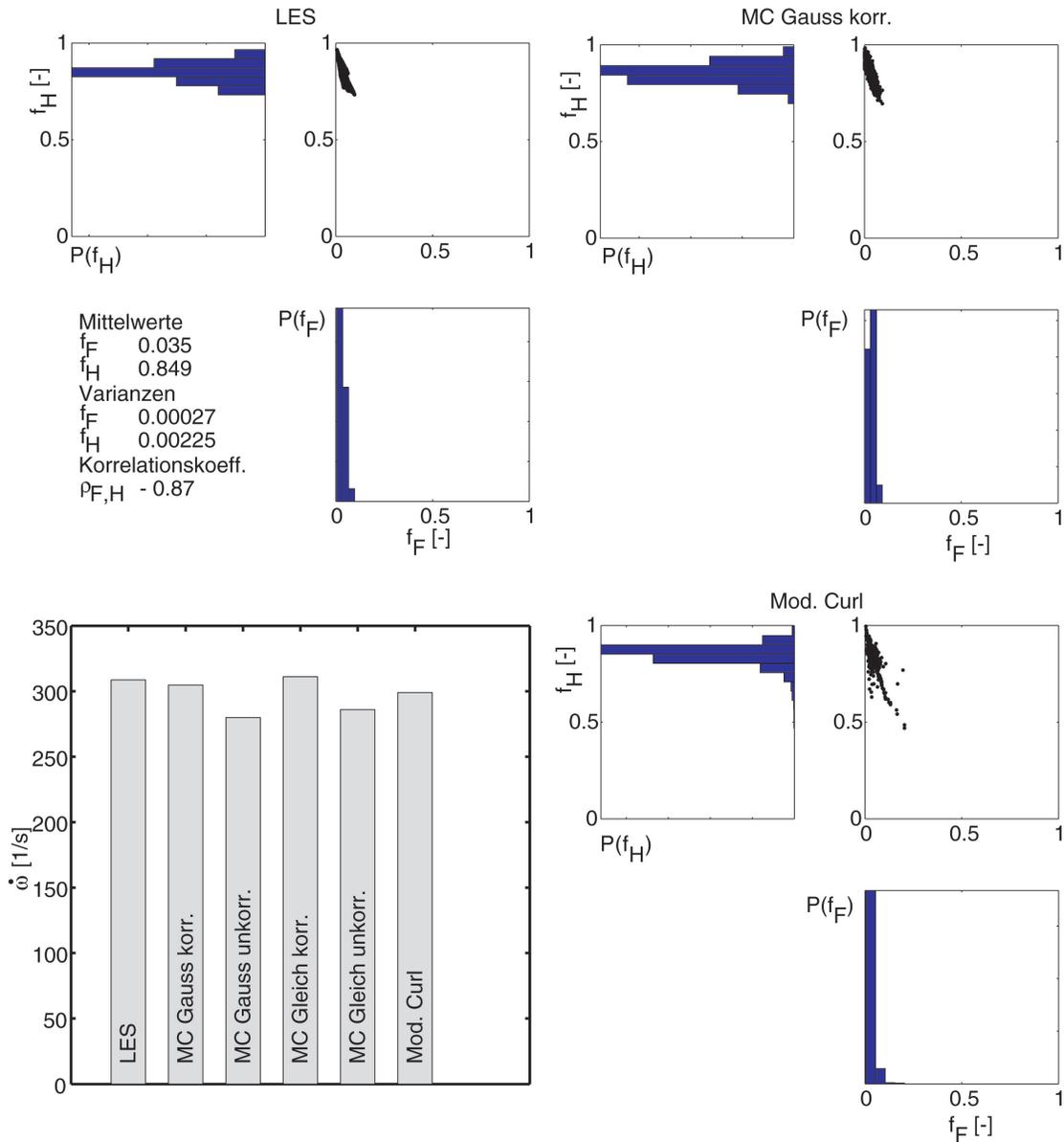
Abbildung 4.12 zeigt die Verteilungen für einen Beobachtungspunkt etwas weiter stromab. Erwartungsgemäß treten geringere Varianzen auf. Des Weiteren zeigt die Verteilung starke Ähnlichkeit zu einer Gauß-Verteilung. Dementsprechend ergeben sich für die anhand der LES-Daten berechnete Reaktionsrate und den mit Hilfe der Gauß-basierten jPDD bestimmten Werten gute Übereinstimmungen. Ferner lässt sich feststellen, dass durch die Berücksichtigung der Korrelation zwischen Heißgas- und Brennstoff-Mischungsbruch eine weitere Verbesserung der Ergebnisse erreicht werden kann. Beste Übereinstimmung mit der Reaktionsrate der LES Daten wird wiederum mit Verteilungen erreicht, die mit Hilfe des Mischungsmodell-Ansatzes generiert wurden.

Streudiagramme von Verteilungen für ähnliche Varianzen wie in Abb. 4.12 sind in Abb. 4.13 gezeigt. Während die Verteilungen in Abb. 4.12 zahlreiche Einzelwerte im Bereich  $f_F = 0$  aufweist, sind die Mittel-



**Abbildung 4.12:** Validierung der Verteilungen mit Daten aus einer LES.

werte und Varianzen in Abb. 4.13 so gewählt, dass zahlreiche Einzelwerte der Verteilung in der linken oberen Ecke zu liegen kommen. Daher ist bei Generierung der auf Gauß- bzw. Gleichverteilungen basierenden jPDDs damit zu rechnen, dass zahlreiche Einzelwerte die Bedingung  $f_F + f_H \leq 1$  verletzen und korrigiert werden müssen. Weiterhin ist an diesem Beobachtungspunkt mit  $\rho_{F,H} \approx -0.9$  eine



**Abbildung 4.13:** Validierung der Verteilungen mit Daten aus einer LES bei stark negativer Korrelation und mittlerer Varianz für  $f_H$ .

besonders starke negative Korrelation festzustellen.

Wie bereits bei den beiden anderen Punkten lässt sich die mit Hilfe der LES-Daten ermittelte Verteilung gut durch jPDDs, die mittels des Modified-Curl Verfahrens generiert wurden, approximieren. Die Berechnung mittlerer Reaktionsraten für beide Verteilungen führt zu

ähnlichen Ergebnissen. Allerdings muss angemerkt werden, dass sich bei Einsatz einer korrelierten Gauß-basierten jPDD in diesem Fall die beste Übereinstimmung der Reaktionsraten ergibt. Auch der Einfluss der Korrelation lässt sich feststellen. Die Annahme einer unkorrelierten Verteilung führt, wie auch in Abb. 4.12, zu einer merklich geringeren mittleren Reaktionsrate. Ebenfalls brauchbare Reaktionsraten liefern für diesen Beobachtungspunkt auch die beiden Varianten der Gleichverteilungs-basierten jPDDs.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass jPDDs, die mit Hilfe des Modified-Curl Mischungsansatzes generiert wurden, sich am besten zur Approximation der Mischungsbruch-PDF eignen. Diese Aussage lässt sich aus einem Vergleich der für die unterschiedlichen Verteilungen berechneten Reaktionsraten ableiten. Mit Hilfe korrelierter Gauß-basierter jPDDs berechnete Reaktionsraten zeigen in Bereichen großer Ungemischtheit die größten Fehler, da hier die Abweichungen von einer clipped-Gauß Verteilung signifikant sind. In Bereichen, in denen die Durchmischung weiter vorangeschritten ist, lässt sich aber eine bedeutend bessere Übereinstimmung feststellen. Bei der Generierung von Gleichverteilungs-basierten jPDDs treten in vielen Bereichen Schwierigkeiten auf, oftmals kann innerhalb bestimmter Toleranzen für vorgegebene Mittelwerte und (Ko-) Varianzen keine Verteilung generiert werden.

Es muss an dieser Stelle auch erwähnt werden, dass bei der Berechnung der Reaktionsraten anhand der LES-Daten mit Fehlern von ca. 5% zu rechnen ist, da für die Auswertung Daten nur für ca. 1500 Zeitschritte zur Verfügung standen. Qualitativ ist diese Unzulänglichkeit auch anhand des Streudiagramms der LES-Daten in Abb. 4.11 zu erkennen, welches insbesondere im Bereich  $f_H \approx 0,1$  noch starke Unregelmäßigkeiten aufweist. Hingegen wurden für die Berechnung der Reaktionsraten über die synthetischen Verteilungen 20000 Einzelwerte verwendet. Eine Diskussion der erforderlichen Menge an Einzelwerten zur zuverlässigen Berechnung von mittleren Reaktionsraten folgt in Kap. 4.1.13. Die Validierung der entwickelten PDF-Ansätze soll daher im Folgenden anhand transportierter

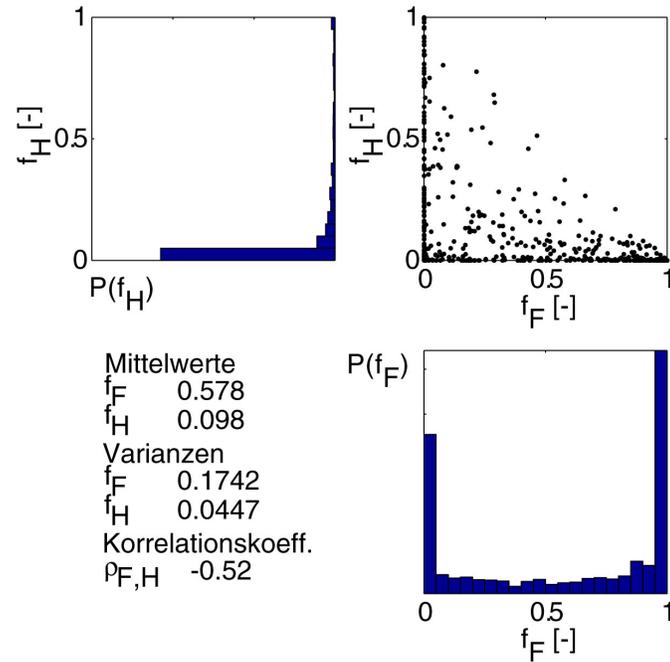
Mischungsbruch-PDFs weiter vervollständigt werden.

#### 4.1.11 Validierung mit transportierter Mischungsbruch-PDF

Das CFD-Programmpaket Fluent stellt seit Version 6.1 eine Implementierung der Temperatur-Massenbruch-PDF  $P(Y_1, Y_2, \dots)$  zur Verfügung [FLU02]. Da die direkte Integration der PDF-Transportgleichung aufgrund ihrer hohen Dimensionalität nicht praktikabel ist, findet, ähnlich wie bei stochastischen Differentialgleichungen, zur Lösung ein Monte-Carlo Partikel-Verfahren Anwendung. Hierbei werden repräsentative Partikel mit den Eigenschaften Ort, Zusammensetzung, Temperatur und Masse konvektiv durch das Rechengebiet transportiert. Zudem wird mit Hilfe von Mischungsmodellen auch eine Vermischung auf molekularer Ebene berücksichtigt. Bekannteste Vertreter dieser Mischungsmodelle sind die bereits in Kap. 4.1.8 erwähnten Ansätze: *IEM* (Interaction by exchange with the mean) und *Modified Curl-Modell*.

Die Berechnung der Mischungsbruch-PDF erfolgt für die gleiche Mischerkonfiguration wie in Kap. 4.1.10. Dabei handelt es sich um eine an das SEV-Injektorkonzept angelehnte Querstromeinblendung eines Doppel-Koaxial-Strahls.

Abbildung 4.14 zeigt für einen Beobachtungspunkt in der Nähe des Injektors die sich mit Hilfe der Mischungsbruch-PDF Transportgleichung berechnete Verteilung. Kennzeichnend für einen Beobachtungspunkt in der Nähe des Injektors ist, dass die sich einstellende Mischungsbruch-PDF einen deutlich multi-modalen Charakter aufweist. Vor allem in den Ecken ( $f_H = 0, f_F = 0$ ) und ( $f_H = 0, f_F = 1$ ) des Definitionsbereichs ist eine starke Ansammlung an Einzelwerten erkennbar. Anders als in den Streudiagrammen der LES-Daten lassen sich in den in Abb. 4.14 gezeigten Diagrammen der Verbundverteilung sowie den beiden Randverteilungen keine Strukturen bzw. Unregelmäßigkeiten erkennen, was auf eine ausreichende Anzahl Ein-



**Abbildung 4.14:** Mischungbruch-PDF mit großer Varianz für  $f_H$  und  $f_F$  berechnet mit einer PDF-Transportgleichung.

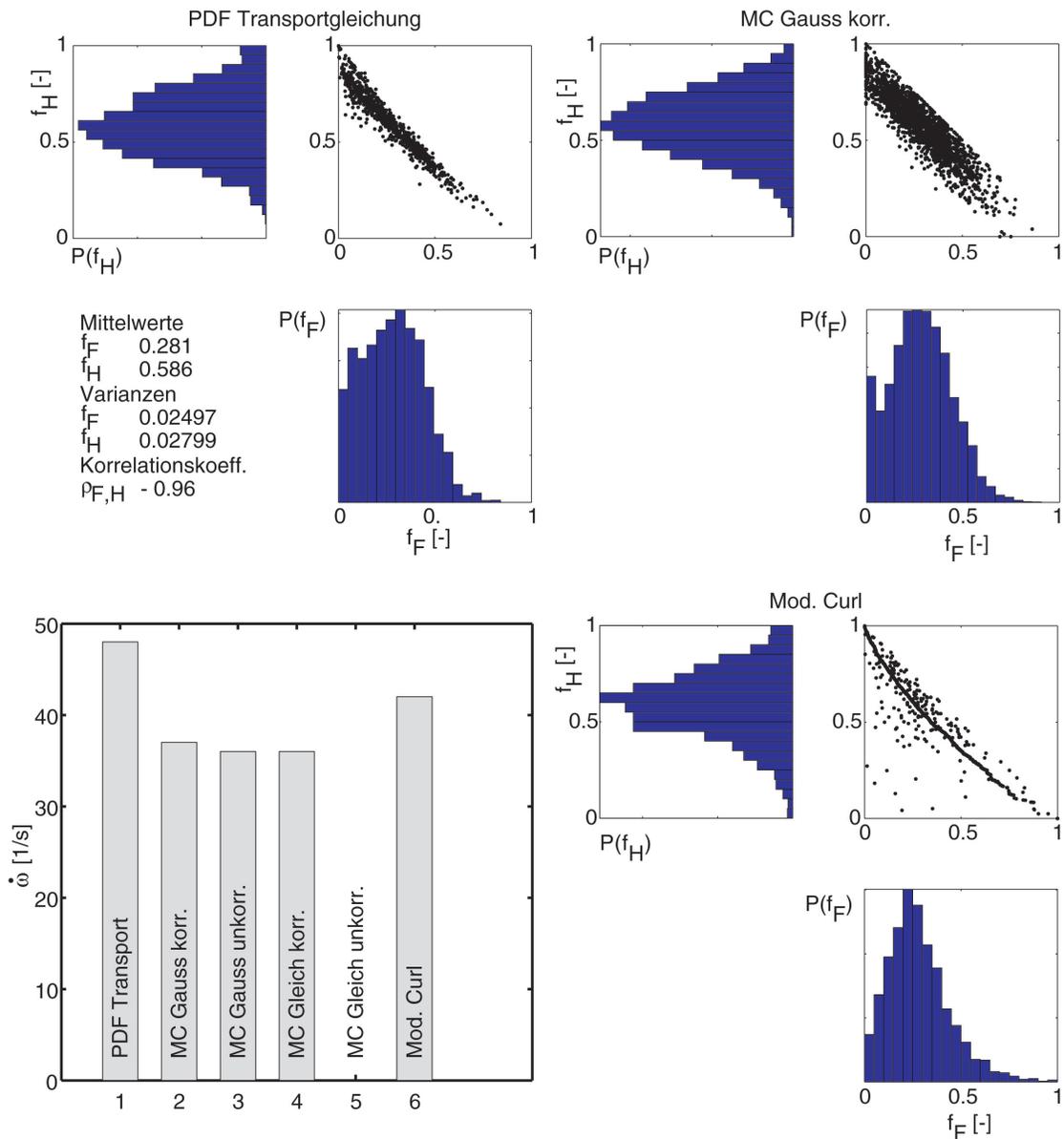
zelwerte zur Repräsentation der Verteilung schließen lässt.

Den in den Abbildungen 4.14, 4.15 und 4.16 gezeigten Streudiagrammen der transportierten Mischungbruch-PDFs wie auch der synthetisch generierten jPDDs liegen 20000 Einzelwerte zu Grunde. Diese Verteilungsgröße erlaubt die Berechnung mittlerer Reaktionsraten mit vernachlässigbaren statistischen Fehlern (vgl. Kap. 4.1.13). Während bei jPDDs die Verteilungsgröße bei der Generierung frei wählbar ist, sind die Verteilungsgrößen beim Transport der PDF aufgrund des zur Verfügung stehenden Speichers auf ca. 50 - 100 Einzelwerte (Partikel) beschränkt. PDFs mit mehr Einzelwerten lassen sich aber bei stationärer Strömung einfach durch Akkumulation der Partikel während mehrerer Iterationen ( $\rightarrow$  gleitende Mittelung) gewinnen. Bei der Berechnung mittlerer Reaktionsraten anhand transportierter PDFs kommt die gleitende Mittelwertbildung in zahlreichen Strömungslösern (z.B. [FLU02]) ebenfalls zur Anwendung.

Abbildung 4.15 zeigt einen Vergleich der Verteilungen für einen Beobachtungspunkt, der sich durch deutliche Fluktuationen der Mischungsbrüche und eine starke negative Korrelation auszeichnet. Mit Ausnahme der unkorrelierten Gleichverteilungs-basierten jPDD lassen sich mit allen vorgestellten Verfahren entsprechende jPDDs erzeugen. Obwohl die ersten beiden statistischen Momente aller drei Verteilungen identisch sind, lassen sich aber bei einem visuellen Vergleich der drei gezeigten Verteilungen deutliche Unterschiede feststellen. Die korrelierten Gauß-basierten jPDDs zeichnen sich durch die größte Fülligkeit aus. Aufgrund der Korrektur einiger unzulässiger Einzelwerte lässt sich in der Randverteilung bei  $f_F = 0$  ein  $\delta$ -Peak erkennen. Kennzeichnend für die mit Hilfe des Mischungsmodells generierte jPDD ist die starke Ansammlung von Einzelwerten entlang einer Linie. Das eingesetzte Sortierverfahren zur Beeinflussung des Korrelationskoeffizienten bedingt diese Erscheinung.

Ein quantitativer Vergleich anhand der Reaktionsrate ergibt für Mischungsmodell-basierte jPDDs die beste Übereinstimmung. Die mit korrelierter und unkorrelierter Gauß-basierten jPDDs berechneten Reaktionsraten führen zu deutlich geringeren Reaktionsraten. Im Wesentlichen lässt sich dies auf die Schiefe der Verteilung für  $f_H$  zurückführen. Dies ist auch qualitativ anhand der gezeigten Randverteilungen erkennbar. Insbesondere Einzelwerte mit  $f_H \rightarrow 1$  tragen aufgrund der hohen Temperatur des Heißgasstroms  $f_H$  wesentlich zur mittleren Reaktionsrate bei.

Für einen Beobachtungspunkt mit mittleren Varianzen der Mischungsbrüche zeigt Abb. 4.16 den Vergleich der Verteilungen. Wie den Streudiagrammen entnommen werden kann, weist die Gauß-basierte jPDD mit negativer Korrelation die größte Ähnlichkeit zur transportierten PDF auf. Dies geben auch die berechneten Reaktionsraten wieder. Die mit Hilfe des *Modified Curl-Modells* generierte jPDD ist wiederum durch zahlreiche Einzelwerte entlang einer Linie gekennzeichnet. Zudem weist sie sich durch zahlreiche Einzelwerte im Bereich  $f_H < \overline{f_H}$  und  $f_F > \overline{f_F}$  aus, was die etwas geringere Reaktionsrate bedingt.

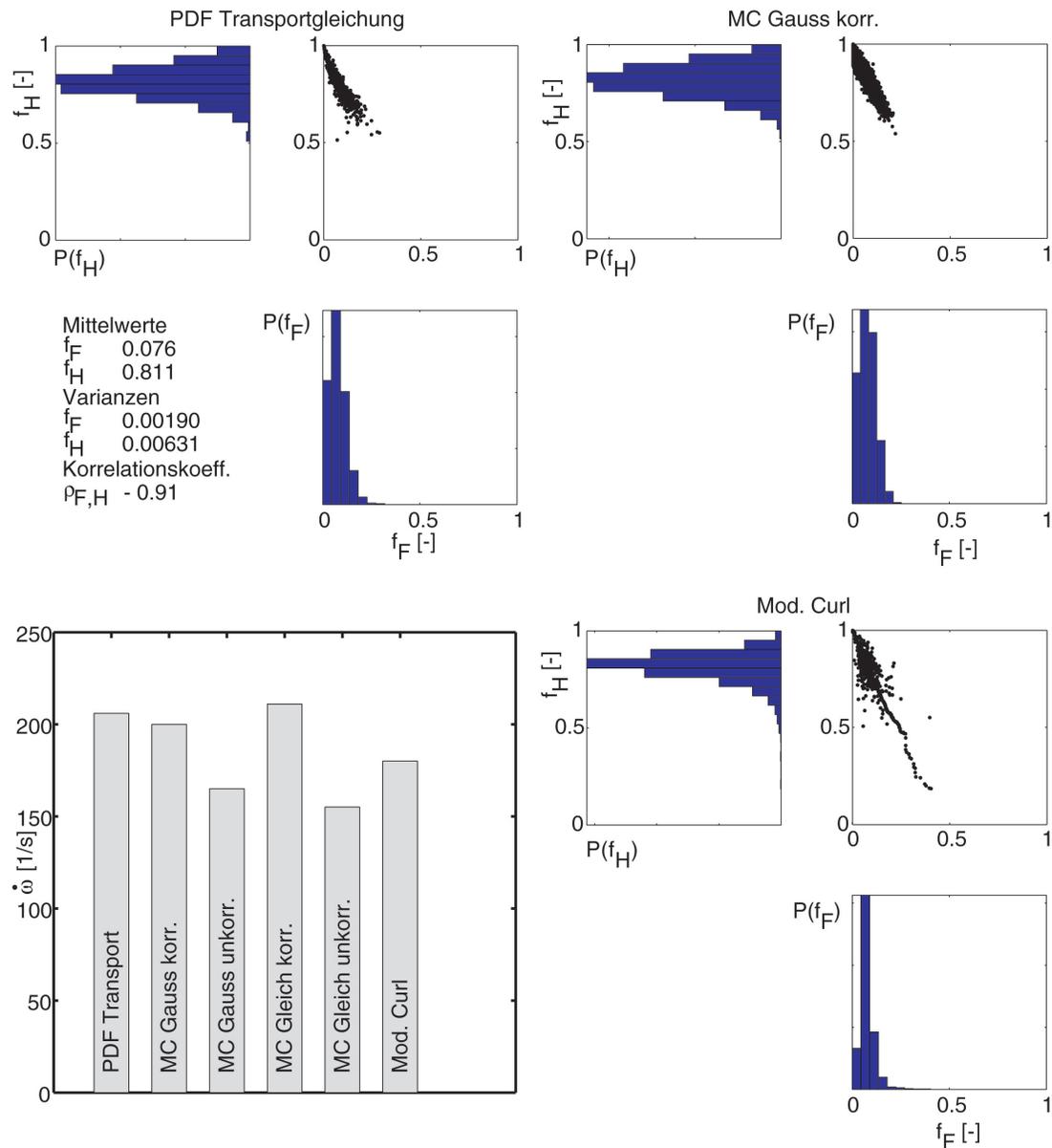


**Abbildung 4.15:** Vergleich der jPDDs mit einer transportierten PDF für eine Verteilung mit großer Varianz.

#### 4.1.12 Abschließende Bewertung der Verfahren

Anhand der in den letzten beiden Abschnitten durchgeführten Validierung der Ansätze zur Approximation der Mischungsbruch-PDF lässt sich eine abschließende Bewertung der Verfahren durchführen.

Schon bei einem qualitativen Vergleich der gezeigten Streudiagramm-



**Abbildung 4.16:** Vergleich der generierten PDF's mit einer transportierten PDF für eine Verteilung mit mittlerer Varianz.

me lässt sich erkennen, dass die Approximation der Mischungsbruch-PDF mit auf Gleichverteilungen basierenden jPDDs sich nicht als zielführend erweisen kann. Aus diesem Grunde umfasst die folgende Diskussion nur die Gauß-basierten und Mischungsmodellbasierten jPDDs.

Problematisch an den aus einer Basis-Verteilung (Gauß- oder Gleich-Verteilung) generierten jPDD ist, dass durch das eingesetzte Korrekturverfahren unter Umständen zahlreiche Einzelwerte auf den Rändern des Definitionsbereichs zu liegen kommen. Diese Einzelwerte beschreiben oftmals den Zustand, bei dem zwar Brennstoff, aber kein Oxidator bzw. vice versa vorhanden ist. Da sich für diese Einzelwerte die Reaktionsrate zu  $\dot{\omega} = 0$  ergibt, folgt in der Regel ein geringerer Wert für die mittlere Reaktionsrate der Verteilung. Hingegen treten bei Mischungsmodell-basierten Verteilungen auch bei großen Varianzen bedeutend weniger Einzelwerte direkt auf den Rändern auf. Gerade hier eignen sich daher die mit Mischungsmodellen generierten jPDDs weitaus besser zur Approximation der Mischungsbruch-PDF. Dies spiegeln auch die für die untersuchten Beobachtungspunkte berechneten mittleren Reaktionsraten wieder. Gleichzeitig konnte auch anhand der berechneten Reaktionsraten gezeigt werden, dass die Berücksichtigung der Korrelation zu einer Verbesserung der Ergebnisse führt.

Deutlich wurde auch beim Vergleich der für die verschiedenen Verteilungen bestimmten Reaktionsraten, dass diese sich nicht als Funktion der ersten beiden statistischen Momente eindeutig abbilden lassen. Insbesondere der statistische Formparameter des dritten Moments, die so genannte Schiefe, besitzt einen signifikanten Einfluss auf die mittlere Reaktionsrate. Eine direkte Berücksichtigung lässt sich derzeit nicht umsetzen, da weder eine entsprechende Transportgleichung für das dritte Moment, noch ein Verfahren zur gezielten Beeinflussung bzw. Manipulation der Schiefe einer Verteilung bekannt ist. Die höheren statistischen Momente können lediglich vorab durch Wahl eines geeigneten Verfahrens zur Generierung der Verteilung beeinflusst werden. So ergibt sich beispielsweise bei der Gleich- und bei der Gauß-Verteilung a priori eine Schiefe von  $y = 0$ . Die bei den hier gezeigten Verteilungen auftretende Schiefe von  $y \neq 0$  ist durch die Korrektur nicht zulässiger Einzelwerte bedingt.

Da das auf Mischungsmodellen basierende Verfahren zur Generierung von Mischungsbruch-jPDDs erst kurz vor Abschluss der vorliegenden

Arbeit entwickelt wurde, konnte in der zur Verfügung stehenden Zeit keine Implementierung in das Gesamtmodell erfolgen. Allen im Folgenden gezeigten Ergebnissen des Gesamtmodells liegen daher korrelierte Gauß-basierte jPDDs zugrunde.

### 4.1.13 Approximationsfehler

Aufgrund der Approximation der kontinuierlichen PDF durch eine diskrete PDF ergibt sich bei der Berechnung der mittleren Reaktionsrate  $\bar{\omega}$  ein statistischer Fehler  $\epsilon_{\omega N}$  [Pop85]:

$$\bar{\omega}_N = \bar{\omega} + \epsilon_{\omega N}. \quad (4.37)$$

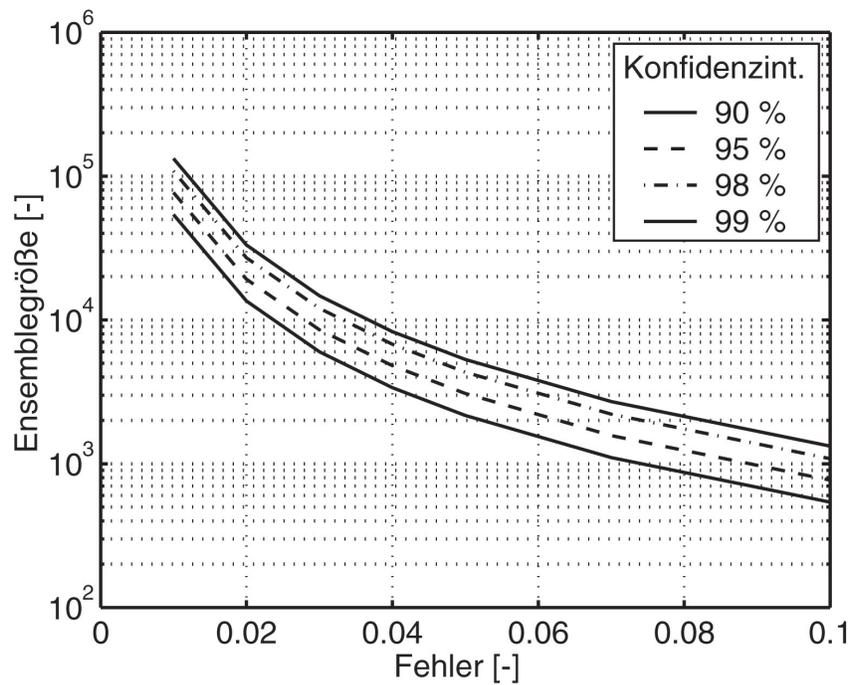
Während sich für den Mittelwert des Approximationsfehlers  $\overline{\epsilon_{\omega N}}$  der Wert 0 ergibt, gilt für die Standardabweichung  $\epsilon'_{\omega N}$ :

$$\epsilon'_{\omega N} = N^{-1/2} \sqrt{D(\dot{\omega})}. \quad (4.38)$$

Hierbei wird auch das Problem diskreter Verteilungen sichtbar, denn mit steigender Dimensionalität  $D$  des Problems vergrößert sich auch der statistische Fehler. Für das zu formulierende Modell ist die Reaktionsrate von zwei Parametern abhängig, d.h. die Dimensionalität des Problems beträgt  $D(\dot{\omega}) = 2$ . Damit folgt für den konkreten Fall die Standardabweichung des Approximationsfehlers zu:

$$\epsilon'_{\omega N} = N^{-1/2} \sqrt{2}. \quad (4.39)$$

In Abb. 4.17 ist die erforderliche Ensemblegröße in Abhängigkeit der gewünschten Genauigkeit und der Größe des Konfidenzintervalls aufgetragen. Ein Konfidenzintervall von z.B. 95% bedeutet, dass für 95% der realisierten Ensembles der Fehler unterhalb einer bestimmten Fehlergrenze liegt.



**Abbildung 4.17:** Erforderliche Ensemblegröße in Abhängigkeit der gewünschten Genauigkeit und des Konfidenzintervalls.

Aus dem gezeigten Diagramm kann entnommen werden, dass zum Erreichen hoher Genauigkeiten ( $\epsilon \leq 1\%$ ) Ensemblegrößen von  $N > 100000$  notwendig sind, was aufgrund der damit verbundenen hohen Rechenzeit nicht mehr praktikabel ist. Für die Rechenzeit kann in etwa ein linearer Zusammenhang mit der Ensemblegröße angenommen werden. Praktikable Ensemblegrößen liegen bei ca.  $N = 20.000$ , so dass bei 95% der berechneten Reaktionsraten der Fehler bei  $\leq 2\%$  liegt.

## 4.2 Zündung

Wie zuvor in der Einleitung dieses Kapitel erläutert, soll aufbauend auf dem in Kap. 3 beschriebenen Zündmodell von Hesselt [Hes98] ein weiterführendes Modell entwickelt werden. Im Gegensatz zu Hesselt soll die Reaktionsrate  $\dot{\omega}_X$  der den Fortschritt der Zündung charakterisierenden Größe bzw. Zündfortschrittindikators  $X$  nicht durch eine während der gesamten Induktionsphase konstanten Größe beschrieben werden, wie z.B. der Zündverzugszeit, sondern auf Basis der lokalen momentan vorgefundenen Radikalenbildungsraten.

Für den allgemeinen Fall, dass Mischung und Reaktionen während der Induktionsphase gleichzeitig auftreten, muss an dieser Stelle angemerkt werden, dass die Zündverzugszeit (wie sie auch von Hesselt verwendet wird) zwar lokal als Funktion der Temperatur und des Mischungbruchs ermittelt wird, nicht aber als Funktion weiterer Größen wie z.B. des Zündfortschritts selber. Eine solche Vereinfachung ist aber nur dann zulässig, wenn der Zündung zeitlich linear ablaufende Prozesse zugrunde liegen. Wie anhand der Gl. (3.1) und (3.2) zu erwarten ist, zeigt Abbildung 3.3 hingegen aber ganz klar ein zeitlich nicht-lineares Verhalten des Radikalenpools. Das in dieser Arbeit entwickelte Zündmodell soll, durch Einführung einer zusätzlichen Abhängigkeit der Reaktionsrate, nun in der Lage sein, diese nicht-linearen Vorgänge abbilden zu können. Zweckmäßig erscheint dabei für die Berechnung der Reaktionsrate  $\dot{\omega}_X$  neben den lokalen Größen Temperatur und Mischungsbrüchen noch die Konzentration des Zündfortschrittindikators  $X$  selber heranzuziehen. Aufgrund dieser Formulierung ergibt sich die Forderung an den Zündfortschrittindikators, dass sich dessen Rate eindeutig als Funktion der zur Verfügung stehenden Größen bestimmen lässt. Insbesondere wenn die chemischen Reaktionen parallel zur Mischung von Brennstoff und Oxidator ablaufen, ist dies keine triviale Eigenschaft. An einem geeigneten Reaktornetzwerk soll daher untersucht werden, welche Zwischenspezies oder Speziesgruppe sich als Repräsentant des Radikalenpools und damit als Zündfortschrittindikator eignet. Ferner lässt

sich an diesem Netzwerkmodell das Verhalten des Modells nach Hesselts untersuchen und mit dem neuen Ansatz vergleichen.

Zum Ende dieses Abschnitts erfolgt schließlich noch die Erweiterung des zunächst für laminare Strömung entwickelten Zündmodells für die Beschreibung der chemischen Prozesse in turbulenter Strömung.

#### 4.2.1 Anforderungen an einen idealen Zündfortschrittsindikator

Aufgrund der Tatsache, dass für die Modellierung des Zündprozesses ein effektiver Ansatz entwickelt werden soll, ist es zweckmäßig, das Modell auf Basis einer Fortschrittsvariablen oder Schlüsselspezies zu formulieren. Diese repräsentiert den Radikalenpool, der für die Zündung verantwortlich ist. Durch Lösen einer skalaren Transportgleichung lässt sich damit der Zündfortschritt orts aufgelöst bestimmen. Der Quellterm dieser Transportgleichung muss nicht notwendigerweise über einen Arrhenius-Ansatz berechnet werden. Stattdessen sollte es möglich sein, die Bildungsrate der Schlüsselspezies als Kennfeld einiger weniger bekannter Parameter (z.B. Brennstoffmischungsbruch und Temperatur) zu bestimmen. Dieses Kennfeld kann auf Basis eines detaillierten Reaktionsmechanismus vor der Lösung des Strömungsfeldes berechnet und in einer Tabelle abgelegt werden, so dass sich die genauen Zusammensetzungen von Erdgas und Frischluft berücksichtigen lassen. Durch die Entkopplung der Berechnung von Strömungsfeld und chemischen Prozessen lässt sich der zeitliche Mehraufwand bei der Berechnung der reaktiven Strömung minimieren. Zudem ist während der Berechnung des Strömungsfeldes nur eine zusätzliche Transportgleichung für den Massenbruch des Radikalenpools zu lösen.

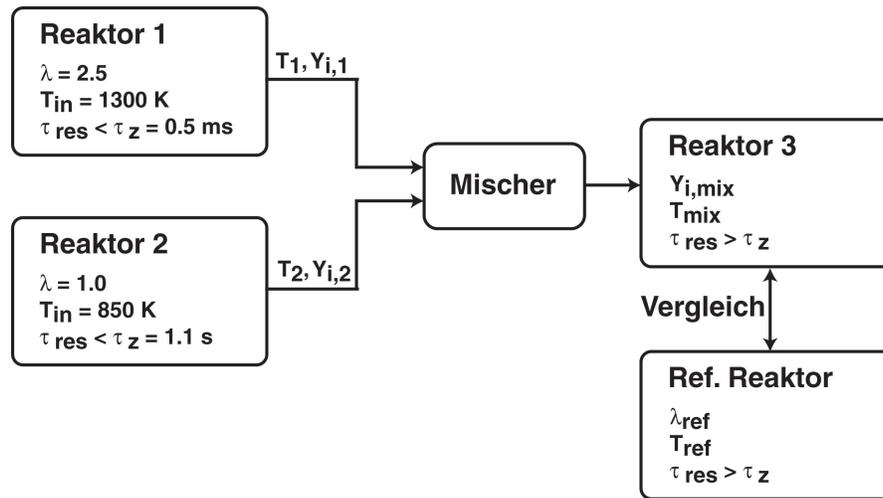
Aufgrund der durchgeführten Überlegungen und der Randbedingungen, die sich durch Anwendung des Modells in einem CFD-Löser ergeben, lassen sich die folgenden Anforderungen an einen *idealen* Repräsentanten des Radikalenpools formulieren:

- Der Verlauf des Massenbruchs der Schlüsselspezies muss bis zur Zündung kontinuierlich ansteigen und bei Beginn der eigentlichen Wärmefreisetzung sein Maximum erreichen.
- Die Reaktionsrate muss sich als Funktion bekannter Größen ausdrücken lassen. Dies lässt sich am geeignetsten anhand einer Lagrange'schen-Formulierung erläutern. Es soll der Weg eines mit der Strömung durch den Brenner mitbewegten Teilvolumens betrachtet werden. Dieses Teilvolumen beinhaltet den Radikalenpool und nimmt während seiner Bewegung ständig die inerte Temperatur und die inerte Zusammensetzung der Umgebung an. Ferner erhöht sich fortwährend die Konzentration des Radikalenpools im Teilvolumen, bis schließlich eine so hohe Reaktivität erreicht wird, so dass es zur Zündung kommt.

Ist die lokale Bildungsrate der Schlüsselspezies invariant bezüglich der nicht abgebildeten Prozesse bzw. Größen (z.B. der genauen Zusammensetzung) so lässt sich die Berechnung der Raten stark vereinfachen. Als Eingangsgrößen stehen damit neben der inerten Zusammensetzung und Temperatur nur der Massenbruch des Radikalenpools zur Verfügung.

- Da die lokale Reaktivität anhand des Radikalenpool-Massenbruchs beschrieben wird, ist es für eine stabile Numerik notwendig, dass unmittelbar bei Beginn der Vorreaktionen die Bildungsrate der Schlüsselspezies so hoch ist, dass rasch ein deutlicher Anstieg des Radikalenpool -Massenbruchs beobachtet werden kann (vergl. hierzu die Diskussion in Kap. 3.1 bezgl. CO als Repräsentant des Radikalenpools).

Die vorgestellten Überlegungen und Ableitungen motivieren die Entwicklung eines Reaktormodells für die Identifikation und Validierung einer Schlüsselspezies, welches in den folgenden Abschnitten näher erläutert wird.



**Abbildung 4.18:** Reaktormodell zur Identifizierung einer geeigneten Spezies als Repräsentant des Radikalenpools.

#### 4.2.2 Reaktormodell zur Auswahl der Schlüsselspezies

Abbildung 4.18 zeigt das zur Auswahl einer entsprechenden Schlüsselspezies und zur Validierung des Zündmodells entwickelte Reaktormodell. Dieses Reaktormodell stellt ein Ersatzschaltbild für die in der Realität ablaufenden Prozesse da. Während in der Realität Mischung und Reaktion gleichzeitig ablaufen, wird dies im Ersatzmodell durch eine sequentielle Anordnung von Reaktoren und Mixern approximiert. Aufgrund der Vereinfachung auf lediglich zwei zu mischende Ströme (Reaktor 1 und 2), können die ablaufenden chemischen Prozesse sehr detailliert betrachtet werden. Der weiten Verbreitung des GRI 3.0 Reaktionsmechanismus wegen findet dieser auch bei den hier durchgeführten Berechnungen Anwendung.

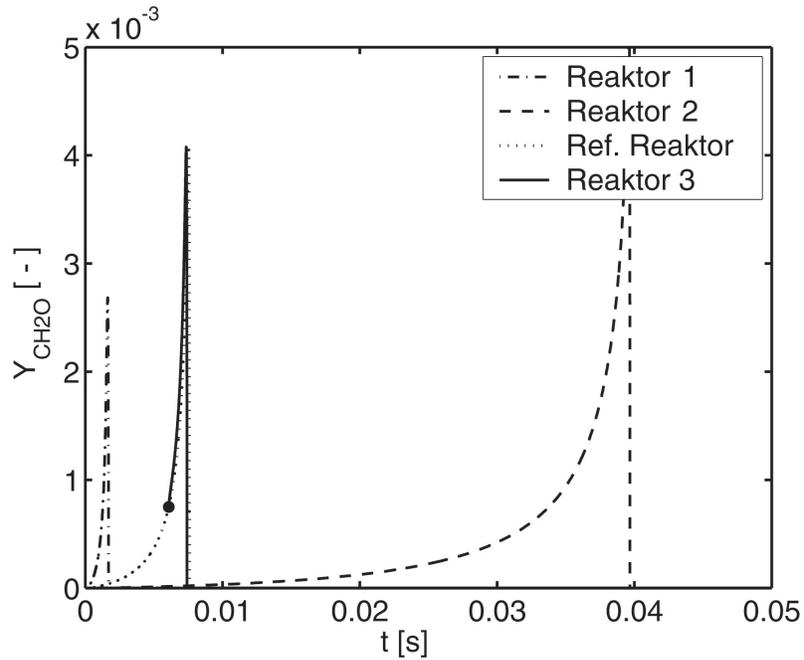
Mit den beiden „Plug-Flow“ Reaktoren 1 und 2 lässt sich ein beliebiger Zustand (Temperatur und Zusammensetzung) während der Induktionszeit erreichen ( $\tau_{res} < \tau_Z \rightarrow R < 1$ ). Im Anschluss wird der Zustand berechnet, der sich bei Mischung der Austrittsströme der Reaktoren 1 und 2 zu jeweils gleichen Teilen ergibt. Die berechneten Werte werden in Reaktor 3 als Startwerte verwendet, woraufhin in Reaktor 3 die Berechnung der Reaktionen bis zur Zündung fortge-

setzt werden. Für den Referenz-Reaktor wird der Zustand als Startwert gewählt, der sich bei Mischung der Startwerte von Reaktor 1 und 2 ergibt. Dies entspricht einer Mischung vor Start jeglicher Reaktionen. Beide Reaktoren sind hinsichtlich der Größen, die später bei der Modellformulierung zur Berechnung der Reaktionsrate  $\dot{\omega}_X$  von  $X$  zur Verfügung stehen, identisch. Allerdings weisen sie bezüglich ihrer Historie einen bedeutenden Unterschied auf. Während sich Reaktor 3 durch Mischung der zunächst unter anderen Betriebsbedingungen (Luftzahl und Temperatur) reagierenden Reaktoren 1 und 2 ergibt, starten die Reaktionen im Referenzreaktor vom vollständig unreaktierten Zustand aus.

Aus den in Abschnitt 4.2.1 formulierten Überlegungen lässt sich die Forderung ableiten, dass ein idealer Repräsentant des Radikalenpools in Reaktor 3 und im Referenzreaktor die gleichen Reaktionsraten aufweisen muss. Zeigt er dieses Verhalten, so gilt er im Folgenden als Mischungsinvariant.

Anhand der Untersuchungen in Kap. 3.1 liegt die Vermutung nahe, dass Formaldehyd ( $\text{CH}_2\text{O}$ ) als Repräsentant für den Radikalenpool geeignet ist. Abbildung 3.3 zeigt, dass sofort nach Start der Reaktionen die Konzentration von  $\text{CH}_2\text{O}$  merklich und stetig monoton ansteigt und ihr Maximum unmittelbar vor Beginn intensiver Wärme-freisetzung erreicht. Im Folgenden soll daher die Mischungsinvarianz bei  $\text{CH}_2\text{O}$  als Repräsentant mit Hilfe des Reaktornetzwerkes überprüft werden. Um zu zeigen, dass die geforderte Eigenschaft nicht trivial ist, werden zudem die Ergebnisse gezeigt, die sich bei Wahl eines ungeeigneten Repräsentanten z.B.  $\text{CH}_3$  ergeben.

Die Abbildungen 4.19 und 4.20 zeigen die mit dem Reaktionsmechanismus GRI 3.0 berechneten Verläufe der Speziesmassenbrüche für das in Abb. 4.18 gezeigte Reaktormodell. Entgegen den Angaben in Abb. 4.18 wurden für die beiden Reaktoren 1 und 2 Eingangstemperaturen von  $T_1 = 1200\text{K}$  bzw.  $T_2 = 1000\text{K}$  gewählt, um eine bessere Darstellbarkeit zu erreichen. Die Mischung der beiden Reaktoren 1 und 2 erfolgt, nachdem in Reaktor 1 90 % und in Reaktor 2 15 %



**Abbildung 4.19:** Speziesprofile für  $\text{CH}_2\text{O}$ , berechnet mit dem Reaktormodell.

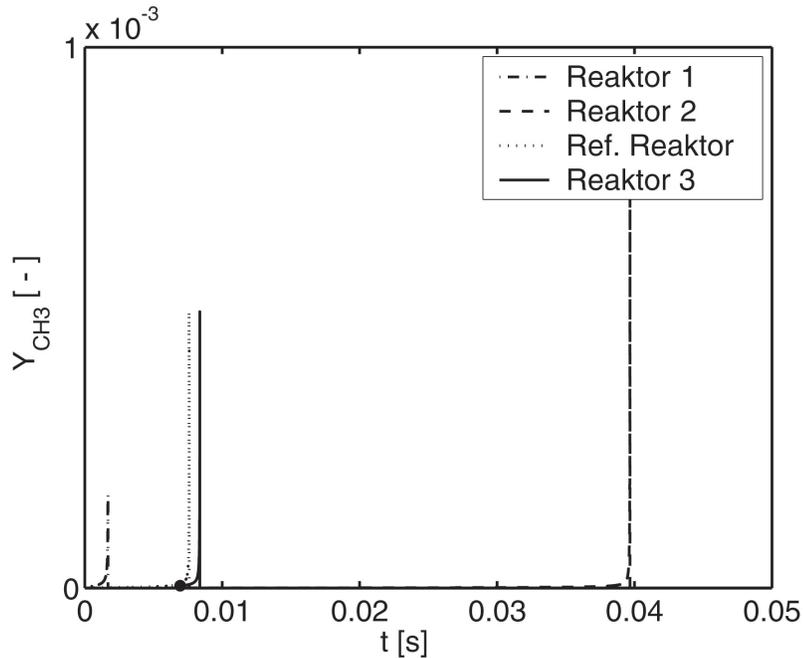
der maximalen  $\text{CH}_2\text{O}$  bzw.  $\text{CH}_3$  Konzentration vorliegt. Somit ist sichergestellt, dass in beiden Reaktoren noch nicht der Wärmefreisetzungsprozess begonnen hat. Aus Gl. (4.1) lässt sich die massenbruchbasierte Reaktivität  $R_Y$ :

$$R_Y = \frac{Y_i}{Y_{i,Z}} \quad (4.40)$$

ableiten, so dass der Zustand in den beiden Reaktoren auch durch  $R_{1,Y} = 0.90$  und  $R_{2,Y} = 0.15$  beschrieben werden kann. In der Definition der Reaktivität entspricht  $Y_i$  dem momentanen Massenbruch des Radikalenpoolrepräsentanten und  $Y_{i,Z}$  dem Massenbruch bei Zündung.

Es ist anzumerken, dass das Reaktormodell auch für andere Mischzeitpunkte ein ähnliches Verhalten aufweist. Dies wird im Anschluss an die detaillierte Betrachtung der Vorgänge gezeigt.

Wie aus den Abbildungen entnommen werden kann, liegt bei den



**Abbildung 4.20:** Speziesprofile für  $\text{CH}_3$ , berechnet mit dem Reaktormodell.

beiden Reaktoren 1 und 2 sowie dem Referenzreaktor bei Beginn der Reaktionen ( $t = 0\text{ s}$ ) noch kein  $\text{CH}_2\text{O}$  bzw.  $\text{CH}_3$  vor. Während  $\text{CH}_2\text{O}$  bereits unmittelbar nach Beginn der Vorreaktionen gebildet wird, sind signifikante Konzentrationen an  $\text{CH}_3$  erst kurz vor Beginn der Zündung zu erkennen. Aus diesem Grund ist mit erheblich geringeren numerischen Fehlern bei der Verwendung von  $\text{CH}_2\text{O}$  als Repräsentant des Radikalenpools zu rechnen. Die Zündung selber lässt sich anhand eines starken Abfalls der Massenbrüche der beiden Zwischenspezies  $\text{CH}_2\text{O}$  bzw.  $\text{CH}_3$  in den gezeigten Diagrammen erkennen.

Weiterhin ist in den Abbildungen das Speziesprofil des Reaktors 3 gezeigt, in dem die Mischung aus Reaktor 1 und 2 schließlich bis zur Zündung ausreagiert. Aufgrund der Vorreaktionen in den beiden Reaktoren 1 und 2 sind bei Beginn der Reaktionen in Reaktor 3 bereits Zwischenspezies vorhanden. Der Startwert für Reaktor 3 ist in den Abbildungen durch einen Punkt markiert. Um einen möglichst guten Vergleich von Reaktor 3 mit dem Referenzreaktor zu erhalten, ist das Speziesprofil von Reaktor 3 auf der Zeitachse verschoben darge-

stellt, so dass der Anfangswert (gekennzeichnet durch einen Punkt) auf dem Speziesprofil des Referenzreaktors zu liegen kommt.

Gemäß den beschriebenen Anforderungen an einen geeigneten Repräsentanten des Radikalenpools muss im Idealfall der Verlauf des  $\text{CH}_2\text{O}$  bzw.  $\text{CH}_3$  Massenbruchs in Reaktor 3 mit dem im Referenzreaktor identisch sein. Bei Wahl von  $\text{CH}_2\text{O}$  als Repräsentant lassen sich nur sehr geringe Abweichungen erkennen. Nicht nur der Zeitpunkt des starken Abfalls des  $\text{CH}_2\text{O}$  Massenbruchs in Reaktor 3, d.h. der Beginn der Wärmefreisetzung, deckt sich mit der im Referenzreaktor beobachteten Zündverzugszeit, sondern auch der Verlauf des  $\text{CH}_2\text{O}$ -Massenbruchs. Die gleichen Untersuchungen für die Zwischenspezies  $\text{CH}_3$  ergeben eine deutlich erkennbare Abweichung des Zündzeitpunkts. Dies lässt sich zum Teil darauf zurückführen, dass  $\text{CH}_3$  im Gegensatz zu  $\text{CH}_2\text{O}$  erst kurz vor der Zündung in signifikanten Konzentrationen vorliegt.

Ähnlich der Spezies  $\text{CH}_2\text{O}$  befindet sich auch  $\text{HCO}$  im Hauptreaktionspfad und kommt damit prinzipiell ebenfalls als Repräsentant des Radikalenpools in Frage. Allerdings zeigt  $\text{HCO}$  bei der Überprüfung mit dem Reaktormodell ein ähnliches Verhalten wie  $\text{CH}_3$ . Ein Anstieg der  $\text{HCO}$ -Konzentration kann erst unmittelbar vor Zündung des Gemischs beobachtet werden, was bei Verwendung von  $\text{HCO}$  als Radikalenpoolrepräsentant zu ähnlichen Problemen wie bei  $\text{CH}_3$  führt. Gleiches Verhalten zeigt die Zwischenspezies  $\text{CH}_2$ , die im wichtigsten Nebenreaktionspfad enthalten ist.

Im realen Brenner ändert sich während der Induktionsphase aufgrund der Mischung des Brennstoffs mit der Verbrennungsluft ständig die Gemischzusammensetzung. Für eine vollständige Validierung ist daher eine Überprüfung des Verhaltens bei unterschiedlichen Mischungszeitpunkten  $R_1$  und  $R_2$  erforderlich. Die Ergebnisse für die Spezies  $\text{CH}_2\text{O}$  sind in Abb. 4.22 und für  $\text{CH}_3$  in Abb. 4.23 gezeigt. Zum besseren Vergleich mit dem in Kap. 4.2.3 beschriebenen linearen Modell ist der Fehler als Funktion der zeitlich basierten Reaktivitäten  $R_{\tau,1}$  und  $R_{\tau,2}$  aufgetragen, die über

$$R_\tau = \frac{t}{\tau_Z} \quad (4.41)$$

definiert sind. Hierbei entspricht  $t$  der momentanen Reaktionszeit und  $\tau_Z$  der Zündverzugszeit. Um eine bessere Darstellbarkeit der Fehler über einen größeren Bereich zu erreichen, sind die Fehler  $F$  in der Form

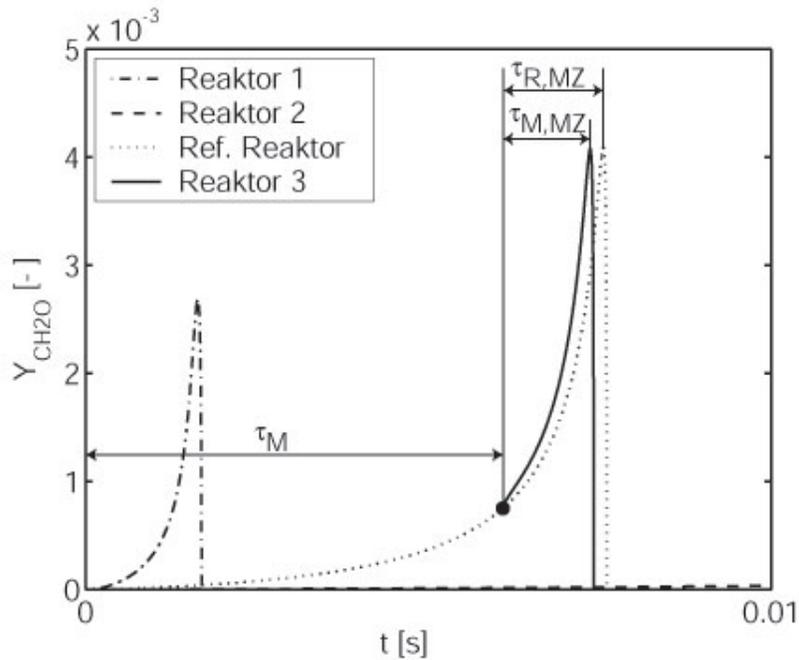
$$F = \ln \left( \frac{\tau_M + \tau_{R,MZ}}{\tau_M + \tau_{M,MZ}} \right) \quad (4.42)$$

aufgetragen. Abbildung 4.21 zeigt hierzu einen Ausschnitt des Diagramms in Abb. 4.19 mit den in Gl. (4.42) verwendeten Zeiten. Nach dem Mischvorgang benötigt Reaktor 3 die Zeit  $\tau_{M,MZ}$  bis zur Zündung. Dem gegenüber steht die Zeit  $\tau_{R,MZ}$ , die anhand des Referenzreaktors für die Zeitspanne zwischen Mischung und Zündung ermittelt werden kann. Vom Start des Referenzreaktors bis zum Mischvorgang vergeht die Zeit  $\tau_M$ . Um eine Übergewichtung des Fehlers bei hohen Werten für  $R_{\tau,1}$  und  $R_{\tau,2}$  zu vermeiden, wird  $\tau_M$  zu den beiden Zeiten addiert. Bei  $R_1 \rightarrow 1$  und  $R_2 \rightarrow 1$  sind die Zeiten  $\tau_{R,MZ}$  und  $\tau_{M,MZ}$  sehr klein, so dass bei einem nahezu konstanten absoluten Fehler  $\Delta\tau$  der relative Fehler unverhältnismäßig groß wird und damit für die Fehlerabschätzung des Gesamtprozesses nicht mehr repräsentativ ist.

Zur besseren Abschätzung des Fehlers  $F$  sei an dieser Stelle angemerkt, dass die Exponentialfunktion  $e^x$  als Umkehrfunktion des natürlichen Logarithmus bei Entwicklung um den Nullpunkt ( $x = 0$ ) über die Taylor-Reihe:

$$e^x = 1 + \frac{x}{1!} + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} \cdots, \quad (4.43)$$

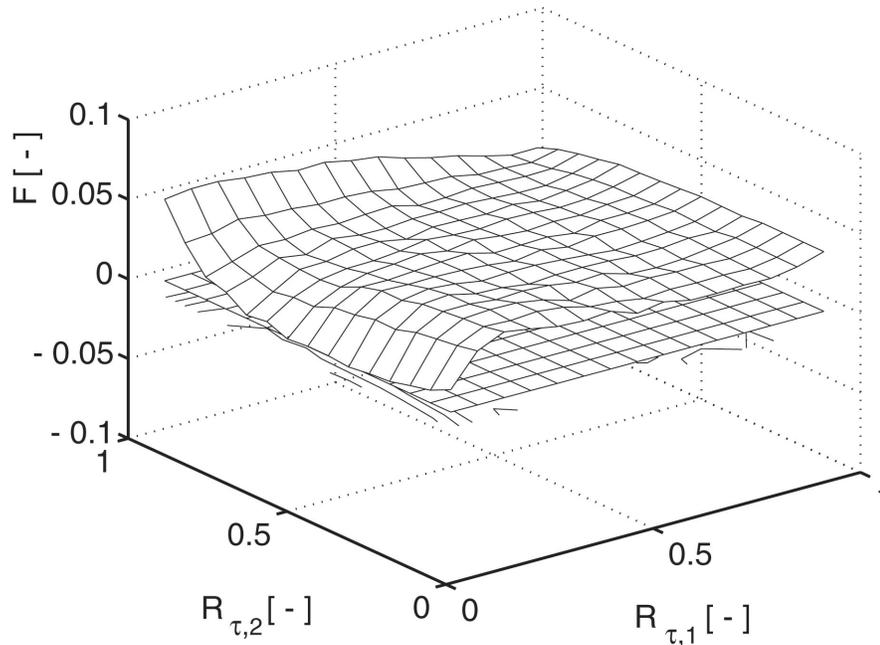
approximiert werden kann. Für die hier auftretenden Beträge des Fehlers erscheint eine Näherung mit den ersten beiden Termen in Gl. (4.43) ausreichend.



**Abbildung 4.21:** Ausschnitt aus Abb. 4.19: Definition der Zeiten für die Berechnung der Fehler.

Abbildung 4.22 zeigt, dass für den gesamten Bereich möglicher Mischungszeitpunkte  $R_{\tau,1}$  und  $R_{\tau,2}$  die Repräsentation des Radikalenpools allein durch  $\text{CH}_2\text{O}$  zu sehr genauen Ergebnissen führt. Zur Orientierung ist zusätzlich in das Diagramm eine Fläche bei  $F = 0$  eingezeichnet. Maximale Abweichungen sind für Mischungszustände mit  $R_{\tau,1} \rightarrow 0$  und  $R_{\tau,2} \rightarrow 1$  zu erwarten. Aus Abb. 4.18 kann abgeschätzt werden, dass diesem Zustand Laufzeiten der Reaktoren von ca.  $\tau_1 < 1\text{ms}$  und  $\tau_2 \approx 1\text{s}$  entsprechen. Die Mischung zwischen Fluidströmen mit solch unterschiedlichen Laufzeiten ist im praktischen Fall aber ausgeschlossen.

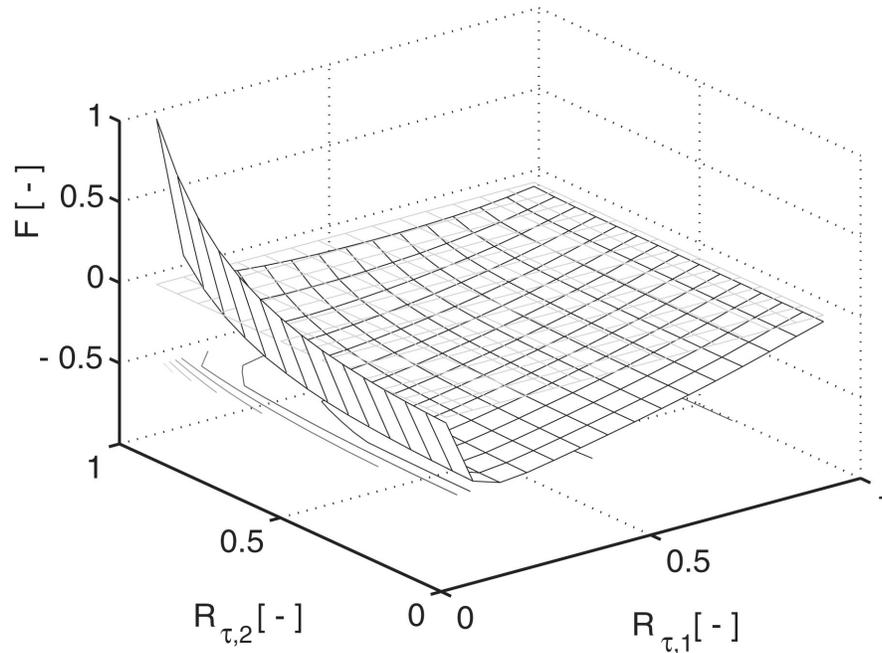
Deutlich größere Abweichungen ergeben sich bei Verwendung von  $\text{CH}_3$  als Repräsentant des Radikalenpools. Es ist zu beachten, dass die Skalierung der Fehlerachse im Gegensatz zum Diagramm des Fehlers von  $\text{CH}_2\text{O}$  um den Faktor 10 größer gewählt wurde. Wie auch bei  $\text{CH}_2\text{O}$  treten die größten Fehler dann auf, wenn die Mischung zwischen einem sehr weit fortgeschrittenen Reaktor 2 und einem sich am Anfang der Induktionsphase befindenden Reaktor 1 durchgeführt



**Abbildung 4.22:** Fehler bei Verwendung von  $\text{CH}_2\text{O}$  als Repräsentant des Radikalenpools.

wird ( $R_{\tau,1} \rightarrow 0$ ,  $R_{\tau,2} \rightarrow 1$ ). Entgegen dem Verhalten von  $\text{CH}_2\text{O}$  können auch für die relevanten Bereiche ( $0 \leq R_{\tau,1} \leq 1$  und  $R_{\tau,2} \rightarrow 0$ ) erhebliche Abweichungen beobachtet werden.

Es ist ferner zu beachten, dass die Berechnungen der in Abb. 4.22 und 4.23 für die in Abb. 4.18 gezeigten Anfangsbedingungen der beiden Reaktoren 1 und 2 berechnet wurden. Im Gegensatz zu den in Abb. 4.19 und Abb. 4.20 gezeigten Diagrammen, bei denen die Anfangstemperaturen der besseren Darstellbarkeit wegen innerhalb eines engeren Intervalls gewählt wurden ( $T_1 = 1200\text{K}$  und  $T_1 = 1000\text{K}$ ), liegen den Berechnungen für die Diagramme in Abb. 4.22 und 4.23 die Temperaturen  $T_1 = 1300\text{K}$  und  $T_1 = 850\text{K}$  zugrunde. Dies zeigt umso mehr das Potenzial von  $\text{CH}_2\text{O}$  als Repräsentant für den Radikalenpool im entwickelten Zündmodell.



**Abbildung 4.23:** Fehler bei Verwendung von  $\text{CH}_3$  als Repräsentant des Radikalenpools.

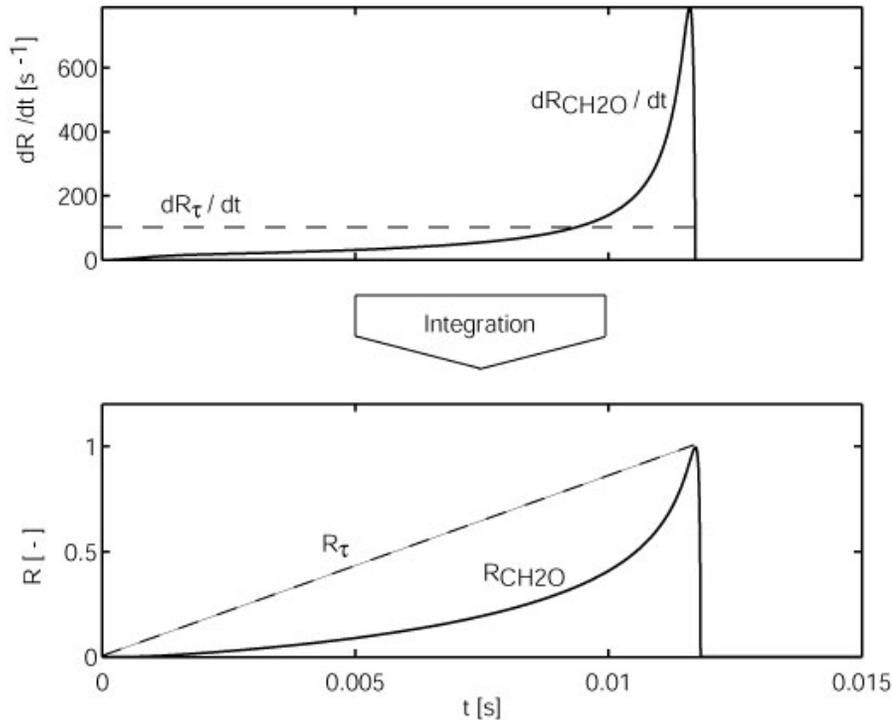
### 4.2.3 Lineares Zündmodell

Anhand des gleichen Reaktormodells soll im Folgenden das lineare Zündmodell untersucht werden. Wie bereits erwähnt, nimmt dieses Modell eine mit der Zeit  $t$  konstante Rate der Reaktivität während der Induktionsphase an, so dass sich die Reaktivität  $R_\tau$  über

$$R_\tau = \frac{t}{\tau_Z} \quad (4.44)$$

definieren lässt. Hierbei entspricht  $\tau_Z$  der Zündverzugszeit für die vorliegenden Betriebsbedingungen. Zündung tritt dann auf, wenn die Reaktivität  $R_\tau$  den Wert  $R_\tau = 1$  einnimmt.

Abbildung 4.24 zeigt hierzu einen Vergleich der sich beim linearen Modell und des in Kap. 4.2.2 entwickelten Radikalenpool-Modells einstellenden Reaktionsraten. Um einen besseren Vergleich der beiden Modelle zu ermöglichen, ist der Massenbruch  $Y_{\text{CH}_2\text{O}}$  der Spezies



**Abbildung 4.24:** Vergleich der Reaktionsraten (oben) und Reaktivitäten (unten) bei linearem Modell und Radikalenpoolmodell.

$CH_2O$  und dessen Rate normiert aufgetragen. Damit entspricht dieser der mit Gl. (4.40) definierten Reaktivität  $R_{CH_2O}$  und erreicht bei Zündung der Gemisches gerade den Wert  $R_{CH_2O} = 1$ . Durch zeitliche Integration der in der oberen Bildhälfte aufgetragenen Raten folgen die in der unteren Bildhälfte gezeigten Verläufe der Reaktivitäten  $R_{CH_2O}$  und  $R_{\tau}$ .

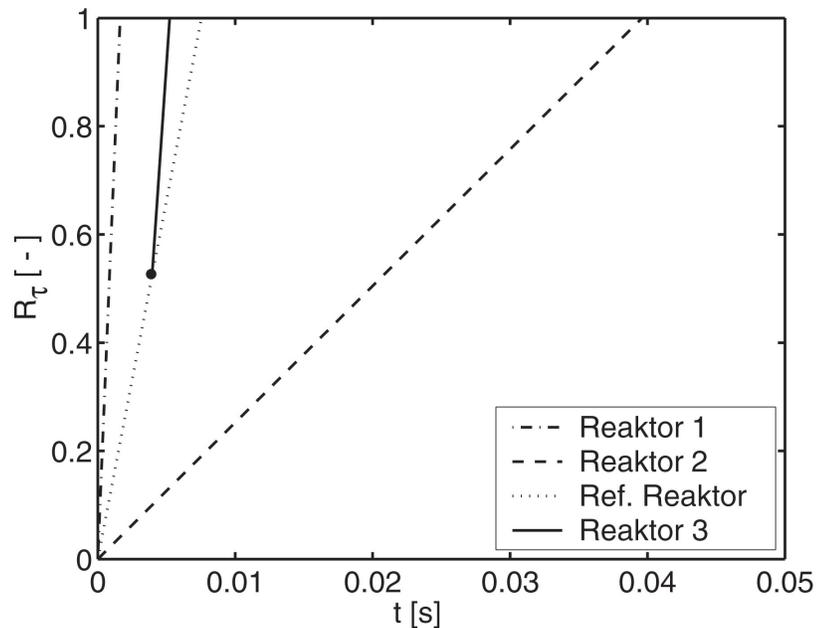
Aus den beiden gezeigten Diagrammen wird das Problem einer linearen Formulierung deutlich. Wird die Reaktionsrate wie beim Hesselt-Modell während der Zündverzugszeit als konstant angenommen, so ergibt sich bei Integration der Rate ein zu rascher Anstieg der Reaktivität  $R_{\tau}$ . Im Vergleich hierzu steigt die Reaktivität  $R_{CH_2O}$  während der ersten zwei Drittel der Zündverzugszeit bedeutend schwächer an. Erst im letzten Drittel ist ein starker Anstieg der Reaktionsrate und damit der Reaktivität  $R_{CH_2O}$  erkennbar. Dieses Verhalten ist typisch für chemische Prozesse, die von Radikalkettenreaktionen kontrolliert

werden.

Für den Fall, dass die Reaktanden zu Beginn der Reaktionen bereits homogen vermischt vorliegen, lässt sich mit dem linearen Modell Zündzeitpunkt bzw. Zündort genau vorhersagen. Findet hingegen parallel zu den ablaufenden chemischen Vorgängen während der Induktionsphase noch die Vermischung der Reaktanden statt, so ergibt sich bei Einsatz des linearen Modells eine fehlerhafte Berechnung der Reaktivität  $R$ . Das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Zündmodell bestimmt die Reaktivität  $R_{CH_2O}$  als Funktion der Konzentration des Radikalenpoolrepräsentanten, so dass auch bei Mischung die Reaktivität automatisch korrekt wiedergegeben wird. Hingegen basiert das lineare Modell auf einer entdimensionierten Zündverzugszeit, für die nicht notwendigerweise das gleiche Mischungsgesetz zur Berechnung des Mischungszustands gelten muss, wie es bei der Berechnung der Mischung von z.B. Massenbrüchen zur Anwendung kommt. Daher kann bei Verwendung eines linearen Modells eine fehlerhafte Bestimmung des Zündzeitpunktes bzw. Zündortes nicht ausgeschlossen werden.

Der Vollständigkeit wegen sei an dieser Stelle angemerkt, dass mit dem linearen Modell den während der Durchmischung der Reaktanden auftretenden lokalen Brennstoff-Luft-Verhältnissen und Temperaturen Rechnung getragen wird und somit lokale Zündverzugszeiten bestimmt werden können. Die Konzentration der aufgrund der chemischen Reaktionen entstandenen Radikalen bzw. der Zündfortschritt hat hingegen keinen Einfluss auf die beim Hesselt-Modell zum Einsatz kommenden Korrelationen für die Zündverzugszeit bzw. Reaktionsrate.

Das Diagramm in Abb. 4.25 zeigt die erwarteten linearen Verläufe der Reaktivitäten. Reaktor 3 beginnt aufgrund der Mischung mit einer Reaktivität von  $R_{\tau} = 0.5 \cdot (0.90 + 0.15) = 0.525$ . Dies ist in Abb. 4.25 durch einen schwarzen Punkt markiert. Der besseren Vergleichsmöglichkeit wegen ist der Verlauf der Reaktivität des Reaktors 3 entlang der Zeitachse so verschoben, dass der Anfangswert auf dem



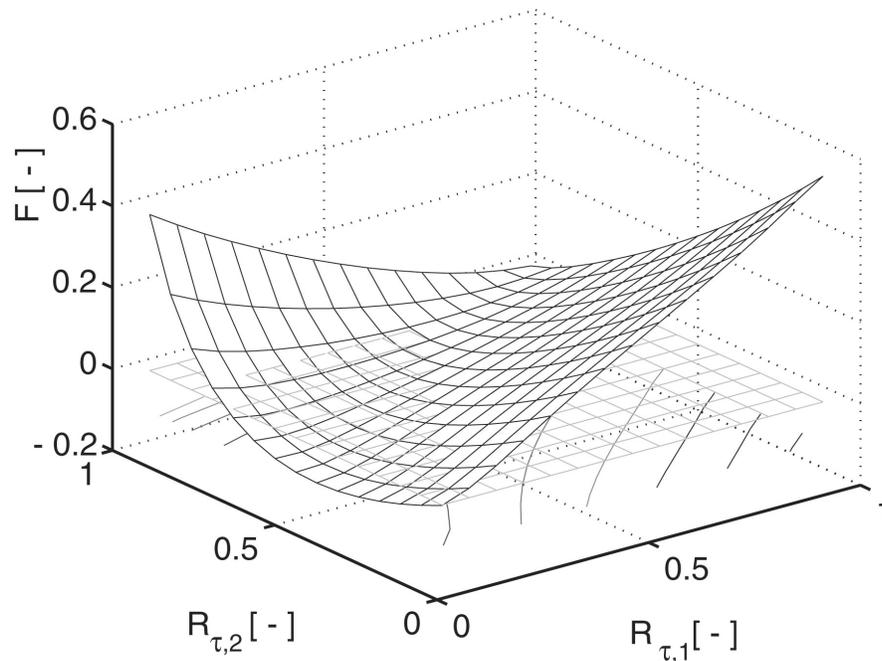
**Abbildung 4.25:** Lineares Modell: Mit dem Reaktormodell berechneter Verlauf der Reaktivitäten.

Verlauf des Referenzreaktors zu liegen kommt.

Es ist deutlich erkennbar, dass die Beschreibung des Zündprozesses mittels eines linearen Modells mit sehr großen Fehlern behaftet ist. Ein Vergleich der Steigung der Reaktivität in Reaktor 3 mit der des Referenzreaktors ergibt einen deutlich stärkeren Anstieg der Reaktivität in Reaktor 3. Bei Überlagerung von Mischung und Chemie muss daher beim linearen Reaktormodell mit der Vorhersage zu langer Zündverzugszeiten bzw. mit einer zu weit stromab liegenden Flamme gerechnet werden.

Abbildung 4.26 zeigt die sich ergebenden Fehler für den gesamten Bereich theoretisch möglicher Mischungszeitpunkte. Der Fehler  $F$  entspricht der in Gleichung (4.42) angegebenen Definition.

Es ist zu erkennen, dass maximale Fehler dann auftreten, wenn Fluidströme bzw. Reaktoren mit sehr unterschiedlichem Reaktionsfortschritt gemischt werden. Im Gegensatz zur Approximation der Reaktivität durch die Zwischenspezies  $\text{CH}_2\text{O}$  ist die Vorhersage aber



**Abbildung 4.26:** Fehler bei Verwendung des linearen Zündmodells.

nicht nur für den im realen Brenner unmöglichen Fall  $R_{\tau,1} \rightarrow 0$  und  $R_{\tau,2} \rightarrow 1$  stark fehlerbehaftet. Auch bei der umgekehrten Konstellation ( $R_{\tau,1} \rightarrow 1$  und  $R_{\tau,2} \rightarrow 0$ ) treten große Abweichungen bei der Vorhersage der Zündung auf. Bei dieser Kombination weisen beide Reaktoren ähnliche Laufzeiten auf, was die Anwendbarkeit des Modells zur Beschreibung realer Brennerströmungen sehr stark einschränkt.

Ein Vergleich mit dem Diagramm für  $\text{CH}_2\text{O}$  in Abb. 4.22 ergibt, dass bei Einsatz des linearen Modells nahezu im gesamten Bereich möglicher Mischungszeitpunkte mit erheblich größeren Fehlern zu rechnen ist. Hiervon lässt sich ableiten, dass der entwickelte Modellansatz, welcher auf der Beschreibung der Reaktivität mittels der Zwischenspezies  $\text{CH}_2\text{O}$  basiert, dem linearen Modell vorzuziehen ist.

#### 4.2.4 Chemie-Turbulenz-Interaktionen während der Induktionsphase

Mit Hilfe des in Kap. 3.2.3 vorgestellten Verfahrens können turbulente Fluktuationen bei der Berechnung mittlerer Bildungsraten des Radikalenpools durch Faltung über eine PDF berücksichtigt werden. Der folgende Abschnitt beschreibt die Erweiterung des entwickelten Zündmodells für turbulente Strömungen.

Unter der allgemein üblichen Annahme [Hes98], dass sich während der Induktionsphase weder Temperatur noch Konzentration der Reaktanden wesentlich ändert, lässt sich die Reaktionsrate der Radikalenpoolspezies als Funktion der lokalen inerten Zusammensetzung  $Y_{i,0}$  und Temperatur  $T_0$  sowie des Massenbruchs des Radikalenpools  $Y_R$  ausdrücken:

$$\dot{\omega}_{YR} = \dot{\omega}_{YR}(Y_{i,0}, T_0, Y_R). \quad (4.45)$$

Zur Kennzeichnung des inerten Zustands der Massenbrüche und der Temperatur erhalten diese Größen das Subskript 0. Da die Zusammensetzungen der in den Brenner eintretenden Ströme bekannt sind, kann unter der Voraussetzung einer für alle Spezies konstanten Diffusion die inerte lokale Zusammensetzung auch über die Mischungsbrüche bestimmt werden. Eine weitere Vereinfachung folgt bei der Annahme, dass der turbulente Energietransport mit dem turbulenten Stofftransport gleich skaliert, was einer turbulenten Le-Zahl von  $Le_T = 1$  entspricht. Wird ferner angenommen, dass der Einfluss der spezifischen Wärmekapazitäten  $c_p$  vernachlässigbar ist, so lässt sich die inerte Temperatur  $T_0$  schließlich über:

$$T_0 = \sum T_i f_i \quad (4.46)$$

bestimmen, wobei  $T_i$  der Eintrittstemperatur des  $i$ -ten Stroms entspricht. Da sich somit die lokalen Werte der Temperatur und der inerten Zusammensetzung als Funktion der Mischungsbrüche  $f_i$  schrei-

ben lassen, lässt sich die Reaktionsrate aus Gl. (4.45) ebenfalls als Funktion dieser Größen formulieren:

$$\dot{\omega}_{YR} = \dot{\omega}_{YR}(f_i, Y_R). \quad (4.47)$$

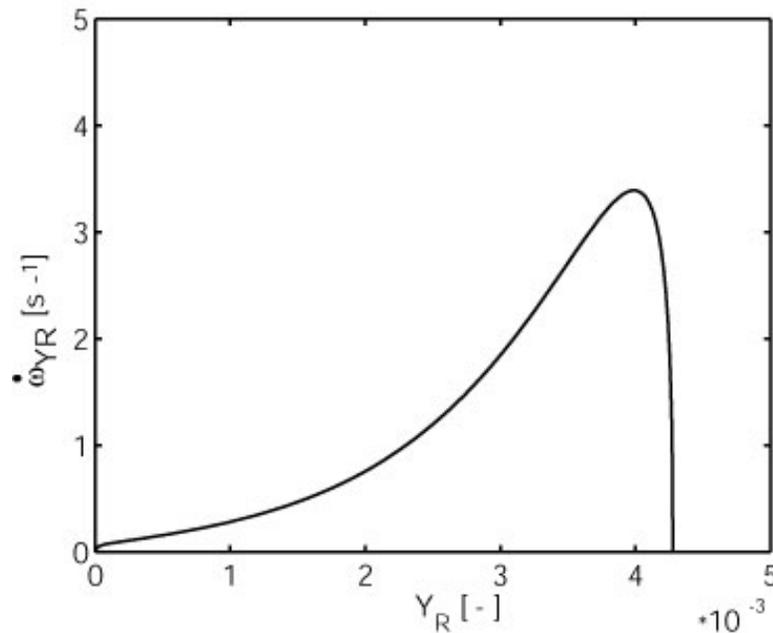
Durch Faltung der Reaktionsrate aus Gl. (4.47) über die PDF der Mischungsbrüche  $P(f_i)$  ergibt sich schließlich die mittlere turbulente Reaktionsrate zu:

$$\overline{\dot{\omega}_{YR}} = \int_0^1 \dot{\omega}_{YR}(f_i, Y_R) P(f_i) df_i. \quad (4.48)$$

Für den speziellen Fall, dass sich das Mischungsfeld durch einen einzigen Mischungsbruch beschreiben lässt, können für die PDF  $P(f)$  die üblichen Näherungen (clipped Gauß oder  $\beta$  Verteilung) gewählt werden. Findet hingegen, wie im vorliegenden Fall, die Mischung von mehr als zwei Teilströmen statt, so beschreibt  $P(f_i)$  die Verbundwahrscheinlichkeit der einzelnen Mischungsbrüche. Mit dem in Kap. 4.1 vorgestellten Verfahren lässt sich diese geeignet approximieren.

Anhand der Verläufe der Reaktionsrate und der Reaktivität in Abb. 4.24 lässt sich vermuten, dass sich die Reaktionsrate  $\dot{\omega}_{YR}(f_i, Y_R)$  bezgl. des Massenbruchs  $Y_R$  nicht-linear verhält und daher  $Y_R$  mit in die PDF aufgenommen werden müsste.

In Abb. 4.27 ist hierzu der Verlauf der Bildungsrate  $\dot{\omega}_{YR}(f_i, Y_R)$  bei konstanten „äußeren“ Randbedingungen ( $f_i = \text{konst.}$ ) als Funktion des Massenbruchs  $Y_R$  aufgetragen. Während die Rate über einen weiten Bereich stetig ansteigt, verzögert sich kurz vor Erreichen des maximalen Massenbruchs diese sehr stark. Bis zum Erreichen der maximalen Rate erscheint eine Vernachlässigung der Fluktuationen von  $Y_R$  bei der Bestimmung von  $\overline{\dot{\omega}_{YR}}$  berechtigt zu sein. Eine Vernachlässigung der Fluktuationen im Bereich der maximalen Rate führt zwar zu Fehlern bei der Bestimmung der mittleren Rate  $\overline{\dot{\omega}_{YR}}$ . Anhand Abb. 4.24 lässt sich aber erkennen, dass maximale Raten erst zum Ende der Induktionsphase auftreten, so dass fehlerhafte Raten



**Abbildung 4.27:** Bildungsrate  $\dot{\omega}_{YR}$  von  $\text{CH}_2\text{O}$  als Funktion des  $\text{CH}_2\text{O}$ -Massenbruchs.

aufgrund vernachlässigter Fluktuationen des Massenbruchs  $Y_R$  die Länge der gesamten Induktionsphase nur unwesentlich beeinflussen.

Die Berücksichtigung der Fluktuationen von  $Y_R$  würde zu einer weiteren Dimension der PDF  $P$  und damit der zu berechnenden Tabellen der Reaktionsraten führen. Dabei muss auch daran erinnert werden, dass die Fluktuationen der Mischungsbrüche (und damit insbesondere der Temperatur) einen bedeutend stärkeren Einfluss auf die mittlere Rate  $\overline{\dot{\omega}_{YR}}$  aufweisen.

### 4.3 Kopplung von Zündung und Wärmefreisetzung

Das in Kap. 4.2 entwickelte Zündmodell beschränkt sich ausschließlich auf die Beschreibung der während der Induktionsphase ablaufenden chemischen Prozesse. Der gewählten Modellierungsstrategie liegt die Annahme zugrunde, dass in dieser ersten Phase weder nen-

nenswert Reaktanden verbraucht noch Wärme freigesetzt wird.

Für die Kopplung von Zündung und Wärmefreisetzung ist die Kopplungsvariable  $c_Z$  in Gl. (4.4) vorgesehen. Aufgrund turbulenter Schwankungen lässt sich aber die Induktionsphase nicht klar von der anschließenden Wärmefreisetzungszone trennen. Im Folgenden wird daher auch von einer dispergierten Zündfläche gesprochen.

Die nächsten Abschnitte geben zunächst einen Überblick über die für die Kopplung von Zündung und Wärmefreisetzung wichtigen Effekte. Anschließend wird mit Hilfe eines PDF-Ansatzes ein einfaches Modell zur Berücksichtigung der dispergierten Zündfläche formuliert, das es ermöglicht, die Kopplungsvariable  $c_Z$  zu bestimmen.

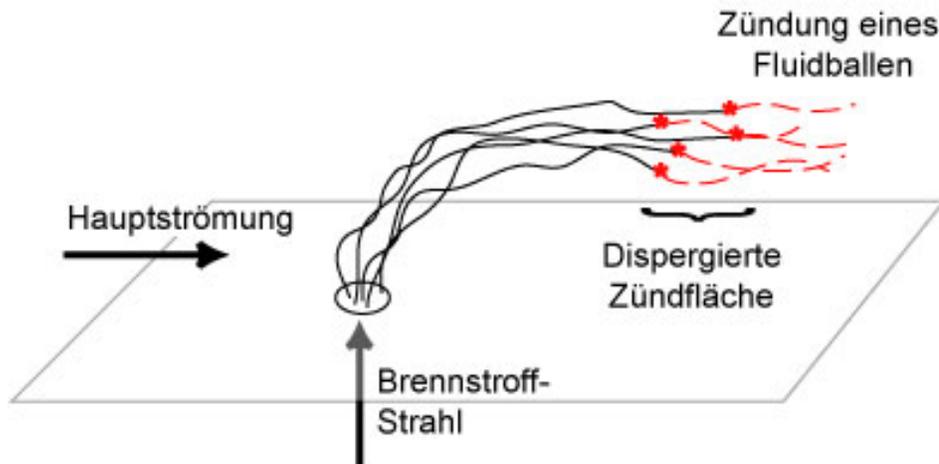
#### 4.3.1 Die dispergierte Zündfläche

Da während der Induktionsphase keine Wärme freigesetzt wird, folgt für den Quellterm  $\overline{S}_h$  der Transportgleichung der Enthalpie (Gl. (4.4)), dass dieser während der Induktionsphase den Wert  $\overline{S}_h = 0$  einnimmt.

Mit dem Ende der Induktionsphase startet die Wärmefreisetzungsphase (vergl. Abb. 3.1), während welcher das Zündmodell keine weiteren Informationen über den Reaktionsfortschritt liefert. Dies erfordert aber neben dem Zündmodell ein weiteres Teilmodell für die Beschreibung der anschließenden Wärmefreisetzung bzw. zur Berechnung des Quellterms  $\overline{S}_h$  (siehe Gl. (4.4)):

$$\overline{S}_h = \bar{\rho} \tilde{c}_Z \int_0^1 \int_0^1 \dot{q} P(f_H, f_F) df_H df_F. \quad (4.49)$$

Eine Kopplung der Wärmefreisetzung an die vorangegangene Induktionsphase erfolgt bei dieser Formulierung über die Skalierungs- oder Kopplungsvariable  $c_Z$ . Diese muss der Modellvorstellung entsprechend während der Induktionsphase den Wert  $c_Z = 0$  und während der Wärmefreisetzungsphase den Wert  $c_Z = 1$  annehmen. Ferner liegt zum Ende der Induktions- bzw. zu Beginn der Wärmefreisetzungs-



**Abbildung 4.28:** Modellvorstellung der dispergierten Zündfläche.

phase ein Übergangsbereich vor, in dem der Wert von  $c_Z$  zwischen  $c_Z = 0$  und  $c_Z = 1$  liegt. Im Folgenden wird dieses Phänomen auch mit dem Begriff „dispergierte Zündfläche“ bezeichnet.

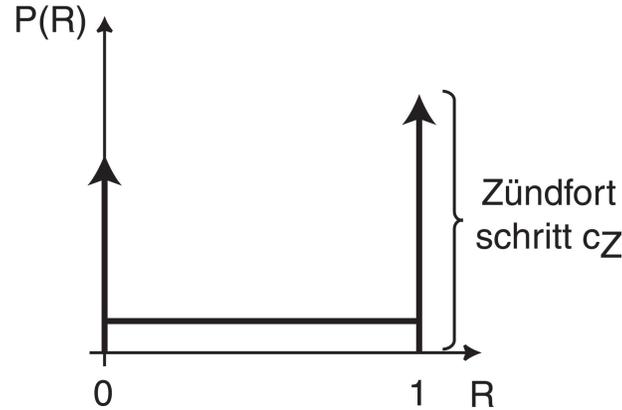
Die dabei zugrunde gelegten Überlegungen lassen sich am besten anhand einer Lagrange’schen Formulierung erläutern.

Aufgrund der Turbulenz haben die an einem bestimmten Punkt im Brennraum eintreffenden Fluidballen unterschiedliche Wege zurückgelegt. Da die Zustände (Mischungszusammensetzung und Temperatur) eine Funktion des Ortes sind, besitzt somit jeder an einem bestimmten Ort eintreffende Fluidballen eine andere Reaktivität, was zu einer aufgedickten bzw. dispergierten Zündfläche führt.

Für eine Querstrahl-Konfiguration zeigt Abb. 4.28 unterschiedliche Wege, entlang deren sich Fluidballen während der Zündverzugsphase und der anschließenden Wärmefreisetzung bewegen. Die Zündung auf dem zurückgelegten Weg ist durch einen Stern (\*) markiert.

### 4.3.2 Modellierung der dispergierten Zündfläche

Mit Hilfe eines PDF-Ansatzes für die Reaktivität  $R_Y$  (Definition siehe Gl. (4.40)) soll die dispergierte Zündfläche berücksichtigt wer-



**Abbildung 4.29:** Angenommene PDF für die Reaktivität.

den. Die sich der Zündung anschließende Wärmefreisetzung wird dabei durch die Wahrscheinlichkeit ausschließlich bei  $R_Y = 1$  skaliert. Die Wahrscheinlichkeit bei  $R_Y = 1$  entspricht in Lagrange'scher Betrachtungsweise dem Anteil der Fluidballen  $c_Z$ , die einen bestimmten Ort mit der Reaktivität  $R_Y = 1$  erreichen und dort Wärme freisetzen. Aus diesem Grunde scheint die Näherung der PDF durch eine einfache Gleichverteilung mit jeweils einem  $\delta$ -Peak an den Rändern  $R_Y = 0$  und  $R_Y = 1$  gerechtfertigt. Abbildung 4.29 zeigt die verwendete PDF und den anhand der Höhe des  $\delta$ -Peaks bei  $R_Y = 1$  bestimmten Zündfortschritt  $c_Z$ .

Mit einigen mathematischen Umformungen der PDF kann gezeigt werden, dass sich die Höhe des  $\delta$ -Peaks bei  $R_Y = 1$  bzw. der Zündfortschritt  $c_Z$  zu:

$$c_Z = \widetilde{R}_Y - 3(\widetilde{R}_Y(1 - \widetilde{R}_Y) - \widetilde{R}_Y''^2) \quad (4.50)$$

ergibt. Während die mittlere Reaktivität  $\widetilde{R}_Y$  durch Normierung des Radikalenpoolmassenbruches (vergl. Gl. (4.40)) bestimmt werden kann, ist für die Varianz der Reaktivität  $\widetilde{R}_Y''^2$  eine zusätzliche Transportgleichung zu lösen:

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_i \widetilde{R_Y''^2}}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\mu_T}{Sc_T} \frac{\partial \widetilde{R_Y''^2}}{\partial x_k} \right) + 2 \frac{\mu_T}{Sc_T} \left( \frac{\partial \tilde{R}_Y}{\partial x_k} \right)^2 - 2 \bar{\rho} \frac{\epsilon}{k} \widetilde{R_Y''^2} + 2 \overline{R_Y'' \dot{\omega}_R}. \quad (4.51)$$

Im Gegensatz zu der Transportgleichung für die Varianz eines konservativen Skalars (z.B. Mischungsbruch) besitzt Gl. (4.51) auf der rechten Seite einen weiteren Term, mit dem die Produktion der Varianz aufgrund der Fluktuationen der Reaktivität  $R_Y$  und dem nicht-linearen Verhalten der Reaktionsrate berücksichtigt wird. Problematisch ist, dass der Term  $2\overline{R_Y'' \dot{\omega}_R}$  nicht direkt aus den Strömungsgrößen berechnet werden kann. Über die von der Favre-Mittelung bekannte Aufteilung der Strömungsgrößen ( $\phi = \tilde{\phi} + \phi''$ ) ergibt sich, dass  $R_Y''$  durch  $R_Y - \widetilde{R}_Y$  ersetzt werden kann. Nach anschließender Mittelung lässt sich somit schreiben:

$$2\overline{R_Y'' \dot{\omega}_R} = 2 \int_0^1 R_Y \dot{\omega}(R_Y) P(R_Y) dR_Y - \widetilde{R}_Y \int_0^1 \dot{\omega}(R_Y) P(R_Y) dR_Y. \quad (4.52)$$

Die einfache Form der Reaktivitäts-PDF macht eine Auswertung der beiden Integrale während der CFD-Berechnung möglich. Aufgrund der durchzuführenden Integrationen steigt die notwendige Rechenzeit für eine Iteration bei Berücksichtigung dieses Terms um ca. 50 % an, was für Testzwecke aber akzeptiert werden kann.

Studien für verschiedene Konfigurationen haben aber gezeigt, dass der Einfluss dieses Terms nur von untergeordneter Rolle ist. Gleiches Verhalten wurde auch in [BG03] bei der Varianz der Enthalpie in einem reaktiven System beobachtet. Im Folgenden soll dieser Term daher vernachlässigt werden.

Mit Hilfe des in diesem Abschnitt entwickelten Teilmodells lässt sich die Wärmefreisetzung an die vorangegangene Zündung koppeln und damit der erste Teil des Quellterms  $\overline{S_h}$  berechnen. Für die Bestimmung der eigentlichen Wärmefreisetzung  $\dot{q}$  werden im folgenden Abschnitt zwei Modelle entwickelt und bewertet.

## 4.4 Wärmefreisetzung

Wie bereits in Kap. 4.2 erwähnt, beschränkt sich das entwickelte Zündmodell ausschließlich auf die Beschreibung der während der Induktionsphase ablaufenden chemischen Prozesse. In Kap. 4.3 wurde nun in einem ersten Schritt ein Teilmodell für die Kopplung der Zündung an die nachfolgende Wärmefreisetzung formuliert. Als weiteres muss nun noch mit einem Modell für die Wärmefreisetzung  $\dot{q}$  der Quellterm  $\overline{S}_h$  der Enthalpie-Transportgleichung (Gl. (4.4)) geschlossen werden.

Im Folgenden sollen zwei Modellvarianten für die Wärmefreisetzung diskutiert werden. Während die erste auf einer detaillierten Betrachtung der Wärmefreisetzungsvorgänge beruht [IFP<sup>+</sup>04], stellt die zweite aufgrund der Annahme einer konstanten Wärmefreisetzung während der chemischen Zeit  $\tau_{ch}$  eine starke Vereinfachung da.

### 4.4.1 Formulierung des Wärmefreisetzungmodells

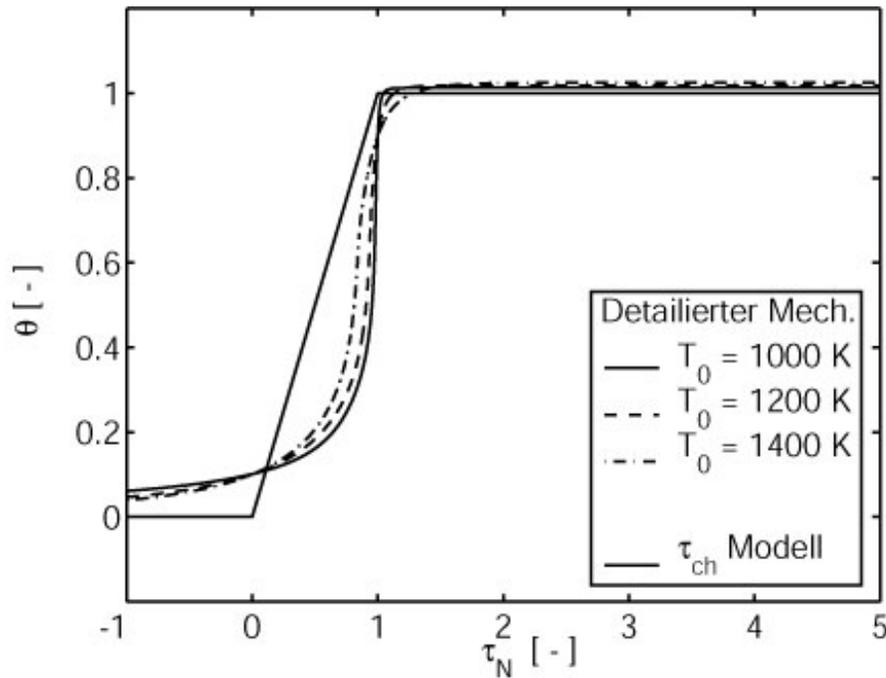
In Abb. 4.30 ist die normierte Temperatur  $\theta$  einer homogenen Mischung in einem PFR für verschiedene Starttemperaturen  $T_0$  über der mit der chemischen Zeit  $\tau_{ch}$  normierten Zeit aufgetragen. Die Berechnung der normierten Temperatur erfolgt über:

$$\theta = \frac{T - T_0}{T_{ad} - T_0}, \quad (4.53)$$

wobei  $T_0$  der Start- und  $T_{ad}$  der adiabten Flammtemperatur entsprechen. Durch Normierung der Zeit mit der chemischen Zeit  $\tau_{ch}$ :

$$\tau_N = \frac{t - \tau_{0,1}}{\tau_{ch}}, \quad (4.54)$$

wird erreicht, dass die Wärmefreisetzung zum Zeitpunkt  $\tau_N = 0$  beginnt und bis  $\tau_N = 1$  abgeschlossen ist. Die chemische Zeit  $\tau_{ch}$



**Abbildung 4.30:** Vergleich der Wärmefreisetzung berechnet mit einem detaillierten Reaktionsmechanismus und dem  $\tau_{ch}$  Modell.

umfasst das Zeitintervall, innerhalb der eine Temperaturerhöhung von  $\theta = 0,1$  auf  $\theta = 0,9$  stattfindet:

$$\tau_{ch} = \tau_{0,9} - \tau_{0,1}, \quad (4.55)$$

wobei  $\tau_{0,1}$  bzw.  $\tau_{0,9}$  den Zeiten bei Erreichen der Temperaturen  $\theta = 0,1$  bzw.  $\theta = 0,9$  entsprechen.

Bemerkenswert an den Verläufen in Abb. 4.30 ist die Ähnlichkeit der normierten Temperaturen, unabhängig von der gewählten Starttemperatur  $T_0$ . Weitere Studien haben auch für eine Variation der Luftzahl  $\lambda$  innerhalb des Bereiches  $0,8 \leq \lambda \leq 1,8$  eine starke Ähnlichkeit der normierten Temperaturen ergeben. Es muss aber angemerkt werden, dass die chemischen Zeiten  $\tau_{ch}$  hingegen sehr wohl eine Funktion der Starttemperatur  $T_0$  und der Luftzahl  $\lambda$  sind.

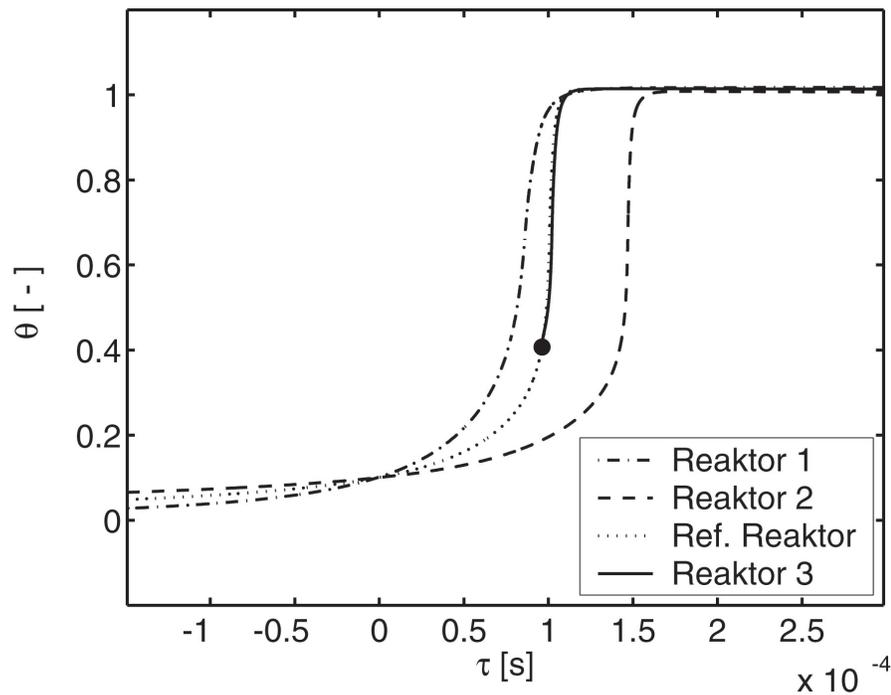
Neben dem mit einem detaillierten Reaktionsmechanismus bestimm-

ten Verlauf der Temperatur zeigt das Diagramm noch den sich für ein einfaches  $\tau_{ch}$ -Wärmefreisetzungsmodell ergebenden Temperaturverlauf. Diese Modellformulierung basiert auf der Annahme, dass die gesamte Wärme konstant innerhalb der chemischen Zeit freigesetzt wird und stellt daher eine starke Vereinfachung der ablaufenden Prozesse dar. Anhand des Diagramms lässt sich der Temperaturverlauf in zwei Bereiche mit stark unterschiedlichen Wärmefreisetzungsraten unterteilen. Unterhalb  $\theta \approx 0,2$  wird nur in geringen Mengen Wärme freigesetzt, während oberhalb ein starker Anstieg der Wärmefreisetzungsrate zu erkennen ist. Die starke Sensitivität der Wärmefreisetzungsrate bezgl. der momentanen Temperatur lässt sich mit der starken Temperaturabhängigkeit des Arrhenius-Ansatzes erklären.

Die Betrachtung der Wärmefreisetzung mittels eines detaillierten Reaktionsmechanismus ist für eine 3D-CFD Applikation aufgrund des sich dabei ergebenden hohen Rechenaufwandes nicht praktikabel. Allerdings kann ein der Formulierung des Zündmodells ähnlicher Ansatz gemacht werden. Lässt sich die momentane Wärmefreisetzung als Funktion der inerten Zusammensetzung und Temperatur sowie der momentanen Temperatur [Iva] eindeutig abbilden, so ist eine ähnliche Formulierung wie beim Zündmodell möglich.

Mit Hilfe des gleichen Reaktormodells wie in Kap. 4.2.2 lässt sich die Genauigkeit dieser Formulierung untersuchen. Ohne Einschränkung der Allgemeinheit, aber der besseren Darstellbarkeit wegen, werden entgegen der Angaben in Abb. 4.18 für die Starttemperaturen der beiden Reaktoren 1 und 2 die Werte  $T_1 = 1200K$  und  $T_2 = 1000K$  gewählt. Des Weiteren ist die Zeitskala der einzelnen Reaktoren so verschoben, dass zum Zeitpunkt  $\tau = 0$  die normierte Temperatur den Wert  $\theta = 0,1$  annimmt. Damit kann ein Vergleich der Temperaturverläufe der Reaktoren während der Wärmefreisetzungsphase getrennt von den Zündverzugszeiten durchgeführt werden.

Ähnlich der Validierung des Zündmodells werden die beiden Reaktoren vor Erreichen der adiabaten Flammtemperatur gestoppt und anschließend gemischt, um im Reaktor 3 vollständig auszureagieren.



**Abbildung 4.31:** Temperaturverlauf bei gleichzeitiger Wärmefreisetzung und Mischung.

Der Referenzreaktor enthält die Mischung, die sich durch Mischung der noch nicht gestarteten Reaktoren 1 und 2 ergibt. Zum besseren Vergleich der Temperaturverläufe in Reaktor 3 und dem Referenzreaktor ist das Temperaturprofil von Reaktor 3 entlang der Zeitachse so verschoben, dass der Startwert (markiert durch einen Punkt) auf dem Temperaturverlauf des Referenzreaktors zu liegen kommt.

Wie aus dem Diagramm in Abb. 4.31 zu entnehmen ist, deckt sich der Temperaturverlauf in Reaktor 3 mit dem des Referenzreaktors. Dies ermöglicht, dass die zeitliche Ableitung der Temperatur bzw. die Wärmefreisetzung als Funktion der inertten Zusammensetzung und Temperatur sowie der momentanen Temperatur eindeutig abgebildet werden kann. Ähnlich dem Zündmodell muss diese Funktion nicht in Form einer analytischen Gleichung zu Verfügung stehen,

sondern kann vor Berechnung des Strömungsfeldes mit Hilfe eines detaillierten Reaktionsmechanismus berechnet und in einer Tabelle als Kennfeld abgespeichert werden.

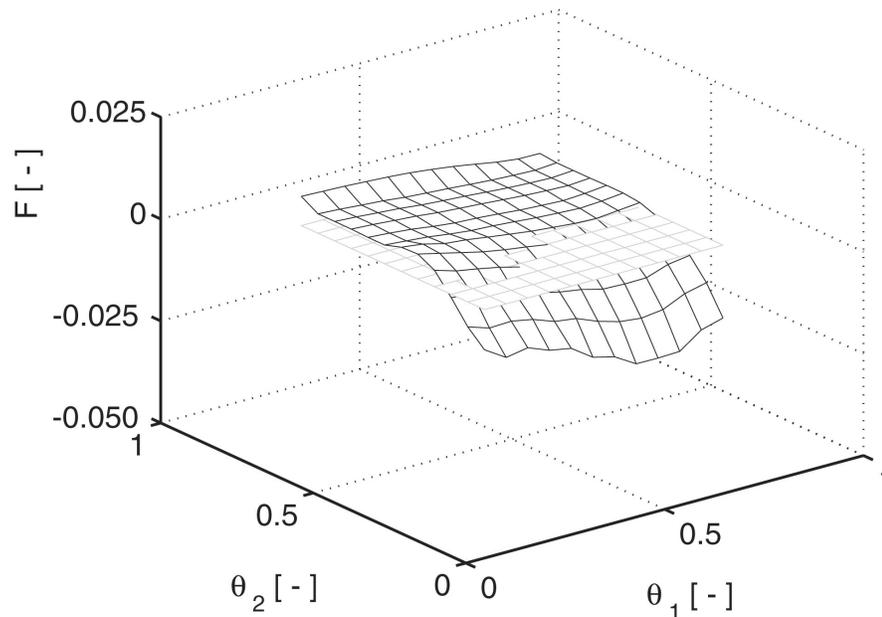
Für einen weiten Bereich an theoretisch möglichen Mischungsszenarien zeigt Abb. 4.32 den sich ergebenden Fehler. Zur einfacheren Orientierung ist die Fläche  $F = 0$  eingezeichnet. Für die Bewertung der sich bei der gewählten Formulierung ergebenden Abweichungen wird eine zu Gl. (4.42) ähnliche Funktion zur Berechnung des Fehlers eingeführt:

$$F_W = \ln \left( \frac{\tau_M + \tau_{R,M0.9}}{\tau_M + \tau_{M,M0.9}} \right). \quad (4.56)$$

Die Zeit  $\tau_M$  entspricht der Zeitspanne, die der Referenzreaktor benötigt, um von  $\theta = 0,1$  diejenige Temperatur zu erreichen, die sich nach Mischung der beiden Reaktoren 1 und 2 ergibt. Im Anschluss an den Mischvorgang benötigt das Gemisch in Reaktor 3 noch die Zeit  $\tau_{M,M0.9}$  um die Temperatur  $\theta = 0,9$  zu erreichen. Dem gegenüber steht die Zeit  $\tau_{R,M0.9}$  des Referenzreaktors, die dieser für den Temperaturanstieg zwischen der Mischtemperatur und  $\theta = 0.9$  benötigt.

Wie aus Abb. 4.32 zu entnehmen ist, bewegt sich der Betrag der Fehlerfunktion  $F$  im gesamten Bereich theoretisch möglicher Mischtemperaturen  $\theta_1$  und  $\theta_2$  in einem sehr kleinen Bereich. Größte Abweichungen sind im Bereich  $\theta_2 \rightarrow 0$  zu beobachten. Da die Kinetik in Reaktor 2 bedeutend langsamer als in Reaktor 1 abläuft, ist aber zu erwarten, dass in einer realen Brennerströmung durchaus dieser Mischungszustand eintreten kann. Es muss aber bei der Bewertung des Modellansatzes berücksichtigt werden, dass auch in diesem Bereich die Vereinfachung des Wärmefreisetzungsprozesses auf eine Fortschrittsvariable, die lokale Temperatur  $T$  bzw.  $\theta$ , zu keinen nennenswerten Fehlern führt.

Aufgrund der durchgeführten Untersuchungen lässt sich feststellen, dass zur Bestimmung der lokalen Wärmefreisetzungsrates Kenntnisse



**Abbildung 4.32:** Fehler des Wärmefreisetzungsmodells als Funktion der Temperatur der Reaktoren 1 und 2 vor dem Mischvorgang.

der inerten Zusammensetzung  $Y_{i,0}$  und Temperatur  $T_0$  sowie der momentanen Temperatur  $T$  bzw.  $\theta$  ausreichend sind. Damit lässt sich die lokale Wärmefreisetzungsrate als Funktion dieser Größen schreiben:

$$\dot{q} = \dot{q}(Y_{i,0}, T_0, T). \quad (4.57)$$

#### 4.4.2 Chemie-Turbulenz-Interaktion während der Wärmefreisetzungsphase

Zur Berücksichtigung der Chemie-Turbulenz-Interaktionen soll der bereits beim Zündmodell verwendete Faltungsansatz Anwendung finden. Wie in Gl. (4.57) gezeigt, lässt sich die Wärmefreisetzungsrate als Funktion der inerten Zusammensetzung  $Y_{i,0}$  und Temperatur  $T_0$  sowie der momentanen Temperatur formulieren. Die bereits in Kap. 4.2.4 getroffenen Annahmen ( $Le = 1$ , für alle Spezies gleiche und

konstante Diffusion) lassen für ein nicht vorgemischtes System die Formulierung über die Mischungsbrüche  $f_i$  zu:

$$\dot{q} = \dot{q}(f_i, T). \quad (4.58)$$

Wie in Kap. 3.1 beschrieben, konnte bei zahlreichen Experimenten beobachtet werden, dass sich bei Ablauf der Verbrennung im Regime der Selbstzündung und bei erhöhtem Inertanteil der Verbrennungsluft eine deutlich aufgedickte Reaktionszone einstellt. Daher kann damit gerechnet werden, dass die Fluktuationen der normierten Temperatur vernachlässigt werden können und die Fluktuationen der Mischungsbrüche den größten Einfluss auf die mittlere Wärmefreisetzungsrates  $\bar{q}$  besitzen, so dass sich diese durch Faltung über die Mischungsbruch-PDF  $P(f_i)$  bestimmen lässt:

$$\bar{q} = \int_0^1 \dot{q}(f_i, T) P(f_i) df_i. \quad (4.59)$$

Kann das System mit einem Mischungsbruch eindeutig beschrieben werden, so kann, ebenso wie in Kap. 4.2.4, auch hier einer der üblichen PDF-Ansätze (clipped Gauß bzw.  $\beta$  Verteilung) für  $P(f)$  zur Anwendung kommen. Die in der vorliegenden Arbeit zu modellierende Brennerströmung erfordert aber die Beschreibung des Mischungsfeldes mit Hilfe zweier Mischungsbrüche, so dass das in Kap. 4.1 entwickelte Distributionsmodell zur Berechnung der mittleren Raten verwendet wird.

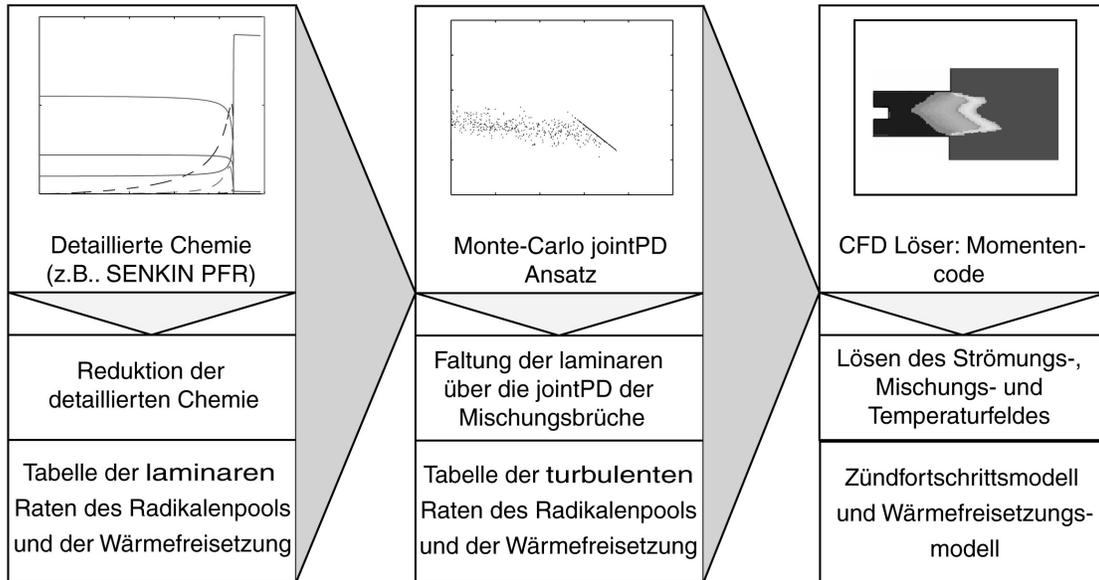
## 5 Struktur und Realisierung des Gesamtmodells

Nachdem die einzelnen Teilmodelle in den vorangegangenen Kapiteln formuliert und validiert wurden, wird im Folgenden die Realisierung des Gesamtmodells für den Einsatz als CFD-Simulationsmodell beschrieben. Damit lassen sich die chemischen Prozesse während der Induktions- als auch während der Wärmefreisetzungsphase räumlich aufgelöst für die turbulente reagierende Strömung in beliebigen Brennerkonfigurationen berechnen. Auf die eigentliche Implementierung in den Strömungslöser FLUENT [FLU02] über so genannte UDFs (**U**ser **D**efined **F**unctions) wird nicht näher eingegangen, da die Vorgehensweise dabei sehr spezifisch für den entsprechenden Strömungslöser ist. Neben der Beschreibung des Gesamtmodellbaus findet in den folgenden Abschnitten auch eine Diskussion der gewählten Euler-Form statt. Ferner wird im letzten Teil des Kapitels die Möglichkeit erörtert, ein adaptives Verfahren bei der Tabulierung der Reaktionsraten einzusetzen.

### 5.1 Aufbau des Modells

Der besseren Handhabung wegen ist das Modell in 3 Module unterteilt, die in Abb. 5.1 dargestellt sind.

Zunächst sind die laminaren Raten der Radikalenpoolspezies und der Wärmefreisetzung zu berechnen und in einer Tabelle abzuspeichern. Hierfür werden für zuvor bestimmte Intervalle der Starttemperatur und Luftzahl die Raten anhand eines detaillierten Reaktionsmechanismus mit einem Plug-Flow-Reaktor [LKM87] berechnet. Dies ermöglicht die Berücksichtigung der realen Erdgas- sowie Frischgaszusammensetzung. Durch die Tabulierung der laminaren Raten kann der Rechenzeitbedarf bei der Berechnung der mittleren turbulenten Raten erheblich reduziert werden. Während die Ausführung einer Plug-Flow-Reaktor Simulation auf einem Pentium P4 mit 2

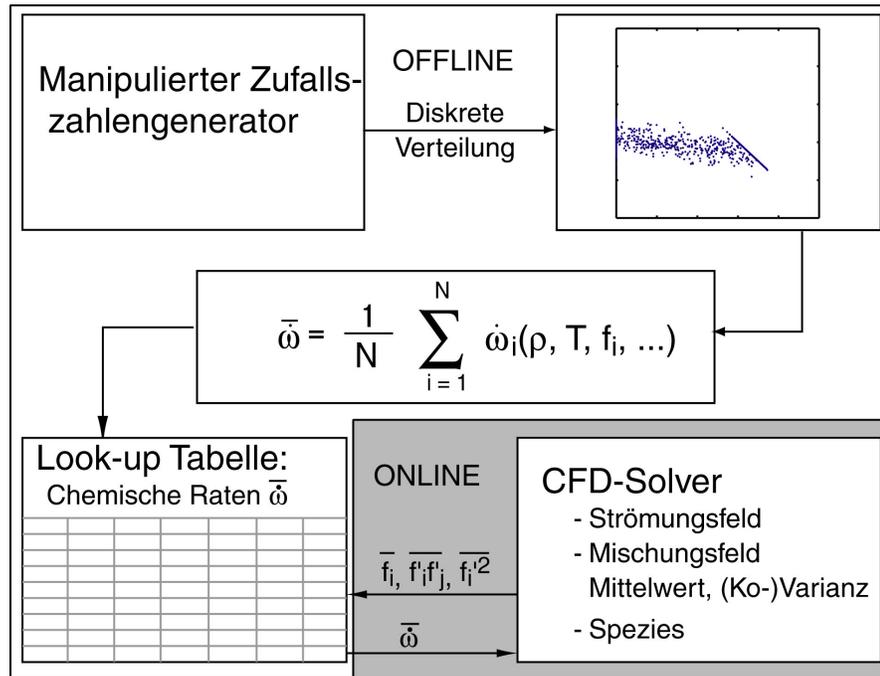


**Abbildung 5.1:** Implementierung und Aufbau des Zünd- und Wärmefreisetzungsmodells.

GHz zwischen 1 und 2 Sekunden benötigt, lässt sich durch Tabulierung und anschließende Interpolation der Zeitbedarf um mehrere Größenordnungen reduzieren.

Die Abläufe im mittleren und rechten Modul in Abb. 5.1 sind in Abb. 5.2 detaillierter dargestellt. Mit Hilfe des in Kap. 4.1.3 beschriebenen Verfahrens wird zunächst eine diskrete Verteilung generiert. Durch anschließende Mittelung der individuellen Rate eines jeden Einzelwertpaares lässt sich anschließend die mittlere Rate der Verteilung berechnen und in einer Tabelle abspeichern. Diese enthält die Raten als Funktion der Mittelwerte und (Ko-)Varianzen der beiden Mischungsbrüche  $f_H$  und  $f_F$ , sowie der für die Rate entsprechenden Fortschrittsvariablen (Massenbruch des Radikalenpoolrepräsentanten bzw. Temperatur).

Weiterhin zeigt Abb. 5.2 die Kopplung des Strömungslösers an die erzeugten Tabellen. Der CFD-Löser berechnet neben den Transportgleichungen für Masse, Impuls, Energie und den Größen des Turbulenzmodells auch die Mischungsbruchfelder. Der lokale Mischungszustand lässt sich für die vorliegende 3-Strom-Mischung



**Abbildung 5.2:** Flussdiagramm des Modells: Tabellengenerierung und Interaktion mit dem Strömungslöser.

mit Hilfe der Brennstoff- und Heißgasmischungsbrüche  $f_F$  und  $f_H$  beschreiben. Zur Berücksichtigung der Turbulenz-Chemie Interaktionen müssen zusätzlich noch die Transportgleichungen für die Mischungsbruch(ko)varianzen in den Strömungslöser implementiert werden.

Während der Berechnung der Energiegleichung sowie der Transportgleichung für den Radikalenpoolrepräsentanten werden vom CFD-Löser die für die Bestimmung der jeweiligen Raten entsprechenden Einflussgrößen an ein Interface-Modul übergeben, welches durch Interpolation der Tabellenwerte die gewünschten Raten zurück liefert. Die Interpolation im Mischungsbruchraum erfolgt mit einem Verfahren erster Ordnung und über die jeweilige Fortschrittsvariable (Radikalenpool-Massenbruch bzw. Temperatur) mit einem Verfahren zweiter Ordnung.

Die Entkopplung der Berechnung der chemischen Raten von der Lösung der Transportgleichungen des Strömungsfelds führt zu ei-

ner effektiven Modellformulierung. Bereits erzeugte Tabellen müssen nur bei Variation der Eingangstemperaturen, des Systemdrucks sowie der Zusammensetzung des Erdgases bzw. der Verbrennungsluft neu erstellt werden. Hingegen lassen sich Berechnungen an unterschiedlichen Brennerkonfigurationen jeweils mit derselben Tabelle durchführen.

Anhand der Diskussion einiger ausgewählter Aspekte soll die Beschreibung der Implementierung in den folgenden Abschnitten vervollständigt werden.

## 5.2 Lagrange vs. Euler-Formulierung

Der besseren Anschaulichkeit wegen wurde bei der Beschreibung des Zünd- und Wärmefreisetzungsmodells vereinzelt eine Lagrang'sche Formulierung verwendet. Dies legt nahe, dass eine Implementierung grundsätzlich in Form einer Euler- als auch Lagrang'schen Formulierung möglich ist.

Bei einer Implementierung der Modelle in Lagrang'scher Formulierung wird der lokale Zustand mittels masseloser Partikel beschrieben. Die Partikel treten durch die Eintritte der einzelnen Ströme in den Brenner ein und werden von der Strömung transportiert. Einfache Transportmodelle verwenden bei der Berechnung der Partikeltrajektorie nur die mittleren Strömungsgrößen, so dass sich für die Partikeleigenschaften, wie z.B. Reaktivität, auch nur mittlere Werte bestimmen lassen. Die disperse Verteilung der Partikel und damit im vorliegenden Fall auch der Reaktivität lässt sich mit Hilfe komplexerer Transportmodelle (u.a. das SPV-Modell von Lightstone et al. [LR98]) berechnen.

Durch Lösen einer gewöhnlichen Differentialgleichung für die Reaktivität lässt sich deren Verlauf entlang der Partikeltrajektorie bestimmen. Besitzen die Partikel als Eigenschaft nur die Reaktivität, so müssen die die Rate beeinflussenden Größen, wie z.B. Temperatur und Mischungsbrüche, durch Auswertung der Partikelumgebung

bestimmt werden.

Eine genaue Berechnung der Reaktivität, insbesondere auch in der Grenzschicht, erfordert den Transport zahlreicher Partikel. Da die Zeit für die Berechnung der Partikelbewegungen nahezu linear mit der Partikelanzahl skaliert, sind der Anzahl der transportierten Partikel Grenzen gesetzt. Hingegen werden bei einem Euler-Ansatz für den gesamten Raum die Transportgleichungen gelöst, so dass die Formulierung der Modelle in Euler-Form geeigneter erscheint.

### 5.3 Adaptive Tabellengenerierung

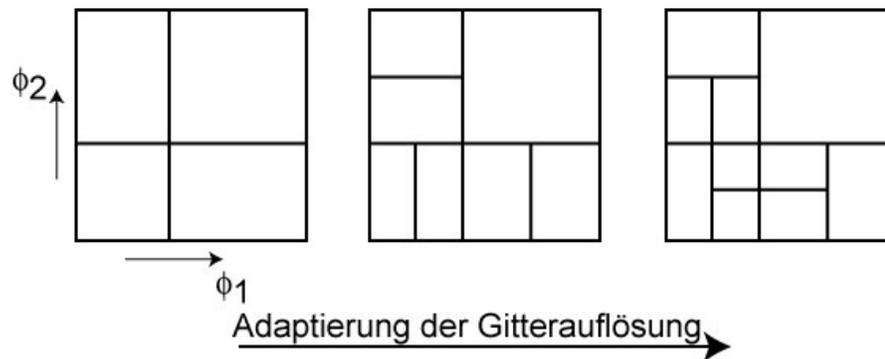
Die Tabulierung der Raten ermöglicht die Entkopplung der sehr aufwändigen Berechnung der chemischen Prozesse von der Lösung des Strömungsfeldes. Allerdings steigt dadurch die sich bei Durchführung einer CFD-Simulation ergebende Datenmenge. Da je nach verwendetem Modell für die Beschreibung der chemischen Prozesse Tabellengrößen mit über 100 MB (z.B. ILDM-Tabellen mit mehreren Fortschrittsvariablen) zustande kommen können, wurden in den letzten Jahren vermehrt Anstrengungen zur Entwicklung effektiver Speicheralgorithmen angestellt.

Von Pope [Pop97] wurde für die Berechnung und Tabulierung der Reaktionsraten das ISAT (**In-Situ Adaptive Tabulating**) Verfahren entwickelt. Dieses Verfahren eignet sich besonders dann, wenn der zu tabulierende Bereich der Einflussgrößen vorab nicht bekannt ist und daher die Berechnung der Raten während des Lösen des Strömungsfeldes stattfindet. Bei Verwendung des ISAT-Verfahrens wird die CFD-Simulation zunächst mit einer leeren Tabelle gestartet. Die Zielgrößen werden online berechnet und an den CFD-Löser zurückgegeben. Zusätzlich werden die errechneten Werte in einer Tabelle abgespeichert. Wird im Lauf der CFD-Simulation die Zielgröße für gleiche oder ähnliche Werte der Eingangsgrößen benötigt, so lässt sich diese sehr schnell anhand der in der Tabelle gespeicherten Daten bestimmen. Nur wenn die Zielgröße noch nicht für ähnliche Werte der

Einflussgrößen bestimmt wurde, findet eine Neuberechnung statt. Im Laufe der CFD-Simulation ergibt sich daher eine stetige Beschleunigung bei der Bestimmung der chemischen Raten. Da die Tabelle nur Einträge besitzt, die tatsächlich benötigt werden, lässt sich mit dem ISAT Verfahren die Tabellengröße deutlich reduzieren.

Ein zuerst an der TU-Darmstadt von A. Maltsev entwickeltes und von Gharaibah, Brandt und Polifke [GBP02] weiterentwickeltes adaptives Tabulierungsverfahren eignet sich speziell für die Tabulierung der Zielgröße vor Durchführung der CFD-Simulation. Anhand Abb. 5.3 soll das Verfahren für die Tabulierung einer von den Größen  $\phi_1$  und  $\phi_2$  abhängigen Größe erläutert werden. Zunächst wird der zu tabulierende Bereich mit Hilfe eines groben Gitters in vier Zellen unterteilt, für welche die Koeffizienten einer Ausgleichsfläche zu berechnen sind. Lässt sich die Zielgröße innerhalb der betrachteten Zelle mit der Ausgleichsfläche ausreichend genau darstellen, so werden die Koeffizienten abgespeichert. Die Überprüfung findet dabei für den Punkt im Zentrum der Zelle statt. Hier wird die Abweichung zwischen dem Vorhersagewert der Ausgleichsfläche und dem exakten Wert bestimmt und mit der maximal zulässigen Abweichung verglichen. Werden zu große Abweichungen festgestellt, so findet eine Teilung der Zelle in Richtung des größten Gradienten statt. Für die beiden resultierenden Zellen werden erneut die Koeffizienten bestimmt und anhand der exakten Werte die Qualität der berechneten Näherung überprüft. Eine Teilung der Zellen zur Verfeinerung findet so lange statt, bis sich die Zielgröße mit der gewünschten Genauigkeit approximieren lässt.

Wie die eigene Arbeit gezeigt hat, eignen sich adaptive Verfahren nur dann, wenn die Zielgröße eine deterministische Funktion ist. Da der in Kap. 4.1 beschriebene Ansatz zur Approximation der PDF durch eine diskrete Verteilung allerdings einem stochastisches Verfahren zugrunde liegt, ergeben sich bei wiederholter Berechnung der Zielgröße mit konstanten Eingangsgrößen jeweils unterschiedliche Ergebnisse (vgl. Kap. 4.1.13). Besonders bei der Berechnung der Zielgröße innerhalb eines engen Intervalls stellt der Tabulationsalgorithmus auf-



**Abbildung 5.3:** Verfahren zur adaptiven Verfeinerung bei der Tabulierung.

grund der Fluktuationen um den Mittelwert einen scheinbar zu hohen Fehler fest, was die weitere Verfeinerung des Intervalls auslöst. In der Regel nimmt der Algorithmus mit steigender Verfeinerung einen immer größeren Fehler wahr, so dass die Verfeinerung immer weiter fortgesetzt wird.

In der gewählten Realisierung des Gesamtmodells beträgt die Tabellengröße ca. 13 MB. Die Neuentwicklung und Implementierung aufwändiger Mechanismen zur adaptiven Tabulierung erscheint daher für den vorliegenden Fall nicht unbedingt notwendig.

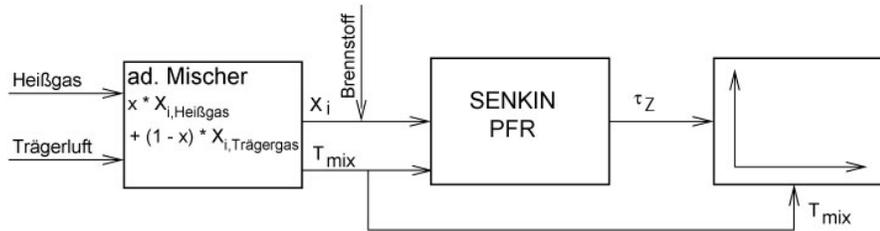
## 6 Ergebnisse

Eine Validierung der neu formulierten Teilmodelle fand bereits in Kap. 4 statt. Neben der Überprüfung der getroffenen Annahmen beschreiben die folgenden Abschnitte die bereits in [BPI<sup>+</sup>03] und [IFP<sup>+</sup>04] veröffentlichte Validierung des Gesamtmodells anhand eines realen Gasturbinenbrenners.

### 6.1 Überprüfung der Vereinfachungen

Wie Eingangs erwähnt, findet im SEV Brenner die Mischung dreier Ströme statt. Die heißen Abgase aus der ersten Verbrennungsstufe werden in der Hochdruckturbine entspannt und treten als Hauptströmung in den SEV-Brenner ein. Über eine Lanze wird senkrecht zur Hauptströmungsrichtung Brennstoff eingedüst, der zur Abschirmung vor den heißen Gasen mit einem kalten Trägerluftstrom ummantelt ist. Da diese vor der ersten Verbrennungsstufe dem Hauptgasstrom entnommen wird, entspricht die Zusammensetzung der Trägerluft der der Umgebungsluft. Hingegen zeichnet sich das in den SEV-Brenner eintretende Heißgas durch einen reduzierten Sauerstoff-Anteil sowie vorhandene Verbrennungsprodukte ( $\text{CO}_2$  und  $\text{H}_2\text{O}$ ) aus. In Kap. 3.1.6 konnte gezeigt werden, dass bei Reduktion des Sauerstoffanteils im Frischgas nahezu konstante Zündverzugszeiten erreicht werden, wenn der Systemdruck so erhöht wird, dass sich ein konstanter Sauerstoffpartialdruck einstellt. Hieraus lässt sich aber auch folgern, dass bei konstantem Systemdruck in Bereichen mit geringeren Sauerstoffmolenbrüchen mit längeren Zündverzugszeiten gerechnet werden muss. Die Berücksichtigung der höheren Sauerstoffkonzentration in der Trägerluft würde die Dimensionalität der Reaktionsraten und damit der Tabellen erhöhen und den Rechenzeitbedarf bei der Tabulierung vervielfachen.

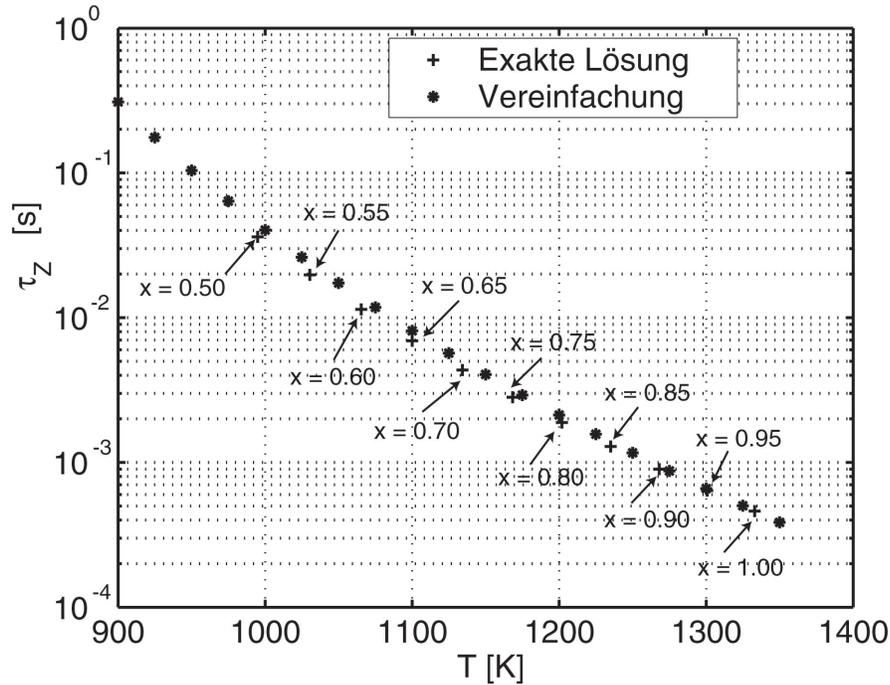
Anhand des in Abb. 6.1 gezeigten Reaktornetzwerkes lässt sich überprüfen, in welchen Bereichen aufgrund der erhöhten Sauerstoffkon-



**Abbildung 6.1:** Ersatzmodell für die Überprüfung der Annahme gleicher Zusammensetzung des Hauptgasstroms und der Trägerluft.

zentration der Trägerluft mit einer Veränderung der chemischen Raten zu rechnen ist. Zur Bestimmung der Mischungstemperatur  $T_{mix}$  und der genauen Zusammensetzung werden zunächst für verschiedene Heißgasanteile  $x$  in einem adiabaten Mischer die Zustandsgrößen der Mischung des Verbrennungsluftstroms berechnet. Unter Beibehalt der Mischungstemperatur wird im Anschluss Brennstoff hinzugefügt und in einem Plug-Flow-Reaktor zur Zündung gebracht. Die sich ergebende Zündverzugszeit entspricht dem Wert bei exakter Betrachtung der Vorgänge. Zündverzugszeiten für das vereinfachte Modell werden ebenfalls mit einem Plug-Flow-Reaktor berechnet und zusammen mit den exakten Werten in einem Diagramm aufgetragen. Die Untersuchungen wurden für ein Verhältnis aus Heißgas- und Trägerluftstrom von  $T_H/T_T \approx 2,2$  und einem Druck von  $p = 15\text{bar}$  durchgeführt. Gleiches Verhalten lässt sich aber auch bei anderen Betriebspunkten feststellen.

Das in Abb. 6.2 gezeigte Diagramm fasst die gewonnenen Ergebnisse zusammen. Geringfügig kürzere Zündverzugszeiten ergeben sich bei der detaillierten Betrachtung der Zusammensetzungen im Bereich niedriger Mischtemperaturen bzw. geringer Heißgasanteile  $x$ . Erwartungsgemäß verringert sich mit steigendem Heißgasanteil  $x$  der Einfluss auf die Zündverzugszeiten, da die Zusammensetzung der Mischung immer weniger von der des reinen Heißgases abweicht. Eine ausreichende Übereinstimmung der Zündverzugszeiten lässt sich ab einem Heißgasanteil von  $x \approx 0,6$  feststellen, was bei der hier gewählten Konfiguration einer Mischtemperatur von  $T_{Mix} \approx 1060\text{K}$  ent-



**Abbildung 6.2:** Überprüfung der Vereinfachung: Zündverzugszeiten für verschiedene Mischtemperaturen.

spricht.

In erster Näherung kann zur Bestimmung einer charakteristischen Zündverzugszeit  $\tau_Z^c$  bei einem typischen Massenstromverhältnis von Trägerluft und Heißgas von  $\dot{m}_T/\dot{m}_H < 0,02$  die Heißgastemperatur als Mischtemperatur angenommen werden. Aus Abb. 6.2 ergibt sich somit für  $x = 1,0$  die Zündverzugszeit zu  $\tau_Z^c = 5 \cdot 10^{-4}s$ , während sich bei  $x = 0,6$  eine Zündverzugszeit von  $\tau_Z > 10^{-2}s$  einstellt. Aufgrund der durchgeführten Abschätzung lässt sich folgern, dass Reaktionsraten in Bereichen mit einem Heißgasanteil von  $x < 0,6$  auf das Gesamtergebn keine signifikanten Auswirkungen haben. Eine Vernachlässigung der erhöhten Sauerstoffkonzentration des Trägerluftstroms erscheint daher zulässig.

Zur weiteren Vereinfachung wurde angenommen, dass die Korrelation zwischen dem Heißgas- und dem Brennstoffmischungsbruch einen konstanten Wert aufweist. Damit lässt sich die Dimension der zu berechnenden Tabellen reduzieren, wodurch sich einerseits geringere

Rechenzeiten bei der Tabulierung der Raten und andererseits kleinere Tabellen ergeben. Es sei an dieser Stelle darauf hingewiesen, dass sich bei einer strukturierten Tabelle im Falle einer Erweiterung um eine Dimension mit z.B. 10 Stützpunkten der Speicherbedarf und der Rechenaufwand verzehnfacht!

Hinsichtlich der Kovarianzen wurde in einer zuvor durchgeführten CFD-Simulation festgestellt, dass sich für diese ein nahezu konstanter Wert einstellt. Nur im Nahfeld des Injektors kann eine Abweichung von der sonst starken negativen Korrelation zwischen Heißgas- und dem Brennstoffmischungsbruch beobachtet werden. Da sich dort der geringen Temperaturen wegen aber nur sehr geringe Reaktionsraten einstellen, stellt die Berechnung mit konstanter stark negativer Korrelation eine zulässige Vereinfachung dar.

## **6.2 Validierung des Gesamtmodells am SEV-Brenner**

Aus Gründen der Geheimhaltung wurden die im Folgenden beschriebenen Berechnungen zum größten Teil vom Auftraggeber der vorliegenden Arbeit durchgeführt. Da es sich bei der Berechnung teilweise um maschinennahe Konfigurationen handelt, erfolgt die Darstellung der Ergebnisse in normierter Form.

Im Folgenden werden zunächst die verwendeten experimentellen Techniken erläutert. Anschließend findet ein detaillierter Vergleich der numerischen Ergebnisse mit den experimentellen Daten statt. Neben den ermittelten Flammpositionen werden, soweit experimentelle Daten verfügbar sind, auch die Flammdicken für die Validierung des Modells herangezogen.

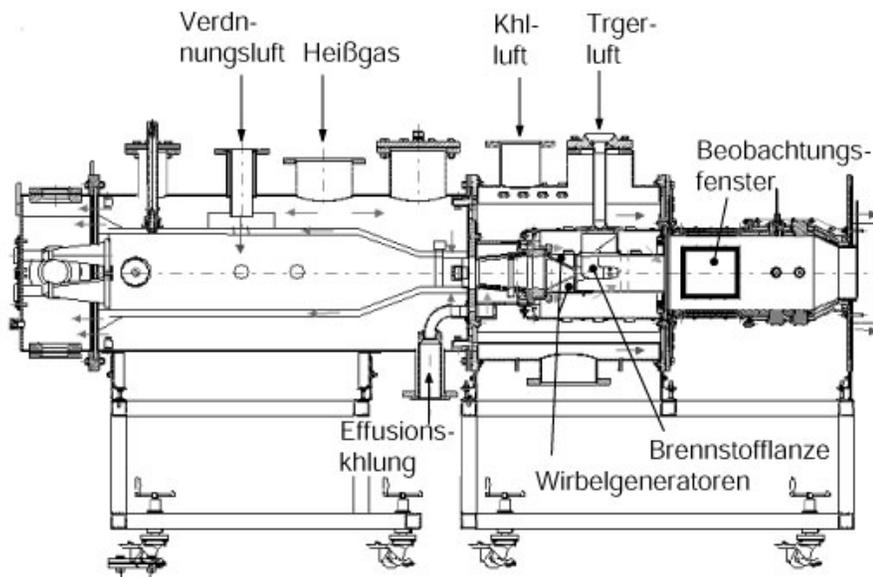
### 6.2.1 Aufbau des atmosphärischen Versuchsstands

Abbildung 6.3 zeigt den Aufbau des atmosphärischen Prüfstands. Am linken Ende lassen sich die beiden trichterförmigen Brenner der ersten Brennstufe erkennen. Im Anschluss daran befindet sich eine Mischstrecke, in der die Verdünnung der heißen Abgase aus der ersten Brennstufe mit Frischgas stattfindet, um das Temperaturniveau an die realen Eintrittstemperaturen des SEV-Brenners anzugleichen. Zur Kühlung der SEV-Brennerwände sind in diese zahlreiche kleine Löcher eingebracht, durch die ein Strom von Effusionskühlluft in den Brenner eintritt und die Brennerwände durch einen Kühlluftfilm von der Hauptströmung isoliert. Vier Wirbelgeneratoren im SEV-Brenner erzeugen die für eine Durchmischung über den gesamten Brennerquerschnitt erforderlichen großskaligen axialen Wirbelstrukturen. Unmittelbar im Anschluss an die Wirbelgeneratoren lässt sich in der Abbildung die Brennstofflanze erkennen, über die der Brennstoff quer zur Hauptströmung eingedüst wird. Die zur Abschirmung des Brennstoffs vor der heißen Luft und zur Erhöhung des Strahlimpulses erforderliche Trägerluft wird über den über der Lanze befindlichen Anschluss dem Versuchsstand zugeführt.

### 6.2.2 Definition der Vergleichsgrößen

Abbildung 6.4 zeigt den typischen Verlauf der Wärmefreisetzung auf der Brennerachse. Die Flammposition bestimmt sich über den Ort maximaler Wärmefreisetzung. Während die Wärmefreisetzung bei den CFD-Studien Teil der Lösung ist, wird bei den experimentellen Daten von einem linearen Zusammenhang zwischen dem OH-Eigenleuchten und der Wärmefreisetzung ausgegangen, so dass die Flammposition über den Ort maximaler OH-Intensität bestimmt werden kann. Zur Ermittlung der Flammdicke ist der Bereich auszumessen, in dem die Wärmefreisetzung einen Wert größer als 3 % der maximalen Wärmefreisetzung einnimmt.

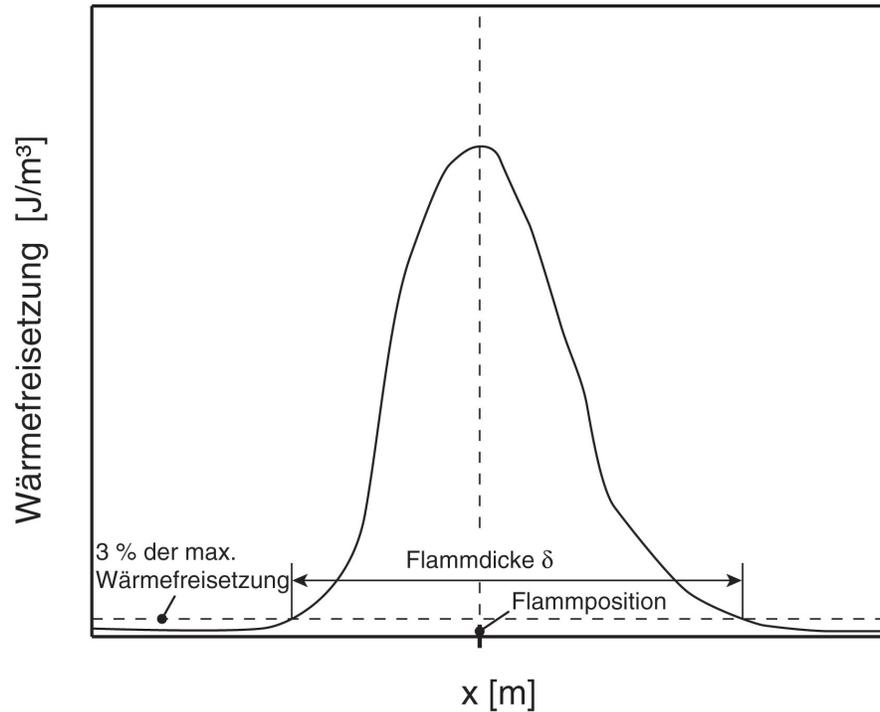
Da für die Auswertung der CFD-Simulationen zahlreiche Post-



**Abbildung 6.3:** Aufbau des SEV Teststands bei ALSTOM in Baden-Dättwil für die Durchführung atmosphärischer Versuche.

Prozessing Methoden zur Verfügung stehen, lassen sich hieraus Flammpositionen und Flammstärken einfach und exakt bestimmen. Hingegen ist die Ermittlung der Größen aus den aufgenommenen Flammbildern einigen Unsicherheiten unterworfen. Zum einen stehen für die Auswertungen nur Flammbilder zur Verfügung, die unter einem unbekanntem Winkel zur vertikalen Brennersymmetrieebene aufgenommen wurden, wodurch die Flamme verzerrt abgebildet wird. Ferner treten besonders bei sehr niedrigen bzw. sehr hohen Vorheiztemperaturen Zustände auf, bei denen die Flamme aufgrund des begrenzten optischen Zugangs nicht komplett erfasst werden kann. Eine zuverlässige Bestimmung der Flammstärke kann daher nur für eine sehr begrenzte Anzahl Betriebspunkte durchgeführt werden.

Eine sichere Bestimmung der Flammposition sowie Flammstärke mit Hilfe der CFD-Simulationen lässt sich nur bei ausreichend genauer Abbildung des Strömungs- und des Mischungsfeldes realisieren. Da die Messung von Mischungsfeldern mit einem hohen Aufwand verbunden ist, existieren von der heißen Strömung nur fotografische Flammaufnahmen. Experimentell ermittelte Mischungskenngrößen

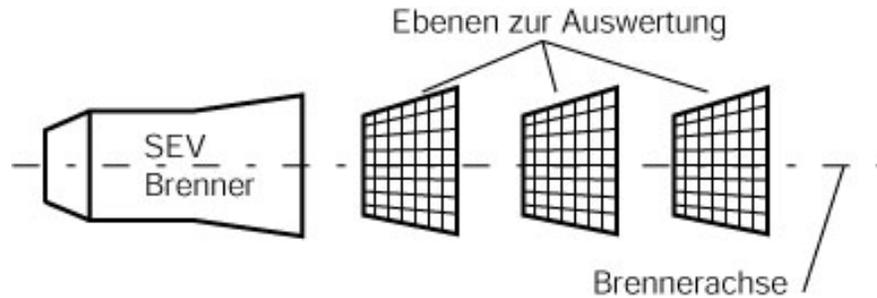


**Abbildung 6.4:** Definition der Vergleichsgrößen anhand des Verlaufs der Wärmefreisetzung entlang der Brennerachse.

stehen ausschließlich aus Wasserkanalversuchen zur Verfügung. Diese wurden unter Beibehalt des Impulsverhältnisses durchgeführt. Für einen Vergleich der Mischungsfelder aus CFD und Experiment wird die Ungemischtheit  $\Theta_F$  als Kenngröße eingeführt:

$$\Theta_F = \frac{\widehat{f_F'^2}}{\widehat{f_F}(1 - \widehat{f_F})} \quad (6.1)$$

Die Kenngröße  $\Theta_F$  beschreibt die Ungemischtheit des Brennstoffs auf einer zur Brennerachse senkrecht stehenden Fläche. Nimmt die Ungemischtheit den Wert  $\Theta_F = 0$  an, so liegen Brennstoff und Heißgas perfekt durchmischt vor. Im Falle perfekter Ungemischtheit, z.B. in der Nähe des Injektors, stellt sich hingegen  $\Theta_F = 1$  ein. Zur Unterscheidung von der sonst in dieser Arbeit üblichen zeitlichen bzw. Ensemblemittelung sind die mittleren Werte nicht durch einen geraden



**Abbildung 6.5:** Auswertung der Ungemischtheit entlang der Brennerachse.

( $\bar{\quad}$ ), sondern durch einen dachförmigen ( $\widehat{\quad}$ ) Überstrich gekennzeichnet.

Anhand der in Abb. 6.5 gezeigten Skizze soll das Verfahren zur Bestimmung der Ungemischtheit  $\Theta_F$  erläutert werden. Eine senkrecht zur Brennerachse stehende Fläche wird in  $N$  gleichmäßig große Teilflächen unterteilt. Anschließend lässt sich für die Gesamtfläche aus den Werten  $f_F^{(i)}$  der Teilflächen der Mittelwert  $\widehat{f}_F$ :

$$\widehat{f}_F = \frac{1}{N} \sum f_F^{(i)} \quad (6.2)$$

und die Varianz  $\widehat{f_F'^2}$ :

$$\widehat{f_F'^2} = \frac{1}{N-1} \sum \left( f_F^{(i)} - \widehat{f}_F \right)^2 \quad (6.3)$$

des Mischungsbruches bestimmen.

Es ist an dieser Stelle anzumerken, dass die Kenngröße  $\Theta_F$  nur zur Beschreibung der Mischung auf den Makroskalen dient und keine Aussagen über den Mischungsfortschritt auf den Mikroskalen zulässt.

### 6.2.3 Vergleich der Ungemischtheit

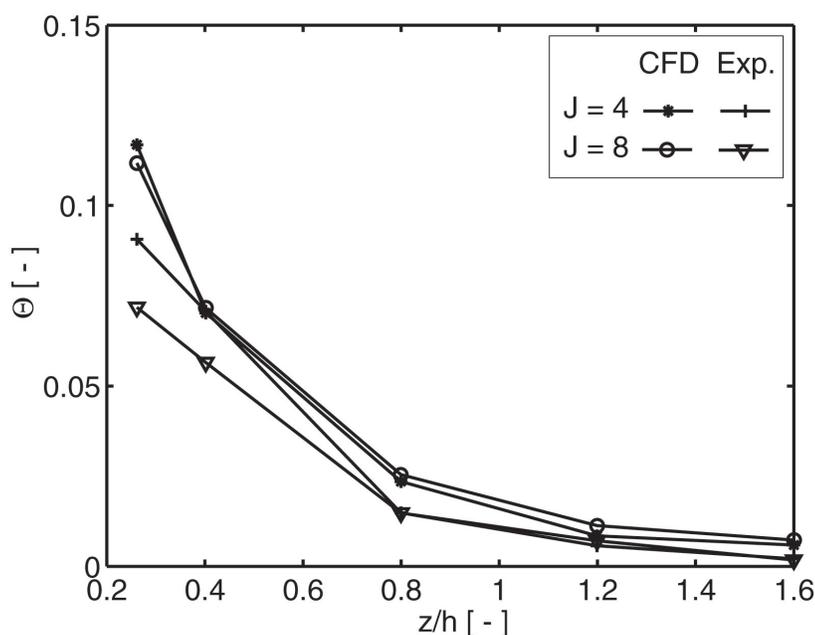
Abbildung 6.6 zeigt die mit einer CFD-Studie bestimmten Ungemischtheiten  $\Theta_F$  im Vergleich zu den Ergebnissen aus dem Wasserkanalversuch als Funktion der mit der Brennerhöhe  $h$  normierten Koordinate  $z$ . Diese verläuft in axialer Richtung und besitzt ihren Nullpunkt am Injektor der Brennstofflanze und den Wert  $z/h = 1,6$  am Brenneraustritt. Die Untersuchungen wurden für zwei verschiedene Impulsverhältnisse  $J$  durchgeführt, wobei zu deren Bestimmung die Impulsströme des Brennstoffs und der Trägerluft zusammengefasst werden, so dass sich

$$J = \frac{\dot{m}_F u_F + \dot{m}_T u_T}{A_F + A_T} \frac{A_H}{\dot{m}_H u_H} \quad (6.4)$$

als Definition für  $J$  ergibt. Dabei entspricht  $\dot{m}$  dem jeweiligen Massenstrom,  $u$  der Eintrittsgeschwindigkeit und  $A$  der Eintrittsfläche. Die Indexes F, C bzw. H kennzeichnen den Brennstoff- (Fuel), Trägerluft- (Carrier Air) bzw. Heißgasstrom (Hot gas).

Wie aus den in Abb. 6.6 gezeigten Verläufen der Ungemischtheit ersichtlich, findet die Durchmischung von Brennstoff und Hauptströmung innerhalb einer sehr kurzen Strecke statt. Dies wird im Wesentlichen durch den Einsatz von Wirbelgeneratoren erreicht, die durch die Bildung großskaliger Wirbelstrukturen für eine gute räumliche Verteilung des Brennstoffs sorgen. Ferner trägt die hohe Turbulenzintensität mit  $TI \approx 20\%$  zu einer raschen Durchmischung bei.

Anhand des Diagramms in Abb. 6.6 lässt sich eine gute Übereinstimmung der numerischen mit den experimentellen Daten feststellen. Nur im unmittelbaren Nahfeld des Injektors  $z/h \approx 0,2$  liefert die CFD-Rechnung signifikant höhere Werte für die Ungemischtheit. Bis zum Austritt in die Brennkammer hat sich die Ungemischtheit bereits auf einen geringen Wert reduziert. Da die absoluten Abweichungen ab  $z/h = 1,2$  nur noch sehr gering sind, kann in dem für die Verbrennung signifikanten Bereich von einer ausreichend genauen nu-



**Abbildung 6.6:** Vergleich der experimentell und numerisch ermittelten Ungemischtheit für verschiedene Impulsverhältnisse.

merischen Bestimmung der Mischung ausgegangen werden. Die durch die CFD-Rechnung tendenziell zu niedrig bestimmten Werte der Ungemischtheit lassen auf eine zu niedrige Turbulenzintensität in der Simulation schließen. Detaillierte Untersuchungen der Strömungsfelder bestätigen diese Annahme. Die numerisch bestimmten Turbulenzintensitäten liegen etwa 2 - 3 Prozentpunkte unter den im Wasserkanal gemessenen.

Allerdings muss beachtet werden, dass die Experimente im Gegensatz zu den Berechnungen mit Wasser durchgeführt wurden. Als charakteristische Ähnlichkeitskenngröße zwischen Experiment und Simulation diene dabei das Impulsverhältnis  $J$ , so dass andere Ähnlichkeitskennzahlen, wie z.B. die Reynoldszahl der einzelnen Ströme, nicht konstant gehalten werden können.

#### 6.2.4 Vergleich der Flammpositionen

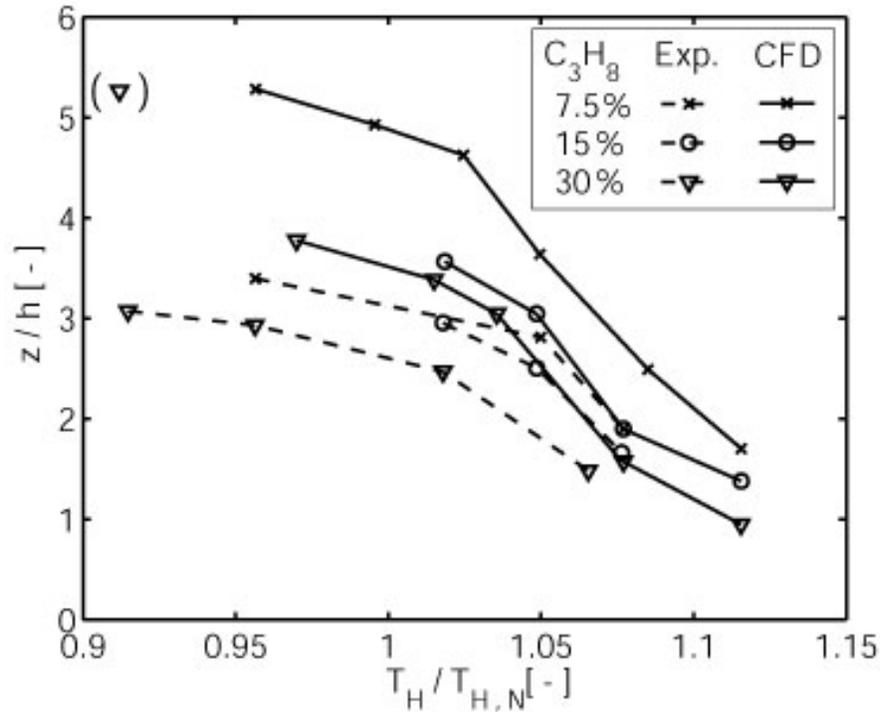
Bei der Entwicklung neuer Brenner muss die genaue Berechnung der Flammposition zur Beurteilung verschiedener Brennervarianten möglich sein. Durch geeignete Wahl der Randbedingungen, wie geometrische Abmessungen, mittlere Geschwindigkeiten, Durchmischungsgrad etc. ist die Flammposition so einzustellen, dass die Flamme stabil in der Brennkammer brennt. Flammrückschläge in die Mischstrecke sind ebenso zu vermeiden, wie in unmittelbarer Nähe des Brenneraustritts positionierte Flammen, da diese schnell zu einer Überhitzung und anschließenden Beschädigung des Brenners führen. Ein Abschwimmen der Flamme kann hingegen zu Schäden an stromab gelegenen Bauteilen führen und muss daher ebenso vermieden werden.

Wie in Kap. 3.1.6 erwähnt, beeinflusst die Zusammensetzung des zum Einsatz kommenden Erdgases die ablaufende Zündkinetik wesentlich. Anteile höherer Kohlenwasserstoffe führen zu einer deutlichen Reduzierung der Zündverzugszeiten und daher auch zu einer Verschiebung der Flamme stromauf. Hingegen kann der Einsatz von Erdgasen mit hohem Inertanteil zur Streckung der Vorreaktionszone führen. Anhand der numerisch ermittelten Flammposition lässt sich daher auch die Einsatzmöglichkeit des Brenners bei verschiedenen Gasqualitäten beurteilen.

Das in der vorliegenden Arbeit entwickelte Modell soll während des Entwicklungsprozesses neuer Brenner als auch bei der Beurteilung der Einsatzmöglichkeit verschiedener Gasqualitäten Anwendung finden. Während in Kap. 4 eine detaillierte Validierung der einzelnen Teilmodelle anhand generischer Konfigurationen durchgeführt wurde, findet im Folgenden ein Vergleich der mit dem Gesamtmodell am SEV-Brenner bestimmten Flammpositionen mit den zur Verfügung stehenden experimentellen Daten statt. Allerdings muss beachtet werden, dass aufgrund der sehr komplexen Geometrie des SEV-Brenners und der Vernachlässigung der Brennerkühlung gewisse Abweichungen zu erwarten sind.

Abbildung 6.7 zeigt die numerisch und experimentell ermittelten Flammpositionen. Zur Normierung der Flammposition  $z$  bzw. der Heißgastemperatur  $T_H$  wird die Brennerhöhe  $h$  resp. die Referenztemperatur  $T_{H,N}$  verwendet. Der in der linken oberen Ecke befindliche Rechenpunkt passt nicht in den sich über weite Bereiche einstellenden Trend; der Vollständigkeit wegen wurde er aber trotzdem in das Diagramm mit aufgenommen. Aufgrund der niedrigen Temperatur  $T_H/T_{H,N} \approx 0,9$  ist zu erwarten, dass der mit der Modellformulierung beschreibbare Prozess der Selbstzündung hier auf die sich einstellende Flammposition nur noch einen untergeordneten Einfluss besitzt. Im Laufe dieses Abschnitts wird hierauf noch näher eingegangen.

Wie erwartet, stabilisiert sich die Flamme bei einer Erhöhung der Heißgastemperatur weiter stromauf. Ferner verschiebt sich die Flamme durch Erhöhung des Propan-Anteils im Brennstoff weiter stromauf. Aus dem Diagramm kann entnommen werden, dass sich die Steigung bzw. die Temperatursensitivität der Flammpositionen mit geringeren Temperaturen verringert. Grundsätzlich lassen sich hierfür zwei verschiedene Mechanismen verantwortlich machen. Zum einen muss erwartet werden, dass im Nahbereich des Eintritts in die Brennkammer die Strömung eine stärkere räumliche Ausbildung (u.a. Rückströmzonen, Strömung in radialer Richtung) als im Fernbereich aufweist und damit ein weiteres Stromaufwandern der Flamme erschwert. Zum anderen ist damit zu rechnen, dass im Bereich niedriger Temperaturen die Flammposition nicht ausschließlich von der Selbstzündkinetik bestimmt wird. Hier spielt bei der Stabilisierung der Flamme noch zusätzlich der Effekt der turbulenten Flammausbreitung eine Rolle. Besonders im Bereich moderater Vorheiztemperaturen ( $T_H/T_{H,N} \leq 0,9$ ) läuft die Kinetik der Selbstzündung relativ langsam ab. Dies erfordert aber für eine vollständige Beschreibung der ablaufenden Prozesse die Berücksichtigung der turbulenten Diffusion von Spezies und Wärme und vor allem deren beschleunigende Auswirkung auf die Reaktionskinetik. Bei ausschließlicher Betrachtung der Selbstzündung ergeben sich daher im Vergleich zum Experiment deutlich weiter stromab stabilisierte Flammen.



**Abbildung 6.7:** Flammposition als Funktion der normierten Heißgas-Temperatur und verschiedener Propan-Anteile.

Die Modellierung dieses Effektes ist aber nicht Teil des formulierten Verbrennungsmodells. Bezüglich einer ausführlichen Diskussion der turbulenten Flammausbreitung sei hier auf das Ende dieses Abschnitts verwiesen.

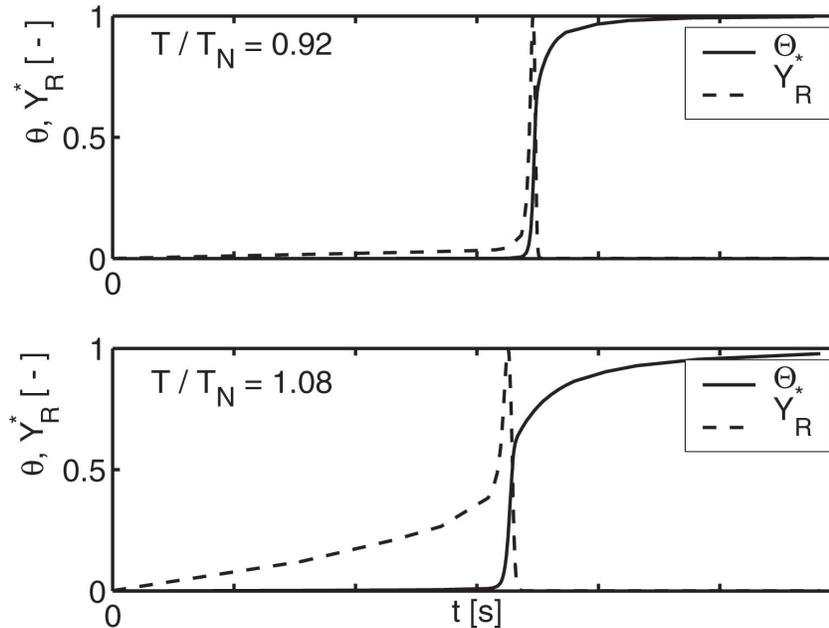
Beim Vergleich der experimentell und numerisch bestimmten Flammpositionen lässt sich bei hohen Temperaturen eine sehr gute Übereinstimmung feststellen. Im Bereich niedriger Temperatur muss hingegen eine größere Abweichung hingenommen werden. Größte Abweichungen sind bei einem Propan-Gehalt des Brennstoffs von  $Y_{C_3H_8} < 0,1$  und einem niedrigen Temperaturniveau festzustellen. Diese Gemische weisen die langsamste Kinetik und damit die längsten Zündverzugszeiten auf.

Für die Abweichungen lassen sich verschiedene Einflussfaktoren verantwortlich machen, die hier zunächst kurz genannt und im An-

schluss teilweise ausführlicher diskutiert werden:

- **Fehlerhaft bestimmte Eintrittstemperatur:** Die Bestimmung der Eintrittstemperatur des Heißgases erfolgt im Experiment über im Brenner angebrachte Thermoelemente. Aufgrund deren Position kann eine Beeinflussung durch Kühlluftströme nicht ausgeschlossen werden, was ggf. zu einer fehlerhaften Erfassung der Temperaturen führt.
- **Zusätzlicher Diffusionskühlluftstrom:** Zur Kühlung der Brennerwände wurde beim SEV-Brenner eine Filmkühlung implementiert, deren Einfluss sich aufgrund der Modellformulierung nicht berücksichtigen lässt.
- **Stromaufpropagieren der Flamme:** Da es sich bei dem formulierten Modell um ein reines Selbstzündmodell handelt, kann der bei niedrigen Temperaturen stärker ins Gewicht fallende Effekt der Flammausbreitung nicht erfasst werden. Es sind daher bei niedrigen Temperaturen Flammpositionen zu erwarten, die zu weit stromab liegen. Eine Diskussion dieses Einflusses findet sich im Anschluss dieser Aufzählung.
- **Reaktionsmechanismus:** Wie bereits in Kap. 3.1 gezeigt, tendiert der verwendete Reaktionsmechanismus (GRI 3.0) im Bereich niedriger Temperaturen zur Vorhersage zu langer Zündverzugszeiten. Die Unsicherheiten bei den Reaktionsmechanismen werden in Kap. 6.2.8 ausführlich diskutiert.
- **Unsicherheiten bei der experimentellen Auswertung:** Wie bereits in Kap. 6.2.2 angesprochen, existieren bei der Auswertung der Flambilder aufgrund geometrischer Verzerrungen und begrenztem optischen Zugangs Unsicherheiten.

Zur Veranschaulichung der beiden konkurrierenden Effekte Selbstzündung und Flammausbreitung sind in Abb. 6.8 die dimensionslosen Temperaturen  $\Theta$  und der normierte Massenbruch eines Radikals  $Y_R^*$  über der Zeitachse aufgetragen. Den Verläufen



**Abbildung 6.8:** Verlauf der dimensionslosen Temperatur  $\Theta$  und des normierten  $\text{CH}_2\text{O}$  Massenbruches für unterschiedliche Starttemperaturen  $T/T_{H,N}$  bei Berechnung einer vorgemischten Flamme.

liegen PREMIX-Rechnungen [KGSM85] zugrunde. PREMIX löst für die Berechnung einer frei propagierenden Flamme die Spezies- und Energieerhaltungsgleichungen und ermöglicht die Berücksichtigung der diffusiven Transportprozesse mit Hilfe detaillierter Modelle. Um ein Abschwimmen der Reaktionszone bei der Berechnung der frei propagierenden Flamme zu verhindern, wird durch Anpassung der Strömungsgeschwindigkeit das Temperaturprofil an einer ausgewählten Koordinate fixiert. Die sich einstellende Geschwindigkeit auf der Frischgasseite entspricht damit der laminaren Flammgeschwindigkeit. Zwar werden die Erhaltungsgleichungen für den stationären Fall gelöst, des besseren Verständnisses wegen sind die Größen aber über der Zeitachse eines sich mit der Strömung bewegenden Beobachters aufgetragen.

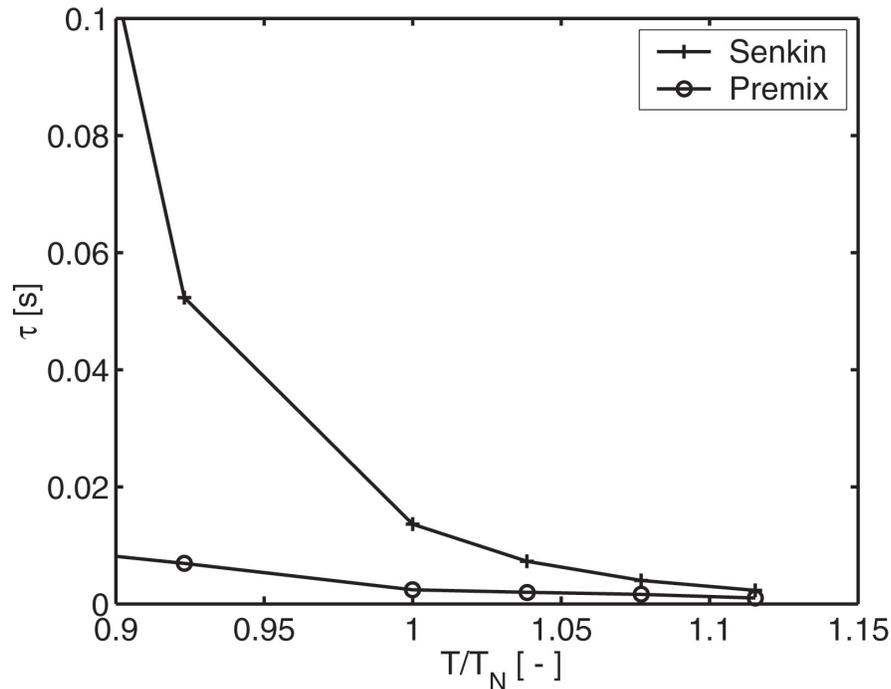
Der Verlauf des normierten Massenbruches  $Y_R^*$  lässt für den Bereich

zwischen Eintritt bis hin zur Flamme bzw. Zone intensiver Wärmefreisetzung bei der Starttemperatur  $T/T_N = 0,92$  keine Vorreaktionen erkennen. Der Massenbruch einer ausgewählten Zwischenspezies zeigt erst unmittelbar vor der Flamme einen Anstieg. Aufgrund diffusiven Transportes der Zwischenprodukte und der Wärme aus der Reaktionszone in die Vorheizzone werden dort die Reaktionen initiiert.

Da bei niedrigen Starttemperaturen die Reaktionen nur sehr langsam ablaufen, würde bei Vernachlässigung der Diffusion das Gemisch erst bedeutend später oder unter Umständen gar nicht zünden.

Hingegen lassen sich bei Wahl einer Starttemperatur von  $T/T_{H,N} = 1,08$  bereits nach Eintritt in den Reaktor Vorreaktionen beobachten. Die im Frischgas enthaltene Energie ist bereits so hoch, dass die Diffusion von Wärme und Spezies aus der Reaktionszone nicht zur Initiierung der Vorreaktionen benötigt wird und sich das Gemisch rasch von selbst entzündet.

Für den gesamten Bereich relevanter Starttemperaturen sind in Abb. 6.9 die Zeiten zusammengefasst, die ein Gemisch vom Eintritt in den Reaktor bis zum Beginn intensiver Wärmefreisetzung benötigt. Die Berechnung dieser Zeiten mit PREMIX für Starttemperaturen, bei denen unmittelbar nach Eintritt in den Reaktor keine Vorreaktionen beobachtet werden können, ist stark von der Wahl der Anfangskoordinate abhängig. Einer Verdopplung der Distanz zwischen Eintritt und dem Fixierungspunkt des Temperaturprofils folgt auch eine Verdopplung der für die Strecke benötigten Zeit. Erst bei ausreichend hohen Starttemperaturen, wenn im gesamten Bereich zwischen Eintritt und Wärmefreisetzungzone Vorreaktionen stattfinden, stellt sich ein von der Eintrittskoordinate unabhängiger Wert für die aufgetragene Zeit ein, welche der Zündverzugszeit entspricht. Aus diesem Grund sind die aufgetragenen Zeiten der 1D laminaren Flamme für Temperaturen unterhalb  $T/T_{H,N} \approx 1,0$  mit Vorbehalt zu betrachten. Trotzdem lassen sich hiermit aber auch für den Niedertemperaturbereich zumindest Abschätzungen der signifikanten chemischen



**Abbildung 6.9:** Zeiten zwischen Beginn der Reaktion und Zündung des Gemisches, bestimmt mit SENKIN und PREMIX Reaktoren.

Zeitmaße durchführen. Ferner sind in das Diagramm die mit PFR-Rechnungen (SENKIN) bestimmten Selbstzündzeiten aufgetragen. Aus dem Vergleich der beiden Zeitmaße lässt sich folgern, dass ab einer Temperatur von  $T/T_{H,N} \approx 1,0$  Flammausbreitung nicht mehr der dominierende Prozess ist. Aufgrund hoher Temperaturen nehmen die chemischen Raten unmittelbar nach Mischung von Brennstoff und Verbrennungsluft so hohe Werte an, dass die bei niedrigen Temperaturen notwendigen Diffusionsprozesse für eine rasche Entzündung nicht weiter erforderlich sind.

Die in Abb. 6.9 gezeigten chemischen Zeitmaße lassen den Schluss zu, dass die Abweichungen der berechneten Flammpositionen zumindest teilweise auf eine Vernachlässigung des Effekts der Flammausbreitung zurückgeführt werden können. Bei den in Abb. 6.8 aufgetragenen Flammpositionen lässt sich für die Temperaturen eine gute Übereinstimmung feststellen, bei denen auch die in Abb. 6.9 gezeig-

ten Zeitmaße ähnliche Werte annehmen und damit Selbstzündung als relevanter Prozess angesehen werden kann.

Dass die Abweichungen im Bereich niedriger Temperaturen u. a. auf die fehlende Beschreibung der Flammausbreitung zurückzuführen sind, belegt auch die Beobachtung, dass die größten Differenzen der Flammpositionen bei Einsatz eines Erdgases mit einem geringen Propan-Anteil auftreten. Reines Methan führt ebenso wie niedrige Temperaturen zu langen Zündverzugszeiten, so dass die Flammausbreitung als Stabilisierungsprozess an Bedeutung gewinnt.

Aufgrund der hohen Reynolds-Zahlen in der untersuchten Brennerströmung wird der Spezies- und Wärmetransport noch durch die Turbulenz intensiviert. Der Einfachheit wegen wurde die Diskussion aber für den Fall einer laminaren Strömung durchgeführt. Ohne Einschränkungen gelten aber die getroffenen Aussagen bezüglich der Flammausbreitung auch für die im vorliegenden Fall auftretende turbulente Flammausbreitung.

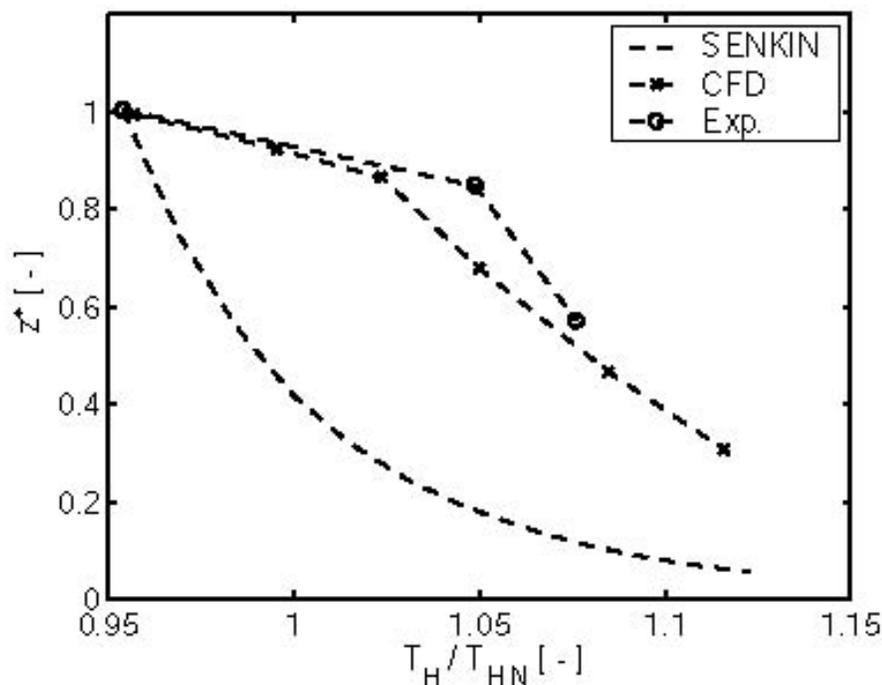
Für die vorgestellten Berechnungen wurde ein Gitter mit ca. 4,5 Millionen Gitterzellen verwendet. Damit betrug die Rechenzeit auf einem Linux-Cluster mit 6 CPUs P4 2,4 GHz ca. 7 Tage. Diese Werte gelten bei Neuinitialisierung aller Felder. Hingegen lässt sich die Rechenzeit deutlich reduzieren, wenn von einer vorhandenen ähnlichen Rechnung aus weiter gerechnet werden kann. Zusätzlich wurden einige Berechnungen mit einem Gitter mit 1 Mio. Gitterzellen durchgeführt. Hierbei betrug die Rechenzeit auf einem Linux-Cluster mit 6 CPUs P4 2,4 GHz weniger als 2 Tage. Hinsichtlich der für die vorgestellten Berechnungen benötigten Rechenzeit muss angemerkt werden, dass diese die Erwartungen des Auftraggebers erfüllt. Ähnliche Rechenzeiten werden auch für die Berechnung der reaktiven Strömung anderer Gasturbinenbrenner benötigt, bei denen eine 2-Schritt-Kinetik in Verbindung mit dem EDC-Modell zur Anwendung kommt.

### 6.2.5 Sensitivität der Flammposition bezüglich mittlerer Zündverzugszeiten

Oftmals werden bei der Auslegung von Brennern Abschätzungen mit Hilfe globaler Größen, wie z.B. die mittlere Mischungstemperatur, mittleres Brennstoff-Luft-Verhältnis usw. durchgeführt, anhand deren sich unter anderem eine charakteristische Zündverzugszeit berechnen lässt. Dies ermöglicht, eine schnelle Abschätzung durchzuführen, ist aber mit zahlreichen Vereinfachungen verbunden. Das gleichzeitige Auftreten von Mischung und chemischer Reaktion, das nicht-lineare Verhalten chemischer Reaktionen und der Einfluss des 3D-Strömungsfeldes auf die Stabilisierung der Flamme lassen sich bei dieser Art von Abschätzungen nicht ausreichend berücksichtigen. Im Folgenden soll daher untersucht werden, inwieweit mit Hilfe globaler Größen (z.B. mittlerer Zündverzugszeit und Strömungsgeschwindigkeit) direkt auf die Flammposition geschlossen werden kann. Verglichen werden dabei Ergebnisse der globalen Abschätzung mit experimentellen Daten und mit 3D-Strömungssimulationen. Diese wurden unter Verwendung der in der vorliegenden Arbeit entwickelten Modelle durchgeführt.

Zum besseren Vergleich sind die numerisch und experimentell ermittelten Flammpositionen in Abb. 6.10 jeweils so normiert, dass sich bei einer dimensionslose Heißgastemperatur von  $T_H/T_{H,N} = 0,954$  der Wert  $z^* = 1$  einstellt. Damit lassen sich die Änderungen der Flammpositionen aufgrund des Temperatureinflusses unabhängig von der absoluten Flammposition vergleichen. Weiterhin sind in das Diagramm noch die normierten Zündverzugszeiten eingezeichnet.

Deutlich ist zu erkennen, dass einfache 0D-Reaktorsimulationen für eine Abschätzung der Veränderung der Flammposition nicht ausreichen, auch wenn gemessene bzw. mit CFD Rechnungen bestimmte Referenzpunkte zur Verfügung stehen. Dies ist auf starke 3D-Effekte in der Strömung zurückzuführen, die sich nicht mit Hilfe einfacher 0D-Simulationen erfassen lassen. Des Weiteren weisen, wie bereits in Kap. 3 gezeigt, chemische Prozesse in der Regel starke



**Abbildung 6.10:** Normierte Flammposition und Zündverzugszeit in Abhängigkeit der Heißgastemperatur bei einem Propananteil von 7,5 %.

Nicht-Linearitäten bezüglich der Temperatur auf, was die Beschreibung der ablaufenden Reaktionen anhand global gemittelter Größen unmöglich macht.

Eine deutlich bessere Übereinstimmung kann in Abb. 6.10 beim Vergleich der experimentell und via 3D-CFD ermittelten Flammpositionen festgestellt werden. 3D-Effekte der Strömung und das gleichzeitige Abläufen von Mischung und Reaktion lassen sich mit CFD-Methoden geeignet erfassen. Insbesondere beim Abgleich mit experimentellen Referenzpunkten ergibt sich bei der Bestimmung der Flammpositionen eine hohe Zuverlässigkeit des entwickelten Modells.

### 6.2.6 Flammdicken

Abbildung 6.11 zeigt die sich für unterschiedliche Flammpositionen einstellenden Flammdicken. Wie bereits erwähnt, lassen sich Flamm-

dicken aufgrund des begrenzten optischen Zugangs nur für eine kleine Teilmenge der durchgeführten Experimente bestimmen.

Generell kann festgestellt werden, dass die Flammdicken gut mit den sich einstellenden Flammpositionen korreliert werden können. Die die Flammposition beeinflussenden Parameter wie Propangehalt des Brennstoffs und die Heißgastemperatur weisen bei konstanter Flammposition nur einen nicht differenzierbaren Einfluss aus.

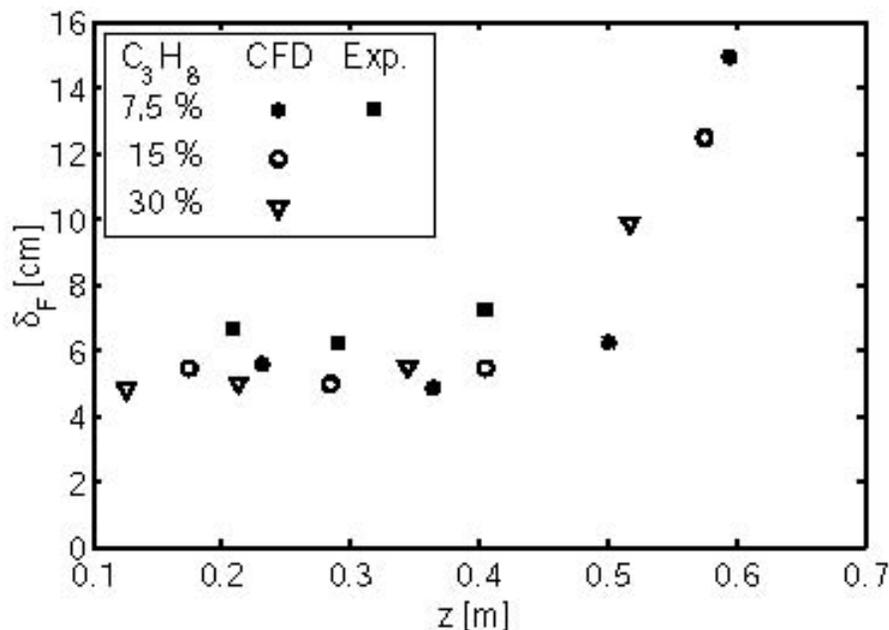
Während sich für den Nahbereich des Brenneraustritts eine nahezu konstante Flammdicke ermitteln lässt, steigt diese mit größerem Abstand vom Brennkammereintritt stark an. Theoretische Überlegungen lassen den Schluss zu, dass eine stärkere turbulente Dispersion der Zündfläche zu dieser Flammaufdickung führt. Die Aufdickung der Zündfläche aufgrund turbulenter Dispersion lässt sich durch eine einfache Abhängigkeit abschätzen:

$$\delta_{Z,turb} \propto \sqrt{2D_T\tau_Z}. \quad (6.5)$$

Aufgrund der bei niedrigen Temperaturen langsameren Kinetik ergeben sich hierbei längere Zündverzugszeiten  $\tau_Z$  und damit auch weiter stromab liegende Flammen. Gleichzeitig zeigt die Auswertung der CFD Rechnungen bei weiter stromab liegenden Flammen eine Zunahme der turbulenten Diffusion  $D_T$ , was gemäß Gl. (6.5) ebenfalls eine Aufdickung der Zündfläche und damit der Flamme hervorruft.

Weiterhin wird die Aufdickung bei geringeren Heißgastemperaturen durch die Zunahme des chemischen Zeitmaßes  $\tau_C$  verstärkt. Beide Effekte gemeinsam erklären die starke Zunahme der Flammdicke bei einer Flammposition von  $z \geq 0,4m$ .

Anhand der in Abb. 6.11 gezeigten Ergebnisse kann eine sehr gute Übereinstimmung zwischen den zur Verfügung stehenden experimentellen und numerischen Daten festgestellt werden. Der starke Anstieg der Flammdicke für Flammpositionen mit  $z \geq 0,4m$ , lässt sich zwar mit den obigen theoretischen Überlegungen erklären, kann aber aufgrund der für diesen Bereich fehlenden experimentellen Daten nur



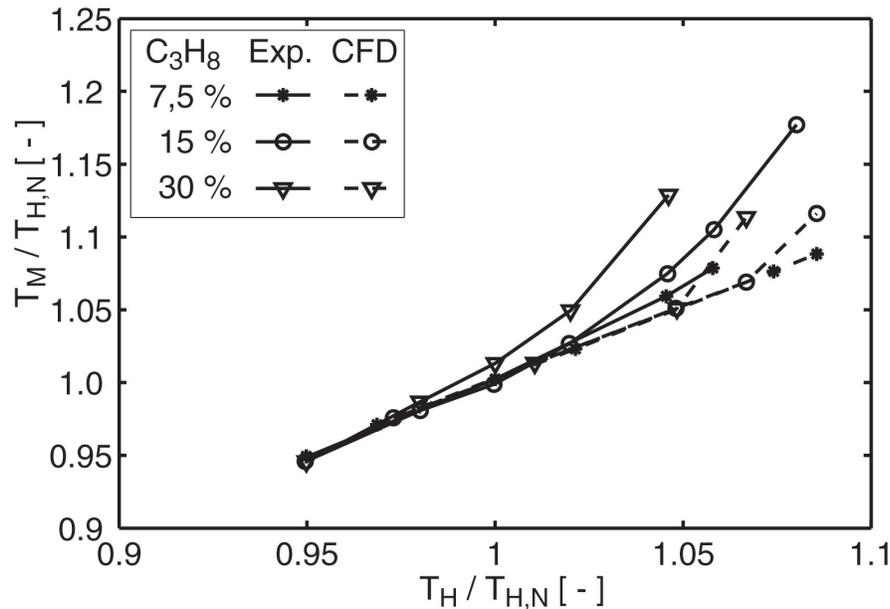
**Abbildung 6.11:** Flammthicken in Abhängigkeit der Flammposition bei atmosphärischen Bedingungen.

unzureichend validiert werden.

### 6.2.7 Materialtemperaturen

Neben der photographischen Erfassung der Flamme wurden an dem beschriebenen Versuchsstand noch Messungen der Brennerwandtemperatur im Bereich des Austritts in die Brennkammer durchgeführt. Allerdings lässt sich mit dieser Methode nur eine Validierung für den Temperaturbereich des Heißgases durchführen, bei dem sich die Flamme in der Nähe des Brenneraustritts stabilisiert. Für alle anderen Konfigurationen kann nur eine Beeinflussung der Materialtemperatur durch die Heißgastemperatur erwartet werden.

Abbildung 6.12 zeigt die experimentell und numerisch ermittelten Materialtemperaturen in normierter Form. Neben der Heißgastemperatur  $T_H$  wird auch die Materialtemperatur  $T_M$  mit der Temperatur  $T_{H,N}$  normiert. Stabilisiert sich die Flamme in der Nähe des Brenneraustritts, so lässt sich dies dadurch feststellen, dass die Ma-



**Abbildung 6.12:** Normierte Materialtemperaturen der Brennerwand am Austritt in die Brennkammer.

materialtemperatur von der Geraden abweicht.

Wie aus den Kenntnissen der Reaktionskinetik zu erwarten, findet bei konstanter Heißgastemperatur durch Erhöhung des Propan-Anteils eine Verschiebung der Flamme stromauf statt. Daher kann erwartet werden, dass mit steigendem Propan-Anteil die Materialtemperaturen bei immer niedrigeren Heißgastemperaturen  $T_H/T_{H,N}$  von der Geraden  $T_M/T_{H,N} = T_H/T_{H,N}$  abweichen. Dieser Trend lässt sich sowohl bei den experimentell als auch bei den numerisch bestimmten Daten erkennen. Generell lässt sich aber feststellen, dass sich die Abweichung von der Geraden bei den experimentell ermittelten Materialtemperaturen früher als bei den Daten aus den CFD-Rechnungen einstellt. Dieses Verhalten ist konsistent mit dem in Kap. 6.2.4 gezeigten Vergleich der Flammpositionen, bei dem CFD-Rechnungen tendenziell eine Stabilisierung der Flamme stromab der experimentell ermittelten Flammposition voraussagen. Bezüglich der Diskussion der Ergebnisse sei daher auf das Kap. 6.2.4 verwiesen.

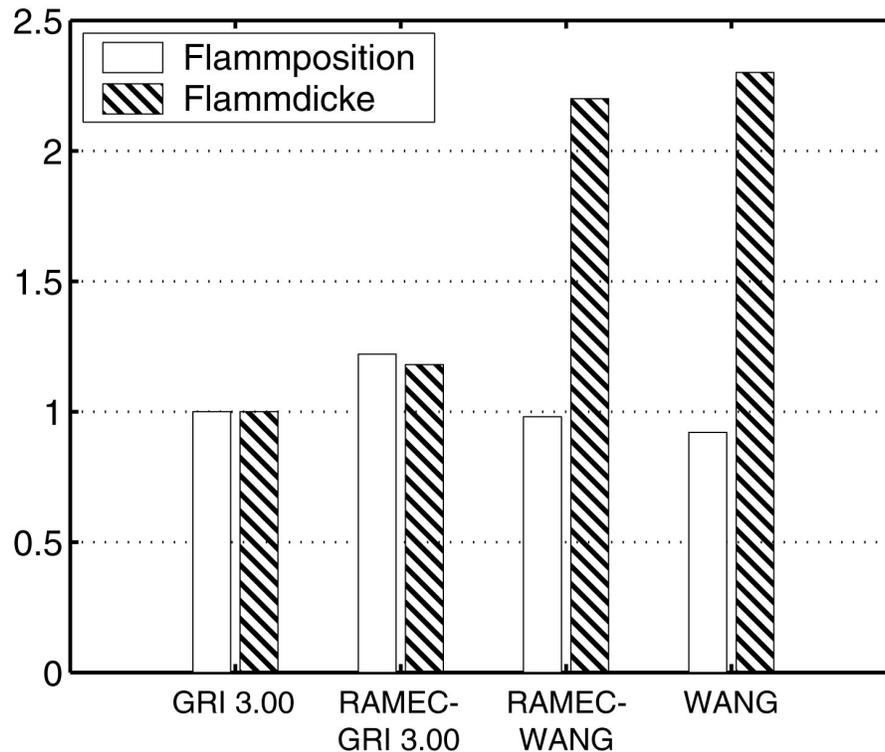
### 6.2.8 Einfluss der Reaktionsmechanismen

Wie bereits in Kap. 3.1.5, Abb. 3.8 gezeigt, existieren hinsichtlich der bei der Zündung ablaufenden Reaktionen große Unsicherheiten. Besonders im Niedertemperaturbereich treten zwischen den mit verschiedenen Reaktionsmechanismen bestimmten Zündverzugszeiten große Abweichungen auf. Untersuchungen mit einfachen Plug-Flow-Reaktoren (vergl. Kap. 3.1.5) zeigten, dass die Zündverzugszeiten besonders im Niedertemperaturbereich stark vom eingesetzten Reaktionsmechanismus abhängen. Aus diesem Grunde ist auch bei CFD-Simulationen, je nach verwendetem Reaktionsmechanismus, mit einer Verschiebung der Flammposition zu rechnen.

Abbildung 6.13 und 6.14 zeigt die sich mit verschiedenen Reaktionsmechanismen ergebenden Flammpositionen und Flammdicken für atmosphärische bzw. Maschinendrucke. Da besonders bei der Beschreibung der Oxidation höherer Kohlenwasserstoffe, wie z.B. Propan, zwischen den Reaktionsmechanismen große Unterschiede festgestellt werden können, liegen den Diagrammen Rechnungen mit einem Propan-Anteil im Brennstoff von 30 % zugrunde. Als Referenzdaten finden jeweils die mit dem GRI 3.0 Reaktionsmechanismus bestimmten Ergebnisse Verwendung.

In beiden Diagrammen zeigt sich für die Flammpositionen die anhand Abb. 3.8 erwartete Abhängigkeit vom verwendetem Reaktionsmechanismus. Während bei den für atmosphärische Bedingungen berechneten Flammpositionen im Vergleich zum GRI 3.0 nur kleinere Abweichungen festzustellen sind (-8 % bis +22 %), fallen diese bei Maschinendruck deutlich höher (+23 % bis +43 %) aus.

Die größten Abweichungen der Flammpositionen ergeben sich bei Einsatz des RAMEC-GRI 3.0 Mechanismus. Dieser Mechanismus basiert auf dem GRI 3.0 Reaktionsschema und wurde um einige Reaktionen aus dem RAMEC Mechanismus erweitert [NBUG<sup>+</sup>03]. Wie bereits in Abb. 3.8 gezeigt, liefert der RAMEC Mechanismus ab einer Temperatur von  $T \approx 1200K$  unter erhöhtem Druck die längsten

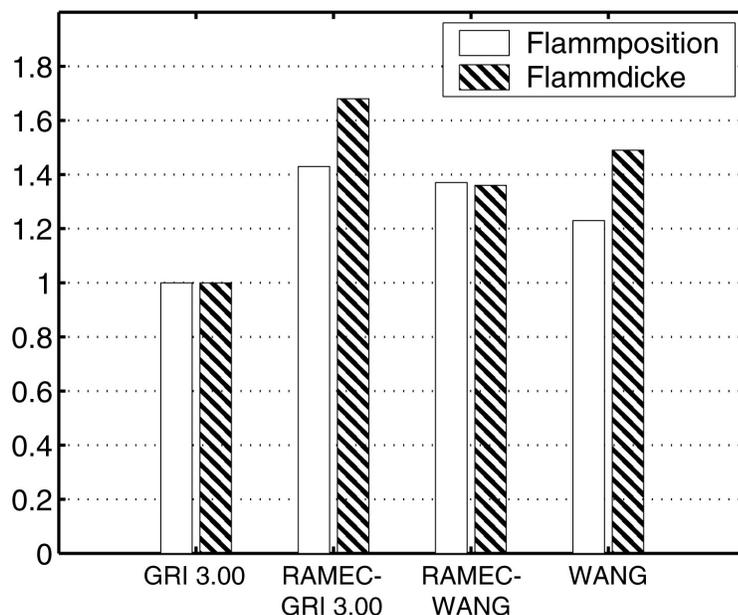


**Abbildung 6.13:** Einfluss des verwendeten Reaktionsmechanismus auf die Position und Dicke der Flamme bei atmosphärischen Bedingungen und einem Propan-Anteil des Brennstoffs von 30 %.

Zündverzugszeiten.

Ferner zeigen die Abbildungen 6.13 und 6.14, dass die mit den beiden Reaktionsmechanismen RAMEC-WANG und WANG ermittelte Flammposition bei Maschinendruck deutlich geringer von der des Referenzmechanismus GRI 3.0 abweicht, als dies bei atmosphärischen Bedingungen der Fall ist.

Auch bezüglich der Flammstärken lässt sich eine große Sensitivität bezüglich des verwendeten Reaktionsmechanismus feststellen. Insbesondere bei den beiden Mechanismen RAMEC-WANG und WANG lassen sich im Vergleich zu den anderen beiden Mechanismen bei sonst nahezu gleichen Flammpositionen mehr als doppelt so dicke Flammen feststellen. Dieser Trend kann aber bei Simulationen unter



**Abbildung 6.14:** Einfluss des verwendeten Reaktionsmechanismus auf die Position und Dicke der Flamme bei Maschinendruck und einem Propan-Anteil des Brennstoffs von 30 %.

Maschinendruck nicht beobachtet werden.

Ein Vergleich zeigt, dass bei Verwendung des WANG-Mechanismus sich unter atmosphärischen Bedingungen bezüglich der Flammposition der geringste Unterschied zwischen den experimentellen Daten und den Ergebnissen der CFD-Simulation ergibt. Hingegen werden mit dem GRI 3.0 Mechanismus bei Berechnungen unter Maschinendruck die besten Übereinstimmungen erreicht.

## 7 Zusammenfassung

Ziel der vorliegenden Arbeit war die Entwicklung eines Modells zur Berechnung der reaktiven Strömung in gasturbinentypischen Brennern, bei denen es aufgrund hoher Brennereintrittstemperaturen oder Anteilen höherer Kohlenwasserstoffe zu einer Selbstzündung des Brennstoff-Luft-Gemisches kommt. Hohe Temperaturen der Frischluft treten zum einen bei mehrstufigen Brennerkonzepten (siehe Gasturbine ALSTOM GT 24/26) als auch bei regenerativ betriebenen Feuerungsanlagen (z.B. Hochöfen) auf. Teilweise bedingen auch hohe Verdichtungsverhältnisse Brennereintrittstemperaturen oberhalb der Selbstzündtemperatur. Weiterhin sind die beschriebenen Brennersysteme durch das Auftreten turbulenter Strömungsformen gekennzeichnet, da sich hiermit hohe Leistungsdichten erreichen lassen.

Die bei der Berechnung zu beschreibenden Phänomene legten daher eine Unterteilung der Arbeit in die folgenden Abschnitte nahe:

- Turbulenz-Chemie-Interaktionen
- Selbstzündung
- Kopplung von Zündung und Wärmefreisetzung
- Wärmefreisetzung

Starke Fluktuationen (z.B. der Mischungsbrüche, Temperatur etc.) sind charakteristisch für die in den zu beschreibenden Brennersystemen auftretenden turbulenten Strömungen. Da im Allgemeinen Reaktionsraten starke Nichtlinearitäten bezüglich der eingehenden Größen aufweisen, führt eine Berechnung mittlerer Reaktionsraten auf Basis gemittelter Einflussgrößen zu signifikanten Fehlern. Dies konnte für den vorliegenden Fall auch anhand eines einfachen Beispiels nachgewiesen werden. Sinnvolle Reaktionsraten lassen sich nur bei Berücksichtigung der Verteilungsfunktion (PDF) der eingehenden Größen berechnen.

Mit Hilfe eines neu entwickelten PDF-Modells können im Gegensatz zu den sonst üblichen presumed PDF-Ansätzen mit angenommener PDF auch Korrelationen zwischen den einzelnen Einflussgrößen berücksichtigt werden. Im vorliegenden Fall treten drei Gasströme unterschiedlicher Temperatur in den Brenner ein, für deren Mischungsbrüche Transportgleichungen zu lösen sind. Die zwischen jeweils zwei Mischungsbrüchen auftretenden Korrelationen ergeben sich nicht wie bei der 2-Strom Mischung über Zwangsbedingungen, sondern stellen sich entsprechend den Mischungsverhältnissen ein.

Der in der vorliegenden Arbeit eingesetzte Ansatz bedient sich bei der PDF keiner analytischen Funktion, sondern der Approximation der PDF durch eine **j**oint **P**resumed **D**iscrete **D**istribution, kurz jPDD (ähnlich einem Ensemble masseloser Partikel). Verschiedene Verfahren zur Generierung dieser jPDDs wurden entwickelt und anhand einer LES sowie einer transportierten Mischungsbruch-PDF detailliert validiert. Zwei verschiedene Wege werden für die Erzeugung der Verteilungen aufgezeigt. Zum einen lassen sich diese auf Basis bekannter Verteilungen (z.B. korrelierte Gauß-Verteilung) und einer anschließenden Korrektur generieren; zum anderen können die aus der Modellierung der molekularen Mischung bei PDF-Transportgleichungen bekannten Mischungsmodelle zur Anwendung kommen. Letztere eignen sich, wie die Validierungsrechnungen gezeigt haben, besonders für die Beschreibung von Mischungsbruch-PDFs.

Ferner konnte anhand der generierten Verteilungen der Einfluss der Korrelationen zwischen dem Heißgas- und dem Brennstoffstrom quantifiziert werden. So ergeben sich bei ausgewählten Randbedingungen durch Vernachlässigung der Korrelation - also bei Annahme statistischer Unabhängigkeit - Fehler im Bereich von bis zu 50%. Gleichzeitig konnte gezeigt werden, dass höhere statistische Momente (z.B. die Schiefe) ebenfalls einen signifikanten Einfluss auf die berechneten Reaktionsraten aufweisen. Durch geeignete Auswahl des Verfahrens zur Generierung der Verteilung ist es aber möglich, höhere statistische Momente zumindest näherungsweise implizit zu berücksichtigen, ohne eine PDF-Transportgleichung oder eine Trans-

portgleichung für höhere Momente lösen zu müssen. Aufgrund der Annahme einer sinnvollen Verteilungsform lassen sich die für die CFD-Simulation benötigten mittleren Raten in einem Pre-Prozessing Schritt berechnen und in einer Tabelle zur Verfügung stellen.

Bei der Entwicklung des Zünd- und Wärmefreisetzungsmodells ließen sich mit Hilfe von Plug-Flow-Reaktorsimulationen grundlegende Kenntnisse der chemischen Vorgänge während der Induktions- und Wärmefreisetzungsphase gewinnen. Die Konzentration der gebildeten Radikale dominiert die bei der Selbstzündung ablaufenden chemischen Prozesse. Diese werden bei ausreichend hoher Starttemperatur sofort nach Zusammentreffen von Brennstoff und Sauerstoff gebildet. Bei Erreichen einer kritischen Radikalkonzentration entzündet sich das Gemisch. Während die Induktionsphase durch eine nahezu konstante Temperatur gekennzeichnet ist, treten bei der Zündung hohe Wärmefreisetzungsraten auf.

Das entwickelte Modell bedient sich bei der Beschreibung der Selbstzündung der Zwischenspezies  $\text{CH}_2\text{O}$ . Diese Spezies wird während der gesamten Induktionsphase gebildet, reagiert aber nur in geringem Maß zu weiteren Spezies auf, so dass bis hin zur Zündung eine ansteigende Konzentration beobachtet werden kann. Über den Quotienten aus aktueller und zündkritischer  $\text{CH}_2\text{O}$ -Konzentration lässt sich die momentane Reaktivität definieren. Mit Hilfe einer einzigen zusätzlichen Transportgleichung für den  $\text{CH}_2\text{O}$  Massenbruch können daher die lokale Reaktivität und damit der Ort der Zündung mit einer CFD-Simulation bestimmt werden.

Im Gegensatz zur sonst auch bei der CFD-Simulation üblichen Berechnung der Reaktionsraten über den Arrhenius-Ansatz werden die Bildungsraten des Radikalenpoolrepräsentanten  $\text{CH}_2\text{O}$  anhand detaillierter Reaktionsmechanismen bestimmt und in einer Tabelle als Funktion der inerten Zusammensetzung und des  $\text{CH}_2\text{O}$ -Massenbruchs für die im Anschluss durchgeführte CFD abgespeichert. Dies ermöglicht die Berücksichtigung der genauen Zusammensetzung von Erdgas und Verbrennungsluft, ohne dass während der

CFD-Simulation für alle beteiligten Spezies Transportgleichungen zu lösen und aufwändige Reaktionsmechanismen anzuwenden sind.

Ferner konnte anhand eines Reaktornetzwerkes gezeigt werden, dass sich die Reaktivität auch bei gleichzeitigem Ablauf von Mischung und Reaktion mit der Spezies  $\text{CH}_2\text{O}$  genau beschreiben lässt. Hingegen weisen einfache lineare Selbstzündmodelle dabei große Defizite auf.

Die Kopplung der Wärmefreisetzung an die vorangehende Induktionsphase wird mit Hilfe eines einfachen PDF-Ansatzes realisiert, welcher die Berücksichtigung der in turbulenter Strömung auftretenden Dispersion der Zündfläche ermöglicht.

Zur Modellierung der an die Induktionsphase anschließenden Wärmefreisetzung konnte die Temperatur als geeignete Fortschrittsvariable identifiziert werden. Die Raten der Wärmefreisetzung lassen sich ebenfalls anhand der durchgeführten Reaktorsimulationen bestimmen und in einer Tabelle ablegen.

Mit der Implementierung der einzelnen Teilmodelle in den Strömungslöser FLUENT konnte die Validierung anhand der zur Verfügung stehenden experimentellen Daten am SEV-Brenner komplettiert werden. Vergleichsrechnungen für zahlreiche Betriebspunkte zeigten, dass das Modell die Vorhersage der Flammposition sowie Flammdicke mit ausreichender Genauigkeit ermöglicht. Ungenauigkeiten ergaben sich allerdings im Bereich niedriger Heißgastemperaturen, da hier die Flammausbreitung bei der Stabilisierung der Flamme eine zunehmende Rolle spielt. Die Modellierung dieses Effektes ist aber nicht Teil der entwickelten Modelle. Gleichzeitig konnte festgestellt werden, dass sich je nach verwendetem Reaktionsmechanismus teilweise deutliche Unterschiede bei der Bestimmung von Flammposition und Flammdicke ergeben. Hinsichtlich der bei niedrigen Selbstzündtemperaturen ablaufenden Reaktionen scheinen die vorhandenen Reaktionsmechanismen noch einige Differenzen aufzuweisen.

Durch den modularen Charakter der gewählten Formulierungen las-

sen sich die einzelnen Teilmodelle auch leicht auf andere Anwendungsgebiete übertragen.

Mögliche weitere Einsatzgebiete des Distributionsmodells sind alle Prozesse in turbulenter Strömung, zu deren statistischen Beschreibung zwei und mehr Variablen notwendig sind und bei denen Korrelationen zwischen den bestimmenden Variablen zu berücksichtigen sind. Exemplarisch soll hier die Berechnung abgehobener Diffusionsflammen auf Basis von Mischungsbruch und skalarer Dissipationsrate, ILDM Methoden mit zwei und mehr Fortschrittsvariablen sowie Modelle zur Beschreibung der  $\text{NO}_x$  Bildung und des CO Abbaus genannt werden.

Das gekoppelte Zünd- und Wärmefreisetzungsmodell hingegen lässt sich leicht auf andere Strömungskonfigurationen und Randbedingungen applizieren. Dabei ist vor allem die Modellierung der innermotorischen Verbrennung bei Diesel-Motoren sowie im CAI-Modus (**C**ontrolled **A**uto **I**gnition) betriebenen Otto-Motoren zu nennen. Selbstzündung tritt ferner in der Energietechnik und in Hochöfen bei zahlreichen Brennerkonzepten mit starker interner oder externer Abgasrezirkulation auf.

Insgesamt konnten mit der vorliegenden Arbeit interessante Beiträge für die Modellierung der reaktiven Strömung im Regime der Selbstzündung geleistet werden. Dabei ist auch die Effizienz der formulierten Modelle hervorzuheben, die trotzdem aber eine detaillierte Betrachtung der chemischen Vorgänge und der komplexen Turbulenz-Chemie-Interaktionen in Dreistromsystemen ermöglichen.

## Literatur

- [AA01] AGARWAL, A. ; ASSANIS, D. N.: Multi-dimensional modeling of natural gas auto-ignition using detailed chemical kinetics. In: *Combust. Sci. and Techn.* (2001), S. 162–164
- [AGB04] *Arbeitsgemeinschaft Energiebilanzen*. 2004
- [BBLC95] BARBE, P. ; BATTIN-LECLERC, F. ; CÔME, G. M.: Experimental and modelling study of methane and ethane oxidation between 773 and 1573 K. In: *J. Chim. Phys.* 92 (1995), S. 1666–1692
- [BBTM95] BABUSHOK, V. I. ; BURGESS, D. R. F. ; TSANG, W. ; MIZIOLEK, A. W.: Simulation studies on the effects of flame retardants on combustion processes in a plug reactor. In: *ACS Symposium Series No. 611*, 1995, S. 275–288
- [BCC<sup>+</sup>94] BAULCH, D.L. ; COBOS, C.J. ; COX, R.A. ; FRANK, P. ; HAYMAN, G. ; JUST, T. ; KERR, J.A. ; MURRELLS, T. ; PILLING, M.J. ; TROE, J. ; WALKER, R.W. ; WARNATZ, J.: Evaluated kinetic data for combustion modeling. In: *Combustion and Flame* 98 (1994), S. 59–79
- [BCL88] BRAY, K. N. C. ; CHAMPION, M. ; LIBBY, P. A.: Mean reaction rates in premixed turbulent flames. In: *22nd Symposium on Combustion* The Combustion Institute, 1988, S. 763–769
- [BG03] BAURLE, R. A. ; GIRIMAJI, S. S.: Assumed PDF turbulence-chemistry closure with temperature-composition correlations. In: *Combustion and Flame* 134 (2003), S. 131–148
- [BKR03] DE BRUYN KOPS, S. M. ; RILEY, J. J.: Large-Eddy-Simulation of a reactive scalar mixing layer with Arr-

- henius chemistry. In: *Computers and Mathematics with Applications* 43 (2003), S. 547–569
- [BO03] BRÜGGEMANN, D. ; OBERMEIER, A. *Unsere Energieversorgung Fakten von heute, Perspektiven für morgen.* 2003
- [BP94] BRAY, K. N. C. ; PETERS, N.: Laminar flamelets in turbulent flames. In: LIBBY, P. A. (Hrsg.) ; WILLIAMS, F. A. (Hrsg.): *Turbulent Reactive Flows*, Academic Press, 1994
- [BPI<sup>+</sup>03] BRANDT, M. ; POLIFKE, W. ; IVANCIC, B. ; FLOHR, P. ; PAIKERT, B.: Auto-ignition in a gas turbine burner at elevated temperature. In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2003* ASME, 2003 (2003-GT-38224)
- [BRB90] BRUEL, P. ; ROGG, B. ; BRAY, K. N. C.: On Auto-Ignition and Turbulent Non-Premixed Systems. In: *23rd Symposium (International) on Combustion* The Combustion Institute, 1990
- [Cal03] CALTECH. *CANTERA: Object-oriented software for reacting flow.* Internet: [www.cantera.org](http://www.cantera.org). 2003
- [Che97] CHEN, J.-Y.: Development of Reduced Mechanisms for Numerical Modelling of turbulent combustion. In: *Workshop on "Numerical Aspects of Reduction in Chemical Kinetics"* CERMICS-ENPC. Champus sur Marne, France, 1997
- [CSW01] CORREA, C. ; SCHRAMM, B. ; WARNATZ, J: Use of reduced chemistry models for ignition and combustion in diesel engines. In: *VDI-Berichte 1629* VDI, 2001, S. 257–262
- [DLW99] DAVIS, S. G. ; LAW, C. K. ; WANG, H.: Propene Pyrolysis and Oxidation Kinetics in a Flow Reaktor and

- Laminar Flames. In: *Combustion and Flame* 119 (1999), S. 375–399
- [Dop94] DOPAZO, C.: *Recent developments in PDF methods*. London : Libby, P. A. and Williams, F. A., 1994 (Turbulent Reacting Flows), S. 375–474
- [EDL92] EGOLFOPOULOS, F. N. ; DU, D. X. ; LAW, C. K.: A Comprehensive Study of Methanol Kinetics in Freely-Propagating and Burner-Stabilized Flames, Flow and Static Reactors, and Shock Tubes. In: *Combustion Science and Technology* (1992), S. 33–75
- [EG95] ELAMRAOUI, R. ; GARRÉTON, D.: Modélisation au second ordre de jets turbulents en présence de fortes variations de densité / Electricité de France. 1995 (HE-44/95/014/A). – Forschungsbericht
- [FLU02] *Fluent 6.1 Documentation*. Fluent Inc., Centerra Resource Park, 10 Cavendish Court, Lebanon, NH 03766, 2002
- [GBP02] GHARAIBAH, E. ; BRANDT, M. ; POLIFKE, W.: A numerical model of dispersed two phase flow in aerated stirred vessels based on presumed shape number density functions. In: *German-Japanese Workshop on Multi-Phase Flow* Forschungszentrum Karlsruhe, 2002
- [GCP<sup>+</sup>90] GRIFFITHS, J. F. ; COPPERSTHWAITE, D. ; PHILLIPS, C. H. ; WESTBROOK, C. K. ; PITZ, W. J.: Auto-ignition temperatures of binary mixtures of alkanes in a closed vessel: Comparisons between experimental and numerical predictions. In: *Twenty-Third Symposium on Combustion* The Combustion Institute, 1990
- [GHSW98] GRAF, U. ; HENNING, H.-J. ; STANGE, K. ; WILRICH, P.-T.: *Formeln und Tabellen der angewandten mathematischen Statistik*. 3. Auflage. Springer Verlag, 1998

- [Gir91] GIRIMAJI, S. S.: Assumed  $\beta$ -pdf Model for Turbulent Mixing: Validation and Extension to Multiple Scalar Mixing. In: *Combust. Sci. and Tech.* 78 (1991), S. 177–196
- [GMT01] GOY, C.J. ; MORAN, A.J. ; THOMAS, G.O.: Auto-ignition characteristics of gaseous fuels at representative gas turbine conditions. In: *Proc. of TURBOEXPO 2001, 2001-GT-0051* (2001)
- [Gup00] GUPTA, A.K.: Flame Characteristics and Challenges with High Temperature Air Combustion. In: *2nd International Seminar on High Temperature Combustion in Industrial Furnace*. Stockholm, 2000
- [Gut] GUTHEIL, F. *ALSTOM Power Schweiz, Private Korrespondenz*
- [HB98] H. BI, A. K. A.: Study of Autoignition of Natural Gas in Diesel Environments Using Computational Fluid Dynamics with Detailed Chemical Kinetics. In: *Combustion and Flame* 113 (1998), S. 289–302
- [HBP05] HEINZ, C. ; BRANDT, M. ; POLIFKE, W.: Optimization of Rate Coefficients for Global Reaction Mechanisms using a nested Genetic Algorithm. In: *Proc. of the European Combustion Meeting, 2005*
- [Hei03] HEINZ, S.: *Statistical mechanics of turbulent flows*. Berlin : Springer-Verlag, 2003
- [Hes98] HESSELT, M.: *Simulation der Zündung und Verbrennung in einem Nutzfahrzeug-Dieselmotor*, RWTH Aachen, Diss., 1998
- [HGH99] HE, G. ; GUO, Y. ; HSU, A. T.: The effect of Schmidt Number on turbulent scalar mixing in a jet-in-crossflow. In: *Heat and Mass Transfer* 42 (1999), S. 3727–3738
- [HHBM04] HUANG, J ; HILL, P. G. ; BUSHE, W. K. ; MUNSHI, S. R.: Shock-tube study of methane ignition und

- engine-relevant conditions: experiments and modeling. In: *Combustion and Flame* 136 (2004), Nr. 1-2, S. 25–42
- [Hin00] HINZ, A.: *Numerische Simulation turbulenter Methan-diffusionsflammen mittels Monte Carlo PDF Methoden*, TU Darmstadt, Diss., 2000
- [HKQ77] HALSTEAD, M. P. ; KIRSCH, L. J. ; QUINN, C. P.: The autoignition of hydrocarbon fuels at high temperatures and pressures - Fitting of a mathematical model. In: *Combustion and Flame* 30 (1977), S. 45–60
- [HP03] HASSE, C. ; PETERS, N.: Simulation von Mehrfacheinspritzungen in direkteinspritzende Dieselmotoren mit einem zweidimensionalen Flamelet-Modell. In: *VDI-Berichte Nr. 1750* VDI, 2003
- [IFP<sup>+</sup>04] IVANCIC, B. ; FLOHR, P. ; PAIKERT, B. ; BRANDT, M. ; POLIFKE, W.: Auto-ignition and heat release in a gas turbine burner at elevated temperature. In: *Proceedings of IGTI 04 ASME Turbo Expo* ASME, 2004, S. GT2004–53339
- [Iva] IVANCIC, B. *ALSTOM Power Schweiz, Private Korrespondenz*
- [IZS98] ISHII, T. ; ZHANG, C. ; SUGIYAMA, S.: Numerical Simulations of highly preheated air combustion in an industrial furnace. In: *J. of Energy Resources Technology* 120 (1998), S. 276–284
- [JK72] JOHNSON, N. L. ; KOTZ, S.: *Distributions in statistics: Continuous multivariate distributions*. New York : Wiley, 1972
- [JPMC01] JENNY, P. ; POPE, S. B. ; MURADOGLU, M. ; CAUGHEY, D. A.: A new hybrid algorithm to solve the fully

- jointPDF equation for turbulent reactive flows. In: *Journal of Computational Physics* 172 (2001), S. 841–878
- [KF96] KRUIS, F. E. ; FALK, L.: Mixing and reaction in a tubular jet reactor: a comparison of experiments with a model based on a prescribed PDF. In: *Chemical Engineering Science* 51 (1996), Nr. 10, S. 2439–2448
- [KGSM85] KEE, R. J. ; GRGAR, J. F. ; SMOOKE, M. D. ; MILLER, J. A.: A Fortran program for modelling steady one-dimensional premixed flames. / Sandia National Laboratories. 1985 ( SAND85-8420). – Forschungsbericht
- [KMJ80] KEE, R.J. ; MILLER, J.A. ; JEFFERSON, T. H.: CHEMKIN: A general-purpose problem-independent, transportable Fortran chemical kinetics code package. In: *SANDIA Report* SAND80-8003 (1980)
- [KS01] KIM, K. ; SHIN, K. S.: Shock tube modeling study of the ignition of propane. In: *Bull. Korean Chem. Soc.* 22 (2001), Nr. 3, S. 303–307
- [Lan99] LANDENFELD, Thilo: *Numerische Beschreibung turbulenter Methandiffusionsflammen mit Schließungsansätzen zweiter Ordnung und angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen*, TU-Darmstadt, Diss., 1999
- [LBM<sup>+</sup>02] LILLE, S. ; BLASIAK, W. ; MÖRTBERG, M. ; DOBSKI, T. ; WEIHONG, Y.: Heat flux evaluation in a test furnace equipped with high temperature air combustion (HiTAC) technique. In: *Proceedings of IJPGC 2002* ASME, 2002
- [LKM87] LUTZ, A.E. ; KEE, R.J. ; MILLER, J.A.: SENKIN: A FORTRAN program for predicting homogeneous gas phase chemical kinetics with sensitivity analysis. In: *SANDIA Report* SAND87-8248 (1987)

- [LMP04] LISOCHKIN, Y. A. ; MALAKHOV, K. V. ; POZNYAK, V. I.: Global kinetic parameters for determining the autoignition limits and induction periods for mixtures of methane, ammonia, oxygen and nitrogen. In: *Combustion, Explosion and Shock Waves* 40 (2004), S. 253–257
- [LR98] LIGHTSTONE, M. F. ; RAITHBY, G. D.: A stochastic model of particle dispersion in a turbulent gaseous environment. In: *Combustion and Flame* 113 (1998), S. 424–441
- [LSBS71] LIFSHITZ, A. ; SCHELLER, K. ; BURCAT, A. ; SKINNER, G. B.: Ignition delays in several CH<sub>4</sub>-O<sub>2</sub>-Ar mixtures. In: *Combustion and Flame* 16 (1971), S. 311–321
- [LW55] LIVENGOOD, J. C. ; WU, P. C.: Correlation of autoignition phenomena in internal combustion engines and rapid compression machines. In: *Proc. of the 5th Symposium of Combustion*, 1955, S. 347–356
- [LW00a] LI, S. C. ; WILLIAMS, F. A.: Reaction mechanism for methane ignition. In: *Proc. of ASME TURBOEXPO 2000*, 2000, S. 2000–GT–145
- [LW00b] LIBBY, P. L. ; WILLIAMS, F. A.: A Presumed PDF Analysis of Partially Premixed Turbulent Combustion. In: *Combust. Sci. and Techn.* 161 (2000), S. 351–390
- [Mag89] MAGNUSSEN, B. F.: Modeling of NO<sub>x</sub> and Soot formation by the Eddy Dissipation Concept International Flame Research Foundation, Amsterdam, 1989
- [MB89] MILLER, J. A. ; BOWMANN, C. T.: Mechanism and Modeling of Nitrogen Chemistry in Combustion. In: *Prog. Energy and Combustion Science* 15 (1989), S. 287–338
- [MBP97] MASTORAKOS, E. ; BARITAUD, T. A. ; POINSOT, T. J.: Numerical Simulations of Autoignition in Turbulent Mi-

- xing Flows. In: *Combustion and Flame* 109 (1997), S. 198–223
- [MCBP97] MASTORAKOS, E ; PIRES DA CRUZ, A. ; BARITAUD, T. A. ; POINSOT, T. J.: A model for the effects of mixing on the autoignition of turbulent flows. In: *Combust. Sci. and Tech.* 125 (1997), S. 243–282
- [Mil] MILANI, A.: Mild Combustion techniques applied to regenerative firing in industrial furnaces / Centro Sviluppo Materiali CSM Experimental Station on Combustion. Genova, . – Forschungsbericht
- [MKP90] MAUSS, F. ; KELLER, D. ; PETERS, N.: A lagrangian simulation of flamelet extinction and re-ignition in turbulent jet diffusion flames. In: *Twenty-third Symposium on Combustion* The Combustion Institute, 1990, S. 693–698
- [MP92] MAAS, U ; POPE, S. B.: Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds. In: *Twenty-Fourth Symposium on Combustion* The Combustion Institute, 1992, S. 103–112
- [MPW<sup>+</sup>98] MARINOV, N. M. ; PITZ, W. J. ; WESTBROOK, C. K. ; VINCITORE, A. M. ; CASTALDI, M. J. ; SENKAN, S. M.: Aromatic and Polycyclic Aromatic Hydrocarbon Formation in a Laminar Premixed n-Butane Flame. In: *Combustion and Flame* 114 (1998), S. 192–213
- [MSSO04] MERKER, G. P. ; SCHWARZ, C. ; STIESCH, G. ; OTTO, F.: *Verbrennungsmotoren - Simulation der Verbrennung und Schadstoffbildung*. 2. Auflage. Stuttgart : Teubner Verlag, 2004
- [Mül93] MÜLLER, U. C.: *Reduzierte Reaktionsmechanismen für die Zündung von n-Heptan und iso-Oktan unter motorrelevanten Bedingungen.*, RWTH Aachen, Diss., 1993

- [NBUG<sup>+</sup>03] NAUMANN, C. ; BRAUN-UNKHOFF, M. ; GOOS, E. ; STEIL, U. ; FRANK, P. ; AIGNER, M.: Messung von Zündverzugszeiten in Stoßrohren mit Hilfe der *tailored-interference* Methode unter für Gasturbinen relevanten Bedingungen. In: *VDI Berichte* Bd. 1750 VDI, 2003, S. 365–370
- [NK01] NAGATA, K. ; KOMORI, S.: The difference in turbulent diffusion between active and passive scalars in stable thermal stratification. In: *J. of Fluid Mech.* 430 (2001), S. 361–380
- [OWB01] ORSINO, S. ; WEBER, R. ; BOLLETTINI, U.: Numerical simulation of Combustion of Natural Gas with High-Temperature Air. In: *Combustion Science and Techn.* 170 (2001), S. 1–34
- [PDH99a] PETERSEN, E. L. ; DAVIDSON, D. F. ; HANSON, R. K.: Ignition delay times of Ram accelerator CH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub>/diluent mixtures. In: *J. of Prop. Power* 15 (1999), S. 82–91
- [PDH99b] PETERSEN, E.L. ; DAVIDSON, D.F. ; HANSON, R.K: Kinetics modelling of shock-induced ignition in low-dilution CH<sub>4</sub>/O<sub>2</sub> mixtures at high pressures and intermediate temperatures. In: *Combustion and Flame* 117 (1999), S. 272–290
- [PFB99] POLIFKE, W. ; FLOHR, P. ; BRANDT, M.: Modeling of inhomogeneously premixed combustion with an extended TFC Model. (1999)
- [Pfu97] PFUDERER, D.: *Über das Potential klassischer statistischer Modelle zur Beschreibung turbulenter Strömungen*, TU-Darmstadt, Diss., 1997
- [PGD98] POLIFKE, W. ; GENG, W. ; DÖBBELING, K.: Optimization of Rate Coefficients for Simplified Reaction Me-

- chanisms with Genetic Algorithms. In: *Combustion and Flame* 113 (1998), S. 119–134
- [Phi91] PHILIPP, M.: *Experimentelle und theoretische Untersuchungen zum Stabilitätsverhalten von Drallflammen mit zentraler Rückströmzone*, TH Karlsruhe, Diss., 1991
- [Pit98] PITSCH, H.: *Modellierung der Zündung und Schadstoffbildung bei der dieselmotorischen Verbrennung mit Hilfe eines interaktiven Flamelet-Modells.*, RWTH Aachen, Diss., 1998
- [Pop81] POPE, S. B.: A Monte Carlo method for the PDF equations of turbulent reactive flow. In: *Combustion Science and Technology* 25 (1981), S. 159–174
- [Pop85] POPE, S. B.: PDF methods for turbulent reactive flows. In: *Prog. Energy Combust. Sci.* 11 (1985), S. 119–192
- [Pop97] POPE, S. B.: Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulating. In: *Combustion Theory and Modelling* 1 (1997), S. 41–63
- [Pop00] POPE, S. B.: *Turbulent Flows*. Cambridge : Cambridge University Press, 2000
- [PV01] POINSOT, T. ; VEYNANTE, D.: *Theoretical and numerical combustion*. 1. R. T. Edwards, 2001
- [RRS84] REID, I. A. B. ; ROBINSON, C. ; SMITH, D. B.: Spontaneous ignition of methane: measurement and chemical model. In: *Twentieth Sym. on Combustion* The Combustion Institute, 1984, S. 1833–1843
- [RSG<sup>+</sup>94] RANZI, E. ; SOGARO, A. ; GAFFURI, P. ; PENNATI, G. ; WESTBROOK, C. K. ; PITZ, W. J.: A new comprehensive reaction mechanism for combustion of hydrocarbon fuels. In: *Combustion and Flame* 99 (1994), S. 201–211

- [RSS<sup>+</sup>02] REPP, S. ; SADIKI, A. ; SCHNEIDER, C. ; HINZ, A. ; LANDENFELD, T. ; JANICKA, J.: Prediction of swirling confined diffusion flame with a Monte Carlo and a presumed PDF model. In: *Int. J. of Heat and Mass Transfer* 45 (2002), S. 1271–1285
- [SB70] SEERY, D. J. ; BOWMANN, C. T.: Ignition delays in several CH<sub>4</sub>-O<sub>2</sub>-Ar mixtures. In: *Combustion and Flame* 14 (1970), S. 37–47
- [SC94] SPADACCINI, L. J. ; COLKET, M. B.: Ignition delay characteristics of methane fuels. In: *Prog. Energy Combustion Sci.* 20 (1994), S. 431–460
- [Sch95] SCHMID, H. P.: *Ein Verbrennungsmodell zur Beschreibung der Wärmefreisetzung von vorgemischten turbulenten Flammen*, Universität Karlsruhe (TH), Diss., 1995
- [SGF<sup>+</sup>] SMITH, G. P. ; GOLDEN, D. M. ; FRENKLACH, M. ; MORIARTY, N. W. ; EITENEER, B. ; GOLDBERG, M. ; BOWMAN, C. T. ; HANSON, R. K. ; SONG, S. ; GARDINER, W. C. ; LISSIANSKI, V. V. ; QIN, Z.: The GRI-Mech home page: [www.me.berkeley.edu/gri\\_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech).
- [Sim03] SIMMIE, J. M.: Detailed chemical kinetic models for the combustion of hydrocarbon fuels. In: *Progress in Energy and Combustion* 29 (2003), S. 599–634
- [SL76] SCHMITZ, N. ; LEHMANN, F.: *Monte-Carlo-Methoden I, Erzeugen und Testen von Zufallszahlen*. 1976
- [SLC98] SUNG, C.J. ; LAW, C.K. ; CHEN, J.-Y.: An augmented reduced mechanism for methane oxidation with comprehensive global parametric validation. In: *27th Sym. on Combustion* (1998), S. 295–304
- [SLC00] SUNG, C.J. ; LAW, C.K. ; CHEN, J.-Y.: Further validation of an augmented reduced mechanism for methane

- oxidation: Comparison of global parameters and detailed structure. In: *Combustion and Flame* 156 (2000), S. 201–220
- [SLP<sup>+</sup>02] SELLE, L. ; LARTIGUE, G. ; POINSOT, T. ; KAUFMANN, P. ; KREBS, W. ; VEYANTE, D.: LES of turbulent combustion for gas turbines with reduced chemistry. In: *Proceedings of the Summer Program 2002* Center of Turbulence Research, 2002
- [Smi99] SMITH, G.P et a.: GRI-Mech. 3.0. In: [http://www.me.berkeley.edu/gri\\_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech) (1999)
- [SMR02] *Measurements of temperature and heat flux in HiTAC flame for unsteady state condition.* 2002
- [Spa71] SPALDING, D. B.: Mixing and Chemical Reaction in Steady Confined Turbulent Flames. In: *Thirteenth Symp. on Combustion* The Combustion Institute, 1971, S. 649–657
- [Stö94] STÖCKER, H.: *Taschenbuch der Physik.* Thun und Frankfurt a. M. : Verlag Harri Deutsch, 1994
- [Stö95] STÖCKER, H.: *Taschenbuch mathematischer Formeln und moderner Verfahren.* Thun und Frankfurt a. M. : Verlag Harri Deutsch, 1995
- [TH86] TSANG, W. ; HAMPSON, R.F.: Chemical Kinetic Data Base for Combustion Chemistry. Part I. Methane and Related Compounds. In: *J. Phys. Chem. Ref. Data* 15 (1986), S. 1087–1279
- [Tur00] TURNS, S. R.: *An introduction to Combustion: Concepts and Applications.* 2nd Edition. McGraw-Hill, 2000
- [VKFS03] VENAYAGAMOORTHY, S. K. ; KOSEFF, J. R. ; FERZIGER, J. H. ; SHIH, L. H.: Testing of RANS turbulence

- models for stratified flows based on DNS data. In: *Annual Research Briefs 2003* Center for Turbulence Research, 2003, S. 127–138
- [VM95] VERSTEG, H. K. ; MALASEHERA, W.: *An introduction to computational fluid dynamics*. Essex : Addison Wesley Longman Limited, 1995
- [VWB] VANDEBROEK, L. ; WINTER, H. ; BERGHMANS, J.: Numerical study of the auto-ignition process in gas mixtures using chemical kinetics / Dept. of Mechanical Engineering, Celestijnenlaan, Leuven, Belgium. – Forschungsbericht
- [WB] WEIHONG, Y ; BLASIAK, W.: Numerical study of fuel temperature influence on single gas jet combustion in highly preheated and oxygen deficient air. In: *adapco-ONLINE*, <http://www.adapco-online.com>
- [WD81] WESTBROOK, C. K. ; DRYER, F. L.: Simplified reaction mechanisms for the oxidation of hydrocarbon fuels in flames. In: *Combustion Science and Technology* 27 (1981)
- [WKN<sup>+</sup>01] WAKISAKA, T. ; KATO, N. ; NGUYEN, T. T. ; OKUDE, K. ; TAKEUCHI, S. ; ISSHIKI, Y.: Numerical prediction of mixture formation and combustion processes in premixed compression ignition engines. In: *The 5th International Sym. on Diagnostics and Modeling of Combustion in Internal Combustion Engines*, 2001, S. 426–433
- [WM92] WARNATZ, J. ; MAAS, U.: *Technische Verbrennung*. Berlin, Heidelberg : Springer-Lehrbuch, 1992
- [WNPR98] WOUTERS, H. A. ; NOOREN, P. A. ; PEETERS, T. W. J. ; ROEKAERTS, D.: Effects of micro-mixing in gas-phase turbulent jets. In: *Int. J. of Heat and Fluid Flow* 19 (1998), S. 201–207

- [ZBLM85] ZELDOVICH, Ya. B. ; BARENBLATT, G. I. ; LIBROVICH, V. B. ; MAKHVILADZE, G. M.: *The mathematical theory of combustion and explosions*. New York. Consultants Bureau, 1985
- [ZPBW98] ZIMONT, V. ; POLIFKE, W. ; BETTELINI, M. ; WEISENSTEIN, W.: An Efficient Computational Model for Premixed Turbulent Combustion on High Reynolds Numbers based on a Turbulent Flame Speed Closure. In: *J. Eng. Gas Turbines and Power* 120 (1998), Nr. 7, S. 526–532