

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

Kapitel 1

Einleitung

Bei der Verbrennung wird die im Brennstoff gespeicherte Energie in Form von Wärme frei. Die Möglichkeit, diese zu nutzen und in andere Energieformen umzuwandeln, ist bereits früh erkannt worden. Das Heizen von Gebäuden, die Verbrennung in Motoren und die Verfeuerung von Brennstoffen in Kraftwerken sind nur einige Beispiele.

Verbrennungsprozesse spielen aktuell und werden auch in Zukunft eine tragende Rolle in der Energieumwandlung spielen. Die steigende Weltbevölkerung, verbunden mit der zunehmenden Industrialisierung, führt dazu, dass die Menge der benötigten Energie stetig steigt. Nach einer Studie im Auftrag des Bundesministeriums für Wirtschaft und Arbeit [24] wird davon ausgegangen, dass sich der Primärenergieverbrauch im Jahre 2030 um 60 % bezogen auf das Jahr 2002 erhöht. Momentan besteht der Primärenergieverbrauch zu ungefähr 90 % aus fossilen Energieträgern [9; 117]. Auch bei zunehmender Nutzung der regenerativen Energien, wie in manchen Ländern angedacht, wird global gesehen ein Großteil der Energie weiterhin von den fossilen Energieträgern bereitgestellt werden.

Regenerative Energien haben in Deutschland bereits einen Teil der Stromversorgung übernommen und in Zukunft ist ein Anstieg des prozentualen Anteils zu erwarten. Ungeklärt ist bis heute die Frage der Speicherung. Strom aus regenerativen Energien wird mitunter nur unter bestimmten Umwelteinflüssen (z.B. Wind, Sonne) bereitgestellt. Steigt ihr Anteil weiter an, wird eine Speichertechnik benötigt, die große Mengen an Energie speichern und wieder zu Verfügung stellen kann. Eine Möglichkeit wäre die Erzeugung von Wasserstoff durch den Prozess der Hydrolyse. Dieser könnte zur Stromerzeugung in Gasturbinen zum Einsatz kommen. Auch bei der Nutzung von regenerativen Energien ist daher die Beherrschung der Verbrennung von großer Bedeutung.

Ein wichtiger Bestandteil der Nutzung regenerativer Energien wird verstärkt die Beimischung von regenerativen Energieträgern zu fossilen sein. Ausgehend von vorhandenen Verbrennungssystemen müssen diese bei höheren Zumischungsraten abgeändert werden. Damit eröffnen sich neue Felder in der Verbrennungsforschung.

Wie in den letzten Absätzen geschildert wird die Verbrennung auch in der Zukunft eine entscheidende Rolle in der Energieerzeugung einnehmen. Zum tieferen Verständnis der Prozesse sowie zur Auslegung von Verbrennungssystemen kann die Computersimulation einen großen Beitrag leisten. Gerade in Hinblick auf effizientere Systeme und die Schadstoffreduzierung wird sich von der Computersimulation eine große Hilfe erhofft.

1.1 Motivation

Die Wichtigkeit des Verständnisses der Verbrennung ist im letzten Abschnitt dargelegt worden. Im Auslegungsprozess einer technischen Anwendung sind dabei experimentelle Untersuchungen unerlässlich. Diese sind jedoch kosten- und zeitintensiv. Außerdem verbieten sich in komplexen Geometrien viele Messtechniken, die einen großen Aufbau oder eine direkte Zugänglichkeit benötigen. Um hier Abhilfe zu schaffen, bietet sich die Computersimulation an. Auch an Stellen des Systems, die nicht zugänglich sind, können Vorhersagen getroffen werden. Des Weiteren ist die Verwendung von Simulationen zur Unterstützung des Entwicklungsprozesses hilfreich, um besonders in der Vorauslegung eine zügige Entwicklung zu gewährleisten.

Im Fokus der Arbeit steht die Weiterentwicklung der Simulationswerkzeuge zur korrekten Vorhersage der Verbrennung. Diese können helfen, effizientere Systeme mit weniger Kraftstoffverbrauch zu entwickeln. Ein hohe Bedeutung kommt auch der Schadstoffreduktion zu. Nur über eine realistische Abbildung der Verbrennung ist auch eine realistische Vorhersage möglich. Die Weiterentwicklung von Verbrennungsmodellen im Kontext der Grobstruktursimulation kann dabei entscheidenden Beitrag leisten.

1.2 Stand der Forschung

In der Vergangenheit stand die Lösung der zeitlich gemittelten Erhaltungsgleichungen im Vordergrund der Forschung. Auf dieser Grundlage sind Methoden und Modelle zur Beschreibung von turbulenter Verbrennung entwickelt worden. Diese werden heutzutage als Standard in der Industrie angewendet.

In den letzten Jahren hat sich eine neue Technik zur Vorhersage isothermer Strömungen durchgesetzt. Die Grobstruktursimulation führt einen räumlichen Filterprozess durch, wodurch große Strukturen direkt abgebildet werden können. Im Gegensatz zur Lösung der zeitlich gemittelten Gleichungen liegt als Lösung ein instantanes Strömungsfeld vor. Für isotherme Strömungen hat sich die Grobstruktursimulation bereits als Lösungswerkzeug bewährt [84] und wird vielseitig verwendet.

Auch für die Verbrennungssimulation verspricht die Grobstruktursimulation eine deutliche Verbesserung der Ergebnisse. Durch die Auflösung großer, die Strömung dominierender Wirbelstrukturen, kann das Strömungsfeld besser vorhergesagt werden. Resultierend sind auch die Wiedergabe von Mischungsprozessen oder Interaktionen zwischen Flammen und Wirbeln in besserer Übereinstimmung mit der Realität. Aus diesen Gründen ist die Grobstruktursimulation in den letzten Jahren vermehrt auch für Verbrennungssimulationen angewendet worden.

Die Modellentwicklung im Kontext der Grobstruktursimulation ist ein andauernder Forschungsschwerpunkt in der Verbrennungsgemeinschaft. Dabei können zwei grundlegende Flammentypen anhand ihres Mischungszustandes unterschieden werden. Bei der nicht-vorgemischten Verbrennung gelangen Brennstoff und Oxidator getrennt zur Flammenfront

und werden erst dort gemischt. Unterschieden dazu wird die vorgemischte Verbrennung bei der Oxidator und Brennstoff auf molekularer Ebene gemischt zur Flammenfront transportiert werden. Speziell für die genannten Flammentypen sind Modelle in Bezug auf die Grobstruktursimulation entwickelt worden.

Für nicht-vorgemischte Simulationen hat sich das steady-flamelet-Verbrennungskonzept bewährt. Anhand einer eindimensionalen, laminaren nicht-vorgemischten Flamme werden die möglichen thermo-chemischen Zustände tabelliert. Die Lösung einer zusätzlichen Transportgleichung reicht aus, um einen voll bestimmten Zustand aus der Tabelle abzurufen. Oftmals wird zusätzlich eine Abhängigkeit von der skalaren Dissipationsrate integriert. Mit dem steady-flamelet-Konzept sind Simulationen für Freistrahlfammen z. B. von Forkel, Kempf und Klewer [31; 47; 55] veröffentlicht worden. Die Rechnung einer pilotierten Freistrahlfamme wird unter anderem von Vreman et al. [118] gezeigt. Staukörperstabilisierte Freistrahlfammen sind mit selbigem Konzept erfolgreich von Kempf et al. [48; 49] und Raman und Pitsch [91] berechnet worden. Ein ähnliches Konzept basierend auf laminaren Flammen zur Erstellung der Chemietabelle nutzt eine zusätzliche Reaktionsfortschrittsvariable zur Beschreibung des Verbrennungsprozesses (Flamelet Generated Manifolds-Modell) [35; 75; 77]. Dabei können zur Erstellung der Chemietabelle sowohl vorgemischte als auch nicht-vorgemischte laminare Flamelets verwendet werden. In Simulationen von Olbricht et al. [78; 79] sind beide Tabellierungsmethoden zum Einsatz gekommen. Dabei sind verdrallte und nicht-verdrallte Staukörperflammen berechnet worden. Weitere Ergebnisse zur nicht-verdrallten Flamme finden sich in Ketelheun et al. [53]. Modelle für Schadstoffvorhersagen, die auf weiterentwickelten Reaktionsfortschrittsvariablen-Ansätzen basieren, sind von Ketelheun et al. [51] und Wegner et al. [122] vorgeschlagen worden. Ein a priori-Vergleich beider Tabellierungsmethoden ist von Ramaekers et al. [90] veröffentlicht worden. Sowohl das steady-flamelet-Konzept als auch das Flamelet Generated Manifolds-Modell liefern gute Ergebnisse für die Simulation von nicht-vorgemischten Flammen. Nehmen Effekte endlich schneller Chemie zu, ist im steady-flamelet-Konzept eine Abhängigkeit von der skalaren Dissipationsrate einzuführen, um ähnlich gute Resultate wie die Fortschrittsvariablen-Ansätze zu liefern.

Es existieren drei renommierte Ansätze zur Beschreibung vorgemischter Flammen. Neben der G-Gleichung [86] und dem Flammenflächendichtemodell [40] ist die Prozedur der künstlichen Aufdickung (Artificially Thickened Flame) [15] zu nennen. Das zuletzt genannte Modell unterscheidet sich dadurch von den anderen beiden, dass die laminare Flammengeschwindigkeit nicht als Beziehung vorgegeben wird, sondern sich durch den verwendeten Reaktionsmechanismus ergibt. Die Flammenstruktur wird dabei soweit aufgedickt, dass sie auf dem verwendeten Gitter auflösbar wird. Simulationen einer mager vorgemischte Drallflamme mit dem Artificially Thickened Flame-Modell sind von Künne et al. [61] veröffentlicht. Des Weiteren sind Untersuchungen zu Verbrennungsinstabilitäten von Veynante und Poinot [115] durchgeführt worden. Ebenso ist ein Gasturbinenbrenner von Selle et al. [106] simuliert worden. Es konnten dabei gute Ergebnisse mit dem Modell erzielt werden.

Zur Untersuchung von partieller Vormischung, bei der sowohl nicht-vorgemischte als auch

vorgemischte Zonen auftreten können, ist verstärkt auf die Direkte Numerische Simulation zurückgegriffen worden. Berechnungen einer abgehobenen Strahlflamme sind von Mizobuchi et al. [71; 72] oder Domingo et al. [19] vorgestellt worden. In beiden Berechnungen ist eine Flammenindikatorformulierung von Domingo et al. [18] verwendet worden, die auf Yamashita et al. [124] zurückgeht. Weiterentwickelte Flammenindikatoren und Modellformulierungen sind unter anderem von Fiorina et al. [30], Knudsen und Pitsch [56; 57] und Nguyen et al. [74] vorgeschlagen worden.

Das Lösen des aus den Erhaltungsgleichungen resultierenden Gleichungssystems kann auf zwei verschiedene Weisen geschehen. Eine dichte-basierte Lösung ermöglicht die Erfassung aller Einflüsse. Die Erhaltungsgleichungen werden in ihrer ursprünglichen Form gelöst und können kompressible Effekte abbilden. Dem entgegen stehen druckbasierte inkompressible Ansätze, die ursprünglich aus der Berechnung isothermer Strömungen stammen. Sie ermöglichen eine deutlich effizientere Lösung des Gleichungssystems durch die Annahme kleiner Machzahlen. Eine Begrenzung der Zeitschrittweite auf die Ausbreitungsgeschwindigkeit akustischer Wellen besteht nicht mehr. Für Strömungen mit variabler Dichte geht die Formulierung auf Majda und Sethian [68] zurück. Bei Strömungen mit starken Dichteänderungen neigt die vorgeschlagene Lösungsprozedur zu Instabilitäten, die zur Divergenz führen können, wie von Shunn und Ham [108] beschrieben. Es existieren verschiedene Lösungsvorschläge, von denen sich jedoch keiner durchsetzen konnte. Forkel [31] führt eine zeitliche Filterung der Dichte durch, um die Oszillationen zu vermeiden. Vreman et al. [118] schlägt eine räumliche Filterung der Dichte vor. Kempf [47] entwickelte ein Predictor-Corrector-Verfahren für die Lösung der Mischungsbruchgleichung und konnte durch geeignete Wahl des Predictor-Zeitschrittes eine Dämpfung der Oszillationen erreichen. Neuere Arbeiten von Olbricht [78] und Hahn [37] nutzen die nicht-konservative Form der Mischungsbruchgleichung, um eine Stabilisierung des Verfahrens zu gewährleisten.

1.3 Ziel der Arbeit

Die vorliegende Arbeit hat das Ziel, ein Gesamtmodell zur Vorhersage von Verbrennungsprozessen mittels der Grobstruktursimulation zur Verfügung zu stellen. Dazu ist die Entwicklung eines Verfahrens zur Beherrschung der hohen Dichteunterschiede in Flammen notwendig. Die entwickelte Lösungsprozedur soll mittels einfacher Testfälle validiert werden, um sich dann in dreidimensionalen turbulenten Systemen zu bewähren. Da innerhalb komplexer Verbrennungssysteme unterschiedliche Flammenmoden auftreten, ist das Ziel sowohl ein Modell nicht-vorgemischter als auch ein Modell vorgemischter Verbrennung zu implementieren und innerhalb des Gesamtverfahrens einzusetzen.

Die Vorhersageeigenschaften der Modelle sollen durch den Vergleich zu experimentellen Daten analysiert werden. Über Sensitivitätsstudien sollen Aufschlüsse über das Verhalten der Modelle erlangt werden.

Als Löser soll PRECISE-UNS von Rolls-Royce zur Anwendung kommen. Bereits am Fachgebiet durchgeführte Arbeiten basieren auf den zeitlich gemittelten Erhaltungsgleichungen oder auf isothermen Bedingungen [14; 54; 120].

1.4 Struktur der Arbeit

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der Simulation von Verbrennungssystemen. Zu ihrem Verständnis werden zu Beginn in Kapitel 2 die grundlegenden Strömungsformen unterschieden, wobei im Folgenden die turbulente Strömung näher erläutert wird. Das zu lösende Gleichungssystem wird hergeleitet und verschiedene Möglichkeiten der Turbulenzmodellierung dargelegt. Näher wird auf die verwendete Grobstruktursimulation eingegangen.

In Kapitel 3 folgen die Grundlagen der Verbrennung. Dazu wird zu Beginn die allgemeine Reaktionskinetik erläutert, um dann gezielt auf die unterschiedlichen Verbrennungsmoden einzugehen. Dabei werden die in der vorliegenden Arbeit genutzten Verbrennungsmodelle erläutert.

Die Lösung des aus den Gleichungen des Strömungs- und Verbrennungsmodells resultierenden Gleichungssystems erfordert neben der Diskretisierung ein stabiles numerisches Gesamtverfahren. Letzteres ist in der vorliegenden Arbeit entwickelt worden, um die Berechnung von Strömungen mit hohen Dichtegradienten durchführen zu können. Das Verfahren ist in Kapitel 4 beschrieben. Im selben Kapitel finden sich auch einige spezielle numerische Umsetzungen der getätigten Implementierungen.

In Kapitel 5 folgt die Verifizierung und Validierung des entwickelten Gesamtverfahrens sowie der implementierten Verbrennungsmodelle anhand von einfachen Testfällen.

Validierungsrechnungen in dreidimensionaler turbulenter Umgebung folgen in Kapitel 6. Neben einer nicht-vorgemischten pilotierten Strahlflamme ist ein mager vorgemischter Brenner und ein generischer Brenner mit Zonen nicht-vorgemischter sowie vorgemischter Verbrennung simuliert worden.

Die vorliegende Arbeit wird von einer Zusammenfassung gefolgt von einem Ausblick in Kapitel 7 abgeschlossen.