

Numerische Beschreibung technischer Verbrennungssysteme

Vom Fachbereich Maschinenbau
an der Technischen Universität Darmstadt

zur

Erlangung des Grades eines Doktor-Ingenieurs (Dr.-Ing.)
genehmigte

D i s s e r t a t i o n

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Kai Aschmoneit

aus Kiel

Berichterstatter: Prof. Dr.-Ing. J. Janicka

Mitberichterstatter: Prof. Dr.-Ing. A. Kempf

Tag der Einreichung: 05.02.2013

Tag der mündlichen Prüfung: 30.04.2013

Darmstadt 2013

D17

Bibliografische Information der Deutschen Bibliothek

Die Deutsche Bibliothek verzeichnet diese Publikation in der Deutschen Nationalbibliografie; detaillierte bibliografische Daten sind im Internet über <http://dnb.ddb.de> abrufbar.

Aschmoneit, Kai:

Numerische Beschreibung technischer Verbrennungssysteme

ISBN 978-3-86376-051-9

Alle Rechte vorbehalten

1. Auflage 2013

© Optimus Verlag, Göttingen

URL: www.optimus-verlag.de

Printed in Germany

Papier ist FSC zertifiziert (holzfrei, chlorfrei und säurefrei,
sowie alterungsbeständig nach ANSI 3948 und ISO 9706)

Das Werk, einschließlich aller seiner Teile, ist urheberrechtlich geschützt. Jede Verwertung außerhalb der engen Grenzen des Urheberrechtsgesetzes in Deutschland ist ohne Zustimmung des Verlages unzulässig und strafbar. Dies gilt insbesondere für Vervielfältigungen, Übersetzungen, Mikroverfilmungen und die Einspeicherung und Verarbeitung in elektronischen Systemen.

Danksagung

Die vorliegende Arbeit ist innerhalb meiner Zeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Energie- und Kratwerkstechnik an der Technischen Universität Darmstadt entstanden. Über drei Jahre durfte ich unter der Leitung von Prof. Dr.-Ing. J. Janicka arbeiten. Bei ihm möchte ich mich für die Ermöglichung der Promotion und die steti-ge Unterstützung meiner Arbeit bedanken. Hervorheben möchte ich auch die angenehm freundliche Zusammenarbeit.

Mein Dank gilt weiterhin Prof. Dr.-Ing. A. Kempf für seine Bereitschaft, das Korefe-rat zu übernehmen. Seine wissenschaftlichen Arbeiten haben mir bei der Ausführung der Dissertation sehr geholfen.

Ein großer Dank geht an alle Mitarbeiter des Fachgebietes. Sie haben eine freundschaftli-che Atmosphäre der Zusammenarbeit geschaffen, für die ich sehr dankbar bin. Besonders hervorheben möchte ich Anja Ketelheun, Christian Klewer und Guido Künne, die mir so-wohl freundschaftlich als auch fachlich jederzeit zur Verfügung standen und damit einen Teil zum Gelingen der Arbeit beigetragen haben. Die freundschaftlichen und fachlichen Diskussionen mit meinem Bürokollegen Werner Gumprich sowie mit Simone Eisenhuth, Michael Baumann, Thomas Breitenberger, Benjamin Sauer und Markus Schmitt möchte ich nicht unerwähnt lassen.

Hervorheben möchte ich auch meine Familie, die mich zu jeder Zeit unterstützt hat. Besondere Erwähnung verdient meine Schwester Insa, die mir in den letzten Wochen der Promotion sehr geholfen hat.

Mein größter Dank geht an meine Freundin Olga, die mich über die gesamten drei Jahre unentwegt unterstützt hat. Besonders in der letzten Phase der Promotion hat sie mir durch ihre Unterstützung die nötige Kraft zur Vollendung der Arbeit gegeben.

Darmstadt, Februar 2013

Kai Aschmoneit

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
1.1	Motivation	2
1.2	Stand der Forschung	2
1.3	Ziel der Arbeit	4
1.4	Struktur der Arbeit	5
2	Grundlagen turbulenter Strömungen	7
2.1	Strömungsformen	7
2.2	Mathematische Beschreibung turbulenter Strömungen	8
2.3	Die Energiekaskade	9
2.4	Gleichungen der Strömungsdynamik	11
2.4.1	Massenerhaltungsgleichung	11
2.4.2	Speziestransportgleichung	12
2.4.3	Impulserhaltungsgleichung	12
2.4.4	Energiebilanzgleichung	13
2.4.5	Materialgesetze	13
2.4.6	Zustandsgleichungen	14
2.4.7	Zusammenfassung des Gleichungssystems	15
2.5	Turbulenzmodellierung	16
2.5.1	Direkte Numerische Simulation (DNS)	17
2.5.2	Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS)	17
2.5.3	Large Eddy Simulation (LES)	18
2.5.3.1	Filterung	19
2.5.3.2	Das Smagorinsky-Modell	20
2.5.3.3	Die Germano-Prozedur	21
3	Grundlagen der Verbrennung	23
3.1	Reaktionskinetik	23
3.2	Diffusionsflammen	25
3.2.1	FGM-Modell	27
3.2.1.1	Mischungsbruchgleichung	28
3.2.1.2	Chemietabelle	29
3.2.1.3	Presumed Probability Density Function (Presumed PDF)	34
3.2.1.4	Zusammenfassung FGM-Modell	36
3.3	Vormischflammen	37
3.3.1	Flammenausbreitungsgeschwindigkeit und Flammendicke	38
3.3.2	Regimediagramm vorgemischter Verbrennung	40

3.3.3	Numerische Behandlung	41
3.3.3.1	ATF-Modell	43
3.4	Partielle Vormischung	49
3.4.1	Kombiniertes Modell für partiell vorgemischte Systeme	49
3.4.1.1	Flammensensor	50
3.4.1.2	Zusammenfassung ATF-FGM-Modell	51
4	Numerische Umsetzung	53
4.1	Der Löser PRECISE-UNS	53
4.2	Diskretisierung	54
4.2.1	Konvektiver Term	55
4.2.2	Diffusiver Term	56
4.2.3	Instationärer Term	57
4.3	Numerisches Gesamtverfahren	58
4.3.1	Druckkorrektur	58
4.3.2	Behandlung der Dichte	59
4.4	Laplace-Operator	62
4.5	Flammensensor und Flammenindikator	63
5	Verifikation und Validierung	65
5.1	Dichtesprung	65
5.1.1	Numerischer Aufbau	66
5.1.2	Ergebnisse	66
5.2	Eindimensionale, laminare Flamme	72
5.2.1	Numerischer Aufbau	72
5.2.2	Ergebnisse	73
5.3	ATF-Modell	76
5.3.1	Aufdickung	76
5.3.1.1	Aufdickung im dreidimensionalen Fall	78
5.3.2	Laplace-Operator	80
5.3.3	Effizienzfunktion	82
5.4	Kombiniertes Modell zur Berechnung verschiedener Verbrennungsmoden	82
5.4.1	Eindimensionale, laminare Flamme	83
5.4.2	Gegenstromkonfiguration	85
6	Anwendungen	89
6.1	Pilotierte Strahlflamme - <i>Flamme D</i>	89
6.1.1	Experimenteller Aufbau	90
6.1.2	Numerischer Aufbau	92
6.1.3	Ergebnisse	93
6.1.3.1	Gittervariation	95
6.1.3.2	Zeitschrittvariation	100
6.1.3.3	Anwendung verschiedener Verbrennungsmodelle	102
6.1.4	Zusammenfassung	107
6.2	Vorgemischte Drallflamme - <i>TECFLAM-Drallbrenner</i>	107
6.2.1	Experimenteller Aufbau	108

6.2.2	Numerischer Aufbau	110
6.2.3	Ergebnisse - isotherm	113
6.2.3.1	Aufteilung des Massenstroms	113
6.2.3.2	Gittervariation	116
6.2.3.3	Zeitschrittvariation	117
6.2.4	Ergebnisse - reagierend	118
6.2.4.1	Gittervariation	121
6.2.4.2	Zeitschrittvariation	124
6.2.4.3	Anwendung verschiedener Verbrennungsmodelle	127
6.2.5	Zusammenfassung	127
6.3	Generischer Brenner	129
7	Zusammenfassung und Ausblick	131
	Literaturverzeichnis	133

Nomenklatur

Lateinische Großbuchstaben		Einheit
A	Fläche	m^2
A_a	Präexponentieller Faktor des Arrhenius-Ansatzes	*
C	Reaktionsfortschrittsvariable	—
C_g	Germano-Parameter	—
C_s	Smagorinsky-Konstante	—
D	Diffusionskoeffizient	m^2/s
E	Effizienzfunktion (Efficiency Function)	—
E_a	Aktivierungsenergie	J/mol
F	Aufdickungsfaktor	—
F_i	Beliebige Funktion	*
\mathcal{G}	Filterfunktion	$1/m^3$
L	Charakteristisches Längenmaß	m
\mathcal{L}_{ij}	Germano-Identität	m^2/s^2
M	Molare Masse	kg/mol
\mathcal{M}_k	Symbol für die Spezies k	—
N	Anzahl der Spezies	—
N_e	Anzahl der Elemente	—
N_r	Anzahl der Reaktionen	—
\mathcal{O}	Ordnung eines Verfahrens	—
P	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	*
\bar{P}	Gefilterter Druckparameter	Pa
U	Charakteristische Geschwindigkeit	m/s
R_u	Universelle Gaskonstante	$J/mol K$
R_s	Spezifische Gaskonstante	$J/kg K$
R_{ij}	Zweipunktkorrelation	m^2/s^2
\mathcal{R}	Rechte Seite des Gleichungssystems	*

Y_k	Massenbruch der Spezies k	—
S	Drallzahl	—
S_{ij}	Deformationsgeschwindigkeitstensor	$1/s$
T	Temperatur	K
\mathcal{T}_{ij}	Spannungstensor des testgefilterten Feldes	$kg/s^2 m$
U_c	Schallgeschwindigkeit	m/s
V	Volumen	m^3
$V_{k,j}$	Diffusionsgeschwindigkeit der Spezies k in Richtung kartesischer Koordinaten	m/s
W	Verwinklungsfaktor	—
Z	Mischungsbruch	—
Z_e	Elementmassenbruch des Elementes e	—
$\widetilde{Z}_n''^2$	Normierte Mischungsbruchvarianz: Unmixedness	—

Lateinische Kleinbuchstaben

Einheit

a	Streckungsrate	$1/s$
c_p	Spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck p	$J/kg K$
c_k	Moldichte der Spezies k	mol/m^3
d	Durchmesser	m
g_i	Erdbeschleunigung in Richtung kartesischer Koordinaten	m/s^2
h	Spezifische Enthalpie	J/kg
h^s	Spezifische sensible Enthalpie	J/kg
k	Geschwindigkeitskoeffizient	*
k_{eq}	Gleichgewichtskonstante	—
k_t	Turbulente kinetische Energie	m^2/s^2
$k_{k,i}$	Feldstärke in Richtung i auf Komponente k	N/kg
l	Längenmaß	m
$l_{ij,I}$	Integral-Längenmaß	m
m	Masse	kg
\dot{m}	Massenstrom	kg/s
$m_{e,k}$	Massenanteil des Elements e in Komponente k	—
n_i	Normalenvektor in kartesischen Koordinaten x, y, z	—
p	Druck	$kg/s^2 m$
q_i	Wärmefluss in Richtung kartesischer Koordinaten	$J/m^2 s$
r	Reaktionsgeschwindigkeit	$mol/m^3 s$
s_1	Laminare Flammgeschwindigkeit	m/s

s_t	Turbulente Flammengeschwindigkeit	m/s
t	Zeit	s
$t_{ij,I}$	Integral-Zeitmaß	s
u_i	Geschwindigkeit in Richtung kartesischer Koordinaten	m/s
u'_Δ	Feinstruktur-Geschwindigkeitsfluktuation	m/s
x	Ortsvektor	m
x_i	Kartesische Koordinaten x, y, z	m

Griechische Großbuchstaben	Einheit
-----------------------------------	----------------

Δ	Filterweite	m
$\Delta \cdot$	Schrittweite der entsprechenden Größe	*
Δh_f^0	Standardbildungsenthalpie	J/kg
Δx_{opt}	Gitterweite, die eine richtige Flammenpropagation sicherstellt	m
$\Delta_{\mathcal{T}}$	Testfilterweite	m
Γ	Verzerrungsfunktion der Flamme	—
Ω	Flammensensor nach Durand und Polifke [21]	—
Ω_ω	Flammensensorformulierung	—
Ω_Ψ	Flammensensorformulierung	—
Ψ	Flammenindex	—

Griechische Kleinbuchstaben	Einheit
------------------------------------	----------------

β	Modellparameter	—
β_a	Exponent der Temperatur im Arrhenius-Ansatz	—
χ	Skalare Dissipationsrate	1/s
δ_{ij}	Kronecker-Delta	—
δ_l	Laminare Flammendicke	m
δ_t	Turbulente Flammendicke (Flamebrush)	m
ϵ	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie	m ² /s ³
ϵ_{err}	Globaler Fehler	—
ϕ	Beliebige Variable	*
η_k	Kolmogorov-Längenmaß	m
κ	Wellenzahl	1/m
λ	Wärmeleitfähigkeit	W/m K
μ	Dynamische Viskosität	kg/s m
ν	Kinematische Viskosität	m ² /s

ν'_k	Stöchiometrischer Koeffizient des Eduktes k	—
ν''_k	Stöchiometrischer Koeffizient des Produktes k	—
ρ	Dichte	kg/m ³
σ	Schmidt-Zahl	—
τ	Zeitkoordinate	s
τ_{ch}	Charakteristische chemische Zeit	s
τ_{fl}	Charakteristische Strömungszeit	s
τ_{ij}	Spannungstensor	kg/s ² m
τ_k	Kolmogorov-Zeitmaß	s
$\tau_{Y_k}^{sgs}$	Feinstruktur-Anteil der Speziesgleichung	kg/m ² s
$\dot{\omega}_k$	Quellterm der Komponente k	kg/m ³ s
$\dot{\omega}_q$	Enthalpie-Quellterm	J/m ³ s
ζ_i	Ortsvektor $i = 1, 2, 3$	m

Indizes

\cdot'	Zeitliche Fluktuation
\cdot''	Korrekturwert (Druckkorrektur)
\cdot^*	Geschätzter Wert (Druckkorrektur)
\cdot_0	Ausgangswert
\cdot_b	Rückwärtsreaktion
\cdot_c	Flächenmittelpunkt
\cdot_{eq}	Gleichgewichtswert
\cdot_f	Vorwärtsreaktion
\cdot_F	Brennstoff
\cdot_k	Größe der Komponente k
\cdot_{max}	Maximalwert
\cdot_{min}	Minimalwert
\cdot^n	Normiert
\cdot_O	Oxidator
\cdot_P	Zellmittelpunkt
\cdot_{P_D}	Zellmittelpunkt stromab der Seite c
\cdot_{P_U}	Zellmittelpunkt stromauf der Seite c
\cdot_{rms}	Standardabweichung
\cdot_{sgs}	Feinstrukturanteil
\cdot_t	Turbulente Größe
\cdot_{th}	Thermisch
\cdot_u	Unverbrannt
\cdot_v	Verbrannt
\cdot_{zl}	Magere Zündgrenze
\cdot_{zr}	Fette Zündgrenze

Operatoren

$\bar{\cdot}$	Räumliche Filterung
$\hat{\cdot}$	Räumliche Filterung mit dem Testfilter (Germano)
$\bar{\cdot}$	Zeitlicher Mittelwert
$\overline{\cdot'^2}$	Varianz
$\tilde{\cdot}$	Dichtegewichtete Favre-Filterung
$\overline{\tilde{\cdot'^2}}$	Favre-Feinstruktur-Varianz
∇	Gradient

Dimensionslose Kennzahlen

CFL	Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl
-------	------------------------------

Da	Damköhler-Zahl
Ka	Karlovitz-Zahl
Le	Lewis-Zahl
Ma	Mach-Zahl
Re	Reynolds-Zahl
Re_t	Turbulente Reynolds-Zahl
Re_Δ	Turbulente Feinstruktur-Reynolds-Zahl
$Sc = \sigma$	Schmidt-Zahl

Abkürzungen

ATF	Artificially Thickened Flame
CBC	Convection Boundedness Criterion
CDS	Central Difference Scheme
CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direct Numerical Simulation
DT	Dynamic Thickening
FGM	Flamelet Generated Manifolds
FPI	Flame Prolongation of Intrinsic low-dimensional manifolds
GAT	Grid-Adaptive Thickening
LES	Large Eddy Simulation
MPI	Message Passing Interface
PDF	Probability Density Function
PVC	Precessing Vortex Core
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
RMS	Root Mean Square
UDS	Upwind Difference Scheme
TNF	International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames