

# VT-Forschungsbericht 2023-01

## Large-Eddy Simulation und Analyse turbulenter, rußender Flammen

Martin Grader, M.Sc.

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt  
Institut für Verbrennungstechnik  
Stuttgart



DLR

Deutsches Zentrum  
für Luft- und Raumfahrt



Herausgeber

Deutsches Zentrum  
für Luft- und Raumfahrt

**Institut für  
Verbrennungstechnik**

Pfaffenwaldring 38-40  
70569 Stuttgart

Telefon  
Telefax

(0 7 11) 68 62 - 3 08  
(0 7 11) 68 62 - 5 78

Als Manuskript gedruckt.  
Abdruck oder sonstige Verwendung  
nur nach Absprache mit dem Institut gestattet

D93, Stuttgart

# Large-Eddy Simulation und Analyse turbulenter, rußender Flammen

Von der Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie  
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines  
Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)  
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

**Martin Grader, M.Sc.**

geboren in  
Baden-Baden

Hauptberichter: Herr apl. Prof. Dr.-Ing. Peter Gerlinger  
Mitberichter: Herr Prof. Dr.-Ing. Andreas Markus Kempf  
Tag der mündlichen Prüfung: 21. April 2023

Institut für Verbrennungstechnik der Luft- und Raumfahrt  
Universität Stuttgart

2023



# Vorwort

Die nachfolgende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Verbrennungstechnik in der Abteilung Computersimulation des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR) Stuttgart.

Besonders möchte ich mich zunächst bei meinem Doktorvater Herrn apl. Prof. Dr.-Ing. Peter Gerlinger bedanken. Seine enorme Kompetenz, seine ansteckende Begeisterung für die numerische Verbrennungssimulation und seine persönliche Wertschätzung haben diese Arbeit maßgeblich geprägt. Die vielen fachlichen Diskussionen, seine Neugierde und Offenheit für neue Lösungsansätze sowie sein hoher Anspruch waren entscheidend für das Gelingen dieser Arbeit.

Für die Möglichkeit zur Durchführung der Arbeit bedanke ich mich bei den Institutsleitern Herrn Prof. Dr.-Ing. Manfred Aigner und Herrn Prof. Dr.-Ing. Andreas Huber sowie den Abteilungsleitern Herrn Dr. Peter Ess, Herrn apl. Prof. Dr.-Ing. Peter Gerlinger und Herrn Dr.-Ing. habil. Berthold Noll. Für die Übernahme des Mitberichts danke ich Herrn Prof. Dr.-Ing. Andreas Kempf.

Dank gebührt auch meinen Kolleginnen und Kollegen, mit denen ich am DLR zusammenarbeiten durfte. Besonders zu nennen sind hier Tobias Dittmann, Christian Eberle, Florian Eigentler und Alexander Steinbach für die vielen Diskussionen zur Modellierung und Simulation rußender Flammen, Ansgar Lechtenberg und Florian Setzwein, mit denen ich die längste Zeit am DLR verbringen durfte, Andreas Fiolitakis, dessen stete Unterstützung die aufwändigen Rechnungen in dieser Arbeit ermöglichte sowie Peter Ess, Roman Keller, Michael Pries und Timo Seitz für die vielen Gespräche zur Simulation turbulenter Flammen. Bedanken möchte ich mich auch bei Zhiyao Yin für die Einführung in die Welt der Modenanalyse und die hervorragende Zusammenarbeit, Klaus-Peter Geigle für die Unterstützung und die Einblicke in die experimentelle Untersuchung rußender Flammen sowie Thomas Bierkandt, Clemens Naumann und Michael Stöhr für die fachlichen Diskussionen. Außerdem danke ich meinen Bürokollegen Uwe Bauder und Felix Grimm für die angenehme Arbeitsatmosphäre und die Hilfsbereitschaft.

Schließlich sind auch meine Kolleginnen und Kollegen von der ONERA Alexis Andre und Nicolas Dellinger sowie vom EU Projekt SOPRANO Alexandre Bouaniche, Lucien Gallen und Livia Tardelli zu nennen, bei denen ich mich für die fachlichen Gespräche und gute Zusammenarbeit bedanke.

Schlussendlich möchte ich meiner Familie danken. Zunächst meiner Mutter und meinem Vater, die mich beim Erreichen meiner Ziele stets unterstützt haben. Vor allem aber bedanke ich mich bei meiner Frau Miriam, ohne deren Rückhalt diese Arbeit nicht möglich gewesen wäre.



# Inhaltsverzeichnis

<b>Abkürzungsverzeichnis</b>	<b>7</b>
<b>Kurzfassung</b>	<b>13</b>
<b>Abstract</b>	<b>15</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>17</b>
1.1 Ruß . . . . .	17
1.2 Simulation turbulenter, rußender Flammen . . . . .	18
1.3 DLR-Rußmodell . . . . .	19
1.4 Zielsetzung . . . . .	20
<b>2 Physikalische Grundlagen</b>	<b>23</b>
2.1 Verbrennungsmodellierung . . . . .	23
2.2 Grundgleichungen . . . . .	24
2.3 Turbulenz . . . . .	28
2.4 Numerische Lösung . . . . .	33
<b>3 Rußmodellierung</b>	<b>35</b>
3.1 PAH- und Rußmodelle . . . . .	35
3.2 Gasphasenchemie . . . . .	37
3.3 PAH-Chemie . . . . .	37
3.4 Rußchemie . . . . .	40
<b>4 Auswertemethoden</b>	<b>45</b>
4.1 Statistik . . . . .	45
4.2 Proper orthogonal decomposition . . . . .	50
4.3 Qualitätskriterien der LES . . . . .	56

## Inhaltsverzeichnis

---

<b>5</b>	<b>Abgehobene Freistrahlf Flamme</b>	<b>59</b>
5.1	Grundlagen . . . . .	59
5.2	Validierung . . . . .	61
5.3	Analyse der Rußevolution . . . . .	70
<b>6</b>	<b>Flammenhalterstabilisierte Strahlflamme</b>	<b>79</b>
6.1	Grundlagen . . . . .	80
6.2	Validierung . . . . .	83
<b>7</b>	<b>Modellbrennkammer</b>	<b>91</b>
7.1	Grundlagen . . . . .	92
7.2	Validierung . . . . .	96
7.3	Einfluss der Dynamiken des Strömungsfelds auf die Rußevolution . . . . .	107
<b>8</b>	<b>Synthese</b>	<b>123</b>
8.1	Statistische Analyse . . . . .	123
8.2	Partikelgrößenverteilung . . . . .	136
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>145</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>149</b>



# Abkürzungsverzeichnis

## Lateinische Symbole

$A$	Amplitude	
$A_a$	Präexponentieller Faktor der Arrhenius Funktion	mol, m <sup>3</sup> , s
$A_s$	Reduzierte Rußoberfläche	1/m
$BIN_i$	Allgemeine Sektion	-
$c_p$	Spezifische Wärmekapazität	J/(kg K)
$c_{th}$	Modellkonstante der Thermophorese	-
$c_{\sigma\phi}$	SSM-Konstante von $\phi$	-
$C_w$	WALE-Konstante	-
$d$	Durchmesser	mm
$d_c$	Kollisionsdurchmesser	nm
$d_g$	Gyrationsdurchmesser	nm
$d_p$	Primärpartikeldurchmesser	nm
$d_{p,agg}$	Kritischer Durchmesser	nm
$D_{i,t k}$	Binärer Indikator im Zustandsraum $k$	-
$D_\alpha$	Diffusionskoeffizient der Spezies $\alpha$	m <sup>2</sup> /s
$E_a$	Aktivierungsenergie der Arrhenius Funktion	J/mol
$E_{ges}$	Gesamtenergie aller POD-Moden	
$E_l$	Energie der Mode $l$	
$E(k)$	Energie pro Wellenzahl	m <sup>3</sup> /s <sup>2</sup>
$f$	Frequenz	Hz
$f_i$	Volumenkraft in Raumrichtung $i$	m/s <sup>2</sup>
$f_v$	Rußvolumenbruch	ppm
$f_{CDS}$	Grenzfrequenz des CDS-Verfahrens	Hz
$F$	Auftrittshäufigkeit- bzw. Frequenz eines statistischen Ereignisses	-
$FI$	Flammenindex	-
$g_{ij}$	Geschwindigkeitsgradiententensor	1/s
$G$	Räumlicher Filter	1/m <sup>3</sup>
$h$	Höhe	mm
$h$	Spezifische Enthalpie	J/kg
$i$	Einzelner Frequenzbereich der MODWPT	-
$j$	Zerlegungsfaktor der MODWPT	-
$j_{\alpha i}$	Diffusionsmassenfluss der Spezies $\alpha$ in Raumrichtung $i$	kg/(m <sup>2</sup> s)

## Abkürzungsverzeichnis

---

$k$	Wellenzahl	1/m
$k_{f,r}, k_{b,r}$	Geschwindigkeitskoeffizienten der Hin- bzw. Rückreaktion $r$	mol, m <sup>3</sup> , s
$k_{f,R}$	Reaktionsrate je reaktiver Stelle des Rußes mit Reaktant R	m <sup>3</sup> /s
$k(\phi_1, \phi_2)$	Teilzustandsraum in der $\phi_1$ - $\phi_2$ Dimension	-
$l$	Länge	mm
$L$	Anzahl der Filterkoeffizienten eines Wavelets	-
$\dot{m}$	Massenstrom	kg/s
$M$	Anzahl der Gitterpunkte	-
$Ma$	Mach-Zahl	-
$M_\alpha$	Molare Masse der Spezies $\alpha$	kg/mol
$n$	Exponentieller Faktor der Arrhenius Funktion	-
$n_p$	Anzahl der Primärpartikel pro Aggregat	-
$n_\alpha$	Parameter der Rußchemie	-
$N$	Zeitschritte im Simulationsdatensatz, Anzahl der POD-Moden	-
$N_a$	Avogadro-Konstante	$6,02 \cdot 10^{23}$ 1/mol
$N_{\text{bins}}$	Anzahl der Rußsektionen	-
$N_p$	Primärpartikeldichte	1/m <sup>3</sup>
$N_r$	Anzahl der Reaktionen	-
$N_s$	Rußpartikeldichte	-
$N_{\text{sp}}$	Anzahl der Spezies	-
$N_A$	Aggregatdichte	1/m <sup>3</sup>
$N_N$	Anzahl der Nachbarzellen	-
$N_\phi$	Anzahl der $\phi$ -Sektionen im Histogramm	-
OX	Allgemeiner Oxidator	-
$p$	Statischer Druck	N/m <sup>2</sup>
$P$	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion	-
$Pr$	Prandtl-Zahl	-
$P_t$	Thermische Leistung	kW
P	Allgemeines Reaktionsprodukt	-
PAH <sub><math>i</math></sub>	PAH Sektion	-
PAH <sub><math>i</math></sub> <sup>*</sup>	PAH-Radikal Sektion	-
PAH <sub><math>i</math></sub> <sup>(*)</sup>	PAH oder PAH-Radikal Sektion	-
$\dot{q}$	Wärmefreisetzung	W/m <sup>3</sup>
$q_i$	Wärmefluss in Raumrichtung $i$	J/(m <sup>2</sup> s)
$r$	Radius	mm
$r_{\text{pre}}$	Anteil der vorgemischten Verbrennung	-
$R_{i,j}$	Kreuzkorrelation	-
$R_m$	Universelle Gaskonstante	8,314 J/(mol K)
$R_r$	Reaktionsrate $R$ der Reaktion $r$	mol/(m <sup>3</sup> s)
R	Allgemeiner Reaktant	-
$\mathfrak{R}$	Spezifische Gaskonstante	J/(kg K)
$\mathcal{R}_{i,j}^*$	Normierte Zweipunktkorrelation der Geschwindigkeit	-
$S_{ij}^d$	Teilelement des quadrierten Geschwindigkeitsgradiententensors	1/s <sup>2</sup>

$s(\phi_1, \phi_2)$	Zustandsraum in der $\phi_1$ - $\phi_2$ Dimension	-
$Sc$	Schmidt-Zahl	-
$S_h$	Strahlungsquellterm	J/(m <sup>3</sup> s)
$S_{ij}$	Element des Scherratentensors	1/s
$S_\alpha$	Chemischer Quellterm der Spezies $\alpha$	kg/(m <sup>3</sup> s)
SOOT <sub><math>i</math></sub>	Rußsektion	-
$t$	Zeit	s
$t_0$	Nulldurchgang vom Negativen ins Positive	s
$t_{\text{res}}$	Aufenthaltszeit	s
$T$	Temperatur	K
$T_{\alpha, \text{max}}$	Parameter der Rußchemie	K
$u$	Axialgeschwindigkeit	m/s
$u_i$	Geschwindigkeit in Raumrichtung $i$	m/s
$u_{\text{mag}}$	Absolutgeschwindigkeit	m/s
$v$	Radialgeschwindigkeit	m/s
$V$	Volumen	m <sup>3</sup>
$w$	Tangentialgeschwindigkeit	m/s
$W$	Normierte Breite des Rußfelds	-
$x$	Axialrichtung	mm
$x_i$	Koordinate in Raumrichtung $i$	m
$x_M$	Skalierungsfaktor des Sektionalansatzes	-
$X_\alpha$	Molenbruch der Spezies $\alpha$	-
$y$	Radialrichtung	mm
$Y_\alpha$	Massenbruch der Spezies $\alpha$	-
$z$	Tangentialrichtung	mm
$Z$	Mischungsbruch	-
$Z_\alpha$	Elementmassenbruch	-

### Griechische Symbole

$\alpha$	Verstärkungsfaktor der Rußoberflächenreaktionen	-
$\beta_{i,j}$	Kollisionsfrequenz	m <sup>3</sup> /s
$\Delta$	Allgemeine Differenz	-
$\Delta\tau$	Phasenversatz	°
$\delta_{ij}$	Kronecker Delta	-
$\epsilon_\alpha^*$	Emissionskoeffizient der Spezies $\alpha$	1/m
$\gamma$	Stoßeffizienz	-
$\kappa$	Isentropenexponent	-
$\lambda$	Wärmeleitfähigkeit	J/(m s K)
$\lambda_l$	Eigenwert der Mode $l$	-
$\mu$	Dynamische Viskosität	N s/m <sup>2</sup>
$\nu', \nu''$	Stöchiometrikoeffizienten der Edukte bzw. Produkte	-
$\Phi$	Äquivalenzverhältnis	-
$\phi$	Allgemeine skalare Größe	-

## Abkürzungsverzeichnis

---

$\Phi_g$	Äquivalenzverhältnis der gesamten Modellbrennkammer	-
$\Phi_p$	Äquivalenzverhältnis des Primärinjektors der Modellbrennkammer	-
$\chi^*$	Dichte der reaktiven Stellen auf der Rußoberfläche	1/m <sup>2</sup>
$\chi_\alpha$	Stoffsymbol der Spezies $\alpha$	-
$\chi_{\text{agg}}$	Aggregationsfaktor	-
$\rho$	Dichte	kg/m <sup>3</sup>
$\sigma$	Stefan-Boltzmann-Konstante	$5,68 \cdot 10^{-8} \text{ W}/(\text{m}^2\text{K}^4)$
$\sigma(\phi)$	Standardabweichung von $\phi$	
$\sigma_\phi$	Feinstrukturvarianz von $\phi$	
$\tau_{ij}$	Element des Spannungstensors	N/m <sup>2</sup>
$\tau_{ij}^t$	Element des modellierten anisotropen Spannungstensors	N/m <sup>2</sup>
$\zeta$	Wichtungsfaktor der Testfilterung	-

### Indizes

$\phi_\alpha, \phi_\beta$	Speziesindizes
$\phi_{\text{BB}}$	Auf den Flammenhalter (bluff-body) bezogene Größe
$\phi_B$	Größe am Brennstoffeinlass
$\phi_f$	Filtername der MRPOD
$\phi_i, \phi_j, \phi_k$	Allgemeiner Laufindex
$\phi_l$	POD-Mode
$\phi_{\text{max}}$	Maximalwert einer Größe
$\phi_O$	Größe am Oxidatoreinlass
$\phi^o, \phi^u$	Größe auf der obere/untere Sektionsgrenze
$\phi_r$	Reaktionsindex
$\phi_{\text{RMS}}$	Quadratischer Mittelwert einer Größe
$\phi_s$	Rußbedingte Größe (engl. soot)
$\phi_{\text{st}}$	Größe bei Stöchiometriebedingung
$\phi^s$	Größe im Zustandsraum $s$
$\phi_t$	Turbulenzbedingte Größe
$\phi^T$	Transponierte Matrix/Vektor
$\phi_Z$	Auf Gitterzelle bezogene Größe

### Sonstige Zeichen

$[\chi_\alpha]$	Stoffmengenkonzentration der Spezies $\alpha$	mol/m <sup>3</sup>
$\bar{\phi}$	Mittelwert einer räumlich gefilterten Größe	
$\phi'''$	Schwankungsanteil einer räumlich gefilterten Größe	
$\tilde{\phi}$	Mittelwert einer Favre gemittelten Größe	
$\phi''$	Schwankungsanteil einer Favre gemittelten Größe	
$\langle \phi \rangle$	Zeitliches Mittel	
$\phi'$	Schwankungsanteil einer zeitlich gemittelten Größe	
$\hat{\phi}$	Variable im Zustandsraum	
$[\phi]$	Abrundung auf ganze Zahlen	
$\phi^*$	Normierte Größe	-

$\phi^+$	Normierte Größe der Wandgrenzschicht	-
$ \phi $	Absolutwert	
$\hat{\phi}$	Testgefilterte Variable	

### Abkürzungen

A1	Benzol
A4	Pyren
AFF	Abgehobene Freistrahlf Flamme
APDF	Angenommene PDF
BP	Betriebspunkt
CARS	Coherent Anti-Stokes Raman Scattering
CDS	Central Differencing Scheme
CFD	Computational Fluid Dynamics
DFT	Diskrete Fourier-Transformation
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt
DMD	Dynamic Mode Decomposition
DNS	Direkte Numerische Simulation
DWT	Diskrete Wavelettransformation
EPOD	Extended Proper Orthogonal Decomposition
FoV	Field of View
FRC	Finite-Raten Chemie
FSF	Flammenhalterstabilisierte Strahlflamme
HACA	H <sub>2</sub> -Abstraktion C <sub>2</sub> H <sub>2</sub> -Addition
IRZ	Inner Recirculation Zone
ISL	Inner Shear Layer
LDS	Leistungsdichtespektrum
LES	Large-Eddy Simulation
LII	Laser-Induced Incandescence
MBK	Modellbrennkammer
MODWPT	Maximum Overlap Descrete Wavelet Packet Transform
MRA	Multiresolution Analysis
MRPOD	Multiresolution Proper Orthogonal Decomposition
NFD	Niederfrequente Dynamiken
NR	Nicht-Reagierend
nTLAF	Non-Linear Extinction Regime Two-Line Atomic Fluorescence
OH-PLIF	OH Planar Laser-Induced Fluorescence
ORZ	Outer Recirculation Zone
OSL	Outer Shear Layer
PAH	Polycyclic Aromatic Hydrocarbon
PAH-PLIF	PAH Planar Laser-Induced Fluorescence
PCA	Principal Component Analysis
PDF	Probability Density Function
PIV	Particle Image Velocimetry

## Abkürzungsverzeichnis

---

POD	Proper Orthogonal Decomposition
PSD	Particle Size Distribution
PVC	Precessing Vortex Core
QUDS	Quadratic Upstream Differencing Scheme
RANS	Reynolds-averaged Navier-Stokes
RMS	Root Mean Square
RQL	Rich-Quench-Lean
SoC	Sum of Correlation
SSM	Scale-Similarity Method
SV-CARS	Shifted-vibrational Coherent Anti-Stokes Raman Scattering
SWZ	Singulärwertzerlegung
TCI	Turbulenz-Chemie-Interaktion
TiReLII	Time Resolved Laser-Induced Incandescence
TPDF	Transportgleichungs-PDF
URANS	Unsteady Reynolds-averaged Navier-Stokes
WALE	Wall-Adapting Local Eddy-Viscosity

### Vektoren und Matrizen

$a_l$	Vektor der zeitlichen Koeffizienten der Mode $l$
$\mathbf{x}$	Ortsvektor
$\mathbf{x}'$	Abstandsvektor
$\mathbf{B}$	Simulationsdatensatz einer Variable
$\mathbf{F}$	Filterungsmatrix
$\mathbf{V}$	Gewichtungsmatrix
$\mathbf{K}$	Kovarianzmatrix
$\mathbf{Y}$	Vektor der Speziesmassenbrüche
$\mathbf{Y}_s$	Vektor der Rußmassenbrüche
$\psi_l$	Eigenvektor der Mode $l$
$\tau$	Nulldurchgangsvektor
$\varphi_l^*$	Vektor der räumlichen Mode $l$
$\varphi_l$	Volumenskalierter Vektor der räumlichen Mode $l$
$\mathbf{\Lambda}$	Eigenwertdiagonalmatrix
$\mathbf{\Phi}$	Hauptkomponentenmatrix
$\mathbf{\Psi}$	Eigenvektormatrix
$\mathbf{\Sigma}$	Singulärwertmatrix

# Kurzfassung

Die vorliegende Arbeit untersucht die Rußevolution in drei turbulenten, rußenden, halb-technischen Ethylenflammen, die mit Hilfe von Grobstruktursimulation (LES, „large-eddy simulation“) und einem Finite-Raten Chemie (FRC) Verbrennungsmodell simuliert werden. Bei den Flammen handelt es sich um eine abgehobene Freistrahlfamme (AFF), eine flammenhalterstabilisierte Strahlflamme (FSF) und eine Modellbrennkammer (MBK) für Fluggasturbinen. Für die MBK werden drei Betriebspunkte betrachtet. Die Ziele dieser Arbeit sind die Durchführung der komplexen Simulationen und die ausführliche Analyse der Ergebnisse. Dadurch sollen Weiterentwicklungsmöglichkeiten für Rußmodelle für halb-technischen Flammen identifiziert und das generelle Verständnis der Rußevolution in solchen Flammen verbessert werden.

Ruß entsteht bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen mit lokalem Brennstoffüberschuss. Gelangt Ruß in die Umwelt, hat dies direkte, negative Folgen nicht zuletzt für den Menschen und das Klima. Die Rußemissionen des Luftverkehrs fördern beispielsweise die Kondensstreifenbildung und damit die Erderwärmung. Außerdem ist Ruß krebserregend. Die Vielzahl an negativen Folgen von Rußemissionen macht deren Reduktion unumgänglich. Auch aus technischer Sicht ist Ruß oft unerwünscht, da seine Präsenz zu Wärmeverlusten führt und ein Zeichen unvollständiger Verbrennung ist. Daher besteht ein hoher Bedarf an genauen Modellen zur Rußvorhersage in Flugtriebwerksbrennkammern. Mit ihrer Hilfe lässt sich die Rußevolution besser verstehen, was wiederum die Entwicklung schadstoffarmer Triebwerke erleichtert.

Aus chemischer Sicht ist die Rußevolution sehr komplex, da eine Vielzahl an Reaktionen, die in nicht-linearer Weise von Temperatur und Mischung abhängen, zur Rußbildung, -wachstum und -oxidation beitragen. Zudem ist die Rußbildung nicht vollständig verstanden. Daher ist die Rußmodellierung immer noch Gegenstand der Forschung. Das in dieser Arbeit genutzte Rußmodell wurde zuletzt von Eberle [70] weiterentwickelt und wird im Folgenden als „DLR-Rußmodell“ bezeichnet. Es handelt sich dabei um ein Sektionalmodell für die Rußvorhersage in Ethylenflammen, welches sehr detailliert und dadurch beim Einsatz in LES relativ teuer ist.

Um sinnvolle Weiterentwicklungsmöglichkeiten aufzuzeigen, führt diese Arbeit die Modellvalidierung des DLR-Rußmodells in turbulenten Flammen fort und vergleicht sie mit der bereits erfolgten Validierung in laminaren Flammen. Erstmals wird auch ein Vergleich der Partikelgrößenverteilung (PSD, „particle size distribution“) zwischen verschiedenen laminaren und turbulenten Flammen gezeigt. Zum besseren Verständnis der Rußevolution werden die sehr umfangreichen, zeitaufgelösten Ergebnisdatensätzen der fünf LES, je nach Qualität der Rußvorhersage, ausführlich analysiert. Die Rußvorhersage in der AFF ist exzellent, was eine Untersuchung zum Einfluss der Vormischung auf die Rußevolution ermöglicht. In der MBK werden Rußbildung und -wachstum vom DLR-Rußmodell

sehr gut wiedergegeben, was eine Analyse der Rußdynamik unter Berücksichtigung des Einflusses verschiedener Betriebsbedingungen erlaubt. Die Form der Rußverteilung in der FSF wird vom DLR-Rußmodell zwar gut vorhergesagt, die Rußkonzentration aber deutlich überschätzt. Daher ergänzt die FSF vor allem den Vergleich zwischen laminaren und turbulenten Flammen, während eine Analyse lediglich die PSD betrachtet.

Diese Arbeit verdeutlicht, dass die Rußevolution in turbulenten Flammen, insbesondere in der MBK, bei höheren Temperaturen und über einen breiteren Mischungsbereich stattfindet, als in den laminaren Flammen, die typischerweise zur Validierung von Rußmodellen genutzt werden. Daraus folgt, dass alle Rußmodelle die in turbulenten Flammen eingesetzt werden sollen, auch unter solchen Bedingungen validiert werden müssen. Dies kann beispielsweise durch das vermehrte Einbeziehen von Stoßrohrexperimenten geschehen. Außerdem unterstreichen die durchgeführten Auswertungen den Bedarf an geeigneten Experimenten zur Validierung der Rußoxidation durch das OH-Radikal. Des Weiteren zeigt die Analyse die Vorteile auf, die eine Modellvalidierung an verlässlichen korrelierten Messungen und an Messungen der PSD bieten würden. Eindeutiges Verbesserungspotenzial besteht in der Modellierung der nicht-aufgelösten Turbulenz-Ruß-Interaktion. Auch für das DLR-Rußmodell beleuchtet diese Arbeit Möglichkeiten zur Optimierung. Allerdings wird das Hinzufügen neuer Teilmodelle, wie einem Rußalterungsmodell, nicht empfohlen, da der Nutzen den gesteigerten Rechenzeitbedarf nicht rechtfertigt.

Die Analyse der AFF zeigt, dass das Abheben der Flamme zu einer Vormischung von Brennstoff und Oxidator führt und Rußbildung und -wachstum dadurch hauptsächlich im vorgemischten Verbrennungsregime stattfinden. Der Vergleich der PSDs offenbart große Unterschiede zwischen den untersuchten Flammen. Effiziente Rußmodelle, die zukünftig zur Anwendung in technischen Flammen entwickelt werden, sollten daher in der Lage sein, den Einfluss der PSD-Form und der Vormischung auf die Rußevolution abzubilden. Die erstmalige, quantitative Analyse von Rußdynamiken mittels „multiresolution proper orthogonal decomposition“ (MRPOD) ermöglicht es, die intermittente Rußevolution in der MBK zu verstehen. Sie wird in allen untersuchten Betriebspunkten von einer symmetrischen, niederfrequenten Dynamik im Mischungsbruchfeld nahe des Injektors verursacht, die wiederum durch Dynamiken im Strömungsfeld beeinflusst wird. Die Sekundärlufteinblasung der MBK erhöht die Intensität der Intermittenz, während eine erhöhte Brennstoffzufuhr die Amplitude der Intermittenz verringert. Zwar lässt diese Analyse wegen des speziellen Designs der MBK nur wenig Rückschlüsse auf die Rußevolution in realen Flugtriebwerksbrennkammern zu, allerdings kann die entwickelte Vorgehensweise ohne weitere Anpassungen auf Simulationen solcher Brennkammern übertragen werden.



# Abstract

This work investigates the soot evolution in three turbulent, semi-technical ethylene flames that are simulated by means of large eddy simulation (LES) and a finite-rate chemistry combustion model: A lifted jet-flame (LJF), a bluff-body jet-flame (BBJF) and an aero-engine model-combustor (AEMC) of which three operating points are investigated. The goal of this work is the conduction of the complex simulations and an extensive analysis of the results. Thereby, possible improvements of soot models for semi-technical flames should be identified and the general understanding of the soot evolution in such flames should be improved.

Soot forms in locally fuel rich parts of hydrocarbon flames. Soot ending up in the environment adversely affects human health and the climate, amongst others. Air traffic soot emissions for example support contrail formation which in turn increases global warming. Furthermore, soot is carcinogenic. The variety of negative effects of soot emissions makes their reduction inevitable. From a technical point of view soot is usually undesirable too, since its presence leads to heat losses and is a sign of incomplete combustion. Thus, there is a great demand for models to predict soot in aero-engine combustors. They help to improve the understanding of the soot evolution, which in turn facilitates the development of low emission aero-engines.

From a chemical perspective, soot evolution is very complex since many reactions are involved in soot formation, growth and oxidation that depend on temperature and mixture in a non-linear manner. Moreover, some processes like the soot formation are not completely understood and soot modeling as such is still a topic of research. The soot model used in this work was last improved by Eberle [70] and is subsequently called 'DLR soot model'. It is a sectional model for soot prediction in ethylene flames that is very comprehensive and thereby comparatively expensive for the application in LES.

In order to identify possible model improvements, this work continues the validation of the DLR soot model in turbulent flames and performs a comparison to previously conducted validations in laminar flames. For the first time, a comparison of the particle size distribution (PSD) is shown between different turbulent and laminar flames. Furthermore, the comprehensive, time resolve data sets of the five LES are analyzed, depending on the soot prediction quality. This helps to improve the understanding of soot evolution. The soot prediction in the LJF is excellent which allows to investigate the effect of premixing on the soot evolution. Soot formation and growth in the AEMC is well predicted by the DLR soot model which allows to analyze soot dynamics with regards to different operating conditions. Even though the shape of the soot distribution in the BBJF is predicted well, the soot concentration is clearly overestimated. Hence, this flame is only involved in the analysis of the PSD and supports the comparison of laminar and turbulent flames.

## Abstract

---

This work shows that soot evolution in turbulent flames, particularly in the AEMC, happens at higher temperatures and over a broader range of mixture states than in the laminar validation flames. Consequently, all soot models applied in turbulent flame simulations must be validated under such conditions, for example by including shock tube experiments. Moreover, the conducted evaluations underline the need for appropriate experiments to validate soot oxidation by the OH radical. In addition, the analysis reveals the benefit which could be achieved by soot model validation with reliable correlated measurements and measurements of PSDs. A clear potential for further improvement exists in the modeling of the unresolved turbulence soot interaction. The current analysis also shows prospects to optimize the DLR soot model in particular. However, the inclusion of further sub models, like a soot aging model is not recommended, since the benefit does not justify the increase in computational time.

The analysis of the LJF shows that flame lift-off leads to premixing of fuel and oxidizer which makes soot formation and growth happening predominantly in the premixed regime. The comparison of PSDs illustrates strong differences between the investigated flames. Hence, efficient soot models, which are developed for a future application in technical flames, should be able to include the effect of premixing and the different PSD shapes on the soot evolution. For the first time, soot dynamics have been analyzed quantitatively by means of multiresolution proper orthogonal decomposition, which allowed to understand the intermittent soot evolution in the AEMC. The soot intermittence is caused by a symmetric low frequency mixture fraction mode close to the injector, which in turn is affected by flow field dynamics. Secondary air injection increases the intensity of the intermittence, while an increased fuel mass flow decreases the amplitude of the intermittence. Few conclusions can be made on soot evolution in real aero-engine combustors due to the unusual design of the AEMC. However, the analysis procedure that has been developed within this work, can be applied to other simulations of such combustors without adjustments.

# 1 Einleitung

## 1.1 Ruß

Rußpartikel sind große, dunkle Verbände von Molekülen, die bei der Verbrennung von Kohlenwasserstoffen mit lokalem Brennstoffüberschuss entstehen. Im Alltag begegnet uns Ruß als Verbrennungsprodukt zum Beispiel in Kerzen, Holzöfen und Motorabgasen [212]. Allerdings findet sich Industrieruß auch als Materialbestandteil beispielsweise in Tinte und Autoreifen [63]. Gelangt Ruß in die Umwelt, hat das überwiegend negative Folgen. Für Menschen stellt Ruß ein generelles Gesundheitsrisiko dar [124] indem er Haut- und Lungenkrebs fördert [115]. Außerdem verursacht Ruß, wie jede andere Art Feinstaub, Entzündungen der Haut [56]. Ein Hauptbestandteil von Ruß sind dessen Vorläufer, die polyzyklischen aromatischen Kohlenwasserstoffe (PAHs, „polycyclic aromatic hydrocarbons“). Auch sie wirken erwiesenermaßen krebserregend [162]. Neben seinem Einfluss auf die menschliche Gesundheit beeinträchtigt Ruß, der in die Atmosphäre gelangt, das Klima. Rußemissionen des Luftverkehrs tragen in vielerlei Hinsicht zur globalen Erwärmung bei. So fördern Rußpartikel als Kondensationskeime die Bildung von Kondensstreifen aus denen wiederum Zirruswolken entstehen können [120]. Diese absorbieren Strahlung und beeinflussen den Temperaturhaushalt der Erde [213, 214, 246]. Ihre Klimawirkung ist sogar höher als die des vom Luftverkehr emittierten Kohlenstoffdioxids [139]. Eine Reduzierung der Rußemissionen würde also die Kondensstreifenbildung abmildern [32, 251] und die negativen Auswirkungen des Luftverkehrs auf das Klima reduzieren. Lagert sich der emittierte, dunkle Ruß auf Eisflächen wie Gletschern und insbesondere den Polkappen ab, erhöht er die Strahlungsabsorption und fördert so das Abschmelzen des Eises [43, 47]. Auch aus technischer Sicht stellt Rußpräsenz in Verbrennungsprozessen meist ein Problem dar. So führt die starke thermische Strahlung des Rußes zu einem Abkühlen der Flamme und einem Aufheizen der umliegenden Bauteile. Dies reduziert den Wirkungsgrad und erhöht die Materialbelastung [255].

Die Vielzahl an negativen Eigenschaften macht die Reduktion von Rußemissionen in Verkehr und Industrie unumgänglich. Im Automobilverkehr spielen lokal rußemissionsfreie Energieträger wie Wasserstoff und vor allem Batterien eine immer größere Rolle [30]. Ihre geringe Energiedichte verhindert bisher den Einsatz in der kommerziellen Luftfahrt. Verkehrsflugzeuge mit Wasserstoffantrieb [134, 247] scheinen nicht wirtschaftlich, jedoch technologisch machbar, wohingegen elektrische Antriebe weiter von der Marktreife entfernt sind [203]. Um kommende Abgasregularien [116] zu erfüllen, werden daher technische Weiterentwicklungen, wie beispielsweise die magere Vormischbrennkammer, nötig sein. Lassen die wirtschaftlichen und gesetzlichen Rahmenbedingungen den Einsatz regenerativ erzeugter Treibstoffe zu, können auch einige dieser Treibstoffe zu einer Reduktion der Rußemissionen beitragen, da ihre Rußneigung oft geringer als die von Kerosin ist [194]. Es werden also auch

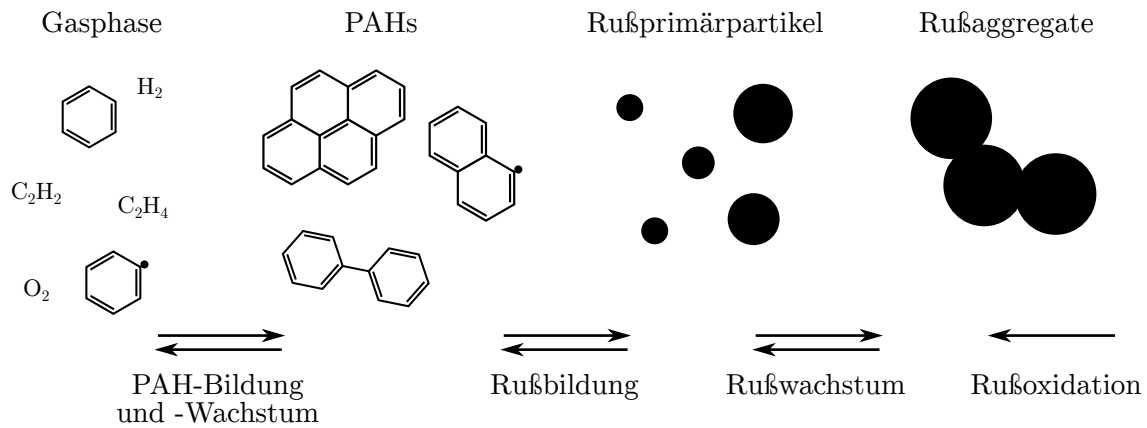
in den nächsten Jahrzehnten flüssige, kohlenwasserstoffbasierte Kraftstoffe zum Einsatz kommen, die generell zur Rußbildung neigen. Deshalb bleiben niedrige Rußemissionen bei der Entwicklung neuer Triebwerksbrennkammern auch weiterhin ein wichtiges Entwicklungsziel. Die stetig gestiegene Leistung von Computern hat dazu geführt, dass numerische Strömungsmechanik (CFD, „computational fluid dynamics“) nicht nur im Entwicklungsprozess von Flugzeugen [229] sondern auch von Triebwerksbrennkammern eine immer größere Rolle spielt [75]. Mit ihrer Hilfe kann das Verständnis der Rußevolution in der Brennkammer verbessert werden, wodurch Maßnahmen zur Rußreduktion getroffen werden können. Allerdings ist die Simulation solch turbulenter, rußender Flammen mit erheblichen Unsicherheiten verbunden, weshalb der Bedarf an geeigneten Modellen zur Rußvorhersage groß ist.

### 1.2 Simulation turbulenter, rußender Flammen

Turbulenz, wie sie in fast allen technischen Anwendungen auftritt, erschwert die Beschreibung strömungsmechanischer Vorgänge erheblich. Die Simulation aller turbulenten Wirbel bis hin zur kleinsten Größenskala wird direkte numerische Simulation (DNS) genannt. DNS bringt einen immensen Rechenaufwand mit sich, weshalb solche Simulationen bisher auf Laborbedingungen beschränkt sind. Dagegen ist der Rechenaufwand von „Reynolds-averaged Navier-Stokes“ (RANS) Simulationen, bei denen die gesamte Turbulenz modelliert wird, wesentlich geringer. Im Gegenzug steigern die Turbulenzmodelle die Unsicherheiten der Simulation. Wird ein Teil der Turbulenz aufgelöst und nur der Einfluss der unaufgelösten Turbulenz auf das Strömungsfeld modelliert, spricht man von Grobstruktursimulation (LES, „large-eddy simulation“) [227]. Zwar ist diese Methode immer noch vergleichsweise teuer, sie verringert die Unsicherheiten in der Turbulenzmodellierung jedoch deutlich. Deshalb kommt LES bei der Simulation turbulenter, rußender Flammen immer häufiger zur Anwendung (z.B. [5, 73]).

Die CFD von Verbrennungsprozessen und insbesondere die Simulation der Rußbildung sind sehr aufwändig und mit großen Unsicherheiten behaftet. Dies liegt daran, dass eine Vielzahl von chemischen Spezies und eine noch größere Anzahl an nicht-linearen Reaktionen nötig sind, um die Verbrennungschemie zu beschreiben, an deren Ende die Rußbildung steht. Abbildung 1.1 veranschaulicht diese Prozesse und gibt einen groben Überblick über die Bildung und Evolution eines Rußpartikels. Ruß wird in brennstoffreichen Flammenzonen durch das Anwachsen von PAHs gebildet. Rußpartikel wachsen durch Adsorption von Gasphasenmolekülen oder durch Kollisionen mit anderen Rußpartikeln. Dadurch bilden sich aus den erst kleinen und runden Partikel große, zusammenhängende Verbände, die sogenannten Aggregate. Oxidation führt schließlich zum Abbau der Rußpartikel. Die Modellierung dieser komplexen Prozesse lässt sich stark vereinfachen, weshalb eine Vielzahl unterschiedlicher Rußmodelle existiert, die sich in Rechenaufwand und Genauigkeit deutlich unterscheiden. In Kapitel 3 werden deshalb gängige Bildungs- und Evolutionsmodelle beschrieben und das in dieser Arbeit verwendete Gasphasenmodell, sowie das sektionale PAH- und Rußmodell eingeordnet.

Neben der Tatsache, dass einzelne Prozesse, wie die Rußbildung, teilweise unverstanden sind [86, 156], liegt die Herausforderung in der Rußmodellierung an der Vielzahl der beteiligten Spezies und deren unterschiedlichen Eigenschaften. Gerade für die PAHs, also die wichtigste Rußvorläuferspe-



**Abbildung 1.1:** Schematische Darstellung der Rußbildung und -evolution [22, 161].

zies, existieren kaum experimentelle Daten, um deren Modellierung validieren zu können. Folglich werden Rußmodelle meist anhand von integralen Größen wie dem Rußvolumenbruch indirekt validiert. Die Vielzahl der nicht-validierbaren Untermodelle werden dann im Rahmen der bekannten Unsicherheiten angepasst. Diese Validierung als Ganzes erschwert die Identifikation von einzelnen Modellfehlern oder fehlender Teilmodelle erheblich. Um ein möglichst verlässliches Rußmodell zu entwickeln, ist es daher notwendig, das Modell an so vielen Validierungsfällen wie möglich zu testen. Ein Rußmodell zur CFD-Anwendung ist also eine starke Vereinfachung der Realität, bei dessen Entwicklung ein ständiger Konflikt zwischen der möglichst weitreichenden Abbildung der chemischen und physikalischen Phänomene, deren Unsicherheiten und den Rechenkosten des Modells herrscht.

### 1.3 DLR-Rußmodell

Die Anfänge der Rußmodellierung zur Anwendung in technischen Brennkammern am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) gehen auf di Domenico [59] zurück. Das Ziel war stets die Entwicklung eines Rußmodells für Fluggasturbinenbrennkammern in Verbindung mit einem Finite-Raten Chemie (FRC) Verbrennungsmodell. So können die Modelle für Verbrennung und Rußevolution gekoppelt gelöst werden und die Interaktion zwischen den Modellen korrekt dargestellt sowie die Massen- und Elementerhaltung gewährleistet werden. Diese Modellierung wurde von Nold [175] übernommen, um Grundlagenuntersuchungen zur Turbulenz-Ruß-Interaktion durchzuführen. Die dreiteilige Modellierung von Gasphase, PAH und Ruß wurde von Blacha [18] so weiterentwickelt, dass PAHs und Ruß jeweils mit Sektionalmodellen beschrieben werden können. Steinbach [230] optimierte das Modell für Kerosin-Treibstoffe, während Eberle [70] das Modell für den Brennstoff Ethylen weiterentwickelte. Ethylenflammen werden in der Validierung von Rußmodellen vorzugsweise genutzt, da der gasförmige Brennstoff weniger Modellunsicherheiten mit sich bringt als das flüssige Kerosin. Eberle [70] erweiterte das sektionale PAH-Modell um PAH-Radikale, mit dem Ziel die langsame PAH-Chemie und deren Temperaturabhängigkeit besser abbilden zu können. Außerdem berücksichtigt das Modell nun Rußaggregate. Es wird in dieser Arbeit unter dem Namen „DLR-Rußmodell“ verwendet.

Das DLR-Rußmodell wurde an einer Vielzahl von laminaren Flammen validiert, ohne dass eine separate Parameteroptimierung notwendig war. So konnten für Stoßrohrexperimente und vorgemischte,

teil-vorgemischte und nicht-vorgemischte Flammen zufriedenstellende bis sehr gute Resultate erzielt werden. Die Rußevolution in einer abgehobenen Freistrahlf Flamme (AFF) [131] konnte in einer LES durch das DLR-Rußmodell ebenfalls exzellent wiedergegeben werden [74]. Die LES einer Modellbrennkammer (MBK) für Fluggasturbinen [93] ergab eine sehr gute Rußvorhersage nahe des Injektors und eine signifikante Abweichung von den Messwerten stromab [73]. Das DLR-Rußmodell ist also einerseits sehr ausgereift und in der Lage die Rußevolution in halb-technischen, turbulenten, rußenden Flammen vorherzusagen, andererseits weist es auch durchaus noch Schwächen auf.

Da das DLR-Rußmodell bereits zu den rechenzeitintensivsten Modellen für den Einsatz in LES zählt, muss dessen Weiterentwicklung durch den konkreten Bedarf eines neuen Teilmodells oder einer erneuten Parameteranpassung gerechtfertigt sein. Trotz der Abweichungen zwischen gemessenem Ruß und der Rußvorhersage des DLR-Rußmodells in Teilen der MBK, konnte dieser Bedarf nicht eindeutig festgestellt werden. Daher fehlt die Evidenz für konkrete Weiterentwicklungen, wie beispielsweise das Berücksichtigen des thermischen Rußalters. Somit ist nun eine gründliche, vergleichende Analyse der bestehenden Validierungsfälle notwendig, um potenziell lohnende Weiterentwicklungen zu identifizieren. Die Einblicke, die ein solch umfassender Vergleich in die Rußevolution verschiedener Flammen bietet, sind nicht nur für das DLR-Rußmodell relevant. Daher kann die Analyse auch generelle Empfehlungen für die Rußmodellentwicklung zum Einsatz in turbulenten Flammen geben.

Zunächst sollte allerdings die Aussagekraft der Simulationen durch das Einbeziehen genauerer Randbedingungen und durch eine längere physikalische Simulationsdauer erhöht werden. Wegen des rechenzeitintensiven Rußmodells ist die Durchführung der an sich schon komplexen LES sehr aufwändig. Es erscheint außerdem sinnvoll, einen weiteren turbulenten Testfall zu untersuchen, der in der Komplexität zwischen der AFF, in der das DLR-Rußmodell exzellente Ergebnisse liefert, und der MBK steht. Dies trifft auf die rußende, flammenhalterstabilisierte Strahlflamme (FSF) [165, 199] zu, die im Gegensatz zur MBK keine kohärenten Dynamiken im Strömungsfeld und keinen erhöhten Druck aufweist, aber immer noch ein ausgeprägtes Rückströmgebiet besitzt. Dank der allgemein guten Rußvorhersage des DLR-Rußmodells kann die einzigartige Kombination aus hochwertigen Modellen für Strömungs-, Verbrennungs- und Rußmodellierung dazu genutzt werden, die Rußevolution in halb-technischen Flammen besser zu verstehen und damit die Entwicklung besserer Rußmodelle und rußärmerer Triebwerksbrennkammern zu unterstützen.

### 1.4 Zielsetzung

Basierend auf den beschriebenen Stärken und Schwächen des DLR-Rußmodells [70] liegt das Hauptaugenmerk dieser Arbeit auf profunden Analysen turbulenter, rußender Flammen und der Durchführung der dazu benötigten, jedoch sehr komplexen LES. Die Analysen dienen dazu, das Verständnis der Rußevolution in diesen turbulenten, halb-technischen Flammen zu verbessern. Außerdem werden die Analysen dazu genutzt, relevante Verbesserungsmöglichkeiten für Rußmodelle im Allgemeinen und für das DLR-Rußmodell im Speziellen aufzuzeigen. Insgesamt sollen folgende Ziele umgesetzt werden:

- Die Aussagekraft bestehender, turbulenter Validierungsfälle soll verbessert werden. Dazu ist es nötig die statistische Konvergenz der jeweiligen LES zu erhöhen und neue Informationen über die Randbedingungen in der MBK zu berücksichtigen.

- Die Modellvalidierung soll um eine rußende, turbulente, halb-technische Validierungsflamme erweitert werden, die Rußevolution im Rezirkulationsgebiet beinhaltet, jedoch nicht die Komplexität der MBK aufweist. Diese Bedingungen werden von FSF erfüllt. Auch hier soll LES zum Einsatz kommen.
- Die bestehende Modellvalidierung für laminare Flammen soll mit den tatsächlichen Bedingungen in turbulenten, halb-technischen Flammen verglichen werden. Der Vergleich dient dazu, das Verständnis über Modellunsicherheiten zu verbessern und Weiterentwicklungsmöglichkeiten aufzuzeigen.
- Die sehr detaillierte Verbrennungs- und Rußmodellierung des DLR-Rußmodells soll zur Analyse der Rußevolution in turbulenten halb-technischen Flammen genutzt werden. Da die Rußevolution, vor allem in der MBK, auch durch kohärente und inkohärente Dynamiken bestimmt wird, muss eine geeignete Auswertemethode angewandt werden.
- Der Einfluss der Betriebsbedingungen der MBK auf die Rußevolution soll untersucht werden. Das Ziel ist es, den Einfluss der Betriebsbedingungen auf die Rußdynamik zu verstehen und falls möglich Handlungsempfehlungen zur Auslegung von technischen Brennkammern abzuleiten.

Die Arbeit baut sich deshalb wie folgt auf: Nach der Einführung zur Modellierung von Strömung, Turbulenz und Verbrennung in Kapitel 2 und zur Modellierung von Rußvorläufern und Ruß in Kapitel 3 folgt eine Beschreibung der Auswertemethoden in Kapitel 4. Die drei turbulenten, halb-technischen Validierungsflammen werden in Kapitel 5 bis 7 vorgestellt, validiert und die Rußevolution im Falle einer guten Rußvorhersage analysiert. In Kapitel 8 folgt eine Einordnung der laminaren und turbulenten Validierungsfälle des DLR-Rußmodells und ein Vergleich der drei in dieser Arbeit behandelten turbulenten Validierungsfälle. Anschließend werden die Ergebnisse der Arbeit in Kapitel 9 zusammengefasst und ein Ausblick auf weiterführende Forschungsthemen gegeben.





## 2 Physikalische Grundlagen

Das Rußmodell steht am Ende einer langen Kette von Modellen, die zur Vorhersage von Strömung und Verbrennung notwendig sind. Gerade das Verbrennungsmodell kann einen maßgeblichen Einfluss auf die Rußvorhersagequalität der numerischen Simulation haben, weshalb zunächst eine Einordnung des in dieser Arbeit verwendeten FRC-Modells erfolgt. Anschließend werden die sich dadurch ergebenden Grundgleichungen und die erforderlichen Teilmodelle zur Beschreibung eines reagierenden Fluids eingeführt. Schließlich folgt die Erweiterung für turbulente Strömungen und deren Berechnung durch LES, sowie die Modellierung der strömungsmechanischen und thermochemischen Feinstruktur. Da das Kapitel sich auf die in dieser Arbeit verwendeten Modelle beschränkt, wird der interessierte Leser auf weiterführende Literatur zu Verbrennungssimulation (z.B. [98]), zur numerischen Behandlung inkompressibler Strömungen (z.B. [80]) und zu LES (z.B. [89]) verwiesen.

### 2.1 Verbrennungsmodellierung

Neben Brennstoff, Oxidator und Verbrennungsprodukten wie Wasser und Kohlenstoffdioxid sind an der Verbrennung viele weitere Spezies, wie beispielsweise Radikale oder Schadstoffe beteiligt. Die kinetischen Mechanismen, die den Verbrennungsprozess so exakt wie möglich modellieren, können deshalb hunderte Spezies und tausende Reaktionen beinhalten. Für den Einsatz in der numerischen Simulation technischer Flammen sind diese Mechanismen zu teuer, da sie durch ihre Größe zu viel Rechenzeit beanspruchen. Deshalb kommen Verbrennungsmodelle zum Einsatz. Diese lassen sich unter anderem danach unterteilen, ob sie die Verbrennung mit einem reduzierten Teil des originalen Mechanismus beschreiben oder ob sie integrale Größen wie beispielsweise den Mischungsbruch nutzen, um den Verbrennungsprozess zu abstrahieren. Zu letztgenannter Gruppe zählen das „flame-sheet-Modell“ [31], alle auf dem „Flamelet“-Ansatz [181] basierenden Modelle und auch abstraktere, niederdimensionale Modelle (z.B. [236]). Sie alle verwenden Tabellen, um von den simulierten Größen auf die chemische Zusammensetzung zurückzuschließen. Daher sind sie sehr effizient, aber weniger allgemeingültig. So sind bei vielen dieser Modelle ausgeklügelte Erweiterungen erforderlich, um Effekte wie Wärmeverluste [117], Speziesdiffusion [182] und Wechselwirkungen zwischen Ruß und Gasphase abzudecken [168]. Zwar konnten solche Modelle in vielen Arbeiten zur Rußvorhersage angewandt werden (z.B. [35, 128, 168, 183, 197]), allerdings kann gerade zur Beschreibung der hochgradig nicht-linearen Mechanismen der Rußbildung ein detaillierteres Modell von Vorteil sein [110]. Solche Modelle beschreiben die Verbrennung mit einem reduzierten Mechanismus und berücksichtigen den Transport einzelner chemischer Spezies statt integraler Größen. Deren Quellterme können wiederum tabelliert werden, um Rechenkosten zu sparen, wie zum Beispiel durch neuronale

Netze [21, 42] oder Tabellierung zur Laufzeit der Simulation [186]. Werden Quellterme der Speziestransportgleichungen ständig mit Hilfe des Reaktionsmechanismus neu berechnet, spricht man von Finite-Raten Chemie [98]. Diese ist zwar rechenzeitintensiv, wird aber nur durch die Qualität des Reaktionsmechanismus eingeschränkt und unterliegt keinen weiteren Modellannahmen. Daher eignet sie sich hervorragend zur Rußmodellierung (z.B. [19, 53, 60, 141, 216, 264]), weshalb auch das DLR-Rußmodell auf FRC basiert.

### 2.2 Grundgleichungen

In dieser Arbeit werden reagierende Strömungen im Kontinuumsregime betrachtet. Das bedeutet, dass sich benachbarte Moleküle ähnlich verhalten und eine Betrachtung der einzelnen Moleküle daher nicht notwendig ist. Stattdessen können Erhaltungs- und Transportgleichungen formuliert werden, die das Verhalten einer reagierenden Strömung in diskreten Volumenelementen beschreiben. Diese bilden ein System gekoppelter, partieller Differentialgleichungen bestehend aus

#### Massenerhaltung

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

#### Impulserhaltung

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

#### Energieerhaltung

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho h) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i h) = -\frac{\partial q_i}{\partial x_i} + \rho u_i f_i + S_h, \quad (2.3)$$

#### Speziestransport

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho Y_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\rho u_i Y_\alpha) = -\frac{\partial j_{\alpha i}}{\partial x_i} + S_\alpha \quad (2.4)$$

mit  $i, j = 1, 2, 3$  und  $\alpha = 1, 2, \dots, N_{\text{sp}} - 1$ . In dieser Arbeit wird die einsteinschen Summenkonvention für die Indizes  $i, j, k$  genutzt. Die Terme auf der linken Seite der Erhaltungsgleichungen beschreiben die Änderung der Dichte  $\rho$ , der Geschwindigkeitskomponenten in die drei Raumrichtungen  $u_i$ , der spezifischen Enthalpie  $h$  und der Speziesmassenanteilen  $Y_\alpha$  nach der Zeit  $t$  und deren konvektiven Transport in die drei Raumrichtungen  $x_i$ . Die Terme der rechten Seite berücksichtigen Diffusion, Dissipation, Quellen  $S$  und externer Volumenkräfte  $f_i$ . Dabei beschreibt  $p$  den Druck,  $\tau_{ij}$  den Schubspannungstensor,  $q_i$  den Wärmestrom und  $j_{\alpha i}$  den Diffusionsmassenstrom einer Spezies. Abhängig von der Anzahl der betrachteten Spezies  $N_{\text{sp}}$  müssen also  $5 + N_{\text{sp}} - 1$  Transportgleichungen gelöst werden. Der Massenanteil der letzten Spezies ergibt sich aus der Normierungsbedingung:

$$Y_{N_{\text{sp}}} = 1 - \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}-1} Y_\alpha. \quad (2.5)$$

Folgende dimensionslose Kennzahlen sind für das weitere Verständnis nützlich:

- Mach-Zahl: Verhältnis zwischen Geschwindigkeit und Schallgeschwindigkeit:

$$Ma = \frac{\sqrt{u_i^2}}{\sqrt{\kappa \mathfrak{R} T}}, \quad (2.6)$$

- Prandtl-Zahl: Verhältnis zwischen diffusivem Impuls- und Wärmetransport:

$$Pr = \frac{\mu c_p}{\lambda}, \quad (2.7)$$

- Schmidt-Zahl: Verhältnis zwischen diffusivem Impuls- und Speziestransport:

$$Sc_\alpha = \frac{\mu}{\rho D_\alpha}. \quad (2.8)$$

Dabei bezeichnet  $\kappa$  den Isotropenexponent des Gasgemisches,  $\mathfrak{R}$  dessen spezifische Gaskonstante,  $T$  dessen Temperatur,  $\mu$  dessen dynamische Viskosität,  $c_p$  dessen spezifische Wärmekapazität,  $\lambda$  dessen Wärmeleitfähigkeit und  $D_\alpha$  den Diffusionskoeffizienten der Spezies  $\alpha$ . Mit Hilfe dieser Kennzahlen lassen sich die in den Grundgleichung getroffenen und im Folgenden beschriebenen Annahmen einordnen.

**Inkompressibilität:** Für niedrige Machzahlen ( $Ma < 0,3$ ), wie sie in dieser Arbeit vorliegen, kann von einem inkompressiblen Fluid ausgegangen werden. Das bedeutet, dass Druckänderungen einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Dichte haben. Numerische Löser, die speziell für den Einsatz bei niedrigen Machzahlen entwickelt wurden, verwenden aus Stabilitätsgründen eine Druckkorrekturgleichung [40] statt der Massenerhaltungsgleichung (Gl. (2.1)). Auch der in dieser Arbeit verwendete numerische Löser funktioniert nach diesem Prinzip. Kompressible Phänomene wie Akustik können dadurch nicht abgebildet werden und der Anteil der kinetischen Energie an der Gesamtenergie, wie auch der Energieeintrag durch Reibung im Fluid, bleiben unberücksichtigt. Dies ermöglicht es, die Energieerhaltung mit Hilfe der spezifischen Enthalpie zu beschreiben. Diese bleibt durch chemische Quellen und Senken unbeeinflusst, wenn ihre Definition die Bildungsenthalpie enthält. Der entscheidende Vorteil einer inkompressiblen Betrachtung des Fluids liegt darin, dass inkompressible Probleme deutlich effizienter berechnet werden können, da der Zeitschritt der Simulation nun von der lokalen Strömungsgeschwindigkeit abhängt. Im Gegensatz zur Schallgeschwindigkeit, die den Zeitschritt bei kompressiblen Simulationen bestimmt, ist diese in den betrachteten Geometrien um etwa eine Größenordnung geringer. Es sei angemerkt, dass der Simulationszeitschritt auch von den Zeitskalen der chemischen Reaktionen beschränkt wird.

**Spannungstensor  $\tau_{ij}$ :** Da in dieser Arbeit nur newtonsche Fluide betrachtet werden, ist  $\tau_{ij}$  linear vom Scherratentensor  $S_{ij}$  abhängig. Berücksichtigt man weiterhin, dass die Verbrennung eine veränderliche Dichte bedingt ( $\frac{\partial u_k}{\partial x_k} \neq 0$ ), lautet die Definition des Spannungstensors mit Hilfe des Kronecker Deltas  $\delta_{ij}$ :

$$\tau_{ij} = \mu \left( 2S_{ij} - \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \quad \text{mit} \quad S_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (2.9)$$

## 2 Physikalische Grundlagen

---

**Diffusiver Spezies- und Wärmetransport**  $j_{\alpha,i}$ ,  $q_i$ : Lokal variierende Speziesmassenanteile führen zu einem Diffusionsmassenstrom, der nach dem ersten Fickschen Gesetz proportional zu deren Gradienten modelliert wird:

$$j_{\alpha i} = -\rho D_{\alpha} \frac{\partial Y_{\alpha}}{\partial x_i}, \quad \alpha = \text{Gasphasenkomponente.} \quad (2.10)$$

Leichte Spezies diffundieren deutlich schneller als schwere Spezies, weshalb für jede Spezies ein von der lokalen Gaszusammensetzung abhängiger Diffusionskoeffizient  $D_{\alpha}$  berechnet wird. Da Verbrennungsvorgänge häufig diffusionsgetrieben sind und die Rußvorhersage stark von diesen Diffusionsprozessen beeinflusst wird [7, 135], ist die aufwändige Berechnung [59] dieses als differentielle Diffusion bezeichneten Ansatzes notwendig. Die Speziesdiffusion von Ruß wird auf Grund der hohen Schmidt-Zahlen vernachlässigt [70] und es gilt  $D_{\alpha=\text{Ruß}} = 0$ . Der diffusive Wärmetransport im Fluid

$$q_i = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x_i} + \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} h_{\alpha} j_{\alpha i} \quad (2.11)$$

wird durch Wärmeleitung und den diffusiven Massenstrom hervorgerufen. Diffusion kann nicht nur durch Unterschiede in der Zusammensetzung, sondern auch durch unterschiedliche Drücke und Temperaturen im Fluid auftreten. Während die Druckdiffusion bei den untersuchten Bedingungen keine Rolle spielt, kann die Thermodiffusion nur für die Gasphasenspezies vernachlässigt werden.

**Thermodiffusion des Rußes:** Moleküle mit einer höheren Temperatur haben eine höhere kinetische Energie als kältere Moleküle. Bei Kollisionen mit Rußpartikeln übertragen sie einen höheren Impuls auf die großen Rußpartikel, welche dadurch einen Nettoimpuls in Richtung des kälteren Fluids erfahren. Die Modellierung dieses allgemein als Thermodiffusion oder im Falle des Rußes als Thermophorese bezeichneten Diffusionsvorgangs erfolgt in Richtung des Temperaturgradienten. Wird molekulare Diffusion vernachlässigt, gilt für den Diffusionsmassenstrom von Ruß

$$j_{\alpha i} = -c_{\text{th}} \frac{\mu Y_{\alpha}}{T} \frac{\partial T}{\partial x_i}, \quad \alpha = \text{Ruß} \quad (2.12)$$

wobei  $c_{\text{th}} = 0,55$  eine Modellkonstante ist. Vor allem in laminaren Diffusionsflammen hat die Thermophorese einen signifikanten Einfluss. In turbulenten Flammen überwiegt jedoch der turbulente Transport [7]. Deshalb wird die Thermophorese, die ungünstige numerische Eigenschaften aufweist, hier in den turbulenten Flammen vernachlässigt.

**Strahlungsquellterm**  $S_h$ : Berücksichtigt man bei der Strahlung von Gasmolekülen nur die Emission und vernachlässigt die Absorption, ergibt sich der Strahlungsquellterm aus

$$S_h = -4\sigma T^4 \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} Y_{\alpha} \epsilon_{\alpha}^*(T). \quad (2.13)$$

Dabei ist  $\sigma$  die Stefan-Boltzmann Konstante und  $\epsilon_{\alpha}^*(T)$  der temperaturabhängige Emissionskoeffizient der betrachteten Spezies. Für Spezies der Gasphase besteht eine zusätzliche Abhängigkeit vom Partialdruck, für Ruß besteht eine zusätzliche Abhängigkeit von der Dichte. Die Definition von  $\epsilon_{\alpha}^*$  ist in [70] beschrieben. Unter Ausnutzung der stark unterschiedlichen Emissionskoeffizienten werden in dieser Arbeit nur  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{CO}_2$  und Ruß als Strahler berücksichtigt.

**Chemischer Quellterm  $S_\alpha$ :** Ein chemisch reagierendes Gas wird durch die darin enthaltenen Spezies  $\chi_\alpha$  und deren Reaktionen beschrieben. In dieser Arbeit wird Ethylen als Brennstoff verwendet, bei dessen Oxidation die Edukte Ethylen und Sauerstoff idealerweise zu den Produkten Wasser und Kohlenstoffdioxid reagieren:



Diese Gleichung wird als Globalreaktion bezeichnet, da die vielen einzelnen Elementarreaktionen die schlussendlich zur Bildung der Produkte führen, in einer Reaktion zusammengefasst sind. Jede beliebige Reaktion kann durch die allgemeine Reaktionsgleichung

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} \nu'_\alpha \chi_\alpha \rightleftharpoons \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} \nu''_\alpha \chi_\alpha \quad (2.15)$$

beschrieben werden, wobei  $\nu'$  und  $\nu''$  die Stöchiometrikoeffizienten der Edukte und Produkte bezeichnen. Elementarreaktionen laufen also in beide Richtungen ab, wobei die Reaktionsgeschwindigkeit der Hin- und Rückreaktion  $k_{f,r}$  und  $k_{b,r}$ , sowie die Spezieskonzentrationen darüber entscheiden, welche Richtung überwiegt. Die temperaturabhängige Reaktionsrate der Hinreaktion  $k_{f,r}$  wird mit der verallgemeinerten Arrhenius-Funktion

$$k_{f,r} = A_a T^n \exp\left(-\frac{E_a}{R_m T}\right) \quad (2.16)$$

beschrieben. Der präexponentielle Faktor  $A_a$ , der exponentielle Faktor  $n$ , die universelle Gaskonstante  $R_m$  und die Aktivierungsenergie  $E_a$  definieren deren Form. Die thermochemischen Eigenschaften der beteiligten Moleküle bestimmen dann  $k_{b,r}$ , wobei für Globalreaktionen  $k_{b,r} = 0$  gilt. Unter Vernachlässigung von Dreierstoßreaktionen lässt sich der chemische Quellterm wie folgt definieren:

$$S_\alpha = M_\alpha \sum_{r=1}^{N_r} (\nu''_{\alpha,r} - \nu'_{\alpha,r}) \underbrace{\left[ k_{f,r} \sum_{\beta=1}^{N_{\text{sp}}} [\chi_\beta]^{\nu'_{\beta,r}} - k_{b,r} \sum_{\beta=1}^{N_{\text{sp}}} [\chi_\beta]^{\nu''_{\beta,r}} \right]}_{R_r}. \quad (2.17)$$

Er beschreibt die Produktion oder den Abbau einer Spezies  $\alpha$  durch die Reaktionen  $N_r$  an denen  $\chi_\alpha$  beteiligt ist. Dabei bezeichnet  $M_\alpha$  die molare Masse und  $[\chi_\beta]$  die Konzentration der Spezies  $\beta$ . Der Term in eckigen Klammern beschreibt die Reaktionsrate  $R_r$ .

**Schließung des Gleichungssystems:** Damit das Gleichungssystem Gl. (2.1) bis (2.4) gelöst werden kann, müssen Temperatur und Dichte bestimmt werden. Nimmt man an, dass intermolekulare Kräfte, auch van der Waals Kräfte genannt, vernachlässigbar sind, kann von einem idealen Gas ausgegangen werden. Somit lässt sich die Temperatur über die Definition der spezifischen Enthalpie

$$h = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} Y_\alpha h_\alpha(T) \quad (2.18)$$

iterativ bestimmen, da  $h$ ,  $Y_\alpha$  und die Funktionen  $h_\alpha(T)$  bekannt sind. Die Dichte kann nun über

das ideale Gasgesetz berechnet werden:

$$\rho = \frac{p}{R_m T \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} \frac{Y_{\alpha}}{M_{\alpha}}}. \quad (2.19)$$

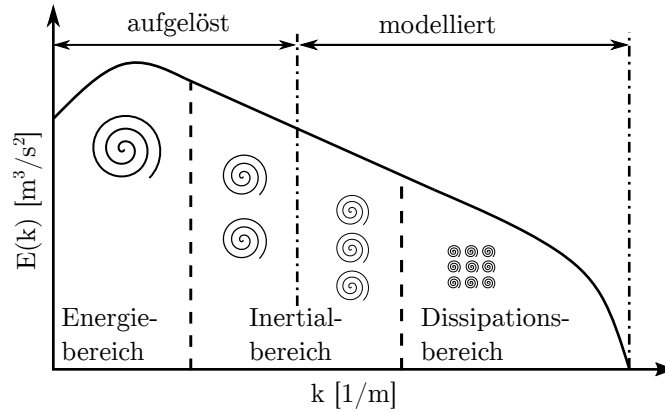
Auch die Größen  $\lambda$ ,  $c_p$ ,  $\mu$  sind abhängig von Temperatur und Gaszusammensetzung und werden zur Laufzeit der Simulation aus den thermochemischen Daten der Spezies berechnet.

### 2.3 Turbulenz

Übersteigt die Reynoldszahl einer Strömung einen kritischen Wert, wird die mittlere Fluidbewegung von chaotischen Wirbeln (engl. eddies) überlagert. Dies nennt man Turbulenz. Die Größe der turbulenten Wirbel erstreckt sich über mehrere Größenordnungen. Daher ist die Simulation aller turbulenten Strukturen mit DNS für praktische Anwendungen zu teuer, weshalb der Einfluss der Turbulenz auf die mittlere Fluidbewegung modelliert werden muss. Werden alle turbulenten Wirbel modelliert, spricht man von RANS-Simulationen. Dazwischen steht die LES, bei der die großen Wirbel in der Simulation aufgelöst und nur die feinen turbulenten Wirbel modelliert werden. Diese ist deutlich teurer als RANS-Simulationen, reduziert jedoch den Einfluss der oft ungenauen Turbulenzmodelle. Für die Simulation turbulenter, rußender Flammen hat sich die LES als sehr vorteilhaft erwiesen [73], weshalb sie auch in dieser Arbeit eingesetzt wird. Während der folgende Abschnitt nur die für diese Arbeit relevanten Aspekte der Turbulenz behandelt, kann eine umfangreiche Beschreibung der Literatur, beispielsweise Pope [189], entnommen werden.

#### 2.3.1 Grobstruktursimulation

Turbulente Wirbel lassen sich mit Hilfe ihrer Wellenzahl  $k$  und der Energie pro Wellenzahl  $E(k)$ , wie in Abb. 2.1 phänomenologisch gezeigt, einordnen. Sie entstehen durch Gradienten im Geschwindigkeitsfeld, sind damit geometrieabhängig und entziehen der mittleren Strömung kinetische Energie. Es handelt sich daher anfangs um große Wirbel mit kleinen Wellenzahlen und einer hohen Energie pro Wellenzahl, die im sogenannten Energiebereich eingeordnet werden können. Ihr anisotroper Charakter erschwert eine allgemeingültige Modellierung. Allerdings zerfallen die Wirbel in kleinere Wirbel, auf die sich die Energie verteilt. Kolmogorov [132] quantifizierte diesen Energietransfer im sogenannte Inertialbereich mit  $E(k) \sim k^{-5/3}$ . Schließlich sind die Wirbel so klein, dass deren kinetische Energie im sogenannten Dissipationsbereich durch Viskosität dissipiert wird. Im Gegensatz zu den großen Wirbeln, sind die kleinen Wirbel relativ homogen und isotrop, was eine Modellierung erleichtert. Deshalb werden bei der LES alle großen, schwer zu modellierenden Wirbel aufgelöst und alle kleinen Wirbel modelliert. Bei einer LES muss daher eine zeitgenaue Simulation auf einem hinreichend feinen, dreidimensionalen Gitter durchgeführt werden, was die höheren Kosten gegenüber stationären RANS und „unsteady Reynolds-averaged Navier-Stokes“ (URANS) Simulationen erklärt.



**Abbildung 2.1:** Schematische Darstellung der Energiekaskade mit der LES-spezifischen Unterteilung. Beide Achsen sind logarithmisch aufgetragen.

Für die LES wird eine allgemeine skalare Größe  $\phi$  in einen Anteil  $\bar{\phi}$ , der die großen Strukturen beschreibt und einen Schwankungsanteil  $\phi'''$ , der die kleinen Strukturen beschreibt, zerlegt:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi''' \quad (2.20)$$

Diese Zerlegung erreicht man durch eine räumliche Filterung

$$\bar{\phi}(\mathbf{x}, t) = \iiint G(\mathbf{x}') \phi(\mathbf{x}, \mathbf{x}', t) dV \quad (2.21)$$

über das Filtervolumen  $V$  mit der Filterfunktion  $G(\mathbf{x}')$ . Dabei ist  $\mathbf{x} = \{x_1, x_2, x_3\}$  der Ortsvektor eines Punkts im dreidimensionalen Raum, um den die gefilterte Variable vorliegt und  $\mathbf{x}'$  der Abstandsvektor zu diesem Punkt. Neben expliziten Filtern, wie beispielsweise einer Gaußfunktion, kann auch das Feinstrukturmodell oder das numerische Verfahren als Filter verwendet werden [89]. In dieser Arbeit entspricht das Filtervolumen dem jeweiligen Zellvolumen  $V_Z$  des numerischen Rechengitters und als Filter wird ein Rechteckfilter

$$G(\mathbf{x}') = \begin{cases} \frac{1}{l_Z^3}; & |\mathbf{x}'| \leq \frac{l_Z}{2} \\ 0; & \text{sonst} \end{cases} \quad (2.22)$$

verwendet. Es wird idealisiert von einer Zelllänge in eine Raumrichtung von

$$l_Z = \sqrt[3]{V_Z} \quad (2.23)$$

ausgegangen. Für LES-Turbulenzmodelle gilt die Bedingung, dass diese Wellenlänge im Inertialbereich liegen muss, was durch ein hinreichend feines Gitter erreicht wird. Weiterhin ist es bei Simulationen mit veränderlicher Dichte sinnvoll, eine Variable mit

$$\phi = \tilde{\phi} + \phi'' = \frac{\overline{\rho\phi}}{\bar{\rho}} + \phi'' \quad (2.24)$$

in einen Favre-gemittelten Anteil  $\tilde{\phi}$  und einen Schwankungsanteil  $\phi''$  zu zerlegen.

### 2.3.2 Gefilterte Grundgleichungen

Filtiert man die Erhaltungsgleichungen (Gl. (2.1) bis (2.4)) mit Gl. (2.21) und wendet die Mittelungen nach Gl. (2.20) und Gl. (2.24) an, so ergeben sich die gefilterten Gleichungen für

#### Massenerhaltung

$$\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) = 0, \quad (2.25)$$

#### Impulserhaltung

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{u}_i) + \frac{\partial}{\partial x_j} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{u}_j) + \frac{\partial}{\partial x_j} \bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \bar{p} f_i, \quad (2.26)$$

#### Energieerhaltung

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{h}) + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho} (\widetilde{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h}) = -\frac{\partial \bar{q}_i}{\partial x_i} + \bar{\rho} \tilde{u}_i f_i + \bar{S}_h, \quad (2.27)$$

#### Speziestransport

$$\frac{\partial}{\partial t} (\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i} (\bar{\rho} \tilde{u}_i \tilde{Y}_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{\rho} (\widetilde{u_i Y_\alpha} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_\alpha) = -\frac{\partial \bar{j}_{\alpha,i}}{\partial x_i} + \bar{S}_\alpha. \quad (2.28)$$

Durch die Filterung entstehen Momente höherer Ordnung, die zur Schließung des Gleichungssystems modelliert werden müssen. Sie lassen sich nach ihrem Einfluss auf die Strömungsmechanik und die Thermochemie klassifizieren. Der Einfluss höherer Momente auf alle thermochemischen Gaseigenschaften ( $\mu$ ,  $\lambda$ ,  $c_p$ ,  $h_\alpha$  und  $D_\alpha$ ) und die ideale Gasgleichung (Gl. (2.19)) werden vernachlässigt.

### 2.3.3 Strömungsmechanische Feinstrukturmodellierung

**Feinstrukturspannungen**  $\bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j)$ : Durch die Filterung enthalten die Feinstrukturspannungen nicht nur den Einfluss der nicht-aufgelösten Skalen auf die aufgelösten Skalen, sondern auch Terme, die die Wechselwirkung zwischen aufgelösten und nicht-aufgelösten Skalen (Kreuzterm) und das Produkt grober Skalen (Leonard-Term) beschreiben. Meist werden diese Terme jedoch zusammen modelliert. Um die Modellierung weiter zu vereinfachen, wird nur der anisotrope Anteil der Feinstrukturspannungen

$$\tau_{ij}^t \approx \bar{\rho} (\widetilde{u_i u_j} - \tilde{u}_i \tilde{u}_j) \quad (2.29)$$

modelliert. Er wird mit Hilfe der Boussinesq Hypothese

$$\tau_{ij}^t = \mu_t \left( 2\tilde{S}_{ij} + \delta_{ij} \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \quad (2.30)$$

approximiert. Dabei wird davon ausgegangen, dass der Einfluss der nicht-aufgelösten Turbulenz als eine Skalierung des gefilterten Spannungstensors mit der turbulenten Viskosität  $\mu_t$  dargestellt werden kann. Zu deren Berechnung wird das „wall-adapting local eddy-viscosity“ (WALE) Modell von



Nicoud und Ducros [174] verwendet. Es basiert auf dem Smagorinsky-Modell [227] und verwendet wie dieses einen algebraischen Ansatz

$$\mu_t = \bar{\rho} (C_w l_Z)^2 \frac{\left(\tilde{\mathcal{S}}_{ij}^d \tilde{\mathcal{S}}_{ij}^d\right)^{3/2}}{\left(\tilde{\mathcal{S}}_{ij} \tilde{\mathcal{S}}_{ij}\right)^{5/2} + \left(\tilde{\mathcal{S}}_{ij}^d \tilde{\mathcal{S}}_{ij}^d\right)^{5/4}} \quad (2.31)$$

mit

$$\mathcal{S}_{ij}^d = \frac{1}{2} \left(\tilde{g}_{ij}^2 + \tilde{g}_{ji}^2\right) - \frac{1}{3} \delta_{ij} \tilde{g}_{kk}^2 \quad \text{und} \quad \tilde{g}_{ij} = \frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j}. \quad (2.32)$$

Die turbulente Viskosität skaliert mit dem Quadrat der Zellgröße  $l_Z$  und der WALE-Konstanten  $C_w$ . Damit sind das Modell und die Simulationen, in denen es verwendet wird, per Definition gitterabhängig. Wie in der ursprünglichen Arbeit von Nicoud und Ducros [174] wird auch in dieser Arbeit  $C_w = 0,5$  angenommen. Gute Ergebnisse konnten aber auch mit  $0,13 \leq C_w \leq 0,5$  [11, 138] erzielt werden. Im Gegensatz zum Smagorinsky-Modell wird beim WALE-Modell die turbulente Dissipation im laminaren Teil der Grenzschicht physikalisch korrekt ausgeblendet. Dies wird durch die Einführung des Tensors  $\tilde{\mathcal{S}}_{ij}^d$ , also dem symmetrischen, spurfreien Anteils des Quadrats des Geschwindigkeitsgradiententensors  $\tilde{g}_{ij}$ , erreicht, der in Wandnähe verschwindet. Um Singularitäten zu vermeiden, wird im Nenner von Gl. (2.31) der Scherratentensor addiert. In der freien Strömung entspricht das WALE-Modell dem Smagorinsky-Modell. Es ist zu beachten, dass das Modell von einem Gleichgewicht aus Turbulenzproduktion und Dissipation ausgeht [89], was im Inertialbereich gegeben ist. Somit muss das Rechengitter turbulente Strukturen bis in den Inertialbereich auflösen können, damit das WALE-Modell korrekt arbeitet.

**Feinstrukturflüsse**  $\bar{\rho}(\widetilde{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h})$ ,  $\bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_\alpha} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_\alpha)$ : Die nicht-aufgelöste, turbulenzbedingte Mischung von Skalaren wird mit Hilfe des Gradienten-Diffusions-Ansatzes modelliert:

$$\bar{\rho}(\widetilde{u_i h} - \tilde{u}_i \tilde{h}) \approx -\frac{\lambda_t}{c_p} \frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_i}, \quad \text{mit} \quad \lambda_t = \frac{\mu_t c_p}{Pr_t} \quad \text{und} \quad (2.33)$$

$$\bar{\rho}(\widetilde{u_i Y_\alpha} - \tilde{u}_i \tilde{Y}_\alpha) \approx -\bar{\rho} D_t \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_i}, \quad \text{mit} \quad D_t = \frac{\mu_t}{Sc_t \bar{\rho}}. \quad (2.34)$$

Zur Definition der turbulenten Wärmeleitfähigkeit  $\lambda_t$  und des turbulenten Diffusionskoeffizienten werden die turbulente Prandtl-Zahl ( $Pr_t$ ) und die turbulente Schmidtzahl  $Sc_t$  benötigt. Für diese wird ein Wert von  $Pr_t = Sc_t = 0,4$  verwendet [184].

### 2.3.4 Thermochemische Feinstrukturmodellierung

Neben dem Einfluss auf das Strömungsfeld selbst beeinflusst die Turbulenz die thermochemischen Eigenschaften des Fluids, indem sie häufig ein inhomogenes Fluidgemisch in den turbulenten Wirbeln verursacht. Finden dort chemische Reaktionen statt, führt diese Inhomogenität zu sehr unterschiedlichen lokalen Reaktionsraten, was man als Turbulenz-Chemie-Interaktion (TCI) bezeichnet. Wird ein Teil der Turbulenz modelliert, ist es deshalb wichtig, auch die nicht-aufgelöste thermochemische Feinstruktur zu modellieren. Der nicht-lineare Charakter der Chemie und die vollständige Kopplung aller thermochemischen Prozesse erschweren die Modellierung jedoch erheblich. Dies drückt

sich dadurch aus, dass im gefilterten chemischen Quellterm  $\bar{S}_\alpha$  unendlich viele Momente höherer Ordnung auftreten, deren Vernachlässigung zu hohen Fehlern führen kann [98]. Es existiert daher eine Vielzahl an Modellierungsansätzen für  $\bar{S}_\alpha$ , die von der Annahme eines homogenen Gemischs, auch laminare Chemie genannt, bis zur Auflösung der gekoppelten thermochemischen Feinstruktur reichen. Die meisten Modelle basieren darauf, dass die Verteilung einer beliebigen Größe durch eine Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (PDF, „probability density function“) beschrieben werden kann. Ist die PDF des Gemischs im Feinstrukturbereich bekannt, können, wie beim Transportgleichungs-PDF (TPDF) Verfahren [187], alle Momente von  $\bar{S}_\alpha$  vollständig berechnet werden [98]. Da die LES rußender Flammen sehr teuer sind und bereits einen Teil der TCI auflösen, kommen hochwertige Feinstrukturmodelle, bei denen sich die PDF frei entwickeln kann, kaum zum Einsatz (z.B. [62, 216]). Stattdessen werden angenommene PDF (APDF) Verfahren, die die Form der PDF vorgeben und dadurch effizienter sind, häufiger und in Kombination mit verschiedenen Verbrennungsmodellen eingesetzt (z.B. [74, 168, 256]). Entspricht die tatsächliche chemische Feinstruktur nicht der vorgegebenen PDF-Form ist die Berechnung von  $\bar{S}_\alpha$  fehlerbehaftet. Trotzdem kommt das APDF-Verfahren dank der geringen Kosten auch in dieser Arbeit zur Anwendung.

### 2.3.4.1 Assumed-PDF Verfahren

Durch die Vorgabe der PDF-Form sind zu deren vollständiger Beschreibung nur Momente erster und zweiter Ordnung nötig. Die PDF einer Variable hängt damit von deren gefiltertem Wert  $\tilde{\phi}$  und der nicht-aufgelösten Fluktuation  $\sigma_\phi = \widetilde{\phi'^2}$  ab. Leider ist die höherdimensionale Verbund-PDF aller thermochemischen Variablen überaus schwierig zu beschreiben. Deshalb wird vereinfachend angenommen, dass die Temperatur  $T$ , der Vektor der Speziesmassenbrüche  $\mathbf{Y}$  und der Vektor der Rußmassenbrüche  $\mathbf{Y}_s$  statistisch unabhängig sind und jeweils eine zugehörige, einfachere PDF vorgegeben werden kann. Die Integration über den thermochemischen Zustandsraum  $\hat{\phi}$  liefert dann den gefilterten chemischen Quellterm

$$\bar{S}_\alpha = \int_{\hat{T}} \int_{\hat{\mathbf{Y}}} \int_{\hat{\mathbf{Y}}_s} S_\alpha(\hat{T}, \hat{\mathbf{Y}}, \hat{\mathbf{Y}}_s) P_T(\hat{T}) P_{\mathbf{Y}}(\hat{\mathbf{Y}}) P_{\mathbf{Y}_s}(\hat{\mathbf{Y}}_s) d\hat{\mathbf{Y}}_s d\hat{\mathbf{Y}} d\hat{T}. \quad (2.35)$$

Die PDF der Temperatur  $P_T$  wird als abgeschnittene Gauß-PDF, die der Speziesmassenbrüche  $P_{\mathbf{Y}}$  als multi-variate  $\beta$ -PDF [97, 99, 100] und die der Rußmassenbrüche  $P_{\mathbf{Y}_s}$  als doppel- $\delta$ -PDF [167] modelliert. Die zweiten Momente von  $P_{\mathbf{Y}}(\hat{\mathbf{Y}})$  und  $P_{\mathbf{Y}_s}(\hat{\mathbf{Y}}_s)$  werden jeweils als Summe der zweiten Momente der jeweiligen Massenbrüche gebildet. Der Einfluss der nicht-aufgelösten Rußfluktuationen beschränkt sich dadurch auf die Rußkollisionsreaktionen [70]. Außerdem bleibt die Speziesfluktuation bei Globalreaktionen unberücksichtigt. Das Integral der Spezies- und Rußmassenbruchs-PDF lässt sich analytisch lösen und wird zur Laufzeit der Simulation berechnet. Der übrige, temperaturabhängige Teil des Integrals wird im Vorfeld der Rechnung berechnet und tabelliert [18, 59]. Dadurch ist die Bestimmung von  $\bar{S}_\alpha$  zur Laufzeit sehr effizient. Eine umfassende Beschreibung des APDF-Verfahrens kann Gerlinger [98] entnommen werden.

**Gefilterter Strahlungsquellterm  $\bar{S}_h$ :** Der Einfluss der nicht-aufgelösten Temperaturfluktuationen auf den gefilterten Strahlungsquellterm  $\bar{S}_h$  kann ebenfalls mit dem APDF-Verfahren bestimmt werden. Werden die nicht-aufgelösten Speziesfluktuationen vernachlässigt, liefert die Integration

über den thermischen Zustandsraum

$$\bar{S}_h = -4\sigma\tilde{T} \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \tilde{Y}_\alpha \int_{\hat{T}} \hat{T}^3 \epsilon_\alpha^*(\hat{T}) P(\hat{T}) d\hat{T} \quad (2.36)$$

die abgestrahlte Wärme. Wie bei der Berechnung von  $\bar{S}_\alpha$  wird  $\bar{S}_h$  im Vorfeld der Simulation tabelliert [18, 59].

### 2.3.4.2 Scale-Similarity Methode

Zur Berechnung aller PDFs wird die Varianz  $\sigma_\phi$  der entsprechenden Variablen benötigt. Da die Turbulenz in der LES teilweise aufgelöst wird, kann ein Skalenähnlichkeitsansatz (SSM, „scale-similarity method“) [10] zur Berechnung von  $\sigma_\phi$  angewandt werden. Dabei wird angenommen, dass sich die größeren, aufgelösten Strukturen und die nicht-aufgelösten Feinstrukturen ähneln. Durch Einführung einer Testfilterung  $\widehat{\phi}$  kann eine Korrelation zwischen den großen, aufgelösten Strukturen und den kleinsten, aufgelösten Strukturen bestimmt werden. Deren Extrapolation approximiert die nicht-aufgelöste Varianz

$$\sigma_\phi = \widetilde{\phi'^2} \approx c_{\sigma_\phi} \left( \widetilde{\widehat{\phi}^2} - \widehat{\phi}^2 \right), \quad (2.37)$$

wobei  $c_{\sigma_\phi}$  eine gitterabhängige Skalierungsvariable ist. Die Testfilterung [29] von  $\tilde{\phi}$  in der Zelle  $i$

$$\widehat{\phi}_i = \frac{\bar{\rho}_i \tilde{\phi}_i + \sum_{j=1}^{N_N} \bar{\rho}_j \tilde{\phi}_j \zeta}{\bar{\rho}_i + \sum_{j=1}^{N_N} \bar{\rho}_j \zeta} \quad (2.38)$$

erfolgt unter Einbeziehung aller verfügbaren  $N_N$  Nachbarzellen  $j$ , wobei der Wichtungsfaktor  $\zeta$  deren Anteil an der Testfilterung bestimmt. Für strukturierte Gitter wird  $\zeta = 0,5$  [45] und für unstrukturierte Gitter wird  $\zeta = 0,25$  [70] angenommen. Der größte Vorteil der Methode ist, dass sie ohne zusätzliche Transportgleichungen auskommt und daher effizient und robust ist. Deshalb wurde sie schon relativ früh in Verbrennungssimulationen mit LES eingesetzt (z.B. [81, 122]).

## 2.4 Numerische Lösung

Zur Lösung des gefilterten Gleichungssystems (2.25) bis (2.28) kommt der unstrukturierte finite-Volumen Löser „turbulent heat release extension of the TAU code for combustion“ (ThetaCOM) [58] des DLR Instituts für Verbrennungstechnik zum Einsatz. Er bietet Lösungsverfahren sowohl für inkompressible Strömungen mit kleiner Machzahl als auch für kompressible Strömungen, wobei in dieser Arbeit ausschließlich inkompressible Fälle behandelt werden. Dazu wird die Projektionsmethode genutzt, die statt der Massenerhaltungsgleichung (Gl. (2.25)) eine Druckkorrekturgleichung verwendet [40]. Zur Verbesserung der Lösungsqualität beim Lösen der Druckkorrekturgleichung nutzt ThetaCOM die Dualgittertechnik. Die Gleichungen für Enthalpie- und Speziesmassentransport (Gl. (2.27) und (2.28)) werden voll gekoppelt gelöst, wodurch Masse- und Elementerhaltung, beispielsweise bei der Interaktion von Gasphase und Ruß, gewährleistet sind. Die Integration des Speziesquellterms erfolgt implizit, wodurch relativ große Zeitschrittweiten von

## 2 Physikalische Grundlagen

---

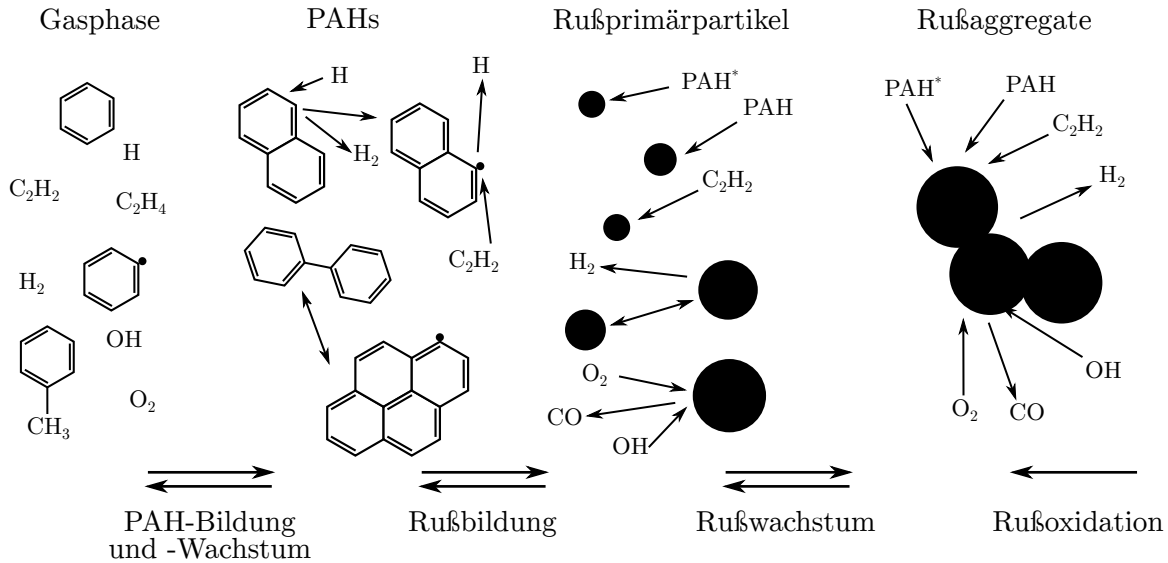
$\Delta t = 5 \cdot 10^{-7}$  s bis  $\Delta t = 1 \cdot 10^{-6}$  s möglich sind. Zur zeitlichen Diskretisierung kommt das semi-implizite Crank-Nicolson-Verfahren zweiter Ordnung zum Einsatz. Das zur räumlichen Diskretisierung der Geschwindigkeits- und Druckkorrekturgleichung genutzte zentrale-Differenzen Schema (CDS) ist ebenfalls zweiter Ordnung. Auch das für die Diskretisierung der Enthalpie und Speziestransportgleichung eingesetzte quadratisches Aufwind-Differenzen Schema (QUDS, „quadratic upstream-differencing scheme“) ist zweiter Ordnung, wobei diese durch Venkatakrishnans Limiter [249] aus Stabilitätsgründen situativ reduziert wird. Inzwischen stehen in ThetaCOM auch genauere räumliche Diskretisierungsverfahren höherer Ordnung zur Verfügung [215].

# 3 Rußmodellierung

Abbildung 3.1 veranschaulicht detailliert, wie Ruß in brennstoffreichen Gebieten der Flamme entsteht. Zur Modellierung der einzelnen Teilprozesse ist neben dem eigentlichen Rußmodell natürlich die Modellierung der Gasphasenchemie und oft auch die Modellierung der aromatischen Rußvorläufer (PAHs) notwendig. Jedes dieser Modelle ist mit teils erheblichen Unsicherheiten behaftet. So ähneln sich gängige Gasphasenmodelle zwar in der Vorhersage des Rußvorläufers Acetylen ( $C_2H_2$ ), sie unterscheiden sich jedoch bei der Vorhersage der ebenfalls wichtigen Aromaten Benzol (A1) und Pyren (A4) häufig um Größenordnungen [18, 201]. Dies wirkt sich wiederum auf die Rußvorhersage aus, die sich beispielsweise in der MBK durch die Variation des Gasphasenmechanismus um den Faktor vier unterscheidet [39]. Im Gegensatz zu den vergleichsweise gut erforschten Prozessen in der Gasphase, sind manche Prozesse der Rußevolution, wie die Rußbildung (Nukleation), kaum verstanden [86] und daher schwierig zu modellieren. Auch deshalb beinhalten Rußmodelle eine Vielzahl von Annahmen, was die Form und Zusammensetzung von Rußpartikeln und die chemischen Prozesse betrifft. Die hohen Unsicherheiten in allen Teilmodellen bedeutet, dass ein Rußmodell nicht als die Summe der Teilmodelle, sondern als Gesamtmodell betrachtet werden sollte. Entsprechend ist eine umfangreiche Validierung des gesamten Modells notwendig, ohne dessen Parameter für einzelne Testfälle anzupassen. Nur so kann ein Rußmodell über einen realistischen Anwendungsbereich relativ zuverlässig funktionieren. Diese Validierung wurde für das DLR-Rußmodell von Eberle [70] durchgeführt. Nachfolgend werden deshalb nur die wichtigsten Funktionsweisen des Gasphasen-PAH- und Rußmodells unter Einhaltung der gängigen Terminologie [161] beschrieben. Zuvor wird das DLR-Rußmodell in die Vielzahl an Modellierungsansätzen eingeordnet.

## 3.1 PAH- und Rußmodelle

Die ersten Rußbildungsmodelle basieren auf sehr einfachen Verbrennungsmodellen und können lediglich den Brennstoff als Rußvorläufer [150, 241] verwenden. Sie müssen für jeden Testfall neu kalibriert werden. Um dies zu vermeiden, berücksichtigen alle danach entwickelten Rußmodelle die Chemie der Rußvorläuferspezies. Acetylen trägt entscheidend zum Wachstum der PAHs und von Ruß bei. Einfache Rußbildungsmodelle vernachlässigen deshalb die PAH-Chemie und nehmen an, dass Ruß direkt aus Acetylen gebildet wird [141, 143]. Jedoch gehen die meisten Rußbildungsmodelle von der realistischeren Annahme aus, dass Ruß aus PAHs gebildet wird. Dabei kann die PAH-Chemie aufgelöst werden und bestimmte PAH-Moleküle wie etwa das vierringige Pyren als Rußvorläufer verwendet werden (z.B. [20, 68, 69]). Auf Grund der Vielzahl an PAH-Molekülen ist dies jedoch sehr teuer. Deshalb werden häufig Sektionalemodelle eingesetzt, die PAH-Moleküle mit



**Abbildung 3.1:** Detaillierte schematische Darstellung der Rußbildung und -evolution [22, 161].

ähnlichen Eigenschaften in einer (z.B. [168]) oder mehreren (z.B. [19, 60, 88]) PAH-Sektionen zusammenfassen, welche wiederum als Rußvorläufer dienen. Auch hybride Modelle, die kleine PAHs auflösen und größere in Sektionen zusammenfassen, sind bekannt (z.B. [48, 178, 193]). Das in dieser Arbeit verwendete sektionale PAH-Modell [71] wurde entwickelt, um die Zeitskalen und den Temperaturbereich der Rußbildung besser abzubilden und berücksichtigt deshalb neben stabilen PAH-Sektionen auch Sektionen für PAH-Radikale.

Wie in Abb. 3.1 gezeigt, haben Rußpartikel unterschiedliche Größen, Formen und auch Stoffeigenschaften, was man polydispers nennt. Die Beschreibung der Partikelgrößenverteilung (PSD, „particle size distribution“) ist somit ein wichtiges Unterscheidungsmerkmal von Rußmodellen. Die Änderung der PSD kann durch die Smoluchowski Koagulationsgleichung [228] beschrieben werden. Grundlagenuntersuchungen verwenden stochastische Methoden (z.B. [9, 24]), um diese direkt zu lösen. Für praktische Anwendungen werden jedoch Partikelverfolgungsmethoden (z.B. [53, 92]), zwei-Gleichungs-Modelle (z.B. [60, 141, 146]), Momentenmethoden (z.B. [85, 154, 163, 205]) oder Sektionalansätze (z.B. [14, 19, 48, 68, 193, 202]) eingesetzt, um die Evolution der PSD kostengünstiger zu approximieren. 2-Gleichungsmodelle können die PSD nicht auflösen. Ihnen liegt die monodisperse Annahme zugrunde, dass alle Rußpartikel die gleiche Größe besitzen. Momentenmethoden lösen zwar mehrere statistische Momente der PSD auf und können integrale Größen wie den Rußvolumenbruch effizient berechnen, allerdings wird auch hierbei die PSD nicht aufgelöst und kann nur rekonstruiert werden [206]. Sektionalansätze sind generell polydispers, können also die Form der PSD wiedergeben. Sie unterteilen die PSD meist in mono- oder polydisperse Sektionen, wodurch sich die Form der PSD relativ frei entwickeln kann. Im Fall von monodispersen Sektionen kommt eine Transportgleichung je Sektion zum Einsatz. Werden unterschiedliche thermochemische Eigenschaften gleich großer Rußpartikel berücksichtigt, die zum Beispiel durch Rußalterung [125] auftreten können, müssen mehrere Transportgleichungen je Rußsektion gelöst werden. Dieser Mehraufwand macht den Einsatz in zeitgenauen Rechnungen derzeit zu teuer, weshalb in dieser Arbeit ein Sektionalansatz verwendet wird, bei dem alle Rußpartikel einer Sektion die gleichen Eigenschaften besitzen [70].

## 3.2 Gasphasenchemie

In dieser Arbeit werden ausschließlich rußende Flammen, mit dem in Laborflammen häufig verwendeten Brennstoff Ethylen, betrachtet. Um die teure Berechnung der Gasphasenchemie so effizient wie möglich zu gestalten, werden in der CFD Gasphasenmechanismen eingesetzt, die speziell auf das jeweilige Verbrennungsproblem angepasst sind. Deshalb reduzierte Blacha [18] den von Slavinskaya und Frank [224] entwickelten Gasphasenmechanismus für rußende Ethylenflammen. Eberle [70] entwickelte Details des Mechanismus weiter, um die laminaren Flammgeschwindigkeit besser vorherzusagen und um die numerische Steifigkeit reduzieren zu können. Der Mechanismus besteht aus 43 Spezies und 304 Reaktionen und beschreibt die Verbrennungschemie sowie die Entwicklung wichtiger Rußvorläufer, wie Acetylen, Benzol und Toluol. Er wurde für die Pyrolyse und Verbrennung sowohl bei atmosphärischen Bedingungen als auch bei höheren Drücken validiert [18, 70, 225]. Seine Eignung zur Rußvorhersage konnte bereits in vielen Arbeiten gezeigt werden [19, 53, 71, 73, 102, 131]. Auch der nicht-reduzierte Gasphasenmechanismus [224] konnte in einer Vergleichsstudie [201] gute Vorhersagen über einen weiten Zustandsbereich nachweisen.

## 3.3 PAH-Chemie

Wie in Abb. 3.1 gezeigt, wachsen aromatische Gasphasenmoleküle in brennstoffreichen Gemischen durch chemische Reaktionen und Kollisionen zu PAHs. Wachsen diese PAHs weiter, bilden sich aus den größten PAHs schließlich die kleinsten Rußpartikel. Deshalb ist ihre akkurate Modellierung für eine gute Rußvorhersage entscheidend. Allerdings decken die PAHs einen großen Massenbereich ab und es existieren sehr viele unterschiedliche PAH-Moleküle. Sie einzeln in einem Modell zu erfassen, ist für die allermeisten CFD-Anwendungen zu teuer. Eine Möglichkeit zur effizienteren Modellierung besteht darin, die ähnlichen Eigenschaften der unterschiedlichen PAHs auszunutzen. Dazu wird eine Pseudospezies definiert, auch Sektion oder Klasse genannt, die PAHs in einem bestimmten Massenbereich abbildet. Der sogenannte Sektionalansatz fasst also viele Spezies mit ähnlichen Eigenschaften in wenigen Sektionen zusammen und verringert den Rechenbedarf dadurch erheblich.

### Sektionalansatz

Abbildung 3.2 zeigt wie das in dieser Arbeit verwendete sektionale PAH-Modell [71] den Massenbereich zwischen 100 g/mol und 800 g/mol mit drei logarithmisch skalierten Sektionen abdeckt. Zwischen zwei benachbarten Sektionen steigt die molare Masse jeweils um den Faktor  $x_M = 2$ . Die erste Sektion (PAH<sub>1</sub>) enthält damit auch Naphthalin als kleinstes PAH. Angrenzend an die größte PAH-Sektion folgt direkt der Ruß. Außerdem enthält das PAH-Modell zu jeder PAH-Sektion eine Sektion der entsprechenden PAH-Radikale (PAH\*) und besteht damit aus insgesamt sechs Sektionen. Im gesamten DLR-Rußmodell wird angenommen, dass die Teilchendichte einer Sektion konstant ist. Nach Pope und Howard [185] entspricht die molare Masse der stabilen PAH-Pseudospezies dadurch der mittleren Masse der Sektion. Die molare Masse der Radikale ist um die eines Wasserstoffatoms kleiner.

Gasphase	PAH <sub>1</sub>	PAH <sub>2</sub>	PAH <sub>3</sub>	SOOT <sub>1</sub>	SOOT <sub>2</sub>	•••	SOOT <sub>30</sub>
M [g/mol]	100	200	400	800	1600	3200	4,29·10 <sup>11</sup> 8,58·10 <sup>11</sup>

**Abbildung 3.2:** Definition der PAH-, PAH<sup>\*</sup>-, und Rußsektionen.

Beispielhaft sei hier eine Wachstumsreaktion der *i*-ten Sektion (engl. BIN) mit einem Reaktant R dargestellt:



Das Wachstum von BIN<sub>*i*</sub> führt dazu, dass ein Teil der zugeführten Masse auf das nächst-größere BIN<sub>*i*+1</sub> übergeht. Außerdem können weitere Produkte P entstehen. Im DLR-Rußmodell wird meist Wasserstoff als eines der Produkte verwendet. Der Stöchiometriekoeffizient  $\nu''_{\text{P}}$  wurde ursprünglich so berechnet, dass für stabile PAHs die Massenerhaltung gewährleistet ist [185]. Blacha [18] erweiterte diesen Ansatz um ein iteratives Verfahren, das auch die Elementerhaltung gewährleistet. Auf die entsprechenden PAH-Radikal-Reaktionen angewandt, sorgt das iterative Verfahren auch hier für Massen- und Elementerhaltung [71]. Lediglich die PAH-Bildungsreaktionen sind von der Elementerhaltung ausgenommen. Es sei erwähnt, dass Eigentler und Gerlinger [76] den Ansatz weiter verbesserten, um die Elementerhaltung auch bei Bildungsreaktionen zu gewährleisten. Jedoch kommt dieser neue Ansatz in der vorliegenden Arbeit noch nicht zur Anwendung.

### Stoffeigenschaften

Für jede PAH-Sektion müssen Stoffeigenschaften definiert werden, die denen der PAHs, die sie zusammenfasst, möglichst genau entsprechen. Die spezifische Enthalpie und die Zusammensetzung aus Wasserstoff- und Kohlenstoffatomen (H/C-Verhältnis) der stabilen PAH-Sektionen wurden deshalb aus Referenz-PAHs von Yu et al. [263] inter- und extrapoliert. Radikale bestehen aus einem Wasserstoffatom weniger und das H/C-Verhältnis wird entsprechend angepasst. Die spezifische Enthalpie der Radikale wird unter der Annahme einer festen Enthalpiedifferenz zu den stabilen PAHs berechnet [71]. Es sei an dieser Stelle angemerkt, dass die Enthalpie der PAHs große Unsicherheiten aufweist, da gerade bei größeren PAHs wenige gemessene Stoffdaten vorliegen. Da sie meist in niedriger Konzentration vorkommen, wirkt sich das nicht negativ auf die Eigenschaften des Fluids aus. Zur Berechnung von Rückreaktionsraten sollten sie jedoch nicht verwendet werden [19]. Stattdessen werden die Rückreaktionsraten im DLR-Rußmodell von repräsentativen PAH-Reaktionen aus einem detaillierten Mechanismus [226] übernommen. Die stoffspezifischen Transportdaten werden aus Referenzdaten von Richter et al. [193] abgeleitet.

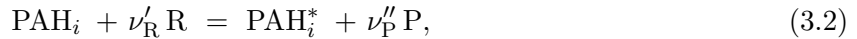
### PAH-Bildung, -Wachstum und -Oxidation

Die Bildung der PAH<sub>1</sub> und PAH<sub>1</sub><sup>\*</sup> Pseudospezies erfolgt analog zur Bildung der aufgelösten PAHs in detaillierten Gasphasenmechanismen [193, 224, 226]. Dazu wurden 25 Reaktionen identifiziert [19, 71], deren Edukte noch vom reduzierten Gasphasenmechanismus aufgelöst werden und deren Pro-



dukte PAHs enthalten, die in die erste PAH-Sektion fallen. Diese Produkte werden in der Reaktionsgleichung durch PAH-Pseudospezies ersetzt und die Stöchiometriekoeffizienten der PAH-Produkte angepasst, um die Massenerhaltung einzuhalten. Die Reaktionsraten werden beibehalten.

Der wichtigste chemische Prozess, der zum Wachstum von PAHs und Ruß in Flammen führt [87], ist der von Frenklach und Wang [88] in die Rußmodellierung eingeführte  $H_2$ -Abstraktion  $C_2H_2$ -Addition (HACA) Mechanismus. Er führt dazu, dass sich die Anzahl der aromatischen Ringstrukturen eines PAHs im Wachstumsprozess immer weiter erhöht. Generell kann er in zwei Schritte unterteilt werden. Abbildung 3.1 zeigt den ersten Schritt, bei dem eine Aktivierungsreaktion

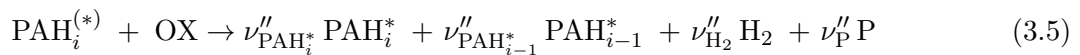


stattfindet wodurch ein PAH-Radikal entsteht. Ursprünglich wurde nur das H-Radikal als Reaktant benutzt, wodurch das Produkt  $P = H_2$  abgespalten wird und der HACA-Mechanismus seinen Namen erhält. Inzwischen sind weitere Aktivierungsreaktionen bekannt [226] und die Reaktanten O, OH und der unimolekulare Zerfall werden im DLR-Rußmodell berücksichtigt [71]. Es sei angemerkt, dass das gesamte Rußmodell sehr sensitiv auf Änderungen in diesem Teilmodell reagiert. Der zweite Schritt des HACA-Mechanismus beschreibt das Wachstum des PAH-Radikals durch Acetylenanlagerung. Analog zu [226] ist er im DLR-Rußmodell reversible ausgeführt:



Für das Wachstum der größten PAH-Sektion ( $PAH_3$ ) entfällt in Gl. (3.3) das zweite Produkt. Es findet also keine Rußbildung durch den HACA-Mechanismus statt, sondern ausschließlich durch PAH-Dimerisierung.

Die Oxidation betrifft stabile PAHs und PAH-Radikale gleichermaßen, weshalb im Folgende die zusammenfassende Notation  $PAH^{(*)}$  gewählt wird. Die Reaktion von  $PAH^{(*)}$  mit einem allgemeinen Oxidator OX



erfolgt im DLR-Rußmodell konkret durch O, OH und  $O_2$ . Die Oxidation der kleinsten PAH-Pseudospezies  $PAH_1$  führt zur Bildung von Aromaten, die durch den Gasphasenmechanismus aufgelöst werden. Alle Reaktionsraten sind in der Arbeit von Eberle et al. [71] aufgelistet und orientieren sich an den Reaktionsraten des detaillierten Mechanismus [226].

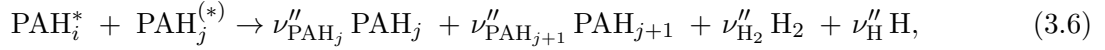
### PAH-Kollisionen und Rußbildung

Nicht nur der HACA-Mechanismus führt zum PAH-Wachstum, sondern auch die Kollisionen der PAHs untereinander. Im Gegensatz zum HACA-Mechanismus und zur PAH-Oxidation werden die Reaktionsraten der Kollisionsreaktionen über die Kollisionsfrequenz der PAHs und deren Stoßeffizienz berechnet. Da die Kollisionseffizienz zweier stabiler PAHs sehr gering ist [202], werden nur

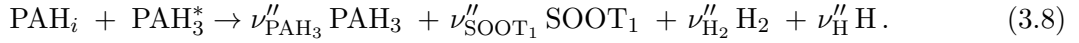
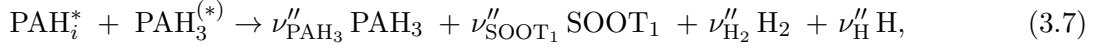
### 3 Rußmodellierung

---

Kollisionen, bei denen mindestens ein PAH-Radikal beteiligt ist, berücksichtigt:



wobei  $j \geq i$  gilt. Gehört mindestens ein Reaktant zur größten PAH-Sektion ( $\text{PAH}_3^{(*)}$ ) und ist mindestens ein Reaktant ein Radikal, findet die Bildung von Ruß (engl. SOOT) statt:



Im Fall von  $i = 3$  gilt außerdem  $\nu''_{\text{PAH}_3} = 0$ . Für beide Kollisionsreaktionen wird eine Stoßeffizienz von  $\gamma = 1$  angenommen [48, 71]. Die Kollisionsfrequenz hängt vom Kollisionsdurchmesser der PAHs und deren Diffusionskoeffizienten ab. Eine Korrekturfunktion gewährt die Gültigkeit über den ganzen Knudsenzahlbereich. Details zu deren Berechnung können der Arbeit von Blacha et al. [19] entnommen werden. Um die Kollisionsreaktionen zur Programmlaufzeit effizient berechnen zu können, werden die Reaktionsraten vor der Rechnung durch Kurvenanpassung in Arrheniusform approximiert und gespeichert [19].

## 3.4 Rußchemie

### Stoffeigenschaften

Die Stoffeigenschaften von Ruß wurden von Blacha et al. [19] definiert. Die Rußdichte von  $\rho_s = 1800 \text{ g/m}^3$  entspricht der Grundlagenliteratur [63] und findet breite Anwendung in Rußmodellen (z.B. [53, 163, 193, 264]). Die Definition der Rußenthalpie ist mit großen Unsicherheiten behaftet [19]. Im DLR-Rußmodell wurde sie so gewählt, dass ihr Einfluss auf die Flammentemperatur möglichst realistisch ist. Deshalb wurde die massenspezifische Enthalpie von Acetylen übernommen, das die Hauptwachstumskomponente von Ruß ist. Die molare Masse benachbarter Rußsektionen steigt, wie in Abb. 3.2 gezeigt, jeweils um den Faktor  $x_M = 2$ . In diesem Punkt entspricht das Rußmodell dem PAH-Modell. Die chemische Zusammensetzung der Rußsektion  $i$  mit der molaren Masse  $M_i$  wird durch

$$(\text{H/C})_i = 0,4405 M_i^{-0,10524} \quad (3.9)$$

festgelegt. Diese Funktion wurde durch Kurvenanpassung von Daten von Richter et al. [193] erzielt. Veränderungen des H/C-Verhältnisses einer Rußsektion, wie es durch thermische Rußalterung entstehen kann, bleiben unberücksichtigt. Modelle mit veränderlichem H/C-Verhältnis sind deutlich teurer, da mehrere Transportgleichungen pro Rußsektion gelöst (z.B. [125, 221]) oder Partikelverfolgung [127] realisiert werden müssen. Daher sind sie für den Einsatz in LES bisher ungeeignet.

### Rußmorphologie

Abbildung 3.1 verdeutlicht, dass sich die Form, beziehungsweise die Morphologie, von Rußpartikeln stark unterscheiden kann. Um das Modell effizient zu halten, berücksichtigt das DLR-Rußmodell nur

monodisperse Rußsektionen, wodurch alle Rußpartikel in einer Sektion die gleiche Masse und die gleiche Form haben. Die kleinsten, eher runden, Rußpartikel werden Primärpartikel genannt [161]. Kollidieren diese, können sie zu einem größeren, ebenfalls runden Rußpartikel verschmelzen (engl. coalescence). Kollidieren größere Rußpartikel, bilden sich lose Partikelverbände, die sogenannten Agglomerate, oder feste Partikelverbände, die sogenannten Aggregate. Sie bestehen aus einer gewissen Anzahl an Primärpartikeln  $n_p$ . Durch die unterschiedliche Morphologie verschiedener Partikel wird zwar nicht die Art der chemischen Reaktionen des Rußpartikels beeinflusst, wohl aber die Reaktionsraten. Deshalb werden im DLR-Rußmodell nicht nur Primärpartikel, sondern auch Rußaggregate berücksichtigt. Da sich kleine Rußpartikel gut durch einzelne, runde Primärpartikel beschreiben lassen, wird die Aggregation erst ab einem Primärpartikeldurchmesser von  $d_{p,agg} > 14$  nm berücksichtigt [74]. Bis dahin gilt für die Rußsektionen  $n_{p,i} = 1$ . Für größere Rußsektionen ( $i > 11$ ) gilt

$$n_{p,i+1} = \chi_{agg} n_{p,i}. \quad (3.10)$$

Der Aggregationsfaktor  $\chi_{agg} = 1,5$  bestimmt dabei die Anzahl der Primärpartikel im Aggregat. Die Primärpartikel werden als Kugeln modelliert, wodurch sich deren Durchmesser

$$d_{p,i} = \sqrt[3]{\frac{6M_i}{N_a \pi \rho_s n_{p,i}}} \quad (3.11)$$

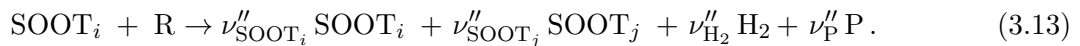
mit Hilfe der Avogadro-Konstante  $N_a$  ergibt. Durch die Wahl von  $1 < \chi_{agg} < 2$  bestehen größere Rußaggregate sowohl aus mehr als auch aus größeren Primärpartikeln. Weiterhin kann die reduzierte Rußoberfläche

$$A_{s,i} = n_{p,i} \pi d_{p,i}^2 N_a [\text{SOOT}_i] \quad (3.12)$$

definiert werden. Im Vergleich zu einer rein sphärischen Modellierung von Rußpartikeln steigt die Rußoberfläche und damit auch die Reaktionsraten der Oberflächenreaktionen bei Rußaggregaten deutlich an. Daher ist gerade bei stark rußenden Flammen, bei denen große Rußpartikel auftreten, die Berücksichtigung von Rußaggregaten entscheidend [74]. Mit insgesamt 30 Rußsektionen deckt das DLR-Rußmodell Primärpartikelgrößen von  $d_{p,1} = 1,28$  nm bis  $d_{p,30} = 80$  nm beziehungsweise einem Kollisionsdurchmesser von  $d_{c,30} = 6,55$   $\mu\text{m}$  ab.  $d_{p,1}$  entspricht Literaturwerten für die Größe der frisch entstandenen Rußpartikel [1]. Die Anzahl der Sektionen ist so gewählt, dass die größten Rußpartikel, die in den untersuchten Flammen entstehen, abgedeckt sind.

### Rußwachstum und -oxidation

Rußwachstum oder Rußoxidation werden, wie in Abb. 3.1 gezeigt, durch Reaktionen an der Rußoberfläche oder durch Kollisionen mit Gas-, PAH- oder anderen Rußpartikeln hervorgerufen. Für Reaktionen zwischen Ruß und einem allgemeinen Reaktant R lautet die Reaktionsgleichung:



Je nach Reaktant entsteht neben Ruß und  $\text{H}_2$  das weitere Produkt P. Bei Wachstumsreaktionen gilt für die Rußsektion  $j = i + 1$  und bei Oxidation  $j = i - 1$ . Eine Ausnahme von Gl. (3.13) stellt

### 3 Rußmodellierung

die Oxidation der kleinsten Rußsektion  $\text{SOOT}_1$  dar, da hierbei  $\text{PAH}_3$  statt  $\text{SOOT}_j$  gebildet wird. Im DLR-Rußmodell hängt die Reaktionsrate der Oberflächenreaktionen

$$R = k_{f,R} \alpha \chi^* A_{s,i} [\text{R}] \quad (3.14)$$

von der Reaktantenkonzentration  $[\text{R}]$ , der reduzierten Rußoberfläche  $A_{s,i}$  der Rußsektion  $i$ , einer temperaturabhängigen Funktion  $0 < \alpha(T) < 1$ , der Dichte der reaktiven Stellen auf der Rußoberfläche  $\chi^*$ , die für chemische Reaktionen zur Verfügung stehen, und der Reaktionsrate je reaktiver Stelle  $k_{f,R}$ , ab. Die Anzahl der reaktiven Stellen auf der Rußoberfläche wird von vielen Bedingungen, wie der Temperatur, der Gaszusammensetzung, der Oberflächenbeschaffenheit des Rußes, und damit Verbunden dem Rußalter beziehungsweise dem H/C-Verhältnis beeinflusst. Die Modellierung von  $\chi^*$  ist deshalb noch Bestandteil der Forschung und wird im DLR-Rußmodell vereinfacht, indem  $\chi^* = 5,8 \cdot 10^{16} \text{ 1/m}^2$  als konstant angenommen wird. Die Funktion

$$\alpha(T) = \left( \frac{T_{\alpha,\max}}{T} \right)^{n_\alpha} \exp \left\{ n_\alpha \left( 1 - \frac{T_{\alpha,\max}}{T} \right) \right\} \quad (3.15)$$

wird benötigt, um zum einen die steigende Aktivierung der Rußoberfläche mit steigenden Temperaturen abzubilden und um zum anderen die Umstrukturierung der Rußoberfläche bei hohen Temperaturen zu modellieren. Letztere erschwert den Gasphasenspezies den Zugang zu reaktiven Stellen. Die Temperatur  $T_{\alpha,\max}$ , bei der  $\alpha = 1$  gilt, und der Parameter  $n_\alpha$  wurden anhand von Diffusionsflammen kalibriert [70]. Die ausführliche Diskussion von Eberle [70] zeigt, dass diese einfache Modellierung physikalisch gerechtfertigt ist und auch in anderen Modellen auf ähnliche Weise angewandt wird. Vorteilhaft an der in Gl. (3.15) gewählten Formulierung ist die Möglichkeit, sie in Arrhenius-Form umschreiben zu können, was die Implementierung erleichtert. Die beiden im DLR-Rußmodell enthaltenen Oberflächenreaktionen sind das Rußwachstum durch  $\text{C}_2\text{H}_2$ -Adsorption (HACA-Mechanismus) und die Oxidation durch  $\text{O}_2$ . Deren relevanten Parameter sind in Tab. 3.1 zusammengefasst.

R	P	$\nu''_{\text{P}}$	$k_{f,R}$	$n_\alpha$	$T_{\alpha,\max}$
$\text{C}_2\text{H}_2$	-	-	Appel et al. [3]	40	1800 K
$\text{O}_2$	CO	2	Appel et al. [3]	40	1800 K

**Tabelle 3.1:** Parameter der Oberflächenreaktionsgleichung (Gl. (3.13) und (3.14)).

Beschreibt Gl. (3.13) eine Kollisionsreaktion, wird der chemische Quellterm

$$R = \gamma \alpha N_a \beta_{\text{SOOT}_i,R} [\text{SOOT}_i] [\text{R}] \quad (3.16)$$

durch die Kollisionsfrequenz  $\beta_{\text{SOOT}_i,R}$  zwischen Ruß und Reaktant und der dazugehörigen Kollisionseffizienz  $\gamma$  beschrieben. Die Berechnung von  $\beta_{\text{SOOT}_i,R}$  erfolgt bei OH gemäß der Stoßtheorie von Trautz [245] (Details siehe [70]) und bei allen anderen Kollisionsreaktionen analog zu den in Abschnitt 3.3 beschriebenen PAH-PAH\* Kollisionen. Zur Berechnung der jeweils genutzten Kollisionsdurchmessers  $d_c$  wird auf die Literatur verwiesen [70]. Alle Kollisionsreaktionen sind in Tab. 3.2 zusammengefasst dargestellt.

R	P	$\nu_p''$	$\gamma$	$n_\alpha$	$T_{\alpha,\max}$	Bemerkung
PAH <sub>j</sub>	-	-	0,3 [19]	-	-	-
PAH <sub>j</sub> *	H	2	0,3 [71]	-	-	-
SOOT <sub>j</sub>	-	-	1,0 [19]	-	-	$i \geq j$
OH	CO	1	0,13 [172]	70	1800 K	-

**Tabelle 3.2:** Parameter der Kollisionsreaktionsgleichung (Gl. (3.13) und (3.16)).

Die Kollisionseffizienzen entsprechen gängigen Literaturwerten. Die temperaturabhängige Dämpfung der OH-Oxidation berücksichtigt die steigende Kollisionseffizienz mit steigender Verweildauer und die sinkende Oxidationseffizienz bei hohen Temperaturen [70]. Die Stoßeffizienz der PAH-Adsorption und Rußkollisionen wird nicht als temperaturabhängig modelliert.

### Rußquantifizierung

Da Rußpartikel sehr viele verschiedene Formen annehmen können, kommen mehrere Größen zur deren Quantifizierung zum Einsatz. Die am meisten genutzte, integrale Größe ist der Rußvolumenbruch

$$f_v = \frac{\rho}{\rho_s} \sum_i^{N_{\text{bins}}} Y_i, \quad (3.17)$$

der den Anteil des Rußvolumens aller  $N_{\text{bins}} = 30$  Rußsektionen am gesamten Gasvolumen angibt. Gemittelte Größen wie der mittlere Primärpartikeldurchmesser

$$d_p = \begin{cases} \frac{\sum_i^{N_{\text{bins}}} d_{p,i} X_i}{\sum_i^{N_{\text{bins}}} X_i}, & \sum_i^{N_{\text{bins}}} X_i > 10^{-12} \\ 0, & \sum_i^{N_{\text{bins}}} X_i \leq 10^{-12}, \end{cases}$$

der mit Hilfe des Molenbruchs  $X_i$  berechnet wird, oder die mittleren Partikeldichten von Primärpartikeln oder Aggregaten

$$N_p = \rho N_a \sum_i^{N_{\text{bins}}} \frac{Y_i n_{p,i}}{M_i}, \quad N_A = \rho N_a \sum_i^{N_{\text{bins}}} \frac{Y_i}{M_i} \quad (3.18)$$

geben detailliertere Auskunft über die Beschaffenheit der Rußpartikel. Um die unterschiedlichen Rußpartikel noch besser quantifizieren zu können, kommt die PSD zum Einsatz. Dabei wird die mit dem Partikeldurchmesser  $d_s$  gewichtete Änderung der Partikeldichte  $dN_s/(d \log(d_s))$ , über dem Partikeldurchmesser aufgetragen. Da in den Rußsektionen des DLR-Rußmodells eine konstante Partikeldichte angenommen wird, kann

$$dN_s/(d \log(d_s)) = \frac{N_{s,i}}{\log(d_{s,i}^o) - \log(d_{s,i}^u)} \quad (3.19)$$

mit Hilfe der Partikeldurchmesser an den oberen und unteren Sektionsgrenzen (o./u.) berechnet werden. Diese werden durch lineare Interpolation approximiert. Dabei wird, anders als im DLR-

### 3 Rußmodellierung

---

Rußmodell integrierten Ansatz von Rosner und Pyykönen [198], angenommen, dass die Partikelgröße im Übergangsbereich zwischen Primärpartikeln und Aggregaten linear ansteigt. Dadurch werden Unstetigkeiten in der Darstellung der PSD vermieden. Um besser mit gemessenen PSDs vergleichen zu können, wird außerdem angenommen, dass die Partikeldichte der Aggregatdichte ( $N_s = N_A$ ) und der Partikeldurchmesser dem Gyrationdurchmesser ( $d_s = d_g$ ) entspricht, dessen Berechnung in der Literatur [70] zu finden ist.

# 4 Auswertemethoden

Der immense Informationsgehalt von LES mit FRC ermöglicht einen tiefen Einblick in die Vorgänge in den untersuchten, rußenden, turbulenten Flammen. Um diese zu interpretieren, müssen passende Auswertemethoden angewandt werden, die die Vielzahl an Informationen zusammenfassen und die wichtigen Effekte aus den zeitaufgelösten Datensätzen extrahieren. Alle nachfolgend beschriebenen Auswertemethoden werden auf einen zeitlich äquidistanten Ergebnisdatensatz angewandt. Dieser liegt für eine gefilterte, Favre-gemittelte Variable  $\tilde{\phi}(x, t)$  an  $M$  Gitterpunkten zu  $N$  Zeitpunkten vor. Die Beibehaltung der Favre-Notation soll verdeutlichen, dass nur von der LES aufgelöste Variablen ausgewertet werden können. Zur besseren Lesbarkeit werden Koordinaten und Geschwindigkeitskomponenten nicht mit Hilfe der einsteinschen Summenkonvention, sondern  $x_1, x_2, x_3 = x, y, z$  und  $u_1, u_2, u_3 = u, v, w$  bezeichnet. In achsensymmetrischen Anwendungsfällen werden die Höhe über dem Brenner  $h$  und der Radius  $r$  als Koordinaten verwendet. In der MBK wird  $r$  nur in Grafiken verwendet, die nicht in den  $x, y$  Koordinatenebenen liegen, sondern um  $45^\circ$  um die x-Achse gedreht sind.

## 4.1 Statistik

Instantane Auswertungen von zeitgenauen Simulationen oder experimentellen Messungen sind anschaulich und können sehr schnell zum Verständnis einzelner Vorgänge in einer Flamme beitragen. Dabei besteht die Gefahr, dass Effekte nicht erkannt oder in ihrer Wichtigkeit falsch bewertet werden. Deshalb ist es sinnvoll Statistiken auszuwerten, die die gesamten zeitgenauen Informationen eines Datensatzes berücksichtigen. Diese können räumlich, also in jeder Gitterzelle, oder im Variablenraum gebildet werden und dabei einzelne Variablen oder auch die Korrelation mehrerer Variablen umfassen.

### 4.1.1 Statistiken im physikalischen Raum

Im physikalischen Raum werden meist nur die Statistiken einzelner Variablen betrachtet. Ausnahmen sind beispielsweise Zweipunktkorrelationen, die in Abschnitt 4.3 behandelt werden. Zum Vergleich mit Experimenten wird vorrangig das zeitliche Mittel, der quadratische Mittelwert (RMS, „root mean square“) oder die Standardabweichung genutzt. Für eine gefilterte, Favre-gemittelte

Variable  $\tilde{\phi}$  ergibt sich das zeitliche Mittel und dessen Schwankungsanteil zu

$$\langle \tilde{\phi}(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \tilde{\phi}(\mathbf{x}, t), \quad \phi'(\mathbf{x}, t) = \tilde{\phi}(\mathbf{x}, t) - \langle \tilde{\phi}(\mathbf{x}) \rangle, \quad (4.1)$$

der RMS-Wert aus dem Schwankungsanteil und dem zeitlichen Mittel zum Zeitpunkt  $t$  ( $\langle \tilde{\phi}(\mathbf{x}) \rangle_t$ ) zu

$$\tilde{\phi}_{\text{RMS}}(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \left( \tilde{\phi}(\mathbf{x}, t) - \langle \tilde{\phi}(\mathbf{x}) \rangle_t \right)^2} \quad (4.2)$$

und die Standardabweichung zu

$$\sigma(\tilde{\phi}(\mathbf{x})) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \left( \tilde{\phi}(\mathbf{x}, t) - \langle \tilde{\phi}(\mathbf{x}) \rangle \right)^2}. \quad (4.3)$$

Für alle bisher eingeführten Variablen, bis auf den Molenanteil  $X$ , erfolgt die zeitliche Mittelung kontinuierlich zur Laufzeit der LES. Die meisten Variablen, die nachfolgend eingeführt werden, wurden im Nachgang der LES berechnet. Ihre zeitliche Mittelung erfolgt mit Hilfe der diskreten Zeitschritte im gespeicherten Simulationsdatensatz.

### 4.1.2 Statistiken im Variablenraum

In dieser Arbeit werden Histogramme genutzt, um Statistiken im Variablenraum darzustellen. Mit Ausnahme von ein-Punkt Statistiken, sollte dabei immer das Zellvolumen der Zellen berücksichtigt werden, mit denen die Statistik erstellt wird. Dazu wird die Statistik, die in einem Volumen  $V$  berechnet wird, mit dem normierten Zellvolumen

$$V_{Z,i}^* = \frac{V_{Z,i}M}{V}, \quad \text{mit} \quad V = \sum_i^M V_{Z,i} \quad (4.4)$$

gewichtet. Dabei ist  $V_{Z,i}$  das Zellvolumen der Zelle  $i$  und  $M$  die Anzahl der Zellen in  $V$ . Durch die Begrenzung auf  $V$  oder gar einen einzelnen Punkt enthalten die Statistiken im Variablenraum also implizit räumliche Informationen, was es bei deren Interpretation zu beachten gilt. Werden Quellterme in die Statistik mit einbezogen, ist es zusätzlich sinnvoll, die mittlere Aufenthaltszeit in der Zelle der Länge  $l_Z$  als

$$t_{\text{res}} = \frac{l_Z}{\sqrt{u^2 + v^2 + w^2}} \quad (4.5)$$

mit einzubeziehen, um die Auswirkung des Quellterms auf die jeweilige Spezieskonzentration besser abbilden zu können. Für Statistiken, die mehrerer Variablen korrelieren, werden zweidimensionale Histogramme verwendet. Solche Statistiken aus Messungen (z.B., [83, 136, 151, 169, 177, 217]) und Simulationen (z.B., [6, 17, 62, 142, 209]) werden benutzt, um das Verständnis der Vorgänge in turbulenten, rußenden Flammen zu verbessern und die Simulationen zu validieren. Im Vergleich zur räumlichen Auswertung von Statistiken einer Variable zeigen sich Fehler in der Simulation durch das korrelierte Auswerten zweier Variablen sehr schnell. Die Aussagekraft einer korrelierten Statistik kann durch Konditionierung und Gewichtung weiter gesteigert werden.



In dieser Arbeit werden hauptsächlich kombinierte, normierte Histogramme zweier gefilterter Variablen  $\tilde{\phi}_1$  und  $\tilde{\phi}_2$  ausgewertet. Zur deren Berechnung wird der komplette  $\tilde{\phi}_1$ - $\tilde{\phi}_2$ -Zustandsraum physikalisch sinnvoll begrenzt und  $s(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)$  benannt. Die Begrenzung kann durch die Wahl der Variablen nötig sein, da beispielsweise das Äquivalenzverhältnis gegen unendlich geht. Sie kann aber auch zur Unterscheidung von vorgemischter und nicht-vorgemischter Verbrennung dienen. Anschließend wird  $s(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)$ , durch  $N_{\tilde{\phi}_1}$  und  $N_{\tilde{\phi}_2}$  Sektionen, in  $N_{\tilde{\phi}_1} \cdot N_{\tilde{\phi}_2}$  Teilzustandsräume oder Sektionen  $k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)$  unterteilt. Sind die Sektionen äquidistant gewählt, entspricht das Histogramm bei geeigneter Normierung einer zweidimensionalen PDF. Für nicht-äquidistant gewählte Sektionen kann diese Normierung zur kontraintuitiven Situation führen, dass das Maximum der Statistik nicht mehr dem wahrscheinlichsten Wert entspricht. Da auch logarithmisch skalierte Sektionen zur Auswertung verwendet werden, kommen deshalb stets Histogramme und keine PDFs zum Einsatz. Die Häufigkeit (engl. frequency)  $F$  von Ereignissen in einer Sektion des Histogramms  $k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)$

$$F(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)) = \sum_{t=1}^N \sum_{i=1}^M D_{i,t}|_{k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)} \quad (4.6)$$

kann durch Summation über die Anzahl der Gitterzellen in  $V$  und die Anzahl der Zeitschritte im Datensatz  $N$  berechnet werden. Dabei wird der auf  $k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)$  konditionierte binäre Indikator

$$D_{i,t}|_{k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)} = \begin{cases} 1, & \tilde{\phi}_1^{\text{u.}(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2))} < \tilde{\phi}_{1,i,t} \leq \tilde{\phi}_1^{\text{o.}(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2))} \cap \tilde{\phi}_2^{\text{u.}(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2))} < \tilde{\phi}_{2,i,t} \leq \tilde{\phi}_2^{\text{o.}(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2))} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.7)$$

benutzt, um ein statistisches Ereignis der beiden Variablen in  $k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)$  anzuzeigen. Zur besseren Vergleichbarkeit wird in den Abbildungen stets die normierte Frequenz

$$F^*(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)) = \frac{\sum_{t=1}^N \sum_{i=1}^M D_{i,t}|_{k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)}}{\sum_{k=1}^{N_{\tilde{\phi}_1} \cdot N_{\tilde{\phi}_2}} \sum_{t=1}^N \sum_{i=1}^M D_{i,t}|_{k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)}} \quad (4.8)$$

verwendet. Außerdem kann der Mittelwert einer weiteren Variable

$$\langle \tilde{\phi}_3 \rangle^s = \left\langle \frac{1}{V} \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \sum_{i=1}^M V_{Z,i} \tilde{\phi}_{3,i,t} |_{s(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)} \right\rangle \quad (4.9)$$

in  $s(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)$  nützlich für die Interpretation der Ergebnisse sein. Um unwichtige Informationen aus der Statistik zu entfernen, erfolgt eine Konditionierung der korrelierten, normierten Histogramme auf eine weitere Variable  $\tilde{\phi}_4$ :

$$F^*(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2))|_{\tilde{\phi}_4} = \frac{\sum_{t=1}^N \sum_{i=1}^M D_{i,t}|_{k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2), \tilde{\phi}_{4,i,t} > 0,001 \cdot \tilde{\phi}_{4_t, \max}}}{\sum_{k=1}^{N_{\tilde{\phi}_1} \cdot N_{\tilde{\phi}_2}} \sum_{t=1}^N \sum_{i=1}^M D_{i,t}|_{k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2), \tilde{\phi}_{4,i,t} > 0,001 \cdot \tilde{\phi}_{4_t, \max}}} \quad (4.10)$$

Der Schwellenwert von  $0,001 \cdot (\tilde{\phi}_{4_t, \max})$  gibt an, ab wann die Statistik gebildet wird. Weiterhin wird die Annahme getroffen, dass die Schwankung der Maximalwerte bei verschiedenen Auswerteziträumen einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Statistik hat. Wird zur Konditionierung eine Größe benutzt, deren Wertebereich negativ ist, zum Beispiel der Rußoxidationsquellterm, werden alle Wer-

## 4 Auswertemethoden

te, die kleiner als 1‰ des Minimalwerts sind, berücksichtigt. Entsprechend kann der konditionierte Mittelwert einer Variable  $\tilde{\phi}_3$

$$\langle \tilde{\phi}_3 |_{\tilde{\phi}_4} \rangle^s = \left\langle \frac{1}{V} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sum_{i=1}^M V_{Z,i} \tilde{\phi}_{3,i,t} \Big|_{s(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2), \tilde{\phi}_{4_i,t} > 0,001 \cdot \tilde{\phi}_{4_t, \max}} \right\rangle \quad (4.11)$$

gebildet werden. Schließlich kann die Statistik mit einer beliebigen Anzahl an Variablen  $\phi_4 \dots \phi_x$  gewichtet werden.

$$F^*(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)) \tilde{\phi}_4 \dots \tilde{\phi}_x = \frac{\sum_{t=1}^N \sum_{i=1}^M D_{i,t} \tilde{\phi}_{4_i,t} \dots \tilde{\phi}_{x_i,t} \Big|_{k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)}}{\sum_{k=1}^{N_{\tilde{\phi}_1} \cdot N_{\tilde{\phi}_2}} \sum_{t=1}^N \sum_{i=1}^M D_{i,t} \tilde{\phi}_{4_i,t} \dots \tilde{\phi}_{x_i,t} \Big|_{k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)}}. \quad (4.12)$$

Dies ist nützlich, um die Bedeutung einzelner Bereiche in  $s(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)$  für die Evolution von  $\tilde{\phi}_4$  zu visualisieren und um die unterschiedlichen Zellgrößen und Aufenthaltszeiten in den Zellen zu berücksichtigen. Zur Analyse der zeitlichen Änderung der Histogramme werden diese an einzelnen Zeitpunkten

$$F_t^*(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)) \tilde{\phi}_4 \dots \tilde{\phi}_x = \frac{\sum_{i=1}^M D_{i,t} \tilde{\phi}_{4_i,t} \dots \tilde{\phi}_{x_i,t} \Big|_{k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)}}{\sum_{k=1}^{N_{\tilde{\phi}_1} \cdot N_{\tilde{\phi}_2}} \sum_{i=1}^M D_{i,t} \tilde{\phi}_{4_i,t} \dots \tilde{\phi}_{x_i,t} \Big|_{k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)}} \quad (4.13)$$

betrachtet. Die Berechnung von Histogrammen über den Zustandsraum einer einzelnen Variable  $s(\tilde{\phi}_1)$  erfolgt analog.

### 4.1.3 Nützliche AuswertevARIABLEN

Die Rußevolution wird unter anderem durch das Flammenregime bestimmt. Ein Indikator, ob ein vorgemischtes oder ein nicht-vorgemischtes Flammenregime vorherrscht, ist der Flammenindex ( $FI$ ) [61, 257]. Da in dieser Arbeit nur Ethylenflammen in Luft betrachtet werden, kann

$$FI = \frac{\nabla \tilde{Y}_{O_2} \nabla \tilde{Y}_{C_2H_4}}{|\nabla \tilde{Y}_{O_2} \nabla \tilde{Y}_{C_2H_4}|} \quad (4.14)$$

mit den Gradienten  $\nabla$  der Favre-gemittelten Speziesmassenbrüchen von Sauerstoff und Ethylen sowie dem Absolutwert  $|\phi|$  gebildet werden. Für vorgemischte Flammen zeigen die Gradienten von Brennstoff und Oxidator in dieselbe Richtung ( $FI > 0$ ) und für nicht-vorgemischte Verbrennung gilt das Gegenteil ( $FI < 0$ ). Da nur gefilterte Größen betrachtet werden und im Feinstrukturbereich ein anderes Flammenregime herrschen kann, ist der  $FI$  als Abschätzung zu betrachten. Zur Visualisierung des  $FI$  in der Flammenzone wird er mit dem Absolutwert der gefilterten Wärmefreisetzung  $|\tilde{q}|$  gewichtet. Der Anteil an vorgemischter Verbrennung in  $s(\phi_1, \phi_2)$

$$r_{\text{pre}} = \frac{\sum_k^{N_{\tilde{\phi}_1} \cdot N_{\tilde{\phi}_2}} F^*(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)) V_Z^* |_{FI > 0}}{\sum_k^{N_{\tilde{\phi}_1} \cdot N_{\tilde{\phi}_2}} F^*(k(\tilde{\phi}_1, \tilde{\phi}_2)) V_Z^*} \quad (4.15)$$

kann zur Analyse beitragen. Der  $FI$  kann analog zu Gl. (4.10) auch zur weiteren Konditionierung der korrelierten, normierten Histogramme benutzt werden.

Die Prozesse der Rußevolution sind für diese Arbeit besonders wichtig, weshalb schon zur Laufzeit der Simulation die einzelnen Rußquellterme berechnet werden. Der gesamte Rußquellterm ist durch

$$\bar{S}_s = \sum_{\alpha=\text{SOOT}_1}^{\text{SOOT}_{30}} \bar{S}_\alpha \quad (4.16)$$

definiert. Außerdem werden die einzelnen Quellterme der  $\text{C}_2\text{H}_2$ -Adsorption ( $\bar{S}_{s,\text{C}_2\text{H}_2}$ ), PAH-Adsorption ( $\bar{S}_{s,\text{PAH}}$ ), Rußbildung ( $\bar{S}_{s,\text{Bil.}}$ ), Rußoxidation durch das OH-Radikal ( $\bar{S}_{s,\text{OH}}$ ) oder Rußoxidation durch molekularen Sauerstoff ( $\bar{S}_{s,\text{O}_2}$ ) betrachtet. Um den relativen Einfluss dieser Prozesse zu quantifizieren, werden die Quellterme des Rußwachstums und der Rußoxidation definiert:

$$\bar{S}_{s,\text{Wachs.}} = \bar{S}_{s,\text{C}_2\text{H}_2} + \bar{S}_{s,\text{PAH}} + \bar{S}_{s,\text{Bil.}}, \quad \bar{S}_{s,\text{Ox.}} = \bar{S}_{s,\text{OH}} + \bar{S}_{s,\text{O}_2}. \quad (4.17)$$

Zur Quantifizierung der Mischung zwischen Brennstoff und Oxidator wurde zur Laufzeit der LES der gefilterte Mischungsbruch  $\tilde{Z}$  berechnet. Er ist durch die Normierung mit den Variablen bei Brennstoff- und Oxidatorzufuhr ( $\tilde{\phi}_\text{B.}$  und  $\tilde{\phi}_\text{O.}$ ) auf  $0 \leq \tilde{Z} \leq 1$  beschränkt und daher nur in nicht-vorgemischten Flammen definiert. Bei seiner Definition wird vereinfachend angenommen, dass alle Spezies gleich diffundieren. Die Formulierung von Bilger [16]

$$\tilde{Z} = \frac{2 \frac{\tilde{Z}_\text{C}}{M_\text{C}} + 0,5 \frac{\tilde{Z}_\text{H}}{M_\text{H}} + \frac{Z_{\text{O.o.}} - \tilde{Z}_\text{O}}{M_\text{O}}}{2 \frac{Z_{\text{C.B.}}}{M_\text{C}} + 0,5 \frac{Z_{\text{H.B.}}}{M_\text{H}} + \frac{Z_{\text{O.o.}}}{M_\text{O}}} \quad (4.18)$$

gilt für Kohlenwasserstoff-Brennstoffe und basiert auf den Elementmassenbrüchen  $\tilde{Z}_\alpha$ . Daher kann  $\tilde{Z}$  in jedem Punkt einer Diffusionsflamme berechnet werden. Im Gegensatz zu  $\tilde{Z}$  kann das Äquivalenzverhältnis  $\Phi$  in beliebigen Flammen ausgewertet werden und wird daher zur Quantifizierung der Mischung in den laminaren Validierungsflammen verwendet. Es ist zwischen  $0 \leq \Phi \leq \infty$  definiert und gibt das, auf die Stöchiometriebedingung normierte, Brennstoff-Luft Verhältnis an. Seine Definition erlaubt sowohl eine globale Betrachtung, die die Brennstoff- und Oxidatormassenströme am Einlass ins Verhältnis setzt als auch eine lokale Betrachtung, die Brennstoff- und Oxidatormassenanteile in jedem beliebigen Punkt der Flamme auswertet. Das lokale Äquivalenzverhältnis lässt sich durch umformen (z.B. [181]) auch über die Elementmassenanteile definieren:

$$\Phi = \frac{\left. \frac{\tilde{Y}_\text{B.}}{\tilde{Y}_\text{O.}} \right|_{\text{st}}}{\frac{\tilde{Z}_\text{O}}{M_\text{O}}} = \frac{2 \frac{\tilde{Z}_\text{C}}{M_\text{C}} + 0,5 \frac{\tilde{Z}_\text{H}}{M_\text{H}}}{\frac{\tilde{Z}_\text{O}}{M_\text{O}}}. \quad (4.19)$$

In dieser Definition beziehen sich die Indizes  $\tilde{\phi}_\text{B.}$  und  $\tilde{\phi}_\text{O.}$  auf die lokalen Massenanteile in einem Punkt. Mischungsbruch und Äquivalenzverhältnis können unter Berücksichtigung der Annahmen bei der Definition von  $\tilde{Z}$  (gleiche Diffusion) ineinander umgerechnet werden:

$$\tilde{\Phi} = \frac{\tilde{Z}}{1 - \tilde{Z}} \frac{1 - Z_\text{st}}{Z_\text{st}} \quad \text{mit} \quad Z_\text{st} = \frac{\frac{Z_{\text{O.o.}}}{M_\text{O}}}{2 \frac{Z_{\text{C.B.}}}{M_\text{C}} + 0,5 \frac{Z_{\text{H.B.}}}{M_\text{H}} + \frac{Z_{\text{O.o.}}}{M_\text{O}}}. \quad (4.20)$$

Im Gegensatz zu  $\Phi_\text{st} = 1$  ist  $Z_{\text{st,C}_2\text{H}_4}/\text{Luft} = 0,063$  von Brennstoff und Oxidator abhängig, weshalb auch bei den turbulenten Flammen meist  $\tilde{\Phi}$  betrachtet wird.

## 4.2 Proper orthogonal decomposition

Die statistische Methode der Hauptkomponentenanalyse (PCA, „principle component analysis“) oder Karhunen-Loève Zerlegung wird in der Anwendung auf turbulente Strömungen oft als „proper orthogonal decomposition“ (POD) [13, 149] bezeichnet. Sie kann zur Datenreduktion (z.B. [90]), Modellbildung und Analyse dienen und findet sowohl in numerischen (z.B. [66, 252]) als auch experimentellen Arbeiten (z.B. [234, 262]) Anwendung. In dieser Arbeit wird die POD zur Datenanalyse, genauer gesagt zur Analyse kohärenter und inkohärenter Strukturen, eingesetzt. Strukturen im Variablenfeld werden als kohärent bezeichnet, wenn sie wiederholt auftreten und eine charakteristische Lebensdauer besitzen [13], also über einen längeren Zeitraum im Feld erhalten bleiben. Beispielsweise ist die karmansche Wirbelstraße eine kohärente Struktur, während die meisten turbulenten Strukturen typischerweise inkohärent sind.

### 4.2.1 Grundlagen

Für die POD einer beliebigen, im physikalischen Raum definierten Variablen  $\tilde{\phi}(\mathbf{x}, t)$  ordnet man deren Schwankungsanteil  $\phi'(\mathbf{x}, t) = \tilde{\phi}(\mathbf{x}, t) - \langle \tilde{\phi}(\mathbf{x}) \rangle$  in einer Matrix  $\mathbf{B}(\phi'(\mathbf{x}, t)) \in \mathbb{R}^{N \times M}$  an (kurz:  $\mathbf{B}$ ). Zur besseren Lesbarkeit wird nachfolgend auf die explizite Notation des Ortsvektors ( $\mathbf{x}$ ) und der Zeit ( $t$ ) verzichtet. POD kann aber auch auf jede beliebige andere Variable angewandt werden, so auch auf zeitaufgelöste Histogramme, in denen der Schwankungsanteil der Frequenz  $F_t^{*'} = F_t^* - F^*$  in einer Matrix  $\mathbf{B}(F_t^{*'}) \in \mathbb{R}^{N \times (\tilde{N}_{\phi_1} \cdot \tilde{N}_{\phi_2})}$  angeordnet wird. Für jede Variable gilt, dass die auszuwertenden Schwankungsanteile zeitlich äquidistant vorliegen müssen. Werden Variablen betrachtet, die im physikalischen Raum definiert sind, müssen die verschiedenen Zellgrößen des Rechengitters berücksichtigt werden. Dazu wird die Gewichtungsmatrix  $\mathbf{V} \in \mathbb{R}^{M \times M}$  eingeführt, deren Einträge das normierte Zellvolumen  $V_{Z,i}^*$  (Gl. (4.4)) enthalten. Konkret soll die nachfolgend definierte Kovarianzmatrix (Gl. (4.22)) gewichtet werden [238], woraus sich die Gewichtung des Ergebnisdatensatzes zu  $\mathbf{B}\mathbf{V}^{\frac{1}{2}}$  ergibt. Wird die POD auf  $F_t^{*'}$  angewandt, entspricht  $\mathbf{V}$  der Einheitsmatrix. Das weitere Vorgehen ist für alle Variablen gleich. Wegen der häufigeren Anwendung wird nachfolgend exemplarisch der Fall einer Variablen im physikalischen Raum mit  $\mathbf{B}(\phi') \in \mathbb{R}^{N \times M}$  gezeigt. Damit lässt sich die Singulärwertzerlegung (SWZ) [27]

$$\mathbf{B}\mathbf{V}^{\frac{1}{2}} = \mathbf{\Psi}\mathbf{\Sigma}\mathbf{\Phi}^T, \quad (4.21)$$

definieren. Diese setzt voraus, dass die Eigenvektormatrix  $\mathbf{\Psi}(\phi') \in \mathbb{R}^{N \times N}$  und die Hauptkomponentenmatrix  $\mathbf{\Phi}(\phi') \in \mathbb{R}^{M \times M}$  orthogonal sind. Die Einträge der Singulärwertmatrix  $\mathbf{\Sigma}(\phi') \in \mathbb{R}^{N \times M}$  sind, außer auf der Hauptdiagonalen, als Null definiert. Die Dimension von  $\mathbf{\Psi}$  und  $\mathbf{\Phi}$  veranschaulicht, dass die SWZ den gewichteten Ergebnisdatensatz  $\mathbf{B}\mathbf{V}^{\frac{1}{2}}$  in räumliche und zeitliche Komponenten zerlegt. Zur Lösung von Gl. (4.21) wird bei der klassischen POD linksseitig mit  $(\mathbf{B}\mathbf{V}^{\frac{1}{2}})^T$  multipliziert. Da in Simulationen meist  $M \gg N$  gilt, ist diese Methode ineffektiv. Deshalb kommt die „snapshot“-POD [222] zum Einsatz, bei der rechtsseitig mit  $(\mathbf{B}\mathbf{V}^{\frac{1}{2}})^T$  multipliziert wird. Damit lässt sich die Kovarianzmatrix  $\mathbf{K}(\phi') \in \mathbb{R}^{N \times N}$  mit

$$\mathbf{K} = \mathbf{B}\mathbf{V}\mathbf{B}^T \quad (4.22)$$

aufstellen. Dabei gilt stets  $\mathbf{K} = \mathbf{K}(u') + \mathbf{K}(v') + \mathbf{K}(w')$  [234] für die POD einer Geschwindigkeitskomponente. Das Einsetzen in Gl. (4.21) ergibt das Eigenwertproblem

$$\mathbf{K}\Psi = \Psi\Lambda \quad (4.23)$$

mit der Eigenwertdiagonalmatrix  $\Lambda = \Sigma^T \Sigma$  und der Eigenvektormatrix  $\Psi$ , in denen jeweils die Eigenwerte  $\lambda_l$  und die normierten Eigenvektoren  $\psi_l$  angeordnet sind. Jede POD-Mode  $l$  besitzt also einen zugehörigen Eigenwert und einen Eigenvektor. Die Anzahl der Eigenwerte und Eigenvektoren und damit die Anzahl an POD-Moden, entsprechen der Anzahl an Zeitschritten im Simulationsdatensatz  $N$ . Die Lösung des Eigenwertproblems (Gl. (4.23)) dient zur Lösung der SWZ (Gl. (4.21)). So können die ersten  $N \times M$  Einträge von  $\Phi$  berechnet werden. Die anderen Einträge sind durch die Definition von  $\Sigma$  nicht relevant. Durch Skalieren erhält man den Vektor der zeitlichen Koeffizienten

$$a_l = \sqrt{\lambda_l} \psi_l \quad (4.24)$$

und den volumenskalierten Vektor der räumlichen Moden

$$\varphi_l = \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} \psi_l \mathbf{B} \mathbf{V}^{\frac{1}{2}} \quad (4.25)$$

der POD der Variable  $\phi$ . Gleichung (4.25) beschreibt also eine Transformation von  $\mathbf{B} \mathbf{V}^{\frac{1}{2}}$  mit Hilfe der Eigenvektoren der Kovarianzmatrix. Wendet man Gl. (4.25) auf das unskalierte Variablenfeld an, erhält man den Vektor der räumlichen Moden

$$\varphi_l^* = \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} \psi_l \mathbf{B} \quad (4.26)$$

mit  $\varphi_l^* = \varphi_l \mathbf{V}^{-\frac{1}{2}}$ . Diese sind nicht mehr orthogonal, lassen sich aber besser interpretieren da bei der grafischen Darstellung der räumlichen Moden die unterschiedlichen Zellvolumen bereits berücksichtigt sind.

### 4.2.2 Alternative Auswertemethoden

Haben mehrere Dynamiken eine ähnliche Energie, fallen diese in der POD oft in einer oder mehreren Moden zusammen. Dies bedeutet, dass Dynamiken mit verschiedenen Frequenzen aber ähnlicher Energie nicht mehr unterschieden werden können. Kohärente und inkohärente Strukturen können also nicht zuverlässig voneinander getrennt werden. Ein weiterer Nachteil der POD ist die Annahme eines linearen Zusammenhangs zwischen dem zeitlichen Koeffizienten und der räumlichen Mode. Ist dies in Teilbereichen nicht der Fall, führt die POD hier zu einer Glättung der Dynamik [234]. Auf Grund dieser Nachteile, werden nachfolgend Vor- und Nachteile alternativer Auswertemethoden aufgezeigt.

Um ein nicht-lineares Verhalten der Moden zuzulassen, können spezielle neuronale Netze, sogenannte Autoencoder, eingesetzt werden. Bei Verwendung von linearen Ansatzfunktionen entspricht der Autoencoder weitestgehend der POD [8]. Nicht-lineare Ansatzfunktionen können zu einem höheren Informationsgehalt der ersten Moden führen [28], welche jedoch schwierig zu interpretieren sein können [25].

Die meisten Nachteile der POD können mit frequenzbasierten Analysemethoden behoben werden, die jedoch meist keine Aussage über den Energiegehalt einer Mode, also deren Bedeutung, machen. Die einfachste Methode ist die Phasenmittelung. Bei einer gegebenen Frequenz werden nur solche Ergebnisse zur Mittelung verwendet, die in einem definierten Phasenbereich liegen. Dabei wird keine Linearität vorausgesetzt. Je kleiner der Phasenbereich, desto aussagekräftiger die Analyse. Allerdings steigt damit auch die physikalische Zeit über die gemittelt werden muss, weshalb die Methode für CFD selten geeignet ist.

Dagegen ist die „dynamic mode decomposition“ (DMD) [211] in der CFD verbreitet. Sie versucht eine Abbildungsvorschrift zwischen allen Auswertzeitpunkten zu finden. Die Eigenwertanalyse dieser Vorschrift erlaubt es, die Dynamiken exakten Frequenzen zuzuordnen und deren räumliches Verhalten darzustellen. Ist der zu analysierende Datensatz periodisch und mittelwertfrei, so geht die DMD in eine diskrete Fourier-Transformation (DFT) über [36]. Inkohärente Dynamiken lassen sich mit DMD allerdings nicht untersuchen.

Um die bereits genannten Nachteile der POD abzumildern, wurde einige Verbesserungen vorgeschlagen. Beispielsweise wird bei der „extended proper orthogonal decomposition“ (EPOD) [23, 67] der Einfluss der Dynamik einer Variable auf eine zweite Variable untersucht, indem die räumlichen Moden der zweiten Variable mit den zeitlichen Koeffizienten der Ersten berechnet wird. So kann zum Beispiel der Einfluss der helikalen Wirbelstruktur (PVC, „precessing vortex core“) auf Variablen untersucht werden, die einen hohen Rauschanteil beinhalten. Informationen über den zeitlichen Zusammenhang der Variablen und die Energie der Dynamik gehen dabei verloren.

Weitere Verbesserungen der POD [158, 219] zielen darauf ab, intermittente Dynamiken besser extrahieren zu können. So auch die von Yin und Stöhr [262] vorgeschlagene „multiresolution proper orthogonal decomposition“ (MRPOD), die die energiebasierte Modenaufteilung der POD im Frequenzbereich eingrenzt. Dadurch wird verhindert, dass Dynamiken ähnlicher Energie und unterschiedlicher Frequenz in einer Mode zusammenfallen. Sie hat sich als sehr geeignet zur Analyse der intermittenten Rußdynamiken erwiesen [104, 105] und wird in dieser Arbeit ausschließlich angewendet. Weitere Details zu Theorie und Anwendung von POD, DMD und weitergehenden Analysemethoden können Taira et al. [238, 239] entnommen werden.

### 4.2.3 Multiresolution POD

Die MRPOD verbindet eine Multiskalenanalyse (MRA, „multiresolution Analysis“) mit der klassischen POD, damit diese nur in einem bestimmten Frequenzbereich durchgeführt wird. Dazu wird eine Filterungsmatrix  $\mathbf{F} \in \mathbb{R}^{N \times N}$  benötigt. Statt den kompletten Ergebnisdatsatz zu filtern, ist es ausreichend und effizienter [262], die gefilterte Kovarianzmatrix

$$\mathbf{K}_f = \mathbf{F}\mathbf{K} \tag{4.27}$$

zu erzeugen. Anschließend wird das normale POD-Verfahren durchgeführt und alle Eigenschaften der POD bleiben im ausgewählten Frequenzbereich erhalten. Somit kann verhindert werden, dass verschiedene Dynamiken ähnlicher Energie aber unterschiedlicher Frequenz in einer Mode zusammenfallen, während die Vorteile der POD gegenüber rein frequenzbasierten Verfahren erhalten bleiben. Im Folgenden wird der Index  $f$  stets durch einen konkreten Filternamen ersetzt.

Bei der Konstruktion der Filterungsmatrix  $\mathbf{F}$  besteht ein Konflikt zwischen einer möglichst guten Auflösung des Frequenz- oder des Zeitbereichs. Eine gute Frequenzauflösung, wie bei einer Fourier-Transformation, kann zu einer schlechten Auflösung von Amplitudenänderungen von  $\phi'$  führen. Eine gute Zeitauflösung geht meist mit einer schlechten Abgrenzung von aufgelösten zu gefilterten Frequenzen einher. Deshalb wird  $\mathbf{F}$  mit MRA erzeugt, die auf einer Wavelettransformation basiert. Wavelets sind zeitlich und spektral begrenzte Funktionen und können zur diskreten Wavelettransformation (DWT) genutzt werden. Genauer gesagt, wird  $\mathbf{F}$  beim MRPOD-Verfahren mit „maximum overlap discrete wavelet packet transformation“ (MODWPT) erzeugt. Zwar verfälscht diese Methode die zeitlichen Koeffizienten an deren Anfang und Ende, wodurch sie nicht mehr energiekonservativ ist, allerdings überwiegen die Vorteile einer hohen Flexibilität bei der Auswahl des Frequenzbereichs und der guten Eignung für endliche Signale.

Zur Erzeugung von  $\mathbf{F}$  wird ein Basiswavelet benötigt. Wavelets werden verschiedenen Familien zugeordnet, die ihre Eigenschaften charakterisieren. Außerdem sind sie durch die Anzahl der Filterkoeffizienten  $L$  definiert. Beides bestimmt die Qualität des Filters. In dieser Arbeit kommen Daubechies „least asymmetric“ Wavelets [50] mit  $L = 20$  Filterkoeffizienten (LA20) zum Einsatz. Außerdem wird ein Zerlegungsfaktor  $j$  benötigt, der bestimmt, in wie vielen Frequenzbereichen oder Skalen  $i$  die MRPOD durchgeführt werden kann. Diese sind näherungsweise durch

$$\frac{1}{\Delta t} \left[ \frac{i}{2^{j+1}}, \frac{i+1}{2^{j+1}} \right], \quad i = 0, 1, \dots, 2^j - 1 \quad (4.28)$$

begrenzt, wobei  $\Delta t$  der Zeitdifferenz im Ergebnisdatensatz entspricht. Es empfiehlt sich den maximalen Zerlegungsfaktor

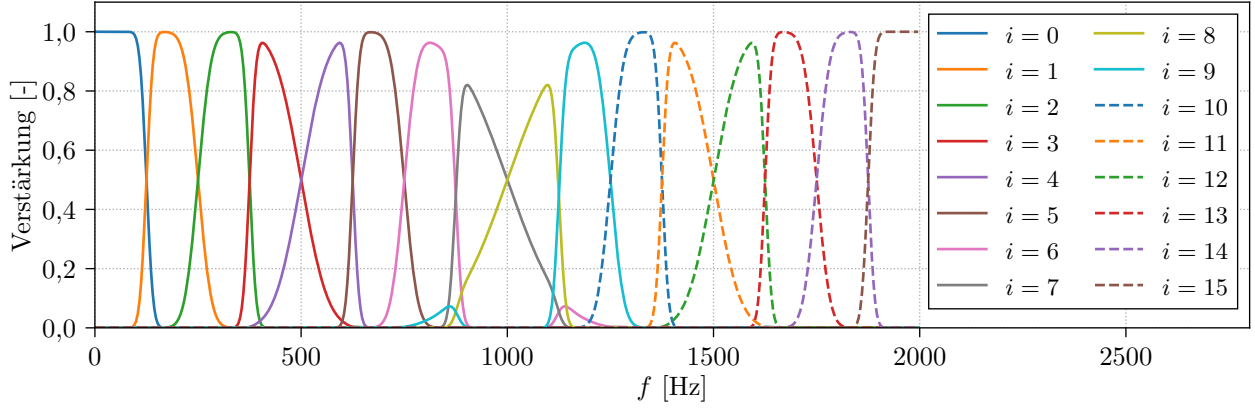
$$j_{\max} = \left\lfloor \log_2 \left( \frac{N}{L-1} + 1 \right) \right\rfloor \quad (4.29)$$

nicht zu überschreiten, wobei  $\lfloor \cdot \rfloor$  die Abrundung auf ganzzahlige Werte beschreibt. Abbildung 4.1 zeigt die Verstärkung der in dieser Arbeit genutzten Basisfilter bis zu einer Frequenz  $f = 2000$  Hz. Fast kein Filter entspricht dem Ideal eines perfekten Rechteckfilters. Deshalb ist es oft sinnvoll, einzelne Filter durch Summation zu kombinieren, um die spektrale Auflösung zu verbessern [262]. Dies wird im konkreten Anwendungsfall in Abschnitt 7.3.1 dargestellt. Summiert man alle einzelnen Filter auf, erhält man keine Frequenzfilterung mehr und  $\mathbf{F}$  wird zur Einheitsmatrix. Eine detaillierte Beschreibung der Erzeugung von  $\mathbf{F}$  kann Yin und Stöhr [262] entnommen werden.

### 4.2.4 Interpretation und Anwendung

Die Hauptdiagonale der ungefilterten Kovarianzmatrix  $\mathbf{K}$  enthält die zellvolumengewichtete Summe der Varianz von  $\tilde{\phi}$  im gesamten Feld zum jeweiligen Zeitpunkt. Im Falle der Geschwindigkeit wäre das die doppelte kinetische Energie der Schwankungsanteile. Da bei einer Eigenwertanalyse grundsätzlich

$$\sum_{l=1}^N \lambda_l = \text{Spur}(\mathbf{K}) \quad (4.30)$$



**Abbildung 4.1:** Signalverstärkung von Filtern, die mit einem LA20 Wavelet,  $j = 4$  und  $\Delta t = 2,5 \cdot 10^{-4}$  s erzeugt wurden.

gilt, müssen auch die Eigenwerte die kinetische Energie der Schwankungsanteile beinhalten. Jeder Eigenwert zeigt also, wie viel der ursprünglichen Schwankungsenergie in der jeweiligen Mode abgebildet ist. Moden mit großen Eigenwerten bilden somit einen hohen Anteil der ursprünglichen Schankungsenergie ab und enthalten dadurch auch die meisten Informationen über das ursprüngliche Variablenfeld. Nachfolgend wird der Begriff „Energie“ unabhängig von der analysierten Variable verwendet. Eine charakteristische Eigenschaft der POD ist, dass die jeweiligen Eigenwerte optimal gewählt und daher möglichst groß sind [13]. Dadurch genügen oft wenige POD-Moden, um die Haupteigenschaften des Variablenfelds wiederzugeben, weshalb POD auch zur Datenreduktion eingesetzt wird. Für nachfolgende Auswertungen wird die Gesamtenergie und die relative Energie einer MRPOD-Mode als

$$E_{\text{ges}} = \text{Spur}(\mathbf{K}) \quad \text{und} \quad E_{l,f}^* = \frac{\lambda_{l,f}(\phi')}{E_{\text{ges}}} \quad (4.31)$$

definiert. Die Normierung der MRPOD-Eigenwerte  $\lambda_{l,f}$  mit der POD-Energie  $E_{\text{ges}}$  ermöglicht den Vergleich von  $E_{l,f}^*$ , die mit verschiedenen Filtern erzeugt wurden.

Kohärente Strukturen rufen meist ein Modenpaar mit annähernd gleichem Energiegehalt hervor. Der quantitative Einfluss verschiedener MRPOD-Moden, beispielsweise Mode eins und zwei des Schwankungsanteils einer Variable kann an einem spezifischen Punkt  $\mathbf{x}$  zu einer spezifischen Zeit  $t$  durch Rekonstruktion von

$$\phi_f'^{1,2}(\mathbf{x}, t) = \sum_{l=1}^2 a_{l,f}(t, \phi')^T \varphi_{l,f}(\mathbf{x}, \phi') \quad (4.32)$$

bestimmt werden. Die Rekonstruktion einer kohärenten Struktur muss immer mit beiden Moden des zugehörigen Modenpaares erfolgen. Der Einfluss dieses Modenpaares auf das zeitlich gemittelte Feld wird durch

$$\tilde{\phi}_f^{1,2}(\mathbf{x}, t) = \langle \tilde{\phi}(\mathbf{x}) \rangle + \phi_f'^{1,2}(\mathbf{x}, t) \quad (4.33)$$

bestimmt. Wird über alle MRPOD-Moden und MRPOD-Filter summiert, erhält man das ursprüngliche Variablenfeld.



Zusammengefasst ist die eigentliche Stärke aller POD-Verfahren die automatische Identifizierung von energiereichen und daher wichtigen Moden durch die absteigende Anordnung von  $\lambda_l$ . Durch die Trennung der räumlichen und zeitlichen Struktur der Moden lassen sich diese einfach interpretieren. Der Vektor  $\varphi_l$  zeigt also die Form und Stärke der Mode  $l$  im physikalischen Raum  $\mathbf{x}$  oder im  $\tilde{\phi}_1$ - $\tilde{\phi}_2$ -Raum, während  $a_l$  das zeitliche Verhalten der Mode  $l$  darstellt. Die Rekonstruktion erlaubt schließlich eine vollständige Quantifizierung des Einflusses einzelner Moden. Die Frequenzfilterung des MRPOD-Verfahrens verbessert die Aussagekraft des normalen POD-Verfahrens, indem das Zusammenfallen verschiedener Dynamiken in einer Mode weitgehend verhindert wird.

#### 4.2.5 Korrelierte Analyse

Zusammenhänge zwischen den Dynamiken zweier Variablen können durch korrelierte Analysen aufgezeigt werden. So lässt sich zum Beispiel der Einfluss von Dynamiken im Strömungsfeld, auf den Mischungsbruch oder den Rußvolumenbruch feststellen. Dabei muss zwischen kohärenten und inkohärenten Dynamiken unterschieden werden.

Kohärente Dynamiken weisen oft ein sinusförmiges Zeitsignal auf, dessen Phasenversatz den Einfluss einer Variablen auf eine andere Variable zeigt. Dabei muss stets der lokale Phasenversatz des rekonstruierten Modenpaars (Rekonstruktion siehe Gl. (4.32)), statt dem Phasenversatz der Zeitsignale des Modenpaars, betrachtet werden, da nur der lokale Phasenversatz eindeutig definiert ist. Abbildung 4.2 zeigt zwei beispielhaft rekonstruierte Dynamiken an einem Gitterpunkt und deren Nulldurchgang vom negativen ins positive  $t_0(\mathbf{x}, \phi'^{1,2})$ . Da  $\phi'^{1,2}(\mathbf{x}, t)$  nur an diskreten Zeitpunkten vorliegt, wird  $t_0$  durch lineare Interpolation bestimmt. Alle Nulldurchgänge bilden den Vektor  $\tau(\mathbf{x}, t, \phi'^{1,2})$ . Um den Einfluss der MODWPT-Randbedingung zu minimieren, bleiben die ersten und letzten fünf Prozent des rekonstruierten Signals unberücksichtigt. Der lokale Phasenversatz zweier Variablen  $\phi'_1$  und  $\phi'_2$  einer kohärenten Dynamik bestehend aus den ersten beiden Moden, mit charakteristischer Frequenz  $f$  ergibt sich unter Berücksichtigung der Schankungsanteile zu

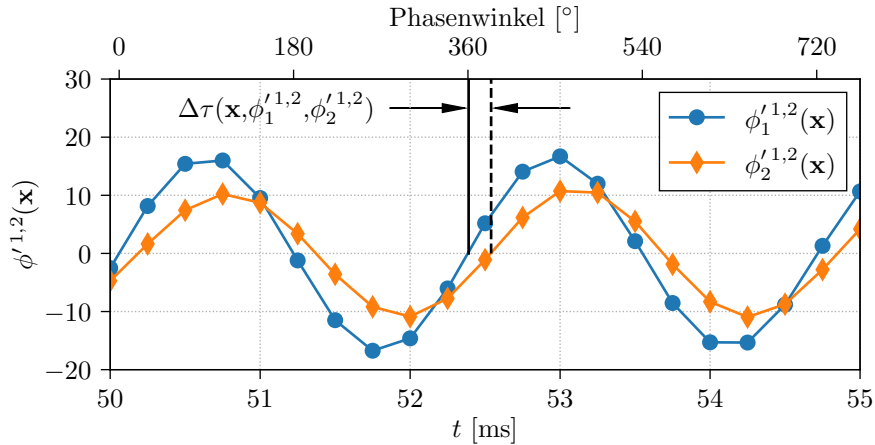
$$\Delta\tau(\mathbf{x}, \phi'^{1,2}, \phi'^{1,2}) = \langle \tau(\mathbf{x}, t, \phi'^{1,2}) - \tau(\mathbf{x}, t, \phi'^{1,2}) \rangle \cdot f \cdot 360^\circ. \quad (4.34)$$

Die Vektoren der Nulldurchgänge werden, wie in Abb. 4.2 gezeigt, stets so angeordnet, dass für deren ersten Eintrag  $t_0^1(\mathbf{x}, \phi'^{1,2}) < t_0^2(\mathbf{x}, \phi'^{1,2})$  gilt. Somit ist klar definiert, ob  $\phi'^{1,2}$  und  $\phi'^{2,2}$  positiv ( $270^\circ < \Delta\tau(\mathbf{x}, \phi'^{1,2}, \phi'^{1,2}) \leq 90^\circ$ ) oder negativ ( $90^\circ < \Delta\tau(\mathbf{x}, \phi'^{1,2}, \phi'^{1,2}) \leq 270^\circ$ ) korreliert sind.

Die Ähnlichkeit inkohärenter Dynamiken wird durch die Kreuzkorrelation der zeitlichen Koeffizienten

$$R_{i,j}(\Delta t, \phi'_1, \phi'_2) = \langle a_i(t, \phi'_1) a_j(t + \Delta t, \phi'_2)^T \rangle \quad (4.35)$$

ersichtlich. Zur besseren Darstellung werden normierte Kreuzkorrelationen  $R_{i,j}^*(\Delta t, \phi'_1, \phi'_2)$  verwendet, die mit dem Maximum aller  $R_{i,j}(\Delta t, \phi'_1, \phi'_2)$  skaliert sind. Um irrelevante Korrelationen auszuschließen, wird nachfolgend nur ein Zeitbereich von  $-50 < \Delta t < 50$  ms berücksichtigt. Neben der Kreuzkorrelation zweier MRPOD-Moden, kann auch die Korrelation einer inkohärenten Mode  $a_i(t, \phi'_1)$  mit einer anderen, zeitlich definierten Variable  $\phi_2(t)$  ( $R_i^*(\Delta t, \phi'_1, \phi_2)$ ) zum Verständnis der Wirkungsweise inkohärenter Dynamiken beitragen.



**Abbildung 4.2:** Rekonstruktion zweier beliebiger Variablen  $\phi_1$  und  $\phi_2$  an einem beliebigen Ort  $\mathbf{x}$  nach Gl. (4.32) mit  $l = 1, 2$ . Punkte zeigen rekonstruierte Werte an. Die farbigen Hilfslinien dienen zur Orientierung. Beispielhafter Nulldurchgang: —  $t_0(\mathbf{x}, \phi_1^{1,2})$ , - - -  $t_0(\mathbf{x}, \phi_2^{1,2})$ . Der Phasenversatz  $\Delta\tau(\mathbf{x}, \phi_1^{1,2}, \phi_2^{1,2})$  ist exemplarisch für diesen Nulldurchgang dargestellt.

### 4.3 Qualitätskriterien der LES

Die Qualität jeder LES hängt neben der Genauigkeit der eingesetzten Modelle, Randbedingungen und numerischen Lösungsschemata entscheidend von der räumlichen Auflösung, also vom Zusammenspiel von Rechengitter und Numerik, ab. Gitterkonvergenzstudien, bei denen das Gitter so lange verfeinert wird, bis sich die Ergebnisse kaum noch unterscheiden, können bei LES mit Verbrennung aus Kostengründen kaum durchgeführt werden. Außerdem führt die inhärente Gitterabhängigkeit des LES-Ansatzes mit WALE-Turbulenzmodell dazu, dass höhere Momente wie der RMS-Wert nicht konvergieren, bis die LES in eine DNS übergeht. Untersuchungen nicht-reagierende Rechnungen können als Abschätzung der LES-Qualität dienen, da die Verbrennung oft dämpfend auf die Turbulenz wirkt. Andererseits kann Verbrennung zu einer Anfachung kohärenter Strukturen führen, was wiederum mehr Turbulenz verursacht. Eine Untersuchung der LES mit Verbrennung anhand von aussagekräftigen Qualitätskriterien ist daher unabdingbar.

#### 4.3.1 Schwache Qualitätskriterien

LES muss Turbulenz bis in den oberen Teil des Inertialbereichs (vgl. Abb. 2.1) auflösen. Dessen unteres Ende ist bei LES gänzlich unbekannt, während sein oberes Ende in technischen Anwendungen, wegen der lokal stark unterschiedlichen Turbulenzproduktion und -dissipation, nur grob geschätzt werden kann. Eine solche Abschätzung kann aus dem Vergleich von modellierten und aufgelösten Größen gewonnen werden. Da die modellierten Größen von den verwendeten Modellen und Konstanten abhängen und zudem Modellierungsfehlern unterliegen, sollten diese Kriterien nur als notwendige Bedingung gesehen werden, weshalb sie in dieser Arbeit schwache Qualitätskriterien genannt werden. Eines dieser Kriterien ist das Verhältnis der aufgelösten zur gesamten turbulenten kinetischen Energie, das laut Pope [188] nicht unter 80 % liegen sollte. Ein anderes Kriterium ist das Verhältnis der modellierten zur molekularen kinematischen Viskosität [89], das für Werte unter Zehn als ausreichend angesehen werden kann [119].

### 4.3.2 Starke Qualitätskriterien

Das Leistungsdichtespektrum (LDS) bietet dank seiner Ähnlichkeit zur Energiekaskade (vgl. Abschnitt 2.3.1) einen anschaulichen Weg zur Qualitätsanalyse einer LES. Dazu wird das Zeitsignal der Geschwindigkeit an einem Gitterpunkt mit Hilfe der Welch-Methode in das LDS transformiert und dabei geglättet. Der Inertialbereich ist durch den Abfall des LDS  $\propto f^{-5/3}$  gekennzeichnet. Wird dieser proportionale Signalabfall über eine Größenordnung aufgelöst, kann die Auflösung durch das Rechengitter als ausreichend betrachtet werden [89]. Zu beachten ist die Grenzfrequenz  $f_{\text{CDS}} = \langle u \rangle / (4l_Z)$ , ab der Diskretisierungsfehler der in dieser Arbeit verwendeten zentralen Diskretisierung (CDS) einsetzen [89]. Problematisch an dieser Methode ist die logarithmische Darstellung, da eine Abweichung der Steigung des Frequenzabfalls vom theoretischen Wert oft nicht erkannt wird.

Untersuchungen von Davidson [51] zu Qualitätskriterien in einer Kanalströmung zeigen, dass auch das LDS kein verlässliches Maß sein kann. Vielmehr wird der Einsatz von Zweipunktkorrelationen empfohlen. Für die beispielhaft gewählte Geschwindigkeitskomponente  $u$  und Raumrichtung  $\mathbf{x}$  lautet die normierte Zweipunktkorrelation

$$\mathcal{R}_{u',\mathbf{x}}^*(\Delta\mathbf{x}) = \frac{\langle u'(\mathbf{x})u'(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) \rangle}{\langle u'(\mathbf{x})u'(\mathbf{x}) \rangle}. \quad (4.36)$$

In dieser Arbeit werden nur Zweipunktkorrelation betrachtet, die in eine Raumrichtung variieren, weshalb nachfolgend lediglich der variierte Anteil des Ortsvektors ( $\mathbf{x}$ ) bezeichnet wird. Mit Hilfe von  $\mathcal{R}^*$  kann die Auflösung der größten turbulenten Strukturen bewertet werden. Eine Auflösung von acht Zellen wird empfohlen [51]. Ist die Strömungsrichtung nicht klar definiert, beispielsweise durch instationäre, kohärente Dynamiken, verfälscht dies die Zweipunktkorrelation. Auch ein sich veränderndes Verhältnis von Produktion zu Dissipation im Bereich von  $\Delta\mathbf{x}$ , beispielsweise beim Durchqueren einer Scherschicht, kann die Aussagekraft der Zweipunktkorrelation negativ beeinflussen. Ihre Anwendung in technischen Geometrien ist also problematisch. Starke Qualitätskriterien können daher zwar grundsätzlich angewandt werden, bedürfen aber einer sorgfältigen Interpretation.



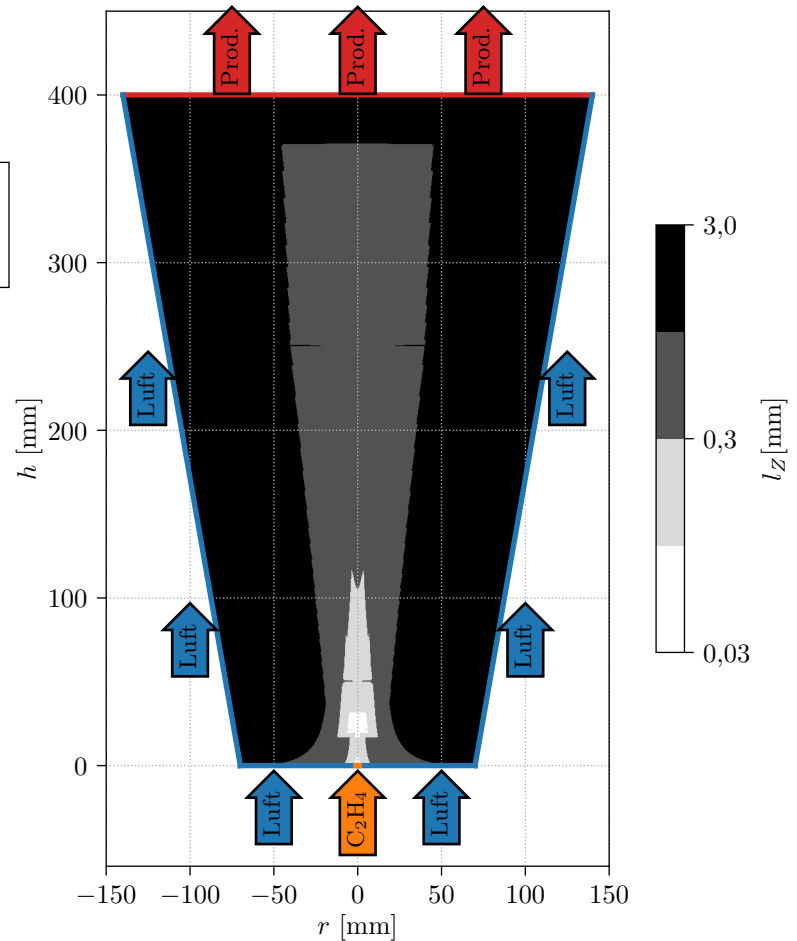
# 5 Abgehobene Freistrahlf Flamme

Die Modellvalidierung an rußenden Freistrahlf lammern mit gasförmigen Brennstoffen mittels LES beschränkt sich meist auf anliegende Freistrahlf lammern (z.B. [5, 62, 168, 197, 256, 258, 259]) und flammenhalterstabilisierte Strahlf lammern [55, 165], wohingegen abgehobene Freistrahlf lammern bisher kaum genutzt wurden. Sie stellen erhöhte Anforderungen an die Verbrennungsmodellierung, finden sich jedoch häufig in technischen Anwendungen. Ihr Vorteil für die Modellvalidierung besteht darin, dass der Einfluss der Randbedingungen auf die Flamme minimal ist, wodurch sich Modellierungsfehler besser identifizieren lassen. Deshalb veröffentlichten Köhler et al. [129–131] umfangreiche Messungen einer AFF, die inzwischen Teil der ISF-Workshop [118] Datenbank ist. Gu et al. [108] erweiterte den experimentellen Datensatz der AFF um korrelierte Messungen von Temperatur, Rußvolumenbruch und Rußpartikelgröße. Bisher wurden vor allem stationäre Simulationen dieser Flamme publiziert [33, 131, 204, 261], dabei wurde eine hohe Sensitivität der Rußbildung auf die Mischung von Brennstoff und Oxidator beobachtet. Dies rechtfertigt den Einsatz von LES, da hier die turbulente Mischung zum größten Teil aufgelöst wird und deshalb genauere Ergebnisse zu erwarten sind. Eberle et al. [74] führten als erste eine LES der AFF durch, deren Ergebnisse zur Validierung des DLR-Rußmodells genutzt wurden [70]. In dieser Arbeit wurde die statistische Konvergenz verbessert [102], weshalb die Flamme nachfolgend erneut untersucht wird. Neben einer Validierung wird eine Analyse mit Hilfe korrelierter Statistiken durchgeführt, die das Verständnis der Rußevolution in abgehobenen Freistrahlf lammern verbessert.

## 5.1 Grundlagen

### 5.1.1 Experimenteller Aufbau

Der Brenner der AFF besteht aus einer runden Brennstoffdüse mit zwei Millimeter Durchmesser, die von einer runden Mantelstromdüse mit einem Durchmesser von 140 mm umgeben ist. Durch die Brennstoffdüse strömt unverdünntes Ethylen mit einer mittleren Geschwindigkeit von  $\langle u \rangle = 44$  m/s, wodurch die Reynoldszahl  $Re = 10000$  beträgt. Im Gegensatz zum turbulenten Brennstoffstrom ist der Mantelstrom mit einer mittleren Geschwindigkeit von 0,29 m/s laminar. Das Experiment wurde unter Umgebungsdruck und ohne Vorheizung von Brennstoff oder Oxidator durchgeführt. Bei den gewählten Betriebsbedingungen ankert die Flamme bei  $h \approx 22,3$  mm über dem Brennstoffeinlass [131].



**Abbildung 5.1:** Rechengebiet, Gitterauflösung und Randbedingungen der AFF.

### 5.1.2 Numerisches Modell

Abbildung 5.1 zeigt die Gitterauflösung in einer Schnitt Ebene durch das konische Rechengebiet. Dessen Länge von 400 mm ist so gewählt, dass die sichtbare Flammenlänge abgedeckt wird. Das größtenteils aus Hexaedern bestehende Gitter hat ca.  $15,6 \cdot 10^6$  Gitterpunkte. Im Bereich der Flamme und besonders im Bereich der Flammenstabilisierung ist es blockweise verfeinert. Dort beträgt die Zelllänge ungefähr  $60 \mu\text{m}$ , um eine Auflösung der OH-Schicht mit mindestens zehn Zellen zu gewährleisten. Im Bereich der Flamme wird eine Zelllänge von 0,8 mm nicht überschritten.

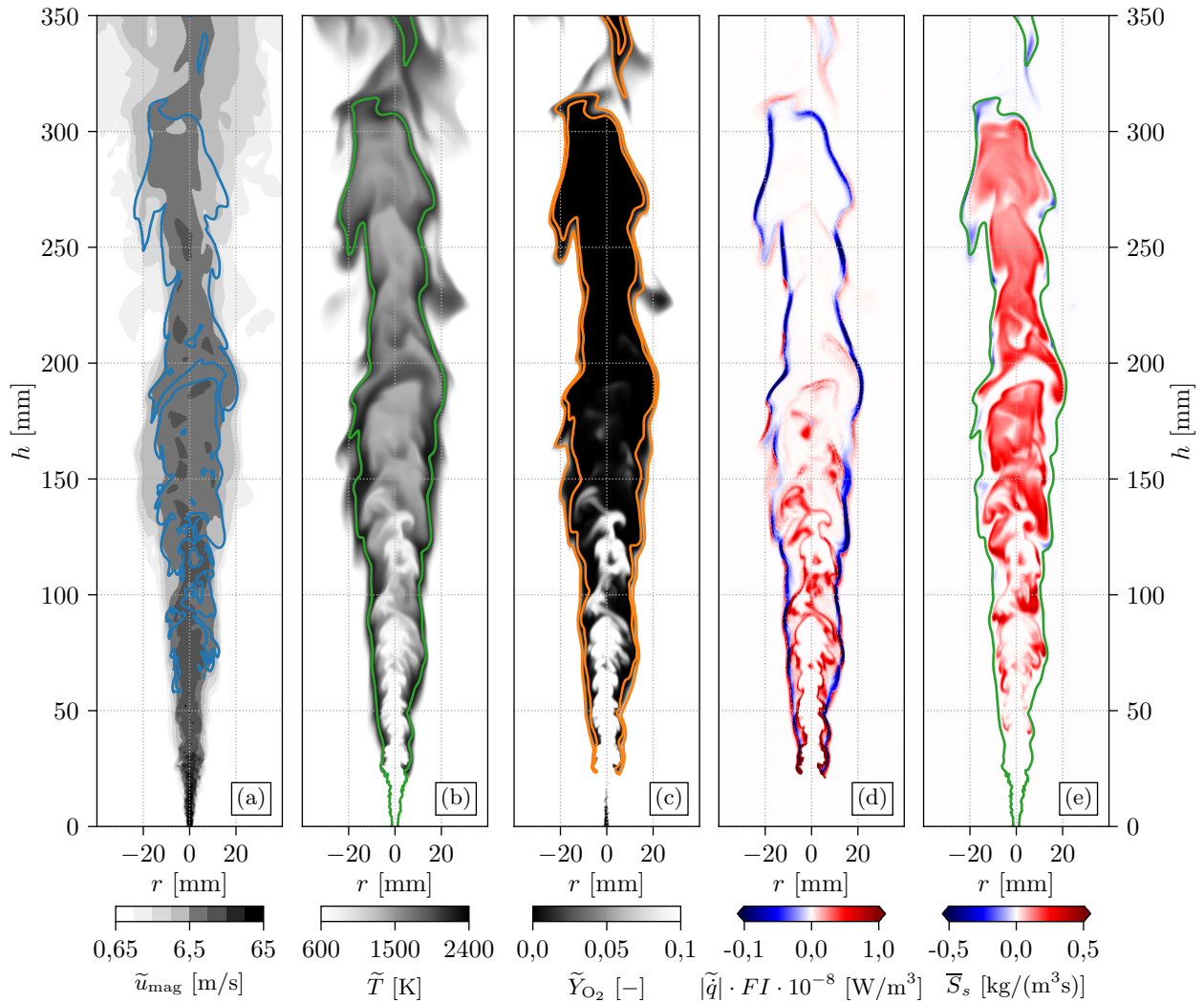
Abbildung 5.1 zeigt auch die numerischen Randbedingungen. Für den Mantelstrom und den konischen Teil des Rechengebiets wird eine Einlassrandbedingung mit der konstanten Geschwindigkeit von 0,29 m/s vorgegeben. Am Ausströmrand wird eine Ausströmrandbedingung mit konstantem Umgebungsdruck gesetzt. Für den turbulenten Brennstoffstrom wird aus Vorrechnungen einer turbulenten Rohrströmung [74] ein zeitaufgelöstes Geschwindigkeitsprofil gewonnen, das als Einlassrandbedingung dient. Die gesamte physikalische Simulationsdauer beträgt 285 ms, wodurch bei einem Zeitschritt von  $0,5 \mu\text{s}$  ungefähr neun Millionen CPU-Stunden verbraucht wurden.

### 5.1.3 Flammenstruktur

Abbildung 5.2 zeigt charakteristische Eigenschaften der AFF anhand instantaner Größen. In Strahlflammen können sich die lokalen turbulenten Längen- und Zeitskalen stark unterscheiden. Abbildung 5.2(a) verdeutlicht dies mit Hilfe des logarithmisch skalierten, absoluten Geschwindigkeitsfelds ( $\tilde{u}_{\text{mag}} = \sqrt{\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2 + \tilde{w}^2}$ ) und Isolinien des Rußvolumenbruchs. Zwischen dem Bereich der Flammenstabilisierung bei 22 mm und dem rußenden Flammenteil weiter stromab unterscheidet sich die Geschwindigkeit bereits um eine Größenordnung. Da Ruß in der AFF vor allem in Bereichen großskaliger Turbulenz und langsamer Geschwindigkeit auftritt, muss die Rechnung lange gemittelt werden, um verlässliche Statistiken zu erhalten. Die Rußbildung selbst setzt als erstes im äußeren Teil der Flamme nahe der Reaktionszone ein, bevor Ruß weiter stromab in der ganzen Flamme zu finden ist. Abbildung 5.2(b) zeigt die Temperatur und mit Hilfe der Isolinie bei  $\tilde{\Phi} = 1$  brennstoffreiche Zonen der Flamme. Rußbildung benötigt sowohl brennstoffreiche Zonen als auch erhöhte Temperaturen. Während Brennstoffüberschuss in der ganzen Flamme vorherrscht, finden sich erhöhte Temperaturen zuerst im äußeren Teil der Flamme und ab  $h \approx 150$  mm auch in deren Kern, was wiederum die Rußverteilung erklärt. Der Temperaturanstieg im Inneren der Flamme ist dabei nicht nur auf Mischungsprozesse, sondern auch auf Wärmefreisetzung zurückzuführen. Darauf deutet die in Abb. 5.2(c) gezeigte Sauerstoffverteilung hin, die mit einer OH-Isolinie überlagert ist. Diese zeigt die Flammenposition und es lässt sich gut erkennen, dass die Flamme abhebt und bei  $h \approx 22$  mm stabilisiert. Wie bei einer Diffusionsflamme zu erwarten ist, befindet sich die Hauptreaktionszone im äußeren Teil der Flamme zwischen Brennstoff und Oxidator. Allerdings führt das Abheben der Flamme dazu, dass Sauerstoff auch im Kern der Flamme bis  $h \approx 150$  mm auftritt. Abbildung 5.2(d) veranschaulicht, dass dadurch eine Vormischung von Brennstoff und Oxidator im Kern der Flamme stattfindet. Dazu wird der mit der Wärmefreisetzung ( $|\tilde{q}|$ ) skalierte Flammenindex (Gl. (4.14)) gezeigt. Im äußeren Teil der Flamme findet die Wärmefreisetzung wie erwartet im nicht-vorgemischten Regime statt. Im Inneren der Flamme ist das Verbrennungsregime jedoch vorgemischt und auch dort findet Wärmefreisetzung statt. Isoflächen des instantanen Rußquellterms (Gl. (4.16)) in Abb. 5.2(e) deuten darauf hin, dass gerade diese vorgemischten Bereiche der Flamme den Ruß stark beeinflussen. Ruß wächst im kompletten inneren Teil der Flamme, in dem die vorgemischte Verbrennung dominiert, und wird nur im äußeren Teil der Flamme oxidiert, wo die nicht-vorgemischte Verbrennung stattfindet. Da der hohe Grad an Vormischung für eine Diffusionsflamme ungewöhnlich ist, wird der Einfluss des Verbrennungsregimes auf die Rußevolution in Abschnitt 5.3.2 genauer analysiert.

## 5.2 Validierung

Die große Anzahl an Messdaten für die AFF ermöglicht eine umfassende Validierung der LES. So lassen sich die Mechanismen der Flammenstabilisierung, die Flammenform sowie Rußvorläufer und Rußvorhersage als auch Temperaturstatistiken mit experimentellen Daten vergleichen. Hierzu wurden die LES-Ergebnisse nicht nur zeitlich, sondern auch räumlich in Umfangsrichtung gemittelt.

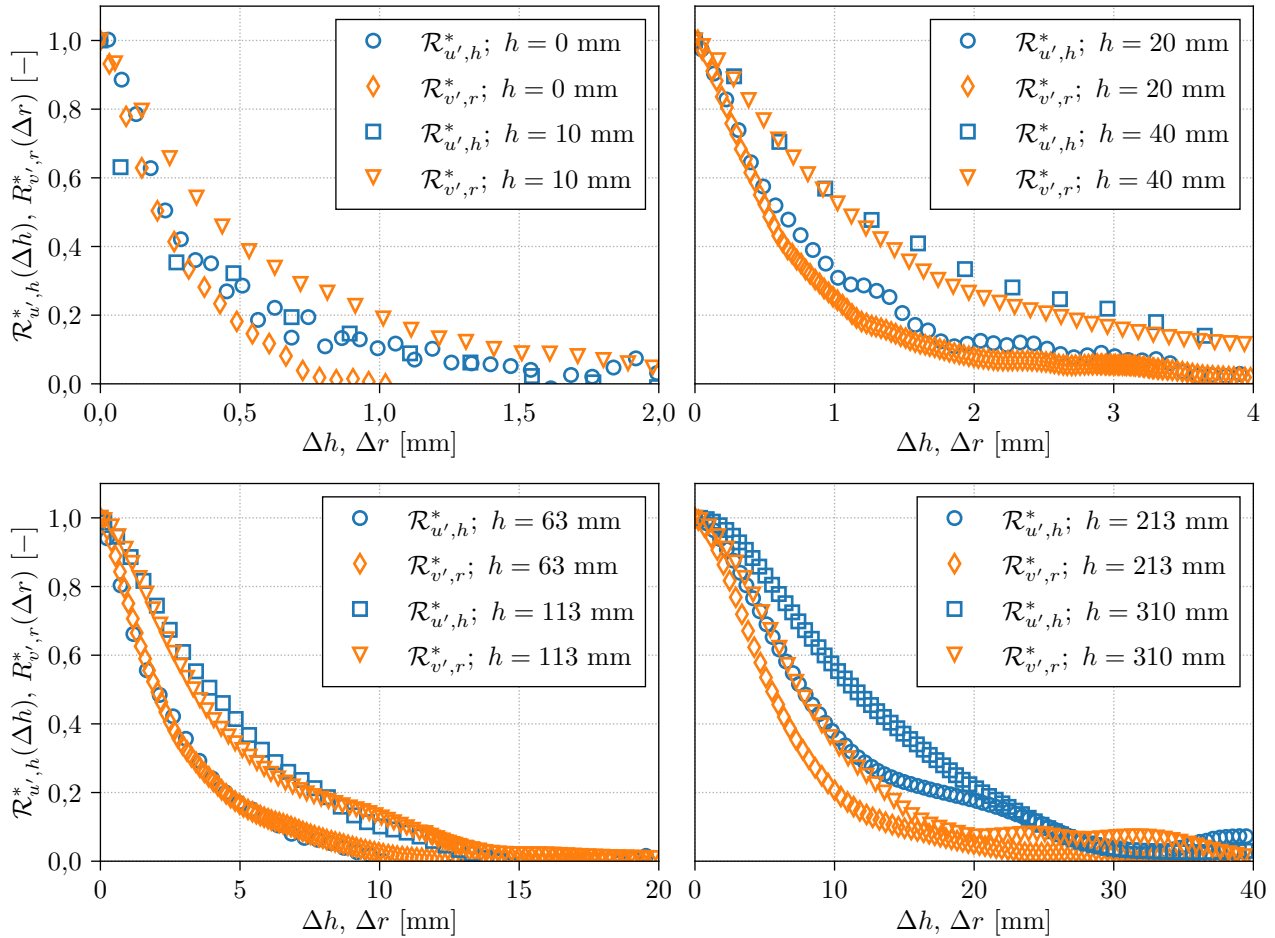


**Abbildung 5.2:** Instantane Konturplots verschiedener Flammeneigenschaften in einer Schnittebene durch die Flamme. Isolinien bei —  $\tilde{f}_v = 0,1$  ppm; —  $\tilde{\Phi} = 1$ ; —  $\tilde{Y}_{\text{OH}} = 10^{-3}$ .

### 5.2.1 Qualität der LES

Grundlage einer guten Flammen- und Rußvorhersage ist die Fähigkeit der LES die groben turbulenten Strukturen ausreichend aufzulösen. Alle in Abschnitt 4.3.1 genannten schwachen Qualitätskriterien werden in der vorliegenden Simulation erfüllt. Die uniforme Hauptströmungsrichtung lässt außerdem die Auswertung von Zweipunktkorrelationen zu, die in Abb. 5.3 dargestellt sind. Der Abstand der Symbole zeigt die Gitterauflösung. Am Düsenaustritt bei  $h = 0$  mm werden sowohl die radiale als auch die axiale Korrelation mit acht Gitterzellen bis  $R \approx 0,3$  aufgelöst. Die gute Auflösung der axialen Strukturen verschlechtert sich in der Mischungszone bei  $h = 10$  mm etwas. Hier wird die Korrelation bis  $R = 0,2$  nur von fünf Zellen aufgelöst. Die Auflösung der radialen Korrelationen bleibt allerdings mit neun Zellen bis  $R = 0,3$  gut. Diese Diskrepanz zwischen axialen und radialen Korrelationen kann auf die beginnende Turbulenzproduktion in der Scherschicht zwischen Brennstoff- und Oxidatorstrom erklärt werden, die den Wert der radialen Korrelationen anhebt. Im Bereich der Flammenstabilisierung bei  $h = 20$  mm wird das Gitter feiner, um die OH-Schicht ausreichend aufzulösen. Deshalb werden hier die axialen und radialen Korrelationen sehr gut aufgelöst, da sich mindestens zehn Gitterpunkte im Bereich bis  $R = 0,2$  finden. Weiter stromab verbessert



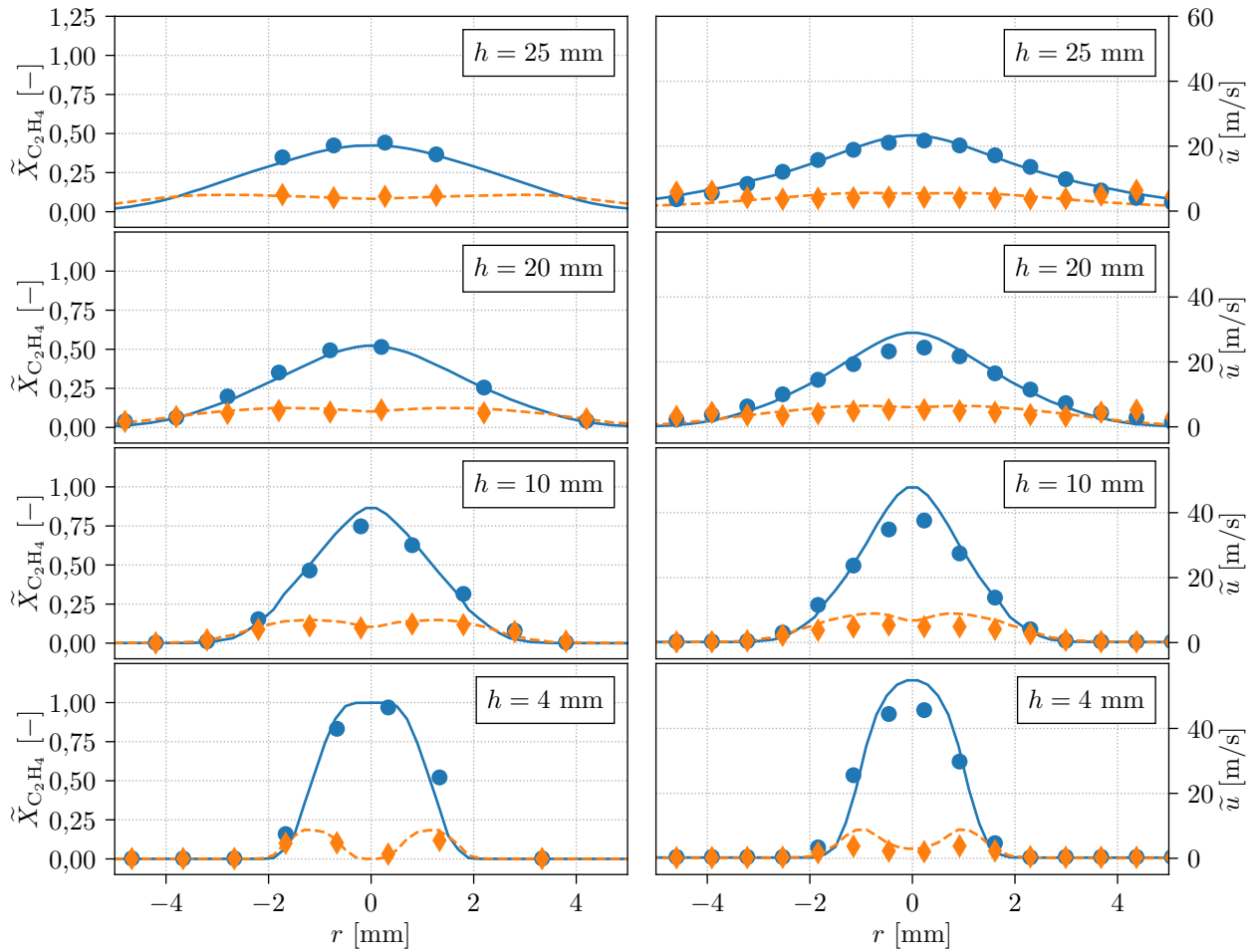


**Abbildung 5.3:** Normierte axiale und radiale Zweipunktkorrelationen von der Achse ausgehend.

sich die Auflösung stetig. Die bereits erwähnten großen Unterschiede in der Größe der turbulenten Skalen sind auch in den Zweipunktkorrelationen sichtbar. Nahe der Düse wird eine Korrelation von  $R = 0,2$  bei ungefähr  $0,5$  mm erreicht, während dies bei  $h = 213$  mm erst bei  $10$  mm der Fall ist. Insgesamt zeigt die Qualitätsanalyse nahe der Düse eine ausreichende und in der Flamme eine sehr gute Gitterauflösung.

### 5.2.2 Flammenstabilisierung

Bedingt durch die kalten Einströmungen, wird der Ort der Flammenstabilisierung von der Flammengeschwindigkeit bestimmt. Eine gute Vorhersage des Geschwindigkeitsfelds und damit der Mischung sind Voraussetzung für die korrekte Vorhersage der Flammenstabilisierung. Abbildung 5.4 vergleicht daher gemessene und berechnete Mittel- und RMS-Werte des Ethylenmolenbruchs und der axialen Geschwindigkeit nahe der Brennstoffdüse. Da hier nur Mischung und keine Verbrennung stattfindet, kann  $\tilde{X}_{C_2H_4}$  als guter Indikator für die Mischung gesehen werden. Die mit „Raman-scattering“ [131] quantitativ gemessenen Ethylenmolenbrüche zeigen sowohl im Mittel- als auch im RMS-Wert eine exzellente Übereinstimmung mit der LES. Im Bereich der Flammenstabilisierung bei  $h = 25$  mm liegen Messwerte nur im kalten Kernbereich der Flamme vor. Der Vergleich mit den Messwerten an dieser Stelle zeigt, dass die LES auch den Sauerstoffanteil, der zur Vormischung im Kern der Flamme führt, sehr gut vorhersagt. Zur Validierung der axia-

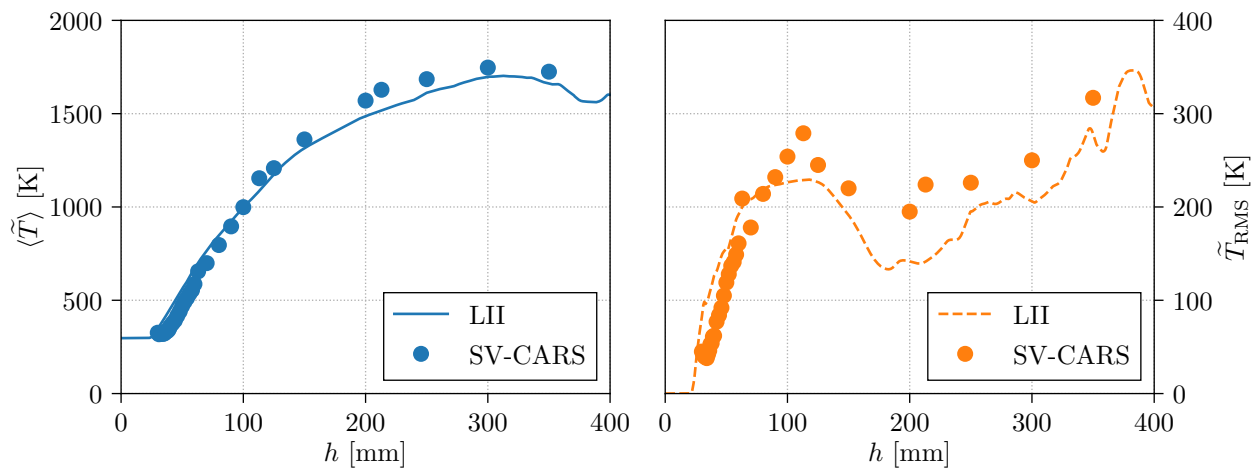


**Abbildung 5.4:** Radialprofile des Ethylen Molmassenbruchs  $\tilde{X}_{C_2H_4}$  (links) und der axialen Geschwindigkeit  $\tilde{u}$  (rechts), Mittelwert (— Simulation, ● Experiment [130, 131]) und RMS (--- Simulation, ♦ Experiment [130, 131])). Zur besseren Lesbarkeit ist nicht jeder Messpunkt gezeigt.

len Geschwindigkeit werden teilveröffentlichte „particle image velocimetry“ (PIV) Messungen [130] verwendet. Auch hier zeigt sich eine generell gute Übereinstimmung zwischen Messungen und LES. Abweichungen treten auf der Achse nahe der Düse ( $h = 4/10$  mm) auf. Hier fallen die auflösungsbedingten Messunsicherheiten des PIV-Systems [129] besonders ins Gewicht. Allerdings bildet die LES die im Experiment eingebaute Brennstoffdüse nicht ab, was die Unterschiede ebenso erklären könnte. Außerdem ist die Auflösung des Rechengitters an diesen Stellen nicht vollkommen ausreichend. Zum Stabilisierungspunkt der Flamme hin verschwinden die Unterschiede zwischen der LES und den Messungen und die Flamme ankert an der korrekten Abhebehöhe [102].

### 5.2.3 Flammenform

Temperaturmessungen wurden in der AFF zum einen mit „shifted-vibrational coherent anti-Stokes Raman scattering“ (SV-CARS) [131] und zum anderen mit „non-linear extinction regime two-line atomic fluorescence“ (nTLAF) [108] durchgeführt. nTLAF-Messungen basieren auf der Annahme, dass unterhalb des Detektionslimits von 800 K Umgebungstemperatur herrscht ( $T = 300 \text{ K} |_{T < 800 \text{ K}}$ ). Es zeigt also das untere Limit der mittleren Temperatur an. Außerdem kann nur in Bereichen mit  $\Phi > 0,9$  gemessen werden [170], was lediglich auf das Innere der Flamme zutrifft.

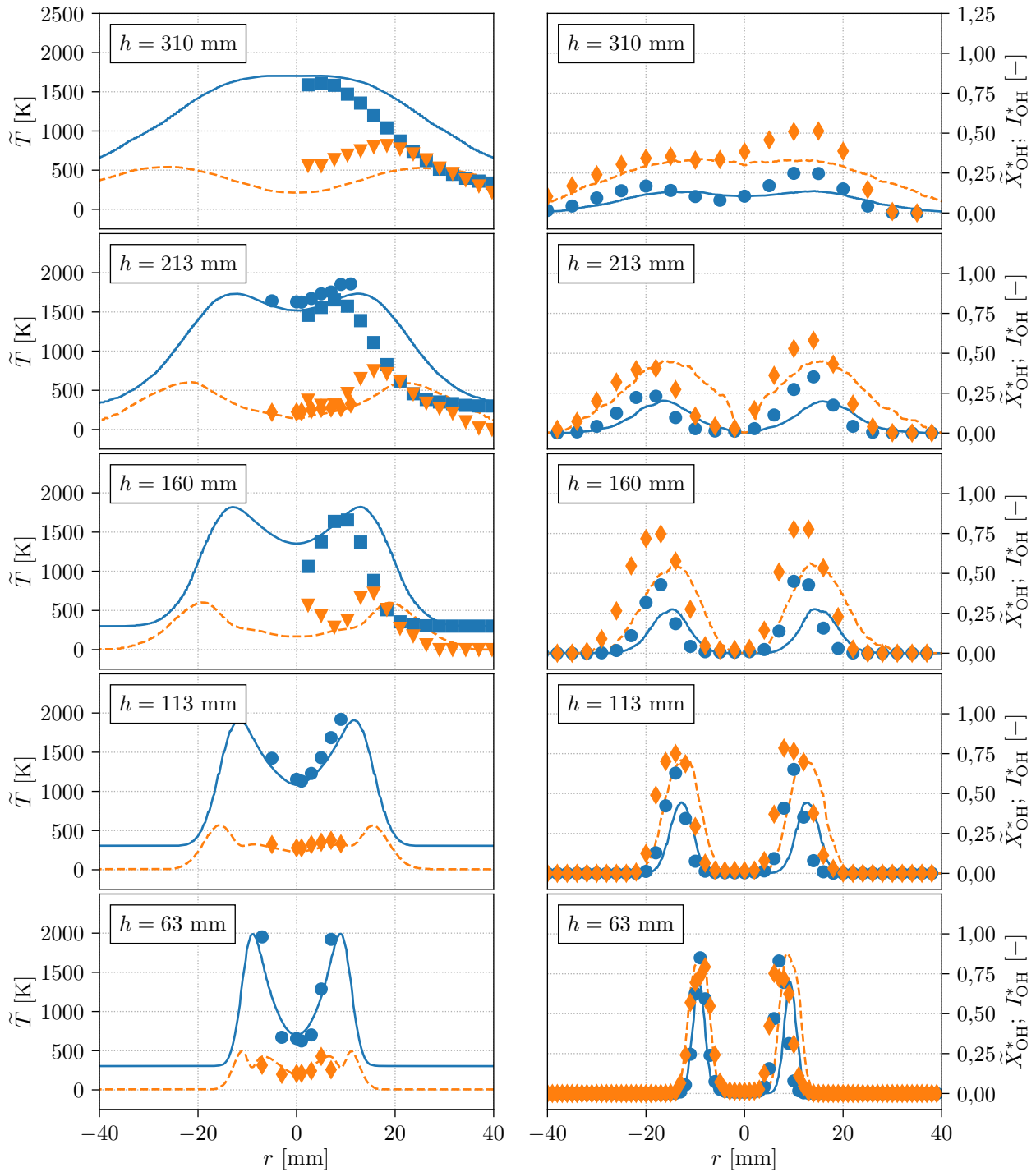


**Abbildung 5.5:** Simulierte (LES) und gemessene (SV-CARS) [131] Temperatur auf der Achse der AFF. Links:  $\langle \tilde{T} \rangle$ , rechts:  $\tilde{T}_{\text{RMS}}$ .

Abbildung 5.5 vergleicht simulierte und mit SV-CARS gemessene Temperaturen auf der Flammenachse. Kleine Abweichungen zwischen  $150 \text{ mm} < h < 300 \text{ mm}$  werden durch eine Überschätzung des Rußvolumens in der Simulation verursacht. Dadurch senkt der Wärmeverlust durch Strahlung die Temperaturen stärker als im Experiment. Daher wird auch der RMS-Wert in diesem Bereich leicht unterschätzt. Im unteren Teil der Flamme steigt der RMS-Wert etwas zu früh an. Insgesamt kann jedoch von einer guten Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Temperaturprofilen auf der Achse gesprochen werden.

Abbildung 5.6 vergleicht simulierte und gemessene radiale Temperatur- und OH-Profile [108, 131]. Die maximale Temperatur findet sich bei  $h = 63 \text{ mm}$  in der Reaktionszone und verschiebt sich stromab zur Achse hin. Dagegen sind die maximalen Temperaturfluktuationen immer im äußeren Teil der Flamme zu finden. Diese gemessenen Trends werden von der LES korrekt wiedergegeben und auch die quantitative Übereinstimmung mit den SV-CARS Messungen ist sehr gut. Im äußeren Teil der Flamme liegen nur nTLAF Messungen vor, die im Vergleich zur LES einen schmalen Bereich mit hohen Temperaturen zeigen. Dieser Unterschied kann durch die hohe Intermitzenz in diesem Teil der Flamme erklärt werden, die die Messgenauigkeit von nTLAF, wie bereits beschrieben, einschränkt. Stromab bei  $h = 310 \text{ mm}$  können Messunsicherheiten die Unterschiede zwischen Simulation und Messungen nicht mehr erklären. Deshalb wird nachfolgend die Vorhersage des OH-Radikals, welches ein guter Marker für die Flammenfront darstellt, mit Messwerten verglichen.

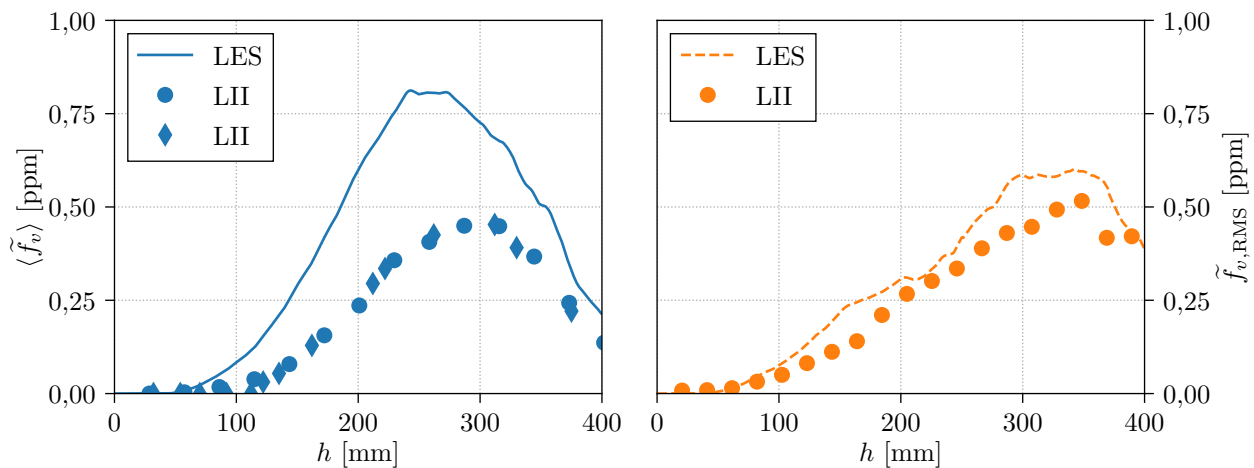
Abbildung 5.6 zeigt simulierte OH-Molenbruchverteilungen und mit „OH planar laser-induced fluorescence“ (OH-PLIF) gemessene OH-Intensitäten. Beide Verteilungen sind mit dem Maximalwert des ganzen Feldes normiert, da die OH-PLIF Messungen nur qualitative Messwerte liefert. Durch Absorption sind die Messwerte leicht asymmetrisch verteilt. Obwohl die Messungen außerdem einen radialen Versatz aufweisen, ist die Übereinstimmung mit den simulierten Mittel- und RMS-Werten hervorragend. Im Gegensatz zu den Temperaturmessungen stimmt die Abnahme der OH-Konzentration mit zunehmender Flammenhöhe gut überein. Insgesamt zeigt der Vergleich der Temperatur- und OH-Werte, dass die LES eine sehr gute Vorhersage der Flammenform liefert.



**Abbildung 5.6:** Radialprofile der Temperatur  $\tilde{T}$  (links) und der normierten OH-Signalintensität  $I_{\text{OH}}^*$  und des normierten OH-Molenbruchs  $\tilde{X}_{\text{OH}}^*$  (rechts, Mittelwert (— Simulation, ● Experiment [131], ■ Experiment [108]) und RMS (--- Simulation, ◆ Experiment [131], ▼ Experiment [108])). Zur besseren Lesbarkeit ist nicht jeder Messpunkt der nTLAF und OH-PLIF Messungen gezeigt.

### 5.2.4 Rußvorhersage

Zur Validierung der LES wird mit „laser-induced incandescence“ (LII) Messungen von Köhler et al. [131] und Gu et al. [108] verglichen. Abbildung 5.7 zeigt Mittel- und RMS-Werte auf der Achse der Flamme. Der maximale Rußvolumenbruch unterscheidet sich um den Faktor zwei. Im Vergleich zu

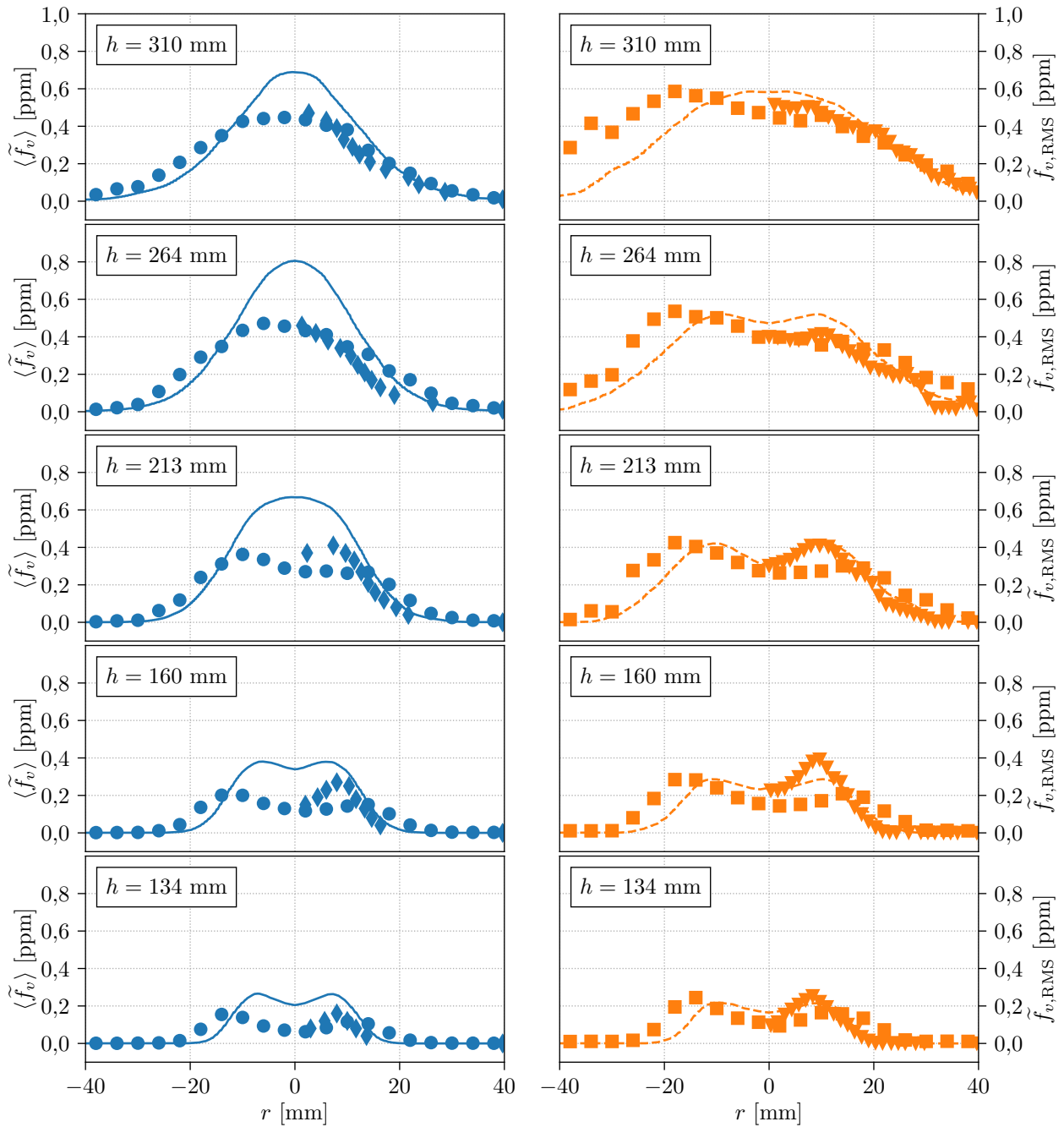


**Abbildung 5.7:** Simulierter (LES) und gemessener (LII) Rußvolumenbruch auf der Achse der AFF. Links:  $\langle \tilde{f}_v \rangle$ , rechts:  $\tilde{f}_{v,RMS}$ . ● und ● Experiment [131]; ◆ Experiment [108].

anderen publizierten Simulationen, die dem Stand der Technik entsprechen (z.B. [62, 168, 197, 216, 256, 258]), ist das ein exzellentes Ergebnis. Außerdem stimmen die RMS-Werte und vor allem die Form der Rußverteilung gut überein. Berücksichtigt man die gute Vorhersage der Flammenstruktur, kann daraus geschlossen werden, dass das Verhältnis zwischen Rußbildung, -wachstum und -abbau korrekt wiedergegeben wird.

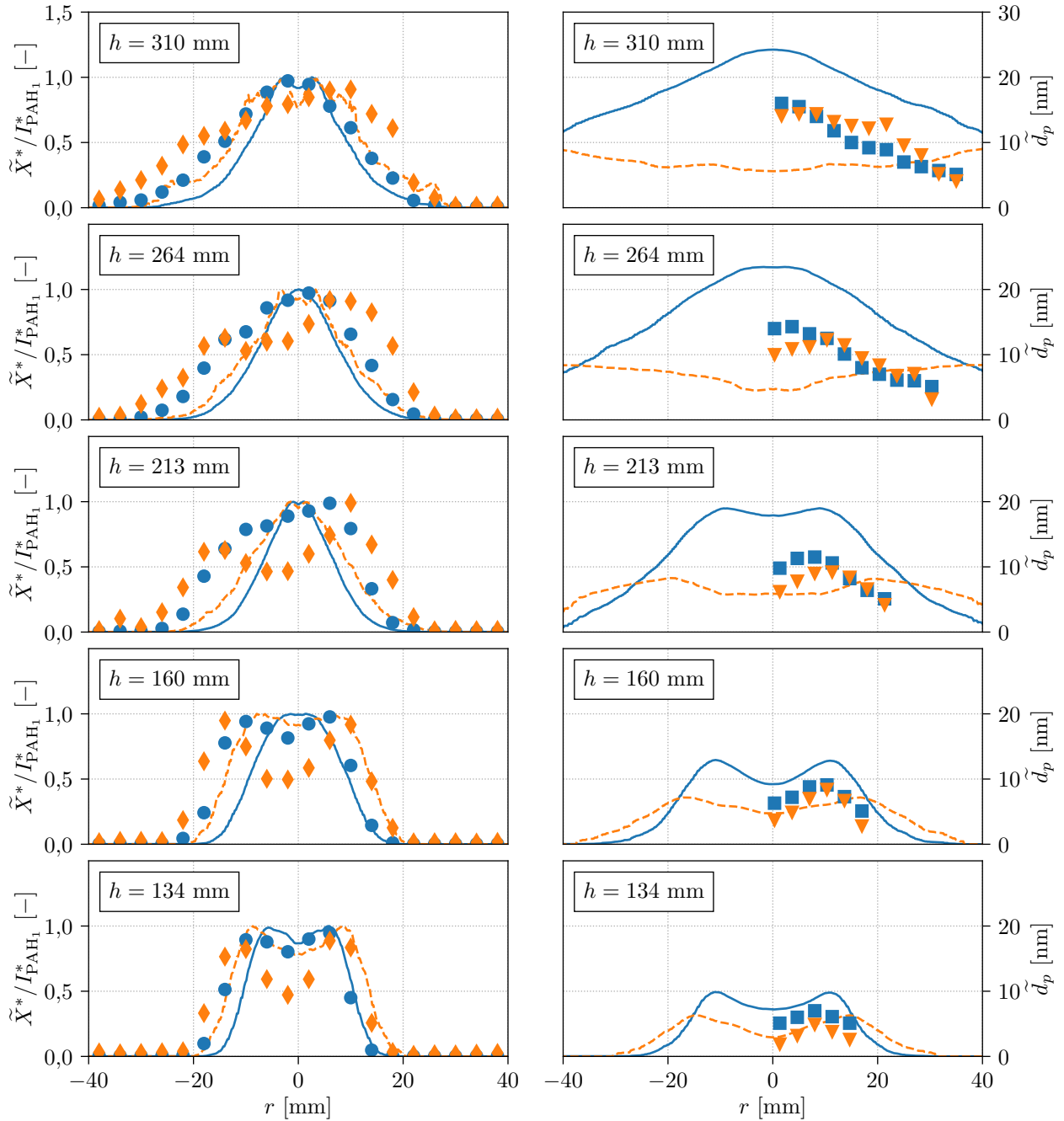
Abbildung 5.8 vergleicht Mittel- und RMS-Werte des Rußvolumenbruchs an fünf Radialprofilen. Im unteren Teil der Flamme bei  $h = 134$  mm zeigen beide Messungen und die Simulation ein enges Rußprofil, das sich mit zunehmender Flammenhöhe verbreitert. Dabei wechselt es von einer M-Form in eine  $\Lambda$ -Form mit dem maximalen Rußvolumenbruch auf der Achse. Dieser Trend wird von der LES gut wiedergegeben. Die Überschätzung des Rußvolumenbruchs ist in den Radialprofilen auch auf der Achse am ausgeprägtesten. Zum äußeren Teil der Flamme hin gleichen sich die Messungen und die LES. Auch die RMS-Profile stimmen sehr gut überein und auch hier wird die Formänderung der radialen Rußverteilung gut von der LES wiedergegeben. Der Vergleich der radialen Profile bestätigt also die sehr gute Rußvorhersage der LES bei der AFF.

Abbildung 5.9 zeigt Radialprofile von gemessenen und simulierten PAH-Konzentrationen und der Primärpartikelgröße, die alle mit großen Unsicherheiten behaftet sind. Die „PAH planar laser-induced fluorescence“ (PAH-PLIF) Messungen [131] detektieren die Fluoreszenzintensität von PAH im Gasgemisch. Diese ist sowohl von der PAH-Konzentration als auch von der PAH-Struktur abhängig. Außerdem ist es unklar, ob die Größe, die in der ersten PAH-Sektion zusammengefassten PAHs, der Größe der gemessenen PAHs entspricht. PAH-PLIF Messungen in ähnlichen Flammen zeigen sehr unterschiedliche Ergebnisse. Einerseits wurde eine Übereinstimmung der maximalen PAH-Konzentration mit dem maximalen Rußvolumenbruch festgestellt [83, 131]. Andererseits wurde die maximale PAH-Konzentration weiter stromauf, im Bereich des Rußwachstums festgestellt [140]. Der Vergleich dient deshalb dazu, Bereiche in der Flamme mit PAH-Präsenz zu bestimmen, weshalb alle Profile mit ihrem jeweiligen Maximalwert normiert wurden. Im unteren Bereich der Flamme stimmen Mittel- und RMS-Werte der Simulation und der Messungen gut überein, während die Simulation weiter stromab eine schmalere PAH-Verteilung vorhersagt. Angesichts der beträchtlichen Unsicherheiten in PAH-Modellierung und PAH-Messungen sind diese Abweichungen vertretbar.



**Abbildung 5.8:** Radialprofile des Rußvolumenbruchs. Links:  $\langle \tilde{f}_v \rangle$  (— Simulation, ● Experiment [131], ◆ Experiment [108]), rechts:  $\tilde{f}_{v,RMS}$  (- - - Simulation, ■ Experiment [131], ▼ Experiment [108]). Zur besseren Lesbarkeit ist nicht jeder Messpunkt gezeigt.

Die in Abb. 5.9 gezeigten Messungen der Primärartikelgröße mittels „time resolved laser-induced incandescence“ (TiReLII) unterliegen erheblichen Unsicherheiten [160], jedoch werden Trends korrekt wiedergegeben [108]. Auch die simulierten Primärpartikelgrößen unterliegen Modellierungsunsicherheiten, da sie im verwendeten Sektionalmodell sehr sensitiv auf den Aggregationsfaktor (vgl. Gl. (3.10)) reagieren [70]. Der Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Partikelgrößen zeigt, dass die LES zwar durchgehend größere Primärpartikel aufweist, die Trends der Mittelwerte jedoch identisch sind. So steigt die Partikelgröße durchweg an und bleibt auch im Bereich des Rußabbaus bei  $h = 310$  mm hoch. Auch die Trends der RMS-Werte stimmen zum Großteil über-



**Abbildung 5.9:** Radialprofile der normierten PAH-Signalintensität  $I_{PAH}^*$  und des normierten PAH-Molenbruchs  $\tilde{X}_{PAH_1}^*$  der ersten Sektion (links) und des Primärpartikeldurchmessers  $\tilde{d}_p$  (rechts), Mittelwert (— Simulation, ● Experiment [131], ■ Experiment [108]) und RMS (- - - Simulation, ♦ Experiment [131], ▼ Experiment [108])). Zur besseren Lesbarkeit ist nicht jeder Messpunkt gezeigt.

ein. Lediglich stromab, im äußeren Bereich der Flamme, steigt der von der LES vorhergesagte RMS-Wert im Gegensatz zu den Messungen an. Hier herrscht die größte Intermitzenz, was die Unterschiede erklären könnte. Berücksichtigt man die genannten Unsicherheiten der Modellierung und der Messmethode, können die Ergebnisse der LES jedoch als gut bezeichnet werden.

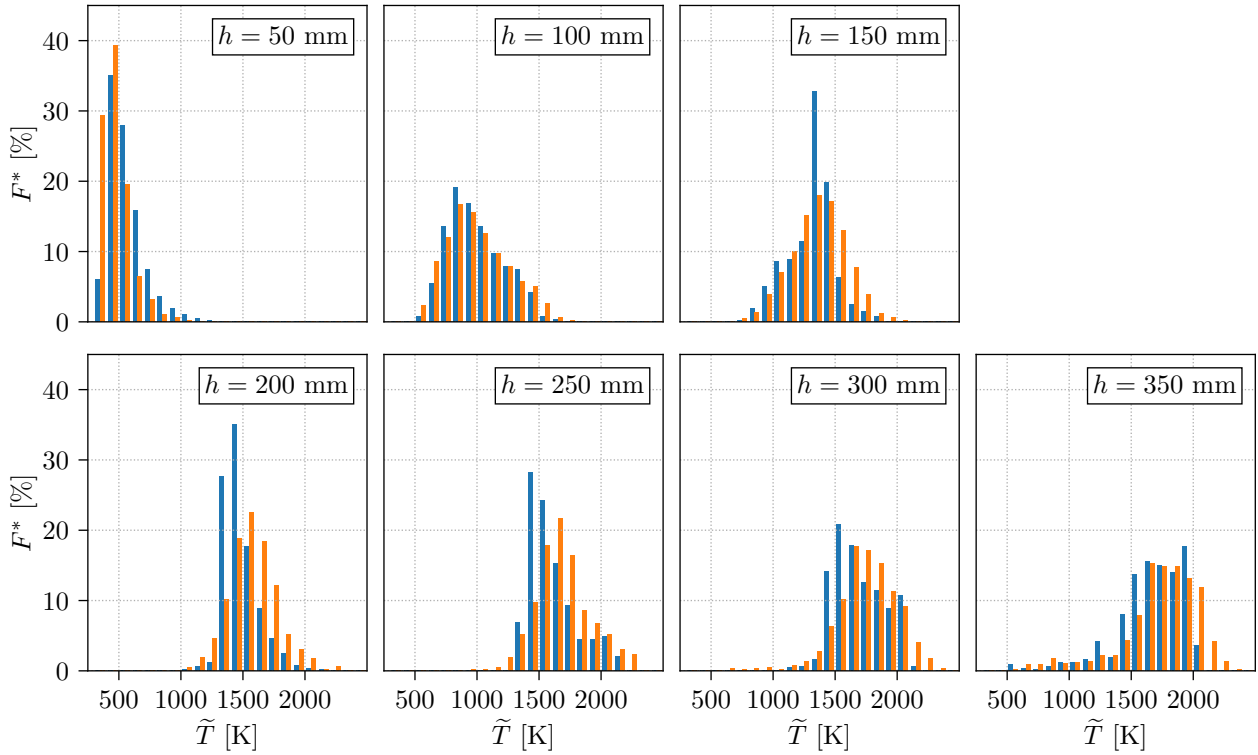
### 5.2.5 Temperaturstatistiken

Abschließend wird die LES in Abb. 5.10 anhand von Temperaturhistogrammen auf der Achse validiert. Da im nachfolgenden Kapitel korrelierten Statistiken zwischen  $\tilde{T}$  und  $\tilde{f}_v$  analysiert werden dient diese Validierung auch dazu, die Verlässlichkeit der Analyse für eine der beiden korrelierten Größen zu untersuchen. Temperaturhistogramme aus SV-CARS-Messungen wurden aus 914 bis 1189 Einzelmessungen berechnet, während bei der LES 565000 Ereignisse in die Statistik einfließen. Um Simulation und Messung trotz dieser Unterschiede vergleichen zu können, werden normierte Histogramme gezeigt (vgl. Gl. (4.8)). Kurz nach dem Bereich der Flammenstabilisierung bei  $h = 50$  mm stimmt die Form der Histogramme gut überein, wobei die LES-Ergebnisse leicht zu höheren Temperaturen verschoben sind. Bei  $h = 100$  mm fängt der Bereich der Rußbildung an. Hier stimmen Simulation und Messung sowohl in der Form als auch der absoluten Größe perfekt überein. Die bereits beschriebene Überschätzung des Wärmeverlustes durch Strahlung wird erstmals bei  $h = 150$  mm sichtbar. Während die Histogramme für  $\tilde{T} < 1250$  K gut übereinstimmen, sind in der LES deutlich weniger Ereignisse für  $\tilde{T} > 1500$  K zu beobachten, die dafür zwischen  $1250 \text{ K} < \tilde{T} < 1500 \text{ K}$  kumulieren. Dieser Trend verstärkt sich durch die zunehmende Rußpräsenz bis  $h = 250$  mm. Danach führt die erhöhte Mischung mit der kalten Umgebungsluft zur Rußabnahme und zu einer Formveränderung der Histogramme. Bei  $h = 350$  mm besteht das Histogramm aus zwei gleichverteilten Bereichen zwischen  $500 \text{ K} < \tilde{T} < 1500 \text{ K}$  und  $1500 \text{ K} < \tilde{T} < 2000 \text{ K}$ . Zwar ist der überschätzte Wärmeverlust immer noch durch einen leichten Versatz der LES-Statistik zu niedrigeren Temperaturen sichtbar, aber die Form stimmt sehr gut mit den Messwerten überein. Daraus lässt sich schließen, dass auch die Mischung mit kalter Umgebungsluft, die für die Rußabnahme durch Oxidation und zunehmender Intermittenz verantwortlich ist, richtig vorhergesagt wird. Außerdem zeigen die Histogramme, dass die mit LES berechneten Statistiken auf der Achse zwar im Bereich hoher Rußkonzentrationen etwas von der Überschätzung des maximalen Rußvolumenbruchs betroffen sind, an den anderen Positionen aber eine hervorragende Übereinstimmung mit den gemessenen Histogrammen aufweisen. Daher ist eine weitergehende Analyse, die diese Erkenntnisse berücksichtigt, gerechtfertigt.

## 5.3 Analyse der Rußevolution

Experimentelle Untersuchungen der AFF durch Gu et al. [108] zeigen eine starke Korrelation des Rußvolumenbruchs mit der Temperatur. Frühe Messungen in anderen Flammen mit ähnlichen Brennstoffen widersprechen sich, ob eine solche Korrelation existiert [223] oder nicht [46]. Seitdem wurden weitere experimentelle Untersuchungen mit unkorrelierten [140, 191] und korrelierten [83, 136, 151, 169, 177] Rußstatistiken veröffentlicht. Auch das Potential von Simulationen zur Nutzung und Analyse korrelierter Statistiken konnte bereits gezeigt werden [6, 17, 62, 142, 209]. Nachfolgend wird zuerst die Fähigkeit der LES diskutiert, die korrelierten Temperatur-Ruß-Histogramme des Experiments [108] zu reproduzieren. Danach werden räumliche Trends in der Statistik der Flamme mit Hilfe von Quelltermanalysen untersucht und in den literarischen Kontext eingeordnet. Abschließend wird die Analyse durch Berücksichtigung des Verbrennungsregimes vertieft. So können die gemessenen Korrelationen erklärt und die Rußevolution in Freistrahlfammen besser verstanden werden.





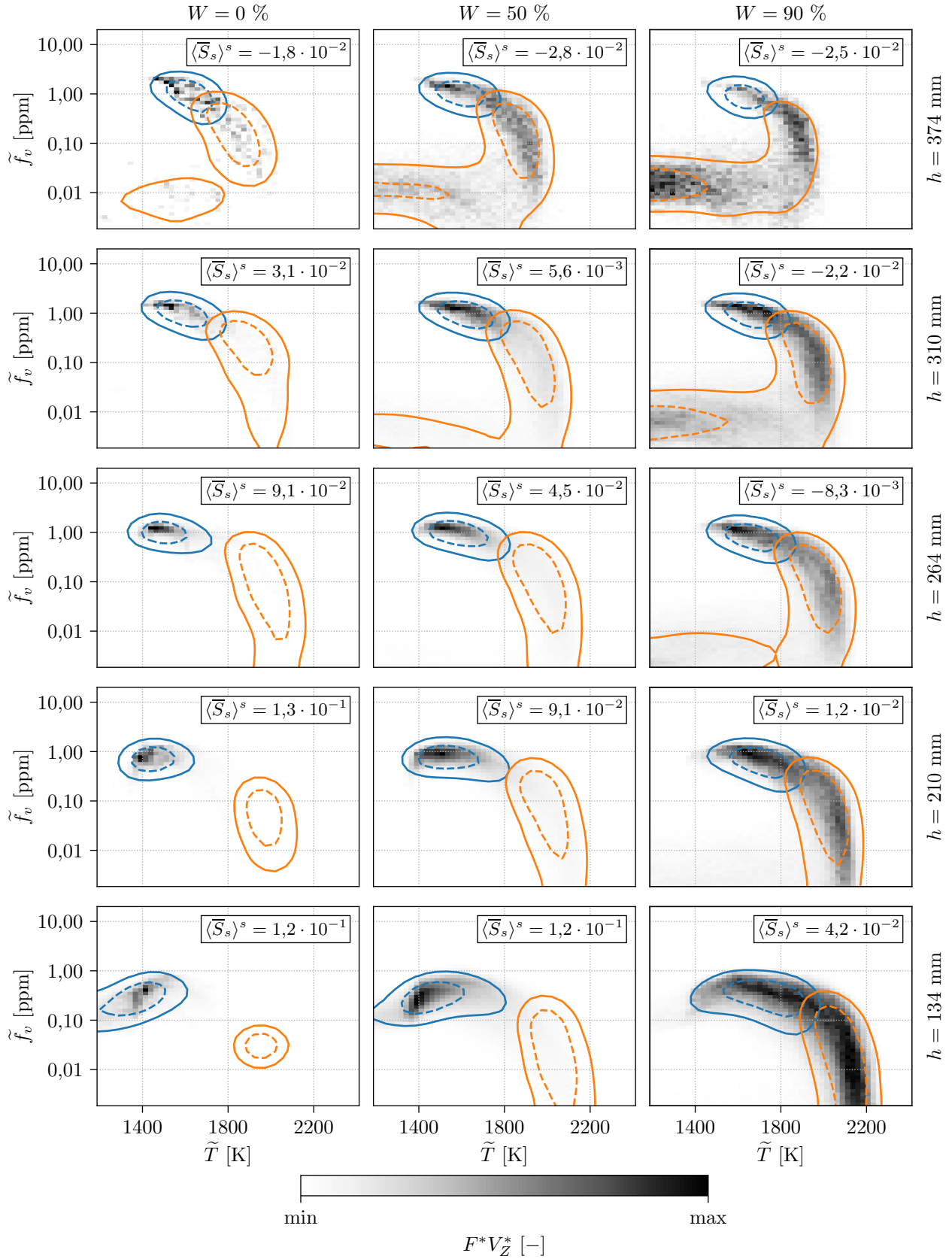
**Abbildung 5.10:** Normierte Histogramme der Temperatur auf der Achse. — LES, — SV-CARS-Messungen [131].

### 5.3.1 Korrelierte Analyse der Temperatur-Ruß-Statistik

Gu et al. [108] nutzte drei radiale und fünf axiale Positionen, um ihre Statistiken auszuwerten. Die radialen Positionen gehen von der Achse in positive  $r$ -Richtung aus und sind durch die Breite des Rußfelds  $W$  festgelegt. In dieser Arbeit ist  $W(h) = r|_{0,15 \cdot (\tilde{f}_v(h))_{\max}}$  definiert. Wie bereits gezeigt, stimmen die Trends von  $\tilde{T}$  und  $\tilde{f}_v$  zwischen LES und den Messungen jeweils gut überein, weshalb die axialen Positionen aus dem Experiment für den Vergleich beibehalten werden. Die Größe des Messfensters betrug  $5 \times 3 \text{ mm}^2$  und dessen Auflösung  $0,33 \times 0,33 \text{ mm}^2$ , was ungefähr der Gitterauflösung der LES entspricht. Zur Verbesserung der LES-Statistik wird die Achsensymmetrie der Flamme ausgenutzt. Um statistische Unabhängigkeit zu gewährleisten, beträgt die Auswertefrequenz nur 200 Hz. Dadurch entspricht die Zeitdifferenz zwischen zwei Auswertungen mindestens einer Durchflusszeit durch das Messvolumen.

Abbildung 5.11 zeigt  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Histogramme an diesen drei radialen und fünf axialen Positionen bei  $W = 0 \%$ ,  $50 \%$  und  $90 \%$ . An der untersten Position auf der Achse ( $h = 134 \text{ mm}$ ,  $W = 0 \%$ ) findet sich Ruß in einem relativ kleinen Bereich bei  $\tilde{T} = 1400 \text{ K}$  und  $0,1 \text{ ppm} < \tilde{f}_v < 1 \text{ ppm}$ . Bei  $W = 50 \%$  wird die Verteilung breiter, wobei die wahrscheinlichsten Werte noch immer bei  $\tilde{T} = 1400 \text{ K}$  auftreten. Zur Reaktionszone hin bei  $W = 90 \%$ , ändert sich die Form der Statistik. Rußvolumenbrüche zwischen  $0,1 \text{ ppm}$  und  $1 \text{ ppm}$  sind nun in einem breiten Temperaturbereich bei  $1500 \text{ K} < \tilde{T} < 1900 \text{ K}$  zu finden. Außerdem tritt Ruß mit  $\tilde{f}_v < 0,1 \text{ ppm}$  zwischen  $\tilde{T} = 2000 \text{ K}$  und  $\tilde{T} = 2200 \text{ K}$  auf. Damit weisen die Histogramme bei  $h = 134 \text{ mm}$  einen klaren radialen Trend auf. Bis zur Position des maximalen mittleren Rußvolumenbruchs ( $h = 310 \text{ mm}$ ) verschiebt sich die Statistik auf der Achse ( $W = 0 \%$ ) nur leicht zu höheren Temperaturen und Rußvolumenbrüchen.

## 5 Abgehobene Freistrahlfamme



**Abbildung 5.11:** Korrelierte Histogramme der zellvolumengewichteten Häufigkeit von gefilterten Temperatur- und Rußvolumenbruchereignissen  $F^*V_Z^*(\tilde{T}, \tilde{f}_v)$ . Geglättete Isolinien für rußwachstumsdominierte Bereiche: —  $F^*V_Z^*|_{\bar{S}_s > 0} <$  - - -  $F^*V_Z^*|_{\bar{S}_s > 0}$ . Geglättete Isolinien für rußoxidationsdominierte Bereiche: —  $F^*V_Z^*|_{\bar{S}_s < 0} <$  - - -  $F^*V_Z^*|_{\bar{S}_s < 0}$ . Die Einheit des Rußquellterms  $\bar{S}_s$  ist  $\text{kg}/(\text{m}^3\text{s})$ .

Dieser axiale Trend findet sich auch bei  $W = 50\%$  und spiegelt die bereits gezeigten Verläufe der Temperaturen und Rußvolumenbrüche in der Flamme wider. Bei  $W = 90\%$  tritt Ruß mit steigender Höhe bei niedrigeren Temperaturen ( $\tilde{T} < 1800\text{ K}$ ) auf und gleichzeitig nimmt die Wahrscheinlichkeit für Rußereignisse bei hohen Temperaturen ab. Bis  $h = 374\text{ mm}$  sind immer mehr schwach rußende Ereignisse im ganzen Temperaturbereich zu beobachten und die Histogramme ähneln sich in radialer Richtung. Der bei  $h = 134\text{ mm}$  stark ausgeprägte radiale Trend der Histogramme ist daher kaum noch sichtbar, was den axialen Trend der Histogramme verdeutlicht.

Obwohl simulierte und gemessene Temperaturen sehr gut übereinstimmen (vgl. Abb. 5.10), unterscheidet sich die Form der simulierten und gemessenen [108]  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Histogramme stark. Dies kann sowohl auf die Darstellung der Messungen als PDF, die Bereiche mit wenig Ruß durch die logarithmische Darstellung stärker gewichtet als auch auf die Unsicherheiten in Messung und Modellierung zurückgeführt werden. Daher werden zur Validierung der simulierten Statistiken nur Trends verglichen. Gu et al. [108] beobachtete an allen Messpunkten eine Korrelation zwischen Rußvolumenbruch und Temperatur, was auch auf die Simulationsergebnisse zutrifft. Außerdem stimmen LES und Experiment dahingehend überein, dass im unteren Teil der Flamme eine starke Abhängigkeit der Statistiken von deren radialer Position existiert. Wie bereits beschrieben verschwindet diese Korrelation stromab, was auch im Experiment beobachtet wurde. Der daraus folgende Trend der Statistiken in axialer Richtung konnte bereits in mehreren Flammen gemessen werden [108, 151]. Die maximalen Rußvolumenbrüche werden von der LES bei  $1400\text{ K} < \tilde{T} < 1700\text{ K}$  beobachtet, was sehr gut mit dem gemessenen Bereich von  $1350\text{ K} < T < 1750\text{ K}$  [46, 108, 151, 177, 217] übereinstimmt. Auch der Trend, dass die maximalen  $\tilde{f}_v$ -Werte stromab bei höheren Temperaturen auftreten, stimmt zwischen LES und Messung [108] überein. Die Messungen auf der Achse einer Freistrahlf Flamme [217] zeigen außerdem, dass sich die Statistiken mit steigendem Düsenabstand verbreiterten, was auch in der LES zu beobachten ist. Die Trends der LES finden sich also auch in den experimentellen Untersuchungen wieder, was eine weitere Analyse rechtfertigt.

Zusätzlich zu den Histogrammen zeigt Abb. 5.11 den mittleren Rußquellterm ( $\langle \bar{S}_s \rangle^s$ , Gl. (4.9)) an jeder Position. Wie erwartet dominiert Rußwachstum ( $\langle \bar{S}_s \rangle^s > 0$ ) im unteren Teil der Flamme, wohingegen stromab Oxidation ( $\langle \bar{S}_s \rangle^s < 0$ ) dominiert. Die Rußoxidation wird außerdem mit zunehmendem Abstand von der Achse stärker. Die Trends der Statistiken finden sich also auch im mittleren Rußquellterm wieder. Im unteren Teil der Flamme nimmt der Quellterm in radialer Richtung ab, während die radialen Unterschiede mit zunehmendem Düsenabstand geringer werden. Um die Trends zu erklären, wird nachfolgend eine genauere Quelltermanalyse durchgeführt.

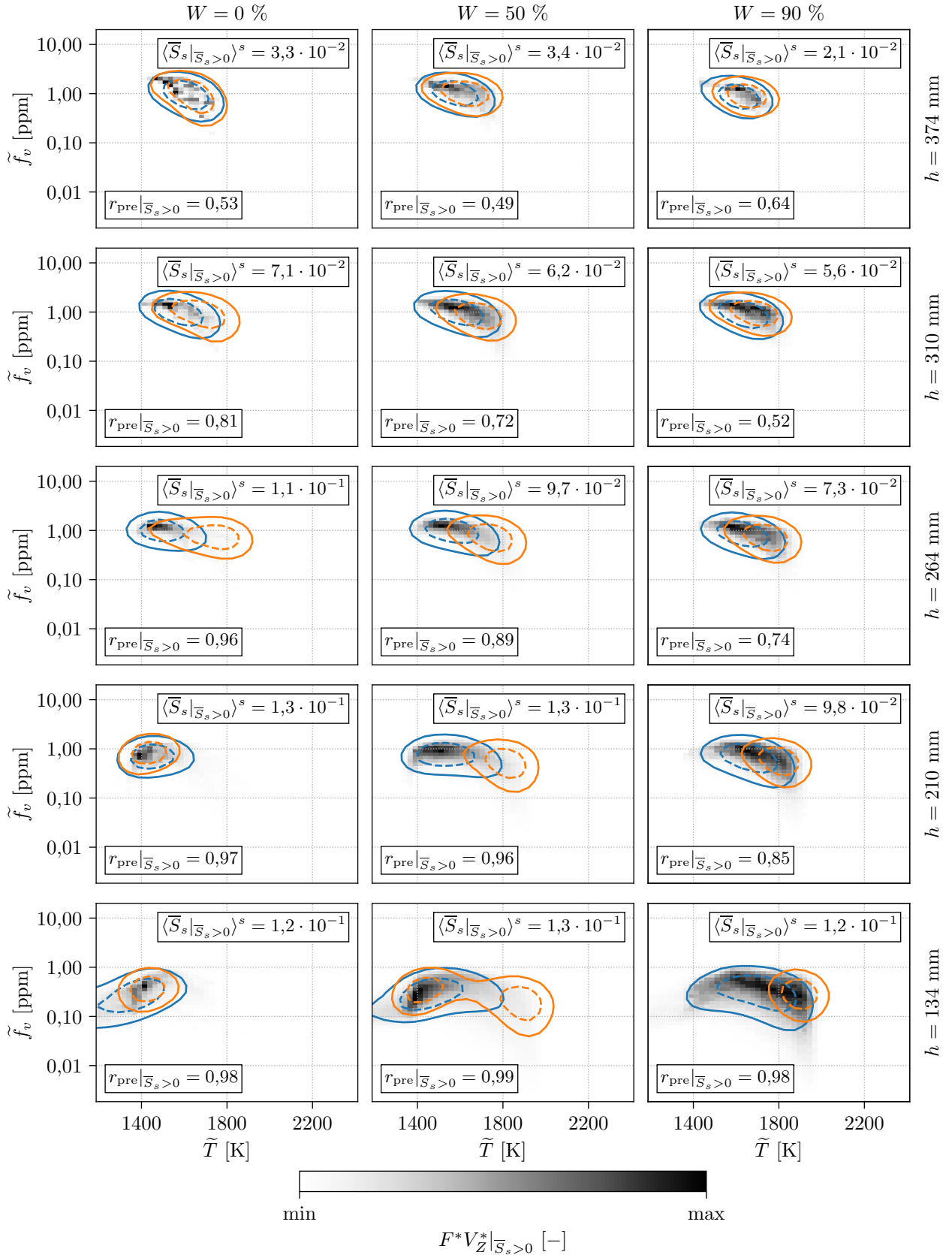
Abbildung 5.11 zeigt deshalb auch geglättete Isolinien der  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Statistik, die jeweils auf Rußwachstum und -oxidation konditioniert sind. Oxidation findet sich meist bei hohen Temperaturen  $\tilde{T} > 1800\text{ K}$ , während Rußwachstum bei niedrigen Temperaturen  $\tilde{T} < 1800\text{ K}$  vorherrscht. Unter Oxidationseinfluss können Ereignisse über mehrere Größenordnungen des Rußvolumenbruchs auftreten, bei Rußwachstum liegen die meisten Rußereignisse innerhalb einer Größenordnung. Die Lage der Gebiete im  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Histogramm in denen Rußwachstum oder -oxidation vorherrscht bleiben in der ganzen Flamme annähernd konstant. Unterschiedliche lokale Rußquellterme in der Flamme müssen sich deshalb auf die Form der unkonditionierten  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Statistik auswirken. Damit kann der starke radiale Trend im unteren Bereich der Flamme durch die Unterschiede in  $\langle \bar{S}_s \rangle^s$  erklärt werden. Deren Ursache wird, unter Berücksichtigung von Mischungseffekten, im nächsten Abschnitt 5.3.2 erörtert.

Lee et al. [140] schlossen aus ihren korrelierten Messungen, dass die Beziehung zwischen Temperatur und Ruß mit dem Rußquellterm zusammenhängt, was diese LES-Analyse bestätigt. Auch die Argumentation von Gu et al. [108], dass die steigende Wahrscheinlichkeit von höheren Temperaturen mit einer höheren Oxidationswahrscheinlichkeit einhergeht, kann durch die LES-Analyse bestätigt werden. Bei höheren Temperaturen verschiebt sich die Statistik in den oxidationsdominierten Bereich, was vor allem nahe der Reaktionszone bei  $W = 90\%$  zu beobachten ist. Qamar et al. [191] beobachteten in experimentellen Untersuchungen, dass die Abnahme des Rußvolumenbruchs im hinteren Teil der Flamme nicht durch gleichmäßige Rußoxidation, sondern durch den kompletten Ausbrand einzelner Rußfilamente verursacht wird. Mueller und Pitsch [168] bestätigte die Beobachtung durch LES und auch in der AFF kann dieses Verhalten bei  $h = 374$  mm beobachtet werden. Obwohl der mittlere Rußvolumenbruch bereits kleiner als 0,4 ppm ist, treten Ereignisse mit  $\tilde{f}_v > 1$  ppm, bei denen Rußwachstum vorherrscht, immer noch auf. Außerdem sind Ereignisse mit  $\tilde{f}_v < 0,1$  ppm wahrscheinlich, was durch die hohe Intermittenz in diesem Bereich der Flamme verursacht wird.

### 5.3.2 Einfluss der Vormischung

Das Abheben der AFF führt, wie in Abb. 5.2 gezeigt, zu einer signifikanten Vormischung von Brennstoff und Oxidator sowie zu Sauerstoffpräsenz auf der Achse. Da die Rußevolution stark vom Verbrennungsregime abhängt, ist der Einfluss der Vormischung von großem Interesse. Auch Verbrennungsmodelle können Annahmen über das Verbrennungsregime enthalten, weshalb die folgende Analyse helfen kann, das passende Verbrennungsmodell für abgehobene Flammen zu wählen. Daher wird die  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Statistik durch Konditionierung in rußwachstumsdominierte (Abb. 5.12) und rußoxidationsdominierte (Abb. 5.13) Statistiken unterteilt. Zusätzlich wird jeweils der Einfluss der Vormischung durch Isolinien und das Vormischverhältnis  $r_{\text{pre}}$  (Gl. (4.15)) gezeigt.

Abbildung 5.12 analysiert das Rußwachstum. Im Gegensatz zu den unkonditionierten  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Histogrammen (Abb. 5.11) fällt der radiale Trend nur schwach aus. Auch die Vormischung hat auf die Form der Statistik wenig Einfluss, da vorgemischte und nicht-vorgemischte Bereiche der Statistik meist übereinstimmen. Im unteren Teil der Flamme bei  $h = 134$  mm ist der auf Wachstum konditionierte Rußquellterm  $\langle \bar{S}_s |_{\bar{S}_s > 0} \rangle^s$  (Gl. (4.11)) in radialer Richtung fast konstant. Hier treten auch die höchsten mittleren Wachstumsraten auf, die zuerst im äußeren Teil der Flamme und ab  $h = 264$  mm auch auf der Achse abnehmen. Das Vormischverhältnis  $r_{\text{pre}} |_{\bar{S}_s > 0}$  zeigt, dass das hohe Rußwachstum auf der Achse und nahe der Flammenwurzel mit einer fast vollständiger Vormischung einhergeht. Stromab bei  $h = 374$  mm, wo sich die Statistiken in radialer Richtung kaum unterscheiden, kommen vorgemischte und nicht-vorgemischte Rußwachstumsereignisse etwa gleich häufig vor. Jedoch überwiegt hier die Rußoxidation (vgl. Abb. 5.11). Die radiale Abhängigkeit der unkonditionierten Statistiken nahe der Flammenwurzel (vgl. Abb. 5.11) stehen im Kontrast zu Messungen von Mahmoud et al. [151] in einer anliegenden Jetflamme. Die bisherige Analyse legt nahe, dass dies ein Effekt der Vormischung auf der Achse ist, die in der experimentell untersuchten, anliegenden Freistrahlfammen [151] so nicht auftritt. Wie Abb. 5.12 zeigt, geht der Einfluss der Vormischung mit zunehmendem Düsenabstand zurück. Gleichzeitig verschwindet der schwache radiale Trend komplett. Vieles weist also darauf hin, dass der radiale Trend im unteren Teil der Flamme eine Folge der Vormischung sein könnte. Allerdings lässt sich dessen Stärke mit rußwachstums-konditionierten Statistiken allein nicht erklären.



**Abbildung 5.12:** Korrelierte Histogramme der zellvolumengewichteten Häufigkeit von gefilterten Temperatur- und Rußvolumenbruchereignissen bei Rußwachstum  $F^*V_Z^*(\tilde{T}, \tilde{f}_v)|_{\bar{S}_s > 0}$ . Geglättete Isolinien für vorgemischte Bereiche: —  $F^*V_Z^*|_{\bar{S}_s > 0, FI > 0} < - - - F^*V_Z^*|_{\bar{S}_s > 0, FI > 0}$ . Geglättete Isolinien für nicht-vorgemischte Bereiche: —  $F^*V_Z^*|_{\bar{S}_s > 0, FI < 0} < - - - F^*V_Z^*|_{\bar{S}_s > 0, FI < 0}$ . Die Einheit des Rußquellterms  $\bar{S}_s$  ist  $\text{kg}/(\text{m}^3\text{s})$ .

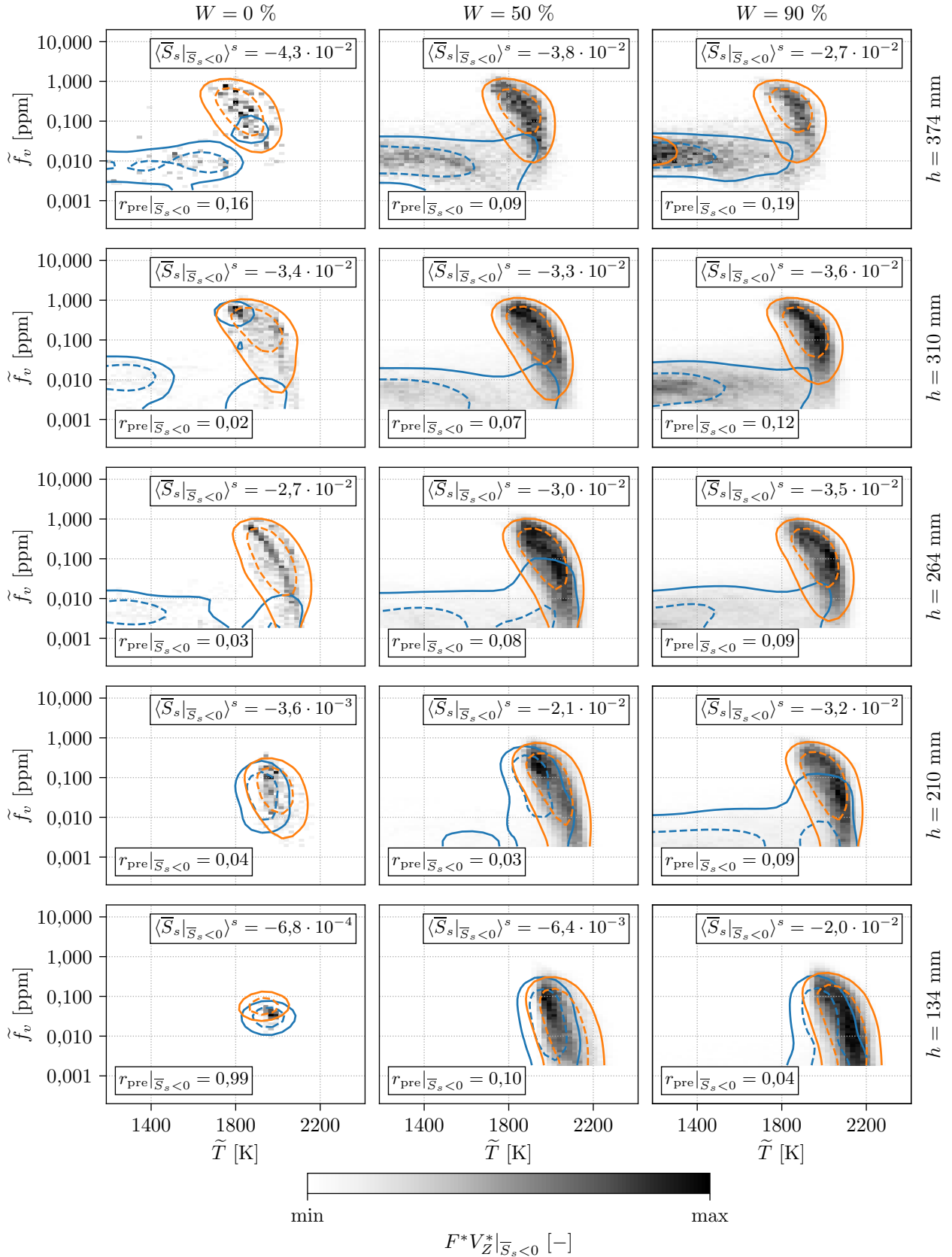
## 5 Abgehobene Freistrahlf Flamme

---

Abbildung 5.13 zeigt die rußoxidationsdominierten Histogramme. Ein Zusammenhang zwischen Rußquellterm und der Form der Statistik kann nicht festgestellt werden. Allerdings unterscheiden sich die Histogramme vorgemischter und nicht-vorgemischter Rußoxidation an einigen Positionen deutlich. Nur im unteren Teil der Flamme ( $h \leq 210$  mm), nahe und auf der Achse, fallen beide Bereiche zusammen. Weiter stromab findet Oxidation unter nicht-vorgemischten Bedingungen meist bei  $\tilde{T} > 1800$  K und  $\tilde{f}_v < 1$  ppm statt. Dies deutet darauf hin, dass es sich hierbei um die Oxidation in der Reaktionszone handelt. Unter vorgemischten Bedingungen finden sich Oxidationsereignisse zwar über den ganzen Temperaturbereich aber nur bei kleinen Rußvolumenbrüchen ( $\tilde{f}_v < 0,1$  ppm). Diese werden von teilweise oxidierten Rußfilamenten verursacht, die durch die Flammenfront transportiert werden und sich mit der kalten Umgebungsluft mischen. Ähnliche Beobachtungen wurden in den experimentellen Arbeiten gemacht. Shaddix und Zhang [217] fanden Ruß in Bereichen mit Flammenlöschung, Kruse et al. [136] fanden Ruß auf der mageren Seite der Flamme. Der Vormischindex zeigt, dass Oxidation überwiegend unter nicht-vorgemischten Bedingungen auftritt. Stromab erhöht sich der Anteil der vorgemischten Oxidation durch den Transport der Rußfilamente durch die Flamme geringfügig. Allerdings bleibt der Vormischindex klein, was verdeutlicht, dass Oxidation auf der mageren Seite der Flamme kaum eine Rolle spielt. Der einzige Punkt, an dem vorgemischte Rußoxidation überwiegt, liegt auf der Achse im unteren Teil der Flamme ( $h = 134$  mm). An dieser sehr brennstoffreichen Position findet jedoch fast ausschließlich Rußwachstum statt, was der sehr kleine Rußoxidationsquellterm verdeutlicht. Die nicht-vorgemischten Bereiche sind daher in der ganzen Flamme entscheidend für die Oxidation, während das vorgemischte Regime für den Rußausbrand eine kleine Rolle spielt. Wie bei den unkonditionierten  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Statistiken ist auch in Abb. 5.13 ein radialer Trend nahe der Flammenstabilisierung zu sehen. Vor allem der Rußquellterm unterscheidet sich um mehr als eine Größenordnung und zeigt die zur Reaktionszone hin steigende Rußoxidation. Damit kann eine abschließende Erklärung für den radialen Trend im unteren Teil der Flamme gegeben werden. Die durch das Abheben der Flamme verursachte Vormischung führt zu gleich starkem Rußwachstum über dem gesamten Radius. Starke Oxidation findet jedoch nur nahe der Reaktionszone im äußeren Teil der Flamme statt. Da sich die jeweiligen Bereiche im  $T$ - $f_v$ -Raum nicht verschieben, ruft der sich ändernde Rußquellterm den radialen Trend in der Statistik hervor.

### 5.3.3 Zusammenfassung der Analyse

Die statistische Analyse der LES hat sich dank der guten Übereinstimmung mit dem Experiment und dem großen Informationsgehalt der Simulationsdaten als sehr nützlich erwiesen, um ein besseres Verständnis der Rußevolution in Freistrahlf lammern zu erlangen. Es konnte gezeigt werden, dass die Positionen von Rußwachstum und -oxidation im  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Histogramm jeweils nahezu konstant bleiben. Die Trends in den Statistiken werden daher durch die wechselnde Dominanz von Rußwachstum und -oxidation hervorgerufen. Das Abheben der Flamme und die dadurch verursachte Sauerstoffpräsenz auf der Achse führen dazu, dass Ruß hauptsächlich unter vorgemischten Bedingungen entsteht und wächst. Dagegen findet die Rußoxidation vor allem unter nicht-vorgemischten Bedingungen statt. Das Abheben der Flamme und die Sauerstoffpräsenz auf der Achse sind auch für den radialen Trend der  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Histogramme verantwortlich, der in anliegenden Freistrahlf lammern nicht auftritt. Diese Analyse zeigt, dass zukünftige Simulationen rußender, abgehobener Flammen Modelle einsetzen sollten, die sowohl vorgemischte als auch nicht-vorgemischte Bedingungen abbilden können.



**Abbildung 5.13:** Korrelierte Histogramme der zellvolumengewichteten Häufigkeit von gefilterten Temperatur- und Rußvolumenbruchereignissen bei Rußoxidation  $F^* V_Z^* (\tilde{T}, \tilde{f}_v) | \bar{S}_s < 0$ . Geglättete Isolinien für vorgemischte Bereiche: —  $F^* V_Z^* | \bar{S}_s > 0, FI > 0$  < - - -  $F^* V_Z^* | \bar{S}_s > 0, FI > 0$ . Geglättete Isolinien für nicht-vorgemischte Bereiche: —  $F^* V_Z^* | \bar{S}_s > 0, FI < 0$  < - - -  $F^* V_Z^* | \bar{S}_s > 0, FI < 0$ . Die Einheit des Rußquellterms  $\bar{S}_s$  ist  $\text{kg}/(\text{m}^3\text{s})$ .





# 6 Flammenhalterstabilisierte Strahlflamme

Rezirkuliertes, verbranntes Gas wird in vielen Brennkammern zur Flammenstabilisierung genutzt und in manchen Kolbenmotoren dazu verwendet, die NO<sub>x</sub> Emissionen zu senken. In fett-mager (RQL, „rich-quick-lean“) Brennkammern sind die höchsten Rußkonzentrationen in der Rezirkulationszone zu finden [166, 231]. Da sich unter anderem die Aufenthaltszeit, und die thermochemischen Bedingungen in Rezirkulationszonen von denen der bisher betrachteten Strahlflammen unterscheiden, ist eine Modellvalidierung unter Einfluss von Heißgasrezirkulation wünschenswert. Die flammenhalterstabilisierte Strahlflamme bietet solche Bedingungen, ohne die Komplexität von Modellbrennkammern zu erreichen. Für nicht-rußende H<sub>2</sub> / CH<sub>4</sub>-FSF existiert eine große Datenbank mit Resultaten aus Messungen [244] und Simulationen die von RANS- und URANS-Simulationen mit einfachen (z.B. [49]) und komplexen TCI-Modellen (z.B. [137, 147, 159, 243]) über Flamelet-LES (z.B. [123, 192]) zu LES/PDF-Simulationen (z.B. [190]) reichen. Auf Basis dieser Brennergeometrie veröffentlichten Mueller et al. [165] Rußvolumenbruchmessungen und LES in einer Ethylenflamme, welche anschließend vereinzelt zur Modellvalidierung genutzt wurde [55]. Rowhani et al. [199, 200] veränderten die Brennergeometrie und führten Geschwindigkeits- und Rußvolumenbruchmessungen durch, um den Einfluss des Flammenhalterdurchmessers auf das Rußverhalten zu untersuchen. Obwohl der Datensatz Teil der ISF-Datenbank [118] ist, sind bisher noch keine numerischen Simulationen dieser Flammen bekannt. In dieser Arbeit wird die Flamme mit dem größten Flammenhalterdurchmesser simuliert, da diese am stärksten rußt. Trotz der einfachen Geometrie weist die Flamme durch die turbulente Einströmung von Brennstoff und Oxidator sowie des Einflusses der Oberflächentemperatur des Flammenhalters einige Unsicherheiten in den Randbedingungen auf. Ihr Einfluss auf die Flammenform und damit auch auf den Ruß ist erheblich. Die Flamme dient in dieser Arbeit also weniger der Modellvalidierung, sondern vielmehr dazu, den Einfluss der Rezirkulation auf die Rußevolution im Vergleich mit den anderen Flammen zu untersuchen. Nichtsdestotrotz werden im Folgenden die vorhandenen Messdaten zur Validierung genutzt und Unsicherheiten des numerischen Aufbaus genauer beschrieben.

### 6.1 Grundlagen

#### 6.1.1 Experimenteller Aufbau

Der zylinderförmige Flammenhalter der FSF hat einen Durchmesser von  $d_{\text{BB}} = 64$  mm und besitzt in der Mitte eine 4,6 mm große Bohrung, durch die mit Stickstoff verdünntes Ethylen strömt ( $X_{\text{N}_2}/X_{\text{C}_2\text{H}_4} = 0,25$ ). Die mittlere Brennstoffgeschwindigkeit beträgt  $\langle u \rangle = 32,1$  m/s, was bei den gegebenen atmosphärischen Bedingungen einer Reynoldszahl von  $Re = 15000$  entspricht. Der Flammenhalter wird von einem Mantelstrom aus Luft mit einer Geschwindigkeit von  $\langle u \rangle = 20$  m/s umströmt, die aus einer runden, um 10 mm zurückversetzten Düse mit  $d = 190$  mm strömt. Vor der Düse befindet sich ein Gitter zur Turbulenzreduktion. Mantelstrom und Brennstoff werden nicht aktiv vorgeheizt. Der Flammenhalter besteht aus Messing und ist mit Keramik zur Flamme hin isoliert. Durch den Flammenhalter bilden sich im Experiment zwei sichtbar rußende Zonen aus. Sie liegen in der Rezirkulationszone hinter dem Flammenhalter und weiter stromab, wo die Flamme einer Freistrahlfamme ähnelt. Ob die Flamme abhebt oder außen auf dem Flammenhalter aufsitzt, ist nicht bekannt.

#### 6.1.2 Numerisches Modell

Abbildung 6.1 zeigt die Gitterauflösung in einer Schnittebene durch das konische Rechengebiet. Dessen Länge deckt zwar nicht die ganze Flammenhöhe ab, ist aber groß genug gewählt, um Einflüsse der Randbedingungen auf das zu untersuchende Rezirkulationsgebiet zu minimieren und entspricht mit  $h = 5 d_{\text{BB}}$  vergleichbaren Rechengebieten aus der Literatur (z.B. [123]). Der Außendurchmesser ist so gewählt, dass die Scherschicht zwischen Mantelströmung und Umgebungsluft noch im Rechengebiet liegt. Das Hexaeder-O-Gitter besteht aus ca.  $9,4 \cdot 10^6$  Gitterpunkten mit 128 Zellen in Umfangsrichtung. Die kleinsten, ca. 0,1 mm großen Zellen befinden sich im Brennstoffeinlass. Mit steigender Flammenhöhe wachsen die Zellen bis auf ca. 1 mm an. Die Auflösung der Scherschicht zwischen Mantelstrom und Rezirkulationsgebiet wird durch den großen Flammenhalterdurchmesser im Vergleich zur Brennstoffzufuhr erschwert. Zwar beträgt die Zelllänge hier in axialer Richtung 0,2 mm und in radialer Richtung 0,4 mm, in Umfangsrichtung führt das strukturierte Gitter jedoch zu einer Zelllänge von ca. 1,5 mm. Die Zelllänge in Umfangsrichtung ist zwar sehr groß, jedoch mit anderen LES vergleichbar [123, 165, 190]. Eine für LES ausreichende Grenz- und Scherschichtauflösung, speziell zwischen Mantelströmung und Flammenhalter, konnte wegen dessen großen Durchmessers und den Einschränkungen des strukturierten Gitters nicht realisiert werden.

Als Randbedingung am seitlichen und am oberen Teil des Rechengebiets sowie neben dem Mantelstromeinlass ist eine Totaldruckrandbedingung vorgegeben. Der Mantelstromeinlass ist durch eine adiabate Wand von der Umgebungsluft getrennt. Die zeitaufgelösten, turbulenten Einströmrandbedingungen für Brennstoff- und Mantelstrom wurden durch Vorrechnungen erzeugt, die in Abschnitt 6.1.3 vorgestellt werden. Der Brennstoffeinlass ist zur Verhinderung von unphysikalischer Wirbelbildung um 10 mm in den Flammenhalter zurückversetzt. Die Temperatur von Luft und Brennstoff beträgt 297 K. Ein Aufheizen von Brennstoff und Mantelstrom vor dem Rechengebiet durch Wärmeübertragung vom heißen Flammenhalter, wird dadurch berücksichtigt, dass die Grenzschichttemperatur des Fluids am Einlass bis 1 mm Wandabstand auf 500 K erhöht ist. Zwar ist

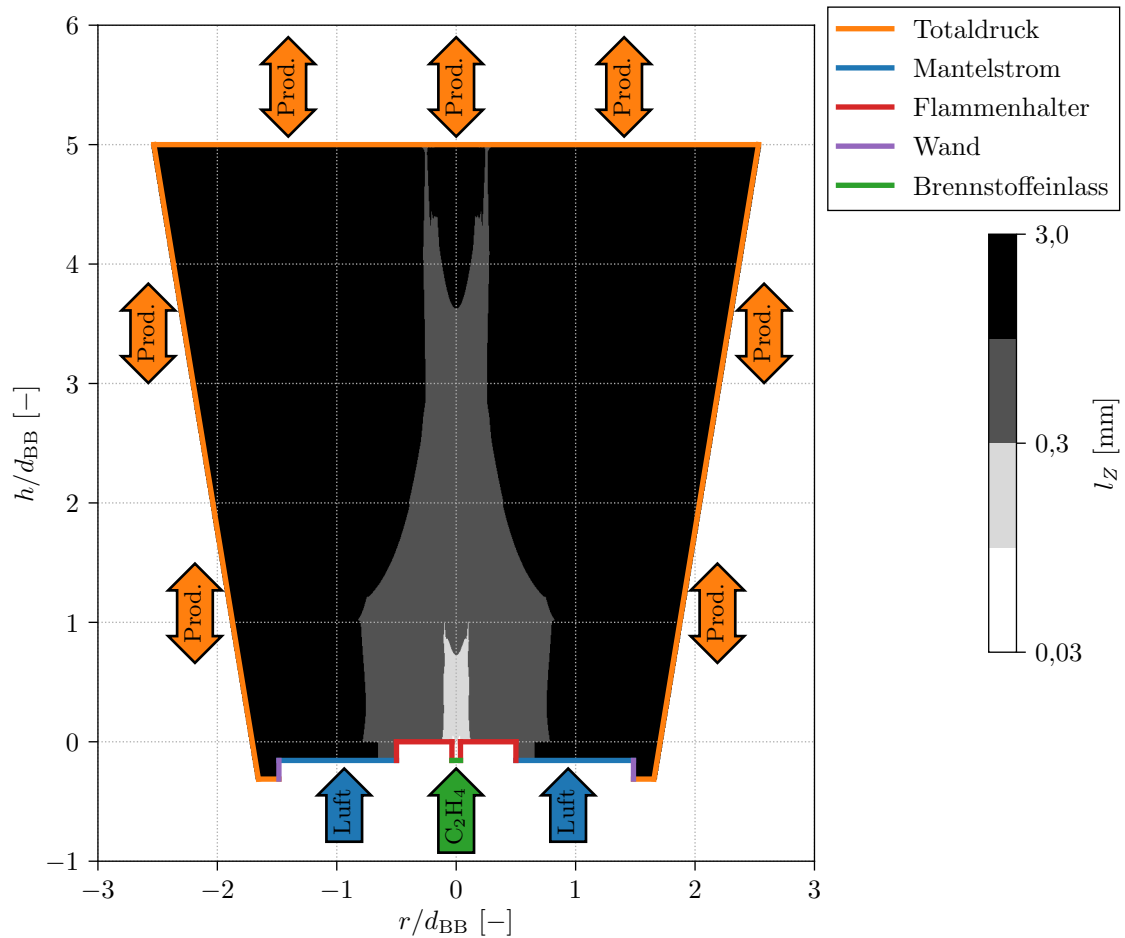
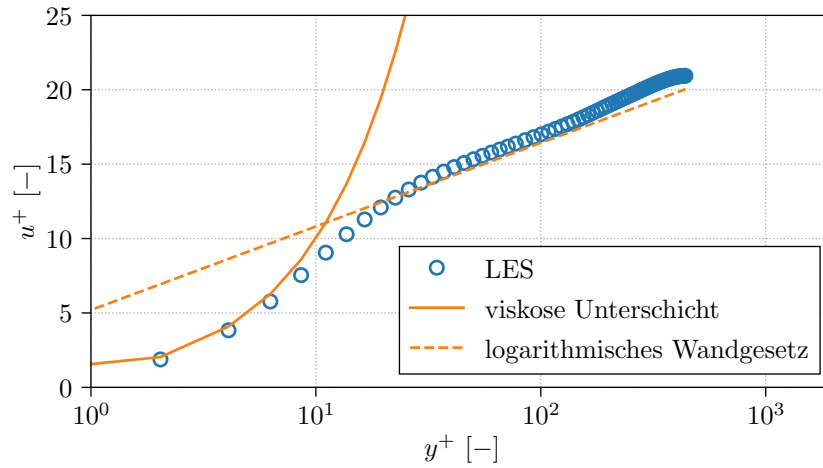


Abbildung 6.1: Gitterauflösungen und Randbedingungen der FSF.

die Oberflächentemperatur des Flammenhalters in der ruhenden FSF unbekannt, in der  $H_2/CH_4$ -Flamme liegen jedoch Messungen vor [244] (953-1050 K), durch deren Berücksichtigung bessere Simulationsergebnisse erzielt werden konnten [190]. Um die geringere adiabate Flammentemperatur und den zusätzlichen Wärmestrahlungsverlust durch Ruß zu berücksichtigen, wird in dieser Arbeit eine geringere Oberflächentemperatur von  $T_{BB} = 900$  K angenommen. Um den Einfluss der Flamme abzubilden, steigt die Temperatur auf den äußeren 4 mm des Flammenhalters linear auf 1600 K an. Wird weiterhin angenommen, dass die Temperaturdifferenz in der Keramikbeschichtung auf der Flammenhalteroberfläche 200 K beträgt, ergibt sich eine Oberflächentemperatur der seitlichen Wände des Flammenhalters von 700 K. Die gesamte physikalische Simulationsdauer beträgt 115 ms, wodurch bei einem Zeitschritt von  $1 \mu s$  ungefähr  $0,7 \cdot 10^6$  CPU-Stunden verbraucht wurden.

### 6.1.3 Vorrechnungen

Um die beiden zeitaufgelösten turbulenten Geschwindigkeitsprofile für die Einströmrandbedingungen zu generieren, wurden jeweils eigenständige LES auf Hexaedergittern durchgeführt. Wie bei solchen Strömungen üblich, kamen periodische Randbedingungen in Verbindung mit einem konstanten Druckgradienten zum Einsatz. Die Rechengebietslänge entspricht acht Durchmessern und wurde damit ausreichend lang gewählt, um durch die Periodizität bedingte Resonanzen im Rechengebiet zu verhindern.



**Abbildung 6.2:** Simuliertes Geschwindigkeitsprofil der turbulenten Rohrströmung im Vergleich zur Theorie [189].

Die moderate Reynoldszahl der Brennstoffzufuhr von  $Re = 15000$  ermöglichte eine wandauflösende LES, die sich am numerischen Modell von Nicoud und Ducros [174] orientiert. Dafür wurde die WALE-Konstante mit  $C_w = 0,5$  und die Abmessungen der wandnächsten Zelle übernommen. Die Größe der wandnächsten Zelle im Primärgitter beträgt  $l_{z,y} \approx 2 \cdot y^+$  in Wandnormalenrichtung sowie  $l_{z,z} \approx 5 \cdot l_{z,y}$  in Umfangsrichtung und  $l_{z,x} \approx 13 \cdot l_{z,y}$  in Strömungsrichtung. Das Rechengitter umfasst ungefähr  $4 \cdot 10^6$  Zellen. Der vorgegebene Druckgradient  $\Delta p/\Delta x = 3600 \text{ N/m}^3$  entspricht der Theorie [210] und resultiert in der gewünschten mittleren Geschwindigkeit von  $\langle u \rangle = 32,1 \text{ m/s}$ . Abbildung 6.2 zeigt das damit berechnete dimensionslose Geschwindigkeitsprofil, welches gut mit dem theoretischen Geschwindigkeitsprofil in der Grenzschicht einer turbulenten Rohrströmung übereinstimmt.

Zur Vorrechnung der Mantelströmung wurde ein Rohr mit Zentralkörper, dessen Durchmesser dem des Flammenhalters entspricht, simuliert. Die sehr hohe Reynoldszahl der Mantelströmung  $Re \approx 2 \cdot 10^5$  macht eine wandauflösende LES im Rahmen dieser Arbeit unmöglich, da sowohl die Grenzschicht am Zentralkörper als auch am äußeren Rohrrand hätte aufgelöst werden müssen. Stattdessen wurden Wandfunktionen eingesetzt, die den tatsächlichen Impulsverlust durch Wandreibung nachbilden sollten. Für die Grenzschicht am Zentralkörper existiert keine analytische Lösung, es ist jedoch davon auszugehen, dass die hier verwendete Zellgröße von  $l_{z,y} \approx 0,1 \text{ mm}$  im Bereich von  $l_{z,y} \approx 10 \cdot y^+$  liegt. Unter Beibehaltung der von Nicoud und Ducros [174] verwendeten Seitenverhältnisse der Zellen, ergab sich ein Rechengitter mit ca.  $6,7 \cdot 10^6$  Zellen. Nach einer ausreichend langen Anlaufzeit von 21 Durchlaufzeiten führte ein vorgegebener Druckgradient von  $\Delta p/\Delta x = 20,2 \text{ N/m}^3$  zur gewünschten mittleren Geschwindigkeit von  $20 \text{ m/s}$ . Der theoretische Druckgradient ohne Zentralkörper ist mit  $\Delta p/\Delta x = 19,2 \text{ N/m}^3$  sehr ähnlich. Durch die zusätzliche Reibung an der Oberfläche des Zentralkörpers wäre ein höherer Druckgradient in der Rechnung zu erwarten gewesen. Dies zeigt, dass die grobe Wandauflösung in der LES trotz Wandfunktionen einen zu geringen Impulsverlust verursacht. Ein zu geringes Turbulenzniveau in der Mantelströmung im Vergleich zur voll ausgebildeten Rohrströmung ist die Folge. Allerdings ist das Turbulenzniveau im Versuchsaufbau ebenfalls niedriger, da ein Gitter zur Turbulenzreduktion genutzt wird. Trotz klarer Defizite erscheint die Vorrechnung der Mantelströmung also ausreichend für den Einsatz in der LES.

### 6.1.4 Flammenstruktur

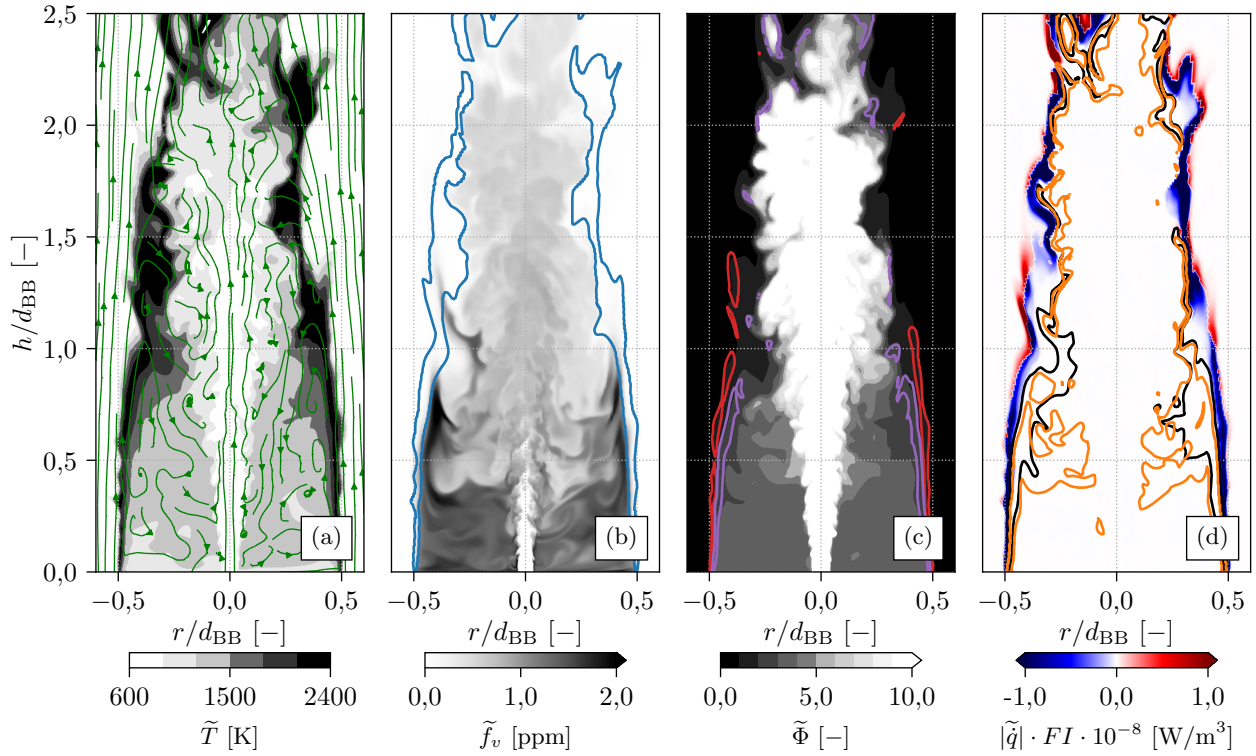
Abbildung 6.3 stellt charakteristische Eigenschaften der FSF anhand instantaner Größen dar. Die Temperaturverteilung in Abb. 6.3(a) zeigt, dass die Flamme zwischen dem durch Stromlinien visualisierten Rezirkulationsgebiet und dem Mantelstrom liegt. Nur hier werden Temperaturen von  $\tilde{T} > 2100$  K erreicht, während die Rezirkulationszone mit  $\tilde{T} \approx 1200$  K deutlich kälter ist und zum Flammenhalter hin weiter abkühlt. Außerdem sitzt die Flamme auf dem Flammenhalter auf, was einen erheblichen Einfluss auf das Rußverhalten hat und in Abschnitt 6.2.4 diskutiert wird. Während die Flamme nahe des Flammenhalters nur schwach von turbulenten Strukturen beeinflusst wird, steigt der Einfluss der Turbulenz weiter stromab stetig an. Außerdem verschiebt sich die Flammenfront zur Symmetrieachse hin. Abbildung 6.3(b) zeigt die Rußverteilung, die durch die mit OH-Isolinien gekennzeichnete Flammenfront begrenzt wird. Die höchsten Rußkonzentrationen finden sich im unteren Teil der Rezirkulationszone und nahe der Flamme. Stromab nimmt die Rußkonzentration stetig ab. Die hohe Rußkonzentration in der Rezirkulationszone lässt sich durch das in Abb. 6.3(c) dargestellte Äquivalenzverhältnis erklären. Die Isolinien der Rußquellterme zeigen, dass Rußwachstum und -oxidation, wie bei vielen Diffusionsflammen auch, nahe der Flammenfront am stärksten sind. Allerdings herrscht in der Rezirkulationszone ein so hoher Brennstoffüberschuss, dass hier keine Rußoxidation zu erwarten ist. Große Aufenthaltszeiten in der Rezirkulationszone führen schließlich dazu, dass geringe Rußquellterme zu hohen Rußkonzentrationen führen können. In Abb. 6.3(d) wird ersichtlich, dass Rußquellterme auch in der Rezirkulationszone vorhanden sind. Während die durch Acetylenwachstum bedingten Quellterme vornehmlich nahe der heißen Flammenfront zu finden sind, reichen die Quellterme durch PAH-Adsorption bis in die Rezirkulationszone. Zwar ist die Quantifizierung einzelner Quellterme meist wenig aussagekräftig, da das Rußmodell als Ganzes validiert wurde, allerdings wurden diese räumlichen Unterschiede auch in Arbeiten mit gänzlich anderer Verbrennungs- und Rußmodellierung festgestellt [55, 165]. Auch die physikalische Beschränkung des Acetylenwachstums auf heiße, radikalreiche Zonen spricht für die beobachteten Unterschiede der Quellterme. Der mit der Wärmefreisetzung skalierte Flammenindex (Gl. (4.14)) zeigt schließlich, dass die Flamme im Gegensatz zur AFF fast ausschließlich im nicht-vorgemischtem Regime brennt.

## 6.2 Validierung

Im Gegensatz zur anderen rußenden FSF [165] sind zur Validierung dieser Flamme nicht nur Rußmessungen [200] sondern auch Geschwindigkeitsmessungen [199] verfügbar. Temperatur- und OH-Messungen, die zur Validierung des Einflusses der Randbedingungen nötig wären, sind nicht vorhanden, weshalb die Plausibilität der Flammenstruktur separat in Abschnitt 6.2.4 besprochen wird. Zur Validierung wurden die LES-Ergebnisse zeitlich und in Umfangsrichtung gemittelt.

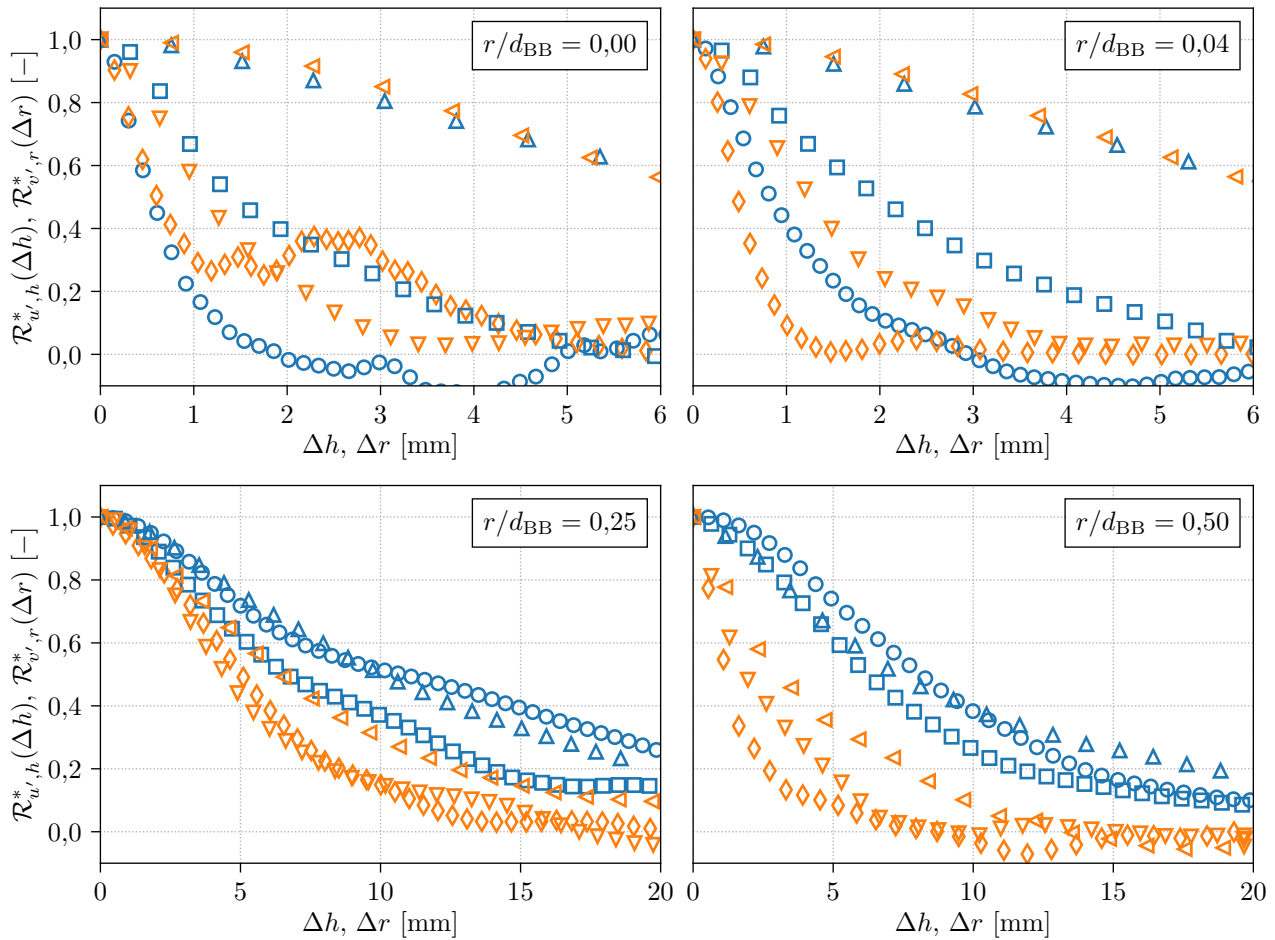
### 6.2.1 Qualität der LES

Wie bei der AFF erfüllt die LES der FSF alle in Abschnitt 4.3.1 genannten schwachen Qualitätskriterien. Da das Strömungsfeld im Mittel keine tangentialen und nur schwache radiale Geschwindigkeiten aufweist, lässt sich die Qualität der LES weiterhin anhand von axialen und radialen



**Abbildung 6.3:** Instantane Konturplots verschiedener Flammeneigenschaften in einer Schnittenebene durch die Flamme.  $\rightarrow$  Stromlinien,  $\text{---}$   $\tilde{Y}_{OH} = 10^{-4}$ ,  $\text{---}$   $\bar{S}_s = -0,1 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$ ,  $\text{---}$   $\bar{S}_s = 0,1 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$ ,  $\text{---}$   $\bar{S}_{s,C_2H_2} = 0,025 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$ ,  $\text{---}$   $\bar{S}_{s,PAH} = 0,025 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$ .

Zweipunktkorrelationen bestimmen. Abbildung 6.4 vergleicht Zweipunktkorrelationen der axialen Geschwindigkeitskomponente in axialer Richtung ( $R_{v',h}^*(\Delta h)$ ) und der radialen Geschwindigkeitskomponente in radialer Richtung ( $R_{v',r}^*(\Delta r)$ ). Der Abstand der Symbole zeigt die mittlere Zellgröße, wobei große Variationen vor allem auf der Achse ( $r/d_{BB} = 0$ ) auffallen. Hier weist das Gitter die größten Änderungen der Zellgröße auf. Auf der Achse ( $r/d_{BB} = 0$ ) nahe der Düse bei  $h/d_{BB} = 0,2$  werden die axiale und die radiale Korrelation mit fünf Zellen bis  $R = 0,3$  aufgelöst, was etwas über der Empfehlung von Davidson [51] liegt. Stromab verbessert sich die Auflösung der Korrelationen, wobei die radiale Korrelation bei  $h/d_{BB} = 0,8$  noch immer etwas zu grob aufgelöst ist. In der Scherschicht zwischen Brennstoffstrom und Rezirkulationszone ( $r/d_{BB} = 0,04$ ) werden alle axialen Korrelationen gut aufgelöst, während die radialen Korrelationen zum Rezirkulationsgebiet innerhalb weniger Gitterzellen stark abfallen. Diese Diskrepanz ist auf die Turbulenzproduktion in der Scherschicht zurückzuführen. Das Rezirkulationsgebiet ( $r/d_{BB} = 0,25$ ) ist nur schwach turbulent und alle Korrelationen sind mit mehr als zehn Gitterpunkten entsprechend gut aufgelöst. In der Scherschicht zwischen Mantelstrom und Rezirkulationsgebiet ( $r/d_{BB} = 0,5$ ) zeigt sich wieder, dass die radialen Korrelationen stark abfallen, während der Verlauf der axialen Korrelationen deutlich flacher ist. Letzteres spricht für eine gute Auflösung. Allerdings verdeutlicht die Diskrepanz zwischen axialen und radialen Korrelationen den eingeschränkten Nutzen von Zweipunktkorrelationen in Scherschichten, weshalb die Korrelationen in Umfangsrichtung im unteren Teil der Flamme wenig aussagekräftig sind. Nichtsdestotrotz kann die Gitterqualität der LES im Bereich der Flamme als ausreichend gut bezeichnet werden. Die OH-Schicht wird mit drei bis fünf Zellen gerade ausreichend aufgelöst. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass die Wandgrenzschicht des Flammenhalters und die

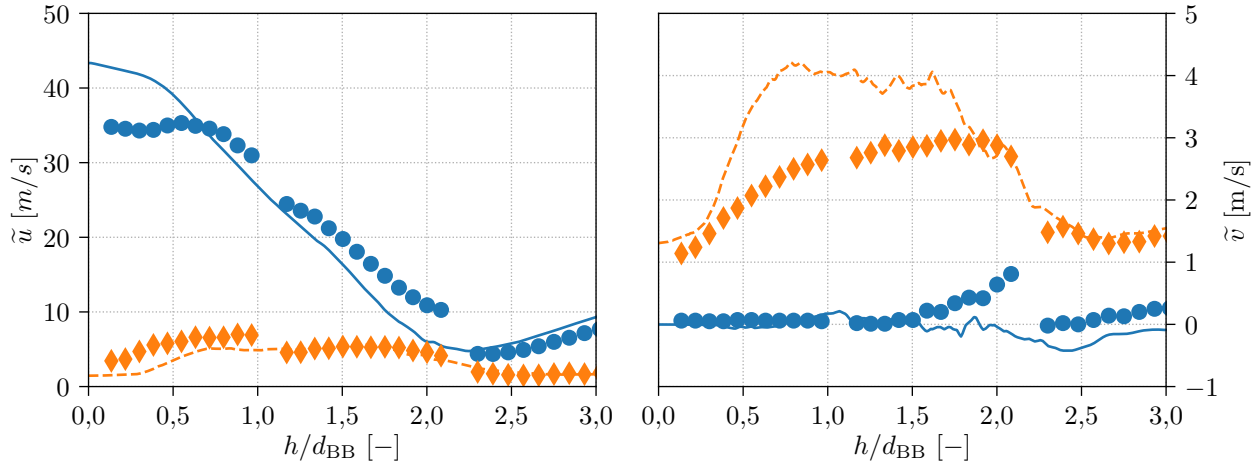


**Abbildung 6.4:** Normierte Zweipunktkorrelationen von verschiedenen Positionen ausgehend.  $R_{u',h}^*(\Delta h)$ :  $\circ$   $h/d_{BB} = 0,2$ ;  $\square$   $h/d_{BB} = 0,8$ ;  $\triangle$   $h/d_{BB} = 2,4$ .  $R_{v',r}^*(\Delta r)$ :  $\diamond$   $h/d_{BB} = 0,2$ ;  $\nabla$   $h/d_{BB} = 0,8$ ;  $\triangleleft$   $h/d_{BB} = 2,4$ .

Scherschicht zwischen Mantelstrom und Rezirkulationsgebiet nicht ausreichend aufgelöst werden. Dies liegt daran, dass die maximale Zellstreckung in Umfangsrichtung bei LES nicht zu hoch sein darf. Sie sollte den Wert von zwanzig nicht überschreiten [51] und idealerweise bei vier liegen [174]. Deshalb müsste der vergleichsweise große Flammenhalter für eine bessere Grenzschichtauflösung mit deutlich mehr Zellen in Umfangsrichtung diskretisiert werden. Dies wäre durch die damit steigenden Rechenkosten nicht zu rechtfertigen.

## 6.2.2 Strömungsfeld

Abbildung 6.5 vergleicht Geschwindigkeitsprofile auf der Achse aus PIV-Messungen [199] mit den LES-Ergebnissen. Experiment und Simulation stimmen überein, dass die axiale Geschwindigkeit bis  $h/d_{BB} = 2,2$  stetig abnimmt und danach wieder steigt. Außerdem stimmt der Verlauf der RMS-Werte beider Geschwindigkeitskomponenten überein, der erst ansteigt, dann bis  $h/d_{BB} = 2,2$  ein relativ konstantes Niveau hält und schließlich abfällt. Experiment und Simulation weichen vom Erwartungswert der mittleren radialen Geschwindigkeitskomponente von  $\langle v \rangle = 0$  m/s geringfügig ab. Die Abweichung der Simulation zeigt, dass eine vollständige Konvergenz der Statistiken noch nicht erreicht ist. Die Abweichung der Messung kann nicht durch unzureichende Konvergenz erklärt wer-



**Abbildung 6.5:** Axiale Profile der axialen Geschwindigkeit  $\tilde{u}$  (links) und der radialen Geschwindigkeit  $\tilde{v}$  (rechts). Mittelwert (— Simulation, ● Experiment [199]) und RMS (--- Simulation, ◆ Experiment [199]). Zur besseren Lesbarkeit ist nicht jeder Messpunkt gezeigt.

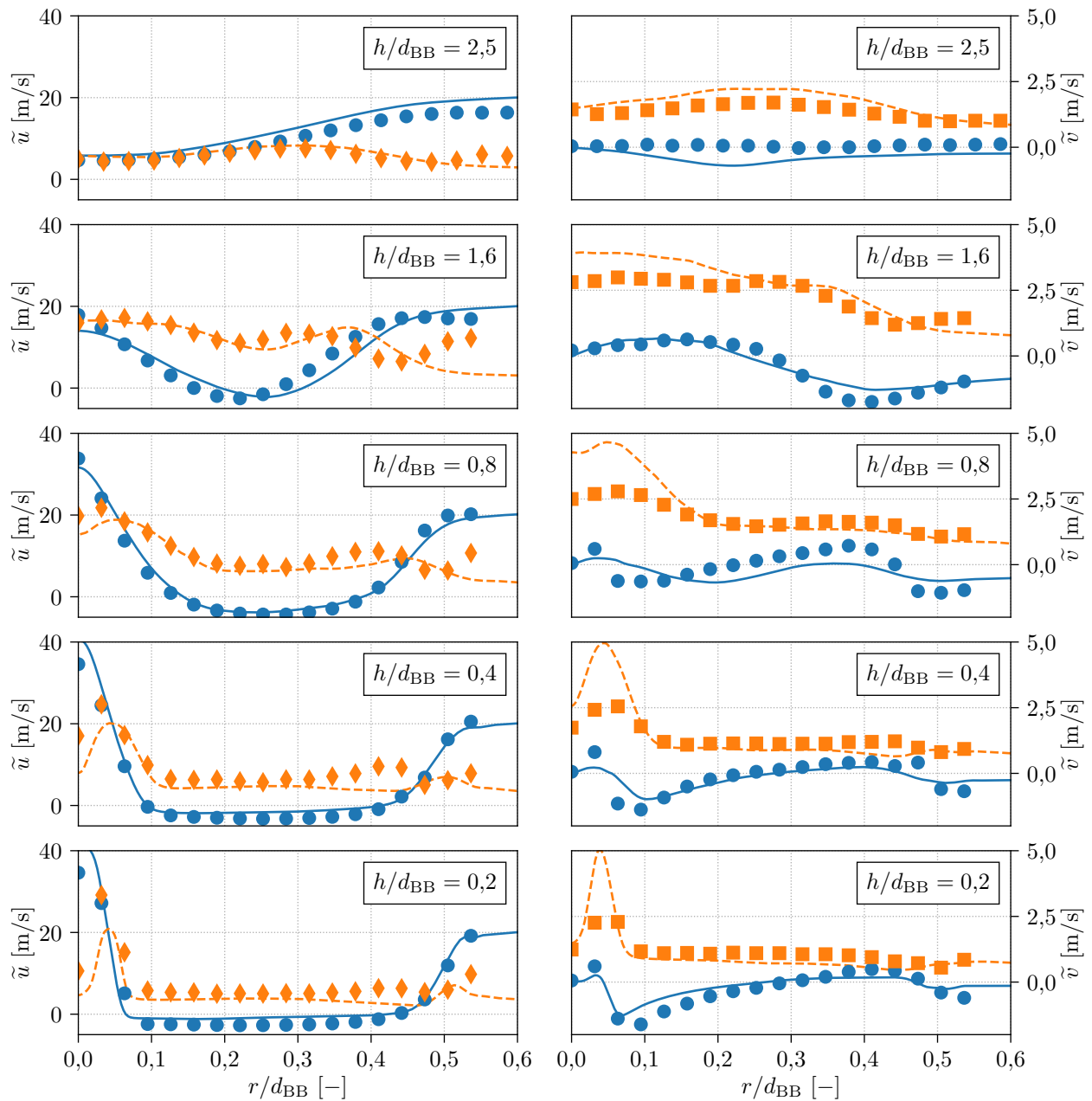
den, liegt aber im Rahmen der Messungenauigkeit von  $\pm 0,95$  m/s. Die größten Abweichungen zwischen Simulation und Experiment zeigen sich in der mittleren axialen Geschwindigkeitskomponente direkt an der Düse. Der Erwartungswert der Geschwindigkeit auf der Achse einer voll ausgebildeten, turbulenten Rohrströmung mit  $\langle u \rangle = 32,1$  m/s liegt hier bei  $\langle u \rangle(r = 0 \text{ mm}) = 39,1$  m/s [189]. Wärmeeintrag ins Fluid über die Wände des Flammenhalters führt in der LES zu einer weiteren Beschleunigung. Wieso dieser Erwartungswert von den Messungen so stark unterschätzt wird, bleibt ebenso wie die Ursache der Sprünge in den Messwerten unklar.

Abbildung 6.6 vergleicht Radialprofile der Geschwindigkeitskomponenten an fünf Positionen. Die unteren vier schließen das Rezirkulationsgebiet mit ein, das in der LES bis  $h/d_{BB} = 1,81$  und im Experiment bis  $h/d_{BB} = 1,75$  reicht. Generell stimmen gemessene und simulierte Geschwindigkeiten gut überein, wobei an einzelnen Positionen Abweichungen auftreten. Die größten finden sich, wie bei LES ähnlicher Flammen [123, 190], in den RMS-Werten im unteren Bereich des Rezirkulationsgebiets nahe der Brennstoffzufuhr. Die Vorhersage der Geschwindigkeiten im Rezirkulationsgebiet ist zufriedenstellend, wobei die LES bei  $h/d_{BB} = 0,2$  und  $h/d_{BB} = 0,4$  langsamere axiale Geschwindigkeiten als die Messung aufweist. Die Profile bei  $h/d_{BB} = 1,6$  zeigen, dass hier das Rezirkulationsgebiet in der LES etwas breiter ist als im Experiment. Außerdem sind die im Experiment erhöhten RMS-Werte der axialen Geschwindigkeit an den untersten beiden Positionen zwischen  $0,4 < r/d_{BB} < 0,45$  in der LES nicht sichtbar.

### 6.2.3 Rußvorhersage

Abbildung 6.7 vergleicht die Rußvorhersage der LES mit LII-Messungen [200] auf der Achse. Die simulierten und gemessenen Werte unterscheiden sich in ihrer Größenordnung deutlich, weshalb die mittleren Messwerte um den Faktor neun und die RMS-Messwerte um den Faktor drei skaliert sind. Da die Simulation bis  $h/d_{BB} \approx 2$  wegen des hohen Äquivalenzverhältnisses kaum Rußquellen auf der Achse aufweist, steigt  $\langle f_v \rangle$  hier nur durch turbulente Mischung. Entsprechend hoch ist  $\tilde{f}_{v,\text{RMS}}$  im Mischungsbereich zwischen  $0,25 < h/d_{BB} < 1,0$ . Im Gegensatz dazu zeigt die Messung in diesem Bereich konstante, niedrige Mittel- und RMS-Werte. Messungen und LES in einer ähnli-



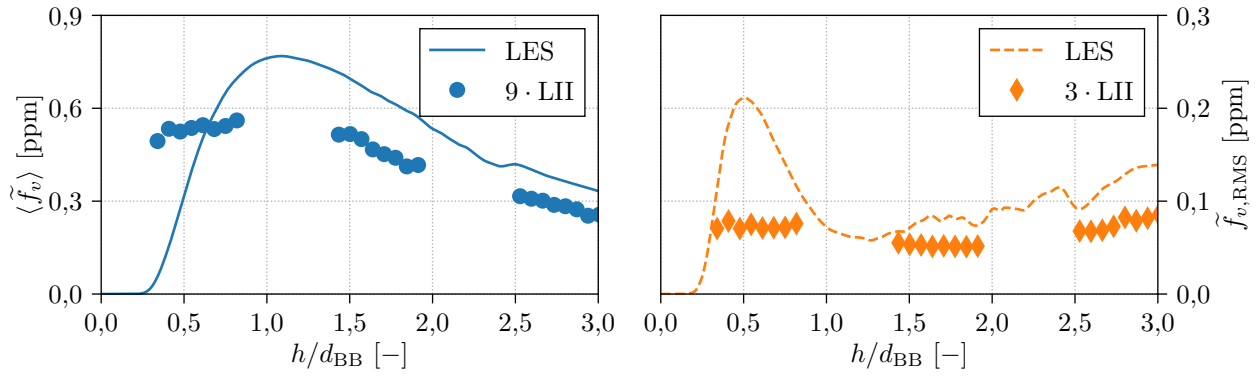


**Abbildung 6.6:** Radialprofile der axialen Geschwindigkeit  $\tilde{u}$  (links) und der radialen Geschwindigkeit  $\tilde{v}$  (rechts). Mittelwert (— Simulation, ● Experiment [199]) und RMS (--- Simulation, ◆ Experiment [199], ■ Experiment [199]). Alle  $\tilde{u}_{\text{RMS}}$ -Werte sind mit Faktor drei skaliert. Zur besseren Lesbarkeit ist nicht jeder Messpunkt gezeigt.

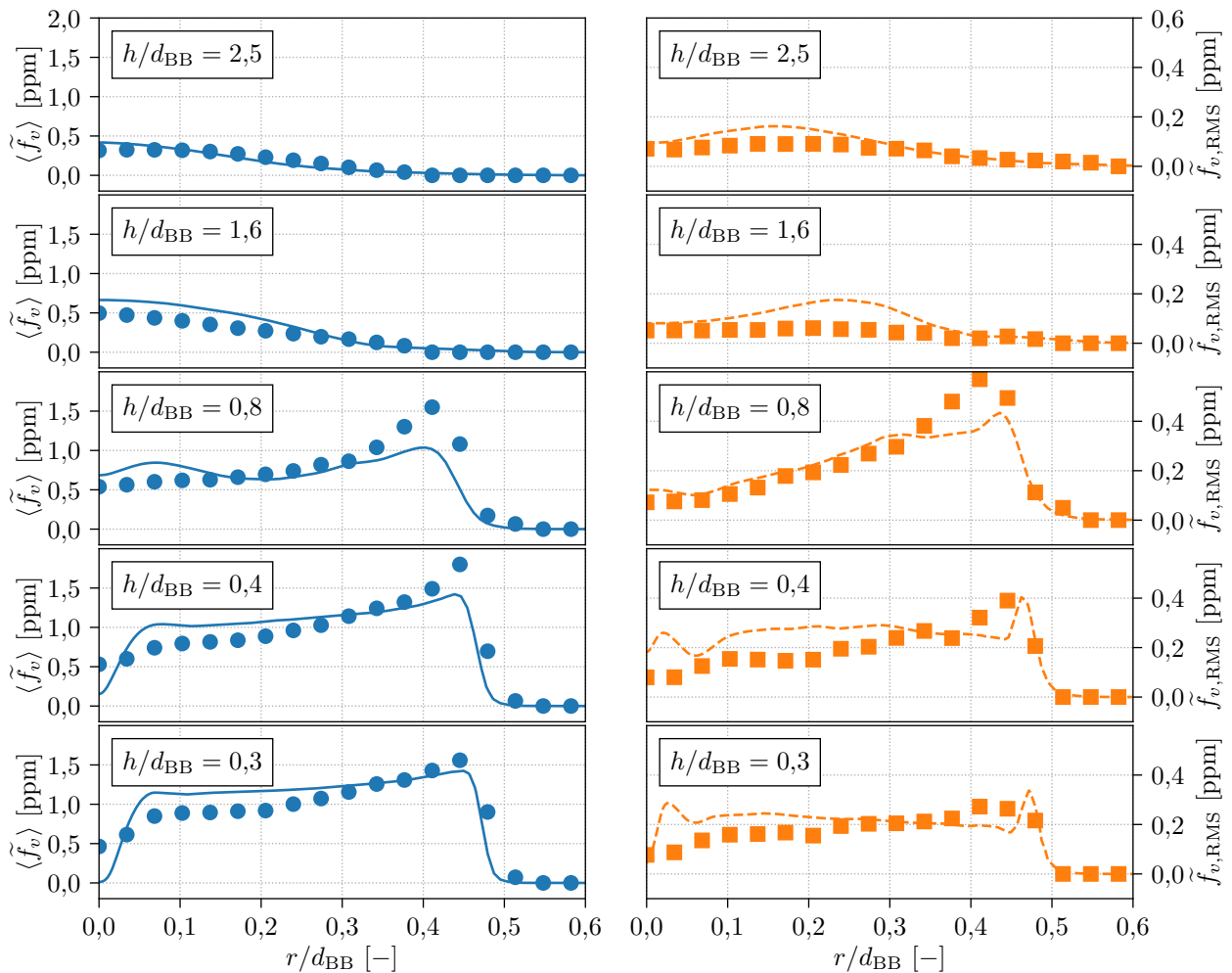
chen Flamme mit kleinerem Brennstoffdüsen- und Flammenhalterdurchmesser [165] weisen zwischen  $0,432 < h/d_{BB} < 0,72$  einen ähnlich starken Anstieg auf, wie die vorliegende LES. Weiter stromab passen gemessene und simulierte Tendenzen gut zusammen.

Abbildung 6.8 zeigt fünf gemessene und simulierte radiale Rußprofile, beginnend bei der flammenhalter nächsten Messposition bei  $h/d_{BB} = 0,3$ . Bis auf die unterschiedliche Größenordnung stimmen Form und Tendenz zwischen Messung und Simulation an allen Positionen gut überein. So wird auch die Transition der Position des maximalen Rußvolumenbruchs von der Innenseite der Flamme nahe des Flammenhalters auf die Achse weiter stromab von der LES gut wiedergegeben. Lediglich bei  $h/d_{BB} = 0,8$  wird der Anstieg hin zum Maximalwert von der LES unterschätzt, was auch in LES

## 6 Flammenhalterstabilisierte Strahlflamme



**Abbildung 6.7:** Simulierte (LES) und gemessene (LII [200]) axiale Profile des Rußvolumenbruchs. Links:  $\langle \tilde{f}_v \rangle$ , rechts:  $\tilde{f}_{v,RMS}$ . Gemessene Mittelwerte sind mit Faktor neun und gemessene RMS-Werte mit Faktor drei skaliert. Zur besseren Lesbarkeit ist nicht jeder Messpunkt gezeigt.



**Abbildung 6.8:** Radialprofile des Rußvolumenbruchs. Links:  $\langle \tilde{f}_v \rangle$  (— Simulation, ● 9-Experiment [200]), rechts:  $\tilde{f}_{v,RMS}$  (--- Simulation, ■ 3-Experiment [200]). Gemessene Mittelwerte sind mit Faktor neun und gemessene RMS-Werte mit Faktor drei skaliert. Zur besseren Lesbarkeit ist nicht jeder Messpunkt gezeigt.

mit ähnlicher Geometrie auftritt [165]. Dies konnte teilweise auf den Einfluss der Einströmrandbedingung der Mantelströmung zurückgeführt werden. Außerdem wird nahe der Reaktionszone im äußeren Teil der Flamme der Bereich hoher RMS-Werte von der LES als zu schmal vorhergesagt.

### 6.2.4 Einfluss der Unsicherheiten

Die gute Übereinstimmung zwischen simulierten und gemessenen Rußprofilen hinsichtlich Form und Tendenz steht im Gegensatz zur Überschätzung von  $\langle \tilde{f}_v \rangle$  in der gesamten Flamme durch die LES. Diese kann sowohl von Rußmodellierungsunsicherheiten als auch von Unsicherheiten im numerischen Modell verursacht werden. Die Unsicherheiten des Rußmodells werden separat im Rahmen eines quantitativen Vergleichs des Rußverhaltens der turbulenten Flammen in Abschnitt 8.1 betrachtet.

Die Unsicherheiten des numerischen Modells betreffen vor allem die Scherschicht zwischen Rezirkulationszone und Mantelstrom. Hier sind sowohl die Flamme als auch die größten Rußquellterme zu finden. Die größten Unsicherheiten liegen im unbekannte Turbulenzgrad des Mantelstroms, in der, durch das strukturierte Gitter bedingt, schlechten Auflösung der Grenzschicht am Flammenhalter und in der niedrigen Auflösung der Scherschicht in Umfangsrichtung. Diese Unsicherheiten betreffen somit die turbulente Mischung von Brennstoff und Oxidator, die Scherrate in der Flamme, sowie den Impulsaustausch zwischen Rezirkulationsgebiet und Mantelstrom. Die Flammenposition, die Stärke des Rußquellterms, die Länge des Rezirkulationsgebietes und die Aufenthaltszeit im Rezirkulationsgebiet sind dadurch direkt beeinflusst.

Die Flammenposition wurde zwar nicht vermessen, ein signifikantes Abheben erscheint aber unwahrscheinlich, da dadurch die starken Rußquellterme und damit auch das durch Messwerte belegte Rußmaximum im unteren Teil der Scherschicht verschwinden würden. Allerdings zeigt eine FRC-basierte LES der  $\text{H}_2/\text{CH}_4$ -FSF, die den Wärmeverlust an der Oberfläche des Flammenhalters berücksichtigt, ein leichtes Abheben der Flamme durch die nicht-adiabate Randbedingung [190]. Dies würde den Bereich der Rußquellterme etwas verkürzen, wodurch weniger Ruß entstünde. Außerdem wäre die Turbulenzproduktion in der Scherschicht größer, was die höheren Geschwindigkeits-RMS-Werte im Experiment bei  $0,4 < r/d_{\text{BB}} < 0,45$  erklären könnte. Ein höherer Turbulenzgrad in der Scherschicht würde die Länge der Rezirkulationszone und die dortigen Geschwindigkeiten beeinflussen und damit auch die Aufenthaltsdauer von Ruß im Rezirkulationsgebiet verändern. Zusätzlich wäre die Mischung zwischen dem brennstoffreichen Gas der Rezirkulationszone und der umströmenden Luft größer. Da Ruß auch im Rezirkulationsgebiet weiter wächst, hätte dies direkte Folgen für den Rußvolumenbruch in der gesamten Flamme.

Die Untersuchung der beschriebenen Effekte setzt ein deutlich feineres Gitter im äußeren Bereich des Flammenhalters voraus. Durch den großen Unterschied zwischen den Durchmessern der Brennstoffdüse und des Flammenhalters ist dies mit dem hier verwendeten strukturierten Gitter kaum zu erreichen. Allerdings wären auch bei einem unstrukturierten Gitter sehr viele Zellen nötig, um eine gute räumlichen Auflösung zu gewährleisten. Im Rahmen dieser Arbeit standen die dafür benötigten Ressourcen nicht zur Verfügung.

Insgesamt zeigt die Diskussion, dass die erheblichen Unsicherheiten des numerischen Modells den Rußquellterm besonders an der Innenseite der Flamme zwischen Mantelstrom und Rezirkulationsgebiet beeinflussen. Die zufriedenstellende Vorhersage der Geschwindigkeit und der Form des Rußfelds lassen darauf schließen, dass die Positionen der Rußbildung und -oxidation durch die Simulation korrekt wiedergegeben werden. Damit ist ein nachfolgender Vergleich der Rußevolution zwischen der FSF und den anderen untersuchten Flammen (siehe Abschnitt 8.1), unter Berücksichtigung des überschätzten Rußvolumenbruchs, möglich.

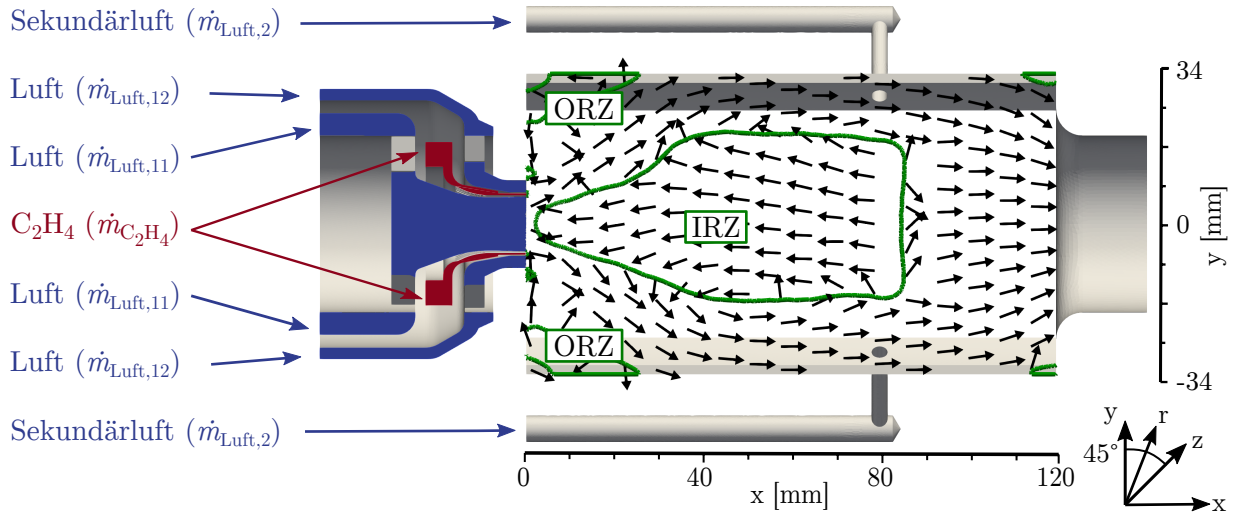


# 7 Modellbrennkammer

Um wissenschaftliche Untersuchungen der Rußevolution unter triebwerksähnlichen Bedingungen zu ermöglichen, wurde die DLR-Modellbrennkammer entwickelt [93]. Diese besitzt einen Drallinjektor, wird bei Drücken bis fünf bar betrieben und verfügt über eine Sekundärlufteinblasung, die das RQL-Betriebskonzept von Flugtriebwerksbrennkammern imitieren soll. Vereinfachend wird Ethylen als Brennstoff verwendet. Die Betriebsbedingungen sind so gewählt, dass vielfältige optische Messungen möglich sind, weshalb das Rußniveau weit unter dem realer RQL-Triebwerksbrennkammern liegt. Im Folgenden werden drei Betriebspunkte numerisch untersucht, an denen das DLR-Rußmodell bereits von Eberle [70] validiert wurde. Die Betriebspunkte sind so gewählt, dass der Einfluss des Äquivalenzverhältnisses am Injektor und der Einfluss der Sekundärlufteinblasung auf den Ruß untersucht werden kann. Die Validierung wird im Folgenden wiederholt, da in dieser Arbeit neuere Messungen der Fenstertemperaturen [171] im numerischen Modell berücksichtigt sind.

Dank der großen Anzahl an Validierungsdaten [93–96, 145, 171, 233] und der Aufnahme in die ISF-Datenbank [118] existiert eine Vielzahl an Simulationen, die zur Modellvalidierung [39, 44, 65, 72, 73, 79, 82, 84, 92, 103, 176, 195, 240, 254] oder zur Analyse der Rußevolution dienen [37, 38, 105, 133]. So wurden Simulationen der MBK bereits mit den meisten gängigen Rußmodellen wie beispielsweise Zweigleichungsmodelle (z.B. [72]), auf der Momentenmethode basierende Modelle (z.B. [133]) und Modelle, die die PSD auflösen, wie Lagrangemodelle (z.B. [92]) und Sektionalmodelle (z.B. [103]), durchgeführt. Zwar konnte der Verbrennungsprozess in einer ersten, URANS-basierten Arbeit [72] gut wiedergegeben werden, zur Rußvorhersage ist jedoch nur die LES geeignet [73]. Der Verbrennungsprozess in der MBK findet bei vorgemischten und nicht-vorgemischten Bedingungen [233] unter starkem Einfluss differentieller Speziesdiffusion [79], starken Wärmeverlusten an den Wänden [171, 195] und Rezirkulation von heißem, teilverbranntem Gas statt. Bei diesen anspruchsvollen Bedingungen eignen sich FRC-basierte Simulationen sehr gut zur Rußvorhersage [52, 65, 73, 103, 105].

Das Rußverhalten der MBK zeichnet sich durch eine hohe Intermittenz aus [38, 233]. Außerdem beeinflusst eine helikale Wirbelstruktur die Rußevolution [72, 95]. Die nachfolgende Diskussion dient neben der Modellvalidierung vor allem dazu, den Einfluss der Dynamiken des Strömungsfelds auf die Rußevolution bei unterschiedlichen Betriebspunkten besser zu verstehen.



**Abbildung 7.1:** Schematische Darstellung der MBK, um  $90^\circ$  im Uhrzeigersinn um die  $z$ -Achse gedreht. —  $\langle \tilde{u}_x \rangle = 0$  m/s, Pfeile zeigen die Strömungsrichtung in einer Schnitt Ebene an.

## 7.1 Grundlagen

### 7.1.1 Experimenteller Aufbau

Abbildung 7.1 zeigt eine schematische Darstellung der MBK. Ethylen wird im Primärinjektor durch 64 konzentrisch angeordnete, rechteckige Kanäle zwischen zwei verdrehten Luftströmen eingeblasen. Weiter stromab wird Sekundärluft durch vier Bohrungen durch die Pfosten der Brennkammer eingeblasen. Quartzglasfenster, die zwischen den Pfosten angebracht sind, machen die Brennkammer für optische Messungen zugänglich. Hinter dem Injektor bildet sich ein Rückströmgebiet, die innere Rezirkulationszone (IRZ, „inner recirculation zone“). Das Rückströmgebiet in den unteren Ecken der Brennkammer wird äußere Rezirkulationszone (ORZ, „outer recirculation zone“) genannt. Die Hauptströmung ist durch die innere Scherschicht (ISL, „inner shear layer“) und die äußere Scherschicht (OSL, „outer shear layer“) von den Rückströmgebieten getrennt. Direkt hinter der Düse breitet sich die Hauptströmung V-förmig aus und gelangt über die Peripherie der Brennkammer zum Auslass.

Tabelle 7.1 fasst die untersuchten Betriebspunkte (BP) zusammen, die sich durch die verschiedenen Luft- und Brennstoffmassenströme im Äquivalenzverhältnis am (primären) Injektor  $\Phi_p$  und im globalen Äquivalenzverhältnis  $\Phi_g$  unterscheiden. In Betriebspunkt 1 (BP-1), im folgenden auch Standardbetriebspunkt genannt [93], wird der Primärinjektor mit leichtem Brennstoffüberschuss betrieben ( $\Phi_p = 1,2$ ). Allerdings sorgt die Sekundärlufteinblasung für Luftüberschuss in der Brennkammer ( $\Phi_g = 0,86$ ). Der gesteigerte Brennstoffmassenstrom in Betriebspunkt 2 (BP-2) erhöht beide Äquivalenzverhältnisse so, dass global stöchiometrische Bedingungen herrschen. Am Injektor liegt das Äquivalenzverhältnis bei  $\Phi_p = 1,4$ . In Betriebspunkt 3 (BP-3) entsprechen die Massenströme durch den Injektor BP-1. Allerdings ist die Sekundärlufteinblasung abgeschaltet, wodurch sich  $\Phi_p = \Phi_g = 1,2$  ergibt. Bei allen BP herrscht ein Druck von  $p = 3$  bar. Außerdem werden in der Analyse BP-1 und BP-3 auch unter nicht-reagierenden (NR) Bedingungen betrachtet, die bereits von Eberle [70] validiert wurden.

BP	$\Phi_p$	$\Phi_g$	$\dot{m}_{C_2H_4}$ [g/s]	$\dot{m}_{Luft11}$ [g/s]	$\dot{m}_{Luft12}$ [g/s]	$\dot{m}_{Luft2}$ [g/s]	$P_t$ [kW]
BP-1	1,2	0,86	0,82	3,03	7,08	4,04	38,6
BP-2	1,4	1,0	0,96	3,03	7,08	4,04	45,1
BP-3	1,2	1,2	0,82	3,03	7,08	0,00	32,2

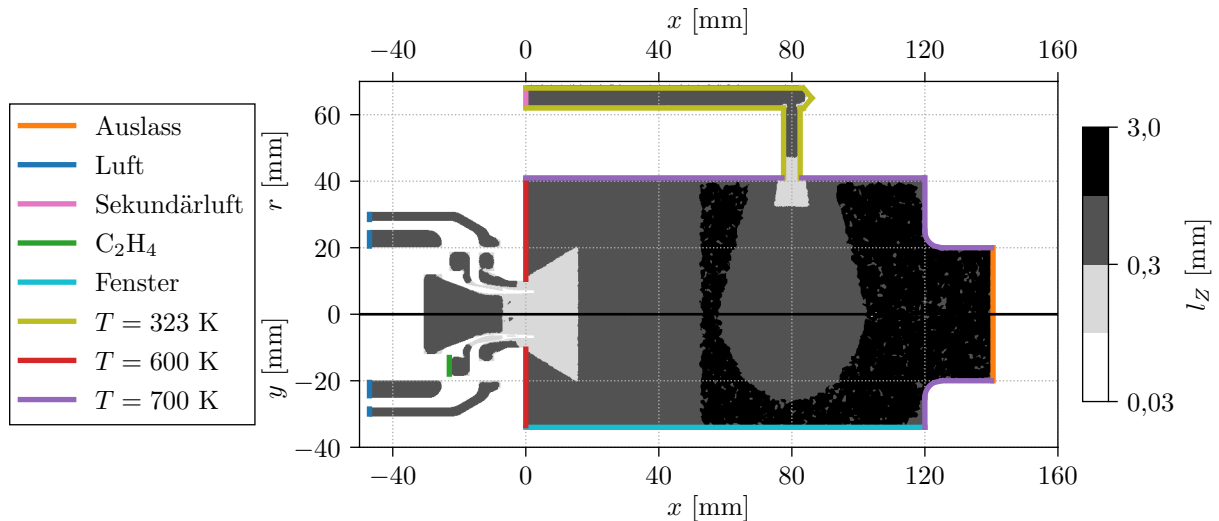
**Tabelle 7.1:** Betriebsbedingungen der simulierten Betriebspunkte. Die Zuordnung der Massenströme kann Abb. 7.1 entnommen werden.

Zur Validierung der BP mit Verbrennung stehen umfangreiche Messdaten zur Verfügung. Für BP-1 und BP-3 wurden Geschwindigkeit [94], Temperatur [95], Fenstertemperatur [171] und Rußvolumenbruch [93] quantitativ und OH- und PAH-Konzentrationen [96] qualitativ gemessen. Für BP-2 stehen quantitative Daten des Rußvolumenbruchs [93] und qualitative Messungen der OH-Konzentration zur Verfügung [96]. Für den Standardbetriebspunkt existieren außerdem qualitative, korrelierte Messungen von OH- und PAH-Konzentrationen [96], Geschwindigkeit und Rußvolumenbruch [94] mit niederfrequenten Messtechniken. Hochfrequente Messtechniken kamen zur qualitativen korrelierten Messung von Geschwindigkeit und OH-Konzentration [233] und Geschwindigkeit-OH-Aceton-Konzentrationen [145] zum Einsatz und ermöglichen zeit-aufgelöste Analysen. Sowohl die qualitativen als auch die korrelierten Messungen werden nicht zur direkten Validierung genutzt, sondern ermöglichen ein besseres Verständnis der Vorgänge in der Brennkammer und dienen der Simulation als Plausibilitätsüberprüfung.

### 7.1.2 Numerisches Modell

Abbildung 7.2 zeigt die Gitterauflösung und die Randbedingungen in zwei Schnittebenen durch das Rechengebiet. Das unstrukturierte Gitter wurde bereits in vorherigen Arbeiten eingesetzt [70, 103], besteht aus Tetraedern und umfasst ca.  $7 \cdot 10^6$  Gitterpunkte. Die kleinsten, 0,06 mm großen, Zellen befinden sich im Bereich der Brennstoffzufuhr. Auch der Bereich des Injektors und der Sekundärlufteinblasung sind mit 0,2 mm besser aufgelöst als der untere (0,5 mm) und der obere Teil (1 mm) der Brennkammer. Auf eine Auflösung der Wandgrenzschicht wurde zu Gunsten der Auflösung in Injektornähe verzichtet. Durch die Vorgabe des gemessenen Wärmestroms über die Fenster der Brennkammer [171] werden die daraus entstehenden Fehler teilweise kompensiert. Alle restlichen Wände werden als isotherme Wände im numerischen Modell berücksichtigt. Die Temperatur der einströmenden Gase entspricht vor dem Injektor in etwa der Umgebungstemperatur. Um die Rückströmung am Auslass zu verhindern, wird die Ordnung der räumlichen Diskretisierung ab  $x = 120$  mm verringert.

Die gesamte physikalische Simulationsdauer beträgt bei jedem Betriebspunkt 300 ms. Bei einem Zeitschritt von  $0,5 \mu s$  werden pro BP etwa  $3,3 \cdot 10^6$  CPU-Stunden an Rechenzeit verbraucht. Die Frequenz mit der Simulationsdaten für die nachfolgenden Analyse gespeichert werden, beträgt 4000 Hz, wodurch Dynamiken bis 2000 Hz analysiert werden können.



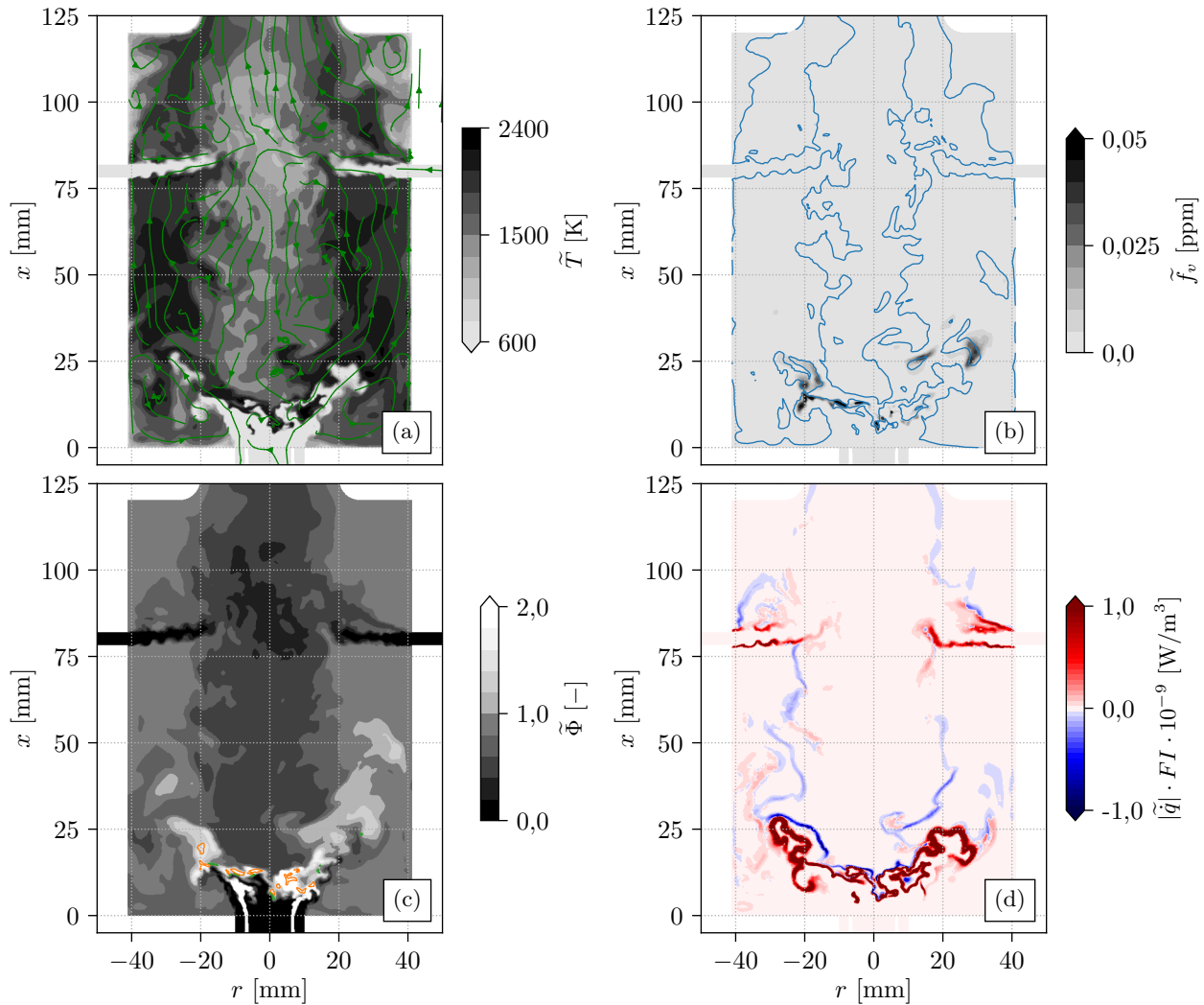
**Abbildung 7.2:** Gitterauflösungen und Randbedingungen der MBK. Schnittebene in  $y/z$ -Normalenrichtung ( $x, r$  Koordinaten, oben), Schnittebene in  $z$ -Normalenrichtung ( $x, y$  Koordinaten, unten). Nicht gekennzeichneten Wände des Injektors:  $T = 350$  K;  $T_{\text{Luft}} = T_{\text{Sekundärluft}} = 293$  K;  $T_{\text{C}_2\text{H}_4} = 297$  K.

### 7.1.3 Flammenstruktur

Abbildung 7.3 zeigt charakteristische Eigenschaften der MBK anhand instantaner Größen für BP-1. Stromlinien und Isoflächen der Temperatur skizzieren den Verbrennungsvorgang. Hinter dem Injektor vermischen sich Brennstoff und Luft und es bildet sich eine heiße Flammenzone in der ISL zwischen warmem, rezirkuliertem Gas und dem kalten Frischgas. In der Peripherie der Brennkammer strömt das heiße Gas stromab, vermischt sich mit der Sekundärluft und reagiert dabei vollständig. Durch die kalte Sekundärluft sind die Temperaturen in der Mitte der MBK moderat. Auch in der ORZ liegen die Temperaturen durch Wandwärmeverluste und die Mischung mit Frischgas deutlich unterhalb der maximalen Temperatur. Trotzdem ist das OH-Radikal, wie Abb. 7.3(b) zeigt, in großen Teilen der Brennkammer präsent. Nur im Rezirkulationsgebiet und in kleinen, abgegrenzten Bereichen in der ISL, in denen auch Ruß auftritt, ist der OH-Massenbruch niedriger. Im Vergleich zu den Strahlflammen ist der Ruß also nicht in großflächigen, ortsfesten Teilen, sondern nur in kleinen, sich ständig ändernden Bereichen der Flamme vorhanden. Dieses unstete Verhalten wird im Folgenden als Intermittenz bezeichnet. Ein Grund für dieses Verhalten ist die, durch das Äquivalenzverhältnis in Abb. 7.3(c) dargestellte, gute Mischung von Brennstoff und Oxidator durch den Drallinjektor. Das im Vergleich zu den Strahlflammen sehr stöchiometrienähe Äquivalenzverhältnis führt dazu, dass nur einzelne, sehr kleine Bereiche in der ISL bleiben, die Rußwachstum ermöglichen. Die Isolinien der Rußquellterme zeigen, dass Rußwachstum und -oxidation in denselben, lokal begrenzten Bereichen der MBK vorkommen. Dadurch überlappen in der MBK Gebiete, in denen Rußwachstum und oxidation stattfindet. Abbildung 7.3(d) veranschaulicht, dass im Bereich der Wärmefreisetzung sowohl vorgemischte als auch nicht-vorgemischte Bereiche zu finden sind.

Insgesamt herrschen also sehr komplexe Verbrennungsbedingungen. Allerdings sei angemerkt, dass im Rezirkulationsgebiet realer RQL-Brennkammern, also im Gebiet der höchsten Rußkonzentrationen [77], je nach Betriebspunkt deutlich höhere Mischungsbrüche als in der MBK herrschen ( $Z > 2Z_{\text{st}}$  [166], übertragen auf  $\text{C}_2\text{H}_4/\text{Luft}$ :  $\Phi(2Z_{\text{st}}) \approx 2,1$ ). Durch die Anordnung der Sekundär-

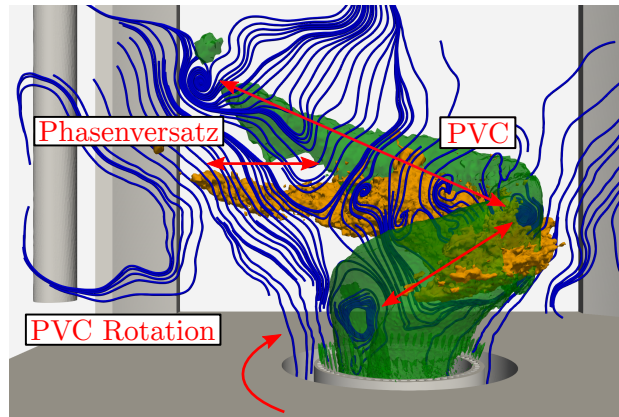




**Abbildung 7.3:** Instantane Konturplots verschiedener Flammeneigenschaften in einer Schnittebene durch die Mittellinie.  $\rightarrow$  Stromlinien,  $\text{---}$   $\tilde{Y}_{\text{OH}} = 10^{-4}$ ,  $\text{---}$   $\bar{S}_s = -0,05 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$ ,  $\text{---}$   $\bar{S}_s = 0,05 \text{ kg}/(\text{m}^3\text{s})$ .

lufteinblasung in der MBK führt diese zu einer erheblichen Verdünnung des Gemischs in der IRZ, statt zu einer Magerverbrennung im hinteren Teil der Brennkammer.

Zusätzlich zu diesen komplexen Verbrennungsbedingungen finden sich verschiedene kohärente und inkohärente Dynamiken in der MBK. Kohärente Strukturen in der MBK sind der PVC und seine Harmonischen. Der PVC ist ein rotierender Wirbel, der in Brennkammern mit verdrahter Einströmung auftritt (z.B. [234]) und helixförmig aus dem Injektor in die Brennkammer reicht. In nicht-ruhenden Brennkammern existiert eine profunde Datenbasis an Experimenten zur Funktionsweise des PVC (z.B. [235, 237]). In Brennkammern die der MBK ähneln intensiviert der PVC die Mischung zwischen Luft und Brennstoff in der ISL [145, 232]. Für die MBK selbst ist bekannt, dass der PVC die Rußbildung in BP-1 deutlich beeinflusst [72, 94]. Abbildung 7.4 zeigt den Einfluss des PVC auf das Strömungs- und PAH-Feld. Die Helixstruktur ist bei beiden Variablen gut zu erkennen. Der Phasenversatz deutet darauf hin, dass der Einfluss des PVC je nach Variable unterschiedlich ist, was in Abschnitt 7.3 analysiert wird. Die Analyse umfasst außerdem inkohärente Strukturen wie beispielsweise niederfrequente Dynamiken (NFD).



**Abbildung 7.4:** Instantanes Strömungsfeld in einer Schnittebene (blaue Stromlinien) und Rekonstruktion der PVC-Mode der axialen Geschwindigkeit (grüne Isofläche bei  $u_{\text{PVC}}^{1,2} = -3$  m/s) und der ersten PAH-Sektion (orange Isofläche bei  $Y_{\text{PAH1,PVC}}^{1,2} = 2,5 \cdot 10^{-6}$ ) in Injektornähe.

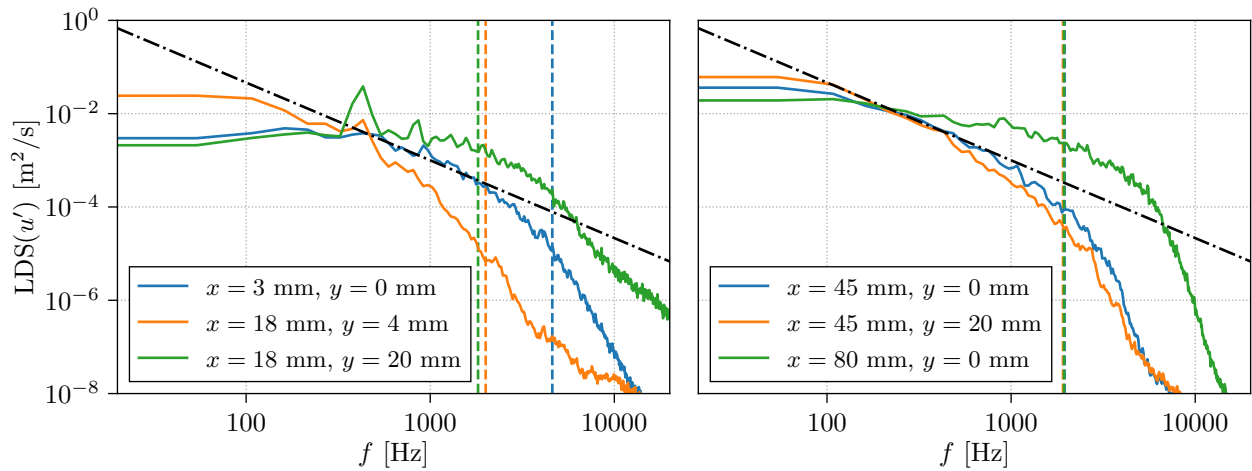
## 7.2 Validierung

Zur Validierung der LES werden nur zeitlich gemittelte Ergebnisse verwendet und auf eine Mittelung in Umfangsrichtung verzichtet, da die Geometrie der MBK im Gegensatz zu den Strahlflammen nicht rotationssymmetrisch ist. Auch auf die Validierung der Geschwindigkeit in BP-3 wird verzichtet, da die Geschwindigkeitsfelder von BP-1 und BP-3 bis auf Unterschiede im Rückströmgebiet sehr ähnlich sind. Da alle BP mit dem gleichen Gitter simuliert wurden, wird auch die Qualität der LES nur für BP-1 untersucht. Um die Aussagekraft des Vergleichs zwischen Simulation und Experiment zu gewährleisten, werden bei besonders intermittenten Größen Konturplots statt Linienplots verglichen.

### 7.2.1 Qualität der LES

Wie bei den beiden Strahlflammen erfüllt die LES der MBK alle in Abschnitt 4.3.1 genannten schwachen Qualitätskriterien. Die Komplexität des Strömungsfelds mit den nah beieinander liegenden Scherschichten und den kohärenten Dynamiken verringert die Aussagekraft von Zweipunktkorrelationen. Deshalb wird in Abb. 7.5 das LDS der axialen Geschwindigkeit an ausgewählten Punkten in der MBK untersucht. Eine zuverlässige Aussage über die Qualität der Gitterauflösung ist so nicht möglich. Daher dient die Analyse nur dazu Probleme durch zu große Gitterzellen zu erkennen.

Auf der Brennkammerachse nahe des Injektors bei  $x = 3$  mm,  $y = 0$  mm ist die Grenzfrequenz des CDS-Verfahrens sehr groß und das LDS zeigt den Verlauf abklingender homogener, isotroper Turbulenz ohne weitere Auffälligkeiten. In der IRZ nahe der ISL bei  $x = 18$  mm,  $y = 4$  mm liegt die  $f_{\text{CDS}}$  niedriger und das LDS fällt bei  $f > 1000$  Hz deutlich stärker ab. Auffällig ist die kleine Spitze im LDS bei  $\approx 430$  Hz, die in der Hauptströmung bei  $x = 18$  mm,  $y = 20$  mm noch deutlicher auftritt. Dies ist kein unerwünschtes numerisches Artefakt, sondern der Einfluss des PVC. Deshalb ist bei der doppelten Frequenz ebenfalls eine kleine Spitze zu erkennen, die durch die erste Harmonische des PVC verursacht wird. Allerdings fällt das LDS bei  $x = 18$  mm,  $y = 20$  mm bis zur  $f_{\text{CDS}}$  nur wenig ab, was auf eine grobe Gitterauflösung hindeutet. Stromab bei  $x = 45$  mm gleicht sich das LDS in der IRZ ( $y = 0$  mm) und der Hauptströmung ( $y = 20$  mm). Bis zur  $f_{\text{CDS}}$  ist die Leistungsdichte um mehrere Größenordnungen gefallen und es sind keine Artefakte zu erkennen,



**Abbildung 7.5:** LDS der axialen Geschwindigkeit  $\tilde{u}$ . ---  $f_{\text{CDS}}$  für jeden Punkt in der jeweiligen Farbe. - - - -  $f^{-5/3}$ .

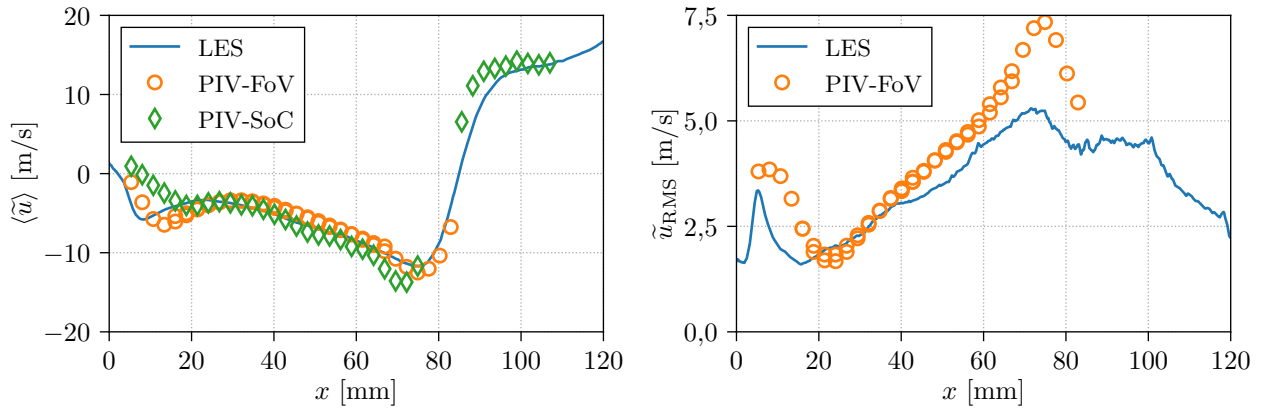
was für eine gute Gitterauflösung spricht. In der Nähe des Staupunkts der Sekundärlufteinblasung bei  $x = 80 \text{ mm}$ ,  $y = 0 \text{ mm}$ , fällt das LDS bis zur  $f_{\text{CDS}}$  nur sehr schwach ab. Die Auflösung könnte also auch hier besser sein. Insgesamt können keine numerischen Artefakte erkannt werden und das Gitter scheint in den meisten Bereichen der MBK eine ausreichende Auflösung zu erreichen. Zwar wäre ein feineres Gitter im Bereich der Sekundärlufteinblasung und in der Hauptströmung stromab des Injektors wünschenswert, was durch die hohen Rechenkosten aber nicht zu rechtfertigen ist.

### 7.2.2 Strömungsfeld

Zur Untersuchung des Strömungsfelds in der MBK wurden zwei verschiedenen PIV-Methoden mit unterschiedlicher Genauigkeit eingesetzt [94]. Das PIV-„field of view“ (FoV)-Verfahren ist auf kleinere Messbereiche als das PIV-„sum of correlation“ (SoC)-Verfahren beschränkt, weshalb es aufwändiger aber genauer ist und RMS-Werte nur mit dem PIV-FoV-Verfahren bestimmt werden. Eine weiterführende Diskussion der PIV-Verfahren kann der Literatur entnommen werden [70, 94].

Abbildung 7.6 vergleicht die axiale Geschwindigkeit auf der Achse der MBK. Unterschiede sowohl zwischen den beiden PIV-Verfahren als auch im Überlappungsbereich der PIV-FoV-Messungen selbst verdeutlichen die Messunsicherheiten. Unter Berücksichtigung der Komplexität des Strömungsfelds ist die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment gut. Signifikante Abweichungen zwischen Messungen und LES finden sich in Injektornähe und im Bereich der Sekundärlufteinblasung, also den Bereichen, die am stärksten von den Einströmrandbedingungen beeinflusst sind. Die Unterschätzung der RMS-Werte im Bereich der Sekundärlufteinblasung verstärkt den Eindruck, dass die Gitterauflösung in diesem Bereich niedrig ist.

Radiale Profile der axialen Geschwindigkeit in Abb. 7.7 bestätigen die insgesamt gute Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation. Der Vergleich ist bei vier charakteristischen Positionen gezeigt: Nahe der Einströmung ( $x = 3 \text{ mm}$ ), im Bereich der primären Verbrennung ( $x = 18 \text{ mm}$ ), im Bereich zwischen Primärinjektor und Sekundärlufteinblasung ( $x = 45 \text{ mm}$ ) sowie im Bereich der Sekundärlufteinblasung ( $x = 80 \text{ mm}$ ). An den beiden unteren Positionen ist das Profil der Geschwindigkeit V-förmig und nimmt stromab die Form eines U an. Im injektornahen, äußeren Bereich des



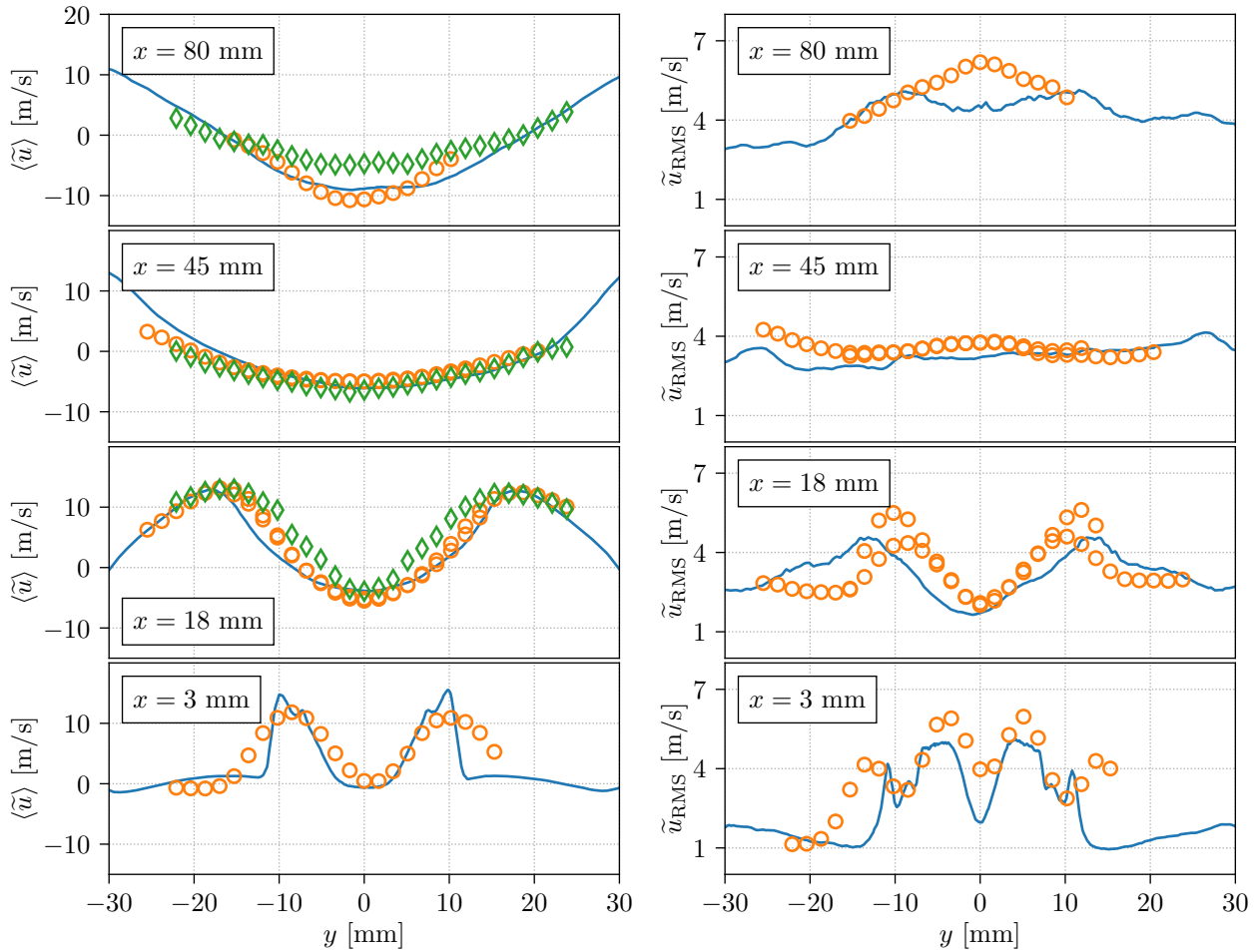
**Abbildung 7.6:** Gemessene [94] (PIV) und simulierte (LES) axiale Geschwindigkeit auf der Achse der MBK. Links:  $\langle \tilde{u} \rangle$ , rechts:  $\tilde{u}_{\text{RMS}}$ .

V-Profils ( $-10 > y > 10$  mm) sind sowohl die mittleren als auch die RMS-Axialgeschwindigkeiten in den Messungen höher als in der Simulation. Stromab bei  $x = 18$  mm setzt sich dieser Trend fort, was besonders in den RMS-Profilen deutlich wird. Zur Sekundärlufteinblasung hin stimmen die Geschwindigkeitsprofile gut überein, lediglich die RMS-Werte in der Brennkammermitte bei  $x = 80$  mm werden von der LES unterschätzt. Außerdem sind minimale Abweichungen bei der mittleren Strömungsgeschwindigkeit in der IRZ sichtbar.

Auch die simulierten Profile der radialen Geschwindigkeitskomponente in Abb. 7.8 zeigen zu geringe Werte im äußeren Teil der V-förmigen Strömung bei  $x = 3$  mm. In der Zone der primären Verbrennung bei  $x = 18$  mm stimmen die Geschwindigkeitsprofile, im Gegensatz zur axialen Geschwindigkeitskomponente, sehr gut überein. Stromab stimmen PIV-FoV-Messungen und Simulation darin überein, dass die radiale Geschwindigkeitskomponente im Mittel verschwindet und deren RMS-Werte bei  $x = 80$  mm höher als die der axialen Komponente sind.

Schließlich zeigt Abb. 7.9 den Vergleich der tangentialen Geschwindigkeitskomponente. Durch die verdrehte Einströmung steigen bei  $x = 3$  mm die Geschwindigkeiten im Mittel bis  $y = \pm 10$  mm an. Die LES weist dort ein ausgeprägtes Maximum auf und fällt nach außen hin stärker ab als die PIV-FoV-Messungen. Stromab stimmen die mittleren Profile gut überein. Jedoch sind im Bereich der Sekundärlufteinblasung wieder größere Unterschiede zu sehen, da die Simulation den gemessenen Drall der Strömung nicht widerspiegelt. Im Gegensatz zu den anderen Geschwindigkeitskomponenten werden die RMS-Werte von der Simulation grundsätzlich unterschätzt. Da sich auch unterschiedliche PIV-FoV-Messungen an einer Position jeweils deutlich unterscheiden, kann dafür keine eindeutige Erklärung gefunden werden.

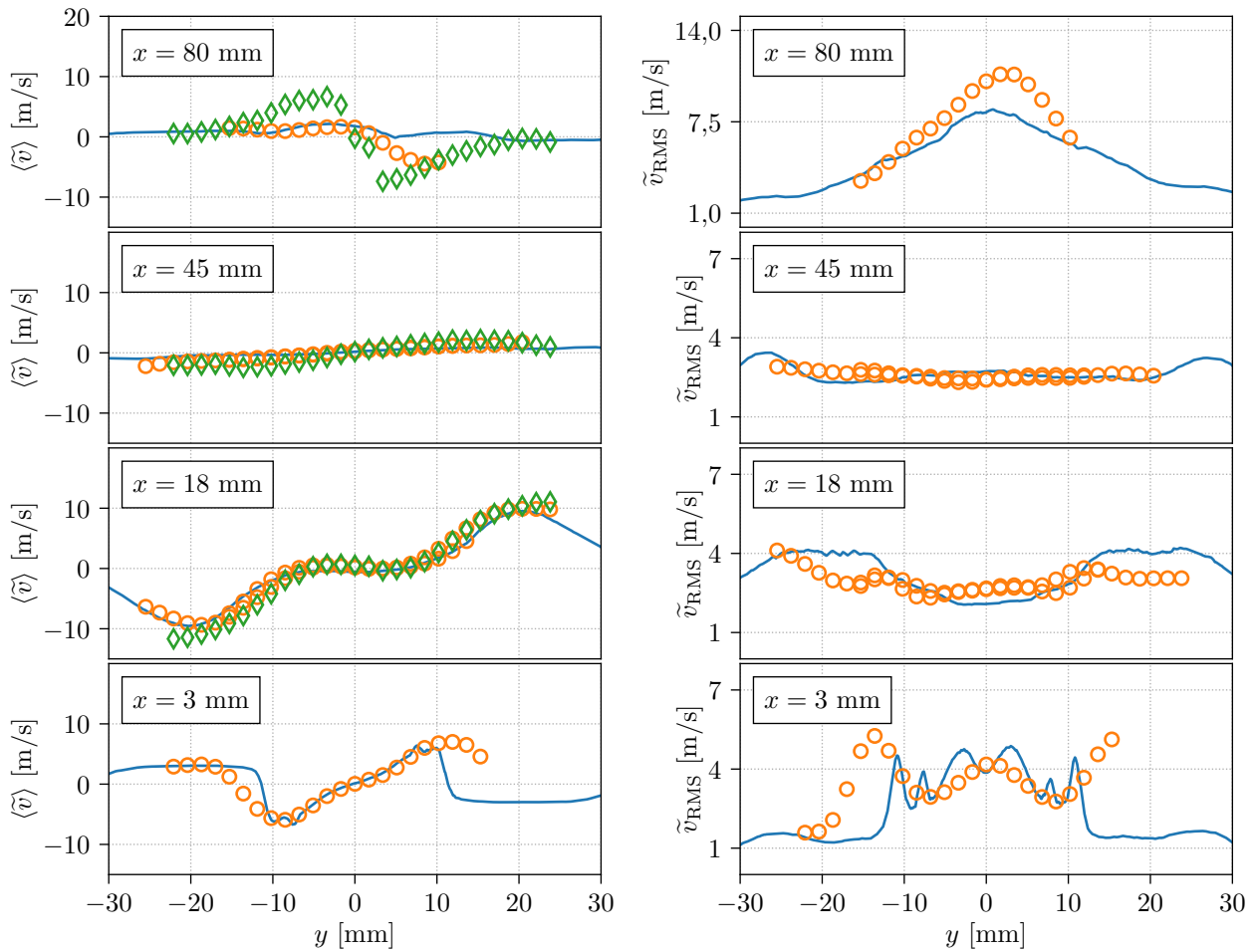
Zusammenfassend stimmen die gemessenen und simulierten Geschwindigkeiten gut überein. Die größten Abweichungen finden sich in Injektornähe bei  $-10 > y > 10$  mm und bei  $x = 80$  mm sowie im leicht überschätzten Öffnungswinkel des V-förmigen Profils bei  $x = 18$  mm. Auch in andere numerische Arbeiten, die Geschwindigkeitsprofile in Injektornähe zeigen, sind analoge Abweichungen von den Messwerten zu beobachten [37, 52, 180]. Gitterstudien [37, 180] zeigen keine Verbesserung der Ergebnisse in Injektornähe. Die gemessenen Geschwindigkeitsprofile im nicht-reagierenden Fall unterscheiden sich deutlich vom reagierenden und stimmen sehr gut mit den LES-Ergebnissen überein [70]. Die Unterschiede im reagierenden Fall lassen sich also nicht auf das numerische Modell zu-



**Abbildung 7.7:** Radialprofile gemessener [94] (PIV) und simulierter (LES) axialer Geschwindigkeit in der MBK. Links:  $\langle \tilde{u} \rangle$ , rechts:  $\tilde{u}_{\text{RMS}}$ . — LES, ○ PIV-FoV, ◇ PIV-SoC.

rückführen. Sie zeigen vielmehr, dass reale Geometrien, die beispielsweise Fertigungstoleranzen und thermischen Veränderungen unterliegen, nie perfekt von numerischen Modellen abgebildet werden können. Die Überschätzung des Öffnungswinkels bei  $x = 18$  mm im Profil der axialen Geschwindigkeit ist auch in anderen numerischen Arbeiten zu beobachten [37, 52, 176, 180, 196]. Durch Verbrennung und rückströmendes Heißgas wird das Geschwindigkeitsprofil in dieser Höhe auch durch den Wärmeverlust der Brennkammer, also durch die Modellierung des Wandwärmeübergangs und der Gasstrahlung, beeinflusst [176, 196]. Bei  $x = 80$  mm ergibt der Vergleich mit anderen Arbeiten kein einheitliches Bild. Der Staupunkt der Sekundärlufteinblasung findet sich in unmittelbarer Nähe und kann empfindlich auf Veränderungen im Strömungsfeld reagieren. Die unterschätzten RMS-Profile legen nahe, dass eine Gitterverfeinerung hier zukünftig bessere Ergebnisse liefern könnte. Die Folgen für die Rußbildung werden als gering angesehen, da der rezirkulierte Massenstrom gut mit den Messungen übereinstimmt. Dies wird in Abschnitt 7.2.3, unter Einbeziehung der lokalen Temperatur und der Axialgeschwindigkeiten, diskutiert.

Ein wichtiges Qualitätskriterium der LES ist die Vorhersage der PVC-Frequenz ( $f_{\text{PVC}}$ ), da der PVC im Gebiet der Rußbildung nahe des Injektors wirkt. Messungen zeigen  $f_{\text{PVC}} = 440 - 442$  Hz [145, 233], während Simulationen Ergebnisse zwischen  $f_{\text{PVC}} = 340$  Hz [38] und  $f_{\text{PVC}} = 500$  Hz [79, 180] vorhersagen. Die aktuelle Arbeit stimmt, wie die Vorgängerarbeit [70], mit  $f_{\text{PVC}} = 430$  Hz fast perfekt mit den experimentellen Ergebnissen überein.

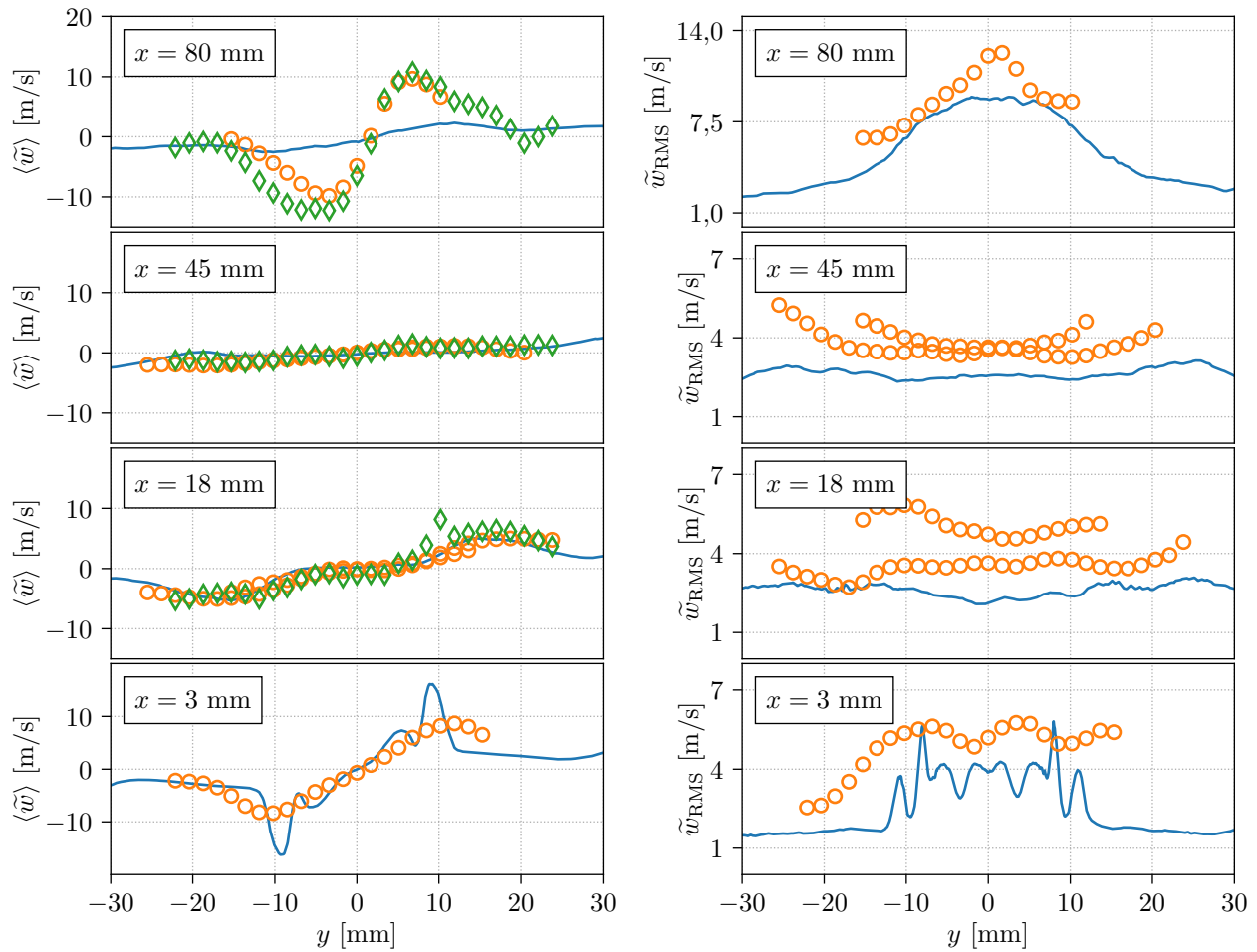


**Abbildung 7.8:** Radialprofile gemessener [94] (PIV) und simulierter (LES) radialer Geschwindigkeit in der MBK. Links:  $\langle \tilde{v} \rangle$ , rechts:  $\tilde{v}_{\text{RMS}}$ . — LES, ○ PIV-FoV, ◇ PIV-SoC.

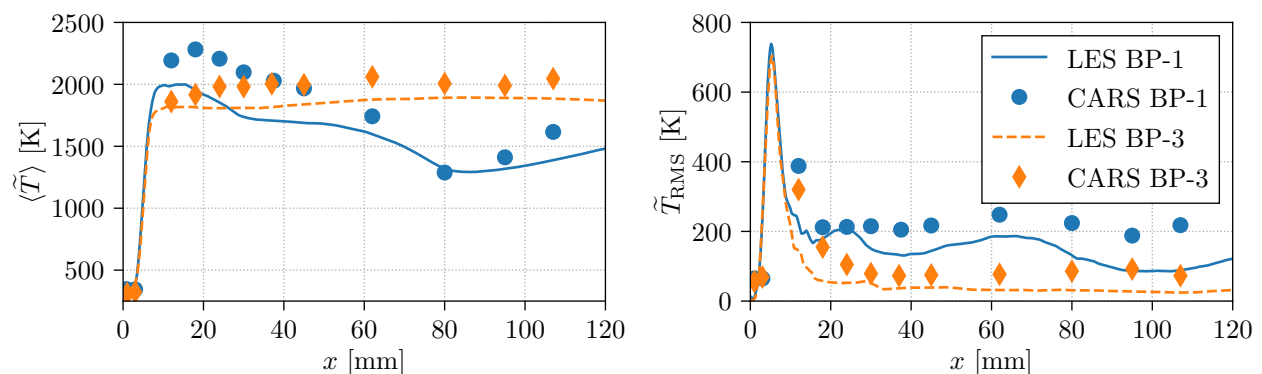
### 7.2.3 Flammenform

Stöhr et al. [233] konnten bei der MBK eine sehr gute qualitative Übereinstimmung zwischen der instantanen Flammenform im Experiment und der LES dieser Arbeit feststellen. Quantitativ wurde die Flammenform, mit „coherent anti-Stokes Raman scattering“ (CARS) Messungen [95] untersucht. Die für BP-1 und BP-3 vorliegenden Messdaten unterscheiden sich im Vergleich zur Geschwindigkeit erheblich und werden deshalb beide in die Validierung mit einbezogen. Abbildung 7.10 zeigt deshalb mittlere und RMS-Axialprofile der Temperatur bei beiden BP. Bis  $h \approx 10\text{ mm}$  steigt die Temperatur stark an und die Profile unterscheiden sich kaum. Danach fällt die mittlere Temperatur in BP-1 bis zur Sekundärlufteinblasung ab und steigt danach wieder leicht an, während sie in BP-3 fast konstant bleibt. Qualitativ gibt die LES den Verlauf in beiden BP wieder. Allerdings wird das Temperaturniveau in BP-1 signifikant und in BP-3 leicht unterschätzt. Auch die RMS-Werte zeigen in der IRZ in beiden BP höhere Fluktuationen als die LES. Messung und Simulation stimmen darin überein, dass die Temperaturfluktuationen in der IRZ relativ konstant sind.

Abbildung 7.11 setzt den Vergleich anhand von Radialprofilen fort. Nahe am Injektor ( $x = 3\text{ mm}$ ) ist die Übereinstimmung der gemessenen und simulierten Mittelwerte sehr gut, wohingegen die simulierten RMS-Werte in der Mitte der Brennkammer höher sind. Da der Staupunkt zwischen IRZ und Einströmung auch bei  $x \approx 3\text{ mm}$  liegt, deutet diese Abweichung auf eine leicht andere

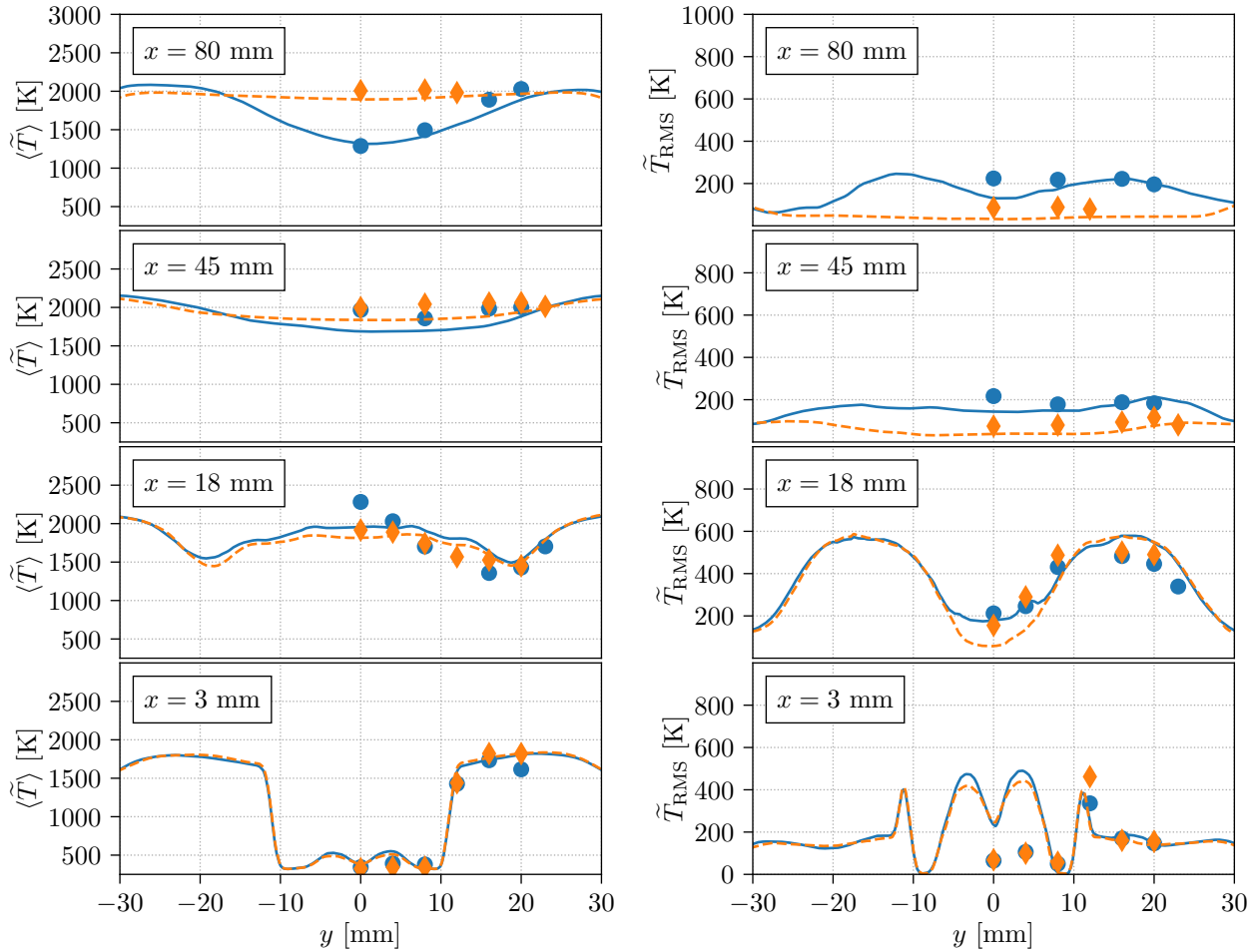


**Abbildung 7.9:** Radialprofile gemessener [94] (PIV) und simulierter (LES) tangentialer Geschwindigkeit in der MBK. Links:  $\langle \tilde{w} \rangle$ , rechts:  $\tilde{w}_{\text{RMS}}$ . — LES, ○ PIV-FoV, ◇ PIV-SoC.



**Abbildung 7.10:** Gemessene [95] (CARS) und simulierte (LES) Temperatur auf der Achse der MBK bei BP-1 und BP-3. Links:  $\langle \tilde{T} \rangle$ , rechts:  $\tilde{T}_{\text{RMS}}$ .

Lage des Staupunkts hin, was die allgemeine Qualität der Flammenvorhersage nicht beeinflusst. Im Bereich der primären Verbrennung ( $x = 18 \text{ mm}$ ) zeigt sich eine gute quantitative Übereinstimmung zwischen Messung und LES, wobei auch hier die niedrigere, simulierte, mittlere Temperatur auf der Achse und der leicht zu große Öffnungswinkel der V-förmigen Flammenzone zu sehen sind. Auch stromab bei  $x = 45 \text{ mm}$  sind die simulierten Temperaturen in der IRZ geringer als die gemessenen. Zur Peripherie der Brennkammer hin stimmen die Temperaturen in beiden BP besser überein. Auch

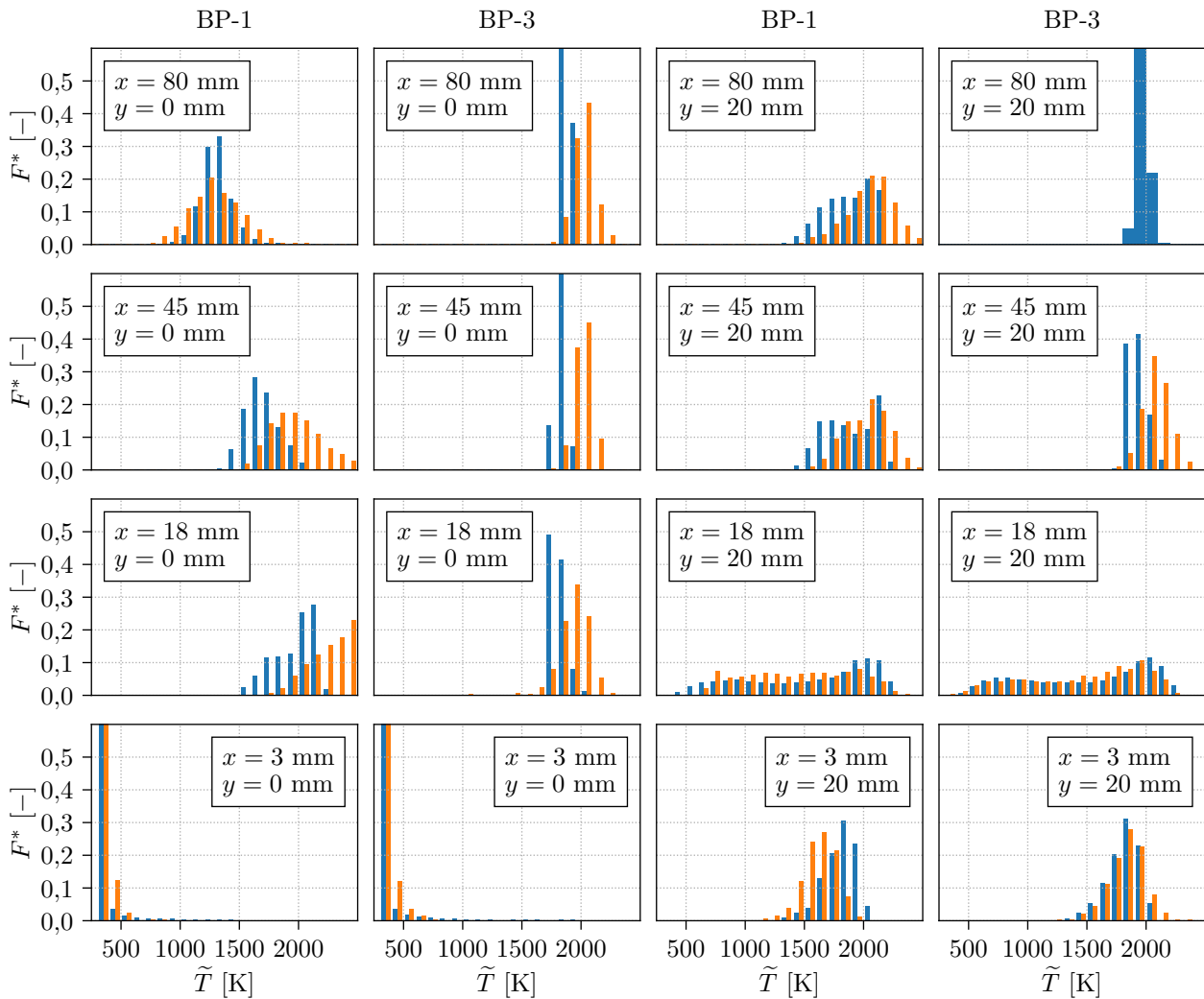


**Abbildung 7.11:** Radialprofile gemessener [95] (CARS) und simulierter (LES) Temperatur in der MBK. Links:  $\langle \tilde{T} \rangle$ , rechts:  $\tilde{T}_{RMS}$ . — LES BP-1; - - - LES BP-3; ● CARS BP-1; ◆ CARS BP-2.

auf Höhe der Sekundärlufteinblasung ist die Übereinstimmung der mittleren Profile gut, wobei der RMS-Wert auf der Achse, wie der RMS-Wert der Geschwindigkeit, von der LES unterschätzt wird.

Abbildung 7.12 vergleicht simulierte und gemessene Temperaturhistogramme in einzelnen Punkten in BP-1 und BP-3. Für jede Höhe über dem Injektor  $h$  werden jeweils zwei Punkte betrachtet, einer auf der Brennkammerachse und einer im äußeren Bereich der Brennkammer. In Injektornähe auf der Brennkammerachse ( $x = 3 \text{ mm}$ ,  $y = 0 \text{ mm}$ ) zeigt das Histogramm der LES in beiden BP fast ausschließlich kaltes Fluid, während in den Messungen über 10 % vorgewärmtes Fluid zu sehen ist. In der ORZ ( $x = 3 \text{ mm}$ ,  $y = 20 \text{ mm}$ ) sind die LES-Ergebnisse fast identisch und stimmen in BP-3 ausgezeichnet mit den Messungen überein. Trotz einer höheren thermischen Leistung in BP-1 ist das Histogramm der Messungen in diesem Punkt zu niedrigeren Temperaturen verschoben, während das der LES dem Histogramm in BP-3 entspricht. Im Bereich der primären Verbrennung ( $x = 18 \text{ mm}$ ) sind die simulierten Statistiken in der IRZ in beiden BP zu niedrigeren Temperaturen verschoben, wobei sich die Form der Histogramme nicht grundsätzlich unterscheidet. Im äußeren Bereich der Flamme ( $y = 20 \text{ mm}$ ) ist die Temperatur fast gleichverteilt und die Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment ist exzellent. Auch stromab in der IRZ bei  $x = 45 \text{ mm}$  wird die Form des Histogramms gut vorhergesagt, es ist aber in der LES zu niedrigeren Temperaturen verschoben. In der Peripherie der Brennkammer ( $y = 20 \text{ mm}$ ) stimmen die Histogramme in BP-1 besser überein, wobei die Verschiebung zu kalten Temperaturen in BP-3 sichtbar bleibt. Auf Höhe





**Abbildung 7.12:** Histogramme gemessener (CARS) und simulierter (LES) Temperatur bei BP-1 und BP-3. — LES, — CARS [95].

der Sekundärlufteinblasung ( $x = 80$  mm) zeigt sich ein ähnliches Bild. Simulation und Experiment stimmen in BP-1 sehr gut überein, während die simulierten Ergebnisse in BP-3 zu niedrigeren Temperaturen verschoben sind.

Ein Grund für den generellen Trend zur Unterschätzung der Temperaturen in beiden BP kann eine zu geringe Eintrittstemperatur des Fluids in die Brennkammer sein, worauf die Histogramme in Injektornähe hindeuten. Außerdem überschätzt das eingesetzte Strahlungsmodell den Wärmeverlust, da es keine Strahlungsabsorption berücksichtigt. Dank der geringen Rußkonzentration in der MBK ist der Wärmeverlust durch Strahlung im Vergleich zum Wandwärmestrom jedoch gering [196]. Außerdem sind auch Simulationen mit detaillierten Strahlungs- [52] und Wandwärmeübergangsmo- dellern [176, 196] nicht in der Lage die hohen, gemessenen Temperaturen zu reproduzieren. Lediglich die Vernachlässigung jeglichen Wandwärmeverlustes, der ca. 15 % der thermischen Leistung be- trägt [171], führt zu einer Vorhersage, die den gemessenen Werten entspricht [196]. Ob dies den tatsächlichen Bedingungen in der MBK entspricht, kann besonders im unteren Teil der IRZ be- zweifelt werden. Hier zeigt das gemessene Histogramm auf der Brennkammerachse bei  $x = 18$  mm, dass in BP-1 20 % der Temperaturereignisse über der adiabaten Flammentemperatur von 2424 K liegen. Eine mögliche Erklärung wäre eine hohe Strahlungsabsorption in diesem Bereich, was jedoch

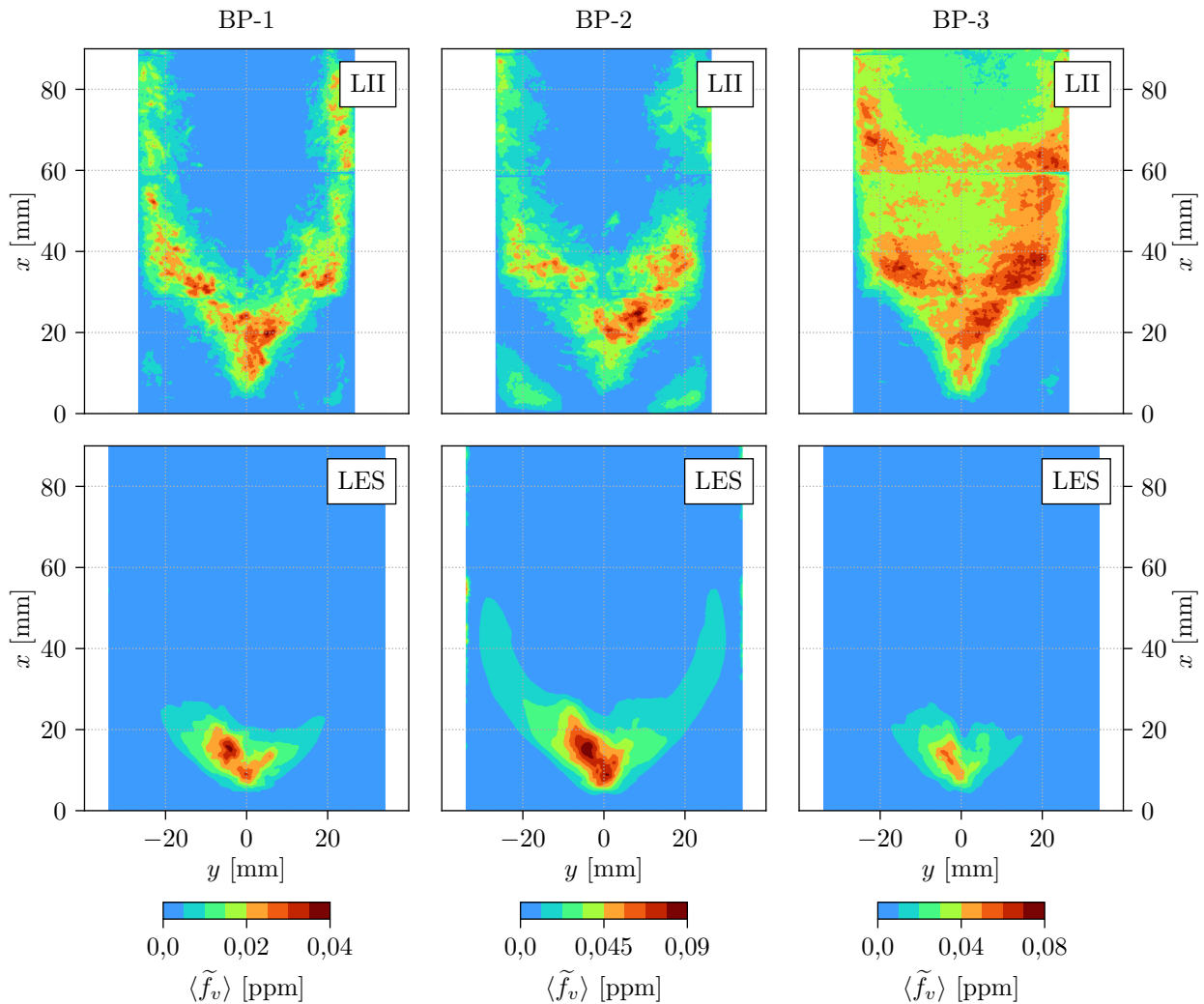
eine Simulation, die auch die Strahlungsabsorption berücksichtigt [196], widerlegt. Deshalb wären weitere Temperaturmessungen in diesem Bereich zur Validierung sinnvoll. Trotz dieser Zweifel an den Messungen dürfte das Temperaturniveau in der LES etwas zu niedrig liegen, da nach [196] 78 % der Strahlung wieder absorbiert wird. Daher ist von einer überschätzten Emission auszugehen, womit sich auch die etwas zu niedrigen Geschwindigkeiten in der IRZ erklären lassen. Die niedrigeren Temperaturen in der IRZ erhöhen hier die Dichte, was zusammen mit den leicht unterschätzten Geschwindigkeiten allerdings dazu führt, dass der rezirkulierte Massenstrom mit dem Experiment übereinstimmt. Insgesamt kann die Simulation der Flammenstruktur, auch dank der guten Vorhersage der Form der Histogramme, in beiden BP als sehr gut bezeichnet werden.

### 7.2.4 Rußvorhersage

Abbildung 7.13 vergleicht den gemittelten Rußvolumenbruch zwischen der LES und LII-Messungen in einer Schnittebene durch die Brennkammer. Trotz der langen Mittelungsdauer von 300 ms sind immer noch signifikante Asymmetrien im simulierten Feld vorhanden, was den intermittenten Charakter der Rußevolution zeigt. Da auch die Rußmessungen nicht konvergiert also glatt und symmetrisch sind, wird auf einen Vergleich einzelner Profile verzichtet. Allerdings sind die Mittelwerte so weit konvergiert, dass eine Diskussion der Absolutwerte gerechtfertigt erscheint.

Der Einfluss der Betriebsbedingungen auf die Größe des Rußvolumenbruchs wird von der LES sehr gut wiedergegeben. Der global brennstoffarme BP-1 rußt am wenigsten, während eine Erhöhung des Äquivalenzverhältnisses in BP-2 und BP-3 jeweils zu einer Zunahme des mittleren Rußvolumenbruchs um den Faktor zwei führt. Dabei unterscheidet sich der maximale Rußvolumenbruch zwischen Experiment und Simulation in Injektornähe nur um einen Faktor von 1,5. Weiter stromab sind die Unterschiede zwischen LES und Experiment jedoch signifikant. Während die Messungen Ruß auch in der Peripherie der Brennkammer zeigen, ist der simulierte mittlere Rußvolumenbruch hier in BP-1 und BP-3 um Größenordnungen niedriger. In BP-3 zeigen die Messungen auch in der IRZ Ruß, was die LES ebenfalls nicht vorhersagt. Am besten schneidet die LES in BP-2 ab, da hier Ruß in der Peripherie vorliegt und die Größenordnung mit dem Experiment übereinstimmt.

Diese gute Übereinstimmung in BP-2 deutet auch darauf hin, dass die bereits beschriebenen Geschwindigkeits- und Temperaturunterschiede zwischen den Messungen und der LES nicht für die Unterschiede im Ruß verantwortlich sind. Lediglich der etwas zu große Öffnungswinkel der V-förmigen Strömung hinter dem Injektor ist auch in der Rußverteilung zu sehen. Unter den zahlreichen Simulationen der MBK war bisher keine in der Lage, den Öffnungswinkel und das gemessene Rußverhalten komplett korrekt wiederzugeben. Rußmodelle mit PAH-basierter Rußbildung, wie das DLR-Rußmodell, konnten den maximalen Rußvolumenbruch am besten wiedergeben [39]. Bisher war nur eine Simulation in der Lage, Ruß in der IRZ vorherzusagen [39]. Diese nutzte jedoch ein sehr simples Rußmodell bei dem die Rußbildung, unphysikalischer Weise, auf Acetylen basierte. Im Vergleich mit den meisten LES die den Stand der Technik repräsentieren (z.B. [37, 84, 92, 176, 240]), kann die Rußvorhersage in Injektornähe daher als sehr gut bewertet werden.

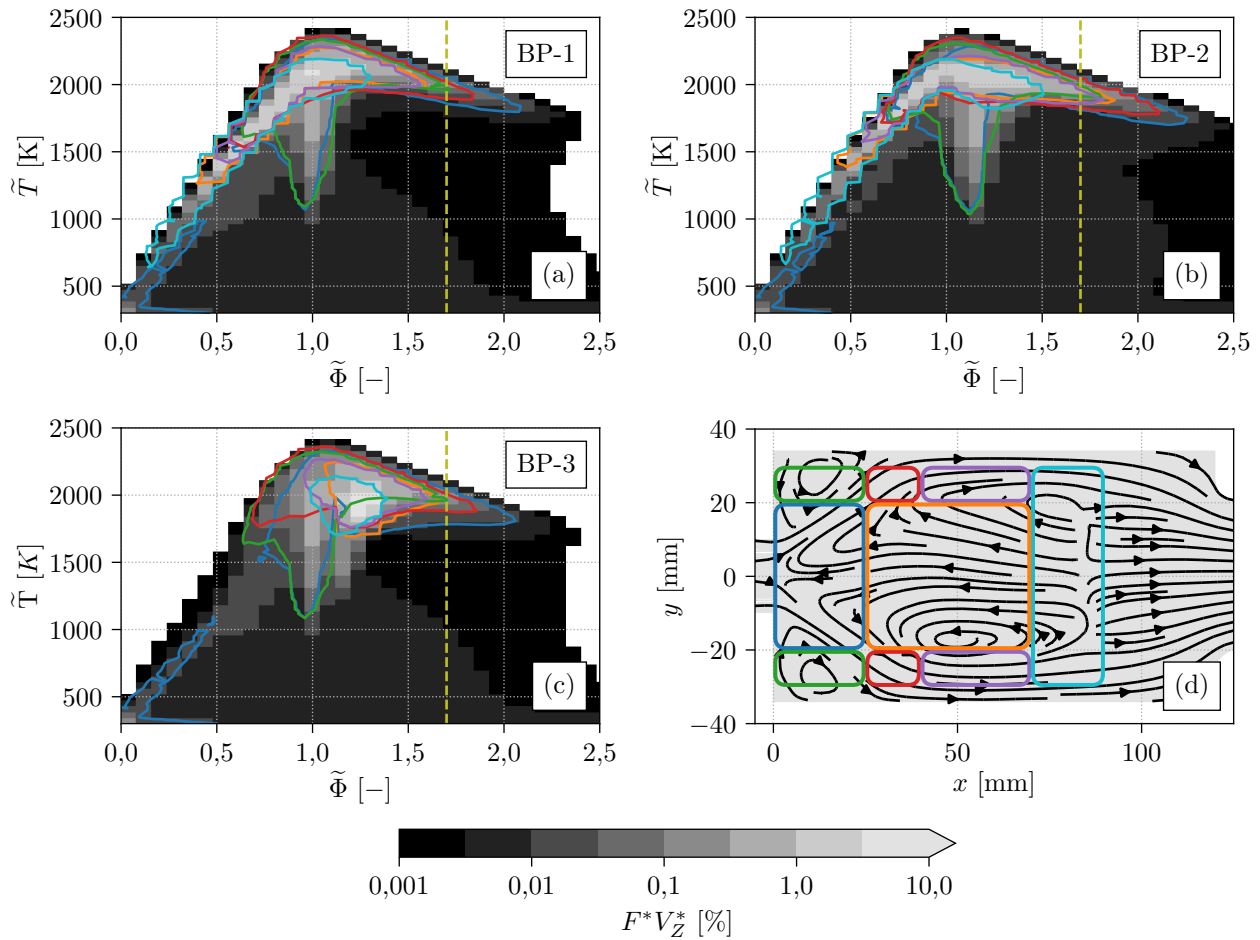


**Abbildung 7.13:** Gemessener (LII, oben) und simulierter (LES, unten) gemittelter Rußvolumenbruch an den drei Betriebspunkten.

### 7.2.5 Verständnis der Rußevolution

Im Gegensatz zu den untersuchten Strahlflammen findet die Rußbildung in der MBK nicht permanent statt, sondern ist auf brennstoffreiche Taschen beschränkt, die sporadisch in der ISL auftreten [103, 233]. Neben der Turbulenz wirkt hier auch der PVC auf das Strömungsfeld [72, 95]. OH-, PAH- und Rußmessungen [96] bestätigen, dass die Rußbildung in Injektornähe auftritt. Außerdem zeigen diese Messungen, dass die Rußpräsenz in der Peripherie der Brennkammer und in der IRZ nur durch den Transport der Rußfilamente, nicht aber durch Rußbildung oder -wachstum zustande kommt, da eine lokale Koexistenz zwischen Ruß und OH ausgeschlossen werden kann.

Abbildung 7.14 untersucht dieses Verhalten mit Hilfe von  $\tilde{\Phi}$ - $\tilde{T}$ -Histogrammen in allen drei BP. Die Wahl der Variablen minimiert den Einfluss des Rußmodells auf die Aussagekraft der Statistiken. Um den Einfluss der Wände zu minimieren, sind in den Histogrammen nur Bereiche zwischen  $1 < x < 110$  mm in einem Radius von 30 mm berücksichtigt. Alle 1200 Zeitschritte, die während den Simulationen gespeichert wurden, sind in den Statistiken enthalten. Rußbildung setzt in laminaren, vorgemischten Ethylenflammen ungefähr ab  $\Phi > 1,7$  ein (z.B. [107]), weshalb dieser Wert in der folgenden Diskussion als Orientierung für die Rußneigung dient. Es sei angemerkt, dass Rußwachs-



**Abbildung 7.14:** Histogramme im  $\tilde{\Phi}$ - $\tilde{T}$ -Raum für die drei untersuchten Betriebspunkte (a)-(c). Geglättete Isolinien bei  $F^*V_Z^* = 0,1$  % zeigen die  $\tilde{\Phi}$ - $\tilde{T}$ -Histogramme, räumlich konditioniert auf die in Grafik (d) gezeigten Bereiche: — Injektor, — IRZ, — ORZ, — Peripherie unten, — Peripherie oben, — Sekundärluft. —→ Stromlinien, - - -  $\Phi = 1,7$ .

tum im Vergleich zur Rußbildung bei höheren Temperaturen und damit auch bei etwas geringeren Äquivalenzverhältnissen als  $\Phi = 1,7$  auftreten kann. Dies liegt daran, dass Acetylen, welches für ein Teil des Rußwachstums verantwortlich ist, etwas temperaturbeständiger als die rußbildenden PAHs ist.

Abbildung 7.14 zeigt, dass die Wahrscheinlichkeit für Ereignisse mit hoher Rußneigung ( $\Phi > 1,7$ ) in allen BP niedrig ist. Am häufigsten treten Zustände nahe des primären und des globalen Äquivalenzverhältnisses des jeweiligen Betriebspunktes auf. Ohne Sekundärlufteinblasung (BP-3) ist die Wahrscheinlichkeit für brennstoffarme Ereignisse geringer und die häufigsten Zustände sind zu niedrigeren Temperaturen ( $\tilde{T} < 2000$  K) hin verschoben. Um Bereiche in der MBK zu identifizieren, die Rußbildungs- und wachstum begünstigen, wurden die Histogramme auch in den in Abb. 7.14(d) abgebildeten Teilbereichen berechnet. Die zugehörigen Isolinien zeigen in allen BP, dass heiße, brennstoffreiche Zustände, die die Rußbildung begünstigen, nur im Bereich des Injektors und im unteren Bereich der Peripherie vorkommen. Am häufigsten treten diese Ereignisse in BP-2 auf, da der Brennstoffmassenstrom höher als in den anderen beiden BP ist. Ohne Sekundärlufteinblasung (BP-3) erhöht sich die Wahrscheinlichkeit für Ereignisse mit  $\Phi > 1,7$  nur im Bereich des Injektors, während sie in den anderen Bereichen nicht häufiger vorkommen. Bei  $\Phi < 1,7$  wirkt sich der Ein-

fluss der Betriebsbedingungen analog aus. Damit ist nicht nur die Rußbildung, sondern auch das Rußwachstum durch die verschiedenen Betriebsbedingungen auf die gleiche Art beeinflusst.

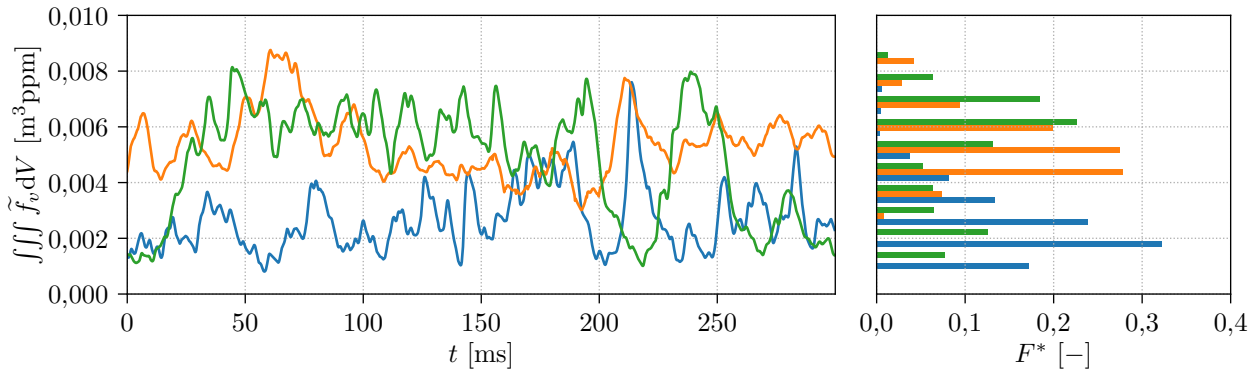
Diese Analyse erweitert die Erkenntnisse numerischer [37] und experimenteller [96] Arbeiten für alle BP dahingehend, dass Rußpräsenz in der Peripherie und der IRZ nur durch Transport zu erklären ist. Zustände die Rußbildung- und -wachstum begünstigen treten hier sehr selten auf. Die zu schnelle Abnahme des Rußvolumenbruchs in der LES steht also nicht direkt in Verbindung mit Rußbildung oder -wachstum, welche vom DLR-Rußmodell korrekt vorhergesagt werden.

Bedingt durch die Komplexität der Brennkammer, können viele weitere Faktoren zur überhöhten Abnahme der Rußkonzentration in der LES führen. Messungen deuten darauf hin, dass das Äquivalenzverhältnis in der IRZ die Rußbildung signifikant beeinflusst [145, 233]. Wie bereits diskutiert (vgl. Abschnitt 7.2.3), stimmt der rezirkulierte Massenstrom zwischen den Simulationen und den Messungen gut überein. Daher ist auch eine falsche Vorhersage des Äquivalenzverhältnisses in der IRZ unwahrscheinlich. Allerdings kann das Mischungsmodell für die Unterschiede zwischen Experiment und Simulation verantwortlich sein, was die bisherige Analyse nicht nachweisen konnte, da nur gefilterte Größen betrachtet wurden. Die deutlich bessere Rußvorhersage im brennstoffreichen BP-2 deutet auf eine hohe Sensitivität des Rußmodell nahe des Rußlimits hin, da BP-1 und BP-3 an der Rußgrenze betrieben wurden. Dies wird im Vergleich mit anderen turbulenten Flammen in Abschnitt 8.1 genauer betrachtet. Umgekehrt zeigt die gute Rußvorhersage in BP-2, dass alle relevanten Eigenschaften der MBK durch die LES wiedergegeben werden. Dies rechtfertigt weitere Analysen zu den Rußbildungs und -wachstumsprozessen in der Brennkammer.

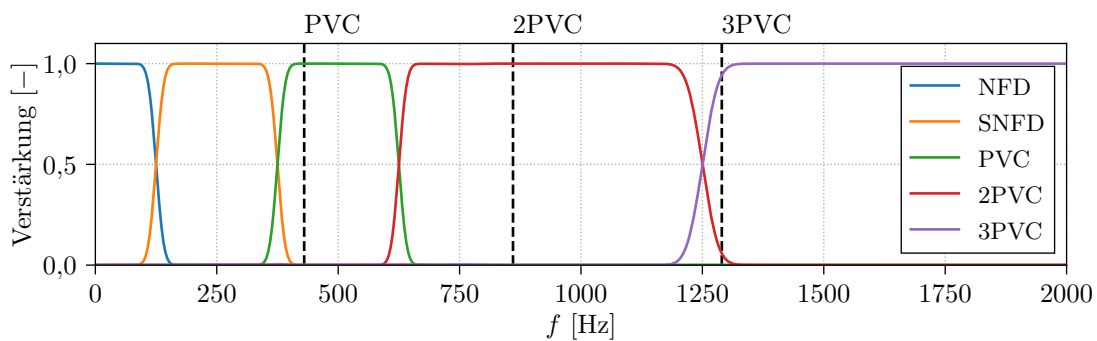
### 7.3 Einfluss der Dynamiken des Strömungsfelds auf die Rußevolution

Die Präsenz kohärenter und inkohärenter Dynamiken im Strömungsfeld unterscheidet die MBK deutlich von den bisher untersuchten turbulenten Strahlflammen. Sowohl der PVC (z.B. [72, 94, 145]) als auch die NFD (z.B. [38, 105, 233]) beeinflussen die Rußevolution in dieser Brennkammer. Der zeitaufgelöste Datensatz der LES wird im Folgenden dazu genutzt, die Verbindung zwischen den Dynamiken des Strömungsfelds und denen des Rußes zu quantifizieren. Dadurch lässt sich deren Bedeutung für die Rußevolution in der Brennkammer darstellen. Der Vergleich zwischen den drei BP hilft den Einfluss der Dynamiken besser zu verstehen und bietet die Möglichkeit, die Sensitivitäten der Dynamiken auf die Betriebsbedingungen zu untersuchen. Zur Unterstützung der Analyse werden auch nicht-reagierende LES von BP-1 und BP-3 ausgewertet.

Abbildung 7.15 vergleicht die zeitliche Entwicklung des Rußvolumens  $\iiint \tilde{f}_v dV$  in den drei BP der MBK. Alle BP zeigen ein äußerst intermittentes Rußverhalten, das auch in experimentellen Untersuchungen von BP-1 [233] beobachtet wurde. Die Unterschätzung des Rußes durch die LES könnte zwar dazu führen, dass die Intermittenz etwas überschätzt wird, es wird aber erwartet, dass die Trends zwischen den Betriebspunkten korrekt wiedergegeben werden. Das Rußvolumen in der Brennkammer schwankt in BP-1 und BP-3 um den Faktor fünf. In BP-2 ist die Amplitude deutlich geringer. Eine numerische Studie von BP-1 fand einen Zusammenhang zwischen der Rußintermittenz und der Interaktion zwischen der Sekundärlufteinblasung und dem rezirkulierten Fluid [105]. Daher ist die Intermittenz im BP ohne Sekundärlufteinblasung (BP-3) unerwartet hoch. Außerdem



**Abbildung 7.15:** Zeitlicher Verlauf (links) und Histogramm (rechts) des Rußvolumens in der MBK. — 4-BP-1; — BP-2; — 4-BP-3



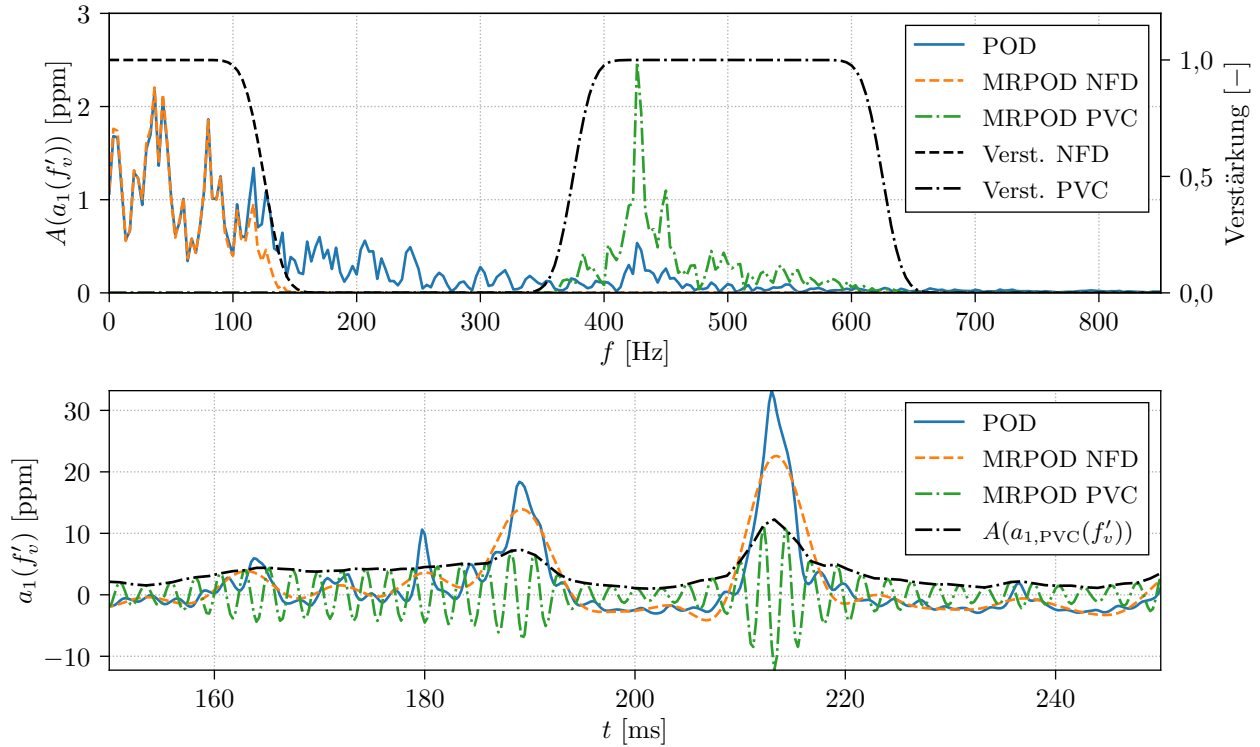
**Abbildung 7.16:** Signalverstärkung der für die MRPOD verwendeten Filter. --- zeigt die PVC-Frequenz sowie dessen erste und zweite Harmonische (2PVC/3PVC).

hat die Sekundärlufteinblasung einen klaren Einfluss auf die Histogramme des Rußvolumens in der Brennkammer. Während die Histogramme von BP-1 und BP-2 eine Glockenform aufweisen, zeigt das Histogramm von BP-3 eher eine bimodale Verteilung mit zwei lokalen Maxima. Um diese Unterschiede im Rußverhalten der einzelnen BP zu erklären, bedarf es einer gründlichen Analyse der verschiedenen Dynamiken des Strömungsfelds und deren Einfluss auf das Rußverhalten.

### 7.3.1 Analysemethode

Abbildung 7.16 zeigt die Frequenzfilter die zur Unterscheidung der verschiedenen Dynamiken im MRPOD-Verfahren verwendet werden. Sie unterscheiden zwischen den NFD, dem PVC und der ersten und zweiten Harmonischen des PVCs (2PVC/3PVC). Da die Filter aus den in Abb. 4.1 gezeigten Filtern zusammengesetzt sind, ist eine bessere Auflösung der zweiten Harmonischen des PVC nicht möglich. Das verbleibende Frequenzband zwischen den NFD und dem PVC wird semi-NFD (SNFD) genannt. Damit ist der ganze Frequenzbereich abgedeckt, was einen aussagekräftigen Vergleich der Energien der Moden und damit deren Bedeutung zulässt.

Abbildung 7.17 demonstriert die Notwendigkeit des MRPOD-Verfahrens. Das Frequenzspektrum des Zeitkoeffizienten der energiereichsten POD-Mode des Rußvolumenbruchs ( $a_1(f'_v)$ ) enthält eine Vielzahl von Frequenzen, darunter die PVC-Frequenz von 430 Hz und Frequenzen im NFD-Bereich. Die POD ist dabei nicht in der Lage, die offensichtlich unterschiedlichen Dynamiken des kohärenten PVC und der inkohärenten NFD zu trennen. Die Aufteilung der POD-Moden wird durch deren



**Abbildung 7.17:** Vergleich zwischen POD- und MRPOD-Verfahren für die erste Mode des Rußvolumenbruchs  $a_1(f'_v)$ . Zur besseren Übersichtlichkeit sind nur die Ergebnisse mit dem PVC- und dem NFD-Filter des MRPOD-Verfahrens gezeigt. Oben: Frequenzspektrum mit Frequenzfiltern, unten: zeitlicher Verlauf und Amplitude der PVC-gefilterten Mode ( $A(a_{1,PVC}(f'_v))$ ).

Energie bestimmt (vgl. Gl. (4.22)), was bei Dynamiken mit ähnlicher Energie eine saubere Trennung verhindert. Daher kommen bei der MRPOD Frequenzfilter zum Einsatz, wodurch Dynamiken ähnlicher Energie aber unterschiedlicher Frequenz getrennt werden können. Die Zeitkoeffizienten der zugehörigen Moden  $a_{1,NFD}(f'_v)$  und  $a_{1,PVC}(f'_v)$  enthalten somit auch nur Frequenzen im Filterbereich, was zu einer klaren Trennung der Dynamiken führt. Der fehlende Anstieg der Amplitude der POD auf der PVC-Frequenz ist damit zu erklären, dass diese Dynamik und damit deren Energie, auf viele Moden verteilt wurde. Die MRPOD fasst den PVC und dessen Energie in zwei, um  $90^\circ$  phasenverschobene Moden zusammen, was typisch für kohärente Dynamiken ist. Der zeitliche Verlauf von  $a_1(f'_v)$  bestätigt die gelungene Aufteilung der Dynamiken. Während der Verlauf der MRPOD-Mode mit NFD-Filter in etwa dem der POD entspricht, zeigt sich im Verlauf der MRPOD-Mode mit PVC-Filter der typische, sinusförmig-periodische Verlauf kohärenter Dynamiken. Auf Grund der Intermittenz des Rußes in der MBK ändert sich die Amplitude  $A$  von  $a_{1,PVC}(f'_v)$  deutlich.

### 7.3.2 Dominante Moden

Die Anzahl an MRPOD-Moden entspricht der Anzahl an Frequenzfiltern multipliziert mit der Anzahl an Zeitschritten im Datensatz, also 6000 Moden in jedem BP. Um die wichtigsten Moden zu identifizieren, wird davon ausgegangen, dass diese auch den höchsten Energiegehalt aufweisen. Da die Moden absteigend nach ihrem Energiegehalt geordnet sind, reicht es aus die ersten Moden zu vergleichen und Moden mit einem relativ hohen Energiegehalt für eine anschließenden Analyse auszuwählen.

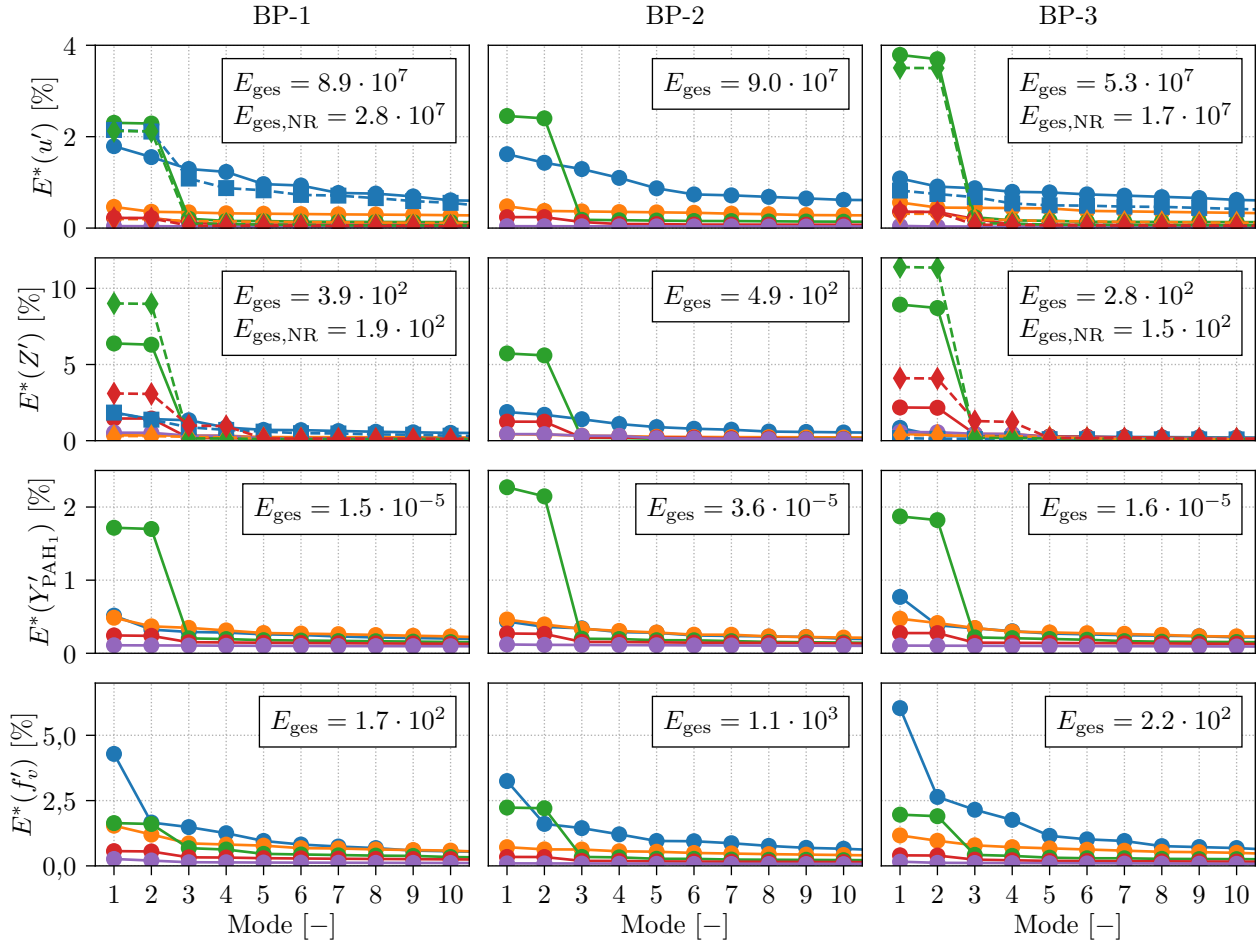
Abbildung 7.18 vergleicht den normierten Energiegehalt  $E^*$  der ersten zehn Moden von Geschwindigkeits ( $u'$ ), Mischungsbruchs ( $Z'$ ), Massenanteil der ersten PAH-Sektion ( $Y'_{\text{PAH}_1}$ ) und Rußvolumenbruch ( $f'_v$ ) der drei BP. Der gesamte Energiegehalt im Datensatz  $E_{\text{ges}}$  (Gl. (4.31)) ermöglicht auch einen absoluten Vergleich. Da die Modenanalyse für die gesamte Brennkammer durchgeführt wurde, ist der relative Energiegehalt der Moden deutlich kleiner als bei Messungen in einer räumlich begrenzten Ebene in der Brennkammer (z.B. [145]). In Übereinstimmung mit diesen Messungen zeigen die LES-Ergebnisse, dass der PVC im Geschwindigkeitsfeld die Dynamik mit dem höchsten Energiegehalt ( $E^*(u')$ ) ist. Dies gilt für alle BP. Das zugehörige Modenpaar ist typisch für kohärente Strukturen und am nahezu identischen Energiegehalt zu erkennen. Im Vergleich zu den nicht-reagierenden Simulationen verstärkt die Verbrennung den PVC und erhöht dessen absolute Energie. Zwar ist  $E^*_{1,2,\text{PVC}}(u')$  in BP-3 am höchsten, jedoch zeigt eine Multiplikation mit  $E_{\text{ges}}$ , dass der absolute Energiegehalt des PVC in den reagierenden und den nicht-reagierenden BP jeweils nahezu identisch ist. Die zweitmeiste Energie im Geschwindigkeitsfeld findet sich in den NFD-Moden, die in allen BP bis auf den nicht reagierenden Fall im BP-1/NR inkohärent sind. Verbrennung stört die kohärente NFD-Dynamik in BP-1/NR und deren Energie wird in BP-1 über die ersten Moden verteilt. In BP-3/NR sind keine kohärenten NFD-Dynamiken zu erkennen. Außerdem führt die Sekundärlufteinblasung dazu, dass der Energiegehalt der ersten NFD-Moden wesentlich höher als in BP-3 ist. Moden in den anderen Frequenzbändern haben einen deutlich kleineren Energiegehalt als der PVC und die ersten NFD-Moden.

Die Energieverteilung zwischen den Moden des Mischungsbruchs ( $E^*(Z')$ ) unterscheidet sich von denen der Geschwindigkeit ( $E^*(u')$ ). Zwar ist der PVC auch hier die Dynamik mit der höchsten Energie, die NFD weisen aber deutlich weniger Energie auf. Stattdessen ist die erste Harmonische des PVC die zweitwichtigste Dynamik. Sie hat die Form einer Doppelhelix, die auch im Experiment zu beobachten ist [145]. Da sie lediglich nahe des Injektors auftritt, wo gleichzeitig die Änderungen von  $Z'$  am höchsten sind, ist sie nur im  $Z'$ -Feld so ausgeprägt. So lässt sich auch der vergleichsweise hohe relative Energieanteil  $E^*(Z')$  des PVC vor allem ohne Sekundärlufteinblasung (BP-3) erklären. Der absolute Energiegehalt der ersten beiden Moden ist für BP-1 und BP-3 identisch, während der höhere Brennstoffmassenstrom in BP-2 auch zu einer höheren Gesamtenergie führt.

Für die Moden von  $Y'_{\text{PAH}_1}$  lässt sich ein sehr ähnliches Verhalten beobachten, wobei sich der Energieunterschied zwischen BP-1/BP-3 und BP-2 erhöht. Insgesamt ist auch hier der PVC die wichtigste Dynamik, während die anderen Dynamiken kaum relevant scheinen. Acetylen, die andere wichtige Rußvorläufer- und Rußwachstumsspezies, verhält sich sehr ähnlich (nicht gezeigt).

Der Einfluss des PVC auf  $f'_v$  ist deutlich geringer als auf die Rußvorläufer. Stattdessen ist der Einfluss der intermittenten NFD größer, was dem Experiment entspricht [96]. Da  $a_{1,\text{NFD}}(f'_v)$  sehr gut mit  $\iiint \tilde{f}_v dV$  korreliert [105], spiegelt die erste NFD-Mode die intermittente Rußevolution wieder. Daher zeigen sich die unterschiedlichen, mittleren Rußvolumenbrüche bei allen BP auch in der Gesamtenergie der Moden. Der Einfluss von  $\Phi_p$  auf  $E_{\text{ges}}(f'_v)$  ist sehr groß, während der Einfluss der Sekundärlufteinblasung geringer ausfällt. Neben den dominanten NFD hat auch der PVC bei allen BP einen deutlichen Einfluss auf das Rußverhalten, was sich am Energieniveau des Modenpaars zeigt. Insgesamt sind also in allen BP der PVC und die NFD die wichtigsten Dynamiken. Daher beschränkt sich die weitere Analyse auf diese beiden.

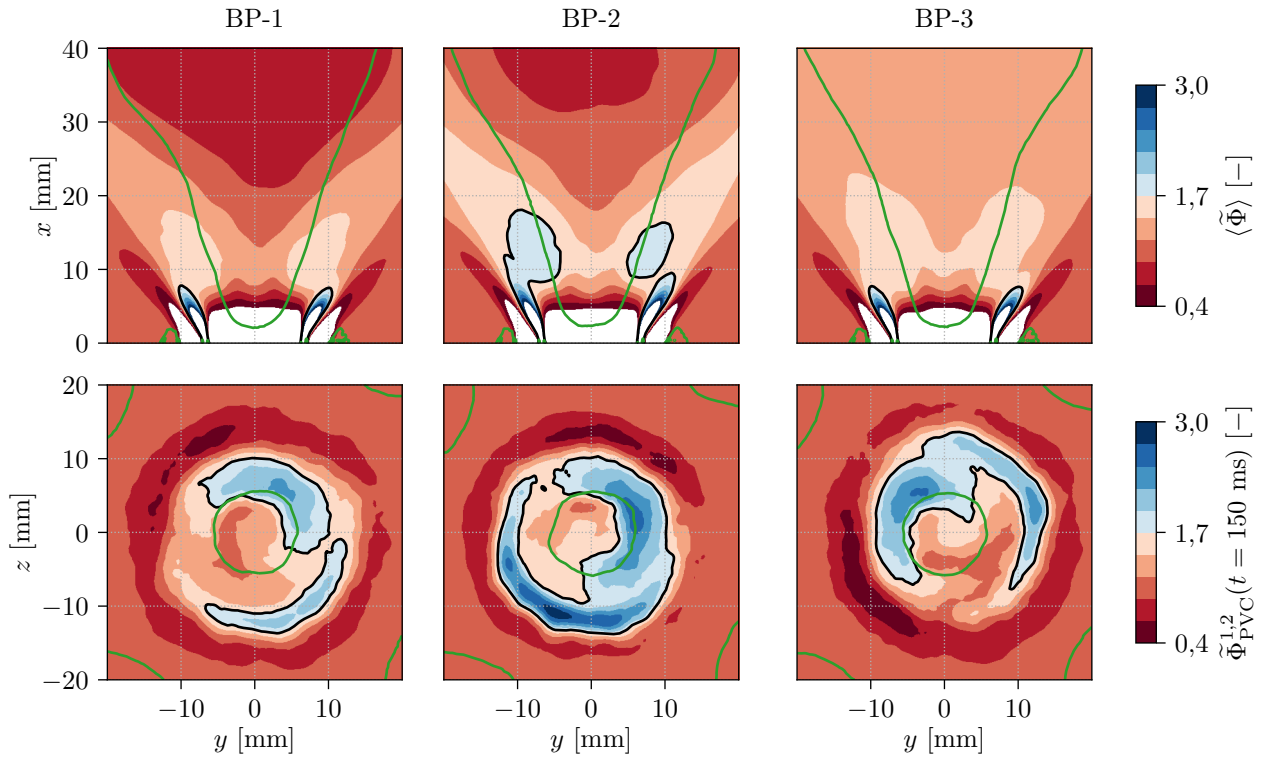




**Abbildung 7.18:** Normierter Energiegehalt  $E^*$  der MRPOD-Moden von Geschwindigkeit ( $u'$ ), Mischungsbruch ( $Z'$ ), Massenbruch der ersten PAH-Sektion ( $Y'_{PAH_1}$ ) und des Rußvolumenbruchs ( $f'_v$ ).  $\bullet$  reagierend,  $\blacklozenge$ ,  $\blacksquare$  nicht reagierend. MRPOD-Frequenzfilter:  $\text{---}$  NFD,  $\text{---}$  SNFD,  $\text{---}$  PVC,  $\text{---}$  2PVC,  $\text{---}$  3PVC. Linien dienen zur Orientierung. Die Einheit von  $E_{ges}(u')$  ist  $\text{m}^2/\text{s}^2$ ,  $E_{ges}(Z', Y'_{PAH_1}, f'_v)$  sind einheitenlos.

### 7.3.3 Einfluss des PVC

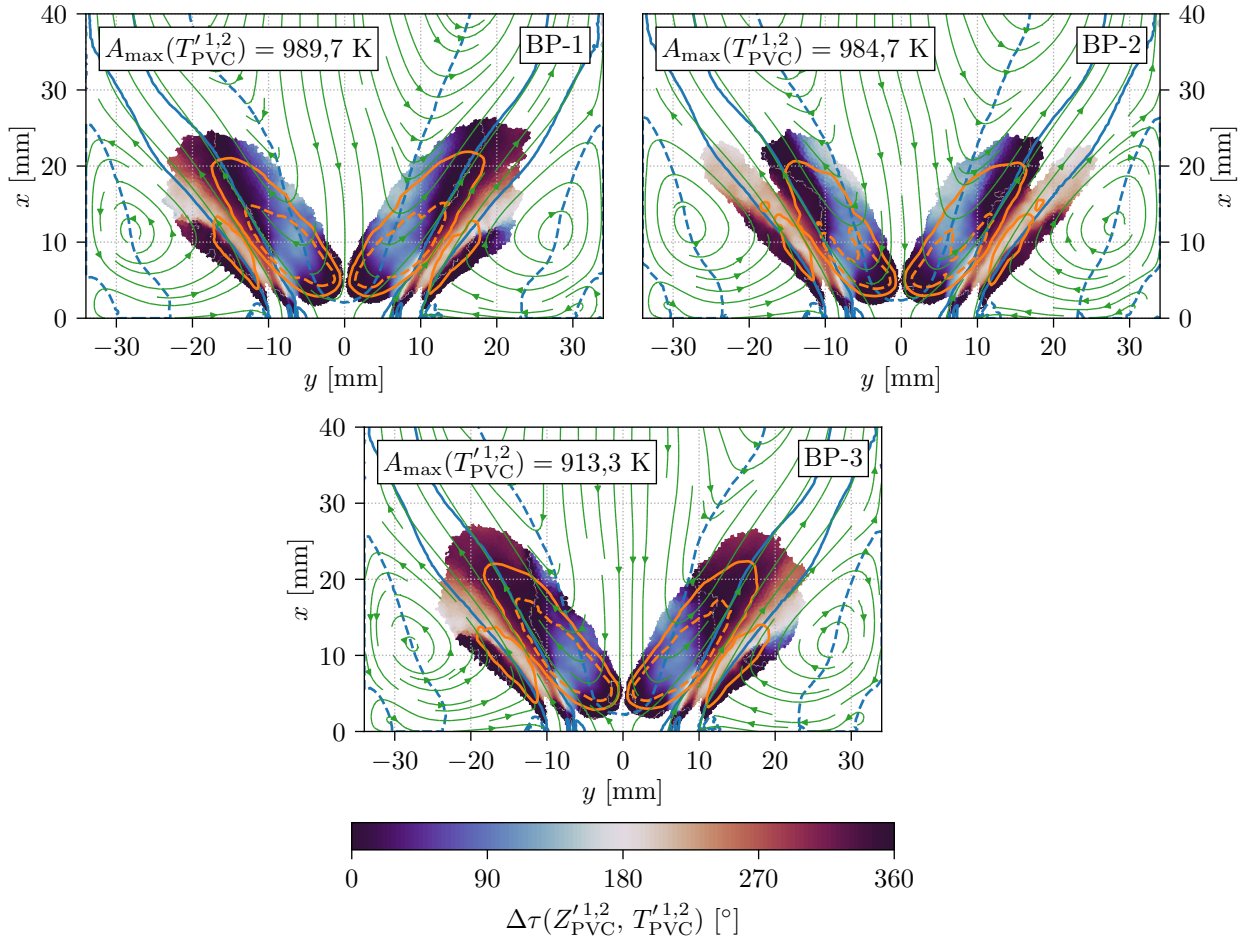
LES, in denen der PVC mit Hilfe von Modenanalyse untersucht wurde, existierten bisher nur für nicht-rußende Brennkammern (z.B. [66]). Erst im Rahmen dieser Arbeit [104, 105] kam die Modenanalyse zur Untersuchung von rußenden Flammen zum Einsatz. Abbildung 7.19 analysiert den Einfluss der Betriebsbedingungen und des PVC in Injektornähe. Das Feld des mittleren Äquivalenzverhältnisses zeigt, dass rußbildungsfördernde Bedingungen ( $\Phi > 1,7$ ) in BP-1 im Mittel nur direkt hinter dem Injektor zu finden sind. In der ISL ist das Äquivalenzverhältnis zu gering, um die Rußbildung kontinuierlich zu begünstigen. Dies gilt auch ohne Sekundärlufteinblasung (BP-3), wodurch  $\langle \tilde{\Phi} \rangle$  zwar etwas größer ist, aber nicht über dem Schwellenwert ( $\langle \tilde{\Phi} \rangle = 1,7$ ) liegt. Nur die Betriebsbedingungen in BP-2 führen zu größeren brennstoffreichen Gebieten in der ISL, die die Rußbildung kontinuierlich begünstigen. Das Fehlen solcher Gebiete in der ISL bei BP-1 und BP-3 illustriert die geringe Rußneigung der MBK bei diesen BP. Abbildung 7.19 zeigt außerdem den Einfluss des PVC auf  $\langle \tilde{\Phi} \rangle$  an einem beispielhaft gewählten Zeitschritt durch dessen Rekonstruktion  $\tilde{\Phi}_{PVC}^{1,2}$  (Gl. (4.33)). Sein Einfluss ist, wie sein Energiegehalt (vgl.  $E^*(Z')$  in Abb. 7.18), bei allen BP sehr ähnlich. Der PVC verändert die Mischung so, dass in Teilen der ISL von BP-1 und BP-3 Gebiete mit  $\tilde{\Phi}_{PVC}^{1,2} > 1,7$



**Abbildung 7.19:** Oben: Gemitteltes Äquivalenzverhältnis  $\langle \tilde{\Phi} \rangle$  in einer vertikalen Schnittebene durch die MBK bei  $z = 0$  mm. Unten:  $\langle \tilde{\Phi} \rangle$  überlagert mit der instantanen, rekonstruierten PVC-Mode des Äquivalenzverhältnisses ( $\tilde{\Phi}_{\text{PVC}}^{1,2}$ ) bei  $t = 150$  ms, in einer horizontalen Schnittebene durch die MBK bei  $x = 10$  mm. —  $\langle \tilde{u} \rangle = 0$  m/s, —  $\tilde{\Phi} = 1,7$ .

auftreten. Die Sekundärlufteinblasung führt dazu, dass diese Gebiete in BP-1 etwas kleiner als in BP-3 sind. Diese brennstoffreichen Gebiete sind im mittleren Feld von BP-2 schon präsent, werden durch den PVC aber noch brennstoffreicher und treten fast in der gesamten ISL auf. Damit zeigt die Rekonstruktion des PVC und der Vergleich mit  $\langle \tilde{\Phi} \rangle$ , dass der PVC von entscheidender Bedeutung für die Rußbildung in der MBK ist. Die dafür notwendigen brennstoffreichen Gebiete sind in BP-1 und BP-3 nur dank seiner Präsenz vorhanden.

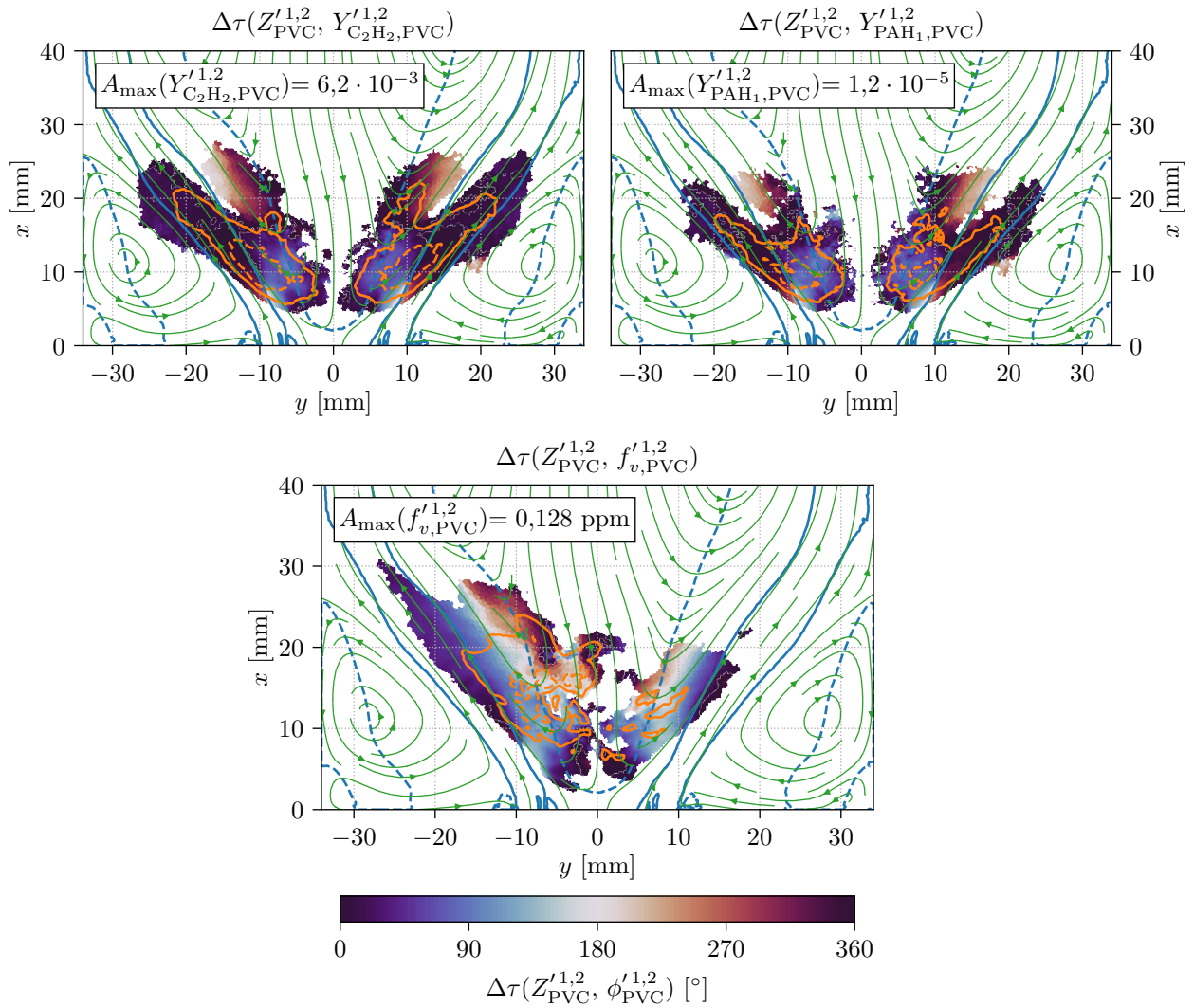
Im Gegensatz zum Mischungsbruch, ändern sich die Speziesmassenbrüche nicht nur durch konvektiven und diffusiven Transport, sondern auch durch die chemischen Quellterme. Die POD kann nicht automatisch zwischen diesen Prozessen unterscheiden. Um den Einfluss des PVC auf die einzelnen Prozesse untersuchen zu können, wird im Folgenden der mittlere Phasenversatz von rekonstruierten PVC-Feldern zweier Variablen  $\Delta\tau(x, \phi_1^{1,2}, \phi_2^{1,2})$  (Gl. (4.34)) untersucht. Repräsentiert  $\phi_1^{1,2}$  den PVC, so zeigt  $\Delta\tau$  den Einfluss des PVC auf  $\phi_2^{1,2}$ . Da der Mischungsbruch den Einfluss des PVC auf die Mischung gut wiedergibt, wird  $Z'$  im Folgenden als repräsentative Variable für den PVC verwendet ( $\phi_1^{1,2} = Z'_{\text{PVC}}^{1,2}$ , der Index „PVC“ weist auf den verwendeten MRPOD-Filter hin). Der mittlere Phasenversatz wird so interpretiert, dass Werte von  $\Delta\tau \approx 0^\circ$  und  $\Delta\tau \approx 180^\circ$  eine instantane Änderung von  $\phi_2^{1,2}$  mit dem PVC zeigen. Transport von  $\phi_2^{1,2}$  durch den PVC, zum Beispiel durch das Verschieben der Flammenfront, aber auch sehr schnelle chemische Reaktionen können einen solchen Phasenversatz verursachen. Werte dazwischen zeigen eine zeitlich verzögerte Reaktion von  $\phi_2^{1,2}$  auf die PVC-bedingte Mischung an. Diese verzögerte Änderung wird so interpretiert, dass sie durch langsame chemische Reaktionen verursacht wird, die für die Rußchemie typisch sind.



**Abbildung 7.20:** Phasenversatz  $\Delta\tau$  der rekonstruierten PVC-Moden des Mischungsbruchs ( $Z'_{PVC}$ ) und der Temperatur ( $T'_{PVC}$ ).  $\rightarrow$  Stromlinien,  $\text{—}$   $\langle \tilde{u}_x \rangle = 10$  m/s,  $\text{---}$   $\langle \tilde{u}_x \rangle = 0$  m/s,  $\text{—}$   $1/3 \cdot A_{\max}(T'_{PVC}(\mathbf{x}))$ ,  $\text{---}$   $2/3 \cdot A_{\max}(T'_{PVC}(\mathbf{x}))$ . Die  $\Delta\tau$ -Konturfläche ist nur bei  $A > 0,1 \cdot A_{\max}$  gezeichnet.

Abbildung 7.20 zeigt den Einfluss des PVC auf die Temperatur ( $\Delta\tau(Z'_{PVC}, T'_{PVC})$ ) bei allen BP am Injektor. Anhand der Stromlinien lässt sich erkennen, dass der größte Einfluss des PVC zwischen IRZ und ORZ zu finden ist. Die Amplitude der rekonstruierten Dynamik  $A(T'_{PVC}(\mathbf{x}, t))$  quantifiziert, wie stark der PVC sich auf  $T'$  auswirkt. Die höchste vom PVC verursachte Amplitude  $A_{\max}(T'_{PVC})$  findet sich in BP-1 und wird mit steigendem Äquivalenzverhältnis geringer. Im Bereich der Hauptströmung ( $\langle \tilde{u}_x \rangle = 10$  m/s) beträgt der Phasenversatz entweder  $\Delta\tau \approx 0^\circ$  oder  $\Delta\tau \approx 180^\circ$ , da hier die Flammenfronten vom PVC lediglich verschoben werden. In der ISL in Injektornähe, wo der PVC brennstoffreiche Gebiete bildet, beträgt der Phasenversatz  $\Delta\tau \approx 90^\circ$  und die Amplitude der Temperatur ist am höchsten. Folglich werden die Temperaturschwankungen nicht durch Transport oder Mischung verursacht, sondern durch langsamere chemische Reaktionen bei denen kaltes Gas verbrennt. Dieses Verhalten ist in allen BP gleichermaßen zu beobachten. Die verschiedenen Betriebsbedingungen verändern also lediglich die Stärke des PVC-Einflusses, während sich dessen Art nicht ändert. Deshalb wird der PVC-Einfluss auf die Rußevolution im Folgenden nur für BP-1 untersucht.

Abbildung 7.21 untersucht den Phasenversatz zwischen dem PVC und den Rußvorläufer  $Y'_{C_2H_2, PVC}$  und  $Y'_{PAH_1, PVC}$ , sowie dem Rußvolumenbruch  $f'_{v, PVC}$  für BP-1. Zwischen den beiden Scherschichten



**Abbildung 7.21:** Phasenversatz  $\Delta\tau$  der rekonstruierten PVC-Moden des Mischungsbruchs ( $Z'_{PVC}{}^{1,2}$ ) und den Massenanteilen von Acetylen ( $Y'_{C_2H_2,PVC}{}^{1,2}$ , oben links) und der ersten PAH-Sektion ( $Y'_{PAH_1,PVC}{}^{1,2}$ , oben rechts) sowie des Rußvolumenbruchs ( $f'_{v,PVC}{}^{1,2}$ , unten).  $\rightarrow$  Stromlinien,  $\text{—}$   $\langle \tilde{u}_x \rangle = 10$  m/s,  $\text{---}$   $\langle \tilde{u}_x \rangle = 0$  m/s,  $\text{—}$   $1/3 \cdot A_{\max}(\phi'_{PVC}{}^{1,2}(\mathbf{x}))$ ,  $\text{- - -}$   $2/3 \cdot A_{\max}(\phi'_{PVC}{}^{1,2}(\mathbf{x}))$ . Die  $\Delta\tau$ -Konturfläche ist nur bei  $A > 0,1 \cdot A_{\max}$  gezeichnet.

weisen die PVC-Mode von Acetylen und die der ersten PAH-Sektion keinen Phasenversatz zum PVC selbst auf. Die Rußvorläuferchemie wird hier also nicht vom PVC beeinflusst. In der IRZ in Injektornähe wächst der Phasenversatz und die Amplituden der Rußvorläufermassenbrüche steigen. Die PVC-bedingte Mischung in diesem Bereich hat also einen signifikanten Einfluss auf die Rußvorläuferchemie. Sie wirkt fast in gleicher Weise auf  $Y'_{C_2H_2,PVC}{}^{1,2}$  und  $Y'_{PAH_1,PVC}{}^{1,2}$ , wobei der Einfluss auf die Acetylenmode etwas weiter in die Brennkammer reicht. In Injektornähe ist  $\Delta\tau(Z'_{PVC}{}^{1,2}, f'_{v,PVC}{}^{1,2})$  größer als der Phasenversatz der Rußvorläufer was die langsame Rußchemie veranschaulicht. Stromab nimmt der Phasenversatz ab, verschwindet im Gegensatz zum  $\Delta\tau$  der Rußvorläufer aber nicht komplett. Dies lässt sich so interpretieren, dass der Ruß in diesem Bereich hauptsächlich vom PVC transportiert wird, gleichzeitig aber auch leicht wächst. Abschließend kann der PVC-Einfluss auf die Rußevolution so zusammenfassen werden, dass die durch den PVC verursachten, brennstoffreichen Gebiete nahe des Injektors die zeitverzögerte Rußbildung und das Rußwachstum bedingen.

## 7.3 Einfluss der Dynamiken des Strömungsfelds auf die Rußevolution

$\sigma(A) \cdot 10^3$	$u'$	$T'$	$Z'$	$Y'_{\text{C}_2\text{H}_2}$	$Y'_{\text{PAH}_1}$	$f'_v$
BP-1	3,5	3,5	2,5	4,6	6,2	21,4
BP-2	3,2	3,2	2,6	3,6	4,3	13,1
BP-3	3,1	3,6	2,9	4,0	5,1	18,1

**Tabelle 7.2:** Standardabweichungen der Amplituden des Eigenvektors  $\Psi_{1,\text{PVC}}$  in den untersuchten Betriebspunkten.

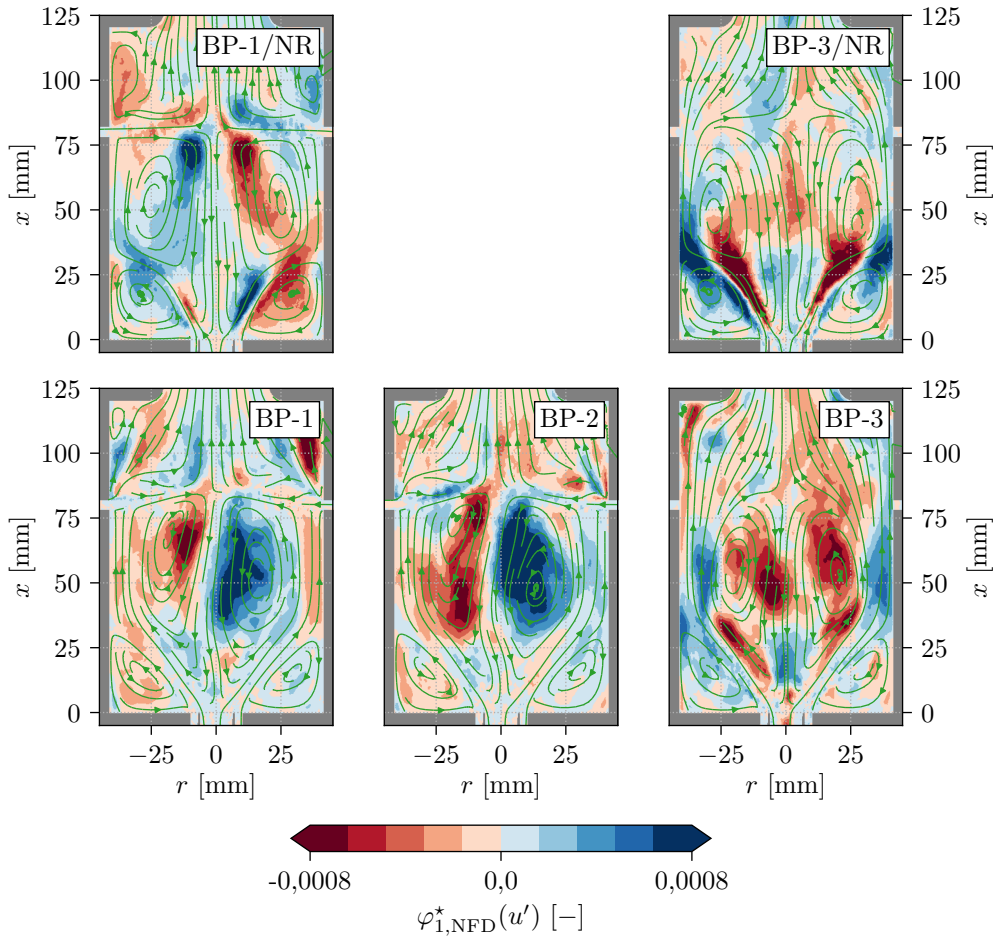
Tabelle 7.2 vergleicht die Standardabweichungen der normierten PVC-Amplituden  $\Psi_{1,\text{PVC}}$  relevanter Variablen. Bei allen BP schwankt die PVC-Amplitude für die Geschwindigkeit, die Temperatur und den Mischungsbruch kaum. Die Standardabweichung der Rußvorläufer ist dagegen etwas erhöht, aber immer noch sehr viel geringer als die großen Schwankungen der PVC-Amplitude des Rußvolumenbruchs, die bereits in Abb. 7.17 hervortrat. Kreuzkorrelationen beweisen einen klaren Zusammenhang zwischen der PVC-Amplitude von  $f'_v$  und  $a_{1,\text{NFD}}(f'_v)$  (nicht gezeigt). Die niedrigeren Schwankungen der Rußvorläufer bestätigt ihre geringe Sensitivität auf die NFD. In BP-2 sind die Schwankungen vor allem von  $A(\Psi_{1,\text{PVC}}(f'_v))$  am kleinsten. Das bedeutet, dass ein höheres Äquivalenzverhältnis am Injektor die Sensitivität von Rußbildung und -wachstum auf niederfrequente Dynamiken im Strömungsfeld verringert.

### 7.3.4 Analyse niederfrequenter Dynamiken

Obwohl der PVC die Rußbildung entscheidend beeinflusst, kann er nicht die Ursache der NFD in der Rußevolution sein, da er einen konstanten Einfluss auf die Mischung ausübt. Die relativ hohe Energie der NFD-Moden im Strömungsfeld (vgl. Abb. 7.18) legen eine Verbindung zwischen Strömungsfeld und Ruß-NFD nahe. Nachfolgend wird diese Verbindung zuerst im physikalischen Raum mit Hilfe des Mischungsbruchs untersucht. Danach folgt eine Analyse korrelierter Statistiken der NFD im  $\tilde{\Phi}$ - $\tilde{T}$ -Raum.

#### 7.3.4.1 Niederfrequente Dynamiken im physikalischen Raum

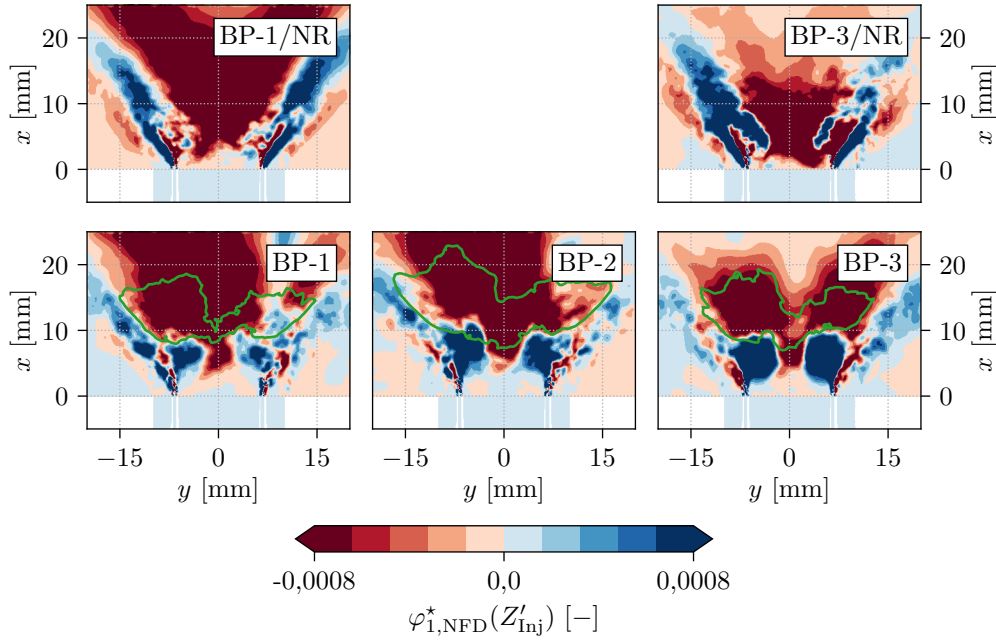
Abbildung 7.22 vergleicht alle BP anhand der energiereichsten räumlichen NFD-Mode der Geschwindigkeit ( $\varphi_{1,\text{NFD}}^*(u')$ ). Dabei ist speziell BP-1/NR interessant, da nur hier eine kohärente NFD-Dynamik zu finden ist, die durch das Modenpaar  $\varphi_{1,\text{NFD}}^*(u')$  und  $\varphi_{2,\text{NFD}}^*(u')$  gebildet wird. Sie beeinflusst die Sekundärlufteinblasung, die IRZ und den Injektor in der linken und rechten Brennkammerhälfte jeweils in entgegengesetzter Richtung. In BP-3/NR ist keine kohärente Struktur zu sehen, was zeigt, dass diese durch die Sekundärlufteinblasung verursacht wird. Stattdessen beeinflusst  $\varphi_{1,\text{NFD}}^*(u')$  nur die Strömung in Injektornähe, indem sie die Position des V-förmigen Strömungsfelds in axialer Richtung verschiebt. Im Gegensatz zu BP-1/NR ist diese Mode in BP-3/NR symmetrisch. Die Verbrennung hat einen signifikanten Einfluss auf alle Moden. Im BP-1 ist der Einfluss von  $\varphi_{1,\text{NFD}}^*(u')$  auf die Sekundärlufteinblasung schwächer und in Injektornähe wird das Strömungsfeld kaum von der Mode beeinflusst, während der Einfluss auf die IRZ nach wie vor stark ist. Diese Mode findet sich in sehr ähnlicher Form auch in BP-2. Bei beiden Betriebspunkten enthalten auch die hier nicht gezeigten Moden  $\varphi_{2-4,\text{NFD}}^*(u')$  Eigenschaften des kohärenten Modenpaares von BP-1/NR. Die Verbrennung stört also die kohärente, durch die Sekundärlufteinblasung verur-



**Abbildung 7.22:** Erste NFD-gefilterte MRPOD-Mode der axialen Geschwindigkeit  $u'$  aller BP einschließlich der nicht-reagierenden.  $\rightarrow$  Stromlinien des gemittelten Geschwindigkeitsfelds.

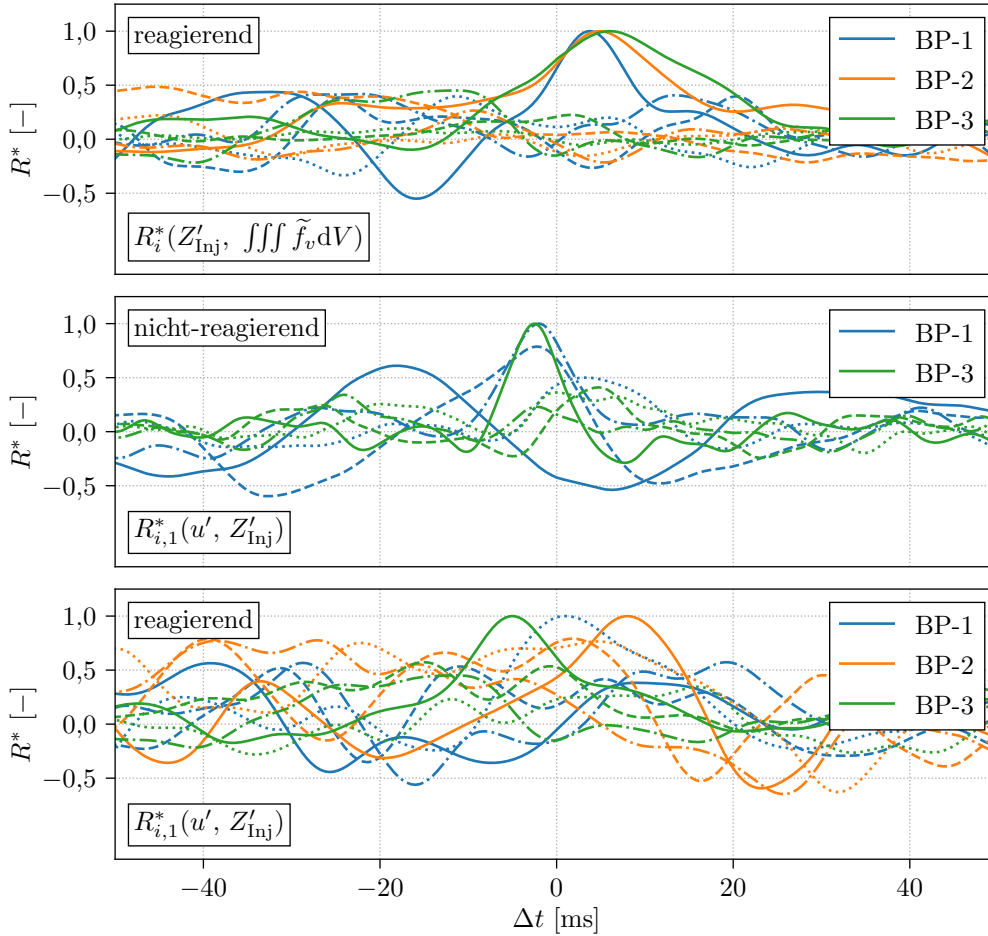
sachte Dynamik und verteilt deren Einfluss auf mindestens vier inkohärente Moden mit ähnlicher Energie (vgl. Abb. 7.18). In BP-3 ist die symmetrische Mode von BP-3/NR zwar schwächer aber immer noch präsent. Es sei angemerkt, dass auch mit Sekundärlufteinblasung Moden existieren, die einen symmetrischen Einfluss auf das Strömungsfeld am Injektor haben.

Abbildung 7.23 vergleicht die erste NFD-Mode des Mischungsbruchs  $\varphi_{1,\text{NFD}}^*(Z'_{\text{Inj}})$ , die in einem Volumen in Injektornähe ( $0 \leq x \leq 25$  mm,  $r \leq 20$  mm) berechnet wurde. Die räumliche Beschränkung ist notwendig, um eine Störung der Mode durch Dynamiken mit ähnlicher Energie zu verhindern, die an anderen Stellen in der Brennkammer auftreten. Im Gegensatz zu den NFD-Moden der Geschwindigkeit, sind die  $Z'$ -Moden aller BP, sogar der nicht-reagierenden BP, sehr ähnlich. Im größten Teil der IRZ wirkt die Mode so, dass  $a_{1,\text{NFD}}(Z')$  und  $Z'$  negativ korreliert sind. Ohne Sekundärlufteinblasung (BP-3) ist der Einfluss der Mode auf einen kleineren Teil der IRZ in Injektornähe beschränkt. Sowohl in den reagierenden als auch in den nicht-reagierenden BP ist die Mode symmetrisch. Lediglich in BP-1 ist die Symmetrie von  $\varphi_{1,\text{NFD}}^*(Z'_{\text{Inj}})$ , wie die Symmetrie des mittleren Rußvolumenbruchfelds (vgl. Abb. 7.13), nicht ganz so stark ausgeprägt. Die Isolinie des gemittelten Rußquellterms  $\langle \bar{S}_s \rangle$  zeigt, dass Bereiche von Rußbildung und -wachstum sehr gut mit dem negativen Teil der Mode übereinstimmen. Dies und die Tatsache, dass diese Mode in allen BP gleichermaßen auftritt, unterstreicht ihre Bedeutung, obwohl der Energiegehalt gering ist ( $E_{1,\text{NFD}}^*(Z'_{\text{Inj}}) < 1$  %).



**Abbildung 7.23:** Erste NFD-gefilterte MRPOD-Mode des Mischungsbruchs in Injektornähe  $Z'_{Inj}$  aller BP einschließlich der nicht-reagierenden. —  $1/3 \cdot \langle \bar{S}_s \rangle_{max}$ .

Abbildung 7.24 zeigt normierte Kreuzkorrelationen (vgl. Gl. (4.35)) der  $Z'_{Inj}$ -NFD-Moden mit dem Rußvolumen in der gesamten Brennkammer und NFD-Moden der Geschwindigkeit (vgl. Abb. 7.22). Die Korrelation zwischen dem Rußvolumen und der ersten Mode von  $Z'_{Inj}$  ist in allen BP signifikant. Das Rußverhalten der Brennkammer ist also an diese Mode gekoppelt, was sich durch die symmetrische Form der Mode in einem Gebiet mit signifikanter Rußbildung und -wachstum erklären lässt. Nur symmetrische Moden können eine globale Variable wie das Rußvolumen so stark beeinflussen, da sich der Effekt von asymmetrischen Moden über den Umfang der Brennkammer ausgleichen würde. Die ausgeprägte Nichtlinearität der Rußchemie wird durch die großen Änderungen in Rußbildung und -wachstum, die von einer kleinen Änderung im Mischungsbruch verursacht werden, verdeutlicht. Die Kreuzkorrelation bei den nicht-reagierenden BP zeigt die Verbindung zwischen der Mischungsbruchmode und der NFD-Dynamiken im Geschwindigkeitsfeld. In BP-3/NR besteht eine deutliche Korrelation zwischen den beiden ersten Moden. Die kohärenten aber asymmetrischen Moden in BP-1/NR korrelieren weniger stark mit  $a_{1,NFD}(Z'_{Inj})$ , während die größte Korrelation zwischen  $a_{1,NFD}(Z'_{Inj})$  und  $a_{3,NFD}(u')$  besteht. Dies ist die erste symmetrische Mode im Geschwindigkeitsfeld von BP-1/NR. Der störende Einfluss der Verbrennung ist auch in den Kreuzkorrelationen zwischen  $a_{1,NFD}(Z'_{Inj})$  und  $a_{1-4,NFD}(u')$  zu erkennen. Nur die Korrelation zwischen  $a_{1,NFD}(Z_{Inj})$  und  $a_{1,NFD}(u')$  in BP-3 ist noch signifikant. Auch diese Geschwindigkeitsmode ist symmetrisch, während die NFD-Moden der Geschwindigkeit in den Betriebspunkten mit Sekundärlufteinblasung asymmetrisch sind. In BP-2 korrelieren  $a_{1-4,NFD}(u')$  nur schwach mit  $a_{1,NFD}(Z'_{Inj})$ . In BP-1 korreliert  $a_{1,NFD}(Z'_{Inj})$  mit  $a_{4,NFD}(u')$  am besten, welche wiederum eine relativ symmetrische Mode ist. Vor allem in BP-2 scheint das von der Verbrennung verursachte Zusammenbrechen der kohärenten Dynamik der Sekundärlufteinblasung das Entstehen einer symmetrischen Mode zu verhindern. Allerdings kann nicht gänzlich ausgeschlossen werden, dass die MRPOD unter der relativ ähnlichen Energie der ersten NFD-Moden leidet und eine symmetrische Mode doch vorhanden ist.



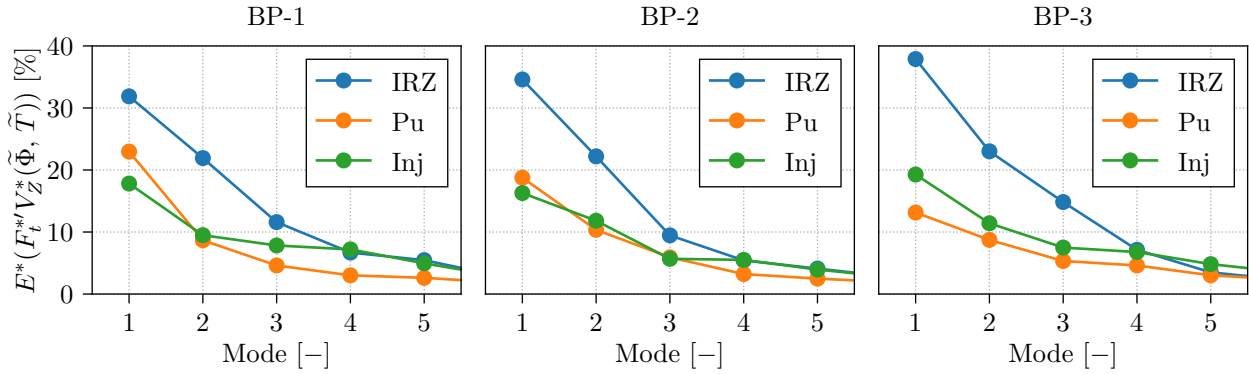
**Abbildung 7.24:** Normierte Kreuzkorrelation der NFD-Moden des Mischungsbruchs mit dem Rußvolumen (oben), der Geschwindigkeit in den nicht-reagierenden BP (mitte) und den reagierenden BP (unten). —  $i = 1$ , - - -  $i = 2$ , - · - · -  $i = 3$ , ·····  $i = 4$ .

Zusammengefasst wird das intermittente Rußverhalten in allen BP durch eine symmetrische, inkoherente Mode in Injektornähe verursacht, die dort den Mischungsbruch beeinflusst. Sekundärlufteinblasung stört die symmetrische Mode, was zusammen mit der Frischluftrezirkulation zu einer chaotischeren Antwort des Rußverhaltens führt. Dies erklärt die unterschiedlichen Formen der Histogramme des Rußvolumens in der Brennkammer (vgl. Abb. 7.15). In BP-3 beeinflusst nur eine Mode das Rußverhalten indem Rußbildungs- und wachstum entweder begünstigt, oder erschwert werden, wodurch die Form des Histogramms bimodal erscheint. Dagegen führt der chaotische Einfluss der Sekundärlufteinblasung in BP-1 und BP-2 zu einer Gauß-ähnlichen Form.

### 7.3.4.2 Niederfrequente Dynamiken in korrelierten Statistiken

Die Analyse der NFD mit Hilfe der ersten Mode des Mischungsbruchs am Injektor  $a_{1,NFD}(Z'_{Inj})$  war zwar erfolgreich und gab einen guten Einblick in die lokalen Mechanismen der Dynamiken, allerdings kann durch den geringen Energiegehalt der Moden nicht ausgeschlossen werden, dass weitere wichtige Dynamiken ungewollt von der Analyse ausgeschlossen sind. Daher werden die Schlussfolgerungen nachfolgend durch eine allgemeinere Analyse der Zusammenhänge zwischen den Dynamiken des Strömungsfelds und denen des Rußes abgesichert. Das Potential korrelierter Äquivalenzverhältnis-



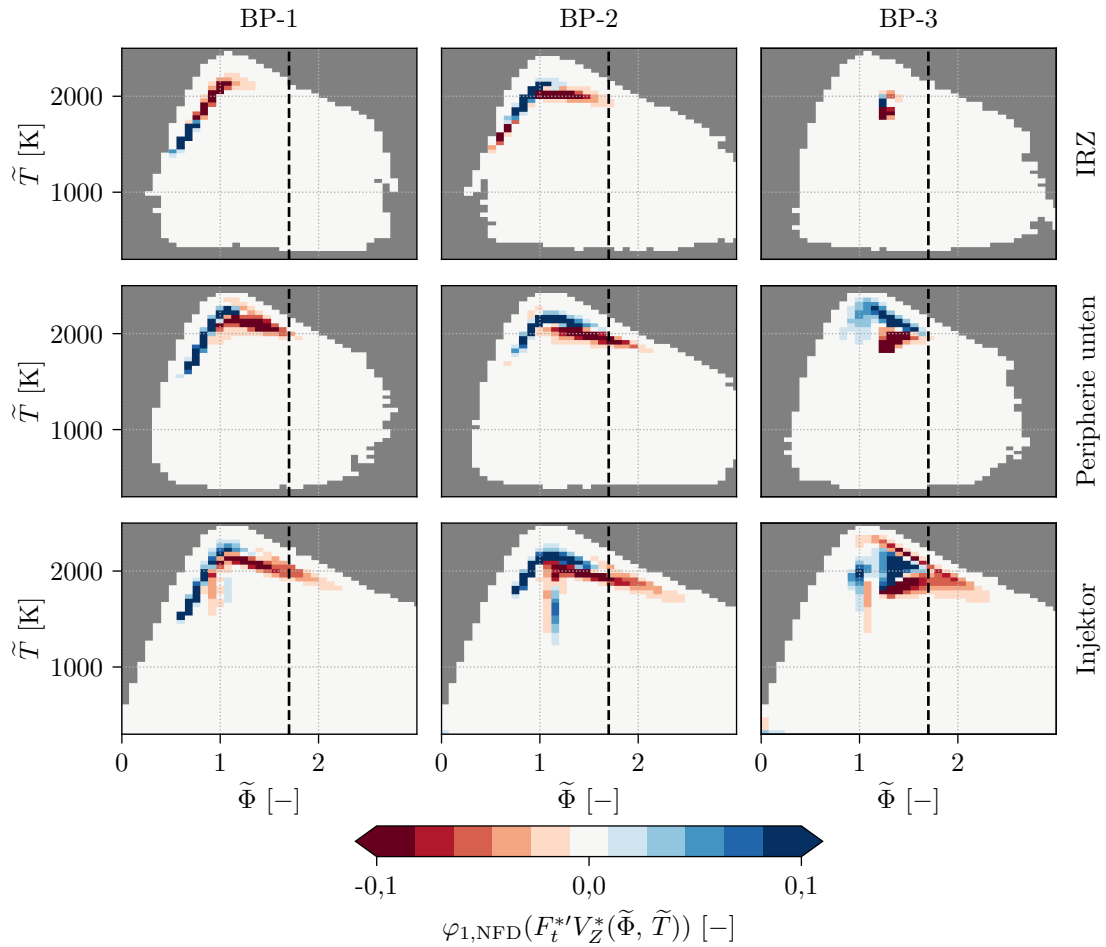


**Abbildung 7.25:** Normierter Energiegehalt  $E^*$  der ersten NFD-gefilterten MRPOD-Moden der Äquivalenzverhältnis-Temperatur Statistik  $F_t'^* V_Z^*(\tilde{\Phi}, \tilde{T})$  berechnet in einem Volumen in Injektornähe (Inj), im unteren Teil der Peripherie (Pu) und in der IRZ. Die Linien dienen nur zur Orientierung.

Temperatur Statistiken zur allgemeinen Darstellung der Prozesse in der Brennkammer konnte bereits demonstriert werden (vgl. Abb. 7.14). Um die zeitliche Dynamik dieser Statistiken zu untersuchen, wird nachfolgend MRPOD auf den Schwankungsanteil der zeitlich aufgelösten, zellvolumengewichteten Statistiken  $F_t'^* V_Z^*(\tilde{\Phi}, \tilde{T})$  angewandt (vgl. Gl. (4.13)). Die Statistiken werden in den in Abb. 7.14 gezeigten Volumen gebildet. Im Unterschied zur Modenanalyse von Variablen im physikalischen Raum unterdrückt die Modenanalyse von Statistiken den Einfluss von Phänomenen, die den zeitlichen Verlauf der Statistik im betrachteten Volumen nicht ändert. Dadurch werden beispielsweise Turbulenz und der PVC nicht von der Modenanalyse erfasst. Wie im vorangegangenen Abschnitt kommt auch hier nur der NFD-Filter des MRPOD-Verfahrens zum Einsatz.

Abbildung 7.25 zeigt die normierte Energie der NFD-gefilterten  $F_t'^* V_Z^*(\tilde{\Phi}, \tilde{T})$ -Moden an den für die Rußevolution wichtigsten Positionen in der MBK: der IRZ, in Injektornähe (Inj) und im unteren Teil der Peripherie (Pu). Die Normierung wurde für jede Position einzeln durchgeführt. Durch den geringeren Einfluss von PVC und Turbulenz bilden die NFD-Moden bereits einen signifikanten Teil der gesamten Energie ab (Inj:  $> 67\%$ , Pu:  $> 48\%$ , IRZ:  $> 85\%$ ). Daher weisen die ersten Moden auch deutlich mehr Energie auf, als die Moden der bisher betrachteten Variablen (vgl. Abb. 7.18). Am meisten Energie enthält an allen BP die erste Mode in der IRZ ( $E_1^* > 30\%$ ). In den Bereichen, in denen Rußbildung und -wachstum auftritt, nämlich in Injektornähe und im unteren Teil der Peripherie, beträgt der Energiegehalt der ersten Mode immer noch mehr als  $15\%$  der gesamten Energie. Da die nächsten Moden in allen BP schon deutlich weniger Energie enthalten, beschränkt sich die nachfolgende Analyse auf die erste Mode.

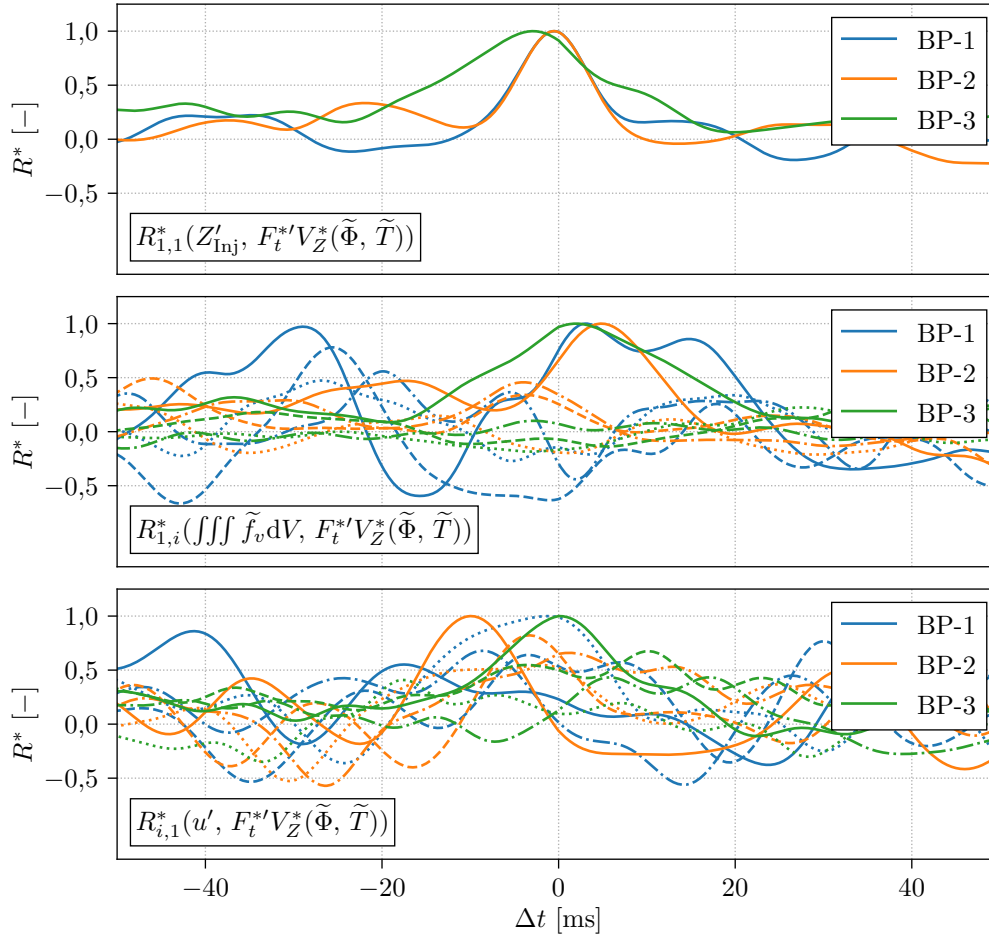
Abbildung 7.26 vergleicht die räumlichen Moden  $\varphi_{1,\text{NFD}}^*(F_t'^* V_Z^*(\tilde{\Phi}, \tilde{T}))$  in den drei Bereichen zwischen den drei BP. Die unterschiedlichen Betriebsbedingungen werden von der Form der Moden widerspiegelt. Die Form der Moden in BP-1 und BP-2 ist relativ ähnlich, wobei der höhere Brennstoffmassenstrom in BP-2 eine Verschiebung der Moden zu einem höherem  $\tilde{\Phi}$  verursacht. Die Form der Moden in BP-3 unterscheidet sich deutlich, da brennstoffarme Bereiche von der Dynamik kaum beeinflusst werden. In der IRZ ist der größte Einfluss der Sekundärlufteinblasung zu erkennen, da hier die Statistik in BP-3 kaum von den NFD beeinflusst wird. Experimentell wurde in BP-1 die Rezirkulation sowohl von magerem als auch von brennstoffreichem, verbranntem Fluid beobachtet [145, 233]. Die erste Mode in der IRZ spiegelt dieses Verhalten sowohl in BP-1 als auch in BP-2 wider. Allerdings beeinflusst sie in keinem BP den für Rußbildung und -wachstum relevanten Bereich von



**Abbildung 7.26:** Erste NFD-gefilterte MRPOD-Mode der Äquivalenzverhältnis-Temperatur Statistik  $F_t^*/V_Z^*(\tilde{\Phi}, \tilde{T})$  berechnet in drei verschiedenen Volumina. - - -  $\Phi = 1,7$ .

$\Phi > 1,7$ . Das ändert sich im unteren Teil der Peripherie und vor allem in Injektornähe. Die Moden ähneln sich in den beiden Bereichen, decken im unteren Teil der Peripherie aber einen kleineren  $\tilde{\Phi}$ -Bereich ab, da das Fluid hier schon besser gemischt ist. In Injektornähe beeinflusst die Mode in allen BP den Bereich von  $\Phi > 1,7$ . Im unteren Teil der Peripherie ist dies nur bei BP-2 zu beobachten. Rußbildung und -wachstum werden also von diesen Moden, die einen hohen Energiegehalt aufweisen, beeinflusst.

Abbildung 7.27 überprüft die Relevanz der  $a_{1,\text{NFD}}(F_t^*/V_Z^*(\tilde{\Phi}, \tilde{T}))$ -Mode durch Kreuzkorrelation. Die Korrelation mit den zuvor analysierten  $a_{1,\text{NFD}}(Z'_{\text{Inj}})$ -Moden ist in allen BP signifikant, was bedeutet, dass beide Moden das gleiche Phänomen beschreiben. Daher ist auch eine klare Korrelation zwischen dem Rußvolumen in der Brennkammer und der ersten Mode in der Äquivalenzverhältnis-Temperatur Statistik zu sehen, während die Korrelation für die höheren Moden wesentlich geringer ist. Jedoch ist die Korrelation im Vergleich zur Korrelation zwischen  $a_{1,\text{NFD}}(Z'_{\text{Inj}})$  und dem Rußvolumen in der Brennkammer (vgl. Abb. 7.24) etwas geringer da  $F_t^*/V_Z^*(\tilde{\Phi}, \tilde{T})$  eine generellere Variable ist und mehr Energie enthält. Die Korrelation zwischen  $a_{1,\text{NFD}}(F_t^*/V_Z^*(\tilde{\Phi}, \tilde{T}))$  und den Geschwindigkeitsmoden führt zur gleichen Schlussfolgerung wie schon für  $Z'_{\text{Inj}}$ . Die Korrelation zwischen der Äquivalenzverhältnis-Temperatur Statistik Mode und den symmetrischen Moden im Geschwindigkeitsfeld ist am besten.



**Abbildung 7.27:** Normierte Kreuzkorrelation der ersten NFD-Moden der Äquivalenzverhältnis-Temperatur Statistik  $F_t^* V_Z^*(\tilde{\Phi}, \tilde{T})$  mit dem Mischungsbruch am Injektor (oben), dem Rußvolumen in der Brennkammer (mitte) und der Geschwindigkeit (unten). —  $i = 1$ , ---  $i = 2$ , .....  $i = 3$ , .....  $i = 4$ .

Zusammengefasst stellt die Modenanalyse der Dynamiken der Äquivalenzverhältnis-Temperatur Statistik eine hilfreiche Ergänzung dar. Sie konnte die Ergebnisse der vorangegangenen Modenanalyse von Variablen im physikalischen Raum verifizieren und darüber hinaus auch bestätigen. Diese Übereinstimmung untermauert die Schlussfolgerung, dass die Intermittente des Rußverhalten in allen BP auf die gleiche Weise über den Mischungsbruch in Injektornähe mit den NFD im Strömungsfeld verbunden ist.

### 7.3.5 Zusammenfassung der Analyse

Die MRPOD-Analyse aller BP der MBK hat gezeigt, dass der PVC und die NFD die dominanten Dynamiken der Brennkammer sind. Die Rußevolution ist gerade in BP-1 und BP-3, die nahe am Rußlimit liegen, vom PVC und dessen Einfluss auf die Mischung hinter dem Primärinjektor abhängig. Sein Einfluss ist bei jedem BP gleich. Während er in der IRZ, nahe des Injektors zu chemischen Reaktionen beiträgt, beeinflusst er die Spezies außerhalb der IRZ nur durch konvektiven Transport. Insgesamt verdeutlicht diese Analyse, dass die Rußintermittenz an allen BP von der nicht-linearen Antwort der Rußchemie auf kleine, niederfrequente Änderungen des Mischungs-

bruchs nahe des Primärinjektors verursacht wird. Diese wiederum sind mit symmetrischen Moden im Geschwindigkeitsfeld verknüpft. Der chaotische Einfluss der Sekundärlufteinblasung erklärt das intermittierende Verhalten von BP-1 und BP-2 gegenüber BP-3. Der erhöhte Brennstoffmassenstrom in BP-2 führt allerdings dazu, dass die Amplitude der Intermittenz geringer wird. Insgesamt zeigt die Analyse den immensen Einfluss der Dynamiken im Strömungsfeld auf die Rußevolution. Um das Rußverhalten der MBK in zukünftigen Simulationen korrekt vorhersagen zu können, ist ihre akkurate Vorhersage daher die notwendige Basis.

Für die Auslegung neuer, rußarmer Brennkammern können trotz der ausführlichen Analyse kaum Handlungsempfehlungen abgeleitet werden. Dies liegt daran, dass das Brennstoff-Luft-Verhältnis der MBK zwischen dem einer RQL-Brennkammern und dem einer mageren Vormischbrennkammern liegt und somit keines der üblichen Brennkammerdesigns in der Luftfahrt repräsentiert. Außerdem wirkt die Sekundärlufteinblasung anders als in RQL-Brennkammern hauptsächlich verdünnend auf das Rückströmgebiet, wodurch die generelle Rußneigung abnimmt, statt den Ruß im hinteren Teil der Brennkammer großflächig zu oxidieren. Die hohe Intermittenz der Sekundärlufteinblasung, die durch die Analyse gezeigt wurde, wird durch den bauartbedingten Staupunkt begünstigt, was für einen stabilen Betrieb industrieller Brennkammern unvorteilhaft wäre. Die Analyse verdeutlicht außerdem wie der Betrieb der MBK nahe der Rußgrenze die Rußintermittenz fördert, da die nicht-lineare Rußchemie bei solchen Äquivalenzverhältnissen sehr sensitiv auf kleine Änderungen der Mischung reagiert. Ein stabiles Rußverhalten der Brennkammer kann dadurch nicht gewährleistet werden. Insgesamt hat sich die MRPOD-Analyse als sehr nützlich erwiesen, um die Rußevolution besser zu verstehen. Das in dieser Arbeit entwickelte Vorgehen zu dessen Anwendung kann zukünftig ohne Anpassungen für Analysen der Rußevolution in weiteren Brennkammern genutzt werden.

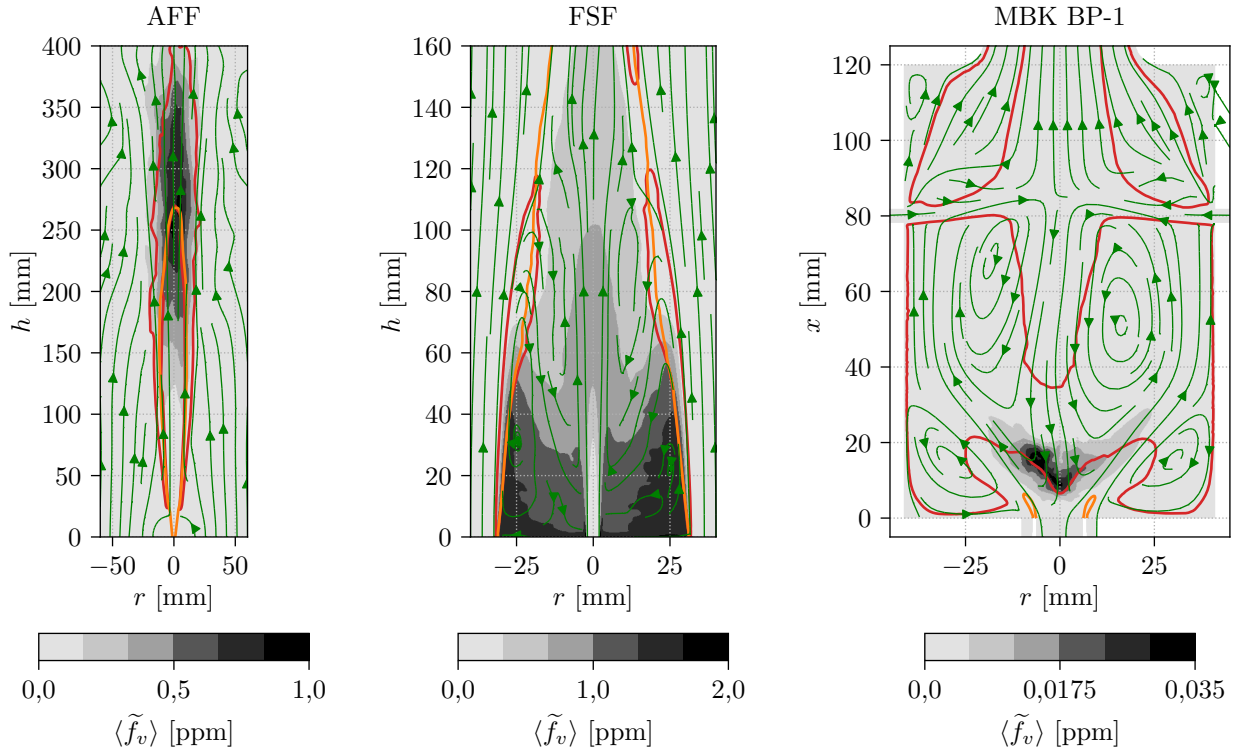
# 8 Synthese

Durch den Einsatz des identischen Rußmodells in unterschiedlichen turbulenten Flammen bietet sich die Gelegenheit zu einem ausführlichen Vergleich der Rußevolution in diesen Flammen. Der Vergleich in Abschnitt 8.1 dient dazu, ein besseres Verständnis der Rußevolution zu gewinnen und dadurch zukünftige Validierungsexperimente und potenzielle Modellverbesserungen zu identifizieren. Dazu werden auch die laminaren Flammen, mit denen das DLR-Rußmodell validiert wurde [70] mit einbezogen. So kann festgestellt werden, ob die Modellvalidierung zur Anwendung in turbulenten Flammen ausreichend ist. Die für den Einsatz in LES relativ hohe Komplexität des DLR-Rußmodells erlaubt es auch PSDs auszuwerten. Deshalb dient der Vergleich in Abschnitt 8.2 dazu, das Verständnis der Evolution der PSD in turbulenten Flammen zu verbessern, die bisher nur isoliert in einzelnen Flammen betrachtet wurde.

Abbildung 8.1 verdeutlicht die Unterschiede der untersuchten turbulenten Flammen mit Hilfe zeitlich gemittelter Größen. Das Maximum des mittleren Rußvolumenbruchs variiert um über eine Größenordnung. Während Ruß in der AFF in heißen oder brennstoffreichen Bereichen der Hauptströmung der Flamme auftritt, findet sich Ruß in der FSF hauptsächlich im kälteren dafür aber sehr brennstoffreichen Rückströmgebiet. Auch in der Modellbrennkammer liegen die höchsten Rußkonzentrationen nahe des Rückströmgebiets in der inneren Scherschicht. Im Vergleich zu den Strahlflammen sind die Temperaturen wesentlich höher und die Mischung weniger brennstoffreich. Zusätzlich unterscheidet die in Abschnitt 7.3 beschriebene hohe Rußintermittenz und der Druck von drei bar die MBK von den Strahlflammen. Um diese erheblichen Unterschiede besser zusammenzufassen, werden in Abschnitt 8.1 korrelierte Statistiken, analysiert. So lassen sich die Teilprozesse der Rußevolution, die in den Flammen räumlich und zeitlich getrennt auftreten können, besser vergleichen.

## 8.1 Statistische Analyse

Die statistische Analyse wird zunächst mit Hilfe von korrelierten Histogrammen über der Temperatur und dem Mischungsbruch beziehungsweise dem Äquivalenzverhältnis durchgeführt. Diese Variablen sind relativ unempfindlich gegenüber Modellierungsunsicherheiten des Rußmodells. Trotzdem müssen Modelleinflüsse, die Vorhersagequalität der Simulationen und die Tatsache, dass nur die gefilterten Variablen betrachtet werden können, beachtet werden. Um spezielle Aspekte der Rußmodellierungen zu betrachten, werden im Verlauf der Analyse Histogramme für weitere Variablen ausgewertet.



**Abbildung 8.1:** Vergleich gemittelter Größen der untersuchten turbulenten Flammen.  $\rightarrow$  Stromlinien des gemittelten Geschwindigkeitsfelds,  $\text{---}$   $2 \cdot \langle \tilde{Z}_{st} \rangle$ ,  $\text{---}$   $0,8 \cdot \langle \tilde{T} \rangle_{\max}$ .

### 8.1.1 Laminare Validierungsflammen

Zunächst werden die laminaren Flammen betrachtet, mit denen das DLR-Rußmodell von Eberle [70] validiert wurde. Diese können in vier Gruppen unterteilt werden:

- Vorgemischte Flammen von Tsurikov et al. [248] zwischen  $2,05 \leq \Phi \leq 2,5$  und  $1 \leq p \leq 5$  bar.
- Teilvorgemischte Diffusionsflammen von McEnally und Pfefferle [157] zwischen  $3 \leq \Phi \leq \infty$  bei  $p = 1$  bar.
- Nicht vorgemischte Diffusionsflammen von Santoro et al. [207] bei verschiedenen Luft- und Brennstoffmassenströmen mit  $\Phi = \infty$  und  $p = 1$  bar (F1-F4, F7). Das DLR-Rußmodell wurde ausführlich in der sogenannten nicht rauchenden Flamme (F2) und der rauchenden Flamme (F4) validiert.
- Teilvorgemischte Diffusionsflammen von Arana et al. [4], die der Santoro-F2 Flamme entsprechen ( $p = 1$  bar) und bei denen die Vormischung zwischen  $5 \leq \Phi \leq 24$  variiert.

Alle Diffusionsflammen wurden als Gleichstromdiffusionsflammen betrieben und sind Teil der ISF-Datenbank [118]. Außerdem wurden von Eberle [70] Stoßrohrexperimente [250] ( $\Phi = \infty$ ;  $1600 < T < 2450$  K) und Reaktorexperimente [153] ( $1,8 \leq \Phi \leq 2,2$ ;  $1400 < T < 1713$  K) zur Validierung verwendet, die in der nachfolgenden Analyse nicht betrachtet werden.

Die Rußvorhersage in den vorgemischten Flammen ist auf Grund der numerischen Modellierung sehr sensitiv gegenüber den thermischen Randbedingungen und den Einströmrandbedingungen.

Entsprechend hoch sind die Unsicherheiten in der Rußvorhersage in solchen Flammen. Das DLR-Rußmodell liefert meist Ergebnisse im Bereich der Messunsicherheit, wobei die Übereinstimmung bei Äquivalenzverhältnissen nahe der Rußgrenze ( $\Phi \approx 1,7$ ) abnimmt. Bei den nicht-vorgemischten Santoro-Flammen ist die Rußvorhersage des DLR-Rußmodells sehr gut. Auch der Einfluss der Vormischung auf die Santoro F2-Flamme wird vom DLR-Rußmodell gut wiedergegeben. Die größten Abweichungen zeigt es im Vergleich zur Rußverteilung auf der Achse der McEnally-Flammen. Dies wird auf die sensitive PAH-Chemie, die auf der Achse der laminaren Diffusionsflammen einen starken Einfluss hat, begründet [70]. Das DLR-Rußmodell liefert also bei allen Flammen plausible Ergebnisse, weshalb keine Flamme bei der nachfolgenden Analyse ausgeschlossen wird.

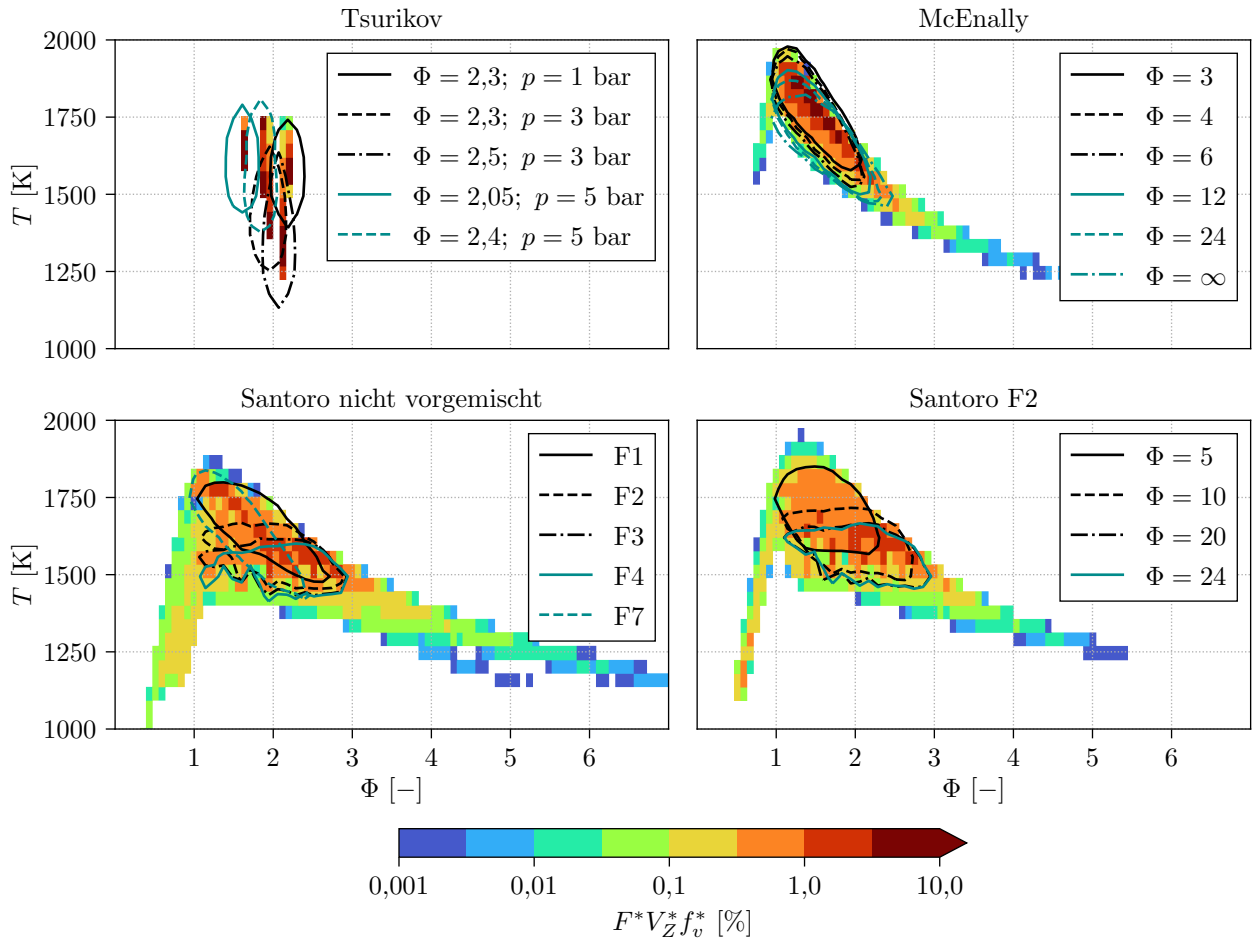
### 8.1.1.1 Rußpräsenz

Abbildung 8.2 fasst die Rußevolution der Validierungssimulationen in einem normierten, mit  $f_v$  gewichteten Temperatur-Äquivalenzverhältnis-Histogramm zusammen. Die Statistik umfasst alle Betriebspunkte der jeweiligen Flamme. Geglättete Isolinien kennzeichnen die einzelnen Betriebspunkte. Bei den Simulationen der vorgemischten Tsurikov-Flammen wurden die Temperaturen in der gesamten Flamme und das Äquivalenzverhältnis am Einlass vorgegeben. Die kleinen Abweichungen im  $\Phi$ , die das Histogramm zeigt, werden durch Diffusionseffekte verursacht. Bedingt durch die starke Thermodiffusion nahe des Einlasses ist Ruß im Vergleich zu den anderen Flammen auch bei deutlich niedrigeren Temperaturen zu finden. Rußevolution bei  $T > 1750$  K wird von den Tsurikov-Flammen nicht abgebildet. Im Gegensatz dazu ist Ruß in den teilvorgemischten McEnally-Flammen auch bei höheren Temperaturen zu finden, was mit der Zunahme der Vormischung korreliert. In diesen Flammen ist eine signifikante Rußpräsenz ( $F^*V_Z^*f_v^* > 1\%$ ) zwischen  $1 \leq \Phi \leq 2,5$  zu finden. Diese liegt damit relativ nahe an der Rußgrenze vorgemischter Ethylenflammen von  $\Phi \approx 1,7$ . Dagegen findet sich Ruß bei den teilvorgemischten Santoro F2-Flammen bei höheren  $\Phi$ , aber geringeren Temperaturen. Die nicht-vorgemischten Santoro-Flammen decken die Rußevolution im größten  $\Phi$ -Bereich ab. Sie beinhalten, bedingt durch die rauchenden Flammen, neben Rußpräsenz in sehr brennstoffreichen Gebieten auch eine geringe Rußpräsenz bei brennstoffarmen  $\Phi$ . Ruß tritt in reinen Diffusionsflammen hauptsächlich an der brennstoffreichen Innenseite der Flamme auf, weshalb Ruß mit steigendem  $\Phi$  bei niedrigeren Temperaturen vorhanden ist.

Zusammengefasst decken alle Flammen unterschiedliche  $\Phi$ - $T$ -Bereiche ab. Eine Teilvormischung erhöht die Temperatur bei der Ruß auftritt, wobei Temperaturen größer als 1800 K nur von den McEnally-Flammen erreicht werden. Die Äquivalenzverhältnisse, bei denen Ruß am stärksten vorkommt, liegen zwischen  $1 \leq \Phi \leq 3$ . Nur in den nicht-vorgemischten Flammen tritt Ruß in geringem Maße bei höheren Äquivalenzverhältnissen auf.

### 8.1.1.2 Rußquellterme

Abbildung 8.3 zeigt, in welchem Bereich des  $\Phi$ - $T$ -Raumes die einzelnen Teilmechanismen der Rußchemie aktiv sind. Dazu ist die Statistik zusätzlich zum entsprechenden Rußquellterm  $S_{s,\alpha}^*$  und dem Zellvolumen  $V_Z^*$  mit der Aufenthaltszeit  $t_{\text{res}}^*$  gewichtet. Die Oberflächenreaktivität des Rußes und die Kollisionseffizienz mit dem OH-Radikal  $\alpha$  (Gl. (3.15)) sind temperaturabhängig modelliert, was einen großen Einfluss auf die Rußvorhersage haben kann. Daher ist die zugehörige tempera-



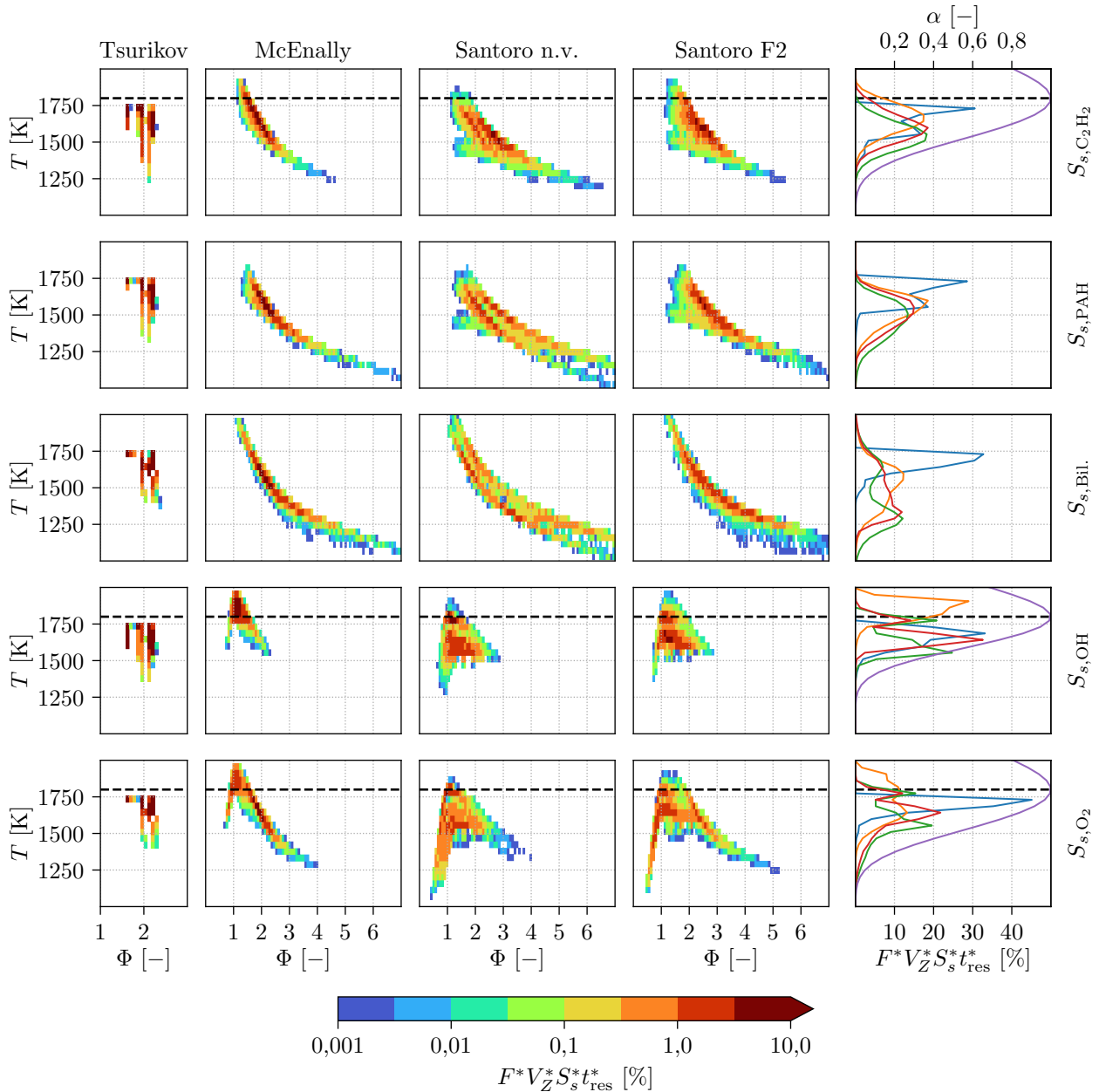
**Abbildung 8.2:** Rußvolumenbruch-gewichtete Histogramme im  $\Phi$ - $T$ -Raum der laminaren Validierungsflammen. Die verschiedenen Betriebspunkte der Flammen sind in der jeweiligen Statistik zusammengefasst. Geglättete  $F^*V_Z^*f_v^*$ -Isolinien zeigen die einzelnen Betriebspunkte.

turabhängige Funktion bei den jeweiligen Reaktionen zusammen mit dem Temperaturhistogramm aufgetragen. Die maximale Oberflächenreaktivität und die maximale Ruß-OH Kollisionseffizienz liegen im DLR-Rußmodell bei  $T_{\alpha,max} = 1800$  K.

Bei den vorgemischten Flammen finden alle Prozesse der Rußchemie, außer der Rußoxidation durch OH, bei höheren Temperaturen als bei den Diffusionsflammen statt. Rußbildung und -oxidation treten bei Vormischung im Bereich des steilen Temperaturanstiegs im vorderen Teil der Flamme auf und sind deshalb besonders empfindlich auf die in der Simulation vorgegebenen thermischen Randbedingung. Das stärkste Rußwachstum ist im hinteren Teil der Flamme bei fast konstanter Temperatur zu beobachten, da der Ruß hier nur schwach durch Thermodiffusion von der Reaktionszone weg transportiert wird. Deshalb zeigen die Temperaturhistogramme aller Rußquellterme ein Maximum nahe der maximalen Flammentemperatur.

Rußwachstum durch Acetylenadsorption ( $S_{s,C_2H_2}$ ) ist bei allen Flammen auf  $T < 1800$  K beschränkt und beginnt schon bei  $\Phi \approx 1,5$ . Die Temperaturhistogramme der Diffusionsflammen sind zwar alle gaußförmig, aber nicht identisch, was zeigt, dass der Oberflächenreaktivitätsparameter  $\alpha$  nicht dominiert. Rußwachstum durch PAH-Adsorption ( $S_{s,PAH}$ ) findet in allen Diffusionsflammen bei sehr ähnlichen Temperaturen statt. Im Unterschied zur Acetylenadsorption und zur Rußoxidation enthält die Modellierung der PAH-Adsorption keinen temperaturabhängigen Parameter. Dies





**Abbildung 8.3:** Rußquelltermgewichtete Histogramme im  $\Phi$ - $T$ -Raum ( $F^*V_Z^*S_s^*t_{res}^*(\Phi, T)$ ) der laminaren Validierungsflammen. Die verschiedenen Betriebspunkte der Flammen sind in der jeweiligen Statistik zusammengefasst.  $F^*V_Z^*S_s^*t_{res}^*(T)$  Histogramme (rechte Spalte) für: — Tsurikov, — McEnally, — Santoro nicht-vorgemischt (n.v.), — Santoro F2, — Oberflächenaktivität  $\alpha$ . ---  $T = 1800 K$ .

zeigt die ähnlichen Verhältnisse der Diffusionsflammen bezüglich der PAH-Chemie bei Rußpräsenz. Im Gegensatz zu den Kollisionsreaktionen ist die Rußbildung ( $S_{s,Bil.}$ ) komplett von der Präsenz von PAH-Radikalen abhängig. Sie findet, je nach Flamme, bei sehr unterschiedlichen Temperaturen statt. PAH-Adsorption und Rußbildung haben allerdings gemein, dass sie, im Unterschied zur Acetylenadsorption auch bei hohen Äquivalenzverhältnissen ( $\Phi > 3,5$ ) auftreten. Die Rußwachstumsprozesse in den nicht-vorgemischten Santoro-Flammen fallen im Gegensatz zu den anderen Diffusionsflammen nicht in einem Bereich zusammen, sondern bilden zwei getrennte Gebiete hoher Wahrscheinlichkeiten. Dies liegt an Flamme F7, bei der der Brennstoff mit Stickstoff verdünnt

Flamme	$\frac{S_{s,C_2H_2}}{S_{s,Wachs.}}$	$\frac{S_{s,PAH}}{S_{s,Wachs.}}$	$\frac{S_{s,Bil.}}{S_{s,Wachs.}}$	$\frac{S_{s,OH}}{S_{s,Ox.}}$	$\frac{S_{s,O_2}}{S_{s,Ox.}}$
Tsurikov	84,0 - 96,3	3,5 - 15,9	0,1 - 0,3	90,7 - 99,3	0,7 - 9,3
McEnally	60,9 - 64,8	34,1 - 38,3	0,1 - 2,1	99,4 - 99,5	0,5 - 0,6
Santoro F2	68,3 - 71,1	28,8 - 31,5	0,1	98,3 - 99,2	0,8 - 1,7
Santoro n.v.	59,8 - 64,0	35,9 - 39,9	0,1 - 0,2	96,9 - 99,3	0,7 - 3,1

**Tabelle 8.1:** Räumlich gemittelte, zellvolumen- und aufenthaltszeitgewichtete Rußquellterme in den laminaren Validierungsflammen in Prozent. Der Einfluss der Betriebspunkte zeigt sich in der Spanne der zugehörigen Quellterme.

ist, wodurch die adiabate Flammentemperatur absinkt. Rußwachstum findet sich in dieser Flamme aber nicht bei kälteren Temperaturen, sondern bei den gleichen Temperaturen wie in den anderen Santoro-Flammen und ist daher zu kleineren Äquivalenzverhältnissen verschoben. Die Chemie des Rußwachstums scheint in den laminaren Diffusionsflammen daher deutlich stärker von der Temperatur als vom Äquivalenzverhältnis bestimmt zu sein.

Die Rußoxidation durch das OH-Radikal ( $S_{s,OH}$ ) unterscheidet sich zwischen den Diffusionsflammen stärker als die Wachstumsprozesse und korreliert stärker mit der Rußpräsenz in den jeweiligen Flammen (vgl. Abb. 8.2). Bei den teilvorgemischten McEnally-Flammen tritt Rußoxidation durch OH hauptsächlich bei  $T > 1800$  K und  $1 \leq \Phi \leq 1,5$  auf. Dieser Bereich ist auch bei den Santoro-Flammen zu erkennen, wenn auch zu  $T < 1800$  K verschoben. Dort existiert Rußoxidation auch in einem zweiten Bereich, der bei noch niedrigeren Temperaturen liegt und einen weiteren  $\Phi$ -Bereich abdeckt. Er wird dadurch verursacht, dass Ruß die Flammen im hinteren Teil durchbricht und die Flamme durch Strahlung stark abkühlt. Die Unterschiede der Diffusionsflammen finden sich auch in der Rußoxidation durch molekularen Sauerstoff ( $S_{s,O_2}$ ). Im Vergleich zur Rußoxidation durch OH wird ein breiterer  $\Phi$ -Bereich abgedeckt und der Oxidationsquellterm ist noch bei niedrigeren Temperaturen aktiv. Der gleichzeitige Anstieg in den Temperaturhistogrammen der Diffusionsflammen deutet auf eine Abhängigkeit von der Oberflächenreaktivität  $\alpha$  bei niedrigen Temperaturen hin. Jedoch unterscheiden sie sich im Bereich hoher Oxidationsraten, wo der Einfluss von  $\alpha$  geringer ist.

Die Quelltermanalyse in Tab. 8.1 verdeutlicht, wie ähnlich die Anteile der verschiedenen Rußquellen in den Diffusionsflammen sind. Die größten Unterschiede finden sich in der Rußbildung. Deren Anteil am Rußwachstum ist in den McEnally-Diffusionsflammen durch stärkere partielle Vormischung am stärksten. Die Oxidation wird in allen Flammen komplett von OH dominiert. Der Anteil von Acetylenadsorption am Rußwachstum ist ungefähr doppelt so hoch wie der Anteil der PAH-Adsorption. Der Rußquellterm in den Vormischflammen wird durch die höheren Temperaturen im Rußwachstumsbereich noch stärker von Acetylenadsorption dominiert.

Auf Grund der Modellierungsunsicherheiten spiegelt die Quelltermanalyse zu einem Teil auch die Wirkungsweise des Rußmodells wider. So ist der dominante Einfluss der OH-Oxidation zwar bekannt, andere Rußmodelle zeigen aber einen größeren Anteil an Oxidation durch Sauerstoff (z.B. [126]). Auch die Rußbildung tritt im DLR-Rußmodell über einen sehr weiten Temperaturbereich und bei erstaunlich geringen Temperaturen auf ( $T < 1300$  K). Dagegen fällt positiv auf, dass die temperaturabhängige Modellierung der Oberflächenaktivität die Quellterme nicht zu dominieren scheint. Deren Form konnte mit Ausnahme der Rußoxidation durch OH in den McEnally-Flammen leider nur im Bereich  $T < T_{\alpha,max}$  validiert werden.

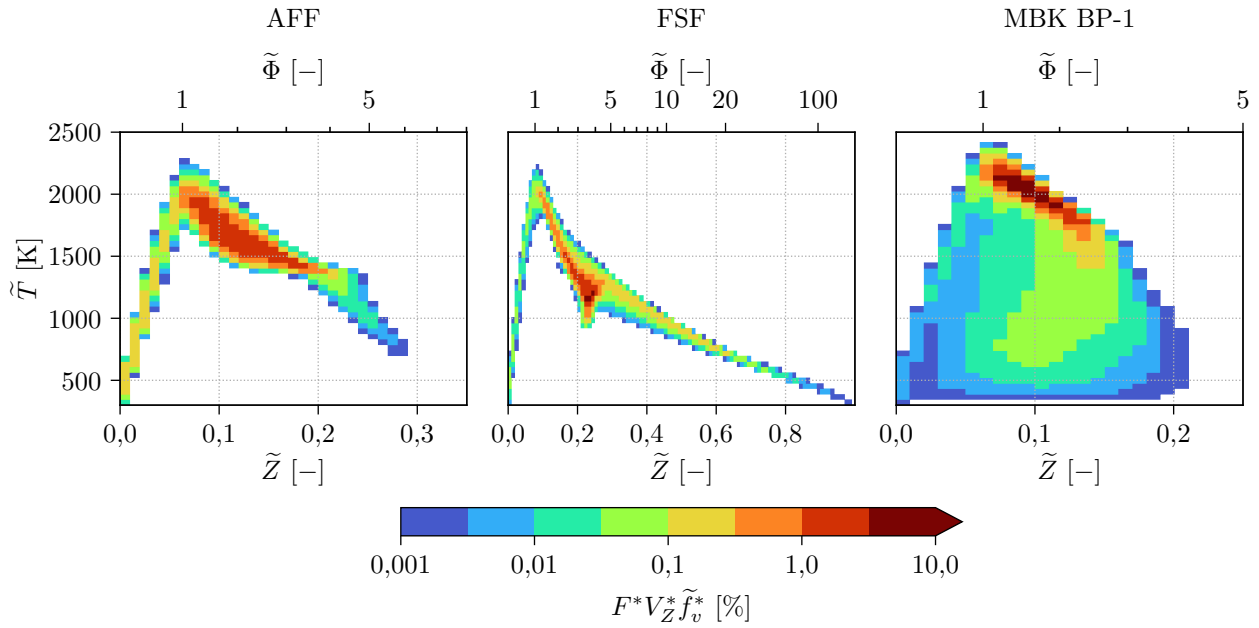
Der Vergleich der laminaren Validierungsflammen zeigt, dass das DLR-Rußmodell über einen sehr großen Bereich gut validiert ist. Die Beschränkung der Diffusionsflammen auf  $T < 1800$  K verdeutlicht, wie wichtig Stoßrohrexperimente, die auch höhere Temperaturen abbilden können, zur Modellvalidierung sind. Dies gilt auch für einige vorgemischte Flammen, bei denen jedoch meist große Unsicherheiten in den numerischen Randbedingungen bestehen. In Gegenstromdiffusionsflammen kann die Rußoxidation unter bestimmten Betriebsbedingungen vernachlässigt werden [179], was für eine zukünftige gesonderte Validierung der Teilmechanismen des Rußmodells interessant sein könnte. Auch in inversen Diffusionsflammen sind Rußwachstum und -oxidation entkoppelt [54]. Experimente im Strömungsreaktor können Informationen über Spezieskonzentrationen, die PSD und Reaktionsraten, beispielsweise  $S_{s,O_2}$ , liefern [15], sind aber bauartbedingt auf niedrigere Temperaturen beschränkt. Im Hinblick auf den Einsatz in realen Brennkammern wären Diffusionsflammen bei höheren Drücken [118] eine nützliche Ergänzung zu den vorgemischten Flammen mit erhöhtem Druck.

## 8.1.2 Turbulente Flammen

### 8.1.2.1 Rußpräsenz

Abbildung 8.4 vergleicht die Rußpräsenz in den turbulenten Flammen im  $\tilde{Z}$ - $\tilde{T}$ -Histogramm. Dadurch können, im Vergleich zum bisher genutzten  $\tilde{\Phi}$ - $\tilde{T}$ -Histogramm, sehr brennstoffreiche Gebiete visualisiert werden. Der Vergleich bezieht lediglich BP-1 der MBK mit ein, da sich die drei Betriebspunkte der MBK im  $\tilde{\Phi}$ - $\tilde{T}$ -Histogramm nur wenig unterscheiden (vgl. Abb. 7.14). Die AFF ähnelt den laminaren Diffusionsflammen am meisten, da Ruß hauptsächlich zwischen  $1 \leq \tilde{\Phi} \leq 4$  auftritt. Im Unterschied zu den laminaren Flammen ist Ruß auch bei  $\tilde{T} > 1800$  K zu finden. In der FSF verursachen die Verdünnung des Brennstoffs und die Rezirkulationszone mit hohen Wärmeverlusten eine Verschiebung der Rußpräsenz zu kleineren Temperaturen. Hauptsächlich findet sich Ruß in der sehr brennstoffreichen Rezirkulationszone, die im  $\tilde{Z}$ - $\tilde{T}$ -Histogramm gut bei  $\tilde{Z} \approx 0,23$  zu erkennen ist. Die Mischung von rezirkuliertem Ruß und einströmendem Brennstoff nahe der Achse bedingt die Rußpräsenz bei sehr hohem  $\tilde{Z}$ , aber niedrigen Temperaturen. Im Gegensatz dazu findet sich Ruß in der MBK nur bei  $\tilde{\Phi} \leq 3$  und bei noch höheren Temperaturen als in den beiden Strahlflammen. Wie bei der FSF führt die Mischung mit einströmendem Fluid zur Rußpräsenz bei niedrigeren Temperaturen.

Die unterschiedlichen Betriebsbedingungen der turbulenten Flammen bewirken also, dass sich die Rußpräsenz nicht nur im physikalischen Raum (vgl. Abb. 8.1) sondern auch im  $\tilde{Z}$ - $\tilde{T}$ -Raum stark unterscheidet. Im Vergleich zu den laminaren Validierungsflammen führen turbulente Mischung und Rezirkulation dazu, dass die Rußevolution in einem größeren  $\tilde{Z}$ - $\tilde{T}$ -Bereich, vor allem aber bei höheren Temperaturen und höheren Äquivalenzverhältnissen, stattfindet. Es ist zu erwarten, dass diese Diskrepanz in realen Triebwerksbrennkammern durch Vorheizung und höhere Reynoldszahlen noch zunimmt. Der Vergleich zeigt, dass eine Rußmodellvalidierung an laminaren Flammen notwendig, aber nicht ausreichend ist.

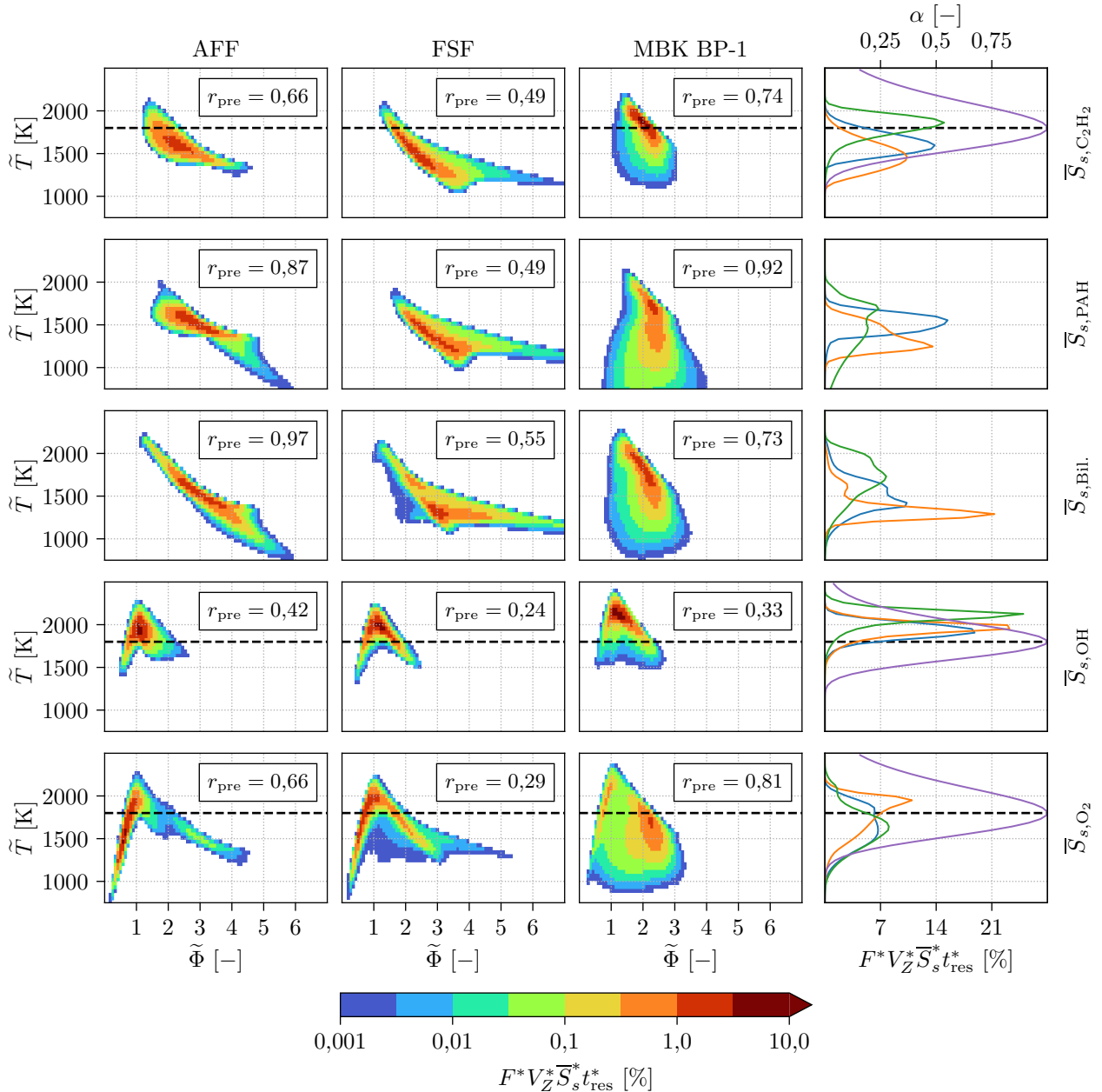


**Abbildung 8.4:** Rußvolumenbruch-gewichtete Histogramme im  $\tilde{Z}$ - $\tilde{T}$ -Raum der turbulenten Flammen.

### 8.1.2.2 Rußquellterme

Abbildung 8.5 vergleicht die Teilmechanismen der Rußchemie in den turbulenten Flammen im  $\tilde{\Phi}$ - $\tilde{T}$ -Raum. Zusätzlich ist das jeweilige Vormischverhältnis  $r_{\text{pre}}$  (Gl. (4.15)) gegeben. Obwohl Brennstoff und Oxidator bei allen Flammen nicht-vorgemischt zugeführt werden, bedingt die turbulente Mischung, dass mindestens 49 % aller Rußbildungs- und -wachstumsprozesse im vorgemischten Regime stattfinden. In der AFF führt die Sauerstoffpräsenz auf der Achse zu diesem hohen Vormischverhältnis. In der MBK wird es von der guten Mischung des Drallinjektors verursacht. Das Rückströmgebiet der FSF ist hauptsächlich vorgemischt, allerdings findet Rußwachstum auch nahe der durch Diffusion geprägten Hauptreaktionszone statt, was das Vormischverhältnis verringert. Oxidation durch das OH-Radikal tritt dagegen vor allem in nicht-vorgemischten Bereichen der Flamme auf. Bei der Rußoxidation durch Sauerstoff unterscheiden sich die Flammen am stärksten, da in der FSF die nicht-vorgemischte Oxidation dominiert, während es in anderen Flammen gerade umgekehrt ist. Der Vergleich verdeutlicht wie wichtig es ist, dass Rußmodelle in beiden Verbrennungsregimen zuverlässig arbeiten.

Rußwachstum durch Acetylenadsorption ( $\bar{S}_{s,C_2H_2}$ ) findet in den Strahlflammen wie in den laminaren Diffusionsflammen am stärksten zwischen  $1,5 \leq \tilde{\Phi} \leq 3$  statt (vgl. Abb. 8.3). Auch der Temperaturbereich der AFF ähnelt den laminaren Diffusionsflammen, während der Wärmeverlust durch Strahlung im Rezirkulationsgebiet der FSF eine Verschiebung zu kleineren Temperaturen bewirkt. In der MBK findet Rußwachstum durch Acetylenadsorption bei kleinerem  $\tilde{\Phi}$  und, im Gegensatz zu allen untersuchten Flammen, auch signifikant höheren Temperaturen ( $\tilde{T} > 1800$  K) statt. Bei Rußwachstum durch PAH-Adsorption ( $\bar{S}_{s,PAH}$ ) und der Rußbildung ( $\bar{S}_{s,Bil.}$ ) zeigen sich die selben Tendenzen. Allerdings tritt auch in der MBK kein Rußwachstum durch PAH-Adsorption bei  $\tilde{T} \geq 1900$  K auf. Außerdem sind die Unterschiede im Rußwachstum durch PAH-Adsorption in den turbulenten Flammen stärker als bei den laminaren Validierungsflammen.



**Abbildung 8.5:** Rußquelltermgewichtete Histogramme im  $\tilde{\Phi}$ - $\tilde{T}$ -Raum ( $F^*V_Z^*\bar{S}_s^*t_{res}^*(\tilde{\Phi}, \tilde{T})$ ) der turbulenten Flammen.  $F^*V_Z^*\bar{S}_s^*t_{res}^*(\tilde{T})$ -Histogramme (rechte Spalte) für: — AFF, — FSF, — MBK-BP-1, — Oberflächenreaktivität  $\alpha$ . ---  $T = 1800$  K.

Die Rußoxidation durch das OH-Radikal ( $\bar{S}_{s,OH}$ ) unterscheidet sich zwischen den Strahlflammen nicht wesentlich und ist in der MBK lediglich zu höheren Temperaturen verschoben. Sie tritt in allen turbulenten Flammen, wie sonst nur in den McEnally-Flammen, bei  $\tilde{T} > 1800$  K auf. Allerdings wurde die Oberflächenreaktivität der OH-Oxidation zur korrekten Vorhersage des Rauchverhaltens der Santoro-Flammen kalibriert. Diese findet, wie in Abb. 8.3 gezeigt, bei  $1500 \leq T \leq 1750$  und  $1 \leq \Phi \leq 2$  statt. Abbildung 8.5 verdeutlicht, dass dieser Bereich in den turbulenten Flammen nicht relevant ist. Die Oxidation durch Sauerstoff ( $\bar{S}_{s,O_2}$ ) ist bei allen turbulenten Flammen ähnlich und deckt einen breiteren Temperaturbereich und Äquivalenzverhältnisse von bis zu  $\tilde{\Phi} \approx 2$  ab. Generell kann, wie bei den laminaren Flammen, kein dominanter Einfluss von  $\alpha$  im Bereich großer Rußquellterme festgestellt werden.

Flamme	$\frac{\langle \bar{S}_{s,C_2H_2} \rangle}{\langle \bar{S}_{s,Wachs.} \rangle}$	$\frac{\langle \bar{S}_{s,PAH} \rangle}{\langle \bar{S}_{s,Wachs.} \rangle}$	$\frac{\langle \bar{S}_{s,Bil.} \rangle}{\langle \bar{S}_{s,Wachs.} \rangle}$	$\frac{\langle \bar{S}_{s,OH} \rangle}{\langle \bar{S}_{s,Ox.} \rangle}$	$\frac{\langle \bar{S}_{s,O_2} \rangle}{\langle \bar{S}_{s,Ox.} \rangle}$
AFF	68,6	31,3	0,1	97,4	2,6
FSF	44,0	55,7	0,3	98,4	1,6
MBK BP-1	40,2	50,0	9,8	99,0	1,0
MBK BP-2	64,3	31,5	4,2	99,1	0,9
MBK BP-3	36,8	49,2	14,0	99,3	0,7

**Tabelle 8.2:** Gemittelte, zellvolumen- und aufenthaltszeitgewichtete Rußquellterme in den untersuchten turbulenten Flammen in Prozent.

Tabelle 8.2 ergänzt die Diskussion durch einen Vergleich der gemittelten Quellterme. In allen Flammen dominiert die Oxidation durch OH, während die Oxidation durch Sauerstoff sehr klein ist. Die Rußbildung und das Rußwachstum in den Flammen unterscheiden sich stark. Die AFF ähnelt auch hier den laminaren Flammen am meisten. Durch die geringeren Temperaturen überwiegt in der FSF das Wachstum durch PAH-Anlagerung, wobei der Anteil des Rußbildungsquellterms klein bleibt. Dagegen ist der Anteil von  $\bar{S}_{s,Bil.}^*$  in allen Betriebspunkten der MBK vergleichsweise hoch, was teilweise durch die geringe Aufenthaltszeit der Rußfilamente in Bereichen mit hohem Rußwachstum, erklärt werden kann. Dies tritt auch in Simulationen mit gänzlich anderen Rußmodellen so auf [37, 180, 196].

Deutliche Unterschiede im Vergleich mit anderen Modellen finden sich in der Aufteilung zwischen  $\bar{S}_{s,C_2H_2}^*$  und  $\bar{S}_{s,PAH}^*$ . Dabei fällt auf, dass Modelle, die wie das DLR-Rußmodell Ruß vor allem in Injektornähe und damit im etwas kälteren Teil der Brennkammer vorhersagen [180, 196], einen höheren Anteil an PAH-Adsorption aufweisen als Modelle, die viel Ruß in der deutlich heißeren Peripherie der Brennkammer sehen [37, 52]. Dieses Verhalten spiegelt zunächst die höhere Temperaturbeständigkeit von Acetylen wider, kann aber auch auf Modellierungsdefizite in diesem, durch laminare Flammen schlecht validierbaren Bereich hinweisen. Dagegen spricht, dass das DLR-Rußmodell den temperaturabhängigen Trend zwischen PAH- und Acetylenadsorption vorhersagen kann, wie der Vergleich der Quellterme zwischen BP-1/BP-3, die kein Ruß in der Peripherie aufweisen, und BP-2 zeigt. Außerdem deuten Messungen darauf hin, dass Ruß vor allem durch Transport in diesen Teil der Brennkammer gelangt [96]. Damit kommt auch diese Analyse zu dem Ergebnis, dass das DLR-Rußmodell keine grundlegenden Modellierungsdefizite aufweist, sondern die Rußbildung nahe der Rußgrenze nicht sensitiv genug wiedergegeben wird.

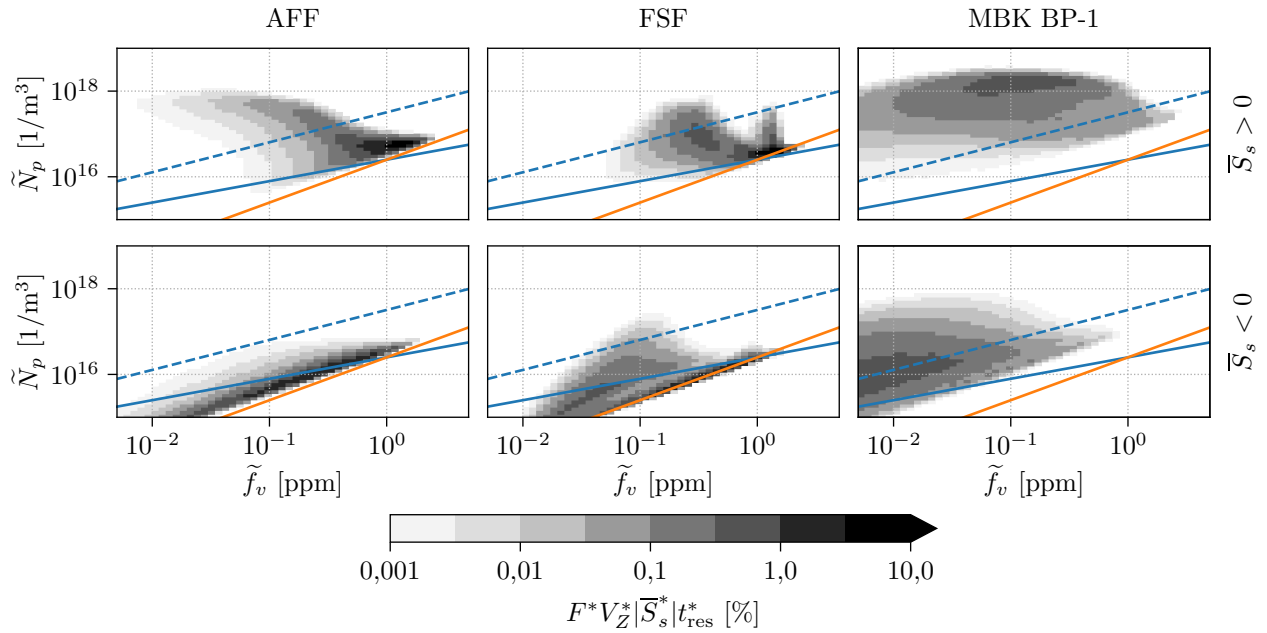
Zusammenfassend zeigt die Analyse, dass im Vergleich zu den laminaren Validierungsflammen ein deutlich breiterer Bereich an Betriebsbedingungen für die Rußevolution in turbulenten Flammen relevant ist. Im Rückströmgebiet der FSF sind die PAH-Adsorption und die Rußbildung bei sehr niedrigen Temperaturen signifikant. Diese können durch die Randbedingungen und den zu hohen Strahlungswärmeverlust durch Ruß verursacht werden. Zur Verbesserung der Rußvorhersage in der FSF scheint eine weitere Untersuchung des Einflusses der Randbedingungen deshalb erfolgversprechender als eine Modellanpassung des PAH-Adsorptionsmechanismus für dieses kalte, brennstoffreichen Regime. Hohe Bildungsraten bei kalten Temperaturen finden sich auch in den laminaren Flammen, was eine Überprüfung des PAH-Radikal Mechanismus lohnenswert erscheinen lässt. Die hohen Temperaturen, vor allem in der MBK, führen dazu, dass Acetylenadsorption und Rußoxidation durch OH unter nicht-validierten Bedingungen stattfinden. Bei hohen Temperaturen tragen

neben Acetylen auch Polyine, die das DLR-Rußmodell nicht berücksichtigt, zum Rußwachstum bei [250, 253]. Es ist jedoch unklar, ob sich durch deren Berücksichtigung Verbesserungen erzielen lassen [76]. Eine Anpassung von  $\alpha$ , die geeignete Validierungsexperimente voraussetzt, hat das Potential die Rußvorhersage zu verbessern. Jedoch fehlen solche Validierungsexperimente zur Rußoxidation bei  $T > 2000$  K, insbesondere im nicht-vorgemischtem Regime [109]. Bis diese Experimente oder bessere theoretische Kenntnisse der OH-Oxidation vorliegen, bleibt die Rußoxidation durch OH der größte Unsicherheitsfaktor der Rußvorhersage in turbulenten Flammen.

### 8.1.2.3 Weitere Modelleinflüsse

Je stärker die Variablen des Histogramms vom Rußmodell abhängen, desto konkreter zeigen sich dessen Eigenschaften in der korrelierten Statistik. Dies gilt es in der Analyse zu beachten. Beispielhaft dazu zeigt Abb. 8.6 das  $\tilde{f}_v$ - $\tilde{N}_p$ -Histogramm für die turbulenten Flammen jeweils mit Rußwachstum ( $\bar{S}_s > 0$ ) und Rußoxidation ( $\bar{S}_s < 0$ ) gewichtet. Das mit Rußwachstum gewichtete Histogramm der MBK weist eine nahezu konstant hohe Primärpartikeldichte über den gesamten  $\tilde{f}_v$ -Bereich auf, was durch den vergleichsweise hohen Anteil an Rußbildung in der MBK bedingt wird (vgl. Tab. 8.2). In der AFF fällt  $\tilde{N}_p$  zu höherem  $\tilde{f}_v$  auf ein niedrigeres Niveau ab, was in der durch noch weniger Rußbildung gekennzeichneten FSF auch der Fall ist. Die Rußbildung im stark rußbeladenen Rezirkulationsgebiet führt aber zu einem erneuten Anstieg von  $\tilde{N}_p$  bei hohen  $\tilde{f}_v$ . Lässt man diffusive Effekte des Sektionalansatzes außer Acht, ändert sich die Partikeldichte durch das Rußwachstum von Primärpartikeln nicht. Somit konkurrieren nur die Rußbildung, die  $\tilde{N}_p$  erhöht, und die Rußkollisionen, die  $\tilde{N}_p$  verringert. Je höher der Rußvolumenbruch desto schwächer der Einfluss der Rußbildung und desto stärker der Einfluss der Kollisionen, was den dargestellten Abfall verursacht. Da das Wachstum von Rußaggregaten im DLR-Rußmodell auch zur Erhöhung der Primärpartikelanzahl im Aggregat führt, fällt die Kurve mit steigendem Aggregatanteil nicht weiter ab. In einer Simulation von Tian et al. [242] wird im Rußaggregatmodell kein Wachstum der Primärpartikel berücksichtigt, sondern lediglich die Anzahl der Primärpartikel im Aggregat erhöht. Daher sind  $N_p$  und  $f_v$  dort immer positiv korreliert (vgl. --- Abb. 8.6). Im Gegensatz dazu bleiben in Messungen von Gu et al. [108] Rußaggregate unberücksichtigt und für  $f_v > 0,4$  ppm sind  $N_p$  und  $f_v$  stets negativ korreliert. Der Vergleich zeigt die Abhängigkeit der Form des Histogramms von der Modellierung der Rußpartikel sowohl in Simulationen als auch in der Auswertung experimenteller Daten.

Bei der Rußoxidation ist die Korrelation zwischen  $\tilde{f}_v$  und  $\tilde{N}_p$  in den mit dem DLR-Rußmodell untersuchten Flammen immer positiv. Dies liegt am Zusammenwirken der Rußoxidation, die  $\tilde{f}_v$  verringert, und den Rußkollisionen, die  $\tilde{N}_p$  verringern. Die positive Korrelation ist sowohl im Rußmodell von Tian et al. [242] als auch im Experiment von Gu et al. [108] bei  $f_v < 0,4$  ppm zu sehen. Zwischen den Rußmodellen unterscheidet sich lediglich die Steigung der Ausgleichsgeraden der Korrelation:  $N_p \sim f_v^{0,5}$  [242] (—) und  $\tilde{N}_p \sim \tilde{f}_v^{1,0}$  DLR-Rußmodell (—). Die Steigung kann neben den unterschiedlichen Reaktionsraten bei Oxidation und Kollision auch von der Modellierung des Masseübergangs zwischen den Rußsektionen abhängen. Der Versatz der Korrelationen in  $\tilde{N}_p$  Richtung hängt vom maximalen  $\tilde{f}_v$ - $\tilde{N}_p$ -Niveau der untersuchten Flamme ab. Die Analyse verdeutlicht die starke Modellabhängigkeit der  $\tilde{f}_v$ - $\tilde{N}_p$ -Histogramme und damit deren Potential zur Modellverbesserung. Daher wären verlässliche Messungen hilfreich, um die Auswirkung von Modelldefiziten, wie zum Beispiel das Fehlen eines Fragmentierungsmodells (z.B. [164]), besser einschätzen zu können.



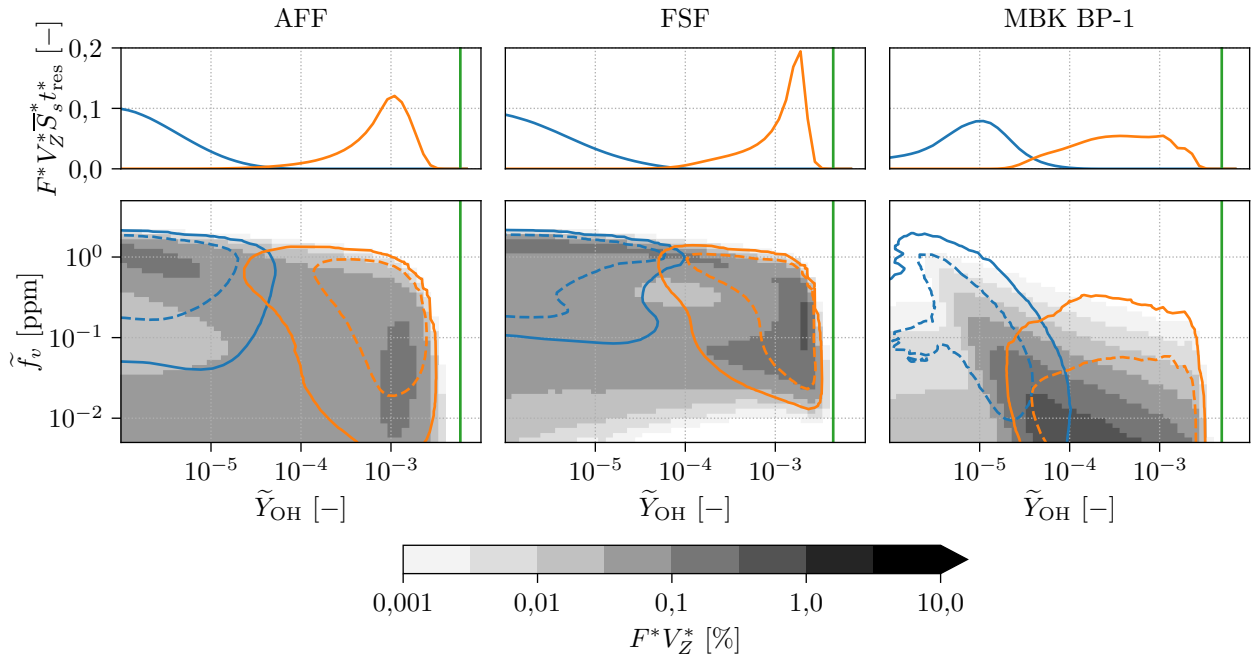
**Abbildung 8.6:** Korrelierte Histogramme des Rußvolumenbruchs ( $\tilde{f}_v$ ) und der mittleren Primärpartikeldichte ( $\tilde{N}_p$ ) bei Rußwachstum (oben) und Rußoxidation (unten). Ausgleichsgeraden: ---  $N_p = 3,2 \cdot 10^{17} \cdot \tilde{f}_v^{0,7}$  [242], —  $N_p = 2,5 \cdot 10^{16} \cdot \tilde{f}_v^{0,5}$  [242], —  $\tilde{N}_p = 2,5 \cdot 10^{16} \cdot \tilde{f}_v^{1,0}$ .

Abbildung 8.7 untersucht den Einfluss des OH-Radikals auf Rußwachstum und -oxidation in den turbulenten Flammen. Dessen starkes Oxidationspotenzial ist limitierend für die Rußpräsenz. In beiden Strahlflammen finden sich hohe Rußkonzentrationen bis  $\tilde{Y}_{\text{OH}} \approx 10^{-3}$ , die bei höheren OH-Massenanteilen stark abnehmen. Diese Beobachtung entspricht hochauflösenden ( $88,7 \mu\text{m}/\text{pixel}$ ), simultanen, qualitativen  $f_v$ -OH-Messungen in einer turbulenten Freistrahlf Flamme [136]. In der MBK setzt der Abfall der Rußkonzentration zu hohen OH-Massenanteilen hin deutlich früher ein als in den Strahlflammen. Dies liegt an der stärkeren Mischung in der MBK und an der geringeren Rußpräsenz. In den Strahlflammen wächst der Ruß im brennstoffreichen Inneren der Flamme und wird erst oxidiert, wenn die turbulente Mischung zur Verschiebung von  $\tilde{f}_v$  zu höheren  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$  führt. Auch die Histogramme von Rußwachstum und -oxidation zeigen diesen Effekt, da sie bei den Strahlflammen kaum überlappen. In der MBK führt die schnelle Mischung und die in der ganzen Brennkammer vergleichsweise hohen OH-Massenanteile zu einer deutlichen Überlappung von Rußwachstum und -oxidation. Außerdem findet die Oxidation auch bei niedrigeren OH-Massenanteilen als in den Strahlflammen statt ( $\tilde{Y}_{\text{OH}} < 10^{-4}$ ). Zwar entspricht die Beobachtung, dass Ruß und OH selten zusammen vorkommen den Messungen [96], die Mischung in der MBK kann aber durch die LES überschätzt werden. Feinstrukturmodelle gleichen diesen Effekt theoretisch aus. Praktisch wirken sich die Feinstrukturmodelle für Ruß bisher nur auf Rußkollisionen aus [12, 167]. Hier besteht also ein hoher Bedarf an geeigneten Weiterentwicklungen.

### 8.1.3 Fazit

Der Vergleich zwischen laminaren Validierungsflammen und den turbulenten Flammen zeigt, dass sowohl die Rußpräsenz als auch die Rußquellen und -senken in turbulenten Flammen in einem breiteren  $\tilde{T}$ - $\tilde{\Phi}$ -Bereich, vor allem aber bei höheren Temperaturen und höheren Äquivalenzverhältnis-





**Abbildung 8.7:** Histogramme im  $\tilde{Y}_{\text{OH}}$ -Raum (oben) und  $\tilde{Y}_{\text{OH}}-\tilde{f}_v$ -Raum (unten). Histogramme  $F^*V_Z^*\bar{S}_s^*t_{\text{res}}^*|\bar{s}_s>0$  (oben) bei: — 0,1 %; - - - 0,01 % (unten). Histogramme  $F^*V_Z^*|\bar{S}_s^*|t_{\text{res}}^*|\bar{s}_s<0$  (oben) bei: — 0,1 %; - - - 0,01 % (unten). —  $\tilde{Y}_{\text{OH}, \text{max}}$ .

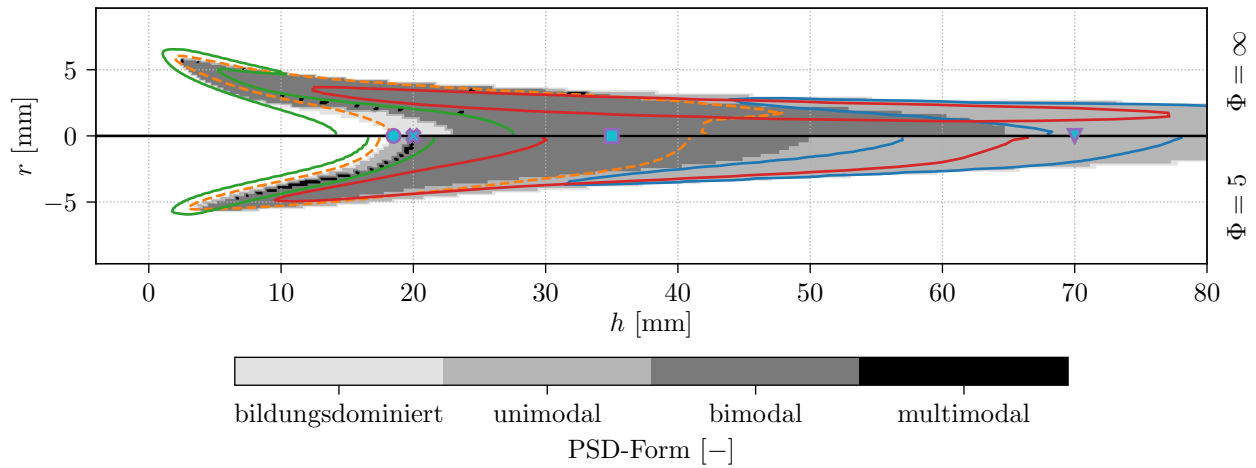
sen, auftreten. Generell sollten Rußmodelle die für den Einsatz in turbulenten Flammen entwickelt werden daher vermehrt an Stoßrohrexperimente validiert werden, da nur diese den Bereich hoher Temperaturen darstellen können. Um eine Verbesserung des DLR-Rußmodells nahe des Rußlimits zu erzielen, kann außerdem die vermehrte Untersuchung vorgemischter Flammen helfen. Dies ist jedoch mit einem hohen Aufwand verbunden, da die erheblichen Unsicherheiten in den numerischen Randbedingungen, wie von Eberle [70] gezeigt, in der Modellvalidierung berücksichtigt werden müssen. Auf Grund der hohen Rußbildung bei niedrigen Temperaturen, erscheint auch eine weitere Untersuchung des PAH-Radikal Mechanismus lohnend. Allerdings zeigte die Analyse kein eindeutiges Fehlen eines bestimmten Teilmechanismus beim DLR-Rußmodell. Sollte eine weitere Validierung auf eindeutige Modelldefizite hinweisen, könnten Teilmodelle, die bisher in der Oberflächenreaktivität  $\alpha$  zusammengefasst sind, ausgegliedert werden. Für den Einsatz in LES muss der Nutzen solcher Weiterentwicklungen jedoch im Verhältnis zu den Rechenkosten stehen, die beispielsweise bei Rußalterungsmodellen sehr hoch sein können. Die Analyse zeigt außerdem, dass korrelierte Statistiken modellierter Größen einen tiefen Einblick in die Funktionsweise eines jeden Rußmodells bieten und zur deren Verbesserung beitragen können. Jedoch fehlen vor allem in turbulenten Flammen verlässliche Validierungsmessungen. Konkreter Forschungsbedarf besteht in der Feinstrukturmodellierung der Rußchemie. Neben aufwändigen experimentellen und DNS-Untersuchungen würde der Vergleich von RANS-TPDF-Simulationen mit LES-APDF-Simulationen die Basis für die Entwicklungen besserer Feinstrukturmodelle bieten.

### 8.2 Partikelgrößenverteilung

Rußmodelle die die PSD auflösen, kommen dank steigender Rechenkapazitäten immer öfter bei LES zur Anwendung. Meist basieren diese Rechnungen auf tabellierter Verbrennungsschemie (z.B. [92, 197]). Seltener werden FRC-Ansätze genutzt (z.B. [74, 216]). Das DLR-Rußmodell selbst wurde zwar bereits in turbulenten Flammen mit LES angewandt, PSDs wurden bisher jedoch nur in laminare Flammen ausgewertet. Die dabei durchgeführte Validierung ergab, dass der Einfluss der Mischung in einem Reaktor auf die PSD gut wiedergegeben wird [70]. Ein wichtiger Vorteil PSD-auflösender Modelle ist die bessere Modellierbarkeit der unterschiedlichen physikalischen und chemischen Eigenschaften verschieden großer Rußpartikel. Darüber hinaus enthält die PSD auch Informationen, die für die Umweltwirkung von Ruß relevant sind. Beispielsweise wirken sich unterschiedlich große Rußpartikel unterschiedlich stark auf die menschliche Gesundheit aus [112]. Kondensstreifen bestehen aus kleinen Eiskristallen, deren Bildung wiederum durch das Vorhandensein von Rußpartikeln als Kondensationskeim begünstigt wird. Partikeleigenschaften, wie Größe und Beschaffenheit haben einen großen Einfluss auf diesen Prozess [152]. Modelle zur Vorhersage der Kondensstreifenbildung nutzen bisher den partikelbasierten Emissionsindex und den mittleren Partikeldurchmesser (z.B. [121]), was bereits einfache Rußmodelle vorhersagen können [77]. Allerdings wird auch hier begonnen, die unterschiedlichen Eigenschaften verschieden großer Partikel zu berücksichtigen [155]. Deshalb werden im Folgenden PSDs in zwei laminare Validierungsflammen [70] beispielhaft untersucht, um anschließend den Einfluss der Verbrennungsbedingungen in den bereits vorgestellten turbulenten Flammen auf die PSDs zu analysieren. Dieser umfassende Vergleich dient einerseits dazu, das Verständnis der PSDs in turbulenten Flammen zu verbessern und andererseits die Plausibilität der PSD-Vorhersage des DLR-Rußmodells auch im Vergleich zur Literatur zu verifizieren.

#### 8.2.1 Laminare Validierungsflammen

Experimentelle Untersuchungen der PSD in laminaren Flammen wurden vor allem in vorgemischten Flammen (z.B. [1, 34]) und Reaktorexperimenten (z.B. [15, 153]) durchgeführt. Entsprechend nutzen viele numerische Studien die gemessenen PSDs dieser Flammen zur Modellvalidierung und zur Sensitivitätsanalyse. Dadurch existiert ein gutes Verständnis über den Einfluss einzelner Teilprozesse der Rußevolution auf die Form der PSD. Sie wird bei kleinen Partikeln durch die konkurrierenden Prozesse der Rußbildung und der Rußkollisionen [19] sowie der im Modell gewählten Größe der kleinsten Rußpartikel [220, 260] bestimmt. Entsprechend stark ist der Einfluss der Kollisionseffizienz kleiner Rußpartikel [144, 202]. Chemische Wachstumsprozesse beeinflussen die Form der PSD bei kleinen Partikeln weniger [71] und wirken sich stärker auf den Rußvolumenbruch aus [202]. PSDs in laminaren Diffusionsflammen wurden experimentell kaum untersucht [64] und es existieren daher auch nur wenige numerische Untersuchungen (z.B. [2]). Allerdings bilden diese Flammen, wie bereits in Abschnitt 8.1.1 gezeigt, die Rußevolution in einem breiteren thermochemischen Zustandsraum ab als die vorgemischten Flammen und sind den turbulenten Flammen etwas ähnlicher. Deshalb wird im Folgenden die Santoro F2-Flamme gewählt, um die Entwicklung der PSD unter Berücksichtigung von Teilvormischung beispielhaft zu analysieren. Die Form der PSD wird anhand der Anzahl lokaler Maxima in unimodal, bimodal und multimodal unterteilt. Unimodale PSDs, deren Maximum sich bei den kleinsten, frisch gebildeten Partikeln befindet, werden nachfolgend „bildungsdominiert“ genannt.



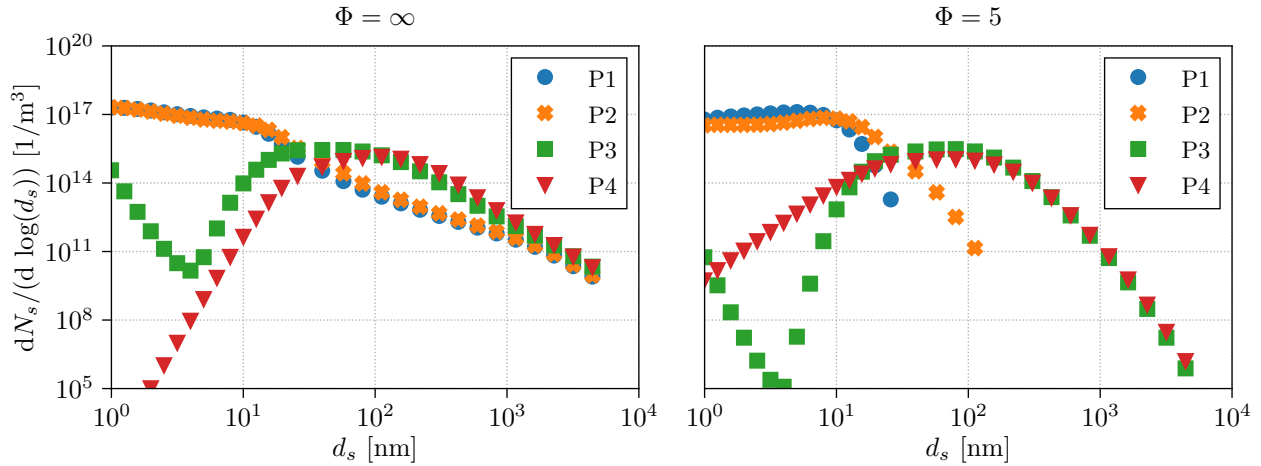
**Abbildung 8.8:** Form der PSD in zwei Betriebspunkten der Santoro F2 Flamme ( $\Phi = \infty$  bei  $r > 0$  mm,  $\Phi = 5$  bei  $r < 0$  mm). Isoflächen sind nur im Bereich von  $f_v > 0,01 \cdot f_{v,\max}$  gezeigt. —  $S_s^* = -0,1$ ; - - -  $S_s^* = 0,1$ ; —  $S_{s,Bil.}^* = 0,1$ ; —  $f_v^* = 0,25$ . ● P1, ✕ P2, ■ P3, ▼ P4.

### 8.2.1.1 Form der PSD

Abbildung 8.8 vergleicht die simulierte PSD-Formen für zwei Betriebspunkte der Santoro F2-Flamme [70]. Auf der Achse der reinen Diffusionsflamme ( $\Phi = \infty$ ) ist die Form zunächst bildungsdominiert, wird durch Einsetzen starken Rußwachstums und Rückgang der Bildungsrate dann bimodal und bei vorherrschender Rußoxidation unimodal. Im äußeren Bereich der Flamme finden sich keine bildungsdominierten PSDs, da das Rußmodell hier gleichzeitiges Auftreten von Rußbildung und -wachstum vorhersagt. Die in der Literaturübersicht festgestellte starke Abhängigkeit der PSD-Form vom Rußmodell, insbesondere vom Bildungsquellterm, zeigt sich also auch in der laminaren Diffusionsflamme. Partielle Vormischung führt zu einer Änderung der PSD-Form im unteren Teil der Flamme. Statt bildungsdominiert ist die PSD zunächst unimodal, wird kurzzeitig multimodal, um dann den typischen Verlauf mit bimodal im Rußwachstumsbereich und später unimodal im Oxidationsbereich anzunehmen.

### 8.2.1.2 PSD an ausgewählten Punkten

Um die Form der PSD besser zu visualisieren, zeigt Abb. 8.9 die PSDs an vier Punkten auf der Achse der Flamme (vgl. Abb. 8.8). Die Punkte P1 und P2 zeigen bei  $\Phi = \infty$  eine fast identische, bildungsdominierte Form. Der Abfall der PSD zu größeren Partikeln ist sehr flach. Bei Teilvormischung verringert sich die Rußbildung zwar nur geringfügig, dies reicht jedoch aus, um zu einer unimodalen PSD in P1 zu führen. Diese Form ist unerwartet, da die Rußbildung noch aktiv ist. Jedoch wurde dieses Verhalten in Messungen an einer laminaren Vormischflamme bei steigender Verdünnung bereits gezeigt [34]. Eine weitere Validierung dieses Verhaltens des DLR-Rußmodells unter Berücksichtigung der Kollisionseffizienzen kleiner Rußpartikel wäre trotzdem wünschenswert. Die multimodale PSD in P2 kommt durch kaum sichtbare Schwankungen der Teilchendichte kleiner Partikel zustande ( $d_s < 10$  nm). Sie kann nicht durch Wachstumsprozesse alleine verursacht werden, sondern bedarf der Mischung mit anderen PSDs. Dies geschieht in laminaren Diffusionsflammen durch Thermodiffusion. Das stärker werdende Rußwachstum führt allerdings sofort dazu,



**Abbildung 8.9:** PSD an vier ausgewählten Punkten auf der Achse der Santoro F2-Flamme (vgl. Abb. 8.8) bei zwei Betriebspunkten.

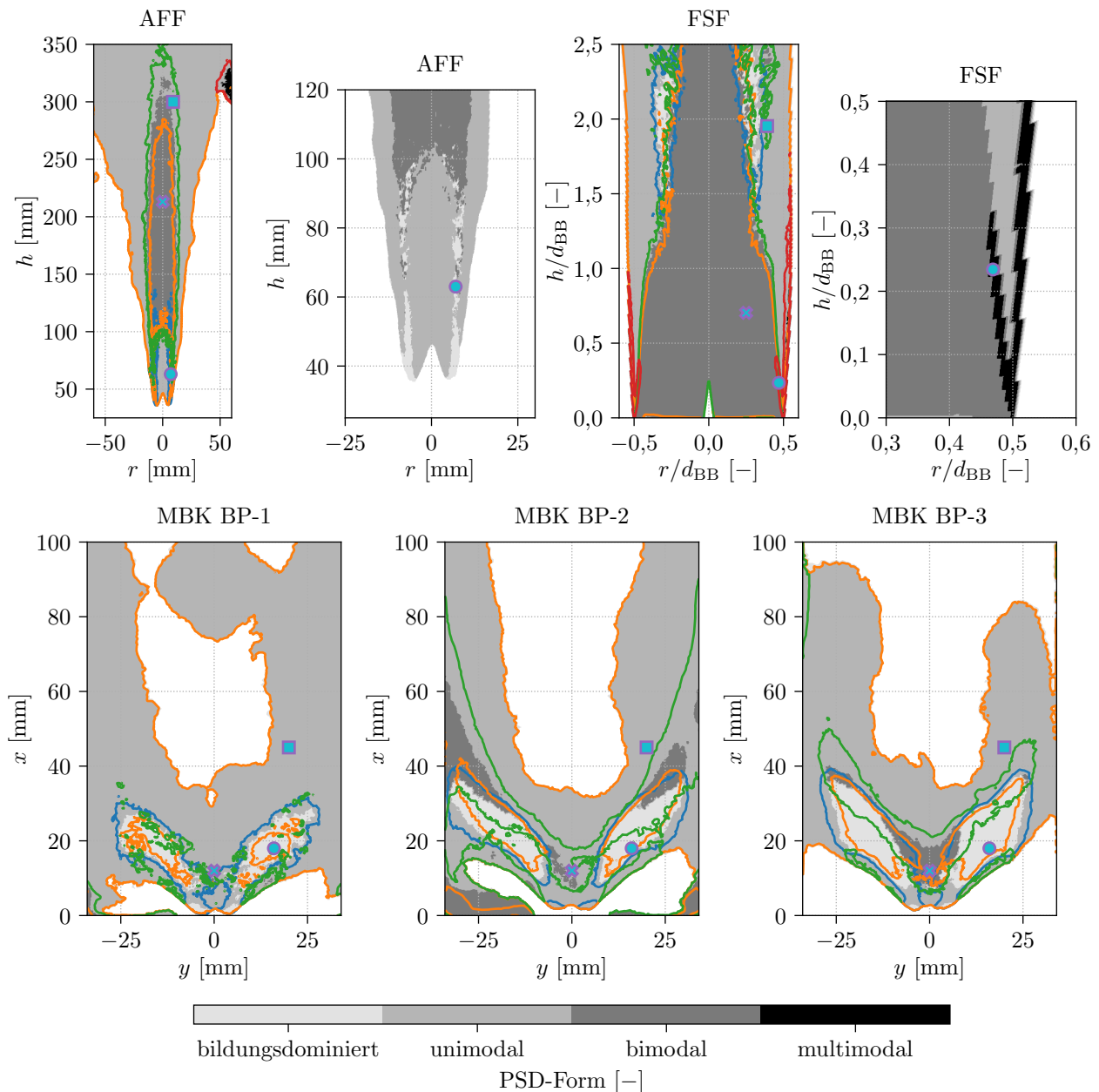
dass die Form, wie in P3 zu sehen, bimodal wird. Ohne Rußbildung wird die Form der PSD durch ständige Kollisionen der Rußpartikel in P4 schließlich unimodal. Der Vergleich der Flammen zeigt, dass die Oxidation für einen Anstieg kleiner Partikel sorgt. Da der Ruß bei P4 und  $\Phi = 5$  der Oxidation schon länger ausgesetzt ist als bei  $\Phi = \infty$ , sind mehr kleine Rußpartikel präsent. Es ist zu erwarten, dass die Berücksichtigung von Rußfragmentierung im Oxidationsmodell diesen Effekt verstärken würde.

Der Vergleich der PSDs der Santoro F2-Flamme veranschaulicht den typischen Formverlauf von bildungsdominiert und bimodal im Wachstumsbereich zu unimodal im Oxidationsbereich. Außerdem demonstriert er die Abhängigkeit der PSD-Form von wenigen Teilmodellen des Rußmodells, vor allem dem Rußbildungsmodell. Diese Feststellung könnte zukünftig genutzt werden, da beispielsweise Rußbildungsdaten nicht messbar sind, die PSD aber Informationen über die kleinsten, frisch gebildeten Rußpartikel liefert.

### 8.2.2 Turbulente Flammen

Zur Messung der PSD wird eine Messsonde benötigt. Auf Grund der damit verbundenen technischen Schwierigkeiten in turbulenten Flammen [41] existieren hier nur sehr wenige PSD-Messungen [26, 78, 218]. Dagegen gibt es deutlich mehr numerische Arbeiten, die auch die PSD beinhalten. Sie basieren auf RANS [106, 173, 208], LES [52, 91, 101, 113, 196, 197, 216] und DNS [148]. Die folgende Analyse vergleicht die PSD in den turbulenten Flammen dieser Arbeit und ordnet die Ergebnisse, soweit möglich, in den literarischen Kontext ein.

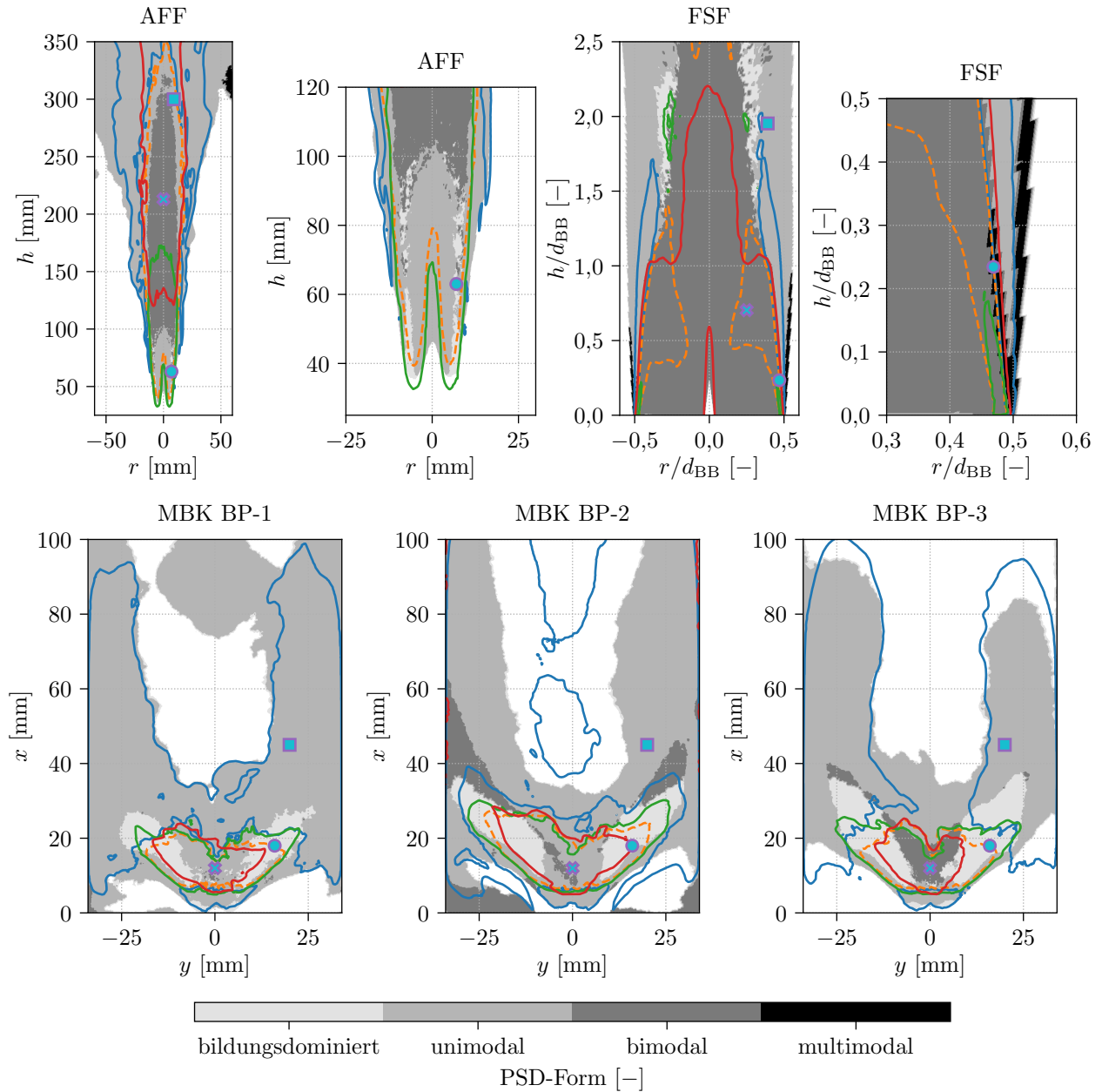
Im Gegensatz zu stationären laminaren Flammen kann sich die Form der PSD in turbulenten Flammen an einem Ort zeitlich ändern. Sowohl Abb. 8.10 als auch Abb. 8.11 zeigen deshalb die wahrscheinlichste Form der PSD in den turbulenten Flammen. Darüber hinaus identifiziert Abb. 8.10 Bereiche hoher PSD-Form Intermittenz anhand von Isolinien. Analog zu Analyse der laminaren Flammen (vgl. Abb. 8.8), zeigt Abbildung 8.11 die chemischen Prozesse der Rußevo­lution.



**Abbildung 8.10:** Wahrscheinlichste Form der PSD in den turbulenten Flammen im Vergleich. Isocontours bei 30 % Wahrscheinlichkeit einer — bildungsdominierten, — unimodalen, — bimodalen und — multimodalen PSD. ● P1, ✕ P2, ■ P3.

### 8.2.2.1 Form der PSD

In der AFF ähnelt die Verteilung der wahrscheinlichsten PSD-Form der der laminaren Diffusionsflamme. Im unteren Teil der Flamme ist die Form meist unimodal oder bildungsdominiert, wobei in manchen Bereichen auch bimodale PSDs häufig vorkommen. Die dort vorhandene hohe Intermitzenz ist bis  $h \approx 150$  mm abgeklungen. Im Inneren der Flamme sind nun bimodale PSDs vorherrschend, während im äußeren Teil und ab  $h \approx 300$  mm auch auf der Achse unimodale Verteilungen dominieren. Wie bei der laminaren Flamme kann dies mit der Rußchemie erklärt werden. Im unteren Teil, in dem die höchste Intermitzenz der PSD-Form vorliegt, finden Rußbildung und -wachstum meist unter vorgemischten Bedingungen statt (vgl. Kapitel 5). Bereiche bimodaler PSDs stimmen



**Abbildung 8.11:** Wahrscheinlichste Form der PSD in den turbulenten Flammen im Vergleich. —  $\langle \overline{S}_s^* \rangle = -0,01$ ; - - -  $\langle \overline{S}_s^* \rangle = 0,1$ ; —  $\langle \overline{S}_{s,Bil.}^* \rangle = 0,1$ ; —  $\langle \tilde{f}_v^* \rangle = 0,25$ . ● P1, ✕ P2, ■ P3.

meist mit Bereichen des Rußwachstums überein, während in Gebieten der Rußoxidation und im Übergangsbereich zwischen Wachstum und Oxidation die unimodale PSD-Form dominiert.

Bei der FSF bewirkt das Rezirkulationsgebiet hinter dem Flammenhalter teilweise andere wahrscheinlichste PSD-Formen. Das Rezirkulationsgebiet selbst ist rußwachstumsdominiert, weshalb die häufigste PSD-Form bimodal ist. Außerdem ist die Intermitenz in diesem Bereich sehr gering. An der Außenseite der Flamme, wo Rußoxidation vorherrscht, ist die wahrscheinlichste Form der PSD unimodal und die Intermitenz ebenfalls gering. Eine hohe Intermitenz der PSD-Form tritt nur direkt an der Innenseite der Flamme auf. Im Gegensatz zu AFF finden sich bildungsdominierte PSDs in der FSF erst weit stromab ( $h/d_{BB} \approx 2$ ), wo die Rußbildung hoch ist. Auch in der Flammenwurzel am äußeren Rand des Flammenhalters ist die Rußbildung hoch, die PSD-Form aber nicht

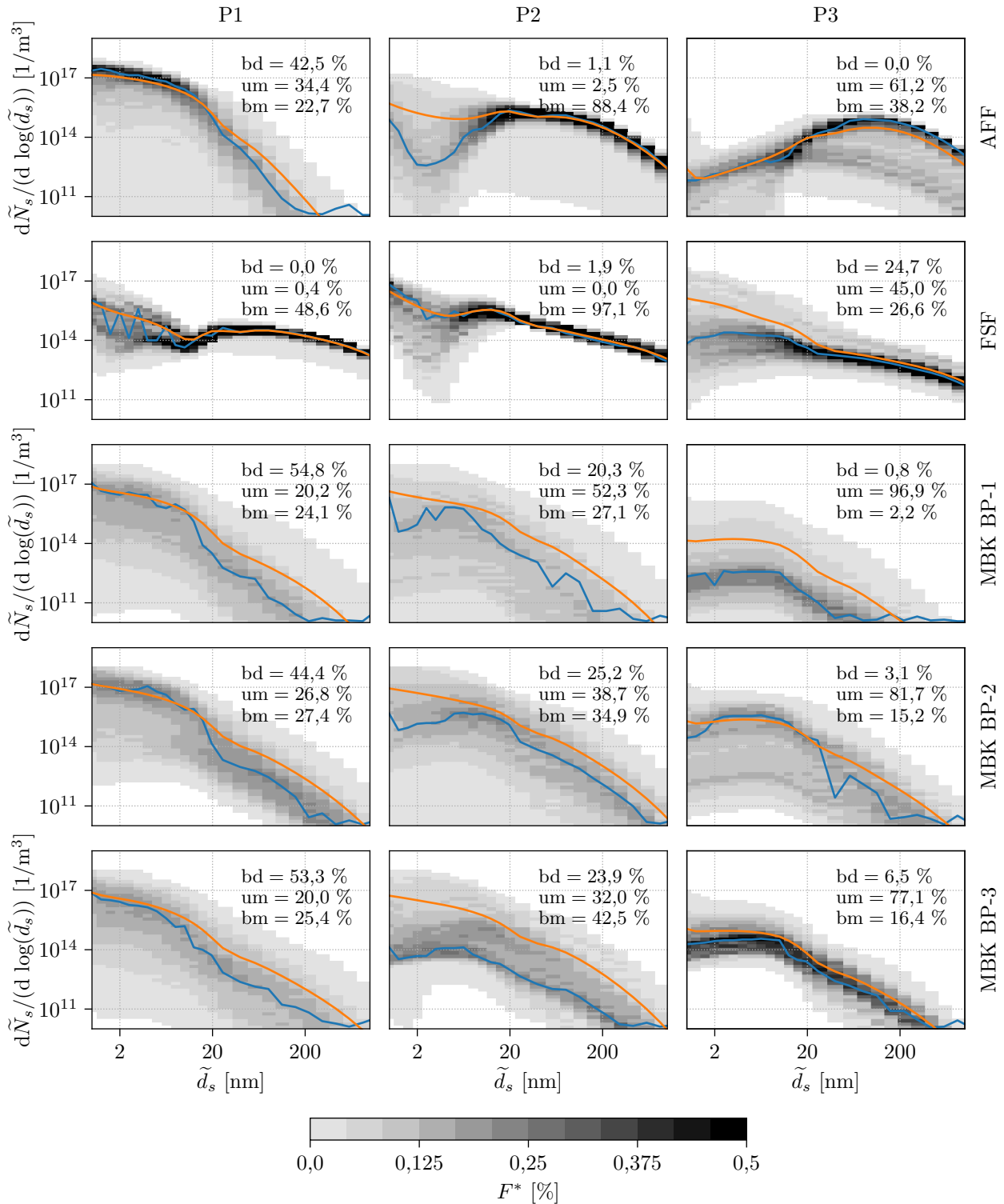
bildungsdominiert. Während bei  $h/d_{\text{BB}} \approx 2$  nur sehr wenig Ruß in den Bildungsbereich transportiert wird und folglich bildungsdominierte PSDs vorherrschen, führt die Rezirkulation dazu, dass stark rußbeladenes Fluid in den Rußbildungsbereich nahe der Flammenwurzel gelangt. Dadurch bleibt hier die PSD-Form trotz einsetzender Rußbildung bimodal. Zusätzlich führt die Rezirkulation dazu, dass an der Flammenwurzel, im Gegensatz zu den anderen untersuchten turbulenten Flammen, häufig multimodale PSDs auftreten. Etwas weiter stromab herrschen dank Rußwachstum oder -oxidation nur noch bimodale oder unimodale PSDs vor.

In allen untersuchten Betriebspunkten der MBK unterscheidet sich die wahrscheinlichste Verteilung der PSD-Form deutlich von der der Strahlflammen. Nahe des Injektors findet sich ein vergleichsweise großer, V-förmigen Bereich in dem bildungsdominierte PSDs am häufigsten sind. Allerdings ist die Intermitenz hier sehr hoch, sodass auch bimodale Verteilungen relativ häufig auftreten. Die hohe Intermitenz der PSD-Form ist eine direkte Folge der intermittenten Rußevolution in der MBK. Im BP-1 kommen bimodale PSDs seltener vor als die anderen Formen. Dies kann mit dem vergleichsweise hohen Anteil der Rußbildung am gesamten Rußwachstum erklärt werden. Allerdings überwiegen oxidationsbedingte, unimodale Verteilungen. Lediglich im Rückströmgebiet nahe des Injektors, wo auch Rußbildung und -wachstum stattfinden, treten bimodale Verteilungen etwas häufiger auf. Wie in der AFF und der Santoro-F2 Flamme mit  $\Phi = 5$  ist das Fluid hier meist vorgemischt. Bei den anderen Betriebspunkten, in denen der mittlere Rußvolumenbruch in diesem Bereich doppelt so hoch ist, nimmt die Häufigkeit bimodaler PSDs zu. Mit Oxidationsluft (BP-2) überwiegen bimodale PSDs in der Peripherie der Brennkammer. Ohne Oxidationsluft (BP-3) finden sich bimodale PSDs am häufigsten im Rückströmgebiet, nahe des Injektors.

### 8.2.2.2 PSD an ausgewählten Punkten

Abb. 8.12 zeigt Histogramme der PSDs für die turbulenten Flammen in jeweils drei verschiedenen Punkten, um deren Form genauer zu untersuchen. Diese sind so gewählt, dass P1 in Bereichen mit starker Rußbildung liegt, bei P2 das Rußwachstum dominiert und bei P3 die Rußoxidation (vgl. Abb. 8.11). Für jeden Punkt ist außerdem die Wahrscheinlichkeit, mit der bildungsdominierte (bd), unimodale (um) und bimodale (bm) PSD-Formen auftreten, gegeben. Die Wahrscheinlichkeit einer multimodalen PSD-Form entspricht dem verbleibenden Anteil. Linien für die mittlere und die wahrscheinlichste PSD veranschaulichen die Intermitenz.

Außer bei sehr großen Partikeln stimmen bei der AFF im Punkt P1 mittlere und wahrscheinlichste PSD sehr gut überein. Die Intermitenz ist also sehr gering, obwohl alle drei Hauptformen der PSD relativ häufig auftreten. Der flache Verlauf der PSD bei kleinen Partikeln deutet darauf hin, dass ein hohes Wachstum kleiner Partikel in diesem vorgemischten Teil der Flamme die uni- und bimodalen PSDs verursacht. Dieses Verhalten wurde zuvor schon bei den laminaren Flammen beobachtet. Daher führen schon geringe Änderungen bei kleinen Partikeln zu einer Änderung der PSD-Form, was die Diskrepanz zwischen geringer Intermitenz und dem häufigen Auftreten aller PSD-Hauptformen erklärt. An der Position des Rußwachstums bei P2 ist die Intermitenz bei großen Partikeln sehr gering, bei kleinen Partikeln dagegen höher, wobei die vorherrschende bimodale PSD gut zu erkennen ist. In der Grenzschicht zwischen Wachstum und Oxidation bei P3 ist die Intermitenz bei großen Partikeln etwas erhöht. Die Form entspricht hier entweder der PSD in P2, oder ist durch Oxidation zu geringeren Partikeldichten verschoben.



**Abbildung 8.12:** PSDs an ausgewählten Punkten in den turbulenten Flamme (vgl. Abb. 8.11) — blaue Linie — wahrscheinlichste PSD, — orange Linie — mittlere PSD. Die Auftrittswahrscheinlichkeiten bildungsdominierte (bd), unimodaler (um) und bimodaler (bm) PSDs sind in Prozent angegeben.

In der FSF weisen die PSDs in allen Punkten eine sehr geringe Intermittenz großer Partikel auf. Im Bereich hoher Rußbildung bei P1 sind multimodale PSDs am häufigsten. Die wahrscheinlichste Form der PSD zeigt, dass die Multimodalität durch Schwankungen der Partikeldichte kleiner Partikel verursacht wird. Diese schwankt auch im Rückströmgebiet (P2), die Form der PSD ist aber



fast ausschließlich bimodal. Weiter stromab im oxidationsdominierten Teil der Flamme (P3) ist die Intermitenz der PSD bei kleinen Partikeln deutlich höher. Dies wird durch die turbulente Strömung und die Nähe von P3 zur Reaktionszone verursacht, wodurch temporär auch Rußbildung und -wachstum vorkommen. Im Vergleich zur AFF ist die Intermitenz bei großen Partikeln schwach, was daran liegt, dass P3 in der AFF näher an der Reaktionszone liegt.

Im Gegensatz zu den beiden Strahlflammen zeigt die Statistik der PSDs in der MBK, wie die Rußbildung insgesamt, eine viel ausgeprägtere Intermitenz, da sich die mittlere und die wahrscheinlichste PSD-Form meist deutlich unterscheiden. Zwar finden sich bei kleinen Partikeln ähnlich hohe Partikeldichten wie in den Strahlflammen, die Dichte großer Partikel, die den Rußvolumenbruch maßgeblich bestimmen, ist aber durchgehend geringer. Dagegen sind die Unterschiede zwischen den drei Betriebspunkten minimal. Im bildungsdominierten Punkt P1 ähneln sich die Statistiken von BP-1 und BP-3 sehr. Das höhere Äquivalenzverhältnis am Primärinjektor führt in BP-2 zu einem leichten Anstieg unimodaler und bimodaler PSDs. Im Rezirkulationsgebiet nahe des Injektors bei P2 führt das höhere Äquivalenzverhältnis von BP-2 und BP-3 zu einer Abnahme unimodaler PSDs. Diese werden in P2 also durch Oxidation und nicht durch vorgemischtes Rußwachstum verursacht. Im Bereich der Oxidation, bei P3, unterscheiden sich die PSDs am deutlichsten. Zwar sind bei allen Betriebspunkten unimodale PSDs am häufigsten anzutreffen, die höhere Rußkonzentration in BP-2 führt aber zu einer deutlich höheren Teilchendichte. Es sei angemerkt, dass weiter stromab die PSDs aller Betriebspunkte die Form von BP-3 annehmen und die Intermitenz sinkt.

Insgesamt wird die Analyse der laminaren Flamme bestätigt. In den Strahlflammen geht starkes Rußwachstum mit bimodalen PSDs einher. Ein hoher Grad an Vormischung führt beim DLR-Rußmodell auch in turbulenten Flammen zu unimodalen Verteilungen bei gleichzeitigem Rußwachstum. Oxidation bedingt unimodale PSDs mit geringer Intermitenz, da die Rußbildung verschwindet. Außerdem zeigt der Vergleich einen erheblichen Einfluss der Betriebsbedingungen auf die PSDs. Je geringer die Rußneigung der Flamme ist, desto klarer weist die mittlere PSD eine bildungsdominierte Form auf. Rückströmung rußbeladenen Fluids führt zu starker Intermitenz der PSD bei kleinen Partikeln und zu multimodalen Verteilungen. In den Strahlflammen ist die Intermitenz bei den kleinsten Partikeln am größten. In der MBK ist die Intermitenz bei allen Partikelgrößen hoch und nimmt erst mit vollständiger Oxidation des Rußes ab. Um die Beobachtungen zu validieren, folgt eine Einordnung zu anderen Simulationen und Messungen der PSD.

### 8.2.2.3 Einordnung und Fazit

Zeitlich gemittelte Messungen der PSD in turbulenten Freistrahlfammen mit geringer Rußbelastung [26, 41] zeigen durchweg bildungsdominierte Formen. Dies trifft auch auf alle Betriebspunkte der schwach rußenden MBK zu (vgl. Abb. 8.12), obwohl sich die Anteile an Rußbildung am Rußwachstum zwischen den Betriebspunkten deutlich unterscheiden. Entsprechend konnten die experimentellen Ergebnisse der turbulenten Freistrahlfamme auch mit einem einfachen,  $C_2H_2$ -basierten Rußbildungsmodell numerisch reproduziert werden [208]. Auch Auswertungen in einer DNS-Rechnung [148] zeigen, dass trotz verschiedener instantaner Formen, im Mittel bildungsdominierte PSDs vorliegen. Leider existieren keine Messungen in stärker rußenden Strahlflammen, mit denen sich die PSD-Vorhersage des DLR-Rußmodells passend einordnen ließe. Stationäre Simulationen stärker rußender Strahlflammen zeigen einerseits ein ähnliches Verhalten wie in der AFF [106],

andererseits aber auch durchweg bildungsdominierte PSDs [173]. Instationäre Simulationen einer schwach rußenden Strahlflamme zeigen sehr unterschiedliche PSDs, was deren Modellabhängigkeit verdeutlicht: In einer LES, die die Rußmessungen um einen Faktor zehn unterschätzt, sind nur unimodale Verteilungen präsent [216], während in einer LES, die näher an den Messwerten liegt, auch bimodale Verteilungen auftreten [113]. Die Ergebnisse einer LES mit sektionalem Rußmodell, die die Messwerte in einer stark rußenden Freistrahlfamme gut wiedergibt [197], ähneln denen der vorliegenden Arbeit sehr: Mit steigender Flammenhöhe geht die bildungsdominierte PSD sowohl instantan als auch im Mittel in eine bimodale PSD über. Im Gegensatz zu Resultaten des DLR-Rußmodells nimmt die Verteilung im Oxidationsbereich jedoch keine unimodale Form an. Sie bleibt mit hohen Partikeldichten kleiner Partikel bimodal. Ob die dort erneut stark auftretende Rußbildung durch die Physik der Flamme gegeben oder durch die tabellierte Chemie aufgeprägt ist, lässt sich nicht beantworten. In den Strahlflammen, die in dieser Arbeit untersucht wurden, erscheint eine neuerliche Rußbildung im Bereich dominanter Oxidation unwahrscheinlich, da meist hohe Temperaturen und niedrige Äquivalenzverhältnisse vorherrschen.

Die PSD-Form in zeitlich gemittelte Messungen an einer schwach rußenden Modellbrennkammer [78] ist an allen Messpunkten bildungsdominiert. LES derselben Brennkammer [101] weisen dasselbe Verhalten auf und zeigen, wie die Ergebnisse der MBK, eine hohe Intermittenz der PSD. Auch LES der MBK [52, 91, 196] bestätigen die hohe Intermittenz, die das DLR-Rußmodell vorhersagt. Allerdings treten bimodale PSDs nicht nennenswert auf, wohingegen ihr Anteil in der vorliegenden Arbeit teilweise über 20 % liegt. Die Arbeit von Dellinger [52] nutzt den gleichen Gasphasen- und PAH-Mechanismus wie das DLR-Rußmodell und zeigt unimodale PSDs. Leider sind diese räumlich gemittelt, was das Fehlen bimodaler Verteilungen erklären könnte. Die Arbeiten von Gallen [91] und Rodrigues [196] basieren auf tabellierter Chemie und zeigen einen deutlich höheren Anteil der Nukleation am gesamten Rußwachstum. Dies und das Überschätzen der Rußkollisionen wird von Gallen [91] für das Fehlen bimodaler Verteilungen in seiner Arbeit verantwortlich gemacht.

Insgesamt sind die vom DLR-Rußmodell vorhergesagten PSDs stimmig. Die Abhängigkeit der mittleren PSD von der Rußkonzentration wird abgebildet und das Verhalten bei stark rußenden Freistrahlfammen wurde auch von anderen Autoren beobachtet [106, 197]. Die oxidationsbedingte unimodale Form lässt sich außerdem physikalisch mit dem Fehlen von Rußbildung erklären. Jedoch schränken die erheblichen Unsicherheiten im Rußbildungsmodell des DLR-Rußmodells, wie bei allen anderen Rußmodellen, die PSD-Vorhersagequalität bei kleinen Partikeln ein. Es ist jedoch zu erwarten, dass Trends, wie der Einfluss der Betriebsbedingungen, korrekt wiedergegeben werden. Der Literaturvergleich zeigt den Bedarf an zeitaufgelösten PSD-Messungen in turbulenten Flammen, um die modellbedingt sehr unterschiedlichen PSD-Vorhersagen zu validieren. Außerdem wäre eine weitere Validierung der PSD-Vorhersage des DLR-Rußmodells bei vorgemischten Bedingungen wünschenswert, um die Neigung zu unimodalen Verteilungen im Rußbildungsbereich zu überprüfen.

Der Literaturvergleich zeigt, dass PSDs bisher nur in einzelnen Flammen analysiert wurden, während diese Arbeit erstmalig einen Vergleich zwischen verschiedenen laminaren und turbulenten Flammen durchführt. Dadurch erhöht sich das Vertrauen in Analyse der Zusammenhänge zwischen Rußquellterm und PSD-Form. Außerdem wird die Vielfalt der auftretenden PSD-Formen deutlich. Rußmodelle, die die PSD genau genug auflösen, sind daher für ein breites Spektrum an Anwendungsfällen besser geeignet als Rußmodelle die eine monodisperse Rußverteilung annehmen.

# 9 Zusammenfassung und Ausblick

In der vorliegenden Arbeit wurde die Rußevolution in drei turbulenten Ethylenflammen, die mit Hilfe von LES und einem FRC-Verbrennungsmodell simuliert wurden, untersucht: Einer abgehobenen Freistrahlf Flamme, einer flammenhalterstabilisierten Strahlflamme und einer Modellbrennkammer für Fluggasturbinen. Für die MBK wurden drei Betriebspunkte betrachtet. Insgesamt konnte die Validierung des Rußmodells der Vorgängerarbeit von Eberle [70] erweitert und auf eine breitere Basis gestellt werden. Das Ziel dieser Arbeit war zum einen die Durchführung der aufwändigen LES und zum anderen die ausführliche Analyse der Simulationsergebnisse. Dadurch sollte das Verständnis der Rußevolution verbessert und die Modellvalidierung genauer eingeordnet werden.

Mit Hilfe statistischer Methoden gelang es die Unterschiede zwischen den Bedingungen in den turbulenten Flammen und den Bedingungen in den laminaren Flammen, mit denen das Rußmodell validiert wurde, aufzuzeigen. Daraus konnten Empfehlungen sowohl für generelle Rußmodellentwicklungen zum Einsatz in turbulenten Flammen als auch speziell für das DLR-Rußmodell abgeleitet werden. Der verwendete Sektionalansatz ermöglichte erstmals einen detaillierten Vergleich der PSD in turbulenten, rußenden Flammen. Mit Hilfe von POD und von statistischen Methoden konnte das Verständnis der Rußevolution in turbulenten Flammen erheblich verbessert werden. So wurde der Einfluss der Vormischung, die durch das Abheben der AFF entsteht, auf die Rußbildung untersucht. Erstmals wurde der Einfluss von Dynamiken im Strömungsfeld und von den Betriebsbedingungen einer MBK auf die Rußevolution quantitativ untersucht und beschrieben. Insgesamt konnte dadurch ein besseres Verständnis sowohl von experimentellen Untersuchungen als auch der Rußevolution im Allgemeinen erreicht werden. Teile der erzielten Resultate konnten bereits veröffentlicht werden [102–105, 233].

## Analyse der Modellvalidierung

Die AFF und die MBK wurden bereits in der Vorgängerarbeit von Eberle [70] behandelt. Durch eine längere physikalische Simulationsdauer bei beiden Flammen und verbesserten Randbedingungen bei der MBK konnte die Verlässlichkeit der Ergebnisse gesteigert werden. Um die Lücke zwischen der AFF, die ein relativ einfaches Strömungsfeld aufweist, und der MBK, die durch den Drallinjektor, Wandinflüsse und Rückströmung eine sehr komplexe Strömungsmechanik besitzt, zu schließen und die Rußevolution unter Rezirkulation beizubehalten, wurde die Untersuchung um die FSF erweitert. Das Geschwindigkeitsfeld und die Rußverteilung der FSF werden gut wiedergegeben, wobei die LES zu viel Ruß vorhersagt. Dies ist nicht zuletzt auf die hohe Sensitivität der Flamme auf die Randbedingungen zurückzuführen, die im Rahmen der Unsicherheiten gewählt wurden.

Der statistische Vergleich zeigte sowohl zwischen den laminaren Validierungsflammen [70] und den turbulenten Flammen als auch zwischen den turbulenten Flammen selbst, erhebliche Unterschiede in der Rußevolution. In turbulenten Flammen tritt Ruß in einem deutlich größeren Bereich thermodynamischer Zustände auf, als die laminaren Validierungsflammen abdecken. Besonders die MBK zeichnet sich durch Rußpräsenz bei sehr hohen Temperaturen aus, was dazu führt, dass Rußwachstum und -oxidation teilweise unter Bedingungen ablaufen, für die Rußmodelle typischerweise nicht validiert wurden. Da solch hohe Temperaturen auch für reale Triebwerksbrennkammern charakteristisch sind, besteht hier Handlungsbedarf. Der Vergleich zeigte aber auch, dass der Einsatz des Rußmodells unter Bedingungen für das es validiert wurde, wie beispielsweise in der AFF, sehr gute Ergebnisse im Rahmen der für die Rußmodellierung typischen Unsicherheiten liefert. Dies bestätigt die DLR-Philosophie der Modellentwicklung [18, 59, 70, 230] bei der ein wissenschaftliches Rußmodell unter möglichst unterschiedlichen Bedingungen validiert wird, anstatt es für einzelne Anwendungsfälle jeweils neu zu optimieren.

### Analyse der Rußevolution

Abgehobene Flammen sind in den meisten technischen Brennkammern zu finden. Diese Arbeit verdeutlicht, dass die damit einhergehende Vormischung von Brennstoff und Oxidator signifikante Auswirkungen auf die Rußevolution hat. Zukünftige Simulationen solcher Flammen müssen daher durch geeignete Modellierung und Validierung in der Lage sein, Verbrennung und Rußevolution unter vorgemischten und nicht-vorgemischten Bedingungen wiederzugeben. Experimentell beobachtete Trends der  $\tilde{T}$ - $\tilde{f}_v$ -Statistik konnten durch die Analyse erklärt werden. Sie werden durch die lokal unterschiedliche Stärke von Rußwachstum und -oxidation verursacht, die wiederum durch das Abheben der Flamme und die damit verbundene Vormischung beeinflusst werden.

Der erstmalige Einsatz von Modenanalyse in rußenden Flammen hat gezeigt, dass das herkömmliche POD-Verfahren nicht ausreicht, um die intermittente Rußdynamik zu analysieren. Stattdessen wurde MRPOD erfolgreich angewandt, wodurch Dynamiken nicht nur nach ihrer Energie, sondern auch nach ihrer Frequenz aufgeteilt werden. Dabei konnte ein erheblicher Einfluss sowohl des „precessing vortex cores“ als auch der niederfrequenten Dynamiken im Strömungsfeld auf den Ruß festgestellt werden. Der PVC erzeugt brennstoffreiche Gebiete in der Nähe des Injektors, die für die Rußbildung und das Wachstum essenziell sind, da die Betriebsbedingungen der untersuchten MBK nahe an der Rußgrenze liegen. Unabhängig von der Sekundärluftzufuhr in die Brennkammer führen die NFD, die einen symmetrischen Einfluss auf die Brennstoff-Luft-Mischung am Injektor haben, zu sehr starken Schwankungen des Rußvolumens in der Brennkammer. Die Sekundärlufteinblasung und die dadurch auftretenden Dynamiken verändern die Mischung im Rezirkulationsgebiet und erhöhen die Sensitivität von Rußbildung und -wachstum auf die NFD. Dagegen verringert ein erhöhter Brennstoffmassenstrom die Amplitude der niederfrequenten Rußintermittenz. Aus der starken Abhängigkeit der Rußevolution von den Dynamiken im Strömungsfeld folgt, dass diese von Simulationen akkurat wiedergegeben werden müssen, um die Rußevolution in der MBK korrekt vorherzusagen.

Da die LES-Ergebnisse der drei turbulenten Flammen alle mit demselben, bereits validierten Rußmodell erzielt wurden, konnte in dieser Arbeit erstmalig ein umfangreicher Vergleich der PSD zwischen laminaren und den turbulenten Flammen durchgeführt werden. Der Vergleich zeigte den großen Einfluss der Betriebsbedingungen auf die Form der PSD. Während im hinteren Teil der Flam-

---

men oxidationsbedingt unimodale Verteilungen vorliegen, treten im Bereich von Rußbildung und -wachstum auch bildungsdominierte, bimodale und multimodale Verteilungen auf. Ein Rußmodell das für die breite Anwendung in turbulenten Flammen konzipiert ist, sollte daher in der Lage sein, den Einfluss dieser PSD-Formen auf die Rußevolution wiederzugeben.

## Ausblick

- **Brennstoffe:** Rußmodellierung und -experimente beschränken sich zu einem großen Teil auf Ethylenflammen, während technische Flammen ebenso mit flüssigen Brennstoffen wie Kerosin betrieben werden. Der nächste Schritt in der Modellentwicklung, der über die Anwendung in der MBK hinausgeht, muss daher solche komplexen Treibstoffe und deren Eigenheiten im Rußverhalten mit einbeziehen. Um die enormen Unsicherheiten, die mit der Simulation flüssiger Treibstoffe verbunden sind, zu verringern, empfiehlt sich die Modellentwicklung mit Hilfe von Experimenten, die vorverdampfte Treibstoffe nutzen.
- **Rußmodellentwicklung für turbulente Flammen:** Zukünftige Modellvalidierungen sollten den großen Bereich thermodynamischer Zustände, der in turbulenten Flammen auftritt, so gut wie möglich abdecken. Daher ist es notwendig, verschiedene vorgemischte und nicht-vorgemischte laminare Flammen in die Validierung miteinzubeziehen. Außerdem wird die Nutzung von Stoßrohrexperimente empfohlen, um die hohen Temperaturen, die in turbulenten Flammen und speziell in Triebwerksbrennkammern auftreten, abzudecken. Einer der größten Unsicherheitsfaktoren in der Rußmodellierung stellt die OH-Oxidation dar. Deren genaue Messungen bei hohen Temperaturen könnte die Rußvorhersage in turbulenten Flammen enorm verbessern.

Rußmodelle, die für eine breite Anwendung in turbulenten Flammen entwickelt werden, sollten den Einfluss der PSD-Form auf die Rußevolution abbilden können. Monodisperse Rußmodelle erscheinen daher weniger geeignet. Wichtiger ist allerdings, dass die Rechenkosten zukünftiger Rußmodelle einer verlässlichen Strömungs- und Verbrennungssimulation nicht im Wege stehen. Sie bilden die Grundlage einer guten Rußvorhersage, wie unter anderem die Analyse der Dynamiken der MBK gezeigt hat.

Die Feinstrukturmodellierung der Rußchemie ist bisher auf Kollisionsprozesse beschränkt. Neue Modell könnten beispielsweise durch den Vergleich von LES-APDF und RANS-TPDF (z.B. [57]) entwickelt werden. Auf Grund der auf absehbare Zeit limitierten Rechenressourcen bieten neue Feinstrukturmodelle ein sehr hohes Verbesserungspotenzial für die Simulation rußender, turbulenter Flammen.

- **DLR-Rußmodell:** Das sektionale PAH-Modell bildet die Schnittstelle zwischen Gasphase und Ruß. Daher hat es einen immensen Einfluss auf die Rußvorhersage. Die Unterschätzung von Ruß auf der Achse laminarer, vorverdampfter Kerosinflammen [76] und die signifikante Rußbildung bei niedrigen Temperaturen deuten auf Verbesserungspotenzial in diesem Bereich hin. Besonders sensitiv reagiert das Modell auf die PAH-Aktivierungsreaktionen (3.2). Außerdem ist das PAH-Wachstum bisher sehr ähnlich zum Rußwachstum modelliert, was bei der Anwendung des Modells in Flammen mit aromatenhaltigen Brennstoffen neu evaluiert werden sollte.

Für die Anwendung in technischen Brennkammern wären Verbesserungen des sektionalen Rußmodells, vor allem für den Einsatz bei höheren Temperaturen, vorstellbar. Dazu könnte beispielsweise das Rußwachstum durch Adsorption von Polyinen [253] berücksichtigt werden. Eine bessere Rußvorhersage, gerade bei  $T > 1800$  K, könnte auch durch den Einsatz eines eigenständigen Rußalterungsmodells erreicht werden. Weiterhin fehlt im Oxidationsmodell die durch  $O_2$  verursachte Fragmentierung der Rußpartikel (z.B. [111]), deren Einfluss durch die dominante OH-Oxidation jedoch als gering eingeschätzt wird. All diese Verbesserungen müssten auf Modellen basieren, die sich im Hinblick auf die Anwendung in LES sehr effizient implementieren ließen. Außerdem wird eine solide Datenbasis zur Modellvalidierung bei hohen Temperaturen benötigt. Die genannten Modellverbesserungen sind daher erst zu empfehlen, wenn beide Bedingungen gegeben sind.

- **Testfälle:** Abschnitt 8.1 hat die Notwendigkeit gezeigt, weitere Testfälle zu berücksichtigen, um eine konsistentere Modellierung zu erreichen. Damit das Rußverhalten in technischen Brennkammern so gut wie möglich abgebildet wird, sollte das Hauptaugenmerk bei der Auswahl auf hohen Temperaturen, partieller Vormischung und erhöhtem Druck liegen. Stoßrohrexperimente können solche Bedingungen darstellen. Außerdem zeigte die Analyse, dass sich korrelierte Messungen verschiedener Rußgrößen sehr gut zur Validierung von Sektionalmodellen eignen würden. Zur Verbesserung der Rußbildungsmodellierung empfiehlt sich auch der vermehrte Vergleich von PSDs. Rußbildung und -wachstum sind in nicht-vorgemischten Gegenstromdiffusionsflammen (z.B. [114]) und in inversen Diffusionsflammen (z.B. [54]) von der Rußoxidation weitgehend entkoppelt, weshalb diese sich gut zur Validierung dieser Teilmodelle eignen. Wünschenswert wären aber vor allem Experimente, mit denen die Rußoxidation durch OH besser validiert werden könnte.
- **Analysemethoden:** Eine Weiterentwicklung der Analysemethoden scheint nicht notwendig, da sie ohne erneute Anpassungen in der Lage sind, die Rußevolution in technischen Brennkammern zu untersuchen. Am Beispiel der MBK hat diese Arbeit sehr detailliert aufgezeigt, wie eine solche Analyse der Rußevolution durchgeführt werden kann. Leider sind die speziellen Betriebsbedingungen der MBK für technische Brennkammern nur eingeschränkt repräsentativ. Daher wäre eine Anwendung der in dieser Arbeit entwickelten Vorgehensweise zur Analyse von Dynamiken in technischen Brennkammern besonders wünschenswert.

# Literaturverzeichnis

- [1] A. D. Abid, E. D. Tolmachoff, D. J. Phares, H. Wang, Y. Liu und A. Laskin. „Size distribution and morphology of nascent soot in premixed ethylene flames with and without benzene doping“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 32 (2009), S. 681–688. DOI: 10.1016/j.proci.2008.07.023.
- [2] P. Akridis und S. Rigopoulos. „Modelling of soot formation in laminar diffusion flames using a comprehensive CFD-PBE model with detailed gas-phase chemistry“. In: *Combustion Theory and Modelling* 21 (2016), S. 35–48. DOI: 10.1080/13647830.2016.1213426.
- [3] J. Appel, H. Bockhorn und M. Frenklach. „Kinetic modeling of soot formation with detailed chemistry and physics: laminar premixed flames of C2 hydrocarbons“. In: *Combustion and Flame* 121 (2000), S. 122–136. DOI: 10.1016/s0010-2180(99)00135-2.
- [4] C. P. Arana, M. Pontoni, S. Sen und I. K. Puri. „Field measurements of soot volume fractions in laminar partially premixed coflow ethylene/air flames“. In: *Combustion and Flame* 138 (2004), S. 362–372. DOI: 10.1016/j.combustflame.2004.04.013.
- [5] H. El-Asrag und S. Menon. „Large eddy simulation of soot formation in a turbulent non-premixed jet flame“. In: *Combustion and Flame* 156 (2009), S. 385–395. DOI: 10.1016/j.combustflame.2008.09.003.
- [6] A. Attili, F. Bisetti, M. E. Mueller und H. Pitsch. „Damköhler number effects on soot formation and growth in turbulent nonpremixed flames“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015), S. 1215–1223. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.proci.2014.05.084>.
- [7] A. Attili, F. Bisetti, M. E. Mueller und H. Pitsch. „Formation, growth, and transport of soot in a three-dimensional turbulent non-premixed jet flame“. In: *Combustion and Flame* 161 (2014), S. 1849–1865. DOI: <http://dx.doi.org/10.1016/j.combustflame.2014.01.008>.
- [8] P. Baldi und K. Hornik. „Neural networks and principal component analysis: Learning from examples without local minima“. In: *Neural Networks* 2 (1989), S. 53–58. DOI: 10.1016/0893-6080(89)90014-2.
- [9] M. Balthasar und M. Kraft. „A stochastic approach to calculate the particle size distribution function of soot particles in laminar premixed flames“. In: *Combustion and Flame* 133 (2003), S. 289–298. DOI: 10.1016/s0010-2180(03)00003-8.
- [10] J. Bardina, J. Ferziger und W. Reynolds. „Improved subgrid-scale models for large-eddy simulation“. In: *Proceedings of the 13th Fluid and Plasma Dynamics Conference. AIAA* 1980–1357. 1980. DOI: 10.2514/6.1980-1357.

- [11] N. Ben-Cheikh, F. Hammami, A. Campo und B. Ben-Beya. „A dynamic sub-grid scale model for large eddy simulation of turbulent flows in a lid-driven cubical cavity“. In: *Comptes Rendus Mécanique* 340 (2012), S. 721–730. DOI: 10.1016/j.crme.2012.10.001.
- [12] L. Berger, A. Wick, A. Attili, M. E. Mueller und H. Pitsch. „Modeling subfilter soot-turbulence interactions in Large Eddy Simulation: An a priori study“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 38 (2021), S. 2783–2790. DOI: 10.1016/j.proci.2020.06.386.
- [13] G. Berkooz, P. Holmes und J. L. Lumley. „The Proper Orthogonal Decomposition in the Analysis of Turbulent Flows“. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 25 (1993), S. 539–575. DOI: 10.1146/annurev.fl.25.010193.002543.
- [14] J. S. Bhatt und R. P. Lindstedt. „Analysis of the impact of agglomeration and surface chemistry models on soot formation and oxidation“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 32 (2009), S. 713–720. DOI: 10.1016/j.proci.2008.06.201.
- [15] T. Bierkandt, P. Oßwald, T. Schripp und M. Köhler. „Experimental Investigation of Soot Oxidation under Well-Controlled Conditions in a High-Temperature Flow Reactor“. In: *Combustion Science and Technology* 191 (2019), S. 1499–1519. DOI: 10.1080/00102202.2018.1554651.
- [16] R. Bilger. „The structure of turbulent nonpremixed flames“. In: *Symposium (International) on Combustion* 22 (1989), S. 475–488. DOI: 10.1016/s0082-0784(89)80054-2.
- [17] F. Bisetti, G. Blanquart, M. E. Mueller und H. Pitsch. „On the formation and early evolution of soot in turbulent nonpremixed flames“. In: *Combustion and Flame* 159 (2012), S. 317–335. DOI: 10.1016/j.combustflame.2011.05.021.
- [18] T. Blacha. „Effiziente Rußmodellierung in laminaren und turbulenten Flammen unterschiedlicher Brennstoffe“. Dissertation. Institute of Combustion Technology for Aerospace Engineering Universität Stuttgart, 2013. DOI: 10.18419/opus-3891.
- [19] T. Blacha, M. Di Domenico, P. Gerlinger und M. Aigner. „Soot predictions in premixed and non-premixed laminar flames using a sectional approach for PAHs and soot“. In: *Combustion and Flame* 159 (2012), S. 181–193. DOI: 10.1016/j.combustflame.2011.07.006.
- [20] G. Blanquart und H. Pitsch. „A joint volume-surface-hydrogen multi-variate model for soot formation“. In: *Combustion generated fine carbonaceous particles*. KIT Scientific Publishing, Karlsruhe, Germany, 2009, S. 437–463.
- [21] J. Blasco, N. Fueyo, C. Dopazo und J.-Y. Chen. „A self-organizing-map approach to chemistry representation in combustion applications“. In: *Combustion Theory and Modelling* 4 (2000), S. 61–76. DOI: 10.1088/1364-7830/4/1/304.
- [22] H. Bockhorn. *Soot Formation in Combustion*. Springer Berlin Heidelberg, 1994. DOI: 10.1007/978-3-642-85167-4.
- [23] J. Borée. „Extended proper orthogonal decomposition: a tool to analyse correlated events in turbulent flows“. In: *Experiments in Fluids* 35 (2003), S. 188–192. DOI: 10.1007/s00348-003-0656-3.



- [24] A. Bouaniche, J. Yon, P. Domingo und L. Vervisch. „Analysis of the Soot Particle Size Distribution in a Laminar Premixed Flame: A Hybrid Stochastic/Fixed-Sectional Approach“. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 104 (2020), S. 753–775. DOI: 10.1007/s10494-019-00103-2.
- [25] H. Boulard und Y. Kamp. „Auto-association by multilayer perceptrons and singular value decomposition“. In: *Biological Cybernetics* 59 (1988), S. 291–294. DOI: 10.1007/bf00332918.
- [26] W. Boyette, S. Chowdhury und W. Roberts. „Soot Particle Size Distribution Functions in a Turbulent Non-Premixed Ethylene-Nitrogen Flame“. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 98 (2017), S. 1173–1186. DOI: 10.1007/s10494-017-9802-5.
- [27] I. N. Bronshtein, K. A. Semendyayev, G. Musiol und H. Mühlig. *Handbook of Mathematics*. Springer Berlin Heidelberg, 2015. DOI: 10.1007/978-3-662-46221-8.
- [28] S. L. Brunton, B. R. Noack und P. Koumoutsakos. „Machine Learning for Fluid Mechanics“. In: *Annual Review of Fluid Mechanics* 52 (2020), S. 477–508. DOI: 10.1146/annurev-fluid-010719-060214.
- [29] S. M. de Bruyn Kops, J. J. Riley, G. Kosály und A. W. Cook. „Investigation of Modeling for Non-Premixed Turbulent Combustion“. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 60 (1998), S. 105–122. DOI: 10.1023/a:1009986317078.
- [30] Bundesregierung. *Neue Kraftstoffe und Antriebe*. 2021. URL: <https://www.bundesregierung.de/breg-de/themen/neue-kraftstoffe-und-antriebe-994216> (besucht am 01.02.2021).
- [31] S. P. Burke und T. E. W. Schumann. „Diffusion Flames“. In: *Industrial & Engineering Chemistry* 20 (1928), S. 998–1004. DOI: 10.1021/ie50226a005.
- [32] U. Burkhardt, L. Bock und A. Bier. „Mitigating the contrail cirrus climate impact by reducing aircraft soot number emissions“. In: *npj Climate and Atmospheric Science* 1 (2018), S. 37. DOI: 10.1038/s41612-018-0046-4.
- [33] M. R. Busupally und A. De. „Numerical modeling of soot formation in a turbulent C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>/air diffusion flame“. In: *International Journal of Spray and Combustion Dynamics* 8 (2016), S. 67–85. DOI: 10.1177/1756827716638814.
- [34] J. Camacho, C. Liu, C. Gu, H. Lin, Z. Huang, Q. Tang, X. You, C. Saggese, Y. Li, H. Jung, L. Deng, I. Wlokas und H. Wang. „Mobility size and mass of nascent soot particles in a benchmark premixed ethylene flame“. In: *Combustion and Flame* 162 (2015), S. 3810–3822. DOI: 10.1016/j.combustflame.2015.07.018.
- [35] D. Carbonell, A. Oliva und C. D. Perez-Segarra. „Implementation of two-equation soot flamelet models for laminar diffusion flames“. In: *Combustion and Flame* 156 (2009), S. 621–632. DOI: 10.1016/j.combustflame.2008.12.003.
- [36] K. K. Chen, J. H. Tu und C. W. Rowley. „Variants of dynamic mode decomposition: boundary condition, Koopman, and Fourier analyses“. In: *Journal of nonlinear science* 22 (2012), S. 887–915. DOI: 10.1007/s00332-012-9130-9.

- [37] S. T. Chong, M. Hassanaly, H. Koo, M. E. Mueller, V. Raman und K. P. Geigle. „Large-eddy simulation of pressure and dilution-jet effects on soot formation in a model aircraft swirl combustor“. In: *Combustion and Flame* 192 (2018), S. 452–472. DOI: 10.1016/j.combustflame.2018.02.021.
- [38] S. T. Chong, V. Raman, M. E. Mueller und H. G. Im. „The Role of Recirculation Zones in Soot Formation in Aircraft Combustors“. In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2018*. GT2018-76217. 2018. DOI: 10.1115/gt2018-76217.
- [39] S. T. Chong, V. Raman, M. E. Mueller, P. Selvaraj und H. G. Im. „Effect of soot model, moment method, and chemical kinetics on soot formation in a model aircraft combustor“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 37 (2019), S. 1065–1074. DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.093.
- [40] A. J. Chorin. „Numerical solution of the Navier-Stokes equations“. In: *Mathematics of Computation* 22 (1968), S. 745–745. DOI: 10.1090/s0025-5718-1968-0242392-2.
- [41] S. Chowdhury, W. R. Boyette und W. L. Roberts. „Time-averaged probability density functions of soot nanoparticles along the centerline of a piloted turbulent diffusion flame using a scanning mobility particle sizer“. In: *Journal of Aerosol Science* 106 (2017), S. 56–67. DOI: 10.1016/j.jaerosci.2016.10.012.
- [42] F. C. Christo, A. R. Masri, E. M. Nebot und S. B. Pope. „An integrated PDF/neural network approach for simulating turbulent reacting systems“. In: *Symposium (International) on Combustion* 26 (1996), S. 43–48. DOI: 10.1016/s0082-0784(96)80198-6.
- [43] A. Clarke und K. Noone. „Soot in the arctic snowpack: a cause for perturbations in radiative transfer“. In: *Atmospheric Environment* 41 (2007), S. 64–72. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2007.10.059.
- [44] Ö. H. Cokuslu, C. Hasse, K. P. Geigle und F. Ferraro. „Soot Prediction in a Model Aero-Engine Combustor using a Quadrature-based Method of Moments“. In: *AIAA SCITECH 2022 Forum*. 2022. DOI: 10.2514/6.2022-1446.
- [45] A. W. Cook und J. J. Riley. „A subgrid model for equilibrium chemistry in turbulent flows“. In: *Physics of Fluids* 6 (1994), S. 2868–2870. DOI: 10.1063/1.868111.
- [46] A. Coppalle und D. Joyeux. „Temperature and soot volume fraction in turbulent diffusion flames: Measurements of mean and fluctuating values“. In: *Combustion and Flame* 96 (1994), S. 275–285. DOI: 10.1016/0010-2180(94)90014-0.
- [47] R. R. Cordero, E. Sepúlveda, S. Feron, A. Damiani, F. Fernandoy, S. Neshyba, P. M. Rowe, V. Asencio, J. Carrasco, J. A. Alfonso, P. Llanillo, P. Wachter, G. Seckmeyer, M. Stepanova, J. M. Carrera, J. Jorquera, C. Wang, A. Malhotra, J. Dana, A. L. Khan und G. Casassa. „Black carbon footprint of human presence in Antarctica“. In: *Nature Communications* 13 (2022), S. 984. DOI: 10.1038/s41467-022-28560-w.
- [48] A. D’Anna und J. H. Kent. „A model of particulate and species formation applied to laminar, nonpremixed flames for three aliphatic-hydrocarbon fuels“. In: *Combustion and Flame* 152 (2008), S. 573–587. DOI: 10.1016/j.combustflame.2007.08.003.

- [49] B. B. Dally, D. F. Fletcher und A. R. Masri. „Flow and mixing fields of turbulent bluff-body jets and flames“. In: *Combustion Theory and Modelling* 2 (1998), S. 193–219. DOI: 10.1088/1364-7830/2/2/006.
- [50] I. Daubechies. *Ten Lectures on Wavelets*. Society for Industrial und Applied Mathematics, 1992. DOI: 10.1137/1.9781611970104.
- [51] L. Davidson. „Large Eddy Simulations: How to evaluate resolution“. In: *International Journal of Heat and Fluid Flow* 30 (2009), S. 1016–1025. DOI: 10.1016/j.ijheatfluidflow.2009.06.006.
- [52] N. Dellinger. „Modélisation de la formation et de l’évolution des particules de suie en approche hybride Euler-Lagrange pour la simulation de foyers aéronautiques“. Dissertation. Sorbonne Université, 2019.
- [53] N. Dellinger, N. Bertier, F. Dupoirieux und G. Legros. „Hybrid Eulerian-Lagrangian method for soot modelling applied to ethylene-air premixed flames“. In: *Energy* 194 (2020), S. 116858. DOI: 10.1016/j.energy.2019.116858.
- [54] R. Demarco, A. Jerez, F. Liu, L. Chen und A. Fuentes. „Modeling soot formation in laminar coflow ethylene inverse diffusion flames“. In: *Combustion and Flame* 232 (2021), S. 111513. DOI: 10.1016/j.combustflame.2021.111513.
- [55] S. Deng, M. E. Mueller, Q. N. Chan, N. H. Qamar, B. B. Dally, Z. T. Alwahabi und G. J. Nathan. „Hydrodynamic and chemical effects of hydrogen addition on soot evolution in turbulent nonpremixed bluff body ethylene flames“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 36 (2017), S. 807–814. DOI: 10.1016/j.proci.2016.09.004.
- [56] I. M. Dijkhoff, B. Drasler, B. B. Karakocak, A. Petri-Fink, G. Valacchi, M. Eeman und B. Rothen-Rutishauser. „Impact of airborne particulate matter on skin: a systematic review from epidemiology to in vitro studies“. In: *Particle and Fibre Toxicology* 17 (2020), S. 35. DOI: 10.1186/s12989-020-00366-y.
- [57] T. Dittmann, A. Fiolitakis, P. M. Gerlinger und M. Aigner. „Simulation of a Piloted Turbulent Sooting Jet-Flame using a Transported-PDF and a Sectional Soot Modeling Approach“. In: *Proceedings of the AIAA Scitech 2019 Forum*. AIAA 2019-0445. 2019. DOI: 10.2514/6.2019-0445.
- [58] *DLR THETA-Code*. URL: [https://www.dlr.de/vt/desktopdefault.aspx/tabid-3082/4659\\_read-15475](https://www.dlr.de/vt/desktopdefault.aspx/tabid-3082/4659_read-15475) (besucht am 15.03.2022).
- [59] M. di Domenico. „Numerical simulations of soot formation in turbulent flows“. Dissertation. Institute of Combustion Technology for Aerospace Engineering Universität Stuttgart, 2008. DOI: 10.18419/opus-6678.
- [60] M. di Domenico, P. Gerlinger und M. Aigner. „Development and validation of a new soot formation model for gas turbine combustor simulations“. In: *Combustion and Flame* 157 (2010), S. 246–258. DOI: 10.1016/j.combustflame.2009.10.015.
- [61] P. Domingo, L. Vervisch und K. Bray. „Partially premixed flamelets in LES of nonpremixed turbulent combustion“. In: *Combustion Theory and Modelling* 6 (2002), S. 529–551. DOI: 10.1088/1364-7830/6/4/301.

- [62] P. Donde, V. Raman, M. E. Mueller und H. Pitsch. „LES/PDF based modeling of soot–turbulence interactions in turbulent flames“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 34 (2013), S. 1183–1192. DOI: 10.1016/j.proci.2012.07.055.
- [63] J.-B. Donnet, R. C. Bansal und M.-J. Wang. *Carbon Black*. Routledge, 1993. DOI: 10.1201/9781315138763.
- [64] J. A. H. Dreyer, M. Poli, N. A. Eaves, M. L. Botero, J. Akroyd, S. Mosbach und M. Kraft. „Evolution of the soot particle size distribution along the centreline of an n-heptane/toluene co-flow diffusion flame“. In: *Combustion and Flame* 209 (2019), S. 256–266. DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.08.002.
- [65] F. Dupoirieux, N. Bertier, C. Guin, L.-H. Dorey, K. P. Geigle, C. Eberle und P. Gerlinger. „Methodology for the Numerical Prediction of Pollutant Formation in Gas Turbine Combustors and Associated Validation Experiments“. In: *AerospaceLab Journal* 2 (2016), S. 15–33. DOI: 10.12762/2016.a111-07.
- [66] C. Duwig und L. Fuchs. „Large eddy simulation of vortex breakdown/flame interaction“. In: *Physics of Fluids* 19 (2007), S. 075103. DOI: 10.1063/1.2749812.
- [67] C. Duwig und P. Iudiciani. „Extended Proper Orthogonal Decomposition for Analysis of Unsteady Flames“. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 84 (2009), S. 25–47. DOI: 10.1007/s10494-009-9210-6.
- [68] S. B. Dworkin, Q. Zhang, M. J. Thomson, N. A. Slavinskaya und U. Riedel. „Application of an enhanced PAH growth model to soot formation in a laminar coflow ethylene/air diffusion flame“. In: *Combustion and Flame* 158 (2011), S. 1682–1695. DOI: 10.1016/j.combustflame.2011.01.013.
- [69] N. A. Eaves, S. B. Dworkin und M. J. Thomson. „The importance of reversibility in modeling soot nucleation and condensation processes“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015), S. 1787–1794. DOI: 10.1016/j.proci.2014.05.036.
- [70] C. Eberle. „Ein effizienter Sektionalansatz zur Modellierung von PAHs und nicht sphärischen Rußpartikeln unter technisch relevanten Verbrennungsbedingungen“. Dissertation. Institute of Combustion Technology for Aerospace Engineering Universität Stuttgart, 2020. DOI: 10.18419/OPUS-10912.
- [71] C. Eberle, P. Gerlinger und M. Aigner. „A sectional PAH model with reversible PAH chemistry for CFD soot simulations“. In: *Combustion and Flame* 179 (2017), S. 63–73. DOI: 10.1016/j.combustflame.2017.01.019.
- [72] C. Eberle, P. Gerlinger, K. P. Geigle und M. Aigner. „Numerical Investigation of Transient Soot Evolution Processes in an Aero-Engine Model Combustor“. In: *Combustion Science and Technology* 187 (2015), S. 1841–1866. DOI: 10.1080/00102202.2015.1065254.
- [73] C. Eberle, P. Gerlinger, K. P. Geigle und M. Aigner. „Toward finite-rate chemistry large-eddy simulations of sooting swirl flames“. In: *Combustion Science and Technology* 190 (2018), S. 1194–1217. DOI: 10.1080/00102202.2018.1443444.

- [74] C. Eberle, P. M. Gerlinger und M. Aigner. „Large Eddy Simulations of a Sooting Lifted Turbulent Jet-Flame“. In: *Proceedings of the 55th AIAA Aerospace Sciences Meeting*. AIAA 2017-1785. 2017. DOI: 10.2514/6.2017-1785.
- [75] R. L. G. M. Eggels. „The Application of Combustion LES Within Industry“. In: *Direct and Large-Eddy Simulation X*. Springer International Publishing, 2017, S. 3–13. DOI: 10.1007/978-3-319-63212-4\_1.
- [76] F. Eigentler und P. Gerlinger. „A Detailed PAH and Soot Model for Complex Fuels in CFD Applications“. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 109 (2022), S. 225–251. DOI: 10.1007/s10494-022-00319-9.
- [77] F. Eigentler, P. M. Gerlinger und R. Eggels. „Soot CFD simulation of a real aero engine combustor“. In: *Proceedings of the AIAA SCITECH 2022 Forum*. AIAA 2022-0489. 2022. DOI: 10.2514/6.2022-0489.
- [78] G. D. Falco, I. E. Helou, P. M. de Oliveira, M. Sirignano, R. Yuan, A. D’Anna und E. Mastorakos. „Soot particle size distribution measurements in a turbulent ethylene swirl flame“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 38 (2021), S. 2691–2699. DOI: 10.1016/j.proci.2020.06.212.
- [79] A. Felden, E. Riber und B. Cuenot. „Impact of direct integration of Analytically Reduced Chemistry in LES of a sooting swirled non-premixed combustor“. In: *Combustion and Flame* 191 (2018), S. 270–286. DOI: 10.1016/j.combustflame.2018.01.005.
- [80] H. H. Ferziger und M. Perić. *Numerische Strömungsmechanik*. Springer Berlin Heidelberg, 2002. DOI: 10.1007/978-3-540-68228-8.
- [81] H. Forkel und J. Janicka. „Large-Eddy Simulation of a Turbulent Hydrogen Diffusion Flame“. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 65 (2000), S. 163–175. DOI: 10.1023/a:1011497715385.
- [82] B. Franzelli, E. Riber, B. Cuenot und M. Ihme. „Numerical Modeling of Soot Production in Aero-Engine Combustors Using Large Eddy Simulations“. In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2015*. GT2015-43630. 2015. DOI: 10.1115/gt2015-43630.
- [83] B. Franzelli, P. Scouffaire und S. Candel. „Time-resolved spatial patterns and interactions of soot, PAH and OH in a turbulent diffusion flame“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015), S. 1921–1929. DOI: 10.1016/j.proci.2014.06.123.
- [84] B. Franzelli, A. Vié und N. Darabiha. „A three-equation model for the prediction of soot emissions in LES of gas turbines“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 37 (2019), S. 5411–5419. DOI: 10.1016/j.proci.2018.05.061.
- [85] M. Frenklach und S. J. Harris. „Aerosol dynamics modeling using the method of moments“. In: *Journal of Colloid and Interface Science* 118 (1987), S. 252–261. DOI: 10.1016/0021-9797(87)90454-1.
- [86] M. Frenklach und A. M. Mebel. „On the mechanism of soot nucleation“. In: *Physical Chemistry Chemical Physics* 22 (2020), S. 5314–5331. DOI: 10.1039/d0cp00116c.

- [87] M. Frenklach und H. Wang. „Detailed Mechanism and Modeling of Soot Particle Formation“. In: *Soot Formation in Combustion*. Hrsg. von H. Bockhorn. Springer Berlin Heidelberg, 1994. Kap. Detailed Mechanism and Modeling of Soot Particle Formation, S. 165–192. DOI: 10.1007/978-3-642-85167-4\_10.
- [88] M. Frenklach und H. Wang. „Detailed modeling of soot particle nucleation and growth“. In: *Symposium (International) on Combustion* 23 (1991), S. 1559–1566. DOI: 10.1016/s0082-0784(06)80426-1.
- [89] J. Fröhlich. *Large Eddy Simulation turbulenter Strömungen*. Teubner, 2006. DOI: 10.1007/978-3-8351-9051-1.
- [90] C. E. Frouzakis, Y. G. Kevrekidis, J. Lee, K. Boulouchos und A. A. Alonso. „Proper orthogonal decomposition of direct numerical simulation data: Data reduction and observer construction“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 28 (2000), S. 75–81. DOI: 10.1016/s0082-0784(00)80197-6.
- [91] L. Gallen. „Prediction of soot particles in Gas Turbine Combustors using Large Eddy Simulation“. Dissertation. Institut National Polytechnique de Toulouse, 2020.
- [92] L. Gallen, A. Felden, E. Riber und B. Cuenot. „Lagrangian tracking of soot particles in LES of gas turbines“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 37 (2019), S. 5429–5436. DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.013.
- [93] K. P. Geigle, R. Hadeff und W. Meier. „Soot formation and flame characterization of an aero-engine model combustor burning ethylene at elevated pressure“. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 136 (2014), S. 021505. DOI: 10.1115/1.4025374.
- [94] K. P. Geigle, R. Hadeff, M. Stöhr und W. Meier. „Flow field characterization of pressurized sooting swirl flames and relation to soot distributions“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 36 (2017), S. 3917–3924. DOI: 10.1016/j.proci.2016.09.024.
- [95] K. P. Geigle, M. Köhler, W. O’Loughlin und W. Meier. „Investigation of soot formation in pressurized swirl flames by laser measurements of temperature, flame structures and soot concentrations“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015), S. 3373–3380. DOI: 10.1016/j.proci.2014.05.135.
- [96] K. P. Geigle, W. O’Loughlin, R. Hadeff und W. Meier. „Visualization of soot inception in turbulent pressurized flames by simultaneous measurement of laser-induced fluorescence of polycyclic aromatic hydrocarbons and laser-induced incandescence, and correlation to OH distributions“. In: *Applied Physics B* 119 (2015), S. 717–730. DOI: 10.1007/s00340-015-6075-3.
- [97] P. Gerlinger. „Investigation of an assumed pdf approach for finite-rate Chemistry“. In: *Combustion Science and Technology* 175 (2003), S. 841–872. DOI: 10.1080/00102200302410.
- [98] P. Gerlinger. *Numerische Verbrennungssimulation*. Springer Berlin Heidelberg, 2005. DOI: 10.1007/3-540-27535-5.
- [99] P. Gerlinger, B. Noll und M. Aigner. „Assumed PDF modelling and PDF structure investigation using finite-rate chemistry“. In: *Progress in Computational Fluid Dynamics, An International Journal* 5 (2005), S. 334. DOI: 10.1504/pcf.d.2005.007066.

- 
- [100] S. S. Girimaji. „Assumed  $\beta$ -pdf Model for Turbulent Mixing: Validation and Extension to Multiple Scalar Mixing“. In: *Combustion Science and Technology* 78 (1991), S. 177–196. DOI: 10.1080/00102209108951748.
- [101] S. Gkantonas, M. Sirignano, A. Giusti, A. D’Anna und E. Mastorakos. „Comprehensive soot particle size distribution modelling of a model Rich-Quench-Lean burner“. In: *Fuel* 270 (2020), S. 117483. DOI: 10.1016/j.fuel.2020.117483.
- [102] M. Grader, C. Eberle und P. Gerlinger. „Large-Eddy Simulation and analysis of a sooting lifted turbulent jet flame“. In: *Combustion and Flame* 215 (2020), S. 458–470. DOI: 10.1016/j.combustflame.2020.01.042.
- [103] M. Grader, C. Eberle, P. Gerlinger und M. Aigner. „LES of a Pressurized, Sooting Aero-Engine Model Combustor at Different Equivalence Ratios With a Sectional Approach for PAHs and Soot“. In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2018*. GT2018-75254. 2018. DOI: 10.1115/gt2018-75254.
- [104] M. Grader und P. Gerlinger. „Influence of operating conditions on flow field dynamics and soot formation in an aero-engine model combustor“. In: *Combustion and Flame* (2023), S. 112712. DOI: 10.1016/j.combustflame.2023.112712.
- [105] M. Grader, Z. Yin, K. P. Geigle und P. Gerlinger. „Influence of flow field dynamics on soot evolution in an aero-engine model combustor“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 38 (2021), S. 6421–6429. DOI: 10.1016/j.proci.2020.05.019.
- [106] D. Grosschmidt, P. Habisreuther und H. Bockhorn. „Calculation of the size distribution function of soot particles in turbulent diffusion flames“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (2007), S. 657–665. DOI: 10.1016/j.proci.2006.07.213.
- [107] C. Gu, H. Lin, J. Camacho, B. Lin, C. Shao, R. Li, H. Gu, B. Guan, Z. Huang und H. Wang. „Particle size distribution of nascent soot in lightly and heavily sooting premixed ethylene flames“. In: *Combustion and Flame* 165 (2016), S. 177–187. DOI: 10.1016/j.combustflame.2015.12.002.
- [108] D. Gu, Z. Sun, B. B. Dally, P. R. Medwell, Z. T. Alwahabi und G. J. Nathan. „Simultaneous measurements of gas temperature, soot volume fraction and primary particle diameter in a sooting lifted turbulent ethylene/air non-premixed flame“. In: *Combustion and Flame* 179 (2017), S. 33–50. DOI: 10.1016/j.combustflame.2017.01.017.
- [109] H. Guo, P. M. Anderson und P. B. Sunderland. „Optimized rate expressions for soot oxidation by OH and O<sub>2</sub>“. In: *Fuel* 172 (2016), S. 248–252. DOI: 10.1016/j.fuel.2016.01.030.
- [110] W. Han, V. Raman, M. E. Mueller und Z. Chen. „Effects of combustion models on soot formation and evolution in turbulent nonpremixed flames“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 37 (2019), S. 985–992. DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.096.
- [111] S. J. Harris und M. M. Maricq. „The role of fragmentation in defining the signature size distribution of diesel soot“. In: *Journal of Aerosol Science* 33 (2002), S. 935–942. DOI: 10.1016/S0021-8502(02)00045-9.

- [112] H. A. Housseiny, M. Singh, S. Emile, M. Nicoleau, R. L. V. Wal und P. Silveyra. „Identification of Toxicity Parameters Associated with Combustion Produced Soot Surface Chemistry and Particle Structure by in Vitro Assays“. In: *Biomedicines* 8 (2020), S. 345. DOI: 10.3390/biomedicines8090345.
- [113] Z. Huo, M. J. Cleary, A. R. Masri und M. E. Mueller. „A coupled MMC-LES and sectional kinetic scheme for soot formation in a turbulent flame“. In: *Combustion and Flame* 241 (2022), S. 112089. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.combustflame.2022.112089>.
- [114] J. Y. Hwang, S. H. Chung und W. Lee. „Effects of oxygen and propane addition on soot formation in counterflow ethylene flames and the role of C3 chemistry“. In: *Symposium (International) on Combustion* 27 (1998), S. 1531–1538. DOI: 10.1016/s0082-0784(98)80561-4.
- [115] IARC. *Chemical Agents and Related Occupations*. Bd. 100 F. Lyon (FR): International Agency for Research on Cancer, 2012.
- [116] ICAO. *Local Air Quality Technology Standards*. URL: [https://www.icao.int/environmental-protection/Pages/LAQ\\_TechnologyStandards.aspx](https://www.icao.int/environmental-protection/Pages/LAQ_TechnologyStandards.aspx) (besucht am 07.03.2021).
- [117] M. Ihme und H. Pitsch. „Modeling of radiation and nitric oxide formation in turbulent nonpremixed flames using a flamelet/progress variable formulation“. In: *Physics of Fluids* 20 (2008), S. 055110. DOI: 10.1063/1.2911047.
- [118] ISF. *International Sooting Flame Workshop*. URL: <https://www.adelaide.edu.au/cet/isfworkshop/data-sets/turbulent-flames> (besucht am 09.08.2021).
- [119] E. Ivanova, B. Noll und M. Aigner. „RANS and LES of Turbulent Mixing in Confined Swirling and Non-Swirling Jets“. In: *Proceeding of the 6th AIAA Theoretical Fluid Mechanics Conference*. AIAA 2011-3934. 2011. DOI: 10.2514/6.2011-3934.
- [120] E. J. Jensen und O. B. Toon. „The potential impact of soot particles from aircraft exhaust on cirrus clouds“. In: *Geophysical Research Letters* 24 (1997), S. 249–252. DOI: 10.1029/96GL03235.
- [121] B. Kärcher. „The importance of contrail ice formation for mitigating the climate impact of aviation“. In: *Journal of Geophysical Research: Atmospheres* 121 (2016), S. 3497–3505. DOI: 10.1002/2015jd024696.
- [122] A. Kempf, H. Forkel, J.-Y. Chen, A. Sadiki und J. Janicka. „Large-eddy simulation of a counterflow configuration with and without combustion“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 28 (2000), S. 35–40. DOI: 10.1016/s0082-0784(00)80192-7.
- [123] A. Kempf, R. P. Lindstedt und J. Janicka. „Large-eddy simulation of a bluff-body stabilized nonpremixed flame“. In: *Combustion and Flame* 144 (2006), S. 170–189. DOI: 10.1016/j.combustflame.2005.07.006.
- [124] I. M. Kennedy. „The health effects of combustion-generated aerosols“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (2007), S. 2757–2770. DOI: 10.1016/j.proci.2006.08.116.



- [125] M. R. Kholghy, A. Veshkini und M. J. Thomson. „The core-shell internal nanostructure of soot – A criterion to model soot maturity“. In: *Carbon* 100 (2016), S. 508–536. DOI: 10.1016/j.carbon.2016.01.022.
- [126] A. Khosousi und S. B. Dworkin. „Detailed modelling of soot oxidation by O<sub>2</sub> and OH in laminar diffusion flames“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015), S. 1903–1910. DOI: 10.1016/j.proci.2014.05.152.
- [127] A. Khosousi, F. Liu, S. B. Dworkin, N. A. Eaves, M. J. Thomson, X. He, Y. Dai, Y. Gao, F. Liu, S. Shuai und J. Wang. „Experimental and numerical study of soot formation in laminar coflow diffusion flames of gasoline/ethanol blends“. In: *Combustion and Flame* 162 (2015), S. 3925–3933. DOI: 10.1016/j.combustflame.2015.07.029.
- [128] T. Kim und Y. Kim. „Interactive transient flamelet modeling for soot formation and oxidation processes in laminar non-premixed jet flames“. In: *Combustion and Flame* 162 (2015), S. 1660–1678. DOI: 10.1016/j.combustflame.2014.11.029.
- [129] M. Köhler, I. Boxx, K. P. Geigle und W. Meier. „Simultaneous planar measurements of soot structure and velocity fields in a turbulent lifted jet flame at 3 kHz“. In: *Applied Physics B* 103 (2011), S. 271–279. DOI: 10.1007/s00340-011-4549-5.
- [130] M. Köhler, K. P. Geigle, W. Meier, B. M. Crosland, K. A. Thomson und G. J. Smallwood. „Sooting turbulent jet flame: characterization and quantitative soot measurements“. In: *Applied Physics B* 104 (2011), S. 409–425. DOI: 10.1007/s00340-011-4373-y.
- [131] M. Köhler, K.-P. Geigle, T. Blacha, P. Gerlinger und W. Meier. „Experimental characterization and numerical simulation of a sooting lifted turbulent jet diffusion flame“. In: *Combustion and Flame* 159 (2012), S. 2620–2635. DOI: 10.1016/j.combustflame.2012.01.015.
- [132] A. N. Kolmogorov. „The local structure of turbulence in incompressible viscous fluid for very large Reynolds numbers“. In: *Proceedings of the Royal Society of London. Series A: Mathematical and Physical Sciences* 434 (1991), S. 9–13. DOI: 10.1098/rspa.1991.0075.
- [133] H. Koo, V. Raman, M. E. Mueller und K.-P. Geigle. „LES of a sooting flame in a pressurized swirl combustor“. In: *Proceeding of the 54th AIAA Aerospace Sciences Meeting*. AIAA 2016-2123. 2016. DOI: 10.2514/6.2016-2123.
- [134] D. Kramer. „Hydrogen-powered aircraft may be getting a lift“. In: *Physics Today* 73 (2020), S. 27–29. DOI: 10.1063/pt.3.4632.
- [135] A. Kronenburg, R. W. Bilger und J. H. Kent. „Modeling soot formation in turbulent methane-air jet diffusion flames“. In: *Combustion and Flame* 121 (2000), S. 24–40. DOI: 10.1016/s0010-2180(99)00146-7.
- [136] S. Kruse, J. Ye, Z. Sun, A. Attili, B. Dally, P. Medwell und H. Pitsch. „Experimental investigation of soot evolution in a turbulent non-premixed prevaporized toluene flame“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 37 (2019), S. 849–857. DOI: 10.1016/j.proci.2018.05.075.
- [137] T. S. Kuan und R. P. Lindstedt. „Transported probability density function modeling of a bluff body stabilized turbulent flame“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005), S. 767–774. DOI: 10.1016/j.proci.2004.08.079.

- [138] L. Kuban, J.-P. Laval, W. Elsner, A. Tyliczszak und M. Marquillie. „LES modeling of converging-diverging turbulent channel flow“. In: *Journal of Turbulence* 13 (2012), N11. DOI: 10.1080/14685248.2012.661062.
- [139] D. S. Lee, D. W. Fahey, A. Skowron, M. R. Allen, U. Burkhardt, Q. Chen, S. J. Doherty, S. Freeman, P. M. Forster, J. Fuglestedt, A. Gettelman, R. R. D. León, L. L. Lim, M. T. Lund, R. J. Millar, B. Owen, J. E. Penner, G. Pitari, M. J. Prather, R. Sausen und L. J. Wilcox. „The contribution of global aviation to anthropogenic climate forcing for 2000 to 2018“. In: *Atmospheric Environment* 244 (2021), S. 117834. DOI: 10.1016/j.atmosenv.2020.117834.
- [140] S.-Y. Lee, S. R. Turns und R. J. Santoro. „Measurements of soot, OH, and PAH concentrations in turbulent ethylene/air jet flames“. In: *Combustion and Flame* 156 (2009), S. 2264–2275. DOI: 10.1016/j.combustflame.2009.09.005.
- [141] K. M. Leung, R. P. Lindstedt und W. P. Jones. „A simplified reaction mechanism for soot formation in nonpremixed flames“. In: *Combustion and Flame* 87 (1991), S. 289–305. DOI: 10.1016/0010-2180(91)90114-q.
- [142] D. O. Lignell, J. H. Chen, P. J. Smith, T. Lu und C. K. Law. „The effect of flame structure on soot formation and transport in turbulent nonpremixed flames using direct numerical simulation“. In: *Combustion and Flame* 151 (2007), S. 2–28. DOI: 10.1016/j.combustflame.2007.05.013.
- [143] P. R. Lindstedt. „Simplified Soot Nucleation and Surface Growth Steps for Non-Premixed Flames“. In: *Springer Series in Chemical Physics*. Springer Berlin Heidelberg, 1994, S. 417–441. DOI: 10.1007/978-3-642-85167-4\_24.
- [144] R. P. Lindstedt und B. B. O. Waldheim. „Modeling of soot particle size distributions in premixed stagnation flow flames“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 34 (2013), S. 1861–1868. DOI: 10.1016/j.proci.2012.05.047.
- [145] I. Litvinov, J. Yoon, C. Noren, M. Stöhr, I. Boxx und K. P. Geigle. „Time-resolved study of mixing and reaction in an aero-engine model combustor at increased pressure“. In: *Combustion and Flame* 231 (2021), S. 111474. DOI: 10.1016/j.combustflame.2021.111474.
- [146] F. Liu, H. Guo, G. Smallwood und omer Gulder. „Numerical modelling of soot formation and oxidation in laminar coflow non-smoking and smoking ethylene diffusion flames“. In: *Combustion Theory and Modelling* 7 (2003), S. 301–315. DOI: 10.1088/1364-7830/7/2/305.
- [147] K. Liu, S. B. Pope und D. A. Caughey. „Calculations of bluff-body stabilized flames using a joint probability density function model with detailed chemistry“. In: *Combustion and Flame* 141 (2005), S. 89–117. DOI: 10.1016/j.combustflame.2004.12.018.
- [148] M. Lucchesi, A. Abdelgadir, A. Attili und F. Bisetti. „Simulation and analysis of the soot particle size distribution in a turbulent nonpremixed flame“. In: *Combustion and Flame* 178 (2017), S. 35–45. DOI: 10.1016/j.combustflame.2017.01.002.
- [149] J. L. Lumley. „The Structure of Inhomogeneous Turbulence“. In: *Atmospheric Turbulence and Wave Propagation*. Hrsg. von A. M. Yaglom und V. I. Tatarski. Moskau: Nauka, 1967, S. 166–178.

- [150] B. F. Magnussen und B. H. Hjertager. „On mathematical modeling of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion“. In: *Symposium (International) on Combustion* 16 (1977), S. 719–729. DOI: 10.1016/s0082-0784(77)80366-4.
- [151] S. M. Mahmoud, G. J. Nathan, P. R. Medwell, B. B. Dally und Z. T. Alwahabi. „Simultaneous planar measurements of temperature and soot volume fraction in a turbulent non-premixed jet flame“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015), S. 1931–1938. DOI: 10.1016/j.proci.2014.06.122.
- [152] F. Mahrt, C. Marcolli, R. O. David, P. Grönquist, E. J. B. Meier, U. Lohmann und Z. A. Kanji. „Ice nucleation abilities of soot particles determined with the Horizontal Ice Nucleation Chamber“. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 18 (2018), S. 13363–13392. DOI: 10.5194/acp-18-13363-2018.
- [153] S. L. Manzello, D. B. Lenhert, A. Yozgatligil, M. T. Donovan, G. W. Mulholland, M. R. Zachariah und W. Tsang. „Soot particle size distributions in a well-stirred reactor/plug flow reactor“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (2007), S. 675–683. DOI: 10.1016/j.proci.2006.07.013.
- [154] D. L. Marchisio und R. O. Fox. „Solution of population balance equations using the direct quadrature method of moments“. In: *Journal of Aerosol Science* 36 (2005), S. 43–73. DOI: 10.1016/j.jaerosci.2004.07.009.
- [155] C. Marcolli, F. Mahrt und B. Kärcher. „Soot PCF: pore condensation and freezing framework for soot aggregates“. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 21 (2021), S. 7791–7843. DOI: 10.5194/acp-21-7791-2021.
- [156] J. W. Martin, M. Salamanca und M. Kraft. „Soot inception: Carbonaceous nanoparticle formation in flames“. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 88 (2022), S. 100956. DOI: 10.1016/j.pecs.2021.100956.
- [157] C. S. McEnally und L. D. Pfefferle. „Experimental study of nonfuel hydrocarbons and soot in coflowing partially premixed ethylene/air flames“. In: *Combustion and Flame* 121 (2000), S. 575–592. DOI: 10.1016/s0010-2180(99)00174-1.
- [158] M. A. Mendez, M. Balabane und J.-M. Buchlin. „Multi-Scale Proper Orthogonal Decomposition of Complex Fluid Flows“. In: *Journal of Fluid Mechanics* 870 (2018), S. 988–1036. DOI: 10.1017/jfm.2019.212.
- [159] B. Merci, D. Roekaerts, B. Naud und S. Pope. „Comparative study of micromixing models in transported scalar PDF simulations of turbulent nonpremixed bluff body flames“. In: *Combustion and Flame* 146 (2006), S. 109–130. DOI: 10.1016/j.combustflame.2006.04.010.
- [160] H. A. Michelsen, C. Schulz, G. J. Smallwood und S. Will. „Laser-induced incandescence: Particulate diagnostics for combustion, atmospheric, and industrial applications“. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 51 (2015), S. 2–48. DOI: 10.1016/j.pecs.2015.07.001.
- [161] H. A. Michelsen, M. B. Colket, P.-E. Bengtsson, A. D’Anna, P. Desgroux, B. S. Haynes, J. H. Miller, G. J. Nathan, H. Pitsch und H. Wang. „A Review of Terminology Used to Describe Soot Formation and Evolution under Combustion and Pyrolytic Conditions“. In: *ACS Nano* 14 (2020), S. 12470–12490. DOI: 10.1021/acsnano.0c06226.

- [162] B. Moorthy, C. Chu und D. J. Carlin. „Polycyclic Aromatic Hydrocarbons: From Metabolism to Lung Cancer“. In: *Toxicological Sciences* 145 (2015), S. 5–15. DOI: 10.1093/toxsci/kfv040.
- [163] M. E. Mueller, G. Blanquart und H. Pitsch. „Hybrid Method of Moments for modeling soot formation and growth“. In: *Combustion and Flame* 156 (2009), S. 1143–1155. DOI: 10.1016/j.combustflame.2009.01.025.
- [164] M. E. Mueller, G. Blanquart und H. Pitsch. „Modeling the oxidation-induced fragmentation of soot aggregates in laminar flames“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 33 (2011), S. 667–674. DOI: 10.1016/j.proci.2010.06.036.
- [165] M. E. Mueller, Q. N. Chan, N. H. Qamar, B. B. Dally, H. Pitsch, Z. T. Alwahabi und G. J. Nathan. „Experimental and computational study of soot evolution in a turbulent nonpremixed bluff body ethylene flame“. In: *Combustion and Flame* 160 (2013), S. 1298–1309. DOI: 10.1016/j.combustflame.2013.02.010.
- [166] M. E. Mueller und H. Pitsch. „Large eddy simulation of soot evolution in an aircraft combustor“. In: *Physics of Fluids* 25 (2013), S. 110812. DOI: 10.1063/1.4819347.
- [167] M. E. Mueller und H. Pitsch. „Large-eddy simulation subfilter modeling of soot-turbulence interactions“. In: *Physics of Fluids* 23 (2011), S. 115104. DOI: 10.1063/1.3657826.
- [168] M. E. Mueller und H. Pitsch. „LES model for sooting turbulent nonpremixed flames“. In: *Combustion and Flame* 159 (2012), S. 2166–2180. DOI: 10.1016/j.combustflame.2012.02.001.
- [169] V. Narayanaswamy und N. T. Clemens. „Simultaneous LII and PIV measurements in the soot formation region of turbulent non-premixed jet flames“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 34 (2013), S. 1455–1463. DOI: 10.1016/j.proci.2012.06.018.
- [170] G. J. Nathan, P. A. M. Kalt, Z. T. Alwahabi, B. B. Dally, P. R. Medwell und Q. N. Chan. „Recent advances in the measurement of strongly radiating, turbulent reacting flows“. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 38 (2012), S. 41–61. DOI: 10.1016/j.pecs.2011.04.001.
- [171] P. Nau, Z. Yin, K. P. Geigle und W. Meier. „Wall temperature measurements at elevated pressures and high temperatures in sooting flames in a gas turbine model combustor“. In: *Applied Physics B* 123 (2017), S. 279. DOI: 10.1007/s00340-017-6856-y.
- [172] K. G. Neoh. „Soot burnout in flames“. Dissertation. Massachusetts Institute of Technology, 1980.
- [173] K. Netzell, H. Lehtiniemi und F. Mauss. „Calculating the soot particle size distribution function in turbulent diffusion flames using a sectional method“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 31 (2007), S. 667–674. DOI: 10.1016/j.proci.2006.08.081.
- [174] F. Nicoud und F. Ducros. „Subgrid-Scale Stress Modelling Based on the Square of the Velocity Gradient Tensor“. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 62 (1999), S. 183–200. DOI: 10.1023/A:1009995426001.

- [175] K. Nold. „Numerische Simulation von turbulenten, rußenden, nicht-vorgemischten Jetflammen mit einem Transportgleichungs-PDF-Verfahren“. Dissertation. Institute of Combustion Technology for Aerospace Engineering Universität Stuttgart, 2012. DOI: 10.18419/OPUS-3893.
- [176] S. Paccati, D. Bertini, L. Mazzei, S. Puggelli und A. Andreini. „Large-Eddy Simulation of a Model Aero-Engine Sooting Flame With a Multiphysics Approach“. In: *Flow, Turbulence and Combustion* 106 (2020), S. 1329–1354. DOI: 10.1007/s10494-020-00202-5.
- [177] O. Park, R. A. Burns, O. R. H. Buxton und N. T. Clemens. „Mixture fraction, soot volume fraction, and velocity imaging in the soot-inception region of a turbulent non-premixed jet flame“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 36 (2017), S. 899–907. DOI: 10.1016/j.proci.2016.08.048.
- [178] W. Pejpichestakul, A. Frassoldati, A. Parente und T. Faravelli. „Kinetic modeling of soot formation in premixed burner-stabilized stagnation ethylene flames at heavily sooting condition“. In: *Fuel* 234 (2018), S. 199–206. DOI: 10.1016/j.fuel.2018.07.022.
- [179] W. Pejpichestakul, A. Frassoldati, A. Parente und T. Faravelli. „Soot Modeling of Ethylene Counterflow Diffusion Flames“. In: *Combustion Science and Technology* (2018), S. 1–11. DOI: 10.1080/00102202.2018.1540472.
- [180] L. Pereira Tardelli. „Investigating the LES strategy for the prediction of soot production in an aero-engine combustor“. Dissertation. Université Paris-Saclay, 2021.
- [181] N. Peters. *Turbulent Combustion*. Cambridge University Press, 2000. DOI: 10.1017/cbo9780511612701.
- [182] H. Pitsch und N. Peters. „A Consistent Flamelet Formulation for Non-Premixed Combustion Considering Differential Diffusion Effects“. In: *Combustion and Flame* 114 (1998), S. 26–40. DOI: 10.1016/s0010-2180(97)00278-2.
- [183] H. Pitsch, E. Riesmeier und N. Peters. „Unsteady Flamelet Modeling of Soot Formation in Turbulent Diffusion Flames“. In: *Combustion Science and Technology* 158 (2000), S. 389–406. DOI: 10.1080/00102200008947342.
- [184] H. Pitsch und H. Steiner. „Large-eddy simulation of a turbulent piloted methane/air diffusion flame (Sandia flame D)“. In: *Physics of Fluids* 12 (2000), S. 2541. DOI: 10.1063/1.1288493.
- [185] C. J. Pope und J. B. Howard. „Simultaneous Particle and Molecule Modeling (SPAMM): An Approach for Combining Sectional Aerosol Equations and Elementary Gas-Phase Reactions“. In: *Aerosol Science and Technology* 27 (1997), S. 73–94. DOI: 10.1080/02786829708965459.
- [186] S. B. Pope. „Computationally efficient implementation of combustion chemistry using in situ adaptive tabulation“. In: *Combustion Theory and Modelling* 1 (1997), S. 41–63. DOI: 10.1080/713665229.
- [187] S. B. Pope. „PDF methods for turbulent reactive flows“. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 11 (1985), S. 119–192. DOI: 10.1016/0360-1285(85)90002-4.
- [188] S. B. Pope. „Ten questions concerning the large-eddy simulation of turbulent flows“. In: *New Journal of Physics* 6 (2004), S. 35–35. DOI: 10.1088/1367-2630/6/1/035.

- [189] S. B. Pope. *Turbulent Flows*. Cambridge University Press, 2000. DOI: 10.1017/CB09780511840531.
- [190] P. P. Popov und S. B. Pope. „Large eddy simulation/probability density function simulations of bluff body stabilized flames“. In: *Combustion and Flame* 161 (2014), S. 3100–3133. DOI: 10.1016/j.combustflame.2014.05.018.
- [191] N. H. Qamar, Z. T. Alwahabi, Q. N. Chan, G. J. Nathan, D. Roekaerts und K. D. King. „Soot volume fraction in a piloted turbulent jet non-premixed flame of natural gas“. In: *Combustion and Flame* 156 (2009), S. 1339–1347. DOI: 10.1016/j.combustflame.2009.02.011.
- [192] V. Raman und H. Pitsch. „Large-eddy simulation of a bluff-body-stabilized non-premixed flame using a recursive filter-refinement procedure“. In: *Combustion and Flame* 142 (2005), S. 329–347. DOI: 10.1016/j.combustflame.2005.03.014.
- [193] H. Richter, S. Granata, W. H. Green und J. B. Howard. „Detailed modeling of PAH and soot formation in a laminar premixed benzene/oxygen/argon low-pressure flame“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 30 (2005), S. 1397–1405. DOI: 10.1016/j.proci.2004.08.088.
- [194] S. Richter, T. Kathrotia, C. Naumann, S. Scheuermann und U. Riedel. „Investigation of the sooting propensity of aviation fuel mixtures“. In: *CEAS Aeronautical Journal* 12 (2020), S. 115–123. DOI: 10.1007/s13272-020-00482-7.
- [195] P. Rodrigues, O. Gicquel, N. Darabiha, K. P. Geigle und R. Vicquelin. „Assessment of External Heat Transfer Modeling of a Laboratory-Scale Combustor: Effects of Pressure-Housing Environment and Semi-Transparent Viewing Windows“. In: *Journal of Engineering for Gas Turbines and Power* 141 (2018). DOI: 10.1115/1.4041242.
- [196] P. Rodrigues. „Modélisation multiphysique de flammes turbulentes suitees avec la prise en compte des transferts radiatifs et des transferts de chaleur parietaux“. Dissertation. Université Paris-Saclay, 2018.
- [197] P. Rodrigues, B. Franzelli, R. Vicquelin, O. Gicquel und N. Darabiha. „Coupling an LES approach and a soot sectional model for the study of sooting turbulent non-premixed flames“. In: *Combustion and Flame* 190 (2018), S. 477–499. DOI: 10.1016/j.combustflame.2017.12.009.
- [198] D. E. Rosner und J. J. Pyrkönen. „Bivariate moment simulation of coagulating and sintering nanoparticles in flames“. In: *AIChE Journal* 48 (2002), S. 476–491. DOI: 10.1002/aic.690480307.
- [199] A. Rowhani, Z. W. Sun, P. R. Medwell, Z. T. Alwahabi, G. J. Nathan und B. B. Dally. „Effects of the Bluff-Body Diameter on the Flow-Field Characteristics of Non-Premixed Turbulent Highly-Sooting Flames“. In: *Combustion Science and Technology* (2019), S. 1–19. DOI: 10.1080/00102202.2019.1680508.
- [200] A. Rowhani, Z. Sun, P. R. Medwell, G. J. Nathan und B. B. Dally. „Soot-flowfield interactions in turbulent non-premixed bluff-body flames of ethylene/nitrogen“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 38 (2021), S. 1125–1132. DOI: 10.1016/j.proci.2020.06.148.

- [201] S. P. Roy und D. C. Haworth. „A Systematic Comparison of Detailed Soot Models and Gas-Phase Chemical Mechanisms in Laminar Premixed Flames“. In: *Combustion Science and Technology* 188 (2016), S. 1021–1053. DOI: 10.1080/00102202.2016.1145117.
- [202] C. Saggese, S. Ferrario, J. Camacho, A. Cuoci, A. Frassoldati, E. Ranzi, H. Wang und T. Faravelli. „Kinetic modeling of particle size distribution of soot in a premixed burner-stabilized stagnation ethylene flame“. In: *Combustion and Flame* 162 (2015), S. 3356–3369. DOI: 10.1016/j.combustflame.2015.06.002.
- [203] S. Sahoo, X. Zhao und K. Kyprianidis. „A Review of Concepts, Benefits, and Challenges for Future Electrical Propulsion-Based Aircraft“. In: *Aerospace* 7 (2020), S. 44. DOI: 10.3390/aerospace7040044.
- [204] R. Saini und A. De. „Assessment of soot formation models in lifted ethylene/air turbulent diffusion flame“. In: *Thermal Science and Engineering Progress* 3 (2017), S. 49–61. DOI: 10.1016/j.tsep.2017.06.002.
- [205] S. Salenbauch, M. Sirignano, D. L. Marchisio, M. Pollack, A. D’Anna und C. Hasse. „Detailed particle nucleation modeling in a sooting ethylene flame using a Conditional Quadrature Method of Moments (CQMOM)“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 36 (2017), S. 771–779. DOI: 10.1016/j.proci.2016.08.003.
- [206] S. Salenbauch, M. Sirignano, M. Pollack, A. D’Anna und C. Hasse. „Detailed modeling of soot particle formation and comparison to optical diagnostics and size distribution measurements in premixed flames using a method of moments“. In: *Fuel* 222 (2018), S. 287–293. DOI: 10.1016/j.fuel.2018.02.148.
- [207] R. J. Santoro, T. T. Yeh, J. J. Horvath und H. G. Semerjian. „The Transport and Growth of Soot Particles in Laminar Diffusion Flames“. In: *Combustion Science and Technology* 53 (1987), S. 89–115. DOI: 10.1080/00102208708947022.
- [208] M. A. Schiener und R. P. Lindstedt. „Transported probability density function based modeling of soot particle size distributions in non-premixed turbulent jet flames“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* (2018). DOI: 10.1016/j.proci.2018.06.088.
- [209] M. A. Schiener und R. P. Lindstedt. „Joint-scalar transported PDF modelling of soot in a turbulent non-premixed natural gas flame“. In: *Combustion Theory and Modelling* (2018), S. 1–42. DOI: 10.1080/13647830.2018.1472391.
- [210] H. Schlichting und K. Gersten. *Grenzschicht-Theorie*. Springer-Verlag, 2006. DOI: 10.1007/3-540-32985-4.
- [211] P. J. Schmid. „Dynamic mode decomposition of numerical and experimental data“. In: *Journal of Fluid Mechanics* 656 (2010), S. 5–28. DOI: 10.1017/s0022112010001217.
- [212] E. von Schneidmesser, K. A. Mar und D. Saar. „Black Carbon in Europe. Targeting an Air Pollutant and Climate Forcer“. In: *IASS Policy Brief; 2* (2017). DOI: 10.2312/IASS.2017.010.
- [213] U. Schumann, P. Jeßberger und C. Voigt. „Contrail ice particles in aircraft wakes and their climatic importance“. In: *Geophysical Research Letters* 40 (2013), S. 2867–2872. DOI: 10.1002/grl.50539.

- [214] U. Schumann, I. Poll, R. Teoh, R. Koelle, E. Spinielli, J. Molloy, G. S. Koudis, R. Baumann, L. Bugliaro, M. Stettler und C. Voigt. „Air traffic and contrail changes over Europe during COVID-19: a model study“. In: *Atmospheric Chemistry and Physics* 21 (2021), S. 7429–7450. DOI: 10.5194/acp-21-7429-2021.
- [215] F. Setzwein, P. Ess und P. Gerlinger. „An implicit high-order k-exact finite-volume approach on vertex-centered unstructured grids for incompressible flows“. In: *Journal of Computational Physics* 446 (2021), S. 110629. DOI: 10.1016/j.jcp.2021.110629.
- [216] F. Sewerin und S. Rigopoulos. „An LES-PBE-PDF approach for predicting the soot particle size distribution in turbulent flames“. In: *Combustion and Flame* 189 (2018), S. 62–76. DOI: 10.1016/j.combustflame.2017.09.045.
- [217] C. R. Shaddix und J. Zhang. „Joint temperature-volume fraction statistics of soot in turbulent non-premixed jet flames“. In: *Proceedings of the 8th US Combustion Meeting*. Paper 070LT-0100. 2013.
- [218] H. Shariatmadar, P. G. Aleiferis und R. P. Lindstedt. „Particle size distributions in turbulent premixed ethylene flames crossing the soot inception limit“. In: *Combustion and Flame* (2022), S. 111978. DOI: 10.1016/j.combustflame.2021.111978.
- [219] M. Sieber, C. O. Paschereit und K. Oberleithner. „Spectral proper orthogonal decomposition“. In: *Journal of Fluid Mechanics* 792 (2016), S. 798–828. DOI: 10.1017/jfm.2016.103.
- [220] J. Singh, R. I. A. Patterson, M. Kraft und H. Wang. „Numerical simulation and sensitivity analysis of detailed soot particle size distribution in laminar premixed ethylene flames“. In: *Combustion and Flame* 145 (2006), S. 117–127. DOI: 10.1016/j.combustflame.2005.11.003.
- [221] M. Sirignano, J. Kent und A. D’Anna. „Detailed modeling of size distribution functions and hydrogen content in combustion-formed particles“. In: *Combustion and Flame* 157 (2010), S. 1211–1219. DOI: 10.1016/j.combustflame.2009.11.014.
- [222] L. Sirovich. „Turbulence and the dynamics of coherent structures. I. Coherent structures“. In: *Quarterly of Applied Mathematics* 45 (1987), S. 561–571.
- [223] Y. R. Sivathanu und G. M. Faeth. „Temperature / soot volume fraction correlations in the fuel-rich region of buoyant turbulent diffusion flames“. In: *Combustion and Flame* 81 (1990), S. 150–165. DOI: 10.1016/0010-2180(90)90061-u.
- [224] N. A. Slavinskaya und P. Frank. „A modelling study of aromatic soot precursors formation in laminar methane and ethene flames“. In: *Combustion and Flame* 156 (2009), S. 1705–1722. DOI: 10.1016/j.combustflame.2009.04.013.
- [225] N. Slavinskaya und O. Haidn. „Reduced Chemical Model for High Pressure Methane Combustion with PAH Formation“. In: *Proceedings of the AIAA Aerospace Sciences Meeting and Exhibit*. AIAA 2008-1012. 2008. DOI: 10.2514/6.2008-1012.
- [226] N. A. Slavinskaya, U. Riedel, S. B. Dworkin und M. J. Thomson. „Detailed numerical modeling of PAH formation and growth in non-premixed ethylene and ethane flames“. In: *Combustion and Flame* 159 (2012), S. 979–995. DOI: 10.1016/j.combustflame.2011.10.005.



- [227] J. Smagorinsky. „General circulation experiments with the primitive equations: I. The basic experiment“. In: *Monthly Weather Review* 91 (1963), S. 99–164. DOI: 10.1175/1520-0493(1963)091<0099:gcewtp>2.3.co;2.
- [228] M. von Smoluchowski. „Drei Vorträge über Diffusion, brownische Bewegung und Koagulation von Kolloidteilchen“. In: *Zeitschrift für Physik* 17 (1916), S. 557–585.
- [229] P. R. Spalart und V. Venkatakrisnan. „On the role and challenges of CFD in the aerospace industry“. In: *The Aeronautical Journal* 120 (2016), S. 209–232. DOI: 10.1017/aer.2015.10.
- [230] A. Steinbach. „Numerische Simulation der Rußbildung bei der Verbrennung komplexer Brennstoffe“. Dissertation. Institute of Combustion Technology for Aerospace Engineering Universität Stuttgart, 2019. DOI: 10.18419/OPUS-10446.
- [231] A. Steinbach, T. Dittmann, P. Gerlinger, M. Aigner und R. Eggels. „Soot Prediction in an Aircraft Combustor at Realistic Operation Conditions“. In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2018*. GT2018-75366. 2018. DOI: 10.1115/gt2018-75366.
- [232] M. Stöhr, C. M. Arndt und W. Meier. „Transient effects of fuel-air mixing in a partially-premixed turbulent swirl flame“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015), S. 3327–3335. DOI: 10.1016/j.proci.2014.06.095.
- [233] M. Stöhr, K. P. Geigle, R. Hedef, I. Boxx, C. D. Carter, M. Grader und P. Gerlinger. „Time-resolved study of transient soot formation in an aero-engine model combustor at elevated pressure“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 37 (2019), S. 5421–5428. DOI: 10.1016/j.proci.2018.05.122.
- [234] M. Stöhr, R. Sadanandan und W. Meier. „Phase-resolved characterization of vortex–flame interaction in a turbulent swirl flame“. In: *Experiments in Fluids* 51 (2011), S. 1153–1167. DOI: 10.1007/s00348-011-1134-y.
- [235] M. Stöhr, I. Boxx, C. D. Carter und W. Meier. „Experimental study of vortex–flame interaction in a gas turbine model combustor“. In: *Combustion and Flame* 159 (2012), S. 2636–2649. DOI: 10.1016/j.combustflame.2012.03.020.
- [236] J. C. Sutherland und A. Parente. „Combustion modeling using principal component analysis“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 32 (2009), S. 1563–1570. DOI: 10.1016/j.proci.2008.06.147.
- [237] N. Syred. „A review of oscillation mechanisms and the role of the precessing vortex core (PVC) in swirl combustion systems“. In: *Progress in Energy and Combustion Science* 32 (2006), S. 93–161. DOI: 10.1016/j.pecs.2005.10.002.
- [238] K. Taira, S. L. Brunton, S. T. M. Dawson, C. W. Rowley, T. Colonius, B. J. McKeon, O. T. Schmidt, S. Gordeyev, V. Theofilis und L. S. Ukeiley. „Modal Analysis of Fluid Flows: An Overview“. In: *AIAA Journal* 55 (2017), S. 4013–4041. DOI: 10.2514/1.j056060.
- [239] K. Taira, M. S. Hemati, S. L. Brunton, Y. Sun, K. Duraisamy, S. Bagheri, S. T. M. Dawson und C.-A. Yeh. „Modal Analysis of Fluid Flows: Applications and Outlook“. In: *AIAA Journal* 58 (2020), S. 998–1022. DOI: 10.2514/1.J058462.

- [240] L. Tardelli, B. Franzelli, P. Rodrigues und N. Darabiha. „Impact of the Reaction Mechanism Model on Soot Growth and Oxidation in Laminar and Turbulent Flames“. In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2019*. GT2019-90873. 2019. DOI: 10.1115/gt2019-90873.
- [241] P. A. Tesner, T. D. Smegiriova und V. G. Knorre. „Kinetics of dispersed carbon formation“. In: *Combustion and Flame* 17 (1971), S. 253–260. DOI: 10.1016/s0010-2180(71)80168-2.
- [242] L. Tian, M. A. Schiener und R. P. Lindstedt. „Fully coupled sectional modelling of soot particle dynamics in a turbulent diffusion flame“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 38 (2021), S. 1365–1373. DOI: 10.1016/j.proci.2020.06.093.
- [243] L. Tian und R. P. Lindstedt. „Impact of molecular mixing and scalar dissipation rate closures on turbulent bluff-body flames with increasing local extinction“. In: *Combustion and Flame* 206 (2019), S. 51–67. DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.04.039.
- [244] TNF. *Turbulent Non-premixed Flames Workshop, Bluff-Body Flames*. URL: <https://tnfworkshop.org/data-archives/bluffbod/> (besucht am 20.12.2021).
- [245] M. Trautz. „Das Gesetz der Reaktionsgeschwindigkeit und der Gleichgewichte in Gasen. Bestätigung der Additivität von  $Cv-3/2R$ . Neue Bestimmung der Integrationskonstanten und der Moleküldurchmesser“. In: *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie* 96 (1916), S. 1–28. DOI: 10.1002/zaac.19160960102.
- [246] D. J. Travis, A. M. Carleton und R. G. Lauritsen. „Climatology: Contrails reduce daily temperature range“. In: *Nature* 418 (2002), S. 601–601. DOI: 10.1038/418601a.
- [247] F. M. Troeltsch, M. Engelmann, A. E. Scholz, F. Peter, J. Kaiser und M. Hornung. „Hydrogen Powered Long Haul Aircraft with Minimized Climate Impact“. In: *Proceedings of the AIAA Aviation 2020 Forum*. AIAA 2020-2660. 2020. DOI: 10.2514/6.2020-2660.
- [248] M. S. Tsurikov, K. P. Geigle, V. Krüger, Y. Schneider-Kühnle, W. Stricker, R. Lückerrath, R. Hader und M. Aigner. „Laser-based investigation of soot formation in laminar premixed flames at atmospheric and elevated pressures“. In: *Combustion Science and Technology* 177 (2005), S. 1835–1862. DOI: 10.1080/00102200590970212.
- [249] V. Venkatakrisnan. „On the accuracy of limiters and convergence to steady state solutions“. In: *31st Aerospace Sciences Meeting*. AIAA 1993-0880. 1993. DOI: 10.2514/6.1993-880.
- [250] P. A. Vlasov und J. Warnatz. „Detailed kinetic modeling of soot formation in hydrocarbon pyrolysis behind shock waves“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 29 (2002), S. 2335–2341. DOI: 10.1016/s1540-7489(02)80284-x.
- [251] C. Voigt, J. Kleine, D. Sauer, R. H. Moore, T. Bräuer, P. L. Clercq, S. Kaufmann, M. Scheibe, T. Jurkat-Witschas, M. Aigner, U. Bauder, Y. Boose, S. Borrmann, E. Crosbie, G. S. Diskin, J. DiGangi, V. Hahn, C. Heckl, F. Huber, J. B. Nowak, M. Rapp, B. Rauch, C. Robinson, T. Schripp, M. Shook, E. Winstead, L. Ziemba, H. Schlager und B. E. Anderson. „Cleaner burning aviation fuels can reduce contrail cloudiness“. In: *Communications Earth & Environment* 2 (2021), S. 114. DOI: 10.1038/s43247-021-00174-y.
- [252] S. Wang, V. Yang, G. Hsiao, S.-Y. Hsieh und H. C. Mongia. „Large-eddy simulations of gas-turbine swirl injector flow dynamics“. In: *Journal of Fluid Mechanics* 583 (2007), S. 99–122. DOI: 10.1017/s0022112007006155.

- [253] J. Z. Wen, M. J. Thomson, M. F. Lightstone und S. N. Rogak. „Detailed Kinetic Modeling of Carbonaceous Nanoparticle Inception and Surface Growth during the Pyrolysis of C<sub>6</sub>H<sub>6</sub> behind Shock Waves“. In: *Energy & Fuels* 20 (2006), S. 547–559. DOI: 10.1021/ef050081q.
- [254] A. Wick, F. Priesack und H. Pitsch. „Large-Eddy Simulation and Detailed Modeling of Soot Evolution in a Model Aero Engine Combustor“. In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2017*. GT2017-63293. 2017. DOI: 10.1115/gt2017-63293.
- [255] A. Wulff und J. Hourmouziadis. „Technology review of aeroengine pollutant emissions“. In: *Aerospace Science and Technology* 1 (1997), S. 557–572. DOI: 10.1016/S1270-9638(97)90004-3.
- [256] Y. Xuan und G. Blanquart. „Effects of aromatic chemistry-turbulence interactions on soot formation in a turbulent non-premixed flame“. In: *Proceedings of the Combustion Institute* 35 (2015), S. 1911–1919. DOI: 10.1016/j.proci.2014.06.138.
- [257] H. Yamashita, M. Shimada und T. Takeno. „A numerical study on flame stability at the transition point of jet diffusion flames“. In: *Symposium (International) on Combustion* 26 (1996), S. 27–34. DOI: 10.1016/s0082-0784(96)80196-2.
- [258] S. Yang, J. K. Lew und M. E. Mueller. „Large Eddy Simulation of soot evolution in turbulent reacting flows: Presumed subfilter PDF model for soot–turbulence–chemistry interactions“. In: *Combustion and Flame* 209 (2019), S. 200–213. DOI: 10.1016/j.combustflame.2019.07.040.
- [259] S. Yang, J. K. Lew und M. E. Mueller. „Large Eddy Simulation of soot evolution in turbulent reacting flows: Strain-Sensitive Transport Approach for Polycyclic Aromatic Hydrocarbons“. In: *Combustion and Flame* 220 (2020), S. 219–234. DOI: 10.1016/j.combustflame.2020.07.008.
- [260] E. K. Yapp, D. Chen, J. Akroyd, S. Mosbach, M. Kraft, J. Camacho und H. Wang. „Numerical simulation and parametric sensitivity study of particle size distributions in a burner-stabilised stagnation flame“. In: *Combustion and Flame* 162 (2015), S. 2569–2581. DOI: 10.1016/j.combustflame.2015.03.006.
- [261] M. Yen, V. Magi und J. Abraham. „Modeling Soot Formation in Turbulent Jet Flames at Atmospheric and High-Pressure Conditions“. In: *Energy & Fuels* 32 (2018), S. 8857–8867. DOI: 10.1021/acs.energyfuels.8b01946.
- [262] Z. Yin und M. Stöhr. „Time–frequency localisation of intermittent dynamics in a bistable turbulent swirl flame“. In: *Journal of Fluid Mechanics* 882 (2020), A30. DOI: 10.1017/jfm.2019.762.
- [263] J. Yu, R. Sumathi und W. H. Green. „Accurate and Efficient Method for Predicting Thermochemistry of Polycyclic Aromatic Hydrocarbons – Bond-Centered Group Additivity“. In: *Journal of the American Chemical Society* 126 (2004), S. 12685–12700. DOI: 10.1021/ja048333+.
- [264] B. Zamuner und F. Dupoirieux. „Numerical Simulation of Soot Formation in a Turbulent Flame with a Monte-Carlo PDF Approach and Detailed Chemistry“. In: *Combustion Science and Technology* 158 (2000), S. 407–438. DOI: 10.1080/00102200008947343.



# Lebenslauf

## Persönliche Daten

Name: Martin Grader  
Geburtsdatum: 07. Juni 1990  
Geburtsort: Baden-Baden  
Staatsangehörigkeit: Deutsch

## Schulbildung

1996-2000: Grundschule Hilpertsau  
2000-2009: Albert-Schweitzer-Gymnasium Gernsbach

## Wehrdienst

2009: Offiziersschule der Luftwaffe, Fürstenfeldbruck  
2010: Luftwaffenausbildungsregiment, Germersheim

## Studium

2014-2016: M.Sc. in Luft- und Raumfahrttechnik,  
Universität Stuttgart  
2015: Auslandssemester, KTH, Stockholm (Schweden)  
2010-2014: B.Sc. in Luft- und Raumfahrttechnik,  
Universität Stuttgart  
2013-2014: Fachpraktikum, Alstom AG, Baden (Schweiz)

## Berufliche Tätigkeit

2017-2022: Wissenschaftlicher Mitarbeiter,  
Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.  
Institut für Verbrennungstechnik, Stuttgart