PDF-Simulation von Verbrennungsvorgängen in praxisnahen Brennkammern

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

Oliver Kunz
aus Heidelberg

Hauptberichter:	Prof. Dr.-Ing. Manfred Aigner Institut für Verbrennungstechnik Universität Stuttgart
Mitberichter:	Prof. Dr.-Ing. Bernhard Weigand Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt Universität Stuttgart
Tag der mündlichen Prüfung:	4.11.2002

Institut für Verbrennungstechnik
Universität Stuttgart
2003

Inhaltsverzeichnis

Inhaltsverzeichnis I
Symbolverzeichnis III
1. Einleitung 1
2. Theoretische Grundlagen 6
2.1 Strömungsmechanische Modelle 6
2.1.1 Grundgleichungen 6
2.1.2 Mittelungsmethode 8
2.1.3 Gemittelte Grundgleichungen 9
2.1.4 Turbulenzmodellierung 10
2.2 Verbrennungsmodelle 16
2.2.1 Laminare Chemie und Wirbelzerfallsmodell . . 28
2.2.2 Chemisches Gleichgewicht. 32
2.2.3 Flamelet-Modell 35
2.2.4 ILDM 38
2.3 Beschreibung der numerischen Verfahren . . . 39
3. JPDF-Verbrennungsmodell 42
3.1 Vorgehensweise und Modellgrundlagen 42
3.2 Herleitung der Submodelle 43
4. Ergebnisse der Berechnung technisch relevanter Anwendungsfälle . 53
4.1 DLR Jetflamme 55
4.1.1 Aufbau und Gitter 55
4.1.2 Vergleich Experiment – Simulation . . . 57
4.2 DLR Gasfilmdüse. 69
4.2.1 Aufbau und Gitter 69
4.2.2 Vergleich Experiment – Simulation . . . 75
4.3 MTU E3E Brennkammer 91
4.3.1 Aufbau und Gitter 91
4.3.2 Vergleich Experiment – Simulation . . . 97

5. Zusammenfassung 112

6. Anhang 116

7. Literaturverzeichnis 119

Symbolverzeichnis

Lateinische Symbole

Formelzeichen:	Einheit:	Bedeutung:
A_k	[konsist. Einh.]	Vorfaktor Reaktion k
C_j	[mol/m^3]	Molare Konzentration der Spezies j
c_p	[J/kg·K]	Spezifische Wärmekapazität
D	[m^2/s]	Diffusionskoeffizient
Da	[-]	Damköhler-Zahl
E_k	[J/kmol]	Aktivierungsenergie für Reaktion k
k	[m^2/s^2]	turbulente kinetische Energie
Ka	[-]	Karlowitz-Zahl
$k_{f,k;}$ $k_{b,k}$	[1/s]	Geschwindigkeitskoeffizient der Vorwärts- bzw. Rückwärtsreaktion k
Le	[-]	Lewis-Zahl
l_t	[m]	turbulentes Längenmaß
M_i	[kg/kmol]	Molmasse der Spezies i
NR	[-]	Anzahl der Reaktionen
NS	[-]	Anzahl der Spezies
R	[J/kg·K]	Spezifische Gaskonstante
	[J/kmol·K]	Universelle Gaskonstante
Re	[-]	Reynoldszahl
u,v,w	[m/s]	Axial-, Radial-, Umfangsgeschw.
u_L, s_L	[m/s]	laminare Flammengeschwindigkeit
Y	[-]	Massenanteil

Griechische Symbole

Formelzeichen:	Einheit:	Bedeutung:
β_k	[-]	Temperaturexponent Reaktion k
δ	[m]	Dicke der Flammenfront
ε	[m^2/s^3]	Dissipationsrate
ϕ	[konsist. Einh.]	beliebige skalare Transportgröße
	[-]	Äquivalenzverhältnis
λ	[W/m·K]	Wärmeleitfähigkeit
	[-]	Luftzahl
μ	[kg/m·s]	Viskosität
$\nu'_{i,k}$	[-]	stöchiometrischer Koeffizient von Edukt i in Reaktion k
$\nu''_{i,k}$	[-]	stöchiometrischer Koeffizient von Produkt i in Reaktion k
ρ	[kg/m^3]	Dichte
σ	[-]	turbulente Schmidt- o. Prandtl-Zahl
ω	[kmol/m^3·s]	chemischer Quellterm

Tiefgestellte Indices

Formelzeichen:	Bedeutung:
a, i	außen, innen
Br	Brennstoff
c	chemisch
F	Brennstoff
i, j, k, l	Laufindex
k	Kolmogorov
L	laminar
Ox	Oxidator
stoic.	stöchiometrisch
t	turbulent

Abkürzungen

BK	Brennkammer
CFD	Computational Fluid Dynamics
CARS	Coherent Anti-Raman Stokes
DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V.
DOC	Direct Operating Costs
DTRM	Diskrete Transfer Methode (Strahlung)
EBU/ EDC	Eddy Breakup Model/Eddy Dissipation Concept
GGW	Chemisches Gleichgewicht
ILDM	Intrinsic Low-Dimensional Manifolds
JPDF	Joint Probability Density Function
LBV	Luft/Brennstoff-Verhältnis
LDA	Laser Doppler Anemometrie
LIF	Laser Induzierte Fluoreszenz
MTU	MTU Aero Engines GmbH
PDF	Probability Density Function
RMS	Root Mean Square

1 Einleitung

Weltweit wachsender Wohlstand, voranschreitende Globalisierung und zunehmende Wirtschaftstätigkeit lassen auch in Zukunft ein durchschnittliches jährliches Wachstum des Luftverkehrs um etwa 5% erwarten [Airbus, 2001]. Dies bedeutet eine Verdopplung der Verkehrsleistung in Zeiträumen von 15 Jahren. Eine nicht zu vernachlässigende Begleiterscheinung des Luftverkehrs ist die Belastung der Umwelt durch Schadstoffe. Die Quelle dieser Belastungen ist das Flugtriebwerk. Wie in Abb. 1.1 illustriert, werden in einem Triebwerk Brennstoff und Luft idealerweise in die Produkte Kohlenstoffdioxid und Wasser umgewandelt. Da die Verbrennung global meist mit Luftüberschuss (=mager) erfolgt, liegen im Abgas auch die Edukte Sauerstoff und Stickstoff, sowie geringe Mengen von Schwefeldioxid (bei schwefelhaltigem Brennstoff) vor. In der Realität läuft der Verbrennungsprozess allerdings nicht so vollständig ab. Neben den soeben angegebenen Verbrennungsprodukten entstehen auch die Schadstoffe NO_X, SO_X, UHC, CO und Ruß. Im unteren Teil von Abb. 1.1 ist der prozentuale Anteil der Abgasbestandteile, bezogen auf den Massenstrom im Kerntriebwerk, dargestellt.

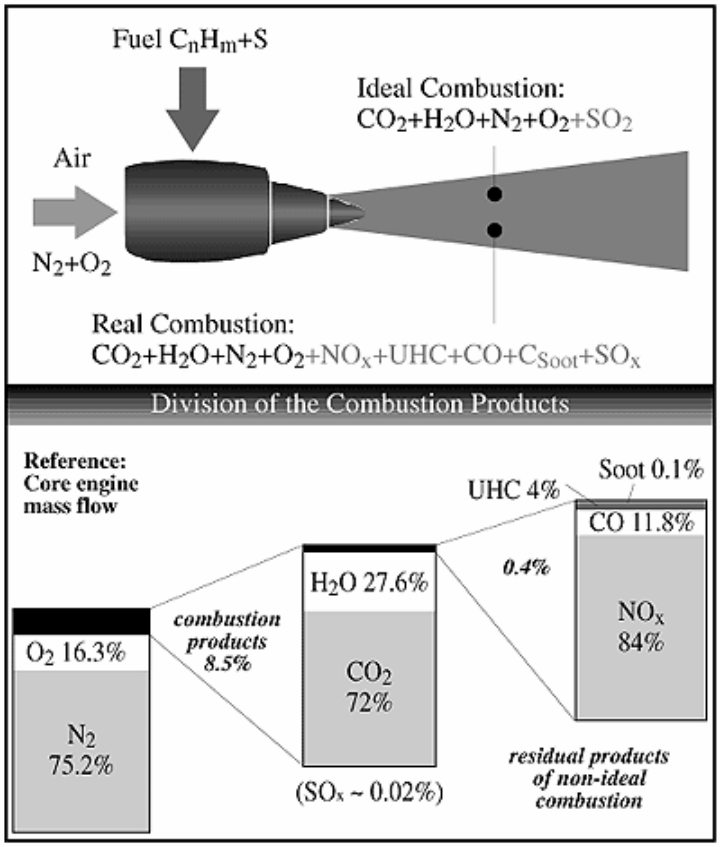


Abb. 1.1: Schadstoffemission aus Flugtriebwerken [IPCC, 1999]

Durch die Reduktion dieser Schadstoffemissionen kann die Umweltverträglichkeit von Flugtriebwerken enorm gesteigert werden. Um dieses Ziel triebwerksseitig zu erreichen, muss der Brennstoffverbrauch gesenkt und die Verbrennung optimiert werden. Diese Maßnahmen sind nicht nur ökologisch, sondern auch ökonomisch motiviert, da eine Senkung des Kerosinverbrauchs unmittelbaren Einfluss auf die Direct Operating Costs (DOC) des Flugzeugs hat. Um eine Größenvorstellung zu vermitteln, sei erwähnt, dass moderne Großtriebwerke 10-15t Brennstoff pro Flugstunde benötigen [Jane's, 2000]. Möglichkeiten zur Reduktion des Brennstoffverbrauchs liegen in der Erhöhung des Vortriebswirkungsgrades durch ein höheres Nebenstromverhältnis, der Steigerung des thermischen Wirkungsgrades durch eine höhere Brennkammeraustrittstemperatur und ein größeres Gesamtdruckverhältnis, sowie in der Erhöhung der Komponentenwirkungsgrade. Da aber beispielweise ein gesteigertes Gesamtdruckverhältnis zu einem starken Anstieg der NO_X-Emissionen führt [z.B. Walther, 1997], müssen neue Gemischbildungs- und Verbrennungsverfahren entwickelt werden, die diesen oder ähnlichen Abhängigkeiten Rechnung tragen.

Auf internationaler Ebene wurden von der International Civil Aviation Organization (ICAO) in den frühen 80'er Jahren Grenzwerte für Emissionen von Flugtriebwerken festgelegt. So wurden 1981 verbindliche Standards eingeführt, die Triebwerke zur Zertifizierung erreichen müssen [ICAO, 1981]. In den Jahren 1993 und 1998 wurden diese Standards extrem verschärft und ausgeweitet [CAEP2, 1993; CAEP3, 1998]. Neben ökologischen und ökonomischen Aspekten spielen somit auch Richtlinien von Seiten der Politik eine wichtige Rolle bei der Entwicklung und Modifizierung von Flugtriebwerken.

Unter Berücksichtigung dieses Hintergrundes, setzt die vorliegende Arbeit an der Verbesserung der Brennkammer, einem zentralen Bauteil des Kerntriebwerks, an.

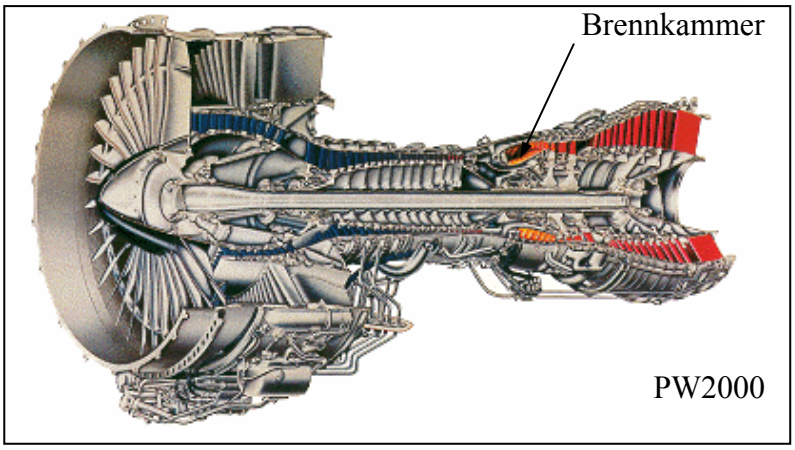


Abb. 1.2: Schnittzeichnung des Pratt & Whitney PW2000 Triebwerks

Abb. 1.2 zeigt die Lage der Brennkammer in einem modernen Flugtriebwerk. In der Brennkammer findet die Eindüsung des Kerosins, die Durchmischung des Brennstoff-Luft-Gemisches und der Verbrennungsprozess statt. Grundsätzliches Ziel ist, möglichst viel der inneren Energie des Brennstoffs in kinetische Energie umzuwandeln und somit für den Vortrieb des Flugzeugs zu nutzen.
Im Bereich der Brennkammerentwicklung müssen neue Berechnungsverfahren und Modelle entwickelt werden, um die Verbrennungsvorgänge genauer beschreiben und gegebenenfalls optimieren zu können. Von besonderem Interesse ist dabei die thermische Wärmefreisetzung, da sie einerseits maßgeblich an der Schadstoffproduktion (z.B. NO_X) beteiligt ist, anderseits aber auch großen Einfluss auf die Materialbelastung (BK-Wand, Turbinenschaufeln) und die Effizienz des Triebwerks (thermodynamischer Wirkungsgrad) hat.

Aufgabenstellung

Das Ziel der Arbeit ist die Entwicklung eines neuen Verbrennungsmodells zur Beschreibung der Wärmefreisetzung in realen Brennkammern. Das Modell soll einfach anwendbar, robust und für den praktischen Einsatz tauglich sein. Es soll eine Verbesserung gegenüber den etablierten Modellen darstellen und durch modularen Aufbau und gut definierte Schnittstellen zum einen ausbaubar sein und zum anderen eine Kopplung an verschiedene CFD-Codes ermöglichen. Es wird Wert darauf gelegt, dass das Modul den globalen Verbrennungsprozess beschreiben kann und sich nicht einer bestimmten Teilproblematik widmet. Dennoch soll die Möglichkeit bestehen, das Modell zu erweitern und Spezifikationen einzuführen. Bezüglich des Rechenaufwandes und des Speicherbedarfs soll das Modell eine praktische Berechnung technisch relevanter Probleme ermöglichen. Weiterhin sollen Erfahrungen und Vorteile bereits bestehender Ansätze verwendet werden. Nachteile und Beschränkungen anderer Verbrennungsmodelle sollen bei dem hier zu entwickelnden Modell vermieden werden. In diesem Zusammenhang sind insbesondere Speicherbedarf, Rechenzeit und eine breite Anwendbarkeit zu nennen. Ein Zugriff auf Tabellen soll vermieden werden, um bei dem Modul die Möglichkeit von parallelisiertem Rechnen offen zu halten und eine „Online"-Rechnung zu ermöglichen.

Aufgrund dieser Vorgaben wird in der vorliegenden Arbeit ein Verbrennungsmodell entwickelt, das auf gekoppelten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen und reduzierten chemischen Mechanismen beruht. Das Modell wird an einen kommerziellen Strömungslöser (FLUENT 5) angebunden. Der Aufbau ist modular gestaltet und bietet die Möglichkeit, Teilprogramme (z.B. Varianzberechnung) zu nutzen.

In drei Anwendungsfällen werden etablierte Verbrennungsmodelle und das neu entwickelte Modell angewandt und miteinander verglichen. Die untersuchten Verbrennungsprozesse steigern sich in Komplexität und Praxisnähe von Fall zu Fall. Die praktische Relevanz wird durch die Einordnung in das Borghi-Diagramm [Borghi, 1988] belegt. Weiterhin werden zur Validierung der Rechnungen experimentelle Daten benutzt und die Messergebnisse teilweise numerisch analysiert.

Die Arbeit ist in verschiedene thematische Abschnitte unterteilt. In Kapitel 2 werden die zum Verständnis dieser Arbeit notwendigen physikalisch-chemischen Grundlagen vermittelt. Kapitel 3 beschreibt Aufbau und Funktion des neu entwickelten Verbrennungsmodells. Im vierten Kapitel werden drei praxisrelevante Anwendungsfälle mit unterschiedlichen Modellen untersucht. Eine Zusammenfassung in Kapitel 5 schließt die Arbeit thematisch ab. In Kapitel 6 sind Anhänge und in Kapitel 7 die Literaturstellen aufgeführt.

Verbrennungsberechnung in realen Brennkammern

Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der Berechnung praxisnaher Verbrennungsprozesse. Als weitere Spezifikation stehen Flugtriebwerksbrennkammern im Zentrum des Interesses. Grundsätzlich stellt die Berechnung von Verbrennungsvorgängen in Triebwerken andere Anforderungen an die Simulationsrechnung als beispielsweise die Berechnung wissenschaftlicher Flammen (Laborflammen). Selbst wenn nur ein Segment einer Brennkammer berechnet wird, ist das Rechengitter oftmals relativ groß. Gitter haben nicht selten einige hunderttausend Zellen, bei der Berechnung ganzer Brennkammern kann die Zellenanzahl bis zu einigen Millionen Rechenzellen ansteigen. Der komplexe Aufbau von Brennkammern erfordert an manchen Orten (z.B. Düse, Kühl- und Mischluftöffnungen) eine starke Verfeinerung des Gitters, wodurch die Anzahl der Zellen nochmals ansteigt. Durch die Nutzung von unstrukturierten Gittern ist auch eine nachträgliche Gitterverfeinerung (Gitteradaption) möglich. Auch hierdurch steigt die Zellenanzahl. Eine hohe Anzahl von Rechenzellen bedeutet allerdings einen größeren Rechenaufwand und damit längere Rechenzeiten.

In der Brennkammer finden verschiedene physikalische und chemische Phänomene statt. Zu nennen sind hier turbulente Strömung, Verdampfungs- und Mischvorgänge, chemische Reaktion, Wärmefreisetzung und Wärmeübertragung. Die Vorgänge treten teilweise gekoppelt und abhängig von einander auf. In CFD-Codes werden die einzelnen Phänomene mit unterschiedlichen Modellen beschrieben. Der Rechenaufwand und damit die Rechenzeit steigt auch hier mit der Anzahl der verwendeten Teilmodelle. Für praktisch anwendbare Rechnungen müssen bei den

heutigen Rechnerleistungen Einschränkungen bei der Anzahl der Modelle und insbesondere bei der Komplexität der Modelle gemacht werden. Würde jedes der oben genannten Phänomene mit dem derzeit genauesten verfügbaren Modell erfasst werden, stiege die Rechenzeit in „utopische“ Dimensionen. Für praxisrelevante Berechnungen muss daher genau abgewogen werden, welche Modelle eingesetzt werden und welche Fehlerquellen sich durch getroffene Vereinfachungen ergeben. Dies gilt in besonderem Maße für die Berechnung der chemischen Reaktion, da die zugehörigen Teilmodelle sehr viel Rechenzeit benötigen und der Einfluss der Verbrennung auf alle anderen Phänomene erheblich ist.

Bei der Berechnung realer Brennkammerströmungen ist es meist schwierig, die Randbedingungen genau zu erfassen. Idealerweise wird bei Simulationsrechnungen auf exakte Messergebnisse zurückgegriffen. Diese liegen bei technischen Versuchsanordnungen oder gar Flugtriebwerken selten vor oder haben nicht die geforderte Genauigkeit. Gleiches gilt für Validierungsdaten. Hohe Temperaturen, hoher Druck, Lärm und Vibrationen, die zwangsläufig bei praxisnahen Anwendungen auftreten, erschweren die Messungen und haben einen negativen Einfluss auf die Genauigkeit der Messergebnisse. Weiterhin ist messtechnische Zugang zur Brennkammer, insbesondere für optische Messmethoden, in der Regel mit großem Aufwand verbunden. Nicht zu vernachlässigen sind auch die mit experimentellen Untersuchungen verbundenen hohen Kosten für Messgeräte, Prüfstand und Personal.

Ein Überblick über andere Arbeiten im Gebiet der Brennkammerberechnung ist im zugehörigen Kapitel 4.3 gegeben. Literaturstellen zu Submodellen sind ebenfalls in den jeweiligen Kapiteln genannt.

2 Theoretische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die zur numerischen Beschreibung von turbulenten Verbrennungsprozessen notwendigen Grundlagen zusammengefasst. Neben den strömungsmechanischen Modellen werden Verbrennungsmodelle, sowie die angewandten numerischen Methoden vorgestellt.

2.1 Strömungsmechanische Modelle

Die mathematische Beschreibung von Strömungsvorgängen ist ein sehr umfangreiches Gebiet, sodass hier nur einige elementare und im Verlauf dieser Arbeit relevante Aspekte aufgegriffen werden können.

2.1.1 Grundgleichungen

Strömungsmechanische Prozesse können durch die globale Kontinuitätsgleichung und die Navier-Stokes-Gleichungen [Schlichting, 1979; Truckenbrodt, 1980] mathematisch beschrieben werden. Grundlage dieser Erhaltungsgleichungen ist die Annahme, dass das Berechnungsgebiet von einem Kontinuum durchströmt wird. Die Massenerhaltungs- oder Kontinuitätsgleichung leitet sich aus der Bilanzierung der zu- bzw. abfließenden Massenströme und der zeitlichen Massenänderung durch Dichteänderung in einem Volumenelement her. Die im Folgenden angeführten Impulserhaltungsgleichungen gelten für Fluide unter der Annahme, dass Gravitations- und elektromagnetische Kräfte nicht vorhanden sind oder als vernachlässigbar klein angesehen werden können. Weiterhin wird in dieser Arbeit vorausgesetzt, dass es sich bei dem strömenden Medium um inkompressible Newtonsche Fluide handelt. Die Erhaltungsgleichungen für Masse und Impuls lauten unter diesen Annahmen in Tensornotation [Schlichting, 1979]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho\, u_k\right) = 0 \tag{2.1}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\rho\, u_i\right) + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho\, u_i\, u_k\right) = \frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_k}\tau_{ik} \tag{2.2}$$

Hierbei ist τ_{ik} der Newtonsche Schubspannungstensor:

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

Wird ein chemisch reagierendes Fluid betrachtet, so findet zudem Stoffumsatz und Freisetzung von Reaktionswärme statt. Daher ergeben sich in diesem Fall weitere

Beziehungen, die den Transport der beteiligten Spezies und die Wärmefreisetzung beschreiben. Die Speziestransportgleichungen lauten:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\, Y_i) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho\, Y_i\, u_k) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\rho\, D \frac{\partial Y_i}{\partial x_k}\right) + \dot{\omega}_i \qquad (2.4)$$

Hierbei sind Druck- und Thermodiffusion vernachlässigt, da diese Prozesse in den in dieser Arbeit untersuchten Strömungen von untergeordneter Bedeutung sind. Weiterhin wird ein vereinfachtes Diffusionsgesetz mit konstantem molekularen Diffusionskoeffizienten für alle beteiligten Spezies verwendet. Die chemische Reaktionsrate wird durch $\dot{\omega}$ beschrieben. Auf diesen Term wird in Kapitel 2.2.1 näher eingegangen.

Die Energieerhaltung des Systems wird anhand der statischen Enthalpie formuliert. Auch hier vereinfacht sich die exakte Herleitung [z.B. Williams, 1985] unter Annahme einer konstanten Lewis-Zahl Le=1 und damit $\lambda / c_p = \rho D$. Hierbei ist λ die thermische Leitfähigkeit, c_p die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck, ρ die Dichte und D die zugehörige Diffusionskonstante. Wenn zudem Druckschwankungen vernachlässigt werden, erhält man die folgende Erhaltungsgleichung für die Enthalpie:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\, h) + \frac{\partial}{\partial x_k}(\rho\, h\, u_k) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\mu}{Pr}\frac{\partial h}{\partial x_k}\right) + \rho\, S_h \qquad (2.5)$$

Der Quellterm in der Enthalpiegleichung S_h repräsentiert Wärmeverluste oder -gewinne beispielsweise durch Strahlung oder Verdampfung von Tropfen.

Die in den Gleichungen (2.1) – (2.5) auftretende Dichte wird aus der Zustandsgleichung für ideale Gase berechnet [z.B. Frohn, 1989; Atkins, 1992; Libby u. a.,1994].

$$\rho = \frac{p}{R\, T} \qquad (2.6)$$

Zur Charakterisierung von Strömungsprozessen wird häufig die Reynoldszahl Re [z.B. Rotta, 1972; Schlichting, 1979] benutzt.

$$Re = \frac{\rho \cdot u \cdot L}{\mu} \qquad (2.7)$$

Hierbei ist ρ die Dichte, u eine Geschwindigkeit, L ein charakteristisches Längenmaß und μ die Viskosität. Die Reynoldszahl ist ein Indikator, um laminare von turbulenten Strömungszuständen zu unterscheiden. Übersteigt Re einen bestimmten kritischen Wert, so schlägt eine Strömung vom laminaren Zustand in den ungeregelten, turbulenten Zustand um. Turbulenz ist dabei gekennzeichnet durch ungeregelte örtliche und zeitliche Schwankungen von physikalischen Größen, die nach dem Zufallsprinzip ablaufen [Hinze, 1975]. Turbulenz ist immer ein dreidimensionales Phänomen. Weitere

grundlegende Eigenschaften der Turbulenz werden in der einschlägigen Literatur, beispielsweise bei [Rotta, 1972; Bradshaw, 1976; Frost u. a., 1977] beschrieben. Wie die meisten technisch relevanten Strömungsvorgänge, so fallen auch die in dieser Arbeit untersuchten Verbrennungsprozesse in den Bereich turbulenter Strömungen. Bei Umströmungsprozessen, wie der Tragflächen- oder Karosserieumströmung, ist die auftretende Turbulenz in der Regel unerwünscht, da sich bei ihr, im Vergleich zu laminarer Umströmung, der Luftwiderstand erhöht [Anderson, 1991]. Im Gegensatz dazu ist man bei internen Strömungen oftmals auf andere physikalische Eigenschaften der Turbulenz angewiesen. Beispielsweise werden Mischprozesse durch hohe Turbulenz intensiviert. Dieser Umstand wird bei der hochgradig turbulenten Mischung von Brennstoff und Oxidator in Flugtriebwerksbrennkammern genutzt.

2.1.2 Mittelungsmethoden

Die angeführten Erhaltungsgleichungen gelten in der obigen Formulierung für Momentanzustände in Strömungen. In den meisten realen Verbrennungsvorgängen, insbesondere in den hier untersuchten drallbehafteten, turbulenten Flammen, treten sehr hohe Schwankungen der Erhaltungsgrößen auf. Während beispielsweise bei der thermischen Auslegung von Brennkammern auch Spitzenwerte (z.B. Temperatur) von Bedeutung sind, sind zur Charakterisierung von Flammen und um globale Aussagen treffen zu können, zeitliche Mittelwerte von Interesse. Bei strömungsmechanischen Fragestellungen wie der Turbulenzmodellierung bedient man sich daher häufig Mittelungsmethoden. Dabei wird zwischen der Reynolds- und der Favre-Mittelung unterschieden. Die beiden Mittelungsmethoden haben gemein, dass der Momentanwert einer Erhaltungsgröße Φ in einen Mittelwert $\overline{\Phi}$ und einen Schwankungsanteil Φ' zerlegt wird. So ergibt sich für eine beliebige Reynolds-gemittelte Größe:

$$\Phi(x,t) = \overline{\Phi}(x,t) + \Phi'(x,t) \tag{2.8}$$

wobei:

$$\overline{\Phi'} \equiv 0$$

Bei den untersuchten Verbrennungsprozessen handelt es sich um turbulente Strömungen mit signifikanten Dichteänderungen. In diesen Fällen ist die dichtegemittelte Favre-Darstellung von Vorteil [Favre, 1969]. Bei der Reynolds-Mittelung der Erhaltungsgleichungen (vgl. Gl. 2.1 – 2.5) treten Tripelkorrelationen der Form $\overline{\rho' u' \Phi'}$ auf. Diese Terme sind a priori unbekannt und müssen modelliert werden. Wird hingegen die Favre-Mittelung benutzt, so entstehen auch bei Vorhandensein von Dichteschwankungen nur (Doppel-) Korrelationen der Form $\overline{\rho}\, \widetilde{u'' \Phi''}$. Aus diesem

Grund wird bei der Berechnung von Verbrennungsvorgängen oftmals die Favre-Mittelung bevorzugt [Bilger, 1976].
Eine beliebige Favre-gemittelte Größe ist definiert durch:

$$\tilde{\Phi} = \frac{\overline{\rho \Phi}}{\bar{\rho}} \tag{2.9}$$

damit ist:

$$\Phi(x,t) = \tilde{\Phi}(x,t) + \Phi''(x,t) \tag{2.10}$$

wobei:

$$\overline{\rho \Phi''} = 0 \text{ und } \overline{\Phi''} \neq 0$$

Zwischen Reynolds- und Favre-Mittelung besteht der Zusammenhang:

$$\tilde{\Phi} = \bar{\Phi} + \frac{\overline{\rho' \Phi'}}{\bar{\rho}} \tag{2.11}$$

2.1.3 Gemittelte Grundgleichungen

Um die in Kapitel 2.1.2 erläuterte Problematik der unbekannten Tripelkorrelationen zu vermeiden, wird in der vorliegenden Arbeit mit der dichtegewichteten Favre-Mittelung gearbeitet [Kuo, 1986].
Werden die Momentangrößen in den obigen Grundgleichungen durch den Favre-Ansatz in Gleichung (2.10) ersetzt und danach die Mittelung durchgeführt, so ergibt sich die folgende Darstellung der Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Spezieserhaltung und Energie:

$$\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\bar{\rho}\,\tilde{u}_k\right) = 0 \tag{2.12}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\bar{\rho}\tilde{u}_i\,\tilde{u}_k\right) = \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\tilde{\tau}_{ik} - \bar{\rho}\,\widetilde{u_i'' u_k''}\right) \tag{2.13}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\bar{\rho}\,\tilde{Y}_i\,\tilde{u}_k\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\mu}{\sigma_t}\frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_k} - \bar{\rho}\,\widetilde{u_k'' Y_i''}\right) + \overline{\dot{\omega}_i} \tag{2.14}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\bar{\rho}\,\tilde{h}\,\tilde{u}_k\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\mu}{Pr}\frac{\partial \tilde{h}}{\partial x_k} - \bar{\rho}\,\widetilde{u_k'' h''}\right) + \overline{\rho\, S_h} \tag{2.15}$$

Durch die Annahme, dass die Mittelwerte zeitlich konstant sind, was bei den in dieser Arbeit betrachteten stationären Strömungen der Fall ist, vereinfachen sich diese Erhaltungsgleichungen im Vergleich zu den Ausgangsgleichungen (vgl. Gl. 2.1-2.5) noch weiter, da die zeitlichen Ableitungen wegfallen.

Die Terme $\overline{\rho}\,\widetilde{u_i'' u_k''}$ in den Impulsgleichungen stellen bei dreidimensionalen Problemstellungen die neun Komponenten des Reynoldsspannungstensors dar. Aufgrund der Symmetrie des Spannungstensors müssen aber lediglich sechs Komponenten berechnet werden [Strehlow, 1985]. Diese Aufgabe übernehmen die im folgenden Kapitel beschriebenen Turbulenzmodelle.

Die turbulenten Glieder in der Spezies- und Enthalpietransportgleichung werden analog zum Boussinesq-Ansatz modelliert [Kuo, 1986]:

$$-\overline{\rho\,\tilde{\mu}_i''\,\tilde{\Phi}''} = \frac{\mu_t}{\sigma_\Phi}\frac{\partial\tilde{\Phi}}{\partial x_i} \tag{2.16}$$

wobei $\tilde{\Phi}$ stellvertretend für die jeweilige skalare Größe steht. σ_Φ ist eine turbulente Schmidt- oder Prandtl-Zahl und μ_t die turbulente kinematische Viskosität, die durch das benutzte Turbulenzmodell bestimmt wird.

Der chemische Quellterm $\overline{\dot{\omega}_i}$ in der Speziestransportgleichung stellt das Hauptproblem bei der Modellierung von Verbrennungsvorgängen dar. Der Quellterm ist eine stark nicht-lineare Funktion mehrerer skalarer Größen. Der mittlere Quellterm errechnet sich daher nicht aus den Mittelwerten der Skalare.

$$\overline{\dot{\omega}_i(\Phi_1,\Phi_2,...)} \neq \dot{\omega}_i(\overline{\Phi}_1,\overline{\Phi}_2,...) \tag{2.17}$$

Auf die Berechnung dieses Terms wird in den Kapiteln 2.2 und 3 ausführlich eingegangen.

2.1.4 Turbulenzmodellierung

Grundsätzlich haben Turbulenzmodelle die Aufgabe, turbulente Strömungsvorgänge mathematisch zu beschreiben. Im Folgenden werden verschiedene Ansätze vorgestellt, die als Ziel haben, den in Kapitel 2.1.1 beschriebenen Zustand der Turbulenz rechnerisch zu erfassen.

Bei der Direkten Numerischen Simulation (DNS) [Reynolds, 1989] werden die turbulenten Strukturen bis in die kleinsten turbulenten Skalen aufgelöst und die Navier-Stokes-Gleichungen ohne statistische Mittelung gelöst. Damit ergibt sich die Notwendigkeit eines extrem feinen Rechennetzes und einer sehr kleinen Zeitschrittweite. Bei den heutigen Rechnerleistungen sind mittels der DNS nur sehr einfache Problemstellungen (kleine Strömungsbereiche, kleine Reynoldszahl) berechenbar. DNS eignet sich daher zur Erkennung grundlegender Gesetzmäßigkeiten in Teilgebieten (da wegen des hohen Rechenaufwands nur kleine Gebiete berechet werden können) von Strömungen. Teilweise können die dadurch gewonnenen Erkenntnisse auf komplexere Strömungsfelder angewendet werden. Für praktische

Anwendungen im Bereich realer Verbrennungsprozesse ist die Nutzung von DNS noch nicht absehbar.

Eine weitere, momentan als sehr zukunftsträchtig angesehene, Möglichkeit der Turbulenzmodellierung ist die „Grobstruktursimulation“ (engl. Large Eddy Simulation, LES) [Reynolds, 1989; Ghosal u. a., 1995; Métais u. a., 1996]. Bei diesem Ansatz werden die großen Strukturen einer turbulenten Strömung direkt simuliert, während die kleineren Strukturen mit einem einfacheren Turbulenzmodell (z.B. Smagorinsky Modell) beschrieben werden. Grundmotivation ist hierbei, die energiereichen und somit für das Strömungsbild wichtigen großen Wirbel direkt zu berechnen und die zu Gitterauflösungs- und Rechenzeitproblemen führende Simulation der kleinen Wirbel sogenannten Feinstrukturmodellen (engl. sub-grid scale turbulence models) zu überlassen.

Die Unterteilung in große und kleine Wirbelstrukturen und damit die Festlegung des Übergangs von direkter Berechnung der Turbulenz auf Turbulenzmodellierung erfolgt durch energetische Betrachtungen [Rotta, 1972], beispielsweise mittels der Energiekaskade [Kolmogorov, 1961; Hinze, 1975]. Die Lage des Übergangsbereiches von Grob- auf Feinstruktur und somit die Maschenweite des Rechengitters ist nicht universell bestimmbar, sondern über die Reynoldszahl abhängig vom jeweiligen Strömungsfall.

Im Vergleich zur DNS ergibt sich bei LES ein wesentlich geringerer Rechenaufwand. Dennoch ist der Aufwand dieser Vorgehensweise bei praktischen Problemstellungen immer noch sehr hoch. Gegenüber RANS-Methoden hat LES den Vorteil, dass nur bei der Berechnung der feinen Strukturen Mittelungsmethoden angewandt werden.

In der vorliegenden Arbeit werden Verbrennungsvorgänge in realitätsnahen Brennkammern berechnet. Die mit der praxisnahen Berechnung dieser Vorgänge verbundenen Anforderungen an die Strömungsberechnung sind sehr hoch. Einerseits muss das Rechengitter, wie in Kapitel 2.3 näher beschrieben, eine hohe Qualität und Auflösung haben, andererseits sind durch den hohen Speicher- und Rechenaufwand Beschränkungen hinsichtlich der Gittergröße gegeben. Die für LES notwendige Gittergröße würde bei der Berechnung realer Brennkammern zu extrem großen Rechenzeiten und Speicherproblemen führen [Bray, 1996; Cannon u. a., 2001]. Ein weiteres Defizit von LES für die hier betrachteten Problemstellungen ist, dass bei chemisch reagierenden Strömungen insbesondere die Vorgänge auf sehr feinskaliger Ebene eine große Rolle spielen. Diese Vorgänge werden bei LES nicht direkt, sondern mittels statistischer Modelle berechnet. Hiermit fällt ein potenzieller Vorteil der Methode weg. Wie bereits erwähnt, ist die Nachrechnung realer Anordnungen mittels

LES mit einem extrem hohen Rechenaufwand verbunden. Da reale Anwendungen aber im Mittelpunkt der vorliegenden Arbeit stehen, findet LES keine Anwendung, sondern „einfachere“ statistische Modelle, die sogenannten Reynolds-gemittelten-Navier-Stokes Methoden (RANS, Reynolds Averaged Navier Stokes).

Bei den RANS-Methoden werden ausschließlich gemittelte Größen verwendet. Wie schon in Kapitel 2.1.2 erwähnt, entstehen durch die zeitliche Mittelung unbekannte Korrelationen von Geschwindigkeitsfluktuationen, den sogenannten Reynoldsspannungen. Innerhalb der statistischen Turbulenzmodelle besteht das größte Problem darin, einen Schließungsansatz für die in den gemittelten Erhaltungsgleichungen auftretenden Momente zweiter Ordnung zu finden. Prinzipiell können dabei zwei verschiedene Ansätze unterschieden werden: der Wirbelviskositätsansatz oder die direkte Berechnung der Reynoldsspannungen anhand von Transportgleichungen für die einzelnen Spannungen. Ergänzend zu diesen beiden Ansätzen wären noch die algebraischen Reynolds Spannungs Modelle (ARSM, Algebraic Reynolds Stress Model) zu nennen, bei denen ein algebraischer Ansatz für die Spannungen gewählt wird [Rodi, 1976; Jyoti, 1996].

Beim Wirbelviskositätsansatz wird der Reynoldssche Spannungstensor mit einem Gradientenflussansatz nach Boussinesq [Boussinesq, 1877; Hinze, 1975] modelliert. Hierbei werden die turbulenten Spannungen auf Gradienten der Hauptströmung zurückgeführt, wobei der Proportionalitätsfaktor eine zu modellierende turbulente Scheinviskosität μ_t (= turbulente Wirbelviskosität) ist.

$$-\bar{\rho}\,\widetilde{u_i'' u_j''} = \mu_t \left(\frac{\partial \tilde{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \tilde{u}_j}{\partial x_i} \right) - \frac{2}{3} \left(\bar{\rho}\,\tilde{k} + \mu_t \frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k} \right) \delta_{ij} \tag{2.18}$$

Im Laufe der Jahre entwickelten sich immer komplexere Modelle. Ausgehend von 0-Gleichungs-Modellen, bei denen algebraische Ausdrücke für die turbulente Viskosität verwendet werden [Baldwin, 1978], über 1-Gleichungs-Modelle, bei denen eine zusätzliche Transportgleichung für einen die Turbulenz beschreibenden Skalar gelöst wird [Spalart u. a., 1992], sind heute die 2-Gleichungs-Modelle am gebräuchlichsten. Bei den 2-Gleichungs-Modellen werden zwei Transportgleichungen für turbulenzbeschreibende Skalare gelöst. In die Kategorie der 2-Gleichungs-Modelle fallen unter anderem die im Folgenden näher beschriebenen k-ε-Modelle.

Eine andere Vorgehensweise zur Bestimmung der Reynoldsspannungen nutzt man bei den ebenfalls im Folgenden näher beschriebenen Reynolds-Spannungs-Modellen (RSM).

Das k-ε-Modell

Das k-ε-Modell [Jones u. a., 1972; Launder u. a., 1972] ist ein halb-empirisches Turbulenzmodell, das auf Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie $\tilde{k}$ mit $\bar{\rho}\tilde{k} = \frac{1}{2}\overline{\rho u_k''^2}$ und ihrer Dissipationsrate $\tilde{\varepsilon}$ mit $\bar{\rho}\tilde{\varepsilon} = \overline{\mu\left(\partial u_k''/\partial x_l\right)\left(\partial u_l''/\partial x_k\right)}$ basiert. Der Reynoldssche Spannungstensor wird hier mit einem linearen Gradientenflussansatz nach Boussinesq [Hinze, 1975] bestimmt. Dabei werden die turbulenten Spannungen auf Gradienten der Hauptströmung zurückgeführt. Der Proportionalitätsfaktor ist, wie in Kapitel 2.1.3 bereits erwähnt, eine turbulente Scheinviskosität μ_t. Mit einigen vereinfachenden Modellannahmen, die an anderer Stelle ausführlich diskutiert werden [Williams, 1985; Kuo, 1986; Libby u. a., 1994], lauten die Transportgleichungen für $\tilde{k}$ und $\tilde{\varepsilon}$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{\rho}\tilde{k} + \frac{\partial}{\partial x_k}\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{k} - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k}\right)\frac{\partial \tilde{k}}{\partial x_k}\right) = \tilde{P} - \bar{\rho}\tilde{\varepsilon} \tag{2.19}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{\rho}\tilde{\varepsilon} + \frac{\partial}{\partial x_k}\bar{\rho}\tilde{u}_k\tilde{\varepsilon} - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon}\right)\frac{\partial \tilde{\varepsilon}}{\partial x_k}\right) = C_1\tilde{P}\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} - C_2\bar{\rho}\frac{\tilde{\varepsilon}^2}{\tilde{k}} \tag{2.20}$$

Hierbei berücksichtigt $\tilde{P}$ die Produktion von turbulenter kinetischer Energie durch Geschwindigkeitsgradienten in der Strömung.

$$\tilde{P} = \frac{1}{2}\mu_t\left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_l} + \frac{\partial \tilde{u}_l}{\partial x_k}\right)^2 - \frac{2}{3}\mu_t\left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}\right)^2 - \frac{2}{3}\tilde{\rho}\tilde{k}\left(\frac{\partial \tilde{u}_k}{\partial x_k}\right) \tag{2.21}$$

Die Scheinviskosität μ_t (=turbulente Wirbelviskosität) wird in Abhängigkeit von der turbulenten kinetischen Energie und der Dissipationsrate berechnet.

$$\mu_t = C_\mu\bar{\rho}\frac{\tilde{k}^2}{\tilde{\varepsilon}} \tag{2.22}$$

Die Wirbelviskosität wird vereinfachend wie ein Skalar betrachtet.
Die empirischen Koeffizienten der Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie und die Dissipationsrate lauten beim Standard-k-ε-Modell [z.B. Rodi, 1978]:

C_μ	σ_k	σ_ε	C_1	C_2
0.09	1.0	1.3	1.44	1.92

Tab. 4.1: Koeffizienten des Standard-k-ε-Modells [Rodi, 1978]

Diese Werte sind für eine möglichst breite Anwendungsgültigkeit des Modells optimiert [Jones u. a., 1972]. Das k-ε-Modell besitzt nicht für alle Strömungsformen die gleiche

Gültigkeit. Bei dem Standard-k-ε-Modell wird von isotroper Wirbelviskosität ausgegangen und der verwendete Boussinesq-Ansatz nimmt eine lineare Abhängigkeit der Reynoldsspannungen vom Gradienten der mittleren Geschwindigkeiten an. Insbesondere in wandnahen Bereichen, in denen nicht von vollentwickelter Turbulenz ausgegangen werden kann, wird daher mit speziellen Modellen, wie z.B. Low-Reynolds oder Wandfunktionen gerechnet.
Bei den in dieser Arbeit behandelten Verbrennungsvorgängen haben die wandnahen Strömungsvorgänge nur untergeordnete Bedeutung und werden daher nicht näher untersucht. In den hier betrachteten Strömungen in Modellbrennkammern, als auch in realen Brennkammern von Flugtriebwerken, treten stark verdrallte, rezirkulierende Strömungen auf. Um die bekannten Defizite des Standard k-ε-Modells in Drallströmungen [Döbbeling, 1990] (z.B. teilweise Überschätzung der turbulenten Viskosität) zu berücksichtigen, kommen neben dem Standard-k-ε-Modell auch zwei modifizierte k-ε-Modelle, das RNG k-ε-Modell [Choudhury, 1993] und das realizeable k-ε Model [Shih u. a., 1995] zum Einsatz. Bei diesen Modellen werden zusätzliche Terme in den Transportgleichungen für k und ε berücksichtigt, andere Koeffizienten verwendet, sowie Änderungen bei der Berechnung der Wirbelviskosität vorgenommen. Durch diese Änderungen können teilweise bessere Ergebnisse bei verdrallten Strömungen erreicht werden. Eine detaillierte Beschreibung der modifizierten k-ε-Modelle, der zugehörigen theoretischen Überlegungen und der Verbesserungen im Vergleich zum Standard k-ε-Modell findet sich bei [Yakhot u. a., 1992; Choudhury, 1993; Shih u. a., 1995].

Das Reynolds Spannungs Modell

Beim Reynolds Spannungs Modell (RSM-Modell) [Launder u. a., 1975] werden zur Bestimmung des Spannungstensors Transportgleichungen für die einzelnen Komponenten gelöst. Folglich sind bei 3D-Problemstellungen sechs zusätzliche Transportgleichungen, sowie eine Gleichung für die Dissipationsrate zu lösen. In den Transportgleichungen für die Reynoldsspannungen treten Tripelkorrelationen auf, die modelliert werden müssen. Das Schließungsproblem der Turbulenzmodellierung wird somit auf die nächst höhere Ebene verlegt. Die Zuverlässigkeit des Modells hängt stark von den getroffenen Schließungsannahmen ab, wobei experimentelle Daten für höhere Korrelationen kaum verfügbar und somit Modellierungsansätze extrem schwierig zu finden sind. Durch die höhere Anzahl von zu lösenden Transportgleichungen steigen sowohl Rechenzeit (50-60%) als auch Speicherbedarf (15-20%) im Vergleich zum Standard-k-ε-Modell [Fluent, 1998]. Das RSM-Modell hat gegenüber dem Standard-k-

ε-Modell den Vorteil, dass die Wirkung von Körperkräften auf die Turbulenz erfasst wird und keine Einschränkungen hinsichtlich der Anisotropie der Wirbelviskosität bestehen [Launder, 1989]. Somit ist es speziell für die hier betrachteten verdrallten Strömungen geeignet [Schmid, 1991; Wennerberg, 1995; Breussin u. a., 1996]. Das RSM-Modell hat allerdings den oben angesprochenen Nachteil, dass sowohl die Rechenzeiten, als auch der Speicherbedarf steigen [Heinrich u. a., 1999]. Weiterhin ist das RSM-Modell nicht universell anwendbar [z.B. Amano u. a., 1985]. Obwohl das RSM-Modell ein großes Potenzial bietet, gibt es kontroverse Meinungen und Erfahrungen über seinen Einsatz. Oftmals sind auch „weniger genaue“ Lösungen, die mit einfacheren Turbulenzmodellen erzielt werden, zur Beschreibung praxisrelevanter Vorgänge in Flammen ausreichend [Pawlik, 2001]. Aufgrund der erwähnten Nachteile kommt RSM in dieser Arbeit nur in einigen Rechenläufen zur Anwendung.

2.2 Verbrennungsmodelle

Verbrennungsprozesse lassen sich auf vielfältige Weise klassifizieren [Eaton u. a., 1999]. Wie bereits in Kapitel 2.1.1 erwähnt, wird bei isothermen Strömungen zwischen laminaren und turbulenten Zuständen unterschieden. Ähnliches gilt für chemisch reagierende Strömungen. Während die Interaktion von Physik und Chemie in laminaren Strömungen relativ einfachen Modellen zu beschreiben ist, treten bei turbulenten Verbrennungsvorgängen komplexe Wechselwirkungen zwischen strömungsmechanischen und reaktionskinetischen Vorgängen auf [Pope, 1990; Borghi, 1999; Bilger, 2000]. Da nahezu alle technisch relevanten Verbrennungsprozesse turbulent ablaufen, werden in der vorliegenden Arbeit nur Vorgänge dieser Art untersucht. Je nachdem wie Brennstoff und Oxidator vorliegen, lässt sich weiterhin zwischen vorgemischten und nicht-vorgemischten Flammen unterscheiden. Im vorgemischten Fall werden Brennstoff und Oxidator schon vor der eigentlichen Verbrennung vermischt und gemeinsam in den Brennraum eingedüst. Ein Beispiel für ansatzweise vorgemischte Verbrennung ist die Verbrennung des Benzin-Luft Gemisches in Ottomotoren. Im Gegensatz dazu handelt es sich bei den Verbrennungsvorgängen in Fluggasturbinen bislang um nicht-vorgemischte Verbrennung. Dabei treten Brennstoff und Oxidator getrennt voneinander in den Brennraum ein. Da Verbrennungsvorgänge in Brennkammern von Gasturbinen im Mittelpunkt dieser Arbeit stehen, werden im Folgenden ausschließlich nicht-vorgemischte Verbrennungsvorgänge betrachtet.

Auch eine Klassifizierung nach dem Aggregatszustand der Ausgangsprodukte Brennstoff und Oxidator kann vorgenommen werden. Während der Oxidator meist in gasförmiger Phase zugeführt wird, kann der Brennstoff festen (z.B. Kohle), flüssigen (z.B. dieselmotorische Verbrennung) oder gasförmigen (z.B. Erdgas-Haushaltsbrenner) Zustand haben. Bei Verbrennungsvorgängen mit festen oder flüssigen Brennstoffen erschweren die Phasenübergänge in den gasförmigen Zustand die Berechnung, da diese Vorgänge durch zusätzliche Modelle (z.B. Tropfenverdampfungsmodelle) berücksichtigt werden müssen. In dieser Arbeit werden ausschließlich Verbrennungsprozesse mit gasförmigen Brennstoffen und Oxidatoren betrachtet.

Eine weitere Möglichkeit, turbulente Verbrennungsvorgänge zu unterscheiden, ist der Vergleich der auftretenden Zeitskalen. Zur Charakterisierung dient dabei häufig die turbulente Damköhler-Zahl, $Da_t = t_t / t_c$, die das Verhältnis zwischen der strömungsmechanischen (t_t), d.h. durch die Mischung bestimmten, und der chemischen Zeitskala (t_c) angibt. Verbrennungsvorgänge lassen sich so in mischungskontrollierte

und in reaktionskinetisch dominierte Vorgänge unterteilen, sowie in Fälle bei denen sowohl der eine, als auch der andere Vorgang auftreten kann („gekoppelte Vorgänge“). Bei hohen Damköhler-Zahlen verlaufen die chemischen Reaktionen wesentlich schneller als die Mischung von Brennstoff und Oxidator. Dies bedeutet, dass hier die einzelnen Flammenreaktionszonen sehr dünn werden und sich innerhalb großer turbulenter Strukturen befinden. Bei kleinen Damköhler-Zahlen gelten die umgekehrten Verhältnisse: Die Reaktionszonen werden sehr breit und bekommen eine hohe räumliche Ausdehnung. Diese Zusammenhänge sind im sogenannten Borghi-Diagramm darstellbar. Ursprünglich für vorgemischte Flammen konzipiert, zeigt Abb. 2.1 ein modifiziertes Borghi-Diagramm für turbulente Diffusionsflammen. Die Nomenklatur und der Aufbau entsprechen denen der Arbeit von [Borghi, 1988]. Zu beachten ist, dass hier inverse Damköhler- und Karlowitz-Zahlen benutzt werden.

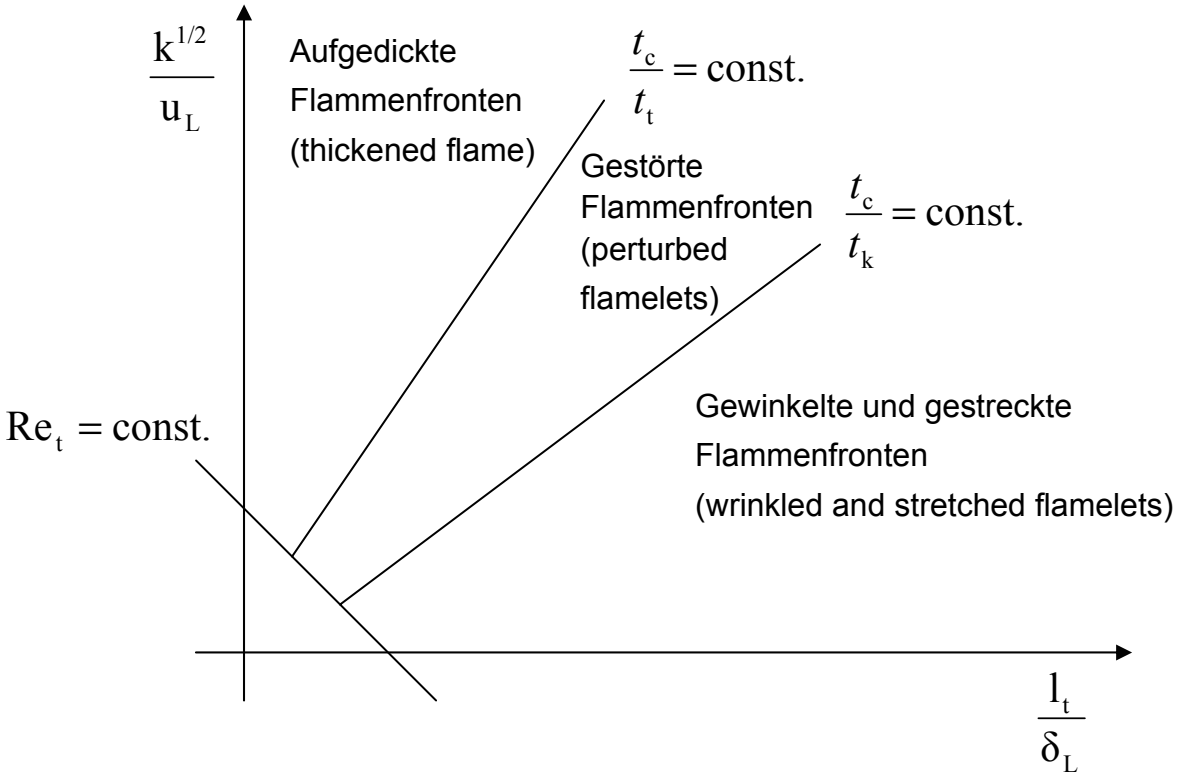


Abb. 2.1: Borghi-Diagramm für turbulente Diffusionsflammen [Borghi, 1988]

Im Diagramm sind verschiedene Flammentypen in Abhängigkeit von einer charakteristischen dimensionslosen Geschwindigkeit ($k^{1/2}/u_L$) und einer dimensionslosen Längenskala (l_t/δ_L) dargestellt. Hierbei ist k die turbulente kinetische Energie, u_L die laminare Flamengeschwindigkeit, l_t ein turbulentes Längenmaß und δ_L die laminare Flammendicke. Die laminaren Größen wurden ursprünglich zur

Charakterisierung von vorgemischten Flammen benutzt, bei Diffusionsflammen haben sie streng genommen keine direkt übertragbare physikalische Bedeutung [Borghi, 1988]. So kann beispielsweise bei einer Diffusionsflamme nicht von einer charakteristischen Flammendicke oder Flammenausbreitungsgeschwindigkeit gesprochen werden. Nach [Borghi, 1988] lassen sich die laminaren Referenzgrößen aber dennoch als Normierungsgrößen nutzen, wenn angenommen wird, dass sich die chemischen Zeitskalen auf einen bestimmten stöchiometrischen Bereich beziehen. Borghi schlägt in diesem Zusammenhang den nahe-stöchiometrischen Bereich vor, da sich die Reaktionszonen meist nahe der Gebiete befinden, die ein Äquivalenzverhältnis von eins haben. Als charakteristische Zeitskalen werden neben der chemischen wiederum die strömungsmechanische, sowie eine Zeitskala der kleinsten Wirbelstrukturen $t_k = \sqrt{l_t \cdot \nu / u'^3}$ (Kolmogorov Zeitskala) benutzt. Im Diagramm können im Wesentlichen drei Bereiche gegeneinander abgrenzt werden [Borghi, 1988], wenn von dem unterhalb der Linie Re_t=const. (=konstante turbulente Reynoldszahl) liegenden laminaren Gebiet abgesehen wird. Im Bereich gewinkelter und gestreckter Flammenfronten (engl. wrinkled and stretched flamelets) ist das Verhältnis von chemischer und Kolmogorov Zeitskala unterhalb eines „kritischen Wertes“ [Borghi, 1988]. Je nach Turbulenzintensität und in Abhängigkeit von einem Streckungsparameter, der in Kapitel 2.2.4 näher beschrieben wird, ist die Flammenfront mehr oder weniger in die Länge gezogen, gewinkelt bzw. gestaucht. Die Flamme setzt sich aus eindimensionalen, gestreckten Diffusionsreaktionszonen (engl. flamelets) [Peters, 1992] zusammen, wobei die Dicke der Flamelets die gleiche Größenordnung wie die Kolmogorovlänge hat.

Liegt das Verhältnis von chemischer und Kolmogorov Zeitskala oberhalb eines bestimmten Wertes [Borghi, 1988], werden die Flammenfronten durch höhere Geschwindigkeitsschwankungen stärker verformt. Ein lokales Aufreißen der Flammenfronten, lokale Flammenlöschung und Interaktionen von Flamelets sind möglich. In diesem Bereich gestörter Flammenfronten (engl. perturbed flamelets) wird die räumliche und zeitliche Struktur der Flamme sehr kompliziert. Durch die zunehmenden Störeffekte haben die Flammen eine unstetige Form. Die Flammenzonen sind, verglichen mit dem laminaren Fall, dicker, da die Turbulenz eine Verstärkung des (effektiven) diffusiven Austausches bewirkt. Durch die fluktuierende Streckung ist Löschung, anschließende Mischung von Edukten und Produkten und daran anschließend eine Zündung des nun teilvorgemischten Mediums möglich.

Für größere Werte der chemischen Zeitskala t_c wird ein Wiederzünden lokal erloschener Gebiete verzögert. Dadurch wird die teilweise Vormischung verstärkt. Durch Erhöhung des Turbulenzgrades und der damit verbundenen Verringerung von t_t, d.h. einer

Intensivierung des Mischvorgangs, wird dieser Effekt noch verstärkt. Der Zustand des Systems nähert sich somit dem einer turbulenten vorgemischten Flamme und strebt im Extremfall auf den homogenen Reaktor zu. Im Borghi-Diagramm wird dieser Bereich mit Gebiet „aufgedickter Flammenfronten“ (engl. thickened flame) bezeichnet. Die Verbrennungsvorgänge in realen Brennkammern lassen sich nicht immer einem bestimmten Bereich im Borghi-Diagramm zuordnen. Oftmals liegen Überschneidungen vor [Riegler, 1999]. Die Zuordnung eines Verbrennungsvorgangs in ein bestimmtes Gebiet im Borghi-Diagramm beeinflusst den Einsatz und die Gültigkeit der anwendbaren Verbrennungsmodelle und ist daher von großem Interesse. Sofern es möglich ist, werden die in dieser Arbeit untersuchten Verbrennungsvorgänge im Borghi-Diagramm dargestellt.

Durch die angeführten Unterscheidungsmöglichkeiten bei der Einteilung von Verbrennungsvorgängen wird deutlich, dass ein einfaches, universelles Modell zur Beschreibung der Wechselwirkung von Strömung und chemischer Reaktion in allen Zuständen nicht existieren kann. Je nach Problemstellung müssen daher bislang Modellansätze verwendet werden. Die Übergänge zwischen den einzelnen Zuständen sind nicht immer genau definierbar (z.B. teilvorgemischte Verbrennung) und oftmals ist es schwierig, die Gültigkeitsbereiche einzelner Modelle zu bestimmen.

Grundsätzlich haben Verbrennungsmodelle die Aufgabe, den Speziesumsatz und die Wärmefreisetzung aufgrund von chemischen Reaktionen zu beschreiben. Hierfür gibt es bei den in dieser Arbeit betrachteten turbulenten Diffusionsflammen eine Reihe von Vorgehensweisen, die im Folgenden näher diskutiert werden. Man unterscheidet Ansätze, bei denen von sehr schneller Chemie und damit von mischungskontrollierten Vorgängen ausgegangen wird und Ansätze, bei denen chemische Reaktionen mit endlicher Rate betrachtet werden. Weiterhin wird zwischen „konventionellen“ Methoden (Momentenansätze) und stochastischen Methoden (PDF-Ansätze) unterschieden [Warnatz u. a., 1997]. In der vorliegenden Arbeit werden sowohl Verbrennungsmodelle mit endlicher als auch mit sehr schneller Reaktionsrate betrachtet. Der Schwerpunkt liegt bei den PDF-Modellen, weshalb die Momentenansätze hier nur kurz behandelt werden.

Bei den in Kapitel 2.1.3 näher beschriebenen Momentenansätzen werden im Falle von chemisch reagierenden Strömungen Transportgleichungen für alle beteiligten Spezies berechnet. Analog zur Modellierung des turbulenten Impulsaustausches werden dabei die turbulenten Glieder der gemittelten Speziesgleichung meist mit dem Boussinesq-Ansatz (vgl. Gl. 2.16) bestimmt. Für die Ermittelung des chemischen Quellterms in den Speziesgleichungen gibt es mehrere Ansätze. So kann der Quellterm mit einem Wirbelzerfallsmodell [z.B. Spalding, 1976], dem laminaren Chemie Modell [Warnatz u.

a., 1997] oder einer Mischung dieser beiden Modelle berechnet werden. Die Modelle werden in Kapitel 2.2.1 noch näher beschrieben. Ein erster Ansatz, ein Wirbelzerfallsmodell mit einem statistischen Modell zu verbinden, stammt von [Serag-Eldin, 1978]. Problematisch ist im Allgemeinen, dass in den Momentenansätzen die Turbulenz-Chemie-Interaktion sehr stark vereinfacht wird. So wird die Turbulenz durch charakteristische Größen wie die Wirbelzerfallszeiten oder die turbulenten Mischungszeiten bestimmt. Hierbei spielen Größen wie beispielsweise k (turbulente kinetische Energie) und ε (Dissipationsrate) eine wichtige Rolle. Weiterhin ist bei reaktionskinetisch kontrollierten Vorgängen problematisch, dass die chemischen Reaktionsmodelle Momentanwerte liefern, während hingegen beispielsweise die Spezieserhaltung mit Momentenmodellen d.h. mit Mittelwerten arbeitet. Da Quellterme der chemischen Reaktion aber hochgradig nicht-lineare Funktionen sind, kann die Nutzung von Mittelwerten zu großen Rechenfehlern führen. Dies wird im folgenden Kapitel näher beschrieben. Eine Kopplung von turbulenzkontrollierten und reaktionskinetischen Vorgängen ist bei dem Modell laminarer Chemie (vgl. Kapitel 2.2.1) nur bedingt möglich.
Eine genauere Nachbildung der Interaktion zwischen Chemie und Turbulenz ist mit den im Folgenden beschriebenen PDF-Modellen möglich.

PDF-Ansatz

Bei den PDF-Verbrennungsmodellen werden Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (engl. PDF, Probability Density Functions) benutzt, um fluktuierende Größen, wie beispielsweise die Speziesmassenanteile oder den Mischungsbruch, zu beschreiben.
Die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $P(\Phi)$ einer Variablen Φ ist ein Maß für die Häufigkeit bzw. den Zeitraum, in dem die Funktion Werte zwischen Φ und $\Phi + \Delta\Phi$ annimmt. In Abb. 2.2 wird dieser Zusammenhang grafisch verdeutlicht. Dargestellt ist eine beliebige, zeitlich um den Mittelwert $\overline{\Phi}$ fluktuierende Größe Φ. Die Verteilungsfunktion rechts der Grafik zeigt die Wahrscheinlichkeit dafür, dass Φ im grau unterlegten Wertebereich $\Delta\Phi$ liegt.

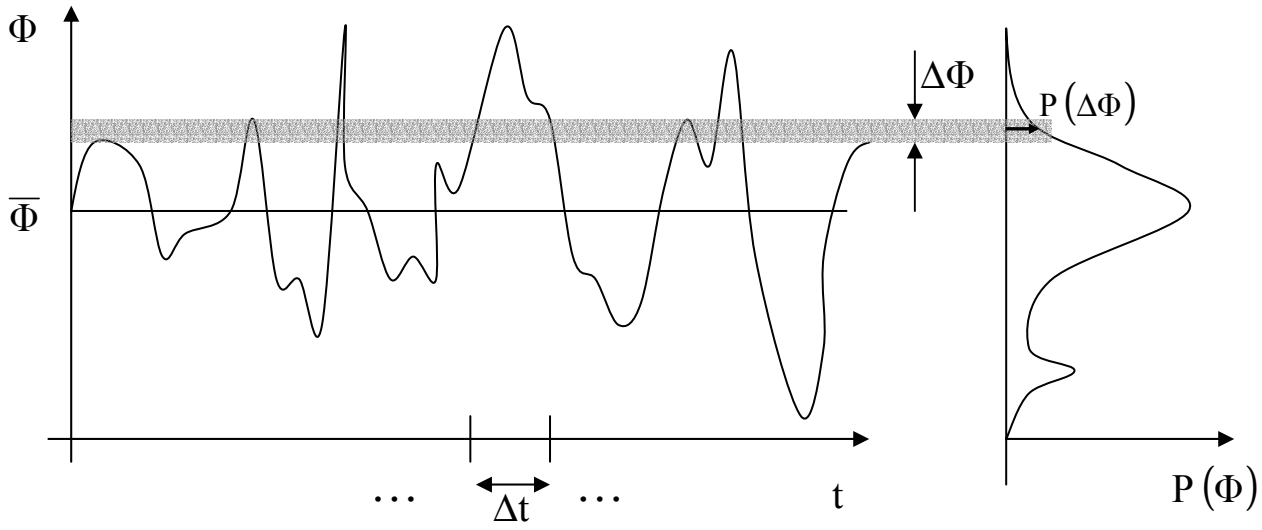


Abb. 2.2: Darstellung der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung $P(\Phi)$ einer fluktuierenden Größe Φ.

Mathematisch lässt sich dieser Zusammenhang wie folgt darstellen [Frost u. a., 1977]:

$$P(\Phi)\cdot\Delta\Phi = \lim_{t\to\infty}\frac{1}{t}\sum_i \Delta t_i \tag{2.23}$$

Hieraus folgt unmittelbar die Normierungsbedingung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} P(\Phi)\,d\Phi = 1 \tag{2.24}$$

Die Integration der mit der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion gewichteten Variablen Φ über den Zustandsraum liefert alle statistischen Momente der Verteilung. Von besonderem Interesse sind hierbei der Mittelwert, sowie das zweite zentrale Moment um den Mittelwert: die Varianz $\overline{\Phi'^2}$.

$$\overline{\Phi} = \int_{-\infty}^{+\infty} \Phi\ P(\Phi)\,d\Phi \tag{2.25}$$

$$\overline{\Phi'^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} (\Phi - \overline{\Phi})^2\ P(\Phi)\,d\Phi \tag{2.26}$$

Höhere Momente werden bei der Verbrennungsmodellierung mittels PDF gewöhnlich nicht benutzt. In der vorliegenden Arbeit werden bei der statistischen Auswertung von experimentellen Ergebnissen teilweise die aus dem dritten bzw. vierten zentralen Moment abgeleiteten Größen Schiefe (engl. skewness) und Wölbung (engl. kurtosis) benutzt.

Der Integrationsbereich der PDF reduziert sich durch die Verwendung von normierten oder auf den Bereich von null bis eins beschränkten Variablen auf genau diesen Bereich. Wie zuvor schon erwähnt, ergibt sich für den zeitlichen Mittelwert $\overline{\mathrm{Y}}(\Phi)$ einer beliebigen von Φ abhängigen Variablen $\mathrm{Y}(\Phi)$ ein Wert, der bei nicht-linearer Abhängigkeit verschieden ist von $\mathrm{Y}\left(\overline{\Phi}\right)$:

$$\overline{\mathrm{Y}}(\Phi) = \int_0^1 \mathrm{Y}(\Phi)\ \mathrm{P}(\Phi)\ \mathrm{d}\Phi \neq \mathrm{Y}\left(\overline{\Phi}\right) \tag{2.27}$$

Da die Beziehungen zur Berechnung von chemischen Zuständen in Abhängigkeit von Zusammensetzung und Temperatur stark nicht-linear sind, eignen sich insbesondere PDF-Methoden sehr gut für die Berechnung turbulenter Verbrennungsprozesse.

Ermittlung der PDF

Bei realen Verbrennungsvorgängen ist der tatsächliche Verlauf der lokalen PDFs, beispielweise von Spezieskonzentrationen und Temperatur, im Allgemeinen unbekannt. Zur rechnerischen Bestimmung der Form der PDF gibt es zwei Möglichkeiten. Es können Transportgleichungen für die Berechnung von sogenannten Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktionen gelöst werden (engl. transported PDF) [Pope, 1985; Dopazo, 1994]. Hierbei handelt es sich um Funktionen, die die Wahrscheinlichkeit beschreiben, dass bestimmte physikalische Größen gleichzeitig bestimmte Werte einnehmen oder in einem bestimmten Wertebereich liegen.
Meist werden Verbundwahrscheinlichkeiten von Geschwindigkeiten und Gemischzusammensetzungen betrachtet. Bei konsequenter Anwendung dieser Methode verliert man durch den Erhalt der vollständigen PDF keine Informationen über deren höhere statistische Momente. Weiterhin ist mit den PDF-Transportgleichungen eine zusätzliche Modellierung der turbulenten Prozesse nicht erforderlich. Hiermit sind jedoch für die molekulare Mischung Modellannahmen zu treffen. Die Lösung der PDF-Transportgleichung erfolgt meist mit der Monte Carlo Methode [Pope, 1981; Chen u. a., 1989; Möbus u. a. 2001]. Die fehlende Kenntnis über die Beschreibung der molekularen Mischung sowie der hohe Rechen- und Speicheraufwand sind Nachteile dieser Methode. Aus diesem Grund wird in der vorliegenden Arbeit eine alternative Möglichkeit zur Bestimmung der PDF-Verteilung benutzt. Die Form der PDF wird bei dieser Vorgehensweise vorab „angenommen“ (engl. assumed PDF). Die Annahmen erfolgen in Anlehnung an experimentelle Ergebnisse und Überlegungen [Jones u. a., 1982; Libby u. a., 1994; Jones u. a., 1982]. Der Ansatz der angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen ist wegen seiner Vielseitigkeit und den verhältnismäßig geringen Rechenzeitanforderungen in der Simulation

anwendungsnaher, technischer Verbrennungsprozesse weit verbreitet. Die dabei gemachten Erfahrungen sind oftmals sehr gut [z.B. Leukel u. a., 1994; Demoulin u. a., 1999; Eigenmann u. a., 1999].

Formen der angenommenen PDF

Angenommene Verteilungsfunktionen werden häufig durch Doppel-Delta-, abgeschnittene Gauß- oder Beta-Funktionen dargestellt, da mit diesen Funktionen in weiten Bereichen eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten erzielt werden kann. Bei allen Verteilungsfunktionen geht der Turbulenzzustand der Strömung über die statistischen Momente als Funktionsparameter in die Form ein.
Die Doppel-Delta-Funktion ist definiert durch:

$$P(\Phi)=\begin{cases} a, & \text{für } \Phi=\overline{\Phi}+\sqrt{\overline{\Phi'^2}} \\ b, & \text{für } \Phi=\overline{\Phi}-\sqrt{\overline{\Phi'^2}} \\ 0, & \text{für alle anderen } \Phi\text{ - Werte} \end{cases} \tag{2.28}$$

mit a = 0.5 und b = 0.5. Die Höhen a und b der Dirac-Peaks werden in den Grenzbereichen nahe $\Phi=0$ und $\Phi=1$ bei Überschwingern gegebenenfalls gesondert berechnet [Khalil, 1976; Theisen, 2000]. Die Doppel-Delta-Funktion zeichnet sich durch geringen Rechenaufwand aus, führt für bestimmte Variablen aber möglicherweise zu etwas ungenaueren Ergebnissen als andere Verteilungsformen.
Die Gauß-Verteilung wird beschrieben durch:

$$P(\Phi)=\frac{1}{\sqrt{\overline{\Phi'^2}}\sqrt{2\pi}}\exp\left[-\frac{1}{2}\left(\frac{\Phi-\overline{\Phi}}{\sqrt{\overline{\Phi'^2}}}\right)^2\right] \tag{2.29}$$

Die Gauß-Funktion [Bronstein, 1987; Stöcker, 1995] wird häufig für die Beschreibung von Verteilungen in der Natur und Technik benutzt (z.B. Populationen). Hintergrund ist der „zentrale Grenzwertsatz“, der besagt, dass die Verteilung des arithmetischen Mittels von n unabhängigen, identisch verteilten Zufallsvariablen mit wachsendem Stichprobenumfang gegen eine Gauß-Normalverteilung strebt. Die Gauß-Verteilung hat bei der Verbrennungssimulation den Nachteil, dass sie nicht auf den Bereich zwischen null und eins beschränkt ist und deshalb die Ränder der PDF gesondert betrachtet werden müssen. Daher wird oft die sogenannte abgeschnittene Gauß-Verteilung benutzt. Sie besteht aus einer Gauß-Verteilung und zwei Dirac-Delta-Funktionen an den Intervallgrenzen zur Beschreibung der Intermittenzspitzen [z.B. Theisen, 2000]. Die Nutzung der Gauß- bzw. der abgeschnittenen Gauß-Funktion ist sehr rechenzeitaufwendig, wenn Erstellung und Integration der PDF während der Verbrennungsrechnung durchgeführt werden [Theisen, 2000].

Die Beta-Verteilung ist definiert durch:

$$P(\Phi) = \frac{\Phi^{\alpha-1}(1-\Phi)^{\beta-1}}{\int_0^1 \Phi^{\alpha-1}(1-\Phi)^{\beta-1}\,d\Phi} \tag{2.30}$$

mit:

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

$$\beta = (1-\overline{\Phi})\left[\frac{\overline{\Phi}(1-\overline{\Phi})}{\overline{\Phi''^2}} - 1\right]$$

Die Beta-Funktion hat den Vorteil, dass sie eine große Anzahl von verschiedenen Formen annehmen kann, selbst aber nur durch die beiden Parameter α und β sowie die Normierungsbedingung bestimmt ist [Rhodes, 1979]. Der Rechenaufwand zur Ermittlung der Beta-Verteilung ist im allgemeinen geringer als bei der Gauß-Funktion (Randproblematik). Weiterhin ermöglicht diese Verteilungsform asymmetrische und bimodale Verteilungen, die bei den hier untersuchten Diffusionsflammen insbesondere im Einströmbereich auftreten können. Nicht immer sind die mit der Beta-Funktion darstellbaren Verteilungsformen physikalisch sinnvoll. Bei den bimodalen Verteilungen ist man auf Peaks an den Rändern beschränkt, sodass nicht alle bimodalen Verteilungen, die in realen Anwendungen eventuell auftreten, mit der Beta-Funktion darstellbar sind.
Alle aufgeführten PDF-Formen sind in Abb. 2.3 exemplarisch dargestellt. Um die Variationsmöglichkeiten der Beta-PDF zu demonstrieren, sind für diesen Typ drei Kurven abgebildet, die sich in der Wahl der Bestimmungsparameter unterscheiden.

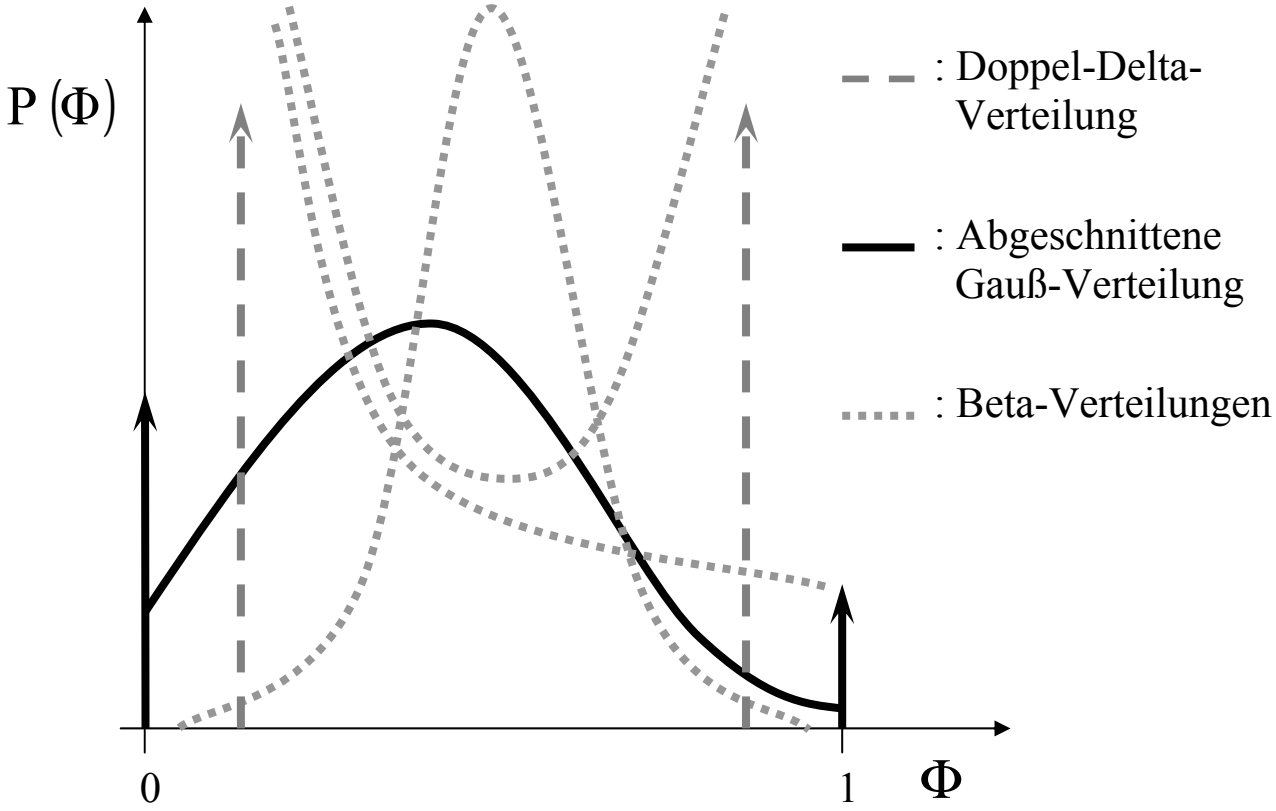


Abb. 2.3: Grafische Darstellung verschiedener angenommener PDF-Verteilungen

In der vorliegenden Arbeit werden sowohl Doppel-Delta-Funktionen als auch die Beta-Funktion zur Beschreibung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen genutzt. Eine detaillierte Erläuterung der statistischen Vorgehensweise im Falle der mehrdimensionalen, gemeinsamen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (engl. JPDF, Joint Probability Density Function) erfolgt in Kapitel 3.1.

Oft wird bei der PDF-Vorgehensweise anstelle der Spezieserhaltungsgleichungen eine Transportgleichung für den Mischungsbruch f gelöst. Der Mischungsbruch ist eine konservative Erhaltungsgröße [Spalding, 1979]. Er lässt sich bei Annahme gleicher molekularer Diffusion aller beteiligten Spezies für ein System aus einem Brennstoff und einem Oxidator wie folgt definieren [z.B. Williams, 1985; Kuo, 1986; Warnatz u. a., 1997]:

$$f = \frac{Z_i - Z_{i,Ox}}{Z_{i,F} - Z_{i,Ox}} \tag{2.31}$$

Hierbei ist Z_i der Elementmassenanteil des Elements i. $Z_{i,F}$ und $Z_{i,Ox}$ sind die Elementmassenanteile des Elements i im Brennstoff- bzw. Oxidatorstrom. Liegt reiner Brennstoff vor, hat der Mischungsbruch den Wert f = 1, bei reinem Oxidator gilt f = 0.

Da der Mischungsbruch die gesamten Informationen über die Gemischzusammensetzung beinhaltet, lassen sich bei seiner Kenntnis die einzelnen Speziesmassenanteile berechnen:

$$Z_i = Z_{i,Ox} + f\left(Z_{i,F} - Z_{i,Ox}\right) \tag{2.32}$$

Die Mischungsbruch Transportgleichung:

$$\frac{\partial}{\partial t}\bar{\rho}\,\tilde{f} + \frac{\partial}{\partial x_k}\bar{\rho}\,\tilde{u}_k\,\tilde{f} - \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\bar{\rho}\,D\frac{\partial \tilde{f}}{\partial x_k}\right) = 0 \tag{2.33}$$

folgt einzig den Gesetzen des konvektiv-diffusiven Transports und hat den Vorteil, bei reinen Gasphasenströmungen quellfrei zu sein. Der Mischungsbruch wird als konservative Erhaltungsgröße nicht von chemischen Quellen oder Senken beeinflusst.

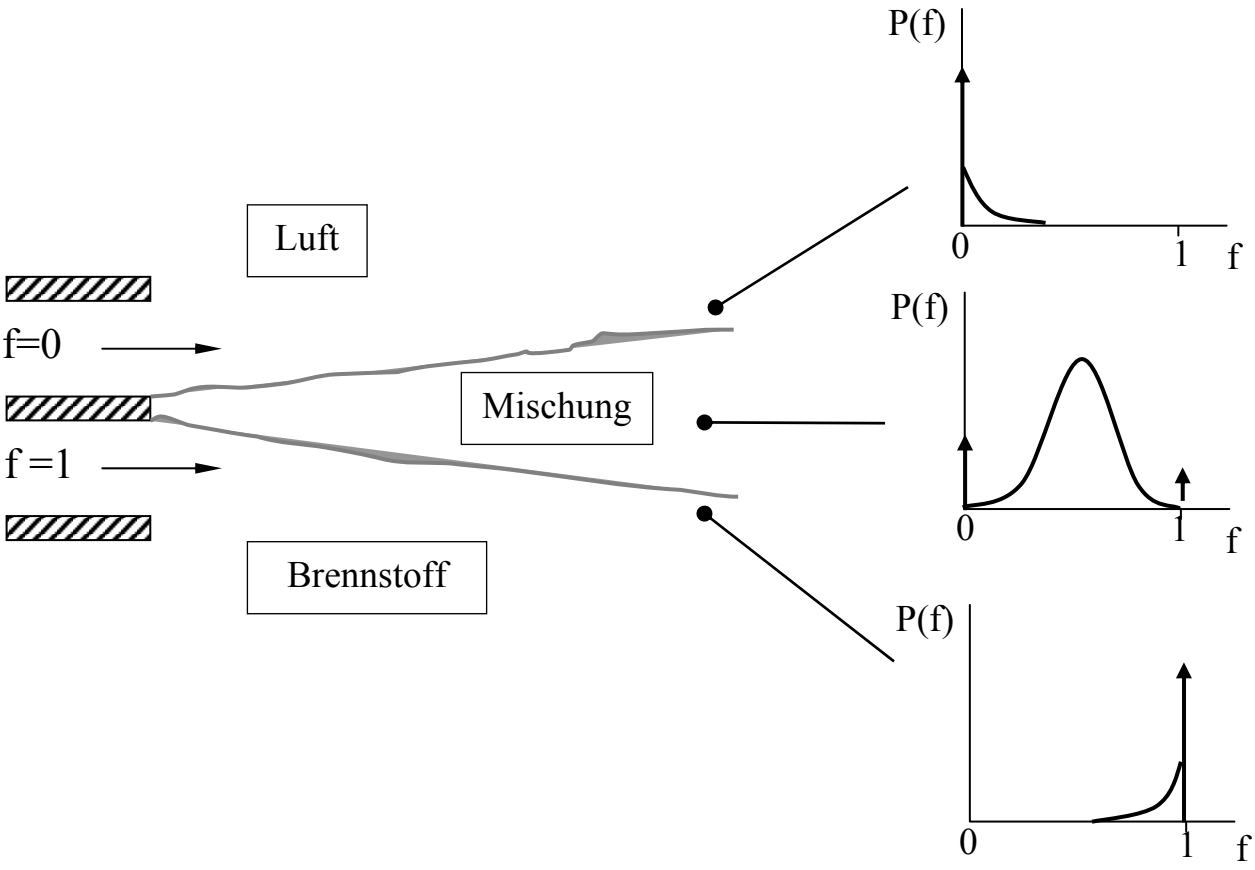


Abb. 2.4: PDF des Mischungsbruches einer Diffusionsflamme

In Abb. 2.4 sind typische Wahrscheinlichkeitsdichten P(f) des Mischungsbruches f in einer exemplarischen turbulenten Diffusionsflamme dargestellt. In Bereichen reinen Brennstoffs f=1 oder reiner Luft f=0 haben die PDFs nahezu die Form von Delta-Funktionen, während im Mischungsgebiet breitere, hier ansatzweise gaußförmig dargestellte, Verteilung vorliegen.

Der Mischungsbruch sowie die Mischungsbruchvarianz werden unter anderem in den im Folgenden beschriebenen Gleichgewichts- und Flamelet-Modellen genutzt.

Statistische Zusammenhänge

Die Schwankungen von Speziesmassenanteilen in Verbrennungsprozessen sind oftmals statistisch voneinander abhängig. Gleiches gilt für Korrelationen von Temperatur- und Speziesfluktuationen. Häufig ist eine Temperaturschwankung direkt mit der Schwankung einer bestimmten Spezies verbunden (wie z.B. thermische NO_X-Produktion). In den vollständigen Erhaltungsgleichungen treten Korrelationsterme von Schwankungsgrößen auf, die diese Abhängigkeiten beschreiben. Um die statistische Abhängigkeit exakt zu beschreiben, müssen diese Terme berücksichtigt werden. In der Praxis sind solche Terme allerdings schwer zu bestimmen, da kaum experimentelle Daten für „gemischte“ Schwankungen (d.h. Korrelationen von Temperatur und Speziesanteilen) vorliegen. In einigen Arbeiten werden Modellierungsansätze für gemischte Schwankungskorrelationen vorgeschlagen [Gutheil u. a., 1987; Bockhorn, 1988]. Aufgrund der Komplexität dieser Ansätze und der problematischen Validierbarkeit der Modellannahmen bleiben die gemischten Schwankungsterme aber häufig unberücksichtigt. Um die Problematik der statistischen Abhängigkeit zu umgehen, wird in anderen Arbeiten [z.B. Landenfeld, 1999; Landenfeld u. a., 1999] vorgeschlagen, die Speziesmassenanteile mit den Massenanteilen im chemischen Gleichgewicht zu normieren, um dadurch statistisch unabhängige Größen zu erhalten. Die Anwendbarkeit dieser Vorgehensweise wird in der vorliegenden Arbeit im Falle der DLR-Jetflamme untersucht. Ergebnisse hierzu finden sich in dem zugehörigen Kapitel 4.1. Der Einfluss der Annahme statistischer Unabhängigkeit auf PDF-Simulationsrechnungen wurde von [Theisen, 2000] am Beispiel des TECFLAM Drallbrenners untersucht. Dabei wurde anhand von Messwerten [Keck, 2001; Keck u. a., 2002] eine JPDF der Größen f, Y_{CO2} und Y_{H2O} aufgestellt und die Temperaturwerte aus einer ILDM-Tabelle (vgl. Kapitel 2.2.4) bestimmt. Die Ergebnisse wurden mit denen von eindimensionalen, statistisch unabhängigen PDFs, bei Nutzung der gleichen ILDM-Tabelle verglichen. Es zeigte sich, dass die Annahme von statistischer Unabhängigkeit der Reaktionsfortschrittsvariablen nur einen sehr geringen Einfluss auf das Simulationsergebnis hat.

Zur Beschreibung der statistischen Abhängigkeiten dient meist der empirische Korrelationskoeffizient [Schlittgen, 1997]. Dieser Korrelationskoeffizient ist ein Maß für die lineare statistische Abhängigkeit von Ereignissen. Die Definition des Korrelationskoeffizienten lautet:

$$\mathrm{cor}(\Phi_k,\Phi_l)=\frac{\frac{1}{n}\sum_i(\Phi_{k,i}-\overline{\Phi}_k)(\Phi_{l,i}-\overline{\Phi}_l)}{\sqrt{\frac{1}{n}(\Phi_{k,i}-\overline{\Phi}_k)^2}\sqrt{\frac{1}{n}(\Phi_{l,i}-\overline{\Phi}_l)^2}} \tag{2.34}$$

Formal mathematisch wird der Korrelationskoeffizient durch die mit den jeweiligen Standardabweichungen normierte Kovarianz zweier Ereignisse Φ_k und Φ_l gebildet. Nimmt der Betrag des Koeffizienten den Wert eins an, so sind die betrachteten Ereignisse vollständig miteinander korreliert. Dies bedeutet für die hier untersuchten Verbrennungsvorgänge, dass Schwankungen einer Messgröße immer mit gleich- oder entgegengesetzt gerichteten Schwankungen der korrelierten Größe verbunden sind. Nimmt der Korrelationskoeffizient den Wert null an, so sind die beiden betrachteten Größen statistisch unabhängig. Die Schwankung einer Größe hat dann keinen direkten Einfluss auf die Schwankung der anderen Größe. Wie erwähnt, stellt der Korrelationskoeffizient nur ein Maß für den linearen Zusammenhang zweier Größen dar. Daher ist $\mathrm{cor}(\Phi_k,\Phi_l)=0$ kein Indikator dafür, dass nicht eventuell andere Abhängigkeiten (z.B. höherer Ordnung) zwischen den Größen Φ_k und Φ_l existieren.

2.2.1 Laminare Chemie und Wirbelzerfallsmodell

Laminare Chemie Modell

Bei Verbrennungsmodellen dieser Art werden die chemischen Quellterme der Spezieserhaltungsgleichungen (2.16) über einen Arrhenius-Ansatz direkt berechnet [Warnatz, 1997].

Betrachtet man eine beliebige Anzahl von Reaktionen NR, so ergibt sich der Gesamtquellterm $\dot{\omega}_i$ für eine Spezies i aus der Summe der Einzelquellterme $\dot{\omega}_{i,k}$ der k Reaktionen, an denen die Spezies teilnimmt.

$$\dot{\omega}_i=\sum_{k=1}^{NR}\dot{\omega}_{i,k} \tag{2.35}$$

Für eine beliebige Reaktion k der Form:

$$\sum_{i=1}^{NS} \nu'_{i,k} M_i \xleftarrow[k_{b,k}]{k_{f,k}} \sum_{i=1}^{NS} \nu''_{i,k} M_i \tag{2.36}$$

errechnet sich der chemische Quellterm für eine Spezies i in einer Reaktion k gemäß [z.B. Libby, 1994]:

$$\dot{\omega}_{i,k} = k_{f,k} \prod_{j=1}^{NS} [C_j]^{\nu'_{j,k}} - k_{b,k} \prod_{j=1}^{NS} [C_j]^{\nu''_{j,k}} \tag{2.37}$$

Für die Gesamtheit aller NR Reaktionen und damit für den vollständigen Quellterm ergibt sich somit:

$$\dot{\omega}_i = M_i \sum_{k=1}^{NR} \left(\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k}\right) \left[k_{f,k} \prod_{j=1}^{NS} [C_j]^{\nu'_{j,k}} - k_{b,k} \prod_{j=1}^{NS} [C_j]^{\nu''_{j,k}} \right] \tag{2.38}$$

mit:

M_i : Molmasse der Spezies i

NR : Anzahl der Reaktionen

NS : Anzahl der Spezies

$\nu'_{i,k}$: stöchiometrischer Koeffizient von Edukt i in Reaktion k

$\nu''_{i,k}$: stöchiometrischer Koeffizient von Produkt i in Reaktion k

$[C_j]$: Molare Konzentration der Spezies j

$k_{f,k}$; $k_{b,k}$: Geschwindigkeitskoeffizient der Vorwärts- bzw. Rückwärtsreaktion k

Hierbei werden die Geschwindigkeitsraten der Hin- und Rückreaktion anhand des Arrhenius-Ansatzes berechnet:

$$k_{f,k} = A_k T^{\beta_k} \exp\left(\frac{-Ea_k}{\Re \cdot T}\right) \tag{2.39}$$

mit:

A_k : Vorfaktor Reaktion k [konsistente Einheit]

β_k : Temperaturexponent Reaktion k [-]

Ea_k : Aktivierungsenergie für Reaktion k [J/kmol]

$\Re$: Universelle Gaskonstante [J/kmol-K]

Bei der Herleitung der Reaktionsraten (2.39) wird, wie schon in Kapitel 2.1.3 angesprochen, deutlich, dass die Quellterme in den Spezies-Erhaltungsgleichungen (2.38) stark nicht-lineare Funktionen mehrer Parameter (Spezieskonzentrationen, Temperatur) sind. Daher lässt sich die mittlere Reaktionsrate nicht aus den Mittelwerten der Skalare Temperatur und Speziesmassenanteil berechnen.

$$\widetilde{\dot{\omega}}_i \neq \dot{\omega}_i(\widetilde{T}, \widetilde{Y}_i) \tag{2.40}$$

Gleichung (2.40) weist somit auf eine mathematische Schwierigkeit bei der Beschreibung reaktiver turbulenter Strömungen hin. Ein Versuch, den Einfluss der turbulenten Temperaturfluktuation zu berücksichtigen, besteht darin, die Temperatur T in Gleichung (2.39) durch $\widetilde{T} + T''$ zu ersetzen und eine Reihenentwicklung durchzuführen [Libby u. a., 1994]. Nach [Warnatz, 1997] ist diese Methode allerdings nur bei Temperaturfluktuationen unter 1% anwendbar. Da die Temperaturschwankungen in den hier untersuchten technischen Verbrennungsvorgängen teilweise wesentlich höher liegen (z.B. DLR-Jetflamme: typ. T_{RMS}= 400K), ist diese, als Momenten-Methode bezeichnete Vorgehensweise in dieser Arbeit nicht anwendbar.

Das laminare Chemie Modell eignet sich prinzipiell nur für die Berechnung von Verbrennung in laminaren Strömungen, da der Einfluss von Turbulenz auf die chemische Reaktion nicht berücksichtigt werden kann. Es ist schwer vorstellbar, dass in hochturbulenten, mischungskontrollierten Bereichen von Flammen die Chemie mit einem laminaren Modell richtig beschrieben werden kann. In der Regel wird das laminare Chemie Modell daher in Verbindung mit einem im Folgenden beschriebenen Wirbelzerfallsmodell benutzt. Da für Berechnungen mit dem laminaren Chemie Modell Transportgleichungen für alle am Reaktionsmodell beteiligten Spezies gelöst werden müssen, ist man in der Praxis aufgrund von Rechenzeit- und Speicherbegrenzungen auf eine bestimmte Anzahl von Spezies beschränkt. Deutlich wird dieser Zusammenhang, wenn beispielsweise detaillierte chemische Mechanismen der Methanverbrennung betrachtet werden [Gardiner, 1984; Peters, 1992]. In den Mechanismen werden etwa 30-40 Spezies in 50-100 Reaktionen verwendet. Im GRI 3.0 Mechanismus [GRI, 2001] werden für die Methanoxidation, inklusive der NO_X-Reaktionen, 53 Spezies in 325 Reaktionen verwendet. Für höhere Kohlenwasserstoffe steigen die Speziesanzahl und die Anzahl der stattfindenden Reaktionen nochmals stark an. Die mit der Speziesanzahl steigende Zahl von Transportgleichungen und mit der Anzahl von Reaktionsgleichungen steigende Komplexität des zu lösenden Differentialgleichungssystems macht deutlich, dass vollständige chemische Mechanismen bei den heutigen Rechnerleistungen nur bedingt eingesetzt werden können. In der Regel werden daher verkürzte bzw. reduzierte chemische Reaktionsmechanismen benutzt. Für reale Aufgabenstellungen ist diese Vorgehensweise sehr sinnvoll, da häufig nur die Wärmefreisetzung und eine begrenzte Anzahl von repräsentativen Spezies von Interesse sind. Eine Berechnung intermediärer und nur in minimalen Konzentrationen vorkommender Spezies steht in vielen Anwendungen nicht im Hauptfeld des Interesses. Diese Aussage trifft allerdings bei der

immer stärker in den Vordergrund tretenden Vorhersage von Schadstoffen, wie beispielsweise den Stickoxiden, nicht zu. In der Praxis werden häufig komplex aufgebaute Brennstoffgemische benutzt, für die wenige gesicherte kinetische Daten vorliegen. Die Bestimmung der jeweiligen detaillierten Reaktionsmechanismen und daran anschließend die Ermittlung von reduzierten chemischen Reaktionssystemen ist daher oftmals sehr schwierig. Für die vielfältigen Vorgehensweisen bei der Reduktion von großen Reaktionssystemen sei an dieser Stelle auf die einschlägige Literatur verwiesen [z.B. Dryer u. a., 1972; Westbrook u. a.. 1981; Paczko u. a., 1986; Bilger u. a., 1991]. In der vorliegenden Arbeit werden sowohl Globalreaktionen, als auch reduzierte Mechanismen für die Brennstoffe Methan, Heptan und einen Kerosinersatzstoff verwendet. Auf die eingesetzten Mechanismen wird in Kapitel 3.1 näher eingegangen.

Wirbelzerfallsmodell

Bei den beiden Wirbelzerfallsmodellen Eddy-Breakup Model (EBU) [Spalding, 1976] und Eddy Dissipation Concept (EDC) [Magnussen u. a., 1976] wird davon ausgegangen, dass die Vermischung von Brennstoff und Oxidator wesentlich langsamer abläuft als die chemische Reaktion (Da>>1), d.h. dass die turbulenten Zeitskalen wesentlich größer als die reaktionskinetischen Zeitskalen sind. Die Reaktionsgeschwindigkeit wird aus dem turbulenten Wirbelzerfall (turbulente Vermischung) ermittelt und ist somit durch strömungsmechanische Prozesse bestimmt. Die Reaktionsrate des Wirbelzerfallsmodells ergibt sich aus der folgenden EDC-Gleichung [Magnussen u. a., 1976]:

$$\dot{\omega}_i = \nu'_{i,k} M_i A \rho \frac{\varepsilon}{k} \mathrm{Min}\left[\frac{Y_R}{\nu'_{R,k} M_R}, \frac{B \sum_P Y_P}{\sum_j^N \nu''_{j,k} M_j} \right] \tag{2.41}$$

Dabei sind Y_R bzw. Y_P die Massenanteile der Edukte bzw. Produkte und A und B empirische Konstanten mit den Werten A = 4.0 bzw. B = 0.5 [Magnussen u. a., 1976]. Der zweite Term stellt eine Erweiterung zur Berechnung von Vormischflammen dar. Mit dem EDC-Wirbelzerfallsmodell nach Magnussen ist es daher formal möglich, sowohl Diffusionsflammen, als auch vorgemischte Flammen zu berechnen. Eine Einschränkung dieses einfachen und robusten Modells besteht darin, dass der zugrunde liegende „gemischt ist gleich verbrannt“ Ansatz nicht in allen Bereichen von Verbrennungsvorgängen zutrifft. Verbrennungsprozesse, bei denen der chemische Umsatz mit endlicher Reaktionsrate stattfindet (d.h. chemische Zeitskalen sind vergleichbar mit Mischungszeitskalen), können mit den Wirbelzerfallsmodellen nicht beschrieben werden [Turns, 1996]. Es besteht daher die Gefahr, dass durch turbulente

Mischungsvorgänge in Bereichen „langsamer Chemie“ ein zu hoher chemischer Umsatz ermittelt wird. Aus diesem Grund wird das Wirbelzerfallsmodell gelegentlich mit einem Modell endlicher Reaktionsrate (engl. finite rate reaction model) gekoppelt. Hierfür wird, wie bereits erwähnt, das laminare Chemie Modell benutzt. Bei dieser Vorgehensweise werden die Umsatzraten beider Modelle ermittelt und die kleinere der beiden als tatsächliche Reaktionsrate verwendet.

$$\overline{\dot{\omega}}_i = \mathrm{Min}\left[\dot{\omega}_{i,\,EDC}\,,\,\dot{\omega}_{i,\,lam.\,Chem.}\right] \tag{2.42}$$

Es wird somit von der Annahme ausgegangen, dass der langsamere der beiden Vorgänge, Mischung bzw. chemische Reaktion, den Gesamtumsatz bestimmt. Die mit dieser Vorgehensweise erzielten Ergebnisse sind in aller Regel gut, allerdings wird die Temperatur teilweise etwas zu hoch vorhergesagt (vgl. z.B. MTU E3E Brennkammer, Kap. 4.3.2).

2.2.2 Chemisches Gleichgewicht

Das Gleichgewichts-Verbrennungsmodell beruht auf der Annahme, dass sich alle an der Verbrennung beteiligen Spezies im thermodynamischen Gleichgewicht befinden. Dies bedeutet, dass sich in dem betrachteten System ein Zustand eingestellt hat, bei dem die chemischen Hin- und Rückreaktionen gleich schnell ablaufen. Formal leitet sich der chemische Gleichgewichtszustand aus dem zweiten Hauptsatz der Thermodynamik ab. Durch Umformulierungen ergibt sich, dass der Zustand minimaler Energie dann erreicht ist, wenn die Gibbssche Enthalpie (= freie Enthalpie) des Gesamtsystems ein Minimum hat. Grundannahme ist dabei, dass das Gesamtsystem den Zustand minimaler Energie anstrebt [Kuo, 1986]. Bei diesem Vorgang wird davon ausgegangen, dass die chemische Zeitskala, d.h. die Zeit, in der das Gleichgewicht erreicht wird, wesentlich kleiner als die turbulente Mischungszeit ist.

Wie in Kapitel 2.2 erwähnt, wird beim chemischen Gleichgewicht-Verbrennungsmodell meist der Mischungsbruch als beschreibende Größe genutzt. Bei Vernachlässigung von Wärmeverlusten ist zur Bestimmung der Spezieskonzentrationen, der Dichte und der Temperatur (bei konstantem Druck) dann einzig die Kenntnis des Mischungsbruches notwendig. Für diese skalare Erhaltungsgröße wird die bereits vorgestellte quellfreie Transportgleichung (2.32) gelöst. Die Problematik der Beschreibung des Verbrennungsprozesses reduziert sich somit auf die Beschreibung des turbulenten Mischungsprozesses, des Mischungsbruches und die im Folgenden beschriebene Tabellierung von Gleichgewichtszuständen.

In der vorliegenden Arbeit wird die Berechnung des chemischen Gleichgewichtszustandes außerhalb des CFD-Codes durchgeführt. Dabei werden zunächst die Zusammensetzung, Temperatur und Dichte im chemischen Gleichgewicht mit der oben beschriebenen Methode der Minimierung der Gibbsschen Enthalpie ermittelt. Die angeführten Skalare sind, wie erwähnt, bei p=const. und bei vorgegebener Ausgangstemperatur im chemischen Gleichgewicht allein vom Mischungsbruch f abhängig (vgl. Kap. 2.2). Anschließend wird zur Bestimmung der mittleren Größen eine in Kap. 2.2 beschriebene nicht-lineare Mittelung über f durchgeführt. Grundlage hierfür ist die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung (PDF) des Mischungsbruches, die sich aus dem Mittelwert und der Varianz des Mischungsbruches ergibt. Für die PDF werden häufig die in Kapitel 2.2 angegeben Formen gewählt. In der hier vorliegenden Arbeit wird als PDF-Form eine β-Funktion verwendet. Im Anschluss daran werden die errechneten mittleren Temperaturen und Speziesmassenanteile in Abhängigkeit von Mischungsbruch und Mischungsbruchvarianz tabelliert. Bei den Gleichgewichtstabellen handelt sich somit um zweidimensionale Tabellen. Die Schrittweite in den Tabellen wird in der „sensiblen“ Region um den stöchiometrischen Mischungsbruch herum verkleinert, um so die dort hohen Gradienten im Temperaturverlauf zu berücksichtigen (vgl. Abb. 2.5).

Diabates Verhalten kann durch Erweiterung der Tabelle auf eine dritte Dimension (verschiedene Ebenen von Enthalpieverlusten/-gewinnen) einbezogen werden. Die Gewinne bzw. Verluste von Enthalpie werden direkt bei der Gleichgewichtsberechnung berücksichtigt [Fluent, 1998]. Unterschied zur Vorgehensweise bei adiabaten Verhältnissen ist, dass die Gleichgewichtsberechnung für verschiedene Enthalpieniveaus durchgeführt wird. Die nicht-lineare Mittelung läuft analog zum adiabaten Fall ab. Die Größe der gesamten (3D-) Tabelle steigt im Vergleich zur zweidimensionalen adiabaten Tabelle stark an, da neben Mischungsbruch und Mischungsbruchvarianz nun noch die Enthalpie als Tabellenparameter hinzukommt.

Die Annahme des chemischen Gleichgewichts hat in vielen Bereichen technischer Flammen ihre Gültigkeit. Als Beispiel seien Bereiche wie die Ausbrandzonen von Haushaltsbrennern oder Feuerungen genannt, in denen die Verbrennungsprodukte eine „erhöhte“ Aufenthaltsdauer haben. Ein Vorteil des Gleichgewichtsmodells ist die Robustheit und der verhältnismäßig geringe Rechenaufwand. Da bei dem Modell keine Informationen über kinetische Reaktionsraten notwendig sind, ist die Methode insbesondere für komplexe Brennstoffe wie Kerosin vorteilhaft. Allerdings ist das Modell nicht in der Lage, beispielsweise Zünd- und Verlöschvorgänge oder die Bildung von Schadstoffen (z.B. Ruß, NOx) zu beschreiben, da diese Vorgänge gewöhnlich stark auf Nichtgleichgewichtseffekten beruhen. Weiterhin werden durch

Gleichgewichtsmodelle Zwischenprodukte wie CO oder H_2 durch Dissoziationseffekte in fetten Flammenbereichen in zu großen Konzentrationen vorhergesagt.

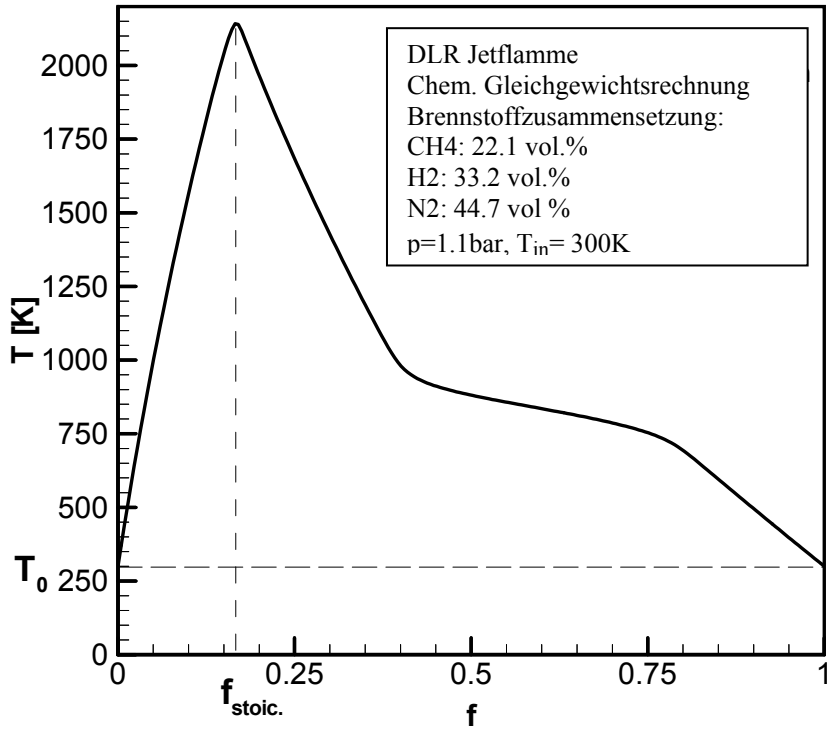


Abb. 2.5: Temperaturverlauf im chemischen Gleichgewicht in Abhängigkeit vom Mischungsbruch bei der DLR Jetflamme

In Abb. 2.5 ist exemplarisch der Verlauf der Gleichgewichtstemperatur über dem Mischungsbruch dargestellt. Als Beispiel dient die in Kapitel 4.1 berechnete DLR Jetflamme. Das Temperaturmaximum liegt sehr nahe am stöchiometrischen Mischungsbruch. Durch die hohen Gradienten in der Umgebung des stöchiometrischen Mischungsbruches haben in diesem Bereich kleine Mischungsbruchänderungen einen besonders großen Einfluss auf die Temperatur. Daher sind Gleichgewichtstabellen in diesen Bereichen, wie bereits erwähnt, besonders fein diskretisiert.

2.2.3 Flamelet-Modell

Im Unterschied zum Gleichgewichtsmodell in Kapitel 2.2.3 können beim Flamelet-Modell in einem gewissen Umfang auch Nichtgleichgewichtseffekte berücksichtigt werden. Diese Effekte haben bei der Untersuchung von Zünd- und Löschprozessen, NO_X-Bildung und Verbrennung in brennstoffreichen Gebieten teilweise großen

Einfluss. Grundvoraussetzung für das Flamelet-Konzept [Peters, 1984; Peters, 1992] ist, dass die laminare Flammendicke (hier: Dicke eines Flamelets) kleiner ist, als die Kolmogorov-Länge. Diese Forderung kann dann erfüllt sein, wenn die Zeitskalen der Reaktionskinetik sehr viel kleiner sind als die Kolmogorov-Zeitskalen des turbulenten Strömungsfeldes.

Ist dies der Fall, so wird beim Flamelet-Ansatz davon ausgegangen, dass sich die chemischen Reaktionen des Verbrennungsprozesses fast ausschließlich in dünnen Schichten, den Flamelets, abspielen. Die Struktur dieser Flamelets ist grundsätzlich eindimensional in Richtung der Normalen der Flammenschicht. Somit reduziert sich die Dimension eines Verbrennungsprozesses von drei auf nur eine Dimension, was eine beträchtliche Vereinfachung darstellt. Beim Flamelet-Modell wird beispielsweise eine turbulente Diffusionsflamme als statistisches Ensemble lokal gekrümmter und gestreckter laminarer Diffusionsflammen angesehen. Damit ergibt sich im Gültigkeitsbereich der Flamelet-Annahmen die Möglichkeit, Chemie und Turbulenz entkoppelt und getrennt voneinander berechnen zu können. Während das turbulente Strömungsfeld mit einem der zuvor beschriebenen Turbulenzmodelle (vgl. Kap. 2.1.4) ermittelt wird, greift man bei der Berechnung der chemischen Prozesse analog zu den im vorigen Kapitel beschriebenen Gleichgewichts-PDF-Modellen auf Flamelet-Bibliotheken zurück. Bei der Berechnung der Flamelet-Bibliotheken wird ausgenutzt, dass Spezieskonzentrationen und Temperatur mit dem Mischungsbruch korreliert sind. Mit Hilfe bestimmter Gleichungen zur Beschreibung der Flamelets, den sogenannten Flamelet-Gleichungen (vgl. [Peters, 1986; Pitsch, 2000]) und reduzierten Reaktionsschemata werden alle relevanten Skalare wie Temperatur, Dichte und Spezieskonzentrationen als Funktion der Parameter Mischungsbruch f, Mischungsbruchvarianz $\widetilde{f''^2}$ und der im Folgenden näher beschriebenen skalaren Dissipationsrate $\widetilde{\chi}$ (Gl. 2.34) in Tabellen abgelegt. Die Vorgehensweise bei der Erstellung von Flamelet-Tabellen ist somit sehr ähnlich der Erstellung der Gleichgewichtstabellen in Kapitel 2.2.2. Im Unterschied zur Gleichgewichtsrechnung wird bei den Flamelet-Tabellen sowohl eine Integration über die PDF des Mischungsbruches als auch eine Integration über die PDF der skalaren Dissipationsrate durchgeführt. Die Varianz der Dissipationsrate wird dabei oft vereinfachend als konstant angesehen. Der Mischungsbruch und die Mischungsbruchvarianz werden auch hier als quellfreie Größen in der Strömungsrechnung angesehen. Die skalare Dissipationsrate ist als Maß für die Flammenstreckung diejenige Größe, die den Abstand vom Gleichgewichtszustand beschreibt. Sie wird nach [Peters, 1992] durch den Ansatz:

$$\widetilde{\chi} = C_{\chi} \frac{\widetilde{\varepsilon}}{\widetilde{k}} \widetilde{f''^2} \tag{2.43}$$

mit $C_{\chi} = 2$, modelliert.

Die aufwendige Erstellung der Flamelet-Bibliotheken kann in das pre-processing verlegt werden, sodass bei der CFD-Rechnung einzig auf Tabellen und gegebenenfalls einen statistischen Mittelungsprozess zurückgegriffen werden muss. Die in der hier vorliegenden Arbeit benutzten Flamelet-Tabellen wurden außerhalb des CFD-Codes generiert und als externe Bibliotheken an den Code angebunden [Barths u. a., 2000].

Der Gültigkeitsbereich des Flamelet-Ansatzes beinhaltet bei den in dieser Arbeit betrachteten turbulenten Diffusionsflammen nicht alle Bereiche der Verbrennung. Wie erwähnt, ist eine Grundvoraussetzung des Modells, dass die chemischen Zeit- und Längenskalen wesentlich kleiner sind als die der Turbulenz. Insbesondere nahe den Einströmgebieten sind die turbulenten Zeitskalen teilweise sehr klein, sodass die Flameletvoraussetzung verletzt ist. Gleiches gilt für Verbrennungszonen, in denen aufgrund sinkender Temperatur die chemischen Reaktionen langsamer ablaufen. Dieser Zusammenhang wird nach [Peters, 1992] anhand von Abb. 2.6 für eine exemplarische Jetflamme demonstriert. Dargestellt ist eine Diffusionsflamme im Phasendiagramm von Mischungsbruchfluktuation (hier: f'') und einem Zeitverhältnis (hier: t_k/t_c) der kleinsten turbulenten Zeit t_k (Kolmogorov Zeitskala) und der Zeit der chemischen Reaktion t_c.

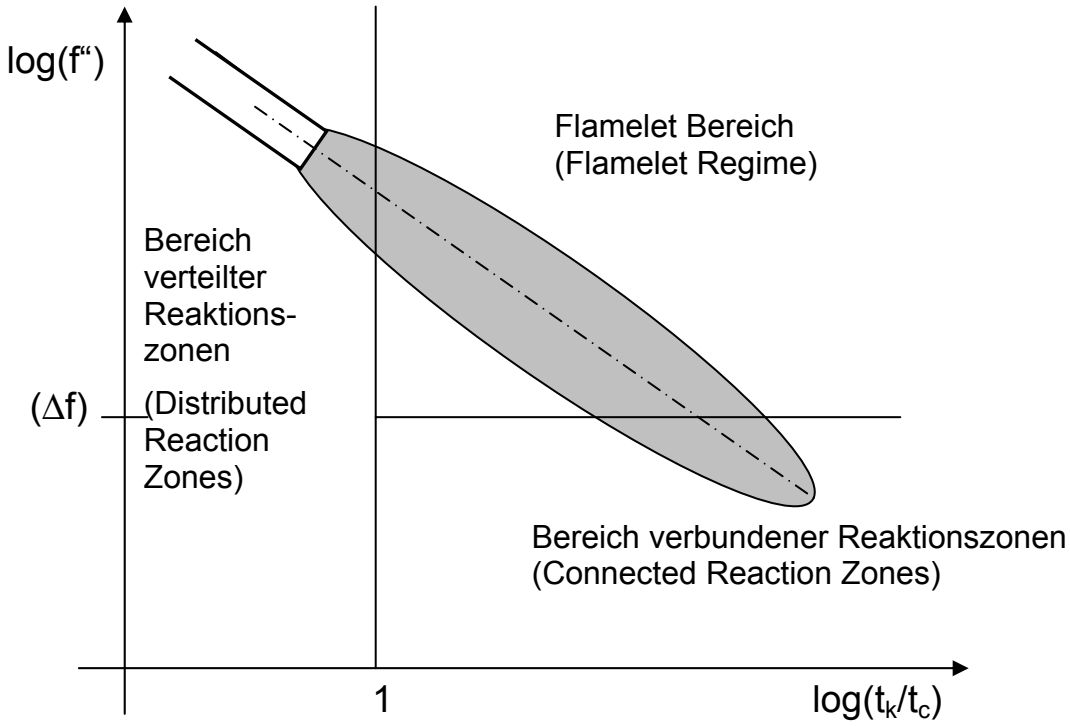


Abb. 2.6: Grafische Darstellung der Regimes turbulenter Verbrennung bei Diffusionsflammen nach [Peters, 1992]

Es wird deutlich, dass sich der Verbrennungsprozess über drei unterschiedliche Bereiche erstreckt. Nahe der Einströmung haben die Werte der Kolmogorov- und die der chemischen Zeitskala nahezu die gleiche Größenordnung. Dies bedeutet, dass ein Gebiet intensiver Mischung und Reaktion vorliegt (Distributed Reaction Zones). Stromab schließt sich zunächst der eigentliche Gültigkeitsbereich des Flamelet-Ansatzes an (Flamelet Regime), und schließlich findet sich an der Flammenspitze eine Region, die durch geringere Mischungsbruchschwankungen und verbundene Reaktionszonen charakterisiert wird (Connected Reaction Zones). Nach [Barths u. a., 1998] ist die Flamelet-Vorgehensweise trotz der Gültigkeitseinschränkungen auch in Gasturbinen-Brennkammern einsetzbar. In der vorliegenden Arbeit kommt der Flamelet-Ansatz im Fall der MTU Brennkammer (vgl. Kapitel 4.3) zur Anwendung.

2.2.4 ILDM

Die Methode der intrinsischen niedrigdimensionalen Manigfaltigkeiten ILDM (engl. Intrinsic Low-Dimensional Manifolds) nutzt den Umstand, dass die typischen Zeitskalen chemischer Reaktionen in Verbrennungsprozessen oftmals mehrere Größenordnungen umfassen [Maas u. a., 1992; Maas, 1993]. Mittels

Eigenvektoranalyse des chemischen Zustandsraums werden die Elementarreaktionen in schnelle und langsame Prozesse eingeteilt. Für langsame Reaktionen werden in einem niedrigdimensionalen Raum Trajektorien bestimmt, die den Reaktionsfortschritt beschreiben. Bei der zeitlichen Annäherung des Gesamtsystems an den Gleichgewichtszustand vereinigen sich Trajektorien unterschiedlichster Ausgangszustände und reduzieren dadurch die Dimension und damit die Komplexität des Systems [Maas, 1993; Nau, 1997; Theisen, 2000]. Die chemische Gesamtreaktion an einem Ort wird somit durch eine feste Anzahl der lokal langsamsten Reaktionen beschrieben. Alle übrigen Reaktionen, die schneller als ein kritisches Zeitmaß ablaufen, werden als im chemischen Gleichgewicht befindlich angesehen. Bei Gemischen von niederen Kohlenwasserstoffen und Luft kann durch diese Vorgehensweise die chemische Reaktion mit zwei bis vier Reaktionsfortschrittsvariablen beschrieben werden [Blasenbrey, 2000].

So werden bei Methan-Luft Gemischen in der Regel der Mischungsbruch und zwei Reaktionsfortschrittsvariablen (meist die Massenbrüche der Produkte Kohlenstoffdioxid und Wasser) zur Charakterisierung des Zustands benutzt. Die minimale Anzahl von notwendigen Fortschrittsvariabeln ist unter anderem stark vom Brennstoff, der Stöchiometrie und der Temperatur der Edukte abhängig. Da die ILDM Methode auf einer strengen mathematischen Formulierung beruht und somit zumindest prinzipiell eine „formalisierte“ Vorgehensweise möglich ist, erscheint sie den global reduzierten Mechanismen als überlegen. Dennoch ergeben sich bei der praktischen Anwendung von ILDM andere Probleme, die diesen Vorteil relativieren. Die Größe der ILDM-Tabellen ist aus Speicherplatzgründen bei drei oder mehr Fortschrittsvariablen problematisch. Eine Verbesserung der Rechenzeit ist zwar durch Optimierung des Tabellenzugriffs möglich [Theisen, 2000] eine drastische Verkürzung der Rechenzeiten erscheint aufgrund des häufigen Tabellenzugriffs aber als schwierig. Weiterhin stellen Strömungscodes hohe Ansprüche an die Qualität der benutzten Tabellen. So sollten beispielsweise keine Fehlstellen in den ILDM-Tabellen auftreten. Dies stellt ein Problem dar, da oftmals nicht für alle Zustände, die in der Tabelle aufgeführt sind, ILDMs existieren [Theisen, 2000].

2.3 Beschreibung der numerischen Verfahren

Zur Lösung der Transport-Differentialgleichungen wurde im Rahmen der vorliegenden Arbeit der kommerzielle CFD-Code FLUENT 5 [Fluent, 1998] verwendet. Bei der Berechnung chemisch reagierender Strömungen werden bei FLUENT beispielsweise Flamelet- oder Gleichgewichtstabellen außerhalb des Codes generiert und in Form von Bibliotheken an den Strömungslöser gekoppelt. Das in dieser Arbeit neu entwickelte JPDF-Modul (vgl. Kapitel 3) arbeitet interaktiv mit dem eigentlichen Strömungscode. Es ist nach Funktionen und Aufgaben in Submodule untergliedert und wird mittels UDF (user-defined functions) an den Löser gekoppelt. Durch den modularen Aufbau ist bei Anpassung der Schnittstelle zwischen JPDF-Modul und Strömungslöser auch eine Kopplung an andere Strömungscodes denkbar. Die Rechengitter werden mit dem Gittergenerator GAMBIT [Gambit, 1998] erstellt.

Strömungslöser

Die Lösung der in Kapitel 2.1.3 vorgestellten Transportgleichungen erfolgt in FLUENT 5 mittels der Finite-Volumen Methode. Bei dieser Diskretisierungsmethode wird das gesamte Strömungsgebiet in einzelne Kontrollvolumina, die Rechenzellen, zerlegt. Durch Integration der partiellen Differentialgleichungen über die Kontrollvolumina entstehen integrale Transportgleichungen, die ein Gleichgewicht aus konvektiven und diffusiven Flüssen sowie den jeweiligen Quelltermen darstellen [Hirsch, 1988]. Die Transportgleichungen werden mit dem in Fluent implementierten „segregated-solver“ gelöst. Details zu der Vorgehensweise finden sich bei [Fluent, 1998].

Bei der Diskretisierung der konvektiven Flüsse wurde eine „UPWIND“-Diskretisierung zweiter Ordnung [Barth u. a., 1989; Noll, 1993], bei den diffusiven Termen eine zentrale Diskretisierung zweiter Ordnung benutzt [Noll, 1993]. Die in den Impulsgleichungen enthaltenen unbekannten Druckgradienten werden mit Hilfe des SIMPLEC-Algorithmus (Semi Implicit Method for Pressure-Linked Equations - Consistent) berechnet. SIMPLEC [Vandoormaal u. a., 1984] basiert auf der ursprünglichen SIMPLE-Methode [Pantakar, 1980]. Beide Methoden haben gemein, dass die Kontinuitätsgleichung durch eine Druckkorrekturgleichung ersetzt wird, mit der sich Druckkorrekturen berechnen lassen, durch die das Druck- und Geschwindigkeitsfeld korrigiert werden [Noll, 1993]. Mit der Nutzung von SIMPLEC kann erfahrungsgemäß eine bessere Konvergenzrate erreicht werden. Eine Steigerung der Konvergenzrate kann weiterhin mit der Verwendung von veränderbaren Relaxationsparametern erzielt werden. Als Konvergenzkriterium werden mit lokalen Werten skalierte Residuen benutzt. Bei den Erhaltungsgleichungen wird ein Residuum

von 10^{-4} gefordert, lediglich bei der Enthalpieerhaltung wird ein noch strengeres Residuum von 10^{-6} verlangt. Das Konvergenzkriterium allein ist kein Maß für die Qualität einer CFD-Rechnung. Durch die oben beschriebenen Diskretisierungsansätze ergeben sich zwangsläufig Fehler beim Übergang von integraler auf diskretisierte Formulierung. Modellannahmen, Abbruchkriterien und insbesondere das Rechengitter haben einen großen Einfluss auf die Qualität der Rechnung. Details über Entstehung und Minimierung rein numerischer Fehler bei der Simulation von Strömungsvorgängen sind bei [Noll, 1993] zu finden.

Prinzipiell lassen sich rein numerische Fehler durch einige grundsätzliche Maßnahmen wie hochaufgelöste Rechengitter, Reduktion der Verzerrung der Rechenzellen und Nutzung von komplexen Diskretisierungsansätzen hoher Ordnung minimieren. Grenzen sind allerdings durch den damit verbundenen höheren Rechen- und Speicheraufwand gesetzt.

Rechengitter

Die in den einzelnen Rechenfällen benutzen Gitter werden in den jeweiligen Kapiteln näher erläutert. Allgemein werden bei der Generierung der Rechengitter unstrukturierte Hexaeder-Zellen verwendet. Auf Tetraeder-Zellen wird trotz ihrer Vorteile bei der Geometrieanpassung verzichtet, da sich in Voruntersuchungen [Noll u. a., 2001] Genauigkeitsprobleme bei ihrer Nutzung ergaben. Die Netze sind in Bereichen hoher Strömungsgradienten lokal teilweise stark verfeinert. Die Größe der Rechengitter schwankt von unter 10000 Rechenzellen für die zweidimensionale Berechnung der DLR Jetflamme bis zu über 300000 Rechenzellen für die dreidimensionale Berechnung der MTU Engine3E Brennkammer. Bei der Gittergenerierung werden Symmetrie- und Periodizitätseigenschaften genutzt, sofern dies möglich ist. Weiterhin wird die Geometrie der Brennräume möglichst realitätsnah im Rechengitter abgebildet und nur dann geometrische Vereinfachungen vorgenommen, wenn diese nur geringen Einfluss auf die Strömung haben (z.B. Kantenabrundungen). Die Unabhängigkeit der Rechnungen vom jeweilig benutzen Gitter ist in allen Rechenfällen näherungsweise gegeben. Generell kann die Gitterunabhängigkeit durch den Vergleich von Rechenergebnissen, die mit unterschiedlichen Gittern erzielt wurden, ermittelt werden. In der hier vorliegenden Arbeit wurden die Netze zum Nachweis der Gitterunabhängigkeit lokal und global stark verfeinert (bis zu 1 Mio. Rechenzellen) und der Einfluss auf das Strömungsfeld untersucht. Insbesondere in Bereichen der Flamme/Brennkammer in denen hohe Gradienten zu erwarten waren, wurde das Rechengitter zum Teil sehr stark verfeinert (Halbierung der Maschenweite). In allen

Fällen ergaben Verfeinerungen des Rechennetzes keine gravierenden Änderungen im Strömungsbild.

Randbedingungen

Auf die Besonderheiten der jeweiligen Randbedingungen der Rechnungen wird in den zugehörigen Kapiteln eingegangen. Generell basieren Einströmprofile von Geschwindigkeiten auf Messungen, sofern experimentelle Daten vorliegen. Alle in dieser Arbeit betrachteten Verbrennungsvorgänge wurden zuvor mit hochauflösenden Lasermesstechniken an Instituten des DLR in Stuttgart, Köln und Berlin ausführlich untersucht [DLR, 2001]. Daher liegen zum einen gut definierte Randbedingungen für die numerische Simulation vor, und weiterhin existieren umfangreiche Daten für die Validierung der rechnerischen Ergebnisse. Für die Eindüsung von Brennstoff und Luft können an den jeweiligen Einströmrändern Profile der Geschwindigkeitskomponenten vorgegeben werden. Die Randbedingungen für die turbulente kinetische Energie und Dissipationsrate werden anhand der Turbulenzintensität und eines geschätzten integralen Wirbellängenmaßes angegeben. Die Brennkammerwände werden je nach Rechenfall als adiabate Wand oder als Wand mit konstanter Temperatur (da Kühlung) betrachtet. Da der Schwerpunkt dieser Arbeit in der Untersuchung der Interaktion von Turbulenz und chemischer Reaktion liegt, werden die Vorgänge in Wandnähe nicht näher betrachtet. Wandgrenzschichten werden bei den hier durchgeführten Rechnungen nicht aufgelöst. Es werden logarithmische Standard-Wandfunktionen gemäß [Launder, 1974] benutzt. Symmetrien werden, sofern dies möglich ist, durch den Einsatz von zyklischen oder periodischen Randbedingungen genutzt. Wie bereits erwähnt, werden die im Einzelfall benutzten Randbedingungen in den jeweiligen Kapiteln näher beschrieben.

3 JPDF-Verbrennungsmodell

Aufgrund der in Kapitel 2.2 geschilderten Einschränkungen und Besonderheiten der einzelnen Verbrennungsmodelle wird in der vorliegenden Arbeit ein neues Verbrennungsmodell entwickelt. Wie bereits in der Aufgabenstellung (vgl. Kap. 1) erwähnt, soll das Modell vielfältigen Ansprüchen genügen und eine Verbesserung gegenüber etablierten Modellen darstellen. Die theoretischen Grundlagen, der Aufbau und die Funktion des Modells werden im folgenden Kapitel näher erläutert.

3.1 Vorgehensweise und Modellgrundlagen

Das in dieser Arbeit neu entwickelte Modul zur Bestimmung der mittleren Reaktionsrate gehört in die Kategorie der Modelle, die mit gekoppelten multidimensionalen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (engl. Joint Probability Density Functions, JPDF) arbeiten. Die Arbeit stellt innerhalb des Instituts für Verbrennungstechnik des DLR eine Fortführung der Arbeiten auf dem Gebiet der Verbrennungsbeschreibung anhand von Wahrscheinlichkeitsdichteansätzen dar [Theisen, 2000].

Wie in Kapitel 2.2.1 beschrieben, werden bei den PDF-Methoden Wahrscheinlichkeitsdichten von bestimmten Skalaren benutzt, um den Speziesumsatz bzw. die Speziesverteilung zu ermitteln. Wird das in Kapitel 2.2.3 vorgestellte Gleichgewichtsmodell verwendet, so ist einzig die PDF des Mischungsbruches notwendig, um das System zu beschreiben [Mühleck, 1995]. Bei der in Kapitel 2.2.5 beschriebenen ILDM Methode sind neben dem Mischungsbruch zusätzlich noch Reaktionsfortschrittsvariablen notwendig, um die Reaktionsrate zu bestimmen [Landenfeld, 1999; Theisen, 2000].

Werden, wie es in der vorliegenden Arbeit der Fall ist, reduzierte chemische Mechanismen zur Ermittlung der Reaktionsraten benutzt, müssen Wahrscheinlichkeitsdichten für alle beteiligten Spezies betrachtet werden. Mit bestimmten Vereinfachungen und Annahmen (z.B. Quasistationaritätsannahmen oder Annahmen über direkte Zusammenhänge von verschiedenen Spezieskonzentrationen), kann die Zahl der notwendigen Spezies durch Einführung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des Mischungsbruches unter Umständen verringert werden [Phillip, 1991; Burbank, 1995]. Bei dieser Vorgehensweise sind jedoch aufwendige Vorarbeiten und Einschränkungen erforderlich. In der vorliegenden Arbeit

wird daher auf dieses Vorgehen verzichtet. Es wird der direkte Weg gewählt und für N-1 der N beteiligten Spezies Transportgleichungen gelöst. Der Massenanteil der N-ten Spezies folgt damit aus der Massenbilanz. Dieses Vorgehen bietet sich auch von daher an, dass Transportgleichungen für Spezies zum einen relativ einfach in den CFD-Code zu implementieren sind und zum anderen eine Kopplung von Spezies- und Mischungsbruchtransportgleichungen in FLUENT problematisch ist [Fluent UDF, 2000].

Grundlagen des JPDF-Modells

Bei der JPDF-Vorgehensweise werden Transportgleichungen für N-1 der N beteiligten Spezies, die Temperatur (bzw. Enthalpie) sowie alle jeweiligen Varianzen gelöst. Die Anzahl der Spezies richtet sich nach dem jeweils benutzten reduzierten chemischen Mechanismus. In dieser Arbeit werden reduzierte Mechanismen mit 5-7 Spezies verwendet, die im Folgenden noch näher beschrieben werden. Anhand der Mittelwerte und der Varianzen werden die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Spezieskonzentrationen und Temperatur ermittelt. Als PDF-Form wird eine im Wertebereich beschränkte, doppelte Dirac-Funktion gewählt. Hierbei müssen eine Reihe von Bedingungen erfüllt werden. Dazu gehört die Erhaltung von höheren statistischen Momenten (Mittelwertserhaltung, Varianzerhaltung), Randwertbeschränkungen und mathematische Formalismen (Erhaltung der Gesamtwahrscheinlichkeiten). Für jede der im Rahmen der PDF möglichen Gemischzusammensetzungen und Temperaturen wird der chemische Quellterm über einen reduzierten Mechanismus bestimmt. Durch Gewichtung und Integration der Reaktionsraten ergibt sich letztendlich die gesuchte mittlere Reaktionsrate. Die einzelnen Komponenten des JPDF-Modells werden im Folgenden näher betrachtet.

3.2 Herleitung der Submodelle

Transportgleichungen und Validierung

Grundlage des JPDF-Modells zur Berechnung der mittleren Reaktionsraten sind Transportgleichungen für die Temperatur und die Speziesmassenanteile, sowie die Transportgleichungen für die Varianzen dieser Größen. Wie in Kapitel 2 bereits angegeben, lauten die Transportgleichung für eine Spezies Y_i:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{\rho}\,\tilde{Y}_i\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\bar{\rho}\,\tilde{Y}_i\,\tilde{u}_k\right)=\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_t}\frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_k}\right)+\overline{\dot{\omega}_i} \qquad (3.1)$$

Die vollständigen Transportgleichungen für die Temperatur- und Speziesvarianz enthalten Terme, deren Modellierung aufgrund von höheren Momenten sehr schwierig ist. Auf die Problematik der Beschreibung dieser Terme wird in Arbeiten von [Narayan u. a., 1992; Baurle u. a., 1994] eingegangen. In praktischen Anwendungen [Frankel u. a., 1990; Gerlinger u. a., 2001] werden meist vereinfachte semi-empirische Transportgleichungen für Temperatur- und Speziesvarianz [Libby u. a., 1994] benutzt:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{\rho}\,\widetilde{T''^2}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\bar{\rho}\,\widetilde{T''^2}\,\tilde{u}_k\right)=\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_t}\frac{\partial \widetilde{T''^2}}{\partial x_k}\right)+C_g\mu_t\left(\frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_j}\right)^2-C_d\bar{\rho}\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}\widetilde{T''^2} \tag{3.2}$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\bar{\rho}\,\widetilde{Y_i''^2}\right)+\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\bar{\rho}\,\widetilde{Y_i''^2}\,\tilde{u}_k\right)=\frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\mu_t}{\sigma_t}\frac{\partial \widetilde{Y_i''^2}}{\partial x_k}\right)+C_g\mu_t\left(\frac{\partial \tilde{Y}_i}{\partial x_j}\right)^2-C_d\bar{\rho}\frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}\widetilde{Y_i''^2} \tag{3.3}$$

Hierbei haben die turbulente Schmidt-Zahl σ_t und die empirischen Konstanten des Produktionsterms C_g und des Dissipationsterms C_d die Werte [Jones u. a., 1982]:

σ_t	C_g	C_d
1.7	2.86	2.0

Tab. 3.1: Koeffizienten der Varianztransportgleichungen

Die Vereinfachungen in den Varianztransportgleichungen bestehen darin, dass die Quellterme beiträge aufgrund von fluktuierendem Reaktionsumsatz nicht berücksichtigt werden. Die Terme, die höhere Momente von Speziesmassenanteilen und der Temperatur enthalten, sind nur mit Modellannahmen zu bestimmen und werden in der Regel nicht berücksichtigt [Libby u. a., 1994]. Da die Temperatur einen sehr großen Einfluss auf den Quellterm der chemischen Reaktion hat, sind insbesondere bei der Gleichung für die Temperaturvarianz die Auswirkungen der Vereinfachungen schwer abzuschätzen. Gemäß [Philipp, 1991] tritt der Einfluss der vernachlässigten Terme bei Verdickung der Flammen bzw. abnehmender Damköhler-Zahl zunehmend in den Hintergrund. Um dennoch die Gültigkeit und praktische Anwendbarkeit der gewählten Vereinfachung zu überprüfen, wurden im Rahmen der vorliegenden Arbeit die Rechnungen mit experimentellen Daten verglichen. Als Vergleichsobjekt wurde die in Kapitel 4.1 noch näher beschriebene DLR Jetflamme gewählt. Für diese Flamme liegen umfangreiche Temperaturmessdaten vor [Bergmann u. a., 1998; DLR, 2001; Meier u. a., 2001]. In Abb. 3.1 sind die radialen Profile der berechneten und gemessenen Temperaturvarianzen (hier als RMS-Werte) in verschiedenen Höhen über der Düse dargestellt.

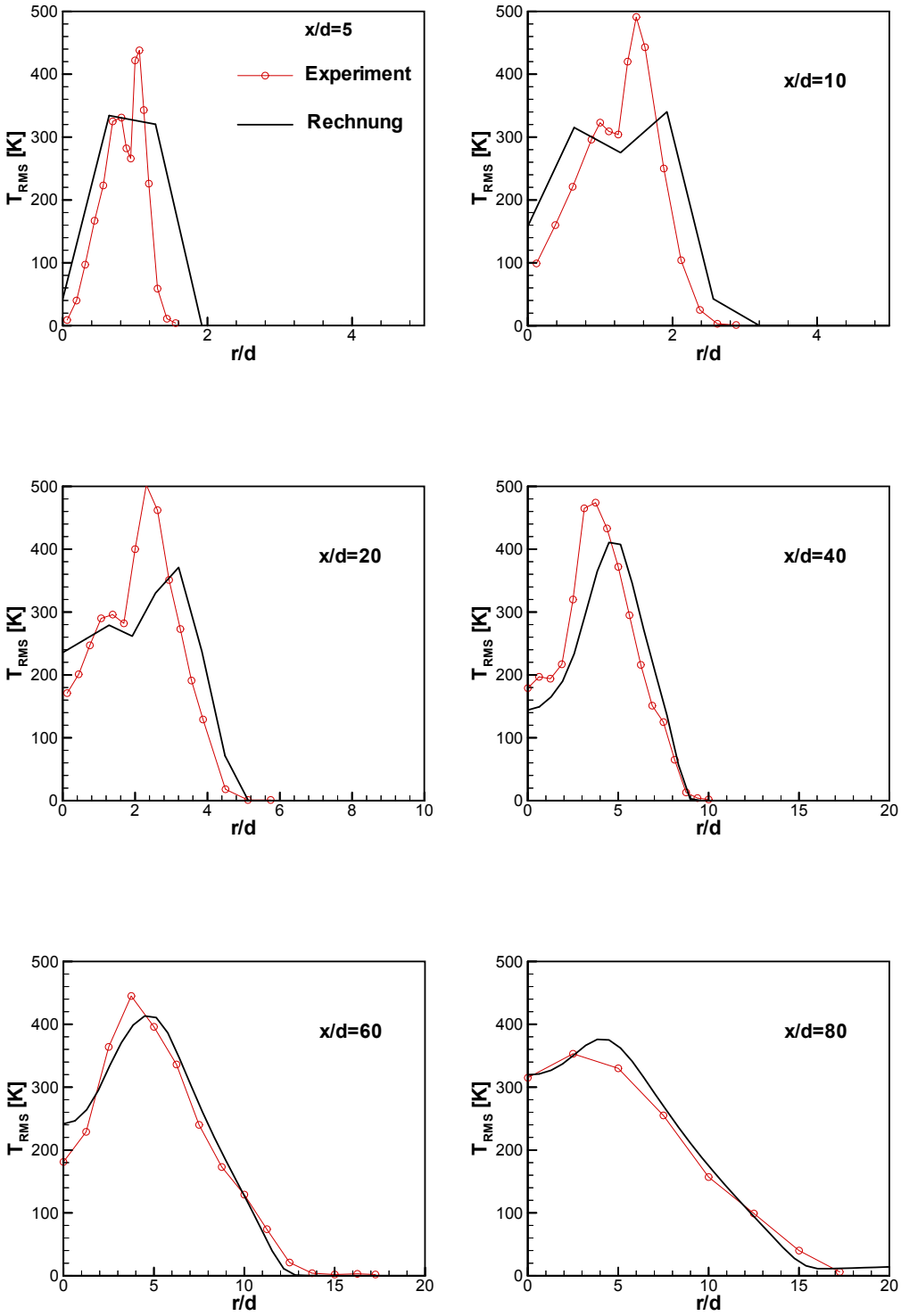


Abb. 3.1: Vergleich von gemessener und berechneter Temperaturvarianz im Falle der DLR Jetflamme (vgl. Kapitel 4.1)

Es zeigt sich, dass die Übereinstimmung zwischen den Messdaten und der Rechnung gemäß Gl. (3.2) sehr zufriedenstellend ist. Insbesondere in größeren Höhen über dem Brenner (x/d=40 bis x/d=80) stimmen sowohl die Höhe der Fluktuation, als auch die räumlichen Gradienten bei Rechnung und Messung sehr gut überein. Die Gebiete nahe dem Brenner (x/d=5 bis x/d=20) sind besonders sensibel, da hier die größten Fluktuationen der Spezieskonzentrationen vorliegen und folglich die Vereinfachungen in der Temperaturvarianz-Transportgleichung die deutlichste Auswirkung haben. Da in dieser Region sehr große Temperatur- und Konzentrationsgradienten auftreten und diese Gradienten quadratisch in die Varianzgleichungen Gl. (3.2) - (3.3) eingehen, haben selbst kleine Fehler bei der Bestimmung der Gradienten einen relativ großen Einfluss auf die Varianzberechnung. Insgesamt jedoch werden die Varianzen, abgesehen von den Spitzenwerten, auch hier gut wiedergegeben. Die Flankensteigungen stimmen gut überein und auch der bimodale Verlauf der Temperaturvarianz in Brennernähe wird erfasst. Als weitere Bestätigung der rechnerischen Vorgehensweise sei auf den qualitativen Vergleich der Temperaturvarianzen bei der Berechnung der MTU E3E Brennkammer in Kapitel 4.3 verwiesen (siehe Abb. 4.38). Auch in diesem sehr praxisnahen Fall ist die Übereinstimmung von vereinfachter Rechnung und den experimentellen Daten deutlich zu erkennen. Angesichts der im Folgenden noch beschriebenen Vereinfachungen an anderer Stelle und den daraus möglicherweise resultierenden Ungenauigkeiten, haben die Vereinfachungen bei der Varianzberechnung sicherlich einen untergeordneten Einfluss auf die Rechengenauigkeit.

PDF-Bedingungen

Damit ein JPDF-Ansatz von der mathematisch-statistischen Seite her korrekt ist, müssen für die Gesamtwahrscheinlichkeit, den Mittelwert und die Gesamtvarianz bestimmte Erhaltungsbedingungen erfüllt sein. Für eine beliebige skalare Größe Φ lauten diese Bedingungen:

$$\int P \, d\Phi = 1 \tag{3.4}$$

$$\int P \, \hat{\Phi}_i \, d\Phi = \tilde{\Phi}_i \tag{3.5}$$

$$\int P \left(\hat{\Phi}_i - \tilde{\Phi}_i \right)^2 d\Phi = \tilde{\Phi}_i''^2 \tag{3.6}$$

mit:

P: Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion

$\hat{\Phi}$: Größe im Zustandsraum (hier: Speziesmassenanteil oder Temperatur)

$\tilde{\Phi}$: Mittelwert

$\tilde{\Phi}''^2$: Varianz

Gleichung (3.4) gewährleistet, dass die Summe der Einzelwahrscheinlichkeiten, d.h. die Gesamtauftrittswahrscheinlichkeit eines Ereignisses, gleich eins ist. Diese auch als Normierungsbedingung bezeichnete Forderung ist Grundlage aller PDF-Modelle [z.B. Pope, 2000]. Mit Gleichung (3.5) wird die integrale Erhaltung des Mittelwerts und mit Gleichung (3.6) die Erhaltungsbedingung der Varianzen erfüllt. Im Falle des in dieser Arbeit entwickelten Modells auf der Basis von reduzierten Mechanismen mit N Spezies und doppelten Dirac-Funktionen als Form der PDF, d.h.

$$P = a_i \, \delta\left(\hat{\Phi}_i - \tilde{\Phi}_i\right)$$

lassen sich die drei Gleichungen (3.4) - (3.6) wie folgt formulieren:

$$\int P \, d\hat{\Phi} = 1 = 2\sum_{i=1}^{N} a_i \tag{3.7}$$

$$\int P \, \hat{\Phi}_i \, d\hat{\Phi} = \tilde{\Phi}_i = 2 a_i \tilde{\Phi}_i + \sum_{j \neq i}^{N} \left(a_j \left(\tilde{\Phi}_i - \tilde{\Phi}_i \cdot \frac{b_j}{\left(1 - \tilde{\Phi}_j\right)} \right) + a_j \left(\tilde{\Phi}_i + \tilde{\Phi}_i \cdot \frac{b_j}{\left(1 - \tilde{\Phi}_j\right)} \right) \right) \tag{3.8}$$

$$\int P \left(\hat{\Phi}_i - \tilde{\Phi}_i\right)^2 d\hat{\Phi} = \tilde{\Phi}_i''^2 = 2 \, a_i \, b_i^{\,2} + 2 \sum_{j \neq i}^{N} a_j \left(\tilde{\Phi}_i \frac{b_j}{\left(1 - \tilde{\Phi}_j\right)} \right)^2 \tag{3.9}$$

Hierbei ist Φ eine skalare Größe, die für einen Speziesmassenanteil oder die Temperatur stehen kann. Bei dem Modell wird davon ausgegangen, dass die Verteilungsfunktion symmetrisch zum Mittelwert ist. Weiterhin wird aufgrund von Schließungsforderungen des Systems vorausgesetzt, dass alle Ereignisse gleich große „Eintrittswahrscheinlichkeit“ haben. Betrachtet man beispielsweise die Speziesmassenanteile, so bedeutet dies, dass alle durch die PDF ermittelten Zusammensetzungen mit $P \neq 0$ die gleiche Auftrittswahrscheinlichkeit haben. Wird die PDF der Temperatur durch eine doppelte Dirac-Funktion beschrieben, so beträgt die einzelne Auftrittswahrscheinlichkeit einer bestimmten Temperatur genau 50%, d.h. in diesem Falle N=1 und a=0.5. Die Wahrscheinlichkeit, dass hingegen eine der beiden Temperaturen auftritt, ist 2·50%=100%. Allgemein folgt aus Gleichung (3.7) somit unmittelbar der Zusammenhang $a_i = a = 1/(2N)$. Mit diesem Ansatz für die Einzelwahrscheinlichkeiten a_i liefert die Mittelwert-Erhaltungsgleichung (3.8) keine neuen Erkenntnisse. Durch die Forderung von Gleichung (3.7) wird Gleichung (3.8) automatisch erfüllt, da die Schwankungen der PDF-Größen symmetrisch zum Mittelwert sind und somit die integrale Mittelwerterhaltung zwangsläufig erfüllt wird.

Durch Einbeziehung noch höherer statistischer Momente (z.B. Schiefe, Wölbung) und der damit verbundenen Informationen über die Form der PDF ist auch eine nichtsymmetrische Verteilung, sowie unterschiedliche Höhen der „Dirac-Peaks“ möglich. Da hierfür aber weitere Transportgleichungen für höhere Momente notwendig wären und dies mit großem zusätzlichen Rechenaufwand verbunden ist, wird auf diese Vorgehensweise in der vorliegenden Arbeit verzichtet.

Gleichung (3.9) beschreibt die Bedingung für den Erhalt der Varianz der einzelnen Größen. Dabei berücksichtigt der erste Term die direkten Schwankungen, die sich aus den Transportgleichungen für die Varianz Gl. (3.2) - (3.3) ergeben. Der zweite Term repräsentiert die Einflüsse der Schwankungen der anderen Größen. Der Faktor b ist hierbei diejenige Größe, mit der den Abstand der Peaks vom Mittelwert bewirkt. Um diesen Sachverhalt zu verdeutlichen, kann beispielsweise die Schwankung des Brennstoffmassenanteils betrachtet werden. Die Fluktuation des Brennstoffs beeinflusst über die Forderung der Gesamtmassenerhaltung die Massenanteile der anderen Spezies. Angenommen der Brennstoffmassenanteil nimmt einen Wert an, der unterhalb des Mittelwerts liegt, so müssen die Massenanteile der anderen Spezies entsprechend erhöht werden, um die Forderung der Gesamtmassenbilanz, dass die Summe aller Massenanteile gleich eins ist, zu erfüllen. Aufgrund der angenommenen Symmetrie der PDF um die jeweiligen Mittelwerte, beeinflusst diese Vorgehensweise die Erhaltung des jeweiligen Mittelwerts nicht. Dennoch ergeben sich bei allen Spezies „erzwungene“ Schwankungen, die sich von den aus den Varianz-Transportgleichungen resultierenden Schwankungen unterscheiden. Diese „erzwungenen“ Schwankungen müssen in der Varianzerhaltung berücksichtigt werden. Wie erwähnt, erfolgt dies durch den zweiten Term auf der rechten Seite von Gl. (3.9). Die Varianz einer Größe setzt sich daher aus der durch die Transportgleichung ermittelten Varianz und aus einem „erzwungenen“ Anteil zusammen, der durch die Schwankung anderer Größen entsteht. Die Schwankungen der Größen sind somit über die Erhaltung der jeweiligen gesamten Varianz miteinander gekoppelt. Da es sich bei der JPDF um eine mehrdimensionale Funktion handelt, sind die Zusammenhänge schwer in grafischer Form darzustellen. In Abb. 3.2 wird dennoch versucht, die Ermittlung der Delta-Funktion im Falle einer zweidimensionalen Problemstellung zu verdeutlichen. Neben den zuvor beschriebenen Größen ist der Schnittpunkt der Geraden durch die Mittelwerte der Größen Φ_1 und Φ_2 mit einem Kreis markiert. Die Zusammensetzung an dieser Stelle, unter der Annahme bei Φ_1 und Φ_2 handle es sich um Speziesmassenanteile, entspräche der Zusammensetzung, mit der bei laminarer Chemie die Reaktionsrate bestimmt würde. Die Ermittlung der JPDF ist im zweidimensionalen Fall trivial. Sie wird allerdings mit

der Erhöhung der Dimension des Systems aufgrund der zunehmenden Zahl von Erhaltungsbedingungen und wechselseitigen Einflüssen immer komplexer.

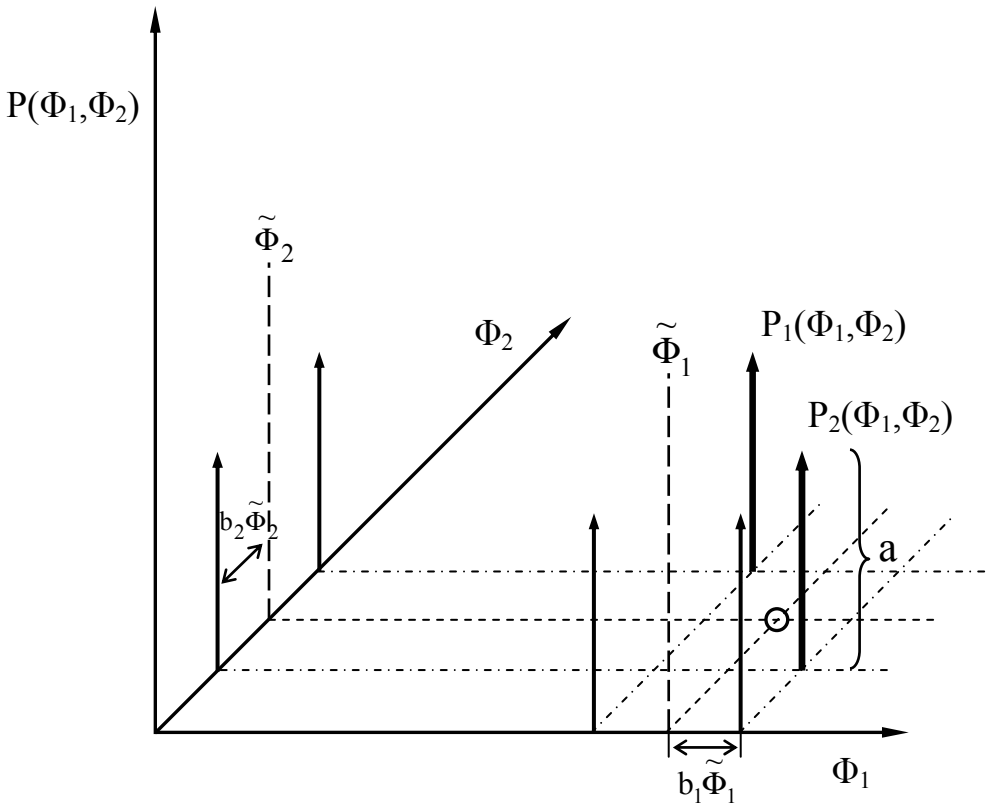


Abb. 3.2: Ermittlung der Delta-Funktionen in einem 2-D Beispiel

Da die PDF-Bedingungen gleichzeitig für alle beteiligten Größen (hier: Speziesmassenanteile) erfüllt werden müssen, erhält man das in Anhang [A] beschriebene lineare Gleichungssystem der Dimension (N×N). Das System wird mittels LU-Zerlegung (Noll, 1992) und anschließender Rückwärtssubstitution gelöst [Press u. a., 1992].

Reduzierte Mechanismen

Die Lösung des im vorigen Abschnitt beschriebenen Gleichungssystems liefert für jeden Rechenpunkt 2×2×N verschiedene einzeln mögliche Auftrittswahrscheinlichkeiten von Speziesmassenanteilen und Temperatur. Für jede Kombination von Gemischzusammensetzung und Temperatur wird eine momentane Reaktionsrate anhand des jeweils verwendeten reduzierten Mechanismus berechnet. In dieser Arbeit werden Mechanismen für die Methanverbrennung und die Verbrennung von Kerosin mittels des Modellkraftstoffs $C_{12}H_{23}$ benutzt. Als Oxidator wird in beiden

Fällen Luft verwendet. Im Fall der Methan-Luft Verbrennung wurde eine 1-Schritt Globalreaktion mit fünf Spezies, eine 2-Schritt Reaktion mit sechs Spezies und eine 4-Schritt Reaktion mit sieben Spezies verwendet. Die Reaktionen und Reaktionsparameter der im JPDF-Modul benutzten chemischen Mechanismen sind in Annhang [B] aufgelistet. Für die Berechnung der Kerosinverbrennung wird eine 1-Schritt Globalreaktion des Ersatzstoffes $C_{12}H_{23}$ mit fünf Spezies [Fluent, 1998] verwendet.
Außer in den JPDF-Rechnungen wurden in der vorliegenden Arbeit auch in den Flamelet-Rechnungen reduzierte Mechanismen (vgl. Kapitel 2.2.3) benutzt. Hier kamen größere reduzierte Methan-Mechanismen mit 17 Spezies und bis zu 46 Reaktionen [Smooke u. a., 1986; Peeters, 1995], sowie ein Heptan-Mechanismus mit 20 Spezies und 42 Reaktionen [Bui-Pham, 1991] zum Einsatz.

Kopplung an den CFD-Code

Das gesamte JPDF-Modul zur Berechnung der Reaktionsrate wird über definierbare Schnittstellen an den CFD-Code FLUENT 5 gekoppelt. Der Aufbau ist modular gestaltet. So werden die Transportgleichungen der Speziesvarianzen und der Temperaturvarianz getrennt von der Berechnung der Reaktionsrate gelöst. Hierdurch ist die Varianzermittlung auch bei Nutzung anderer Reaktionsmodelle möglich. Bei der Wahl der Reaktionsmechanismen ist man aufgrund von Beschränkungen des Lösers (maximale Anzahl von Transportgleichungen) momentan auf maximal 24 Spezies beschränkt.
Die errechnete gewichtete JPDF-Reaktionsrate wird unmittelbar an den Strömungslöser zurückgegeben oder mit der in Kapitel 2.2.1 beschriebenen EDC-Umsatzrate gekoppelt. Der Einfluss der Turbulenz auf die chemische Reaktion ist im JPDF-Modul durch die Wahrscheinlichkeitsverteilung der Spezies und Temperatur und somit durch die Fluktuation dieser Größen gegeben. Dennoch besteht beim JPDF-Modul die Möglichkeit einer Kopplung mit dem EDC-Modell. In Bereichen, in denen die Mischungszeiten wesentlich länger sind als die charakteristische Zeit der chemischen Reaktion, ist die Umschaltung auf ein Wirbelzerfallsmodell plausibel. In der vorliegenden Arbeit wurde in diesem Fall eine effektive Reaktionsrate nach folgendem Ansatz zu berechnet [Burbank, 1995]:

$$\dot{\omega}_{\text{eff}} = \frac{1}{\frac{1}{\dot{\omega}_{\text{JPDF}}} + \frac{1}{\dot{\omega}_{\text{EDC}}}} \tag{3.10}$$

Die effektive Reaktionsrate $\dot{\omega}_{\text{eff}}$ entspricht somit einer Parallelschaltung von zwei Hemmungen. Umsatzkontrollierend ist dabei die kleinere der beiden Reaktionsraten

$\dot{\omega}_{JPDF}$ bzw. $\dot{\omega}_{EDC}$. Vergleichbar ist dieser Ansatz mit der Berechnung des Gesamtwiderstandes zweier parallel geschalteter Widerstände.

Vereinfachungen und Einschränkungen

Vereinfachungen und Modellannahmen haben Einfluss auf Genauigkeit und praktische Anwendbarkeit der JPDF-Vorgehensweise in dieser Arbeit. Wie schon zuvor erwähnt, werden bei den Transportgleichungen der Varianzen Fehler durch Vernachlässigung schwer modellierbarer Quellterme gemacht. Der Einfluss dieser Vernachlässigung ist allerdings, wie oben bereits gezeigt, vermutlich gering.

Die Form der Wahrscheinlichkeitsdichteverteilung der Speziesmassenanteile und der Temperatur wird mit einer doppelten Dirac-Funktion beschrieben. Dieser Ansatz spiegelt sicherlich nicht die Realität wieder. Eine kontinuierliche Verteilung, beispielsweise durch eine Beta-Funktion, gibt den realen Verlauf dieser Größen oftmals besser wieder. In dieser Arbeit wurde aber aus zwei Gründen die Form der PDF bewusst einfach gehalten. Zum einen wurde in anderen Arbeiten [z.B. Theisen, 2000] festgestellt, dass der Einfluss der verwendeten PDF-Form bei den hier betrachteten Verbrennungsvorgängen relativ geringen Einfluss auf die Rechenergebnisse hat, und zum anderen ist ein Ziel der vorliegenden Arbeit, ein recheneffizientes JPDF-Modell zu entwickeln. Die Benutzung von komplexeren PDF-Formen hätte eine erhebliche Steigerung des Rechenzeitbedarfs zur Folge. Die Anzahl der JPDF-Durchläufe zur Ermittlung der momentanen Reaktionsrate würde sich, beispielsweise bei einer mit acht Stützstellen diskretisierten Verteilungsform, gegenüber der hier gewählten Verteilung um den Faktor 16 erhöhen.

Vereinfachend wird in dieser Arbeit auch die statistische Abhängigkeit zwischen den beschreibenden Parametern betrachtet. Über die Mittelwert- und Varianzerhaltungsbedingung hängen die Speziesmassenanteile statistisch voneinander ab, doch eine statistische Abhängigkeit von der Temperatur ist nicht gegeben. Wie bereits in Kapitel 2.2.1 beschrieben, ist die Berechnung der Korrelationen von Spezies- und Temperaturfluktuation sehr aufwendig und abhängig von Modellannahmen [Gutheil u. a., 1987; Bockhorn, 1988].

Eine weitere Unsicherheit liegt in der Benutzung von reduzierten Mechanismen. Bruttoreaktionen und reduzierte Mechanismen stellen Vereinfachungen des tatsächlichen Reaktionsverlaufs dar. So ist die Herleitung reduzierter Mechanismen stark auf empirische Daten angewiesen und wird häufig dahingehend optimiert, dass charakteristische Größen (z.B. laminare Brenngeschwindigkeit, Zündverzugszeit) mit gemessenen Werten übereinstimmen [Bollig u. a., 1996; EBI, 1997]. Hinzu kommt, dass die Umsatzraten in reduzierten Mechanismen, genau wie die von

Elementarreaktionen, von vielen Parametern (z.B. Temperaturbereich, Druck, Stöchiometrie, ...) abhängen und daher genau auf den Gültigkeitsbereich des Mechanismus geachtet werden muss.
Wie die in den nachfolgenden Kapiteln gezeigten Ergebnisse belegen, liefert die hier verwendete JPDF-Vorgehensweise trotz dieser Vereinfachungen und Fehlereinflüsse sehr gute Resultate.

Entwicklungspotential

Das JPDF-Modul bietet in vielen Bereichen Vorteile gegenüber anderen Verbrennungsmodellen. Verbrennungsvorgänge werden in dem Modul direkt berechnet. Damit wird Zugriffs- und Interpolationszeit auf - meist sehr große - Tabellen (vgl. Gleichgewichtsmodell und ILDM) gespart. Da keine Tabellen benutzt werden, ist auch die Problematik der damit verbundenen Speicherplatzeinschränkungen und der Tabellenqualität (vgl. Kap. 2.2.2 - 2.2.4) hinfällig. Bei der Wahl des reduzierten Mechanismus gibt es nur die momentane Einschränkung der Speziesanzahl [Fluent, 1998]. Neu entwickelte oder modifizierte Mechanismen können kurzfristig eingebaut werden.

4 Ergebnisse der Berechnung technisch relevanter Anwendungsfälle

Im folgenden Kapitel werden drei verschiedene technisch relevante Verbrennungsprozesse betrachtet, die am DLR in Stuttgart, Köln und Berlin experimentell untersucht wurden. Für alle Anwendungsfälle liegen umfangreiche Messdaten vor, die mit modernsten Messtechniken ermittelt wurden. Auf die jeweils vorliegenden experimentellen Datensätze wird in den zugehörigen Kapiteln eingegangen. Bei den Berechnungen kommen unterschiedliche, in Kapitel 2.2 vorgestellte Verbrennungsmodelle zum Einsatz. Sofern die Möglichkeit besteht, werden die Ergebnisse unterschiedlicher Verbrennungsmodelle miteinander und mit den experimentellen Daten verglichen.

Bei den im Folgenden angeführten Anwendungsfällen ist die Komplexität des Problems stark unterschiedlich. Dies betrifft den experimentellen Aufbau und Messaufwand, die Geometrie der Brennkammer, die Komplexität des Strömungsbildes und die untersuchten Flammentypen. Aus diesen Gründen werden auch an die Rechengitter und verwendeten Modelle unterschiedlich hohe Anforderungen gestellt. Die DLR Jetflamme ist als nicht eingeschlossene Jet Diffusionsflamme die „einfachste Anwendung“. Mit steigender Komplexität folgt die DLR Gasfilmdüse, eine eingeschlossene hochturbulente Diffusionsdrallflamme. Abschließend wird die Engine 3E (E3E) Modellbrennkammer der Firma MTU Aero Engines GmbH untersucht. Nicht nur die Komplexität, sondern auch die Praxisrelevanz steigt bei den untersuchten Anwendungsfällen. Die DLR Jetflamme kann als wissenschaftliche Laborflamme angesehen werden, während mit der MTU E3E Modellbrennkammer die Verhältnisse in realen Fluggasturbinenbrennkammern untersucht wurden. Die für die numerische Simulation notwendigen Randbedingungen stammen in allen Rechenfällen aus experimentellen Untersuchungen. Während der Zugang für optische Messverfahren bei offenen Laborflammen unproblematisch ist, so ist dies schon bei der DLR Gasfilmdüse nicht mehr der Fall. Dennoch wurde auch hier für einen weitgehend ungestörten optischen Zugang gesorgt. Besonders schwierig wird der Einsatz von Laser-Messverfahren bei der MTU Brennkammer. Da die Brennkammer unter realen Betriebsbedingungen (Druck: 6bar und höher) gefahren wurde, war nicht nur der optische Zugang eingeschränkt, sondern auch die Messung durch die „messunfreundlichen“ Umgebungsbedingungen (Vibrationen, Lärm, Hitze) erschwert. Aus diesem Grund liegen für Laborflammen oftmals umfangreichere und genauere

Messdaten vor als für praxisnahe Anwendungen. Gerade für die Definition von Randbedingungen sind Simulationsrechnungen aber auf möglichst genaue Daten angewiesen. Liegen nur unzureichende Messdaten vor, so müssen bei der Berechnung Annahmen getroffen werden. Diese Annahmen sind zwangsläufig mit kleinen Fehlern oder Ungenauigkeiten behaftet und beeinflussen somit die Qualität der Rechenergebnisse.

Ähnliches Gilt für unsichere oder fehlerbehaftete Messungen. Je komplexer bzw. praxisnäher die betrachteten Verbrennungsvorgänge sind, desto schwieriger und ungenauer werden die experimentellen Untersuchungen. Werden die aus solchen Messungen resultierenden Ergebnisse als Basis für Simulationsrechnungen benutzt, so hat dies einen negativen Einfluss auf die Simulationsergebnisse. Über die Bestimmung der Randbedingungen der Rechnung durch Messdaten haben ungenaue experimentelle Ergebnisse einen großen Einfluss auf die Genauigkeit und Qualität der Simulationsrechnung.

4.1 DLR Jetflamme

In diesem Kapitel werden Ergebnisse der numerischen Simulation der DLR Jetflamme vorgestellt und mit experimentellen Ergebnissen verglichen. Wie bereits in Kapitel 3 erwähnt, dient die Jetflamme in der vorliegenden Arbeit in erster Linie zur Validierung der Vorgehensweise bei der Berechnung der Temperaturvarianz-Transportgleichung. Weiterhin werden numerische Untersuchungen zur Korrelation von Speziesmassenanteilen und der Abweichung vom chemischen Gleichgewicht durchgeführt.

4.1.1 Aufbau und Gitter

Die DLR Jetflamme ist eine nicht eingeschlossene Jet-Diffusionsflamme, die am Institut für Verbrennungstechnik des DLR Stuttgart, an der Universität Darmstadt und am SANDIA Forschungszentrum in Livermore untersucht wurde [TNF, 2000].
Der Brenner besteht aus einer runden Brennstoffzuführung (d=8mm) und einem konzentrischen Oxidator-Mantelstrom (D=140mm). Als Brennstoff wird ein Methan-Wasserstoff-Stickstoff-Gemisch, als Oxidator Luft verwendet. Weitere charakteristische Daten der Jetflamme lauten:
Brennstoffzusammensetzung: 22.1% (vol.) CH_4, 33.2% (vol.) H_2, 44.7% (vol.) N_2
Stöchiometrischer Mischungsbruch: f_{stoic}= 0.167
Einströmung Brennstoff: U_{Br} = 42.2 m/s; Re=15200, T=292K
Einströmung Luft: U_{Ox} =0.3 m/s, T=292K
Die Beimischung von Wasserstoff im Brennstoff ist notwendig, um die Verbrennung stabil zu halten und ein Erlöschen der Flamme zu verhindern. Durch die Wahl dieses Brennstoffgemisches ergeben sich jedoch für die numerische Simulation einige Einschränkungen, die im nächsten Kapitel näher beschrieben werden.
Zur experimentellen Untersuchung der Flamme wurden verschiedene Lasermesstechniken eingesetzt. Die Geschwindigkeiten wurden mittels Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) an der TU Darmstadt gemessen [EKT, 2000]. Es liegen Messergebnisse der Axial- und Radialgeschwindigkeit an verschiedenen radialen Positionen und in unterschiedlichen Höhen über der Düse vor. Simultane Messungen von Temperatur und den Massenanteilen verschiedener Spezies (N_2, O_2, CO, CO_2, H_2O, OH, NO) wurden am DLR und in SANDIA durchgeführt [Meier u. a., 2000; DLR, 2001]. Dabei wurden Raman-, Rayleigh-Streuung- und LIF-Techniken angewandt. Die experimentellen Daten sind frei zugänglich [DLR, 2001] und stellen einen umfangreichen und sehr präzisen Datensatz zur Validierung theoretischer Modelle dar.

Details über den experimentellen Aufbau und die eingesetzten Messtechniken finden sich bei [Bergmann u. a., 1998; Meier u. a., 2000]. Zur Berechnung der Flamme wird ein zweidimensionales Rechengitter mit 9500 Rechenzellen verwendet, dessen Größe sich durch adaptive, lokale Verfeinerung im Einströmbereich auf 29000 Zellen vergrößerte (vgl. Abb. 4.1). Bei der Verfeinerung der Gitterzellen wurde die Maschenweite jeweils halbiert. Das Rechengitter in Abb. 4.1 besteht somit aus drei Bereichen. In den jeweiligen Übergangsstellen ändert sich die Gittergröße jeweils um den Faktor zwei. In Richtung der Strömung hat das Rechengebiet eine Ausdehnung von 1200mm, in radialer Richtung von 200mm. Der rotationssymmetrische Aufbau der Flamme vereinfacht die Berechnung dahingehend, dass die Mittelachse als Rotationsachse benutzt werden kann und somit nur für die Hälfte der Flamme ein Gitter generiert werden muss. Der Übergang von Mantelströmung in die ruhende umgebende Luft (Druckrandbedingung) hat keinen wesentlichen Einfluss auf die Flamme und wurde daher nicht berücksichtigt. Die hohe Gitterverfeinerung im Bereich der Eindüsung ermöglicht die Vorgabe eines Einströmprofils für den Brennstoffstrom. Als Grundlage für die Randbedingungen von Brennstoff- und Oxidatorstrom an der Düse dienen LDA-Messungen [TNF, 2000]. An den Seitenrändern des Rechengebietes wurden Symmetrie-Randbedingungen gesetzt, d.h. die Geschwindigkeitskomponente und die Gradienten aller Variablen normal zum Rand sind gleich null. Ein Ausschnitt des Rechengitters ist in Abbildung 4.1 zu sehen.

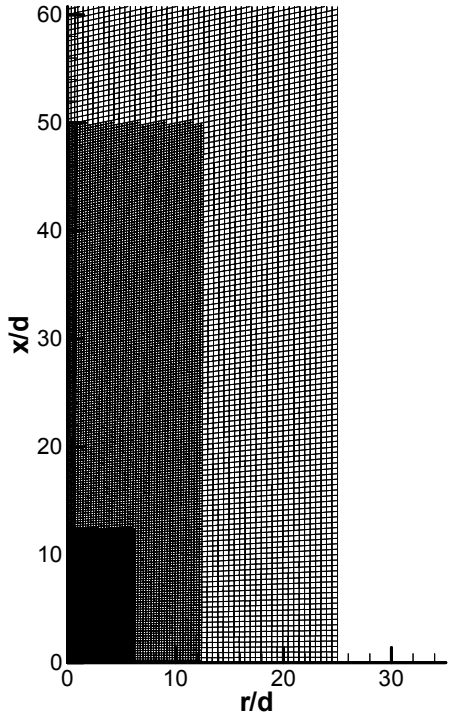


Abb. 4.1: DLR Jetflamme: Ausschnitt des Rechengitters

Aufgrund der kleinen Zellgröße und der hohen Anzahl von Rechenzellen erscheint der zentrale untere Bereich schwarz.

Um eine Vorstellung von der DLR Jetflamme zu vermitteln, zeigt Abbildung 4.2 ein Foto der Flamme (Mitte), die gemessene Temperaturverteilung (Rayleigh-Streuung) (links), sowie als Indikator für Verbrennungszonen die gemessene OH-LIF-Verteilung (rechts) [DLR, 2001].

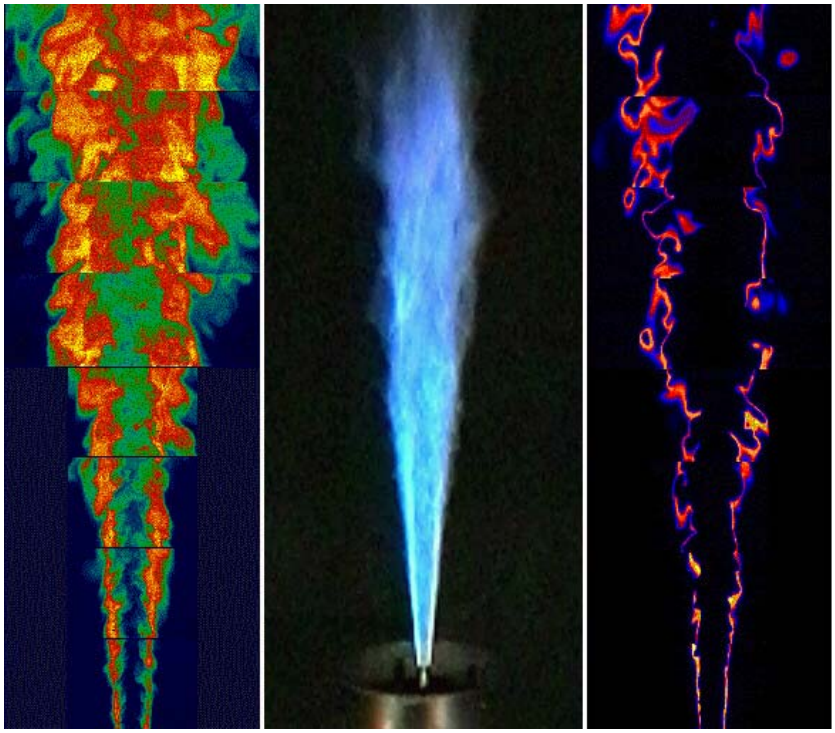


Abb. 4.2: DLR Jetflamme: Temperaturverteilung (Rayleigh-Streuung) (l), Fotografie (m), Verbrennungszonen (OH-LIF) (r), [DLR, 2001]

4.1.2 Vergleich Experiment - Simulation

Im folgenden Kapitel werden experimentelle Ergebnisse mit den Resultaten der Berechnungen verglichen. Bei der numerischen Simulation wurde ein RSM-Turbulenzmodell [Launder u. a., 1975] in Verbindung mit dem PDF-Gleichgewichts-Verbrennungsmodell angewendet. Das Flamelet- und das JPDF-Modell wurden nicht verwendet, da in dieser Arbeit für den Brennstoff aus Methan, Wasserstoff und Stickstoff keine reduzierten Mechanismen zur Verfügung standen. Bei den Berechnungen wurde die bevorzugte Diffusion von Wasserstoff gegenüber den anderen Brennstoffkomponenten aus Einfachheitsgründen nicht berücksichtigt, obwohl sich in den Messungen herausstellte, dass in einem kleinen Gebiet, nahe des Eintritts, ein gewisser Einfluss von bevorzugter Diffusion vorlag. Der Einfluss von bevorzugter Diffusion auf mischungsbruchbasierte Verbrennungsmodelle und die Möglichkeiten der Einbeziehung von bevorzugter Diffusion werden bei [Pitsch, 2000] beschrieben. Ein Vergleich der Rechenergebnisse verschiedener Gruppen mit jeweils unterschiedlichen Modellen und CFD-Codes wurde im Rahmen des TNF5-Workshops [TNF, 2000] durchgeführt.

In Abbildung 4.3 ist die Axialkomponente des berechneten Geschwindigkeitsfeldes dargestellt. Das Geschwindigkeitsfeld weist die für Jetflammen typische Form auf. Die Axialkomponente hat am Ort der Brennstoffeindüsung den höchsten Betrag und nimmt stromabwärts kontinuierlich ab. Der Öffnungswinkel des Jets hat mit etwa 18° den für Jetflammen charakteristischen Wert [Günther, 1974].

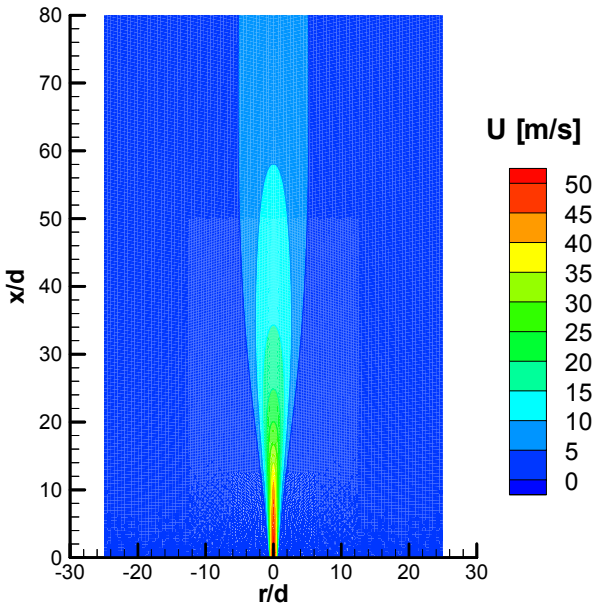


Abb. 4.3: DLR Jetflamme: berechnete Axialgeschwindigkeit

Um die Geschwindigkeitskomponenten mit Messungen zu vergleichen, werden die Profile in den Höhen x/d=5, 20, 40 und 80 über dem Brenner, sowie entlang der Mittelachse betrachtet. Hierbei ist der Referenzdurchmesser d=8mm.

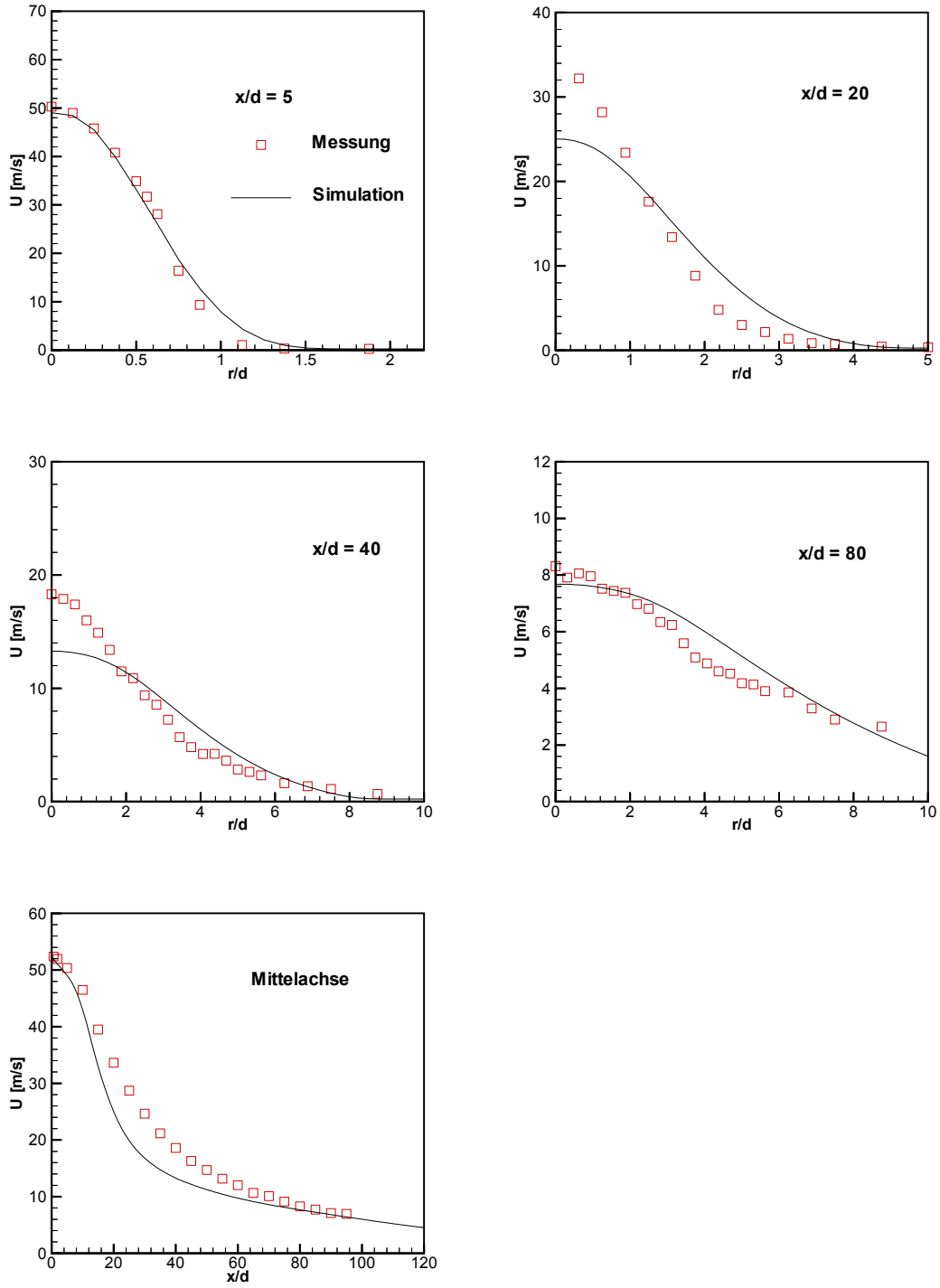


Abb. 4.4: Axialgeschwindigkeit im Abstand x/d= 5, 20, 40, 80 von der Düse und auf der Mittelachse

In den Abbildungen zeigt sich, dass im Nahbereich des Brenners (x/d=5) eine sehr gute Übereinstimmung von Experiment und Simulation besteht, während weiter stromab (x/d=20-40) die Axialgeschwindigkeit auf der Strahlachse in der Simulation unterschätzt wird. Erst in einiger Entfernung vom Brenner (x/d=80) stimmen die berechneten Profile wieder gut mit den Messergebnissen überein. Die Unterschätzung der Axialgeschwindigkeit im mittleren Bereich der Flamme ergab sich sowohl bei der Nutzung des k-ε-, als auch des RSM-Turbulenzmodells. Eine ungenaue Vorgabe der Einströmrandbedingungen für die Turbulenz, insbesondere für die turbulenten Längenmaße, Fehler im Turbulenzmodell oder bei der Diskretisierung sind mögliche Gründe für den Unterschied zwischen Rechnung und Simulation. Zur weiteren Untersuchung wurde das Eintrittsprofil des Brennstoffs variiert. Neben einem Blockprofil wurde das Profil einer vollständig ausgebildeten Rohrströmung [Wagner, 1995] verwendet. Es zeigte sich, dass das Profil lediglich geringen Einfluss auf den Nahbereich des Brenners (x/d<10) besitzt. Ein etwas größerer Einfluss ergab sich bei einer Variation der turbulenzbeschreibenden Längemaße der Luft- bzw. Brennstoffeinströmung. Allerdings war auch hier der Einflussbereich auf das Gebiet nahe der Eindüsung beschränkt.

Die zu diesen Geschwindigkeitsdarstellungen gehörenden Temperaturverteilungen sind in den folgenden Abbildungen dargestellt. Abb. 4.5 zeigt die Temperaturverteilung in Mittelebenendarstellung für die Messung und Abb. 4.6 die für die Rechnung.

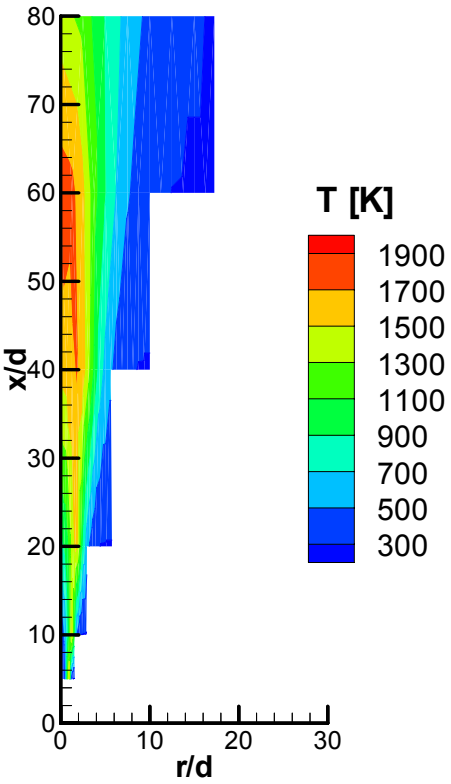


Abb. 4.5: Temperatur: Messung

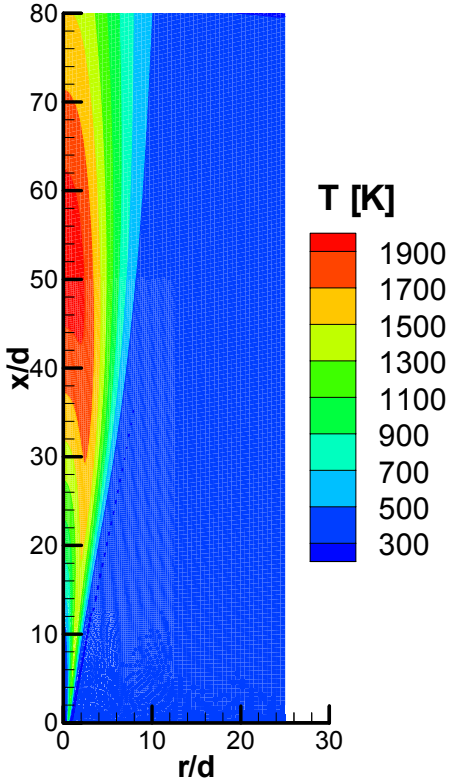


Abb. 4.6: Temperatur: Simulation

Die Konturdarstellung zeigt, dass die minimalen und maximalen Temperaturen in Simulation und Experiment gut übereinstimmen. Allerdings ist das zentrale Heißgebiet in der Simulation größer als in der Messung. Um Experiment und Simulation näher zu vergleichen, werden in Abb. 4.7 die Profile der mittleren Temperatur in verschiedenen Höhen über dem Brenner dargestellt. Es wird deutlich, dass im unteren Bereich (x/d=5) der Flamme die errechneten Temperaturen mit den gemessenen bis zum Radius r/d=0.8 sehr gut übereinstimmen. Im Bereich bis r/d=1 liegt die errechnete Temperatur etwa 15% unter den gemessenen Werten. Das Temperaturmaximum liegt bei der Rechnung in radialer Richtung etwa 1mm weiter von der Mittelachse entfernt als im Experiment. Der Temperaturgradient in radialer Richtung stimmt, abgesehen vom brennernahen Bereich, bei Messung und Rechnung überein, allerdings ist auch hier bei der Rechnung eine geringfügige Verschiebung (ca. 2mm) nach außen zu erkennen. Das breitere Hochtemperaturgebiet zeigt sich auch weiter stromab. Bei x/d=20 stimmen Temperaturbetrag und die radialen Gradienten sehr gut überein. Eine Verbreiterung der heißen Zone ist auch bei x/d=40 und x/d=80 zu erkennen. In diesen Gebieten übersteigen die errechneten Temperaturen die Messwerte um etwa 150K. Insbesondere in Achsennähe treten etwas höhere Abweichungen von ca. 10% auf. Dabei muss

allerdings beachtet werden, dass auch bei der hier benutzten Raman-Temperaturmessung die Genauigkeit der Mittelwerte bei etwa 3% liegt und die Fehler in Hochtemperaturgebieten wesentlich höher sind als in Niedertemperaturgebieten [Bergmann u. a., 1998; Meier u. a., 2000].

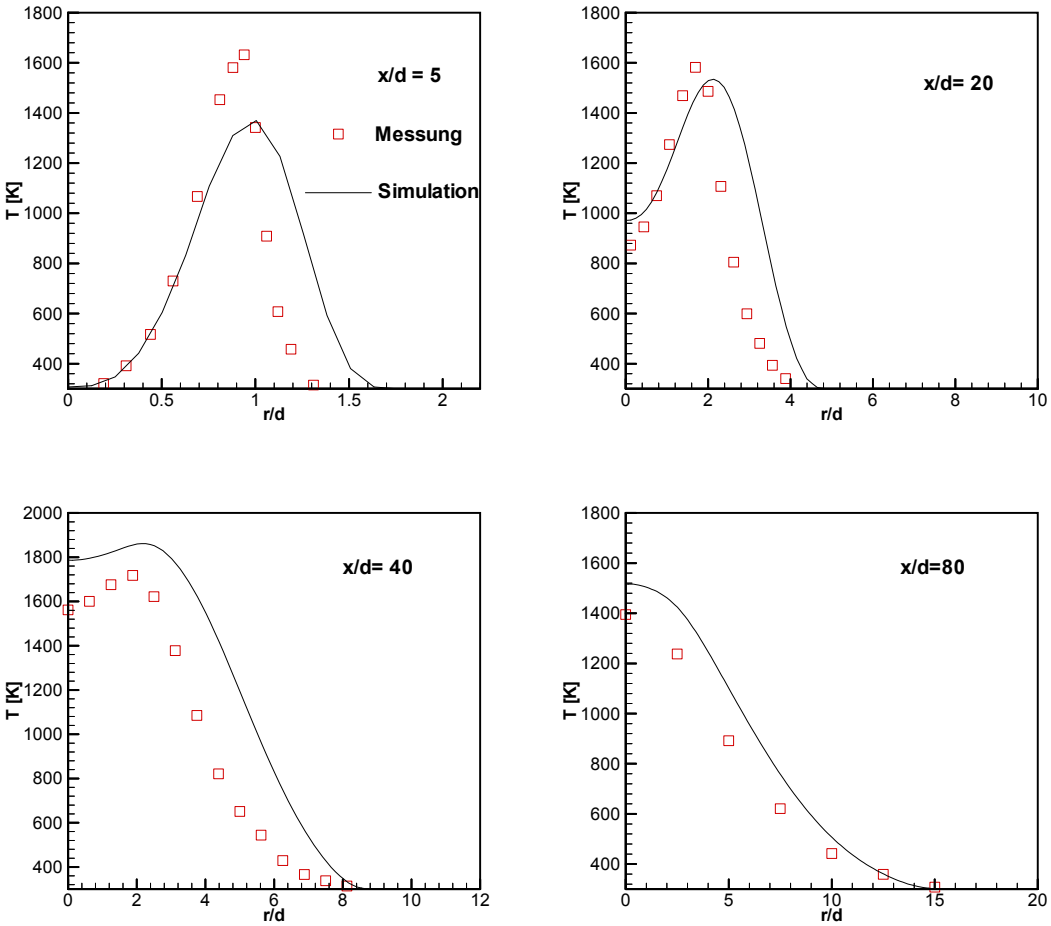


Abb. 4.7: Profile der mittleren Temperatur im Abstand x/d= 5, 20, 40, 80 von der Düse

In Abb. 4.8 sind Profile des Mischungsbruches in verschiedenen Höhen über dem Brenner dargestellt.

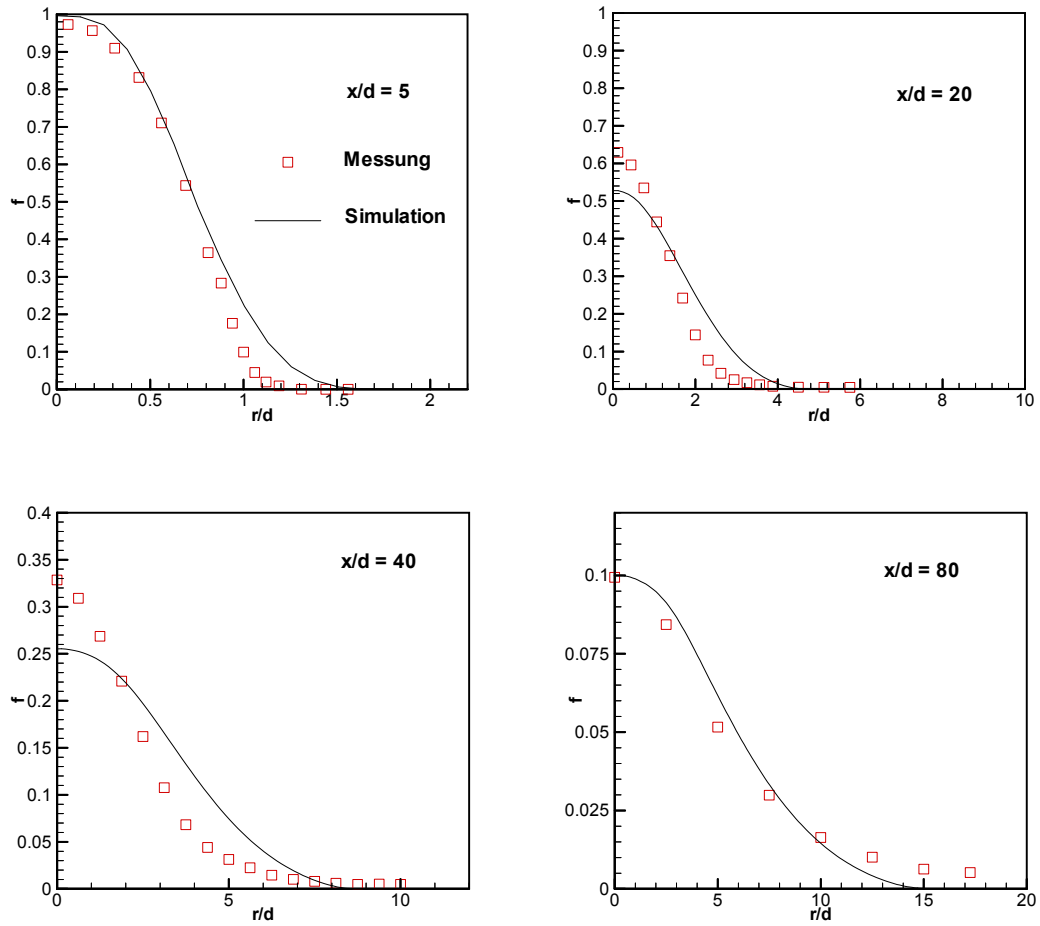


Abb. 4.8: Profile des Mischungsbruches im Abstand x/d= 5, 20, 40, 80 von der Düse

In geringer Entfernung vom Brenner (x/d=5) ist die Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung sowohl vom Betrag, als auch von den radialen Gradienten her sehr gut. Im mittleren Strömungsgebiet (x/d=20-40) ist zu erkennen, dass die Abnahme des Mischungsbruches auf der Mittelachse in der Rechnung größer ist als in der Messung. Die Mischung von Brennstoff und Oxidator findet im Experiment weiter stromab statt als in der Simulation. Dies steht im Zusammenhang mit den errechneten Ergebnissen für die Axialgeschwindigkeit und die Temperatur. Im mittleren Strömungsgebiet hat die berechnete Axialgeschwindigkeit geringere Werte als in der Messung. Bei der Temperatur hingegen findet man in der Rechnung höhere Werte, da die Temperatur in den Gleichgewichtstabellen direkt an die Mischungsbruchverteilung gekoppelt ist. Der Mischungsbruch strebt in der Simulation früher, d.h. düsennäher,

gegen den stöchiometrischen Wert. Aus dem in Abb. 2.5 dargestellten Zusammenhang zwischen Mischungsbruch und Temperatur im chemischen Gleichgewicht ist ersichtlich, dass mit der Annäherung an den stöchiometrischen Bereich eine signifikante Temperaturerhöhung verbunden ist. Sowohl im Experiment, als auch in der Simulation ist durch Vergleich von Abb. 4.7 und Abb. 4.8 zu erkennen, dass Temperaturmaxima immer in unmittelbarer Nähe des stöchiometrischen Mischungsbruches von f=0.167 auftreten.

In Abb. 4.9 sind Profile des CO_2-Massenanteils in verschiedenen Höhen über dem Brenner dargestellt.

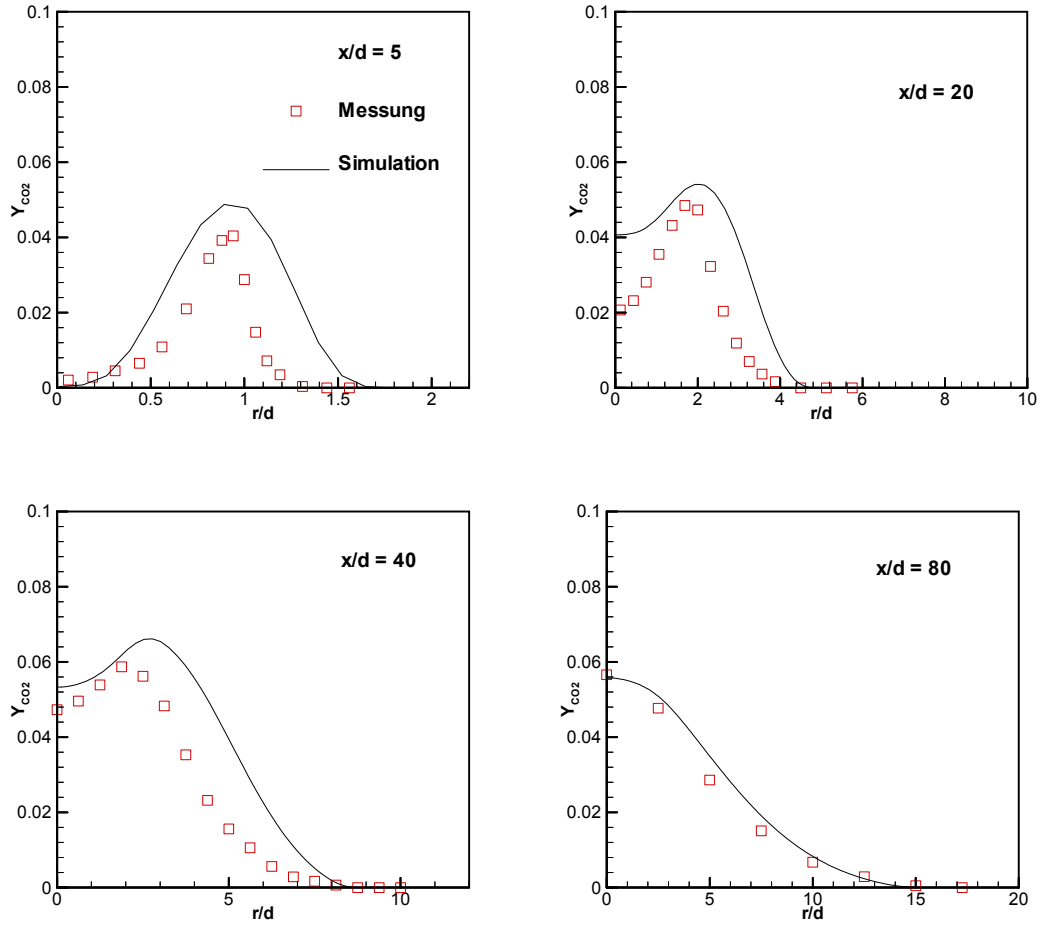


Abb. 4.9: Profile des CO_2-Massenanteils im Abstand x/d= 5, 20, 40, 80 von der Düse

Auch bei der exemplarischen Verteilung des Reaktionsprodukts CO_2 zeigt sich eine generell gute Übereinstimmung zwischen Rechnung und Experiment. Es zeigt sich auch

hier die etwas größere radiale Ausdehnung der berechneten Flamme im unteren (x/d=5) und mittleren (x/d=20-40) Bereich. Die Konzentrationen von Kohlenstoffdioxid werden im unteren Bereich etwas höher als im Experiment berechnet. Die Ursache hierfür liegt zum einen darin, dass im brennernahen Bereich noch kein vollständiges chemisches Gleichgewicht erreicht ist und die errechneten Konzentrationen daher über den Messwerten liegen. Weiterhin zeigen Arbeiten, in denen bevorzugte Diffusion berücksichtigt wurde [z.B. Pitsch, 2000], eine etwas geringere Abweichung der CO_2-Massenanteile zwischen Rechnung und Messung. Dabei wurde auch festgestellt, dass der Einfluss von bevorzugter Diffusion im unteren Bereich der Flamme (x/d=20) besonders groß ist. Somit kann auch die Vernachlässigung von bevorzugter Diffusion ein Grund für die Abweichung der Ergebnisse sein.

Wie bereits erwähnt, wurde die DLR Jetflamme unter Annahme des chemischen Gleichgewichts berechnet. Um diese Vorgehensweise zu rechtfertigen, werden die Raman-Messdaten [DLR, 2001] statistisch ausgewertet und mit theoretischen Werten verglichen. Bei den experimentellen Untersuchungen wurden pro Messpunkt 800-1000 Simultanmessungen von verschiedenen Spezies vorgenommen. Die hohe Anzahl von Messungen erlaubt die Bestimmung von wechselseitigen Abhängigkeiten der Spezies bzw. Speziesschwankungen. Bei der Untersuchung der experimentellen Schwankungen muss beachtet werden, dass in brennernahen Heißgebieten die größten Messunsicherheiten und gleichzeitig die größten Fluktuationen bei den Messgrößen auftreten. Umgekehrt sind in weiter stromab liegenden Bereichen sehr genaue Messungen möglich, jedoch liegen nur kleine Schwankungen der Messgrößen vor, sodass Messfehler möglicherweise die gleiche Dimension wie Schwankungen haben. Zur statistischen Auswertung experimenteller Daten ist man in hohem Maße auf qualitativ hochwertige Messungen und auf eine möglichst große Anzahl von Einzelmessungen angewiesen. Dies trifft insbesondere für die Ermittlung von Schwankungskorrelationen zu [Schlittgen, 1997].

Wie in Kapitel 2.2.1 beschrieben, ist der empirische Korrelationskoeffizient ein Maß für die statistische Abhängigkeit zweier Größen. In Abb. 4.10 ist der Korrelationskoeffizient zwischen den Massenanteilen von CO_2 und H_2O aufgetragen.

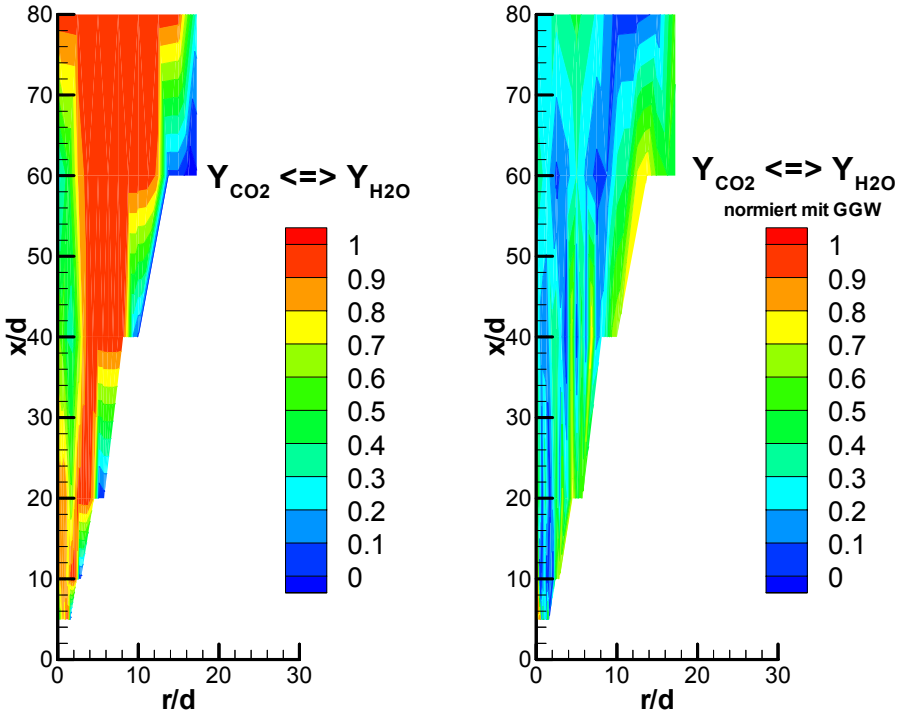


Abb. 4.10: Korrelationskoeffizient zwischen Y_{CO2} und Y_{H2O} (rechts: mit Gleichgewichtswerten normiert)

Es zeigt sich, dass zwischen Y_{CO2} und Y_{H2O} in weiten Teilen der Flamme eine mittlere (0.5 - 0.8) oder starke (0.8 - 1) Korrelation [Schlittgen, 1997] vorliegt. Insbesondere in den in Abb. 4.2 visualisierten Reaktionszonen (OH-LIF-Bild) sowie in Bereichen, in denen ein ausreagiertes Gemisch von Reaktionsprodukten vorliegt (x/d=80), sind die Korrelationen sehr stark. Da im chemischen Gleichgewicht die Speziesmassenanteile stark miteinander korreliert sind, ist dies ein erster Hinweis für die Gültigkeit der Gleichgewichtsannahme. In einer weiteren Untersuchung wurden die Messwerte mit Ergebnissen aus Gleichgewichtsberechnungen gekoppelt. Hierfür wurde in dieser Arbeit ein Programmodul entwickelt und mit Submodellen des TRUST-Codes [Mühleck, 1995; Theisen, 2000] verbunden. Anhand der experimentellen Mischungsbruchverteilung wurde mit einem Gleichgewichtsmodell [Mühleck, 1995] die theoretische Gleichgewichtszusammensetzung für jeden Messpunkt ermittelt. Durch Normierung der Messergebnisse mit den jeweiligen Gleichgewichtswerten und Errechnung des auf normierten Daten beruhenden Korrelationskoeffizienten ergibt sich die in Abb. 4.10 (rechts) dargestellte Abhängigkeit der Massenbrüche von Kohlenstoffdioxid und Wasser. Es zeigt sich sehr deutlich, dass bei der DLR Jetflamme die Normierung mit den Gleichgewichtswerten zur weitgehenden statistischen Unabhängigkeit der beiden betrachteten Größen führt. In weiten Bereichen der Flamme

liegt keine oder nur eine schwache (0–0.5) Korrelation [Schlittgen, 1997] vor. Da die Normierung mit den Gleichgewichtswerten zu einer guten Entkopplung der betrachteten Größen führt, zeigt dies die Gleichgewichtsnähe des Verbrennungsprozesses und somit die Anwendbarkeit von Gleichgewichts-Verbrennungsmodellen. Bei der Analyse von Korrelationen zwischen dem Mischungsbruch und dem Massenanteil einer Spezies ergaben sich ähnliche Ergebnisse. Auch in diesen Fällen führte die Normierung mit Gleichgewichtswerten zur weitgehenden statistischen Unabhängigkeit der betrachteten Größen. Dass dieses Verhalten nicht für alle Flammentypen und Flammenregionen in gleichem Maße zutrifft, zeigte eine kritische Durchsicht anderer Arbeiten [z.B. Landenfeld, 1999].

In weiteren numerischen Untersuchungen der am DLR Stuttgart und in SANDIA ermittelten Messdaten wurde die Abweichung von adiabaten Verhältnissen bestimmt. Hierbei wurde wiederum anhand der Messwerte der Idealzustand des chemischen Gleichgewichts ermittelt. Unter der Annahme isenthalper Strömungsverhältnisse wurde die Abweichung vom chemischen Gleichgewicht bestimmt. Diese Abweichung repräsentiert Verluste durch Strahlung und Wärmeleitung. In Abb. 4.11 sind diese Verluste als normierte Differenz zwischen gemessener Temperatur und der Temperatur des chemischen Gleichgewichts $(T-T_{GGW})/T_{GGW}$ grafisch dargestellt.

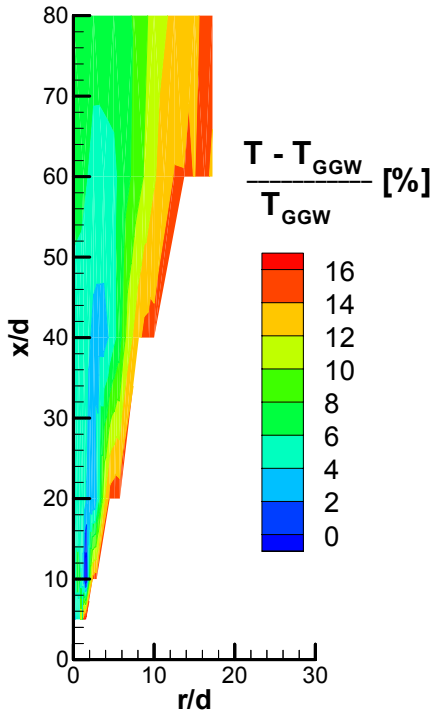


Abb. 4.11: Energieverlust bzgl. des chemischen Gleichgewichts

Die Verluste bewegen sich im Bereich von 0–15%. Erwartungsgemäß nehmen die Verluste mit zunehmender „Verweildauer“ stromabwärts und in radialer Richtung nach Außen hin zu. Die insgesamt relativ geringen Enthalpieverluste lassen einen geringen Anteil von Ruß und somit schwache Wärmestrahlung vermuten. Dieses Ergebnis steht in Einklang mit der im Experiment beobachteten „blauen“, d.h. rußarmen Farbe der DLR Jetflamme. Aufgrund des geringen Betrags der Verluste, sind diese beim Vergleich von rechnerischen Ergebnissen (chemische Gleichgewichtsberechnung) und Messergebnissen nicht zu erkennen.

4.2 DLR Gasfilmdüse

Im folgenden Kapitel wird die sogenannte DLR Gasfilmdüse behandelt. Die Ergebnisse der numerischen Simulation dieser praxisnahen Anwendung werden mit experimentellen Ergebnissen von Geschwindigkeits- und Temperaturmessungen verglichen.

4.2.1 Aufbau und Gitter

Bei der DLR Gasfilmdüse handelt es sich um eine eingeschlossene Diffusionsflamme, bei der Gebrauch von einer Brennstoff-/Luftdüse gemacht wird, die DLR-intern als Gasfilmdüse bezeichnet wird. Die Düse basiert auf den Vorgaben für eine MTU Fluggasturbinendüse [MTU, 1999] und ist sowohl von der Geometrie, als auch von den Betriebsparametern sehr praxisnah. Im Rahmen des DLR-internen Projektes BKM (Brennkammermodellierung) wurde die Düse mit verschiedenen Messtechniken untersucht. Die Ergebnisse dieser experimentellen Studien werden in der vorliegenden Arbeit mit den Simulationsergebnissen verglichen. Hierbei kommen das neu entwickelte JPDF-Modell, das PDF-Gleichgewichtsmodell sowie das Wirbelzerfallsmodell (EDC) zum Einsatz.
Abb. 4.12 zeigt einen Schnitt durch die Gasfilmdüse mit angeschlossener Brennkammer.

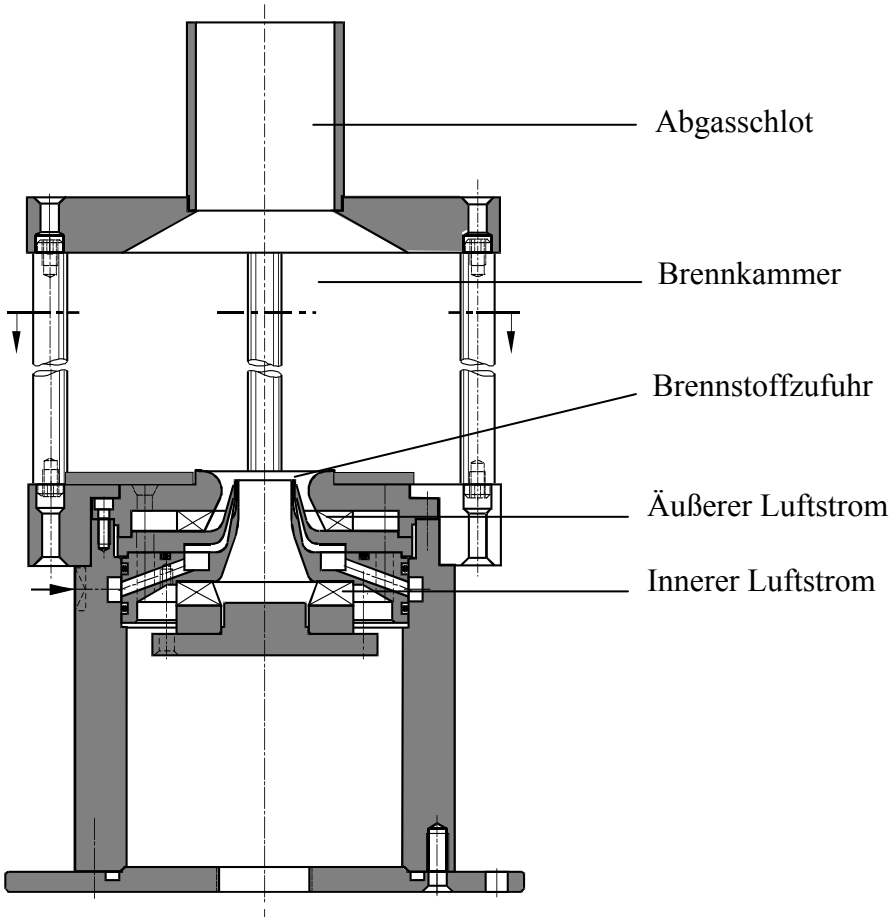


Abb. 4.12: Aufbau der DLR Gasfilmdüse und Brennkammer

Die Düse ist eine sogenannte Airblast-Düse mit Teilluftströmen durch eine Innendüse (d=15mm) und eine konzentrisch angeordnete Außendüse. Die Außendüse ist ein zum Ende hin diffusorartig aufgeweiteter Ringkanal, der an der engsten Stelle einen Durchmesser von d_a=25mm hat und sich stromab mit einem Konturradius von r=5.6mm aufweitet. Die Teilluftströme werden aus einer gemeinsamen Vorkammer gespeist. Zwei radiale Drallkörper erzeugen in beiden Teilströmungen gleichsinnigen, aber vom Betrag her unterschiedlichen Drall (mittlere Drallzahl: S=0.33). Die Brenngaszufuhr erfolgt zwischen den beiden Luftströmen durch 72 ringförmig angeordnete Kapillarkanäle, die jeweils eine Fläche von $0.5\times0.5\text{mm}^2$ besitzen. Der gemeinsame Austrittsquerschnitt von Innendüse und Brenngasaustritt ist gegenüber dem Endquerschnitt um 4.3mm versetzt (Düsenrücksprung). Die stromab folgende Brennkammer hat einen quadratischen Querschnitt mit einer Kantenlänge von 85mm und eine Länge von 114mm. Als Brennkammeraustritt schließt sich nach einer konischen Verjüngung ein 50mm langes zylindrisches Rohr mit einem

Innendurchmesser von d=40mm an. Die Wände der Brennkammer bestehen aus 1.5mm starken Quarzglasscheiben, um einen optischen Zugang zu ermöglichen.

In den Simulationsrechnungen wird das in Abb. 4.13 dargestellte Rechengitter benutzt.

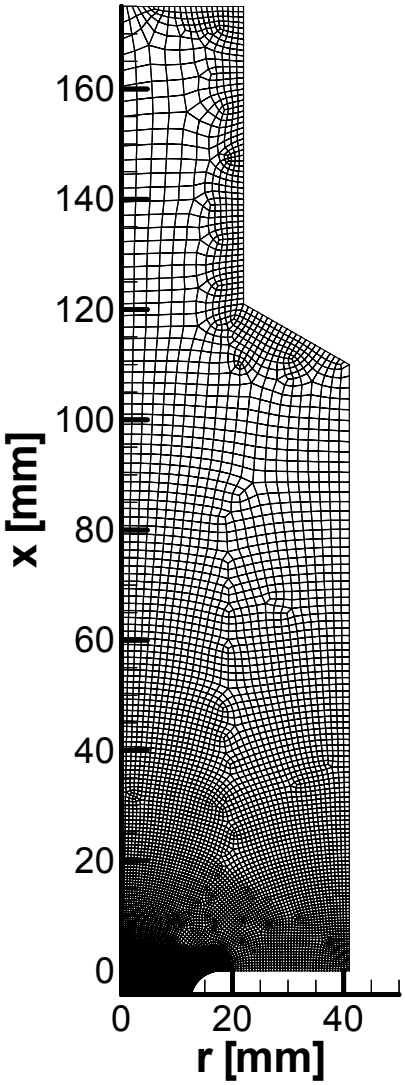


Abb. 4.13: Rechengitter der Gasfilmdüse (9700 Rechenzellen)

Unter Annahme von rotationssymmetrischen Strömungsverhältnissen wurde ein zweidimensionales Gitter verwendet, das aus 9700 unstrukturiert angeordneten, quadrilateralen Rechenzellen besteht. Die Gitterweite ist im unteren Bereich der Brennkammer und insbesondere im Einströmbereich mit Kantenlängen von 0.2–0.5mm sehr klein. Stromab wird das Gitter grober, die Kantenlängen der Zellen haben hier 10–

15 mal größere Werte als im Einströmbereich. Zur Untersuchung der Gitterunabhängigkeit kam neben diesem Gitter auch ein stark verfeinertes Rechennetz mit ca. 37000 Zellen zum Einsatz. Das Rechengebiet beginnt in axialer Richtung auf der Höhe des gemeinsamen Eintritts des Brenngases.

Im Vergleich zum experimentellen Aufbau in Abb. 4.12 weist das Gitter einige Vereinfachungen auf. In der Simulation wird nur eine Halbebene der Brennkammer berechnet und an der Mittelachse eine Symmetrierandbedingung gewählt. Aufgrund der vereinfachenden Annahme von rotationssymmetrischen Verhältnissen werden Vorgänge, die im Experiment in den Ecken der Brennkammer stattfinden, in der Rechnung nicht berücksichtigt. Wie sich herausstellte ist der Einfluss dieser Gebiete auf die Hauptverbrennungszone in der Brennkammermitte nur von untergeordneter Bedeutung. Dennoch muss diese Vereinfachung bei der Interpretation der Ergebnisse, insbesondere in randnahen Gebieten, berücksichtigt werden. Als weitere Vereinfachung der Geometrie wird eine ringförmige Brennstoffzufuhr anstatt der Kapillare angenommen. Dadurch wird die mittlere Einströmgeschwindigkeit des Brennstoffs nahezu halbiert. Aufgrund der niedrigeren Dichte des Brennstoffs ($\rho_{Br.}/\rho_{Luft}\approx 0.55$) und des im Vergleich zum Luftstrom geringen Volumenstroms ist der Einfluss des hierdurch reduzierten Eintrittsimpulses vernachlässigbar und nur im Nahbereich der Einströmung erkennbar [Lehmann, 2001].

Die Randbedingungen für die Luftströme basieren auf Ergebnissen von LDA-Messungen die in 1mm Höhe über der Düse durchgeführt wurden [Lehmann, 2000]. Da die LDA-Messebene 5.3mm stromab des Rechengittereintritts liegt, müssen die Messwerte auf den Eintrittsquerschnitt projiziert werden. Hierbei wurde das Eintrittsprofil der Rechnung sukzessive so angepasst, dass die Geschwindigkeitskomponenten in der ersten Messebene bei Simulation und Experiment möglichst gut übereinstimmen. Für den Brennstoffstrom wurde ein konstanter Massenstrom mit blockförmigem Geschwindigkeitsprofil verwendet. Der Brennkammerboden, die Seitenwände und das Auslassrohr werden als adiabate Wände betrachtet. Die Auslassöffnung wird mit einer Druckrandbedingung belegt.

Die Gasfilmdüse wurde sowohl isotherm (d.h. kalt) als auch mit Verbrennung experimentell untersucht. Im isothermen Fall wurde der Brenngasstrom durch einen äquivalenten Luftstrom ersetzt. Als Brennstoff wurde Methan verwendet. In der hier untersuchten Einstellung der Flamme betrug der Brennstoffvolumenstrom $V_{Br}=3.5Nm^3/h$. Der Brenner hatte damit eine thermische Leistung von ca. P=35KW. Der Gesamtluftstrom betrug im isothermen Fall $V_{L\text{-}is}=58.5Nm^3/h$ und im thermischen

Fall $V_{L\text{-}th}$=49.1Nm^3/h. In beiden Fällen teilte sich der Gesamtluftstrom im Verhältnis m_i/m_a =3/4 zwischen dem inneren und dem äußeren Luftstrom auf.

Alle in diesem Kapitel benutzten experimentellen Daten wurden am DLR Institut für Antriebstechnik in der Abteilung für Turbulenzforschung ermittelt [Lehmann, 2000]. Das Geschwindigkeitsfeld wurde mittels Laser-Doppler-Anemometrie bestimmt. Es liegen Messdaten aller drei Geschwindigkeitskomponenten in verschiedenen radialen Positionen (r=0–40mm) in unterschiedlichen Höhen (x=1-100mm) über dem Brenner vor. Die Temperaturmessungen wurden mit Thermoelementen durchgeführt. Eine Vielzahl von Messpunkten erlaubte auch hier die Ermittlung eines zweidimensionalen Temperaturfeldes. Details über den Aufbau der Messtechnik und die experimentelle Vorgehensweise finden sich bei [Lehmann, 2000].

Abb. 4.14: Foto der Gasfilmflamme

Abb. 4.14 zeigt ein Foto der Gasfilmdüse im thermischen Betriebsfall. Deutlich sichtbar ist die abgehobene V-förmige Kontur der Flamme und der rotglühende Auslasszylinder. Neben diesem Strömungszustand ergab sich bei den experimentellen Untersuchungen

unter bestimmten Bedingungen ein weiterer stabiler Zustand, bei dem die Flamme am Brennkammerboden anlag. Dieser Zustand wird in dieser Arbeit jedoch nicht numerisch untersucht. Hier wird ausschließlich der Messfall bei 35KW thermischer Leistung bei einer Luftzahl von λ=1.38 (Φ=0.72) betrachtet.

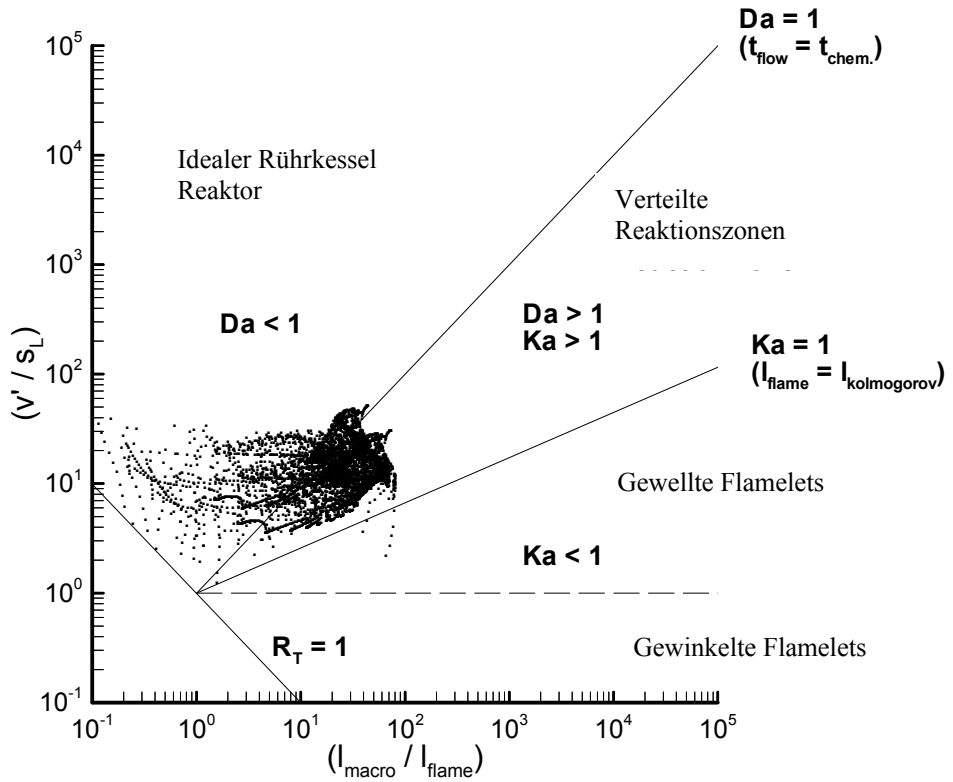


Abb. 4.15: Einordnung der Gasfilmdüse in das Borghi-Diagramm für Diffusionsflammen [Borghi, 1988]

Abb. 4.15 zeigt die Lage der Gasfilmdüse im Borghi-Diagramm [Borghi, 1988]. Grundlage ist eine Simulationsrechnung mit dem JPDF-Verbrennungsmodell. Es zeigt sich, dass die Verbrennung nicht einer einzigen Region des Diagramms zugeordnet werden kann, sich aber im Bereich um Da=1 bewegt. Da somit die strömungsmechanische Zeitskala (Mischprozesse) vergleichbar mit der Zeitskala der chemischen Reaktion ist, kommt dem Einfluss der Turbulenz auf die chemische Reaktion bei dieser Flamme eine besondere Bedeutung zu. Weiterhin ist fraglich, ob Verbrennungsmodelle, die auf unendlich schneller chemischer Reaktion oder auf Flamelet-Modellierung basieren, hier noch akzeptable Ergebnisse liefern. Punkte, die im Bereich der normierten Längenskalen kleiner als Eins liegen, haben keine physikalische Bedeutung. Sie repräsentieren kalte Bereich nahe des Brennerbodens in denen keine Verbrennung stattfindet und somit eine Darstellung im Borghi-Diagramm

nicht sinnvoll ist. Da keine geeignete Filterungsmethode zur Verfügung steht, sind diese Rechenpunkte dennoch im Diagramm aufgeführt.

Im Folgenden werden Rechenergebnisse für den isothermen und den heißen Strömungszustand mit den jeweiligen experimentellen Ergebnissen verglichen und diskutiert.

4.2.2 Vergleich Experiment - Simulation

In diesem Kapitel werden zunächst die isothermen Ergebnisse von Messung und Rechnung und danach die Ergebnisse für den Fall mit Verbrennung verglichen.

Bei der numerischen Simulation der isothermen Strömung wird das in Kapitel 2.1.4 erwähnte modifizierte k-ε-Modell [Shih u. a., 1995] für die Beschreibung der Turbulenz verwendet. Wie bereits im vorherigen Kapitel erwähnt, wird im isothermen Fall an Stelle des Brennstoffs Luft eingedüst. Zum Vergleich von gemessenem und gerechnetem Geschwindigkeitsfeld ist in Abb. 4.16 die Kontur der Axialkomponente im Mittelschnitt dargestellt.

Die grundlegenden Merkmale einer Typ II-Diffusionsflamme [Leuckel, 1994] sind sowohl bei der Simulation, als auch im Experiment sehr gut zu erkennen.

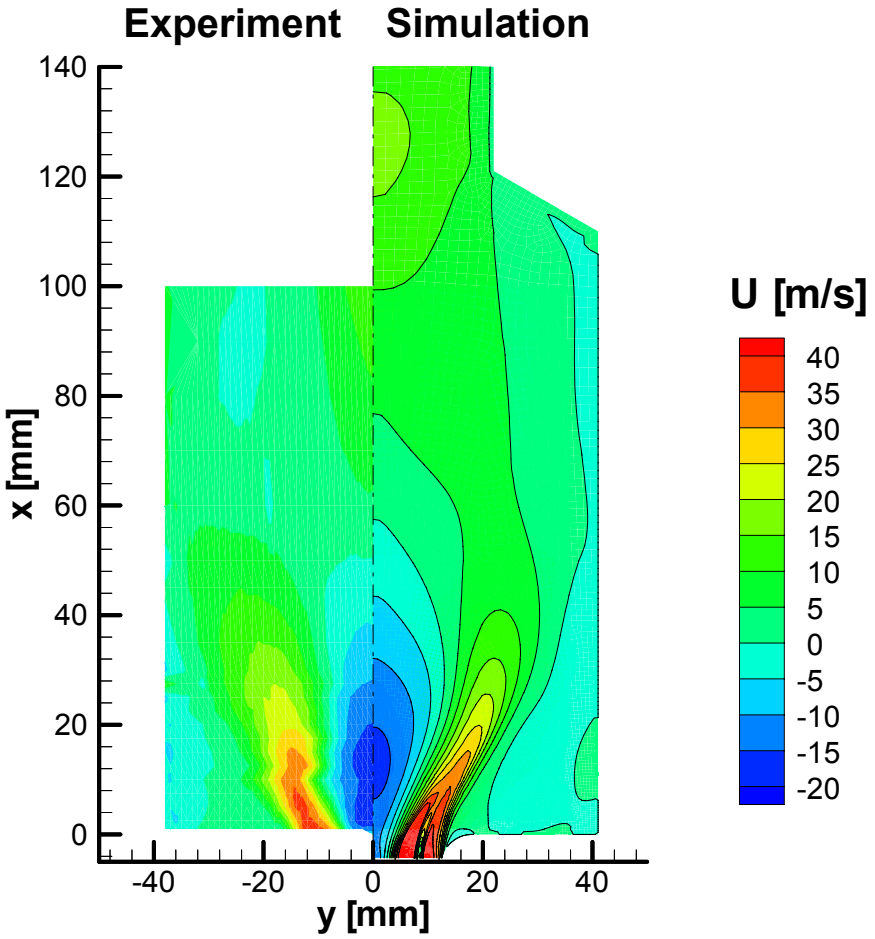
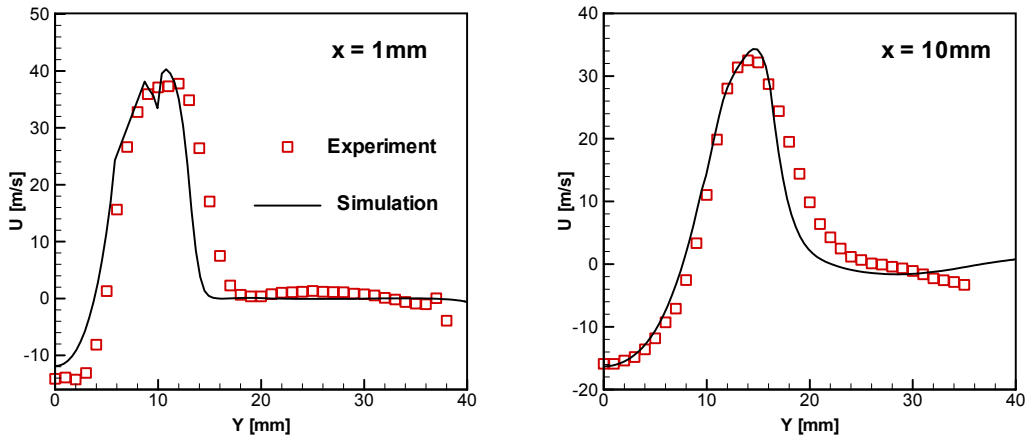


Abb. 4.16: Axialgeschwindigkeiten im Fall isothermer Strömung

Die für Drallflammen diesen Typs charakteristische innere Rezirkulationszone [Günther, 1974] im Bereich der Mittelachse stimmt bei Experiment und Simulation sowohl von der Lage, als auch vom Betrag der Axialgeschwindigkeit gut überein. Nur in der axialen Ausdehnung der zentralen Rückströmzone sind geringe Unterschiede zu erkennen. Auch die sich stromab verjüngende äußere Rezirkulationszone, die in axialer Richtung vom Brennerboden bis etwa x=50mm und in radialer Richtung von y=20mm bis an die Außenwand reicht, ist sowohl im Experiment als auch in der Simulation deutlich zu erkennen. Auch der Öffnungswinkel der Düsenströmung stimmt in Experiment und Rechnung gut überein und hat in beiden Fällen einen Wert von ca. 30°. Auch die Eindringtiefe des Luft-Brennstoff-Gemisches, die sich anhand der Axialgeschwindigkeitsgradienten abschätzen lässt, zeigt eine gute Übereinstimmung.
Dass diese guten Simulationsergebnisse bei stark verdrallten Flammen nicht selbstverständlich sind, zeigte die Untersuchung einer eingeschlossenen Drallflamme (Tecflam-Drallbrenner) [Meier u. a., 2000; Theisen u. a., 2000], die dieser Arbeit vorangegangen war.
Zum detaillierten Vergleich der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten sind in Abb. 4.17-4.19 die Profile von Axial-, Radial- und Umfangsgeschwindigkeit in verschiedenen Höhen über dem Düsenaustritt (x=0mm) dargestellt.



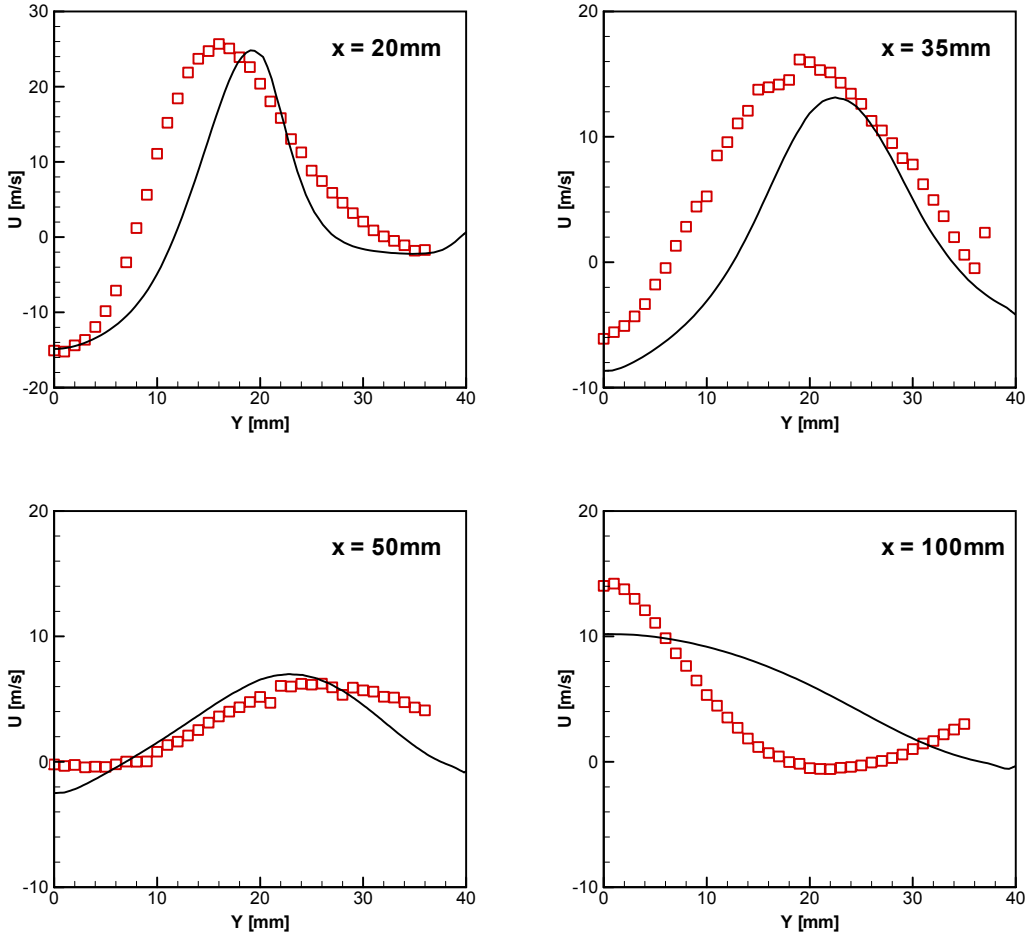


Abb. 4.17: Profile der Axialgeschwindigkeit in verschiedenen Höhen über der Düse

Direkt über dem Eintritt (x=1mm) ist in der Simulation noch der Nachlauf der 4.3mm stromauf liegenden Brennstoffeindüsung zu erkennen, während dies im Experiment nicht sichtbar ist. Im Brennernahbereich (x<20mm) ist die Übereinstimmung sowohl vom Geschwindigkeitsbetrag her, als auch von der radialen Ausdehnung des Strömungsgebietes sehr gut. Weiter stromab (x>20) zeigt sich in der Simulation der Trend einer stärkeren Aufweitung. Dies ist besonders deutlich bei x=100mm zu erkennen. In dieser Höhe ist die Übereinstimmung von Messung und Experiment nicht befriedigend. Beim Vergleich der Geschwindigkeiten sei allerdings darauf hingewiesen, dass die betraglichen Unterschiede der Minimal- und Maximalwerte zwischen Experiment und Simulation relativ gering sind. Als Grund für die Abweichung der Simulationsergebnisse von den gemessenen Ergebnissen ist die Vereinfachung der Rechnung auf den zweidimensionalen Fall denkbar. In diesem Zusammenhang muss allerdings auch die Genauigkeit der Messung in Betracht gezogen werden. Die Geschwindigkeitsmessungen haben nach [Lehmann, 2001] in Abhängigkeit vom

Messort typischerweise eine Ungenauigkeit von etwa ±10-20%. Dieser Fehler kann unter Umständen auch wesentlich höher werden [Lehmann, 2001], wenn bei der LDA-Messung nicht genügend Partikel ausgewertet werden können.

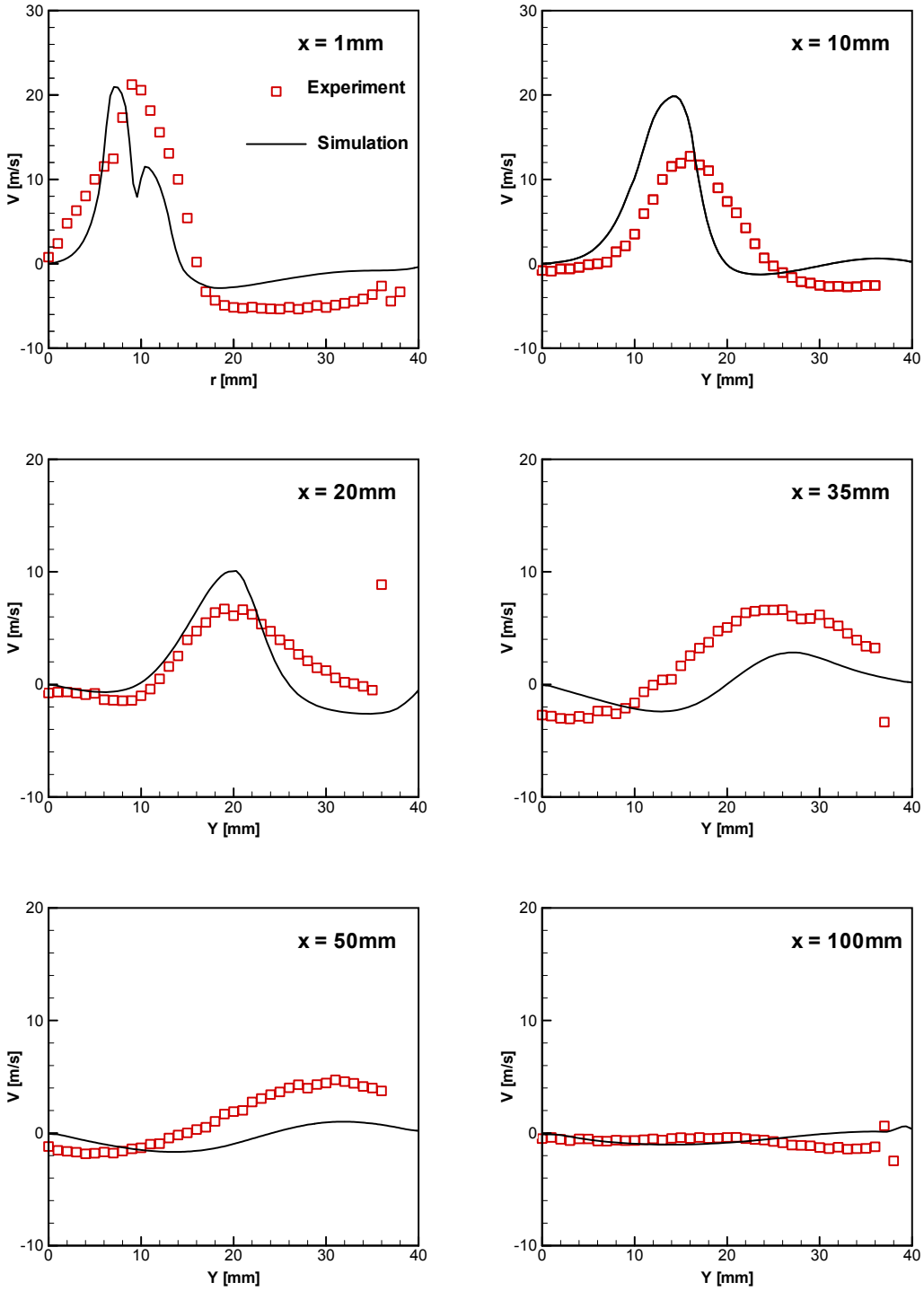
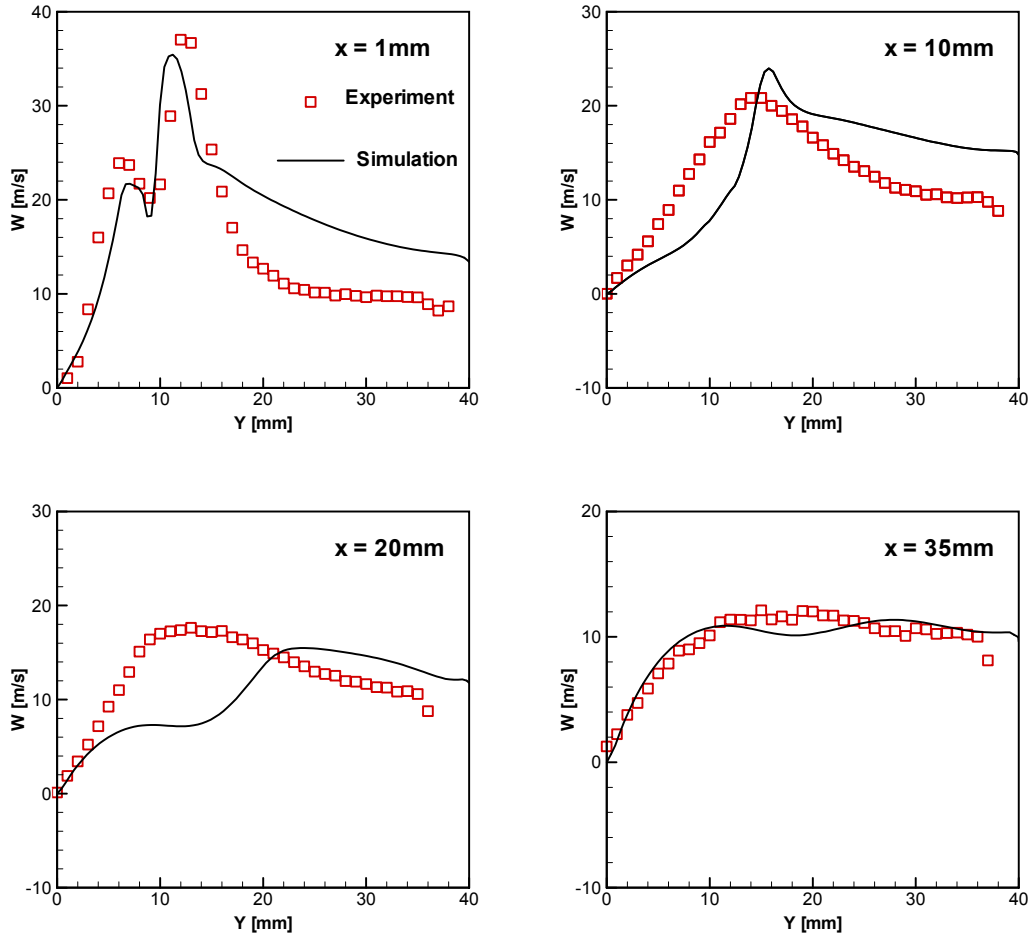


Abb. 4.18: Profile der Radialgeschwindigkeit in verschiedenen Höhen über der Düse

Bei der radialen Komponente in Abb. 4.18 zeigt sich, dass der grundlegende Verlauf bei Experiment und Simulation gut übereinstimmt. Es bestehen geringe betragliche Unterschiede und, wie im Fall der Axialkomponente, Unterschiede in der radialen Ausdehnung des Geschwindigkeitsfeldes. In x=1mm Abstand vom Brenner ist bei der Simulation auch hier noch der Einfluss des Nachlaufs zu sehen. Weiterhin ist deutlich zu erkennen, dass die Radialgeschwindigkeit stromab sehr stark abnimmt. In x=1mm Entfernung vom Brenner liegen die Maximalbeträge bei ca. v=20m/s, bei x=50mm bei ca. v=4m/s und bei x=100mm ist die Radialgeschwindigkeit sowohl in der Simulation als auch im Experiment gleich null.



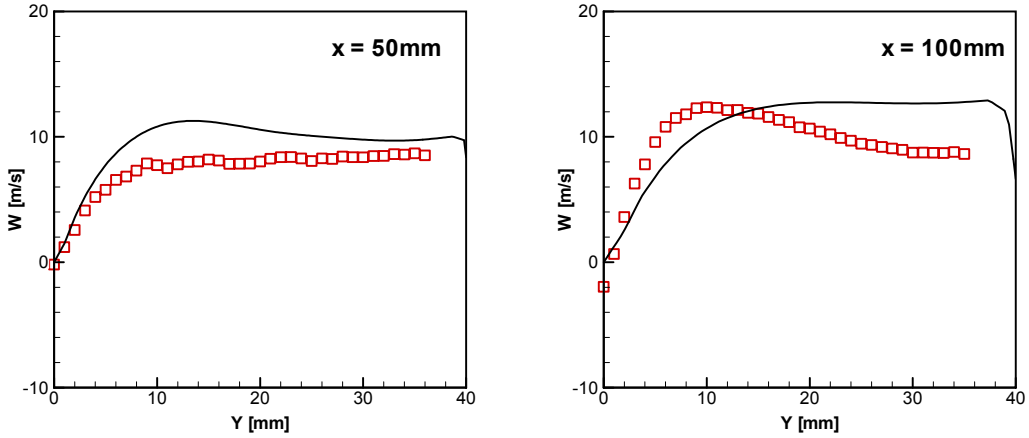


Abb. 4.19: Profile der Umfangsgeschwindigkeit in verschiedenen Höhen über der Düse

Einzig bei der Umfangskomponente (Abb. 4.19) zeigt sich bei x=1mm sowohl in der Rechnung, als auch in der Messung der Einfluss der Zweistromdüse. Während die Übereinstimmung in den Geschwindigkeitsbeträgen und in der Lage der Maxima in dieser Höhe noch gegeben ist, so nimmt diese stromab stark ab. Insbesondere bei x=10mm bis x=20mm liegen die Maxima bei der Simulation weiter von der Mittelachse entfernt als im Experiment. Die Ursache dieser Diskrepanz ist noch nicht geklärt. Denkbar ist, dass das hier benutze modifizierte k-ε-Turbulenzmodell den Drall nicht ganz exakt beschreiben kann oder aber die vereinfachende Annahme von 2D-Roationssymmetrie in diesem Bereich der Strömung nicht gerechtfertigt ist. Weiter stromab (x>35mm) verbessert sich die Übereinstimmung.

Im Folgenden wird die Strömung mit Verbrennung betrachtet. Im Experiment ändern sich die Randbedingungen bis auf den Gesamt-Luftvolumenstrom nur geringfügig. Der im isothermen Fall aus Gründen sicherer Handhabung benutzte „Ersatzbrennstoff“ Luft wird durch Methan ersetzt. In der Rechnung kommt wiederum das in Kap. 2.1.4 erwähnte RNG k-ε-Turbulenzmodell zum Einsatz. Die chemische Reaktion wird mit verschiedenen Modellen beschrieben. Zum einen wird das in dieser Arbeit entwickelte JPDF-Modell verwendet (JPDF). Weiterhin wird in Vergleichsrechnungen das Wirbelzerfallsmodell (EDC) und das chemische Gleichgewichtsmodell (GGW) eingesetzt.
In Abb. 4.20 ist die Kontur der Axialgeschwindigkeit dargestellt. Auf der linken Seite sind die Messergebnisse, auf der rechten Seite die Simulationsergebnisse mit dem JPDF-Verbrennungsmodell abgebildet. Im unteren Bereich der Brennkammer befindet sich ein Eckenwirbel, die äußere Rezirkulationszone. Wie im isothermen Fall handelt es

sich um eine Drall-Strömungsform des Typs II [Leukel, 1994]. Die Flamme wird durch eine zentrale Rezirkulationszone stabilisiert. Im Vergleich zum isothermen Fall besitzt die Rezirkulationszone bei der Strömung mit Verbrennung eine etwas größere Ausdehnung in axialer Richtung und geringfügig höhere Geschwindigkeitsbeträge. Diese Aussagen treffen sowohl für die Messung, als auch für die Rechnung zu. Im Gegensatz zur Messung ist das Rückströmgebiet bei der Rechnung zweigeteilt. Neben der brennernahen Rückströmung ist ein zweites Maximum nahe x=50mm zu erkennen. Eine ähnliche Geschwindigkeitsverteilung wurde bei anderen Typ II Drallflammen auch experimentell beobachtet. Im Vergleich zum isothermen Fall steigen die Geschwindigkeiten im Auslass deutlich an. Die Volumenexpansion aufgrund der Verbrennung hat Auslassgeschwindigkeiten von über 70m/s zur Folge, wie im oberen Teil der Simulationsrechnung (Abb. 4.20) zu sehen ist. Diese Rechenergebnisse werden von Geschwindigkeitsmessungen 2mm oberhalb des Auslasses [Lehmann, 2000] bestätigt.

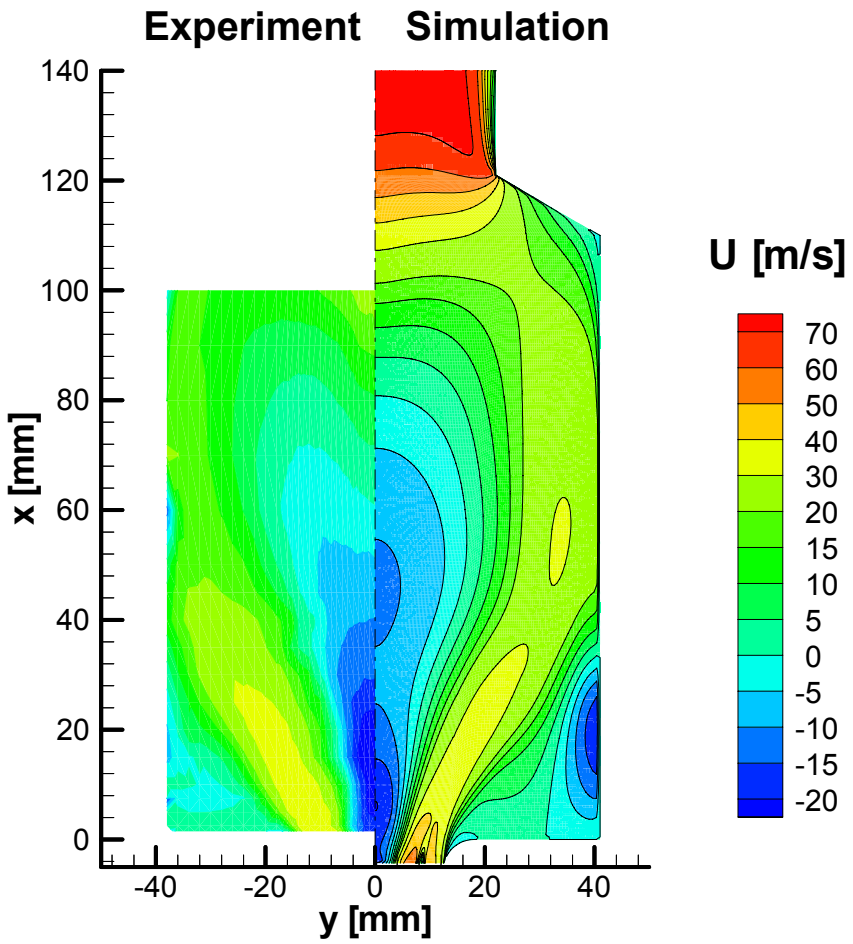
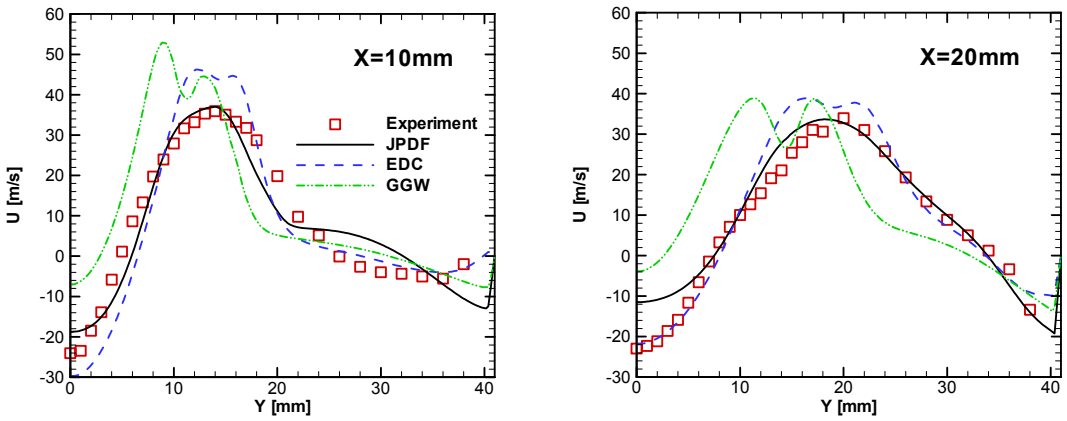


Abb. 4.20: Axialgeschwindigkeiten im Strömungsfall mit Verbrennung

Zum besseren Vergleich von Simulation und Messung sind in den Abb. 4.21-4.23 die Profile der einzelnen Geschwindigkeitskomponenten in verschiedenen Höhen über der Düse aufgetragen.



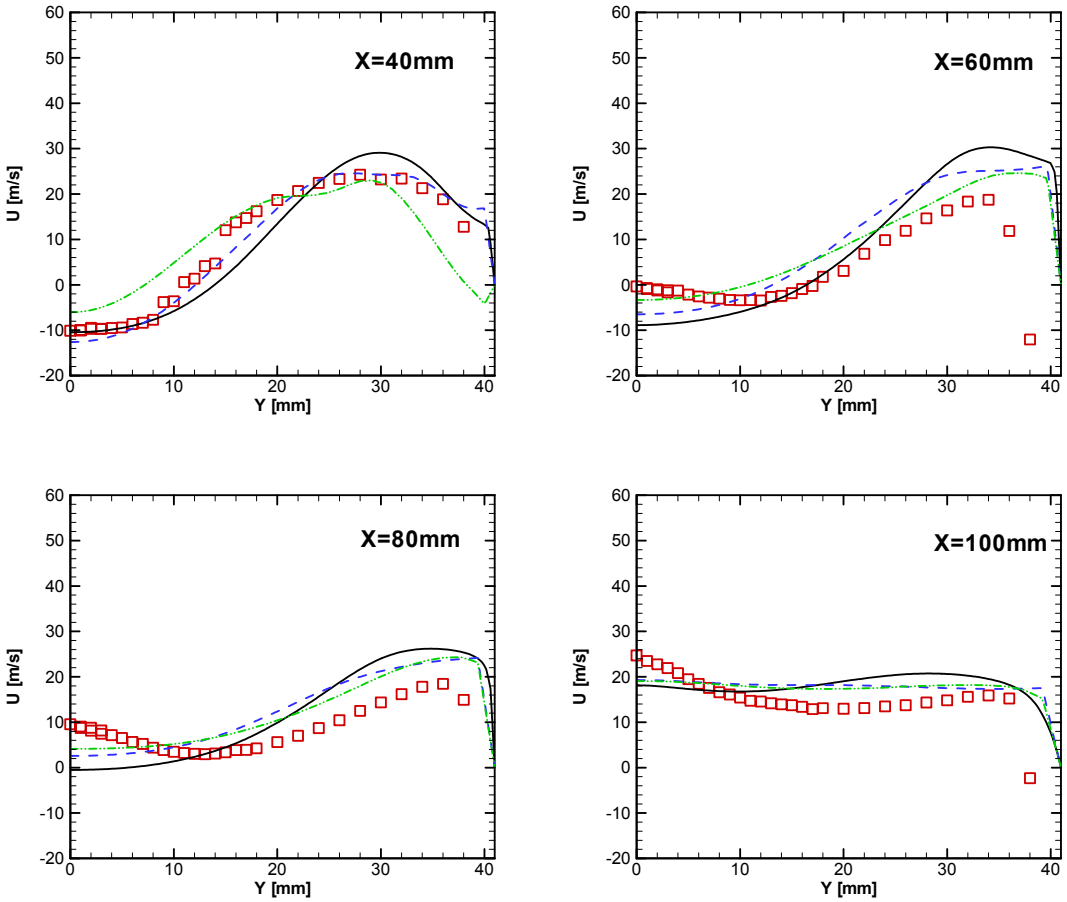


Abb. 4.21: Profile der Axialgeschwindigkeit in verschiedenen Höhen über der Düse

Die Ergebnisse der einzelnen Verbrennungsmodelle sind sehr unterschiedlich und weichen teilweise stark voneinander ab. Bei der in Abb. 4.21 gezeigten Axialgeschwindigkeit liefert das JPDF- und das EDC-Verbrennungsmodell im Bereich nahe der Düse Ergebnisse, die den experimentellen Daten am besten entsprechen. Weiter stromab (x>60mm) weichen die Simulationsergebnisse weniger stark voneinander ab, wobei die Axialgeschwindigkeit bei Nutzung des chemischen Gleichgewichtsmodells am treffendsten beschrieben wird. Bei allen Modellen werden die Ausdehnungen von innerer und äußerer Rezirkulationszone gut erfasst, allerdings gibt es Unterschiede bei den Geschwindigkeitsbeträgen. Weiterhin fällt auf, dass die Verteilung der Axialgeschwindigkeit nahe der Düse im Fall des Gleichgewichtsmodells und teilweise des EDC-Modells zwei lokale Maxima besitzt. In der Messung ist eine derartige Verteilung der Axialgeschwindigkeit nicht zu erkennen.

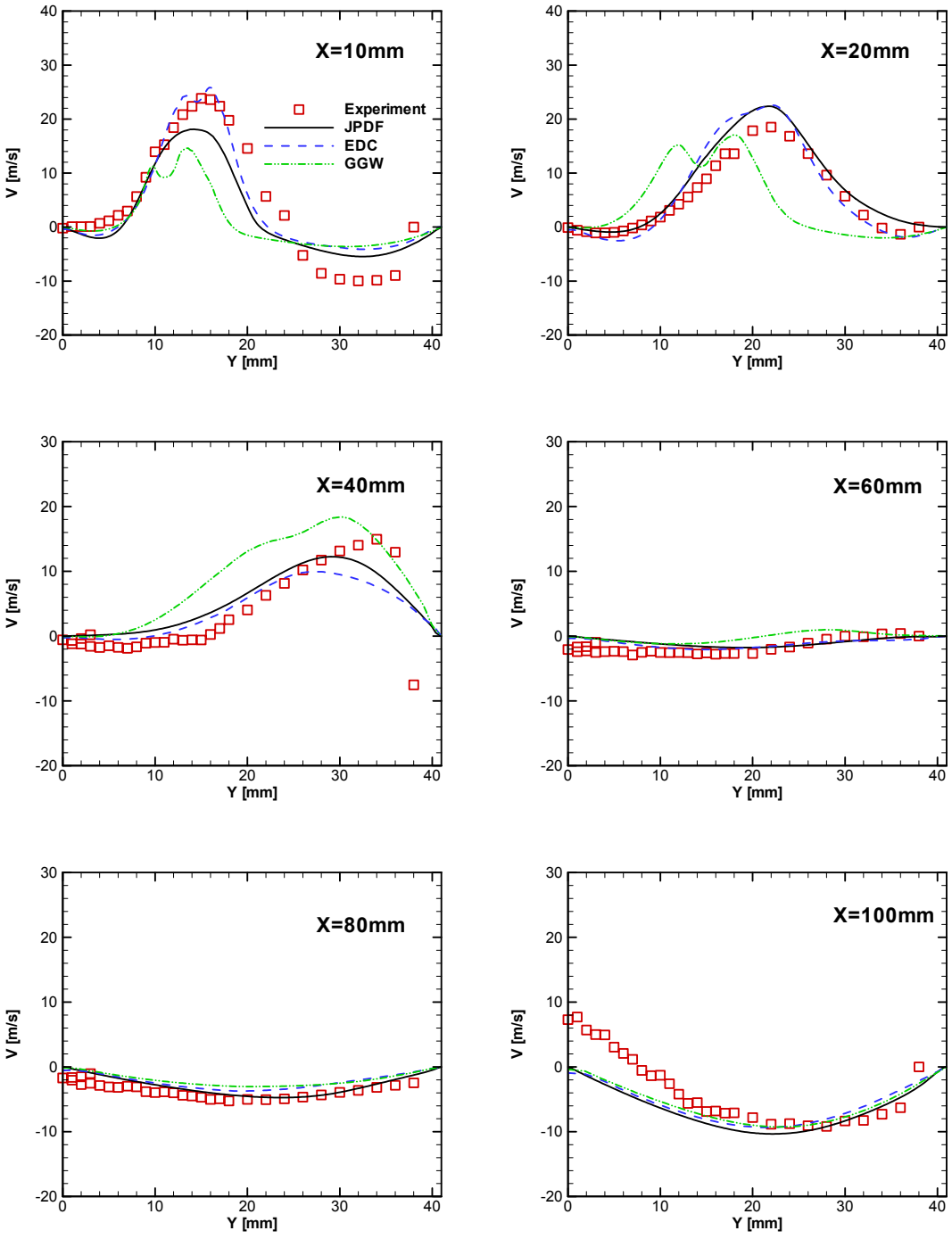
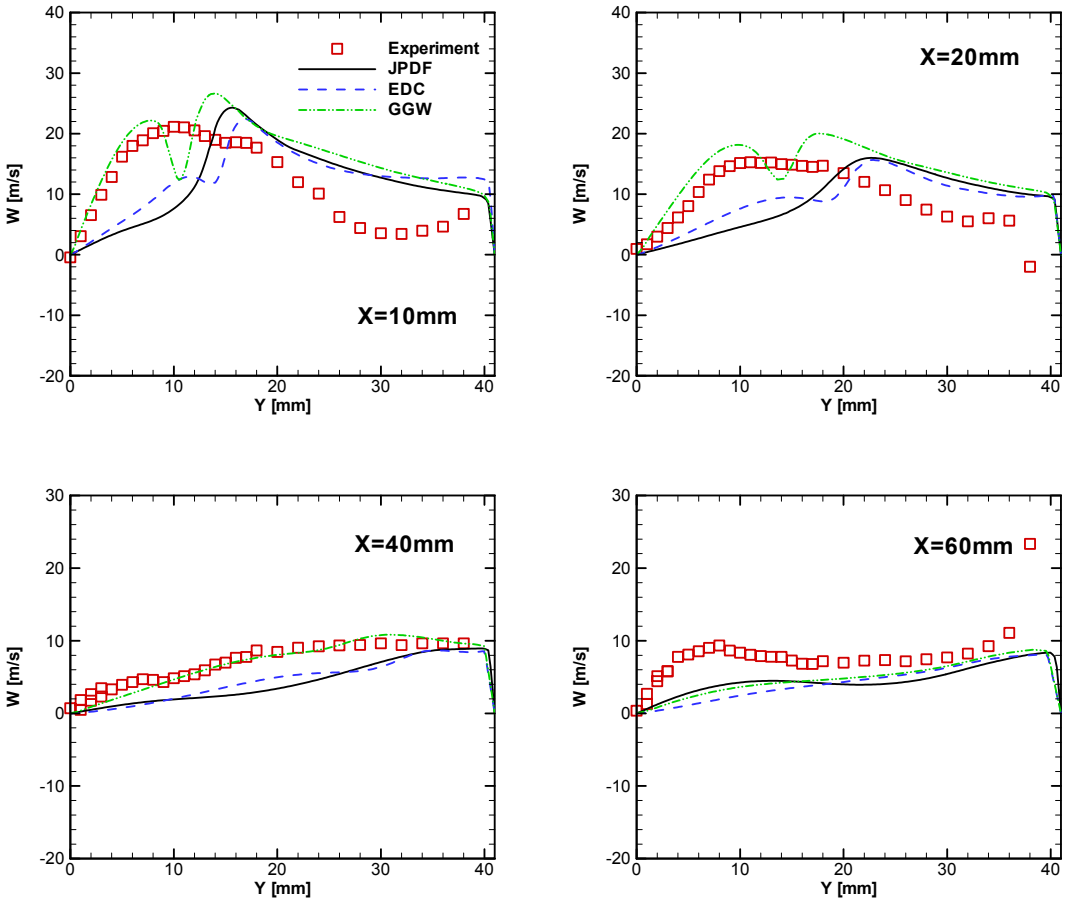


Abb. 4.22: Profile der Radialgeschwindigkeit in verschiedenen Höhen über der Düse

Bei den in Abb. 4.22 gezeigten Profilen der Radialgeschwindigkeit überwiegen die Unterschiede zwischen den Simulationsergebnissen ebenfalls im Brennernahbereich. Die besten Übereinstimmungen mit der Messung ergeben sich wiederum bei der Nutzung des JPDF- und des EDC-Modells. Im mittleren und oberen Strömungsabschnitt

(x>60mm) treten nur noch geringfügige Unterschiede zwischen den verschiedenen Modellen auf.

Bei den Umfangsgeschwindigkeiten in Abb. 4.23 zeigt sich, dass nahe dem Brenner alle Modelle Defizite bei der Beschreibung dieser Geschwindigkeitskomponente haben. Im Bereich zwischen x=40mm und x=60mm liefern die Modelle ähnliche Ergebnisse, die geringfügig unter den Messwerten liegen. Weiter stromab (x>60mm) ergibt sich die beste Übereinstimmung zwischen Simulation und Experiment bei Nutzung des JPDF-Verbrennungsmodells.



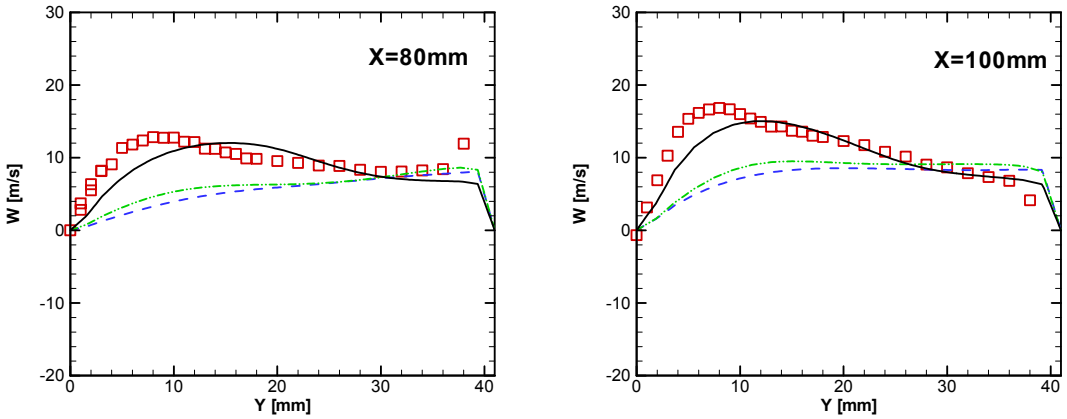


Abb. 4.23: Profile der Umfangsgeschwindigkeit in verschiedenen Höhen über der Düse

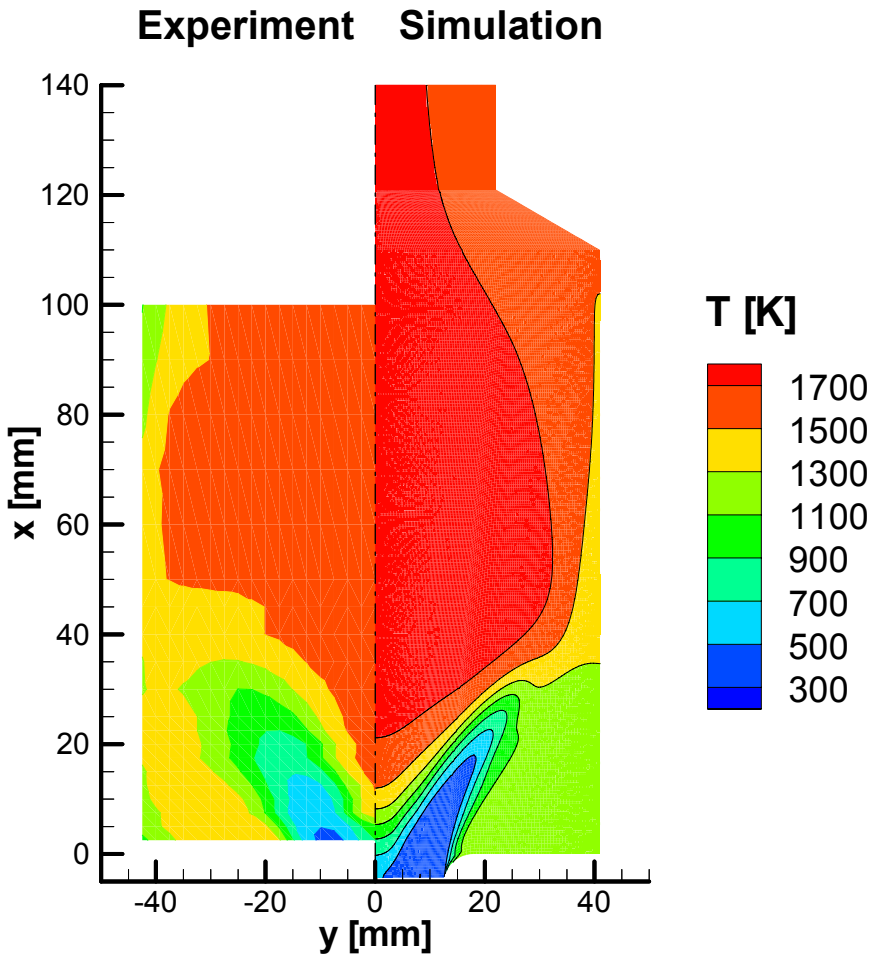


Abb. 4.24: Temperaturverteilung im Strömungsfall mit Verbrennung

Abb. 4.24 zeigt die Kontur der gemessenen (links) und der mit dem JPDF-Modell berechneten (rechts) Temperatur. Die Eindringtiefe und die Temperaturgradienten des

Luft-Brennstoff-Gemisches stimmen bei Messung und Rechnung sehr gut überein. Auch die Form und Lage des stromab folgenden Heißgebietes werden in der Simulation gut wiedergegeben. Wie sich in den in Abb. 4.25 dargestellten Temperaturprofilen zeigt, wird einzig die Temperatur in der äußeren Rezirkulationszone in der Simulation etwas unterschätzt. Auf diese Abweichung wird im Folgenden noch näher eingegangen.

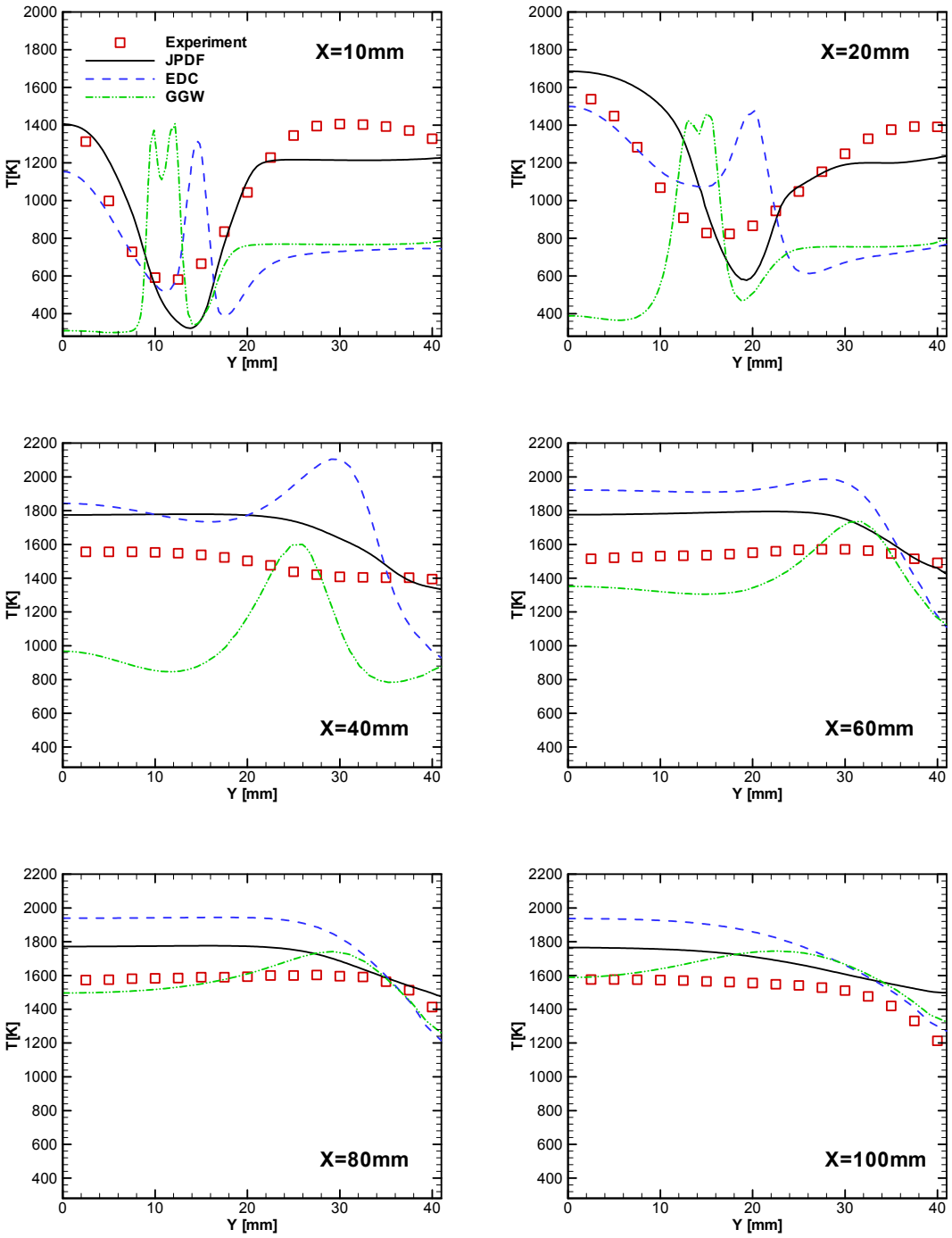


Abb. 4.25: Profile der Temperatur in verschiedenen Höhen über der Düse

In den Temperaturprofilen (Abb. 4.25) zeigt sich der Einfluss des Verbrennungsmodells auf die Simulationsergebnisse sehr deutlich. Mit dem Wirbelzerfallsmodell wird im unteren Brennerbereich (x<40mm) ein Heißgebiet auf der Mittelachse und ein zweites Heißgebiet am äußeren Rand der Einströmung (y=15-20mm) errechnet. Das EDC-Modell sagt somit eine hohe Reaktionsrate in den hochturbulenten Scherschichten voraus. Stromab (x>40) vereinigen sich die beiden Heißgebiete. Die Aufteilung des Heißgebietes in zwei Bereiche ist in den Messungen nicht zu finden. Die maximalen Temperaturwerte liegen beim Wirbelzerfallsmodell mit ca. 2160K deutlich über den gemessenen Werten. Weiterhin liegen die Temperaturen in der äußeren Rezirkulationszone mit ca. 800K deutlich unter den Messwerten, die sich im Bereich von 1250-1400K bewegen.

Wird das Chemische Gleichgewichtsmodell (GGW) benutzt, ergeben sich ebenfalls stark von der Messung abweichende Temperaturprofile. Das zentrale Heißgebiet in der unteren Brennkammermitte wird nicht erfasst. Im Bereich zwischen innerer und äußerer Einströmung wird in den Höhen x=10–20mm ein Heißgebiet vorhergesagt. Stromab wandert dieses Heißgebiet in radialer Richtung nach außen, gleichzeitig kommt es auch im Bereich der Mittelachse zu Temperaturerhöhungen auf bis zu 1600K in einer Höhe von x=100mm. Das Temperaturmaximum liegt mit ca. 1800K in einem Bereich, der sich in axialer Richtung von x=60mm bis x>100mm und in radialer Richtung von y=25mm bis y=35mm erstreckt. Das Heißgebiet liegt somit weit stromab und sehr nahe an den Brennkammerwänden. Insbesondere im brennernahen Bereich stimmen Experiment und Gleichgewichtsrechnung nicht überein. Erst ab einer Höhe von x=80mm sind bei Simulation und Messung ähnliche Temperaturverläufe zu erkennen. Dies lässt die Folgerung zu, dass in diesen Höhen das Gemisch im chemischen Gleichgewicht ist und somit das Gleichgewichtsmodell Gültigkeit besitzt.

Einzig das in dieser Arbeit entwickelte JPDF-Modell ist in der Lage, die globale Temperaturverteilung der Gasfilmdüse zu beschreiben, und die abgehobene Flammenform vorherzusagen. Sowohl das Heißgebiet in der zentralen Rezirkulationszone, als auch die Temperaturabsenkung im Düseneinströmbereich und die Temperaturerhöhung im Bereich der äußeren Rückströmung werden erfasst. Insbesondere im brennernahen Bereich (x=10mm) stimmen im Bereich der inneren Rückströmzone die Temperaturen, sowie die radialen Temperaturgradienten bei Simulation und Messung sehr gut überein. Der Betrag des Temperaturabfalls im Einströmbereich und die Temperatur in der äußeren Rezirkulation werden um 50-150K unterschätzt. In diesem Zusammenhang sei darauf hingewiesen, dass die in der Simulation niedrigere Temperatur in den wandnahen Gebieten durch die Annahme der Rotationssymmetrie und die damit verbundene Vernachlässigung der Vorgänge in den

Brennkammerecken herrühren kann. Im stromab von x=40mm liegenden Bereich ist der Einfluss der Eindüsung des Brennstoff-Luft Gemisches nicht mehr zu erkennen. In weiten Bereichen der Brennkammer liegt ein homogenes Temperaturfeld vor. Dies ist sowohl im Experiment, als auch in der JPDF-Simulation gut zu erkennen. Die Temperaturbeträge werden in diesem Gebiet von der Simulation überschätzt und liegen bis zu 150K über den Messwerten. Hierbei muss allerdings beachtet werden, dass die Fehler der Thermoelement-Temperaturmessungen bis über 100K betragen können [Lehmann, 2001]. Die Bildung integraler Mittelwerte der Temperatur ist bei der Gasfilmdüse schwierig, da die Rückströmzonen stromabwärts eine verhältnismäßig große Ausdehnung besitzen (bis x>80mm). Daher wurde zur Validierung der integralen Temperaturbilanz der massenstromgewichtete Mittelwert der Temperatur in der Auslassebene bestimmt. Bei allen Verbrennungsmodellen stimmt dieser Wert mit ca. 1630K überein. Wie erwähnt, sind sowohl die Geschwindigkeitsfelder als auch die Temperaturverteilung bei den unterschiedlichen Verbrennungsmodellen sehr verschieden. Die relativ starke Kopplung der Verbrennung mit strömungsmechanischen Vorgängen zeigte sich auch in einer Berechnung, in der das chemische Gleichgewichtsmodell auf das mit dem JPDF-Modell ermittelte Strömungsfeld „aufgesetzt“ wurde. Bei eingefrorener Strömung wurden zunächst nur die Transportgleichungen für den Mischungsbruch, die Mischungsbruchvarianz sowie die Enthalpie gelöst. Bei dieser Vorgehensweise ergab sich eine Temperaturverteilung, die sehr ähnlich der des JPDF-Modells war. Auf diesen Zustand aufbauend wurden alle Transportgleichungen gelöst und es ergaben sich wieder die in Abb. 4.25 dargestellten Temperaturverteilungen des chemischen Gleichgewichts.

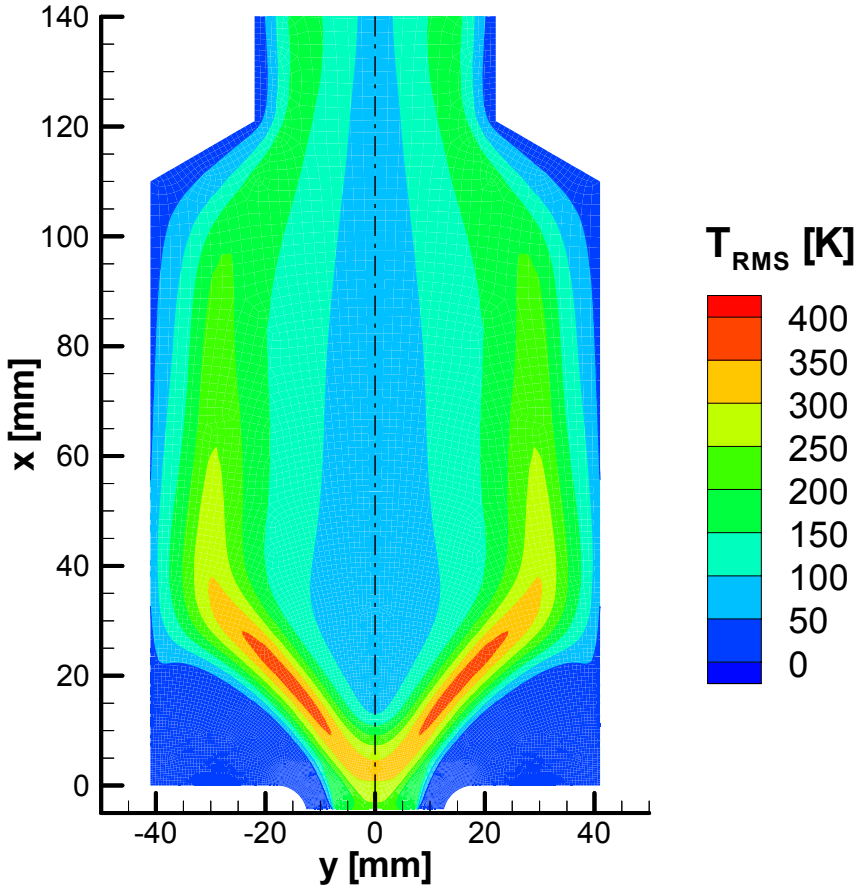


Abb. 4.26: Kontur der Temperatur-RMS-Werte

In Abb. 4.26 ist die Kontur der berechneten RMS-Werte (root mean square) der Temperatur gezeigt. Die größten Fluktuationen mit bis zu 400K treten nahe der Düse im Scherbereich der Einströmung und der inneren Rezirkulationszone auf. Zur Mitte der Brennkammer hin nehmen die Temperaturschwankungen ab, und auch im Bereich der äußeren Rückströmung und in wandnahen Gebieten sind nur geringe Schwankungen zu erkennen. Bei den Temperaturfluktuationen ist aufgrund fehlender Messdaten kein Vergleich zwischen Simulation und Experiment möglich.

4.3 MTU E3E Brennkammer

Als praxisnächste Anwendung der vorliegenden Arbeit wird im folgenden Kapitel die MTU E3E-Modellbrennkammer vorgestellt. Im Vergleich zu den zuvor beschriebenen halbtechnischen Flammen sind Geometrie, Betriebszustände und Lastfälle bei dieser Anwendung sehr nahe an der realen Verbrennung in einer Fluggasturbinenbrennkammer. Die Praxisnähe erschwert durch die damit verbundenen „realen Umgebungsbedingungen“ (hoher Druck, hohe Temperaturen, Vibrationen, Lärm) einerseits die messtechnischen Untersuchungen. Andererseits werden durch Unsicherheiten in den Randbedingungen, die komplexe Geometrie und die hohen Anforderungen an die Strömungs- und Verbrennungsmodelle auch die Berechnungen schwieriger. In verschiedenen Arbeiten wurden bereits vollständige Brennkammern numerisch untersucht [z.B. Correa u. a., 1987; Brehm u. a., 1999; Røkke u.a., 2000; Birkby u. a., 2001; Malecki u. a., 2001], oftmals aber nur isotherm [z.B. Relation u. a., 1998; Hassa u. a., 2000] oder in Hinblick auf bestimmte Phänomene (NO_X, Strahlung,...) [z.B. Brehm u. a., 1997; Martens, 1999]. In der hier vorliegenden Arbeit wird eine chemisch reagierende Brennkammerströmung mit verschiedenen Verbrennungsmodellen und bei unterschiedlichen Lastzuständen untersucht. Weiterhin wird die Anwendbarkeit der in dieser Arbeit entwickelten JPDF-Vorgehensweise an einem praxisnahen Anwendungsfall gezeigt.

4.3.1 Aufbau und Gitter

Die hier untersuchte Brennkammer war Teil eines nationalen Programms zur Förderung neuer Triebwerkstechnologien. Im Rahmen des Projektes Engine 3E (E3E) [MTU, 1999; Zarzalis u. a., 2000] sollte eine konventionelle Flugtriebwerksbrennkammer mit einer 60%-igen NOx-Reduktion gegenüber den Grenzwerten von ICAO’95 [ICAO, 1995] entwickelt werden. Zudem sollten die Emissionswerte der anderen Schadstoffe denen eines modernen Triebwerks entsprechen [Jane’s, 2000]. Hierzu sollten Einzeltechnologien entwickelt und unter realistischen Betriebsbedingungen demonstriert werden. Die E3E-Brennkammer wurde bei der MTU Aero Engines GmbH entwickelt und auf den Triebwerksprüfständen des DLR mit verschiedenen Messtechniken untersucht [Lückerath u. a., 1998; Meier u. a., 1999; Hassa u. a., 2000; Meier u. a., 2000]. Neben den umfangreichen experimentellen Untersuchungen wurden von verschiedenen Seiten numerische Berechnungen der Brennkammer bzw. der Düse durchgeführt [MTU, 1999; Hassa u. a, 2000; Zarzalis u. a., 2000; Kunz u. a., 2001].

Abb. 4.27 zeigt ein Foto der gesamten E3E-Brennkammer. Im Vergleich zum eingebauten Zustand ist die Brennkammer hier rechtwinklig gedreht und liegt auf der

Brennkammeraustrittsebene auf. Die Hauptströmungsrichtung geht daher in dieser Abbildung von oben nach unten.

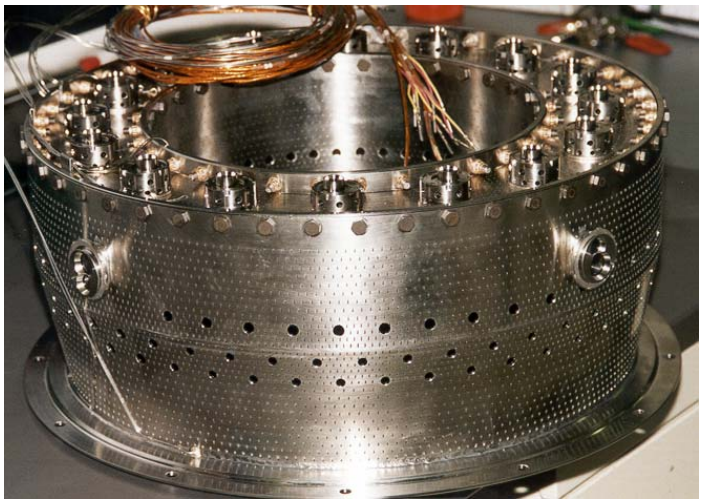


Abb. 4.27: MTU E3E-Brennkammer

Bei der Brennkammer handelt es sich um eine konventionelle Ringbrennkammer [MTU, 1999]. Die Brennstoffzufuhr und -aufbereitung erfolgt über die in der oberen Bildhälfte ersichtlichen Düsen. Der Brennkammerliner ist mit Effusionskühllöchern versehen, in der Mitte des Liners sind drei Reihen von Misch- und Kühlluftöffnungen zu erkennen. Die Brennkammer hat eine Länge von ca. 140mm sowie eine radiale Ausdehnung von r_a-r_i≈65mm. Im Rahmen der experimentellen Untersuchungen am DLR wurde nicht die vollständige Brennkammer, sondern nur ein ebenes Brennkammersegment mit vier Brennstoffdüsen vermessen. Diese Modellbrennkammer hat den Vorteil eines guten optischen Zugangs und ist somit besonders für lasermesstechnische Untersuchungen geeignet. Abb. 4.28 zeigt einen Querschnitt durch das Brennkammersegment.

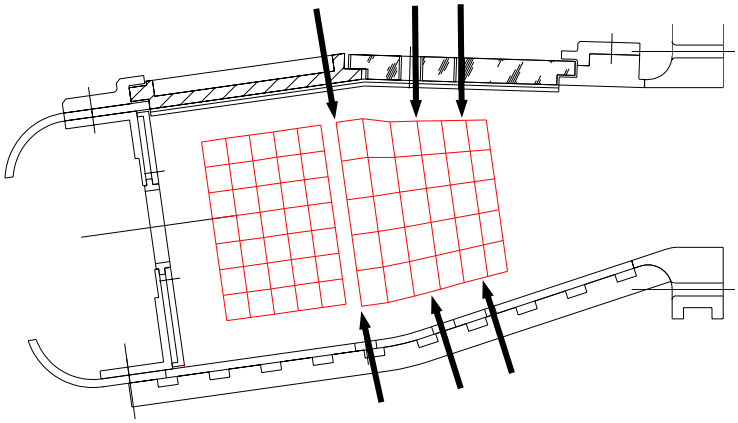


Abb. 4.28: Querschnittszeichnung der E3E-Modellbrennkammer

Die Orte der Misch- und Kühllufteindüsung sind durch Pfeile markiert. Die Seitenwände der Modellbrennkammer bestehen aus filmgekühlten Quarzglasscheiben. Weiterhin kann die obere Brennkammerwand beim Einsatz optischer Messtechniken durch ein Glaspaneel ersetzt werden. Die Brennstoffdüse ist in Abb. 4.28 nicht abgebildet. Sie befindet sich in der Aussparung der prallgekühlten Kopfplatte der Brennkammer.

Die Matrix im zentralen Bereich der Brennkammer zeigt den messtechnisch erfassbaren Bereich, wobei die Schnittpunkte der Matrix die untersuchten Messorte sind. Im vorderen Bereich der Brennkammer, der sogenannten Primärzone, findet die Eindüsung des Brennstoff-Luft-Gemisches, sowie der Großteil der Wärmefreisetzung durch chemische Reaktion statt. Die stromab folgenden Sekundär- und Mischzonen haben die Aufgabe, für einen vollständigen Ausbrand zu sorgen und eine homogene oder an die Kühlung der nachfolgenden Turbine angepasste Temperaturverteilung am Brennkammeraustritt herzustellen. Dies geschieht durch Eindüsung von kühler Mischluft durch Einlässe in der oberen und unteren Brennkammerwand. Die kreisförmigen Mischluftöffnungen sind versetzt angeordnet, um eine optimale Durchmischung zu erreichen. Um realitätsnahe Betriebsbedingungen zu schaffen, war die Brennkammer bei den Messungen in ein Druckgehäuse für Drücke bis p_{max}=20bar eingebaut. Für Details des Prüfstands und des experimentellen Aufbaus wird auf Arbeiten von [Hassa u. a., 2000; Meier u. a., 2000; Zarzalis u. a., 2000] verwiesen. Die Brennkammer wurde mit unterschiedlichen optischen Messtechniken untersucht. Das globale Geschwindigkeitsfeld wurde mittels Laser-Doppler-Anemometrie (LDA) bestimmt [Hassa u. a., 2000]. Die OH-Konzentrationen und die Temperaturverteilung wurde mit OH-LIF ermittelt [Meier u. a., 2000]. Weiterhin wurden mit der CARS-Methode Messungen von Temperatur und Temperaturfluktuationen durchgeführt [Lückerath u. a., 1998]. Auf Besonderheiten der unterschiedlichen Messtechniken wird beim Vergleich von Simulation und Messung in Kapitel 4.3.2 eingegangen.

Bei der rechnerischen Untersuchung wird aufgrund von der Periodizität der Ränder nur eines der vier Segmente der Modellbrennkammer berechnet. Das in der numerischen Simulation verwendete Oberflächennetz der Brennkammer ist in Abb. 4.29 gezeigt. Das Rechennetz ist dreidimensional und besteht aus über 300000 hexaederförmigen Rechenzellen.

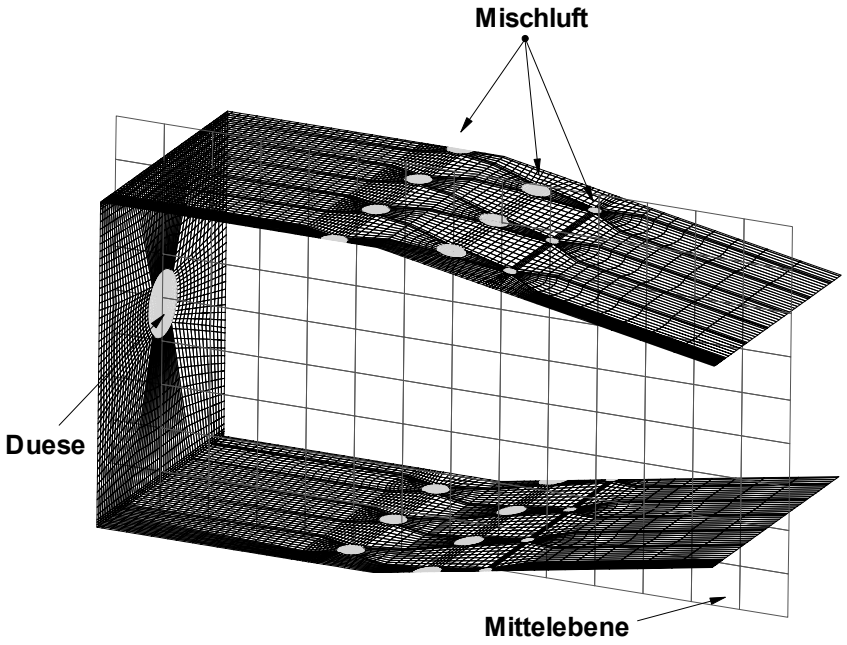


Abb. 4.29: Oberfläche des MTU E3E Rechengitters

In Bereichen hoher Gradienten und insbesondere nahe der Einströmöffnungen ist das Gitter lokal teilweise stark verfeinert. Der Bereich der Düse und die Mischluftzuführungen sind in der Abbildung 4.29 in hellgrauer Farbe dargestellt. Weiterhin ist die in den folgenden Abbildungen verwendete Bezugsebene (=Mittelebene) angedeutet. Diese Ebene verläuft durch den Mittelpunkt der Brennstoffdüse und parallel zu den Seitenwänden der Brennkammer.
Sowohl die Geometrie des Brennkammersegments als auch die Betriebsparameter und die gefahrenen Lastfälle sind praxisnah gewählt und erlauben daher Aussagen über reale Flugtriebwerksbrennkammern. Der Brennkammerdruck wurde im Experiment zwischen p_3=6bar und p_3=15bar variiert, die Einströmtemperaturen der Mischluft lagen bei T_3=700K. Die Brennkammer wurde in drei verschiedenen Lastzuständen betrieben, die verschiedene Flugzustände widerspiegeln. Die hierfür eingestellten Luft-Brennstoffverhältnisse (LBV) in der Brennkammer entsprechen bei einem LBV40 dem Volllastfall, bei LBV60 dem Reisefluglastfall und bei LBV90 dem Leerlauflastfall. Der Wechsel des Lastfalls wurde durch Änderung der Brennstoffmenge bei konstantem Luftmassenstrom vorgenommen.
Bei der Berechnung der Brennkammer wurden einige Vereinfachungen und Annahmen getroffen, durch die Experiment und Simulation voneinander abweichen. So wurde in den Rechnungen von einem gasförmigen Brennstoff ausgegangen, während bei den

Experimenten flüssiger Brennstoff (Kerosin) eingesetzt wurde. Diese Vereinfachung wurde aufgrund des hohen zusätzlichen Rechenaufwandes einer Mehrphasenrechnung getroffen. Die Brennstoffaufbereitung und strömungsmechanische Vorgänge vor und in der Düse wurden nicht berücksichtigt. Die Rechnung beginnt erst mit dem Eintritt des Brennstoff-Luft-Gemisches in die Brennkammer. Die Effusionskühlung der oberen und unteren Wand im vorderen Bereich der Brennkammer konnte aufgrund von Beschränkungen in der Auflösung des Rechengitters in der Rechnung nicht direkt wiedergegeben werden. Anstelle der vielen kleinen Kühlluftöffnungen wurde vereinfachend eine dem Gesamtmassenstrom äquivalente Einströmung über die gesamte Fläche angenommen. Da Vorgänge in unmittelbarer Wandnähe im Rahmen dieser Arbeit nicht näher untersucht werden ist diese Vereinfachung gerechtfertigt. In einer exemplarischen Rechnung wurde die Strahlung mittels der Diskreten Transfer Methode (DTRM) berücksichtigt. Da sich ihr Einfluss auf das Temperaturfeld als relativ gering herausstellte [Kunz u. a., 2001], werden Energieverluste durch Strahlung in den nachfolgend beschriebenen Rechnungen vernachlässigt.

Den Randbedingungen der Rechnungen liegen experimentelle Messergebnisse zu Grunde. LDA-Messungen 1mm stromab der Brennstoffdüse liefern die Profile aller drei Geschwindigkeitskomponenten an dem entsprechenden Brennkammereintritt. Sie werden in der Rechnung als Grundlage der Einströmrandbedingungen genutzt. Diese Vorgehensweise ist gerechtfertigt, da hier die Geschwindigkeitsverteilung am Düsenaustritt nur unwesentlich von dem weiter stromab liegenden Strömungsfeld beeinflusst wird [Schütz u. a., 2000; Noll u. a., 2001].

Die Einströmrandbedingungen der Mischluftstrahlen ergeben sich aus MTU-internen abschätzenden Druckverlustberechnungen [MTU, 1999]. Hierauf aufbauend wird ein jeweils zeitlich konstanter Luftmassenstrom und ein blockförmiges Eintrittsprofil der Mischluftströme angenommen.

Die Seitenflächen der Brennkammer sind in der Simulation mit translatorisch periodischen Randbedingungen belegt. Die Brennkammerwände haben eine angenommene Temperatur von T_{Wand}=800K. Dieser Zahlenwert hat eine realistische Größenordnung. Eine genaue Kenntnis der Wandtemperatur ist nicht notwendig, da die Interaktion von Gasphase und Brennkammerwand im Rahmen dieser Arbeit nicht näher untersucht wird.

Um den turbulenten Verbrennungsvorgang zu charakterisieren, zeigt Abb. 4.30 die Einordnung der Verbrennungsbedingungen in der E3E Brennkammer in das Borghi-Diagramm.

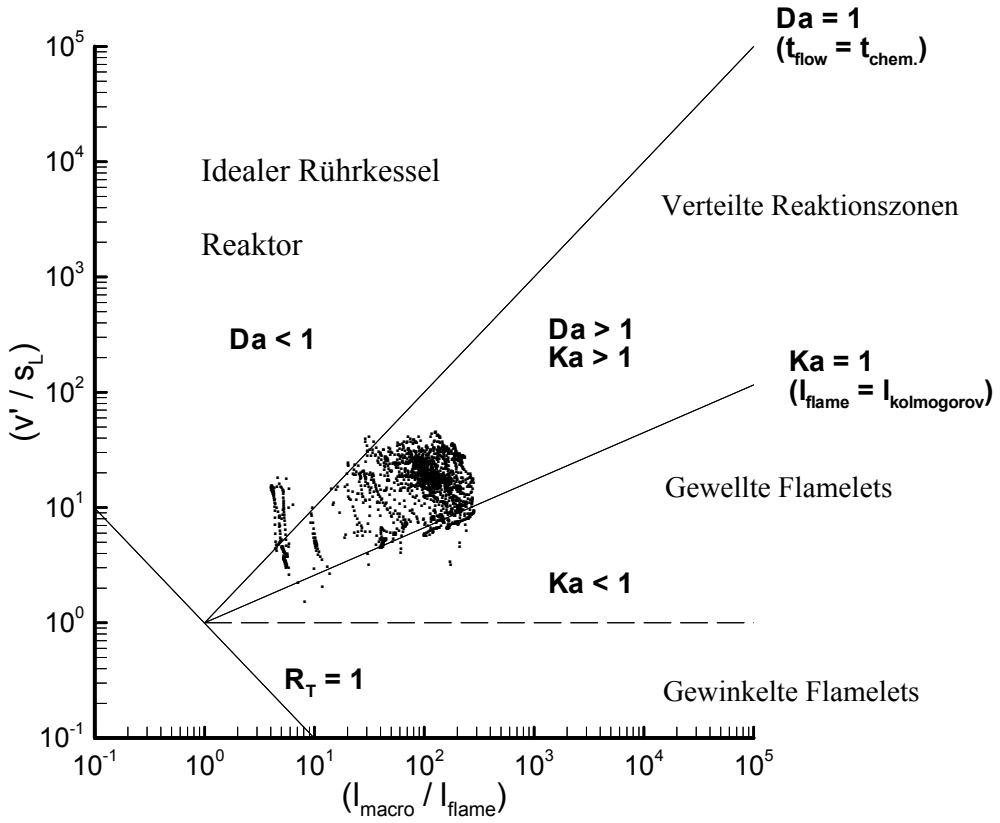


Abb. 4.30: E3E Brennkammer im Borghi-Diagramm [Borghi, 1988]

Grundlage der Zuordnung sind Simulationsrechnungen mit dem JPDF- und dem Gleichgewichtsmodell. Zu beachten ist, dass in dieser Darstellung nur die Rechenpunkte in der Mittelebene dargestellt sind. Jeder Punkt in der Abbildung entspricht einem Rechenpunkt. Die Punkte im Bereich 5-20 oberhalb der dimensionslosen Längenskala haben keine physikalische Bedeutung, da sie kalte, wandnahe Bereiche repräsentieren. Die Verbrennungszone wird durch die Punkte im Bereich von 100-400 auf der Längenskala und 10-50 auf der Geschwindigkeitsskala erfasst. Die Flamme befindet somit im Gebiet der verteilten, räumlich gestörten, verbreiterten Flammenfronten. Wie bereits in Kapitel 2.2 erwähnt, soll die Zuordnung einzig einen Anhaltspunkt für eine grobe Charakterisierung der vorliegenden Verbrennung liefern und eine Aussage über die Gültigkeit der Voraussetzungen von Teilmodellen ermöglichen.

4.3.2 Vergleich Experiment – Simulation

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Geschwindigkeits- und Temperaturmessungen mit Rechenergebnissen verglichen. Weiterhin werden Simulationsrechnungen mit unterschiedlichen Verbrennungsmodellen, Lastzuständen und Brennstoffen gegenübergestellt und diskutiert.

Die Geschwindigkeitsmessungen wurden am Institut für Antriebstechnik des DLR in Köln mit LDA durchgeführt. Details über den experimentellen Aufbau und die Vorgehensweise bei den Messungen sind bei [Hassa u. a., 2000] zu finden. Aus Gründen der eingeschränkten optischen Zugänglichkeit der Brennkammer konnte das Geschwindigkeitsfeld nur in dem in Abb. 4.28 dargestellten Gebiet ermittelt werden. In Abb. 4.31 ist die gemessene Axialgeschwindigkeit (x-Richtung) in der Ebene durch die Düsenmitte bei LBV90 dargestellt. Zur Orientierung ist auch die äußere Berandung der Brennkammerschnittebene gezeigt.

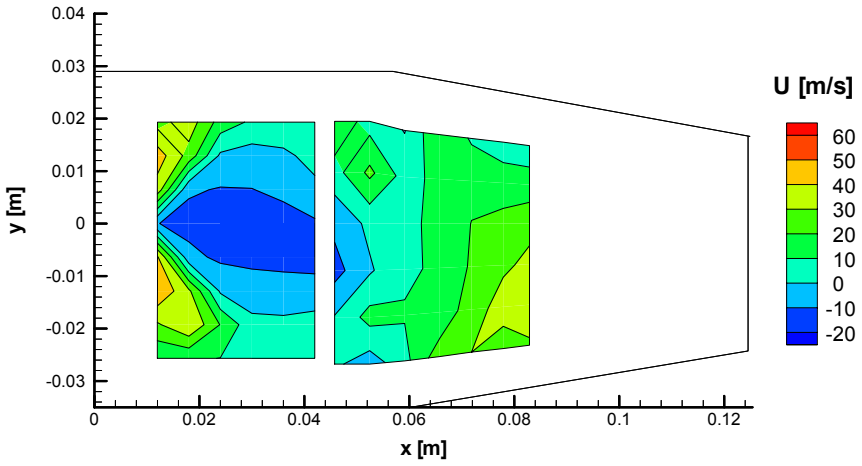


Abb. 4.31: Axialgeschwindigkeit: Messung

Am linken Rand des Messgebietes ist die kegelförmige Brennstoffeindüsung ansatzweise zu erkennen. Stromab folgt in der Mitte der Brennkammer eine Zone, in der Rückströmung herrscht und die Axialgeschwindigkeit bis zu -20m/s beträgt. Dieses Rückströmgebiet, das aufgrund der Verdrallung der einströmenden Luft entsteht, ist in der dargestellten xy-Ebene nahezu symmetrisch zur Achse durch die Düsenmitte (y=0) und reicht in axialer Richtung bis zum Eintritt der ersten Reihe von Luftstrahlen. Am oberen und unteren Rand des rechten Messgebietes sind die Einflüsse der Mischluftstrahlen zu erkennen.

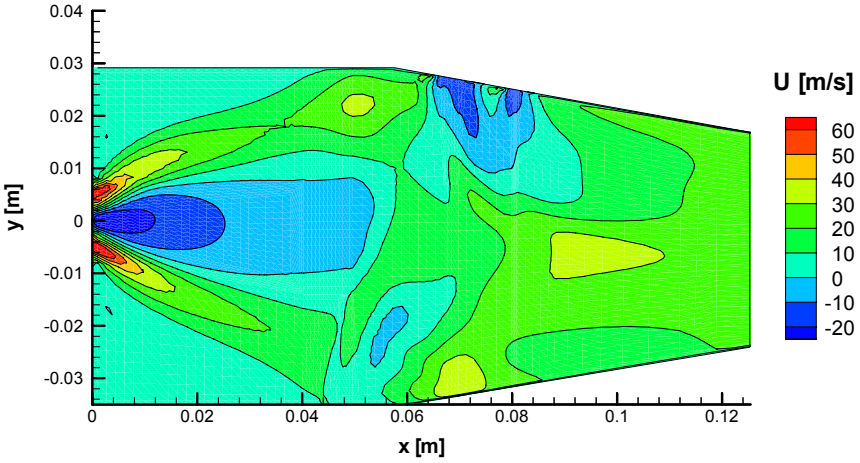


Abb. 4.32: Axialgeschwindigkeit: Rechnung

Bei den Berechnungen, die in den Abb. 4.32-4.37 gezeigt sind, wurde ein modifiziertes k-ε-Turbulenzmodell sowie das PDF-Gleichgewichtschemie Verbrennungsmodell genutzt. Die berechnete Geschwindigkeitsverteilung ist in Abb. 4.32 dargestellt. Wesentliche Merkmale des Strömungsbildes sind auch hier das kegelförmige Brennstoff-Luft-Spray, die zentrale Rezirkulationszone, der Einfluss der Mischluftzuführungen und die Beschleunigung der Strömung in Richtung des Brennkammeraustritts. Beim Vergleich mit der Messung ist zu erkennen, dass der Ausbreitungswinkel der eintretenden Luft in der Simulation kleiner ist. Der Grund hierfür liegt vermutlich in der Vereinfachung der Rechnung auf eine einphasige Strömung. Die Trägheit des Brennstoffsprays, d.h. der Kerosintropfen, wird in der Gasphasenrechnung nicht erfasst. Selbst bei starker Erhöhung (+30-50%) der Radialgeschwindigkeitskomponente der Düseneinströmung weitete sich der Öffnungswinkel des Sprays nur geringförmig auf. Um in diesem Punkt eine bessere Übereinstimmung zwischen Experiment und Simulation zu erreichen, müsste wahrscheinlich eine 2-Phasenrechnung durchgeführt werden. Hierauf wurde in dieser Arbeit aufgrund der dann zusätzlich notwendigen Modellannahmen für Sprayausbreitung und des damit verbundenen Mehraufwandes verzichtet. Der Einfluss des geringeren Spraywinkels zeigt sich auch in der stromab folgenden Rückströmzone. Sie ist in der Simulation etwas näher an der Brennstoffdüse und besitzt eine kleinere Ausdehnung in radialer Richtung. Bei den Geschwindigkeitsbeträgen und -gradienten besteht zwischen Messung und Simulation eine gute Übereinstimmung. In der Rechnung ist ebenfalls der Einfluss der Mischluftstrahlen und die Beschleunigung der Strömung durch verbrennungsbedingte Volumenexpansion zu erkennen.

In den Abb. 4.33 und 4.34 sind die gemessenen bzw. errechneten radialen Geschwindigkeitskomponenten (y-Richtung) gezeigt.

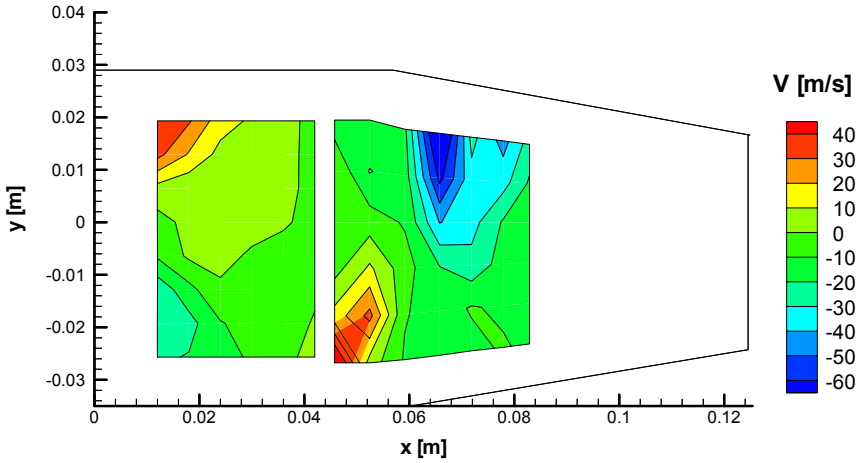


Abb. 4.33: Radialgeschwindigkeit: Messung

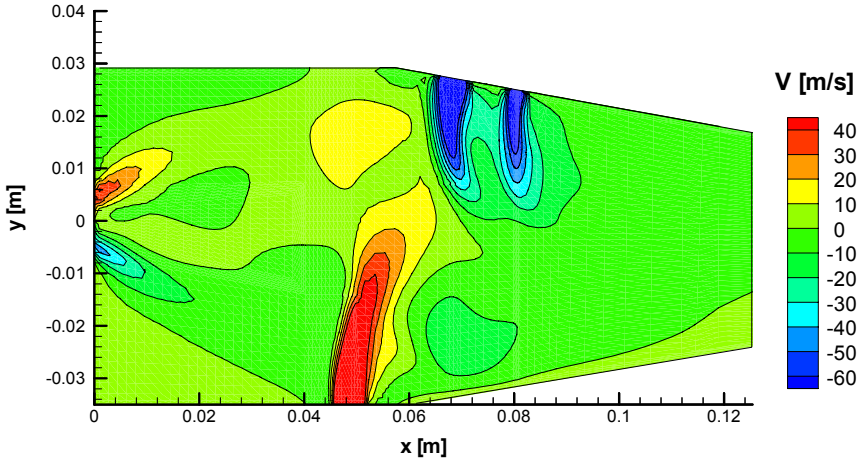


Abb. 4.34: Radialgeschwindigkeit: Rechnung

Am linken Rand des Messbereiches ist wiederum der Einfluss der Brennstoffeindüsung zu erkennen. Wie bei der Axialgeschwindigkeit, zeigt sich auch hier in der Rechnung der etwas zu kleine Spraywinkel. Bei den Geschwindigkeitsbeträgen stimmen Simulation und Rechnung gut überein. Unterschiede sind bei der Eindringtiefe der Mischluftstrahlen zu erkennen. In der Rechnung reicht der erste untere Mischluftstrahl etwas weiter in die Brennkammer als in der Messung. Die Krümmung der Strahlen in Richtung der Strömung stimmt hingegen überein. Die Eindringtiefe des ersten oberen Mischluftstrahls wird in der Simulation leicht unterschätzt. Während der Strahl in der

Messung bis in die untere Hälfte der Brennkammer reicht (y<0mm), kann man ein derart tiefes Eindringen in der Simulation nicht beobachten. Es ist möglich, dass diese Unterschiede mit geringfügigen Ungenauigkeiten in den Randbedingungen zu erklären oder mit der Wärmefreisetzung der chemischen Reaktion verbunden sind. Bei vorangegangen Untersuchungen des isothermen Strömungsfalls [Noll u. a., 2002] wurde eine etwas bessere Übereinstimmung der Eindringtiefen erreicht.

Die Temperaturverteilung in der Brennkammer wurde mit der mobilen CARS-Anlage des Instituts für Verbrennungstechnik, DLR Stuttgart, ermittelt [Lückerath u. a., 1998]. Die CARS-Lasermesstechnik erlaubt eine punktweise Bestimmung der Temperatur. Messungen wurden an 90 Messpunkten in der Mittelebene vorgenommen. Typischerweise wurden pro Messpunkt 1200 Einzelmessungen durchgeführt. Neben der momentanen Temperatur können somit der statistische Mittelwert, Fluktuationen sowie räumliche Gradienten ermittelt werden. Die Genauigkeit der Methode beträgt etwa ±60K in der Mischzone und ±100K in der Primärzone [Lückerath, 2001]. Die geringere Genauigkeit in der Primärzone leitet sich unter anderem aus höheren Dichtefluktuationen und den damit verbundenen geringeren Signalstärken ab. Die räumliche Auflösung der CARS-Messungen beträgt unter isothermen Idealbedingungen etwa 5mm in der Länge und etwa 0.3mm in radialer Richtung. In diesem Volumenelement werden 95% des Messsignals produziert [Lückerath u. a., 1998]. Unter realen Brennkammerbedingungen ist die räumliche Auflösung der Messtechnik allerdings wesentlich schlechter. Dieser Aspekt muss beim Vergleich von Messung und Simulation berücksichtigt werden, da das Rechengitter im Bereich der Mittelebene eine laterale Auflösung von nur etwa einem Millimeter besitzt. Da das CARS-Signal zudem von dem Quadrat der Dichte abhängt, muss die räumliche Mittelung der Rechenergebnisse dichtegewichtet vorgenommen werden, bevor Experiment und Simulation verglichen werden können. Weitergehende Informationen über die Messungen finden sich bei [Lückerath u. a., 1998].

Abb. 4.35 zeigt die gemessene Temperaturverteilung in der Mittelebene der Düse.

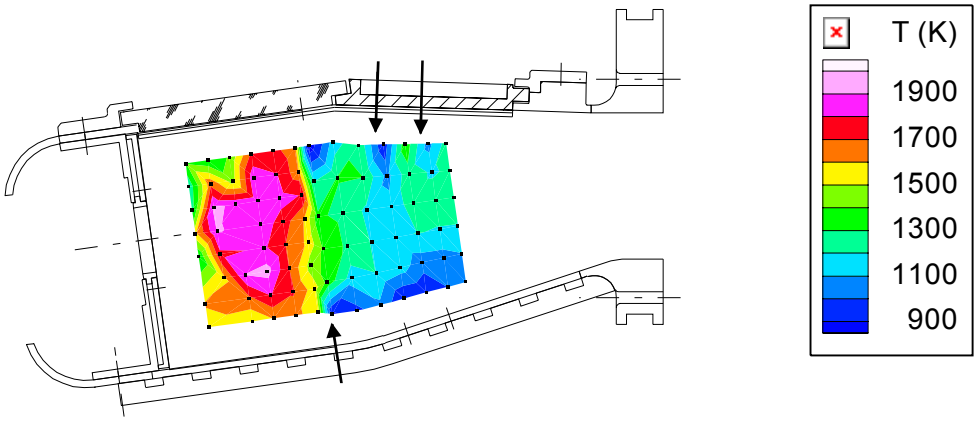


Abb. 4.35: Gemessene Temperaturverteilung in der Mittelebene

Die schwarzen Punkte markieren die Positionen, an denen gemessen wurde. Die Messung wurde bei einem Druck von p=6bar und einem Luft-Brennstoff-Verhältnis von 90 (=Leerlauf) durchgeführt. Die größte Wärmefreisetzung findet im zentralen Bereich der Primärzone statt. Hier liegt eine kompakte Hochtemperaturzone mit Maximaltemperaturen von über 2000K vor. Am Rand des Heißgebietes sind hohe Temperaturgradienten zu erkennen. Im Bereich der Sekundärzone ist der Einfluss der Mischluft deutlich an den niedrigen Temperaturen im Einströmbereich zu erkennen. Im oberen Bereich, direkt hinter dem Heißgebiet, ist eine kühle Zone zu erkennen, obwohl in der Mittelebene an dieser Stelle keine Mischlufteindüsung (durch Pfeile angedeutet) stattfindet. Da die zugehörige Eindüsung ca. 10mm von der Messebene entfernt liegt, ist dies ein Indiz dafür, dass das Messvolumen durch Schwankungen eine nicht unerhebliche laterale Ausdehnung besitzt.

Abb. 4.36 zeigt die berechnete Temperaturverteilung in der Mittelebene. Wie bereits erwähnt, hat das Rechengitter in diesem Bereich eine laterale Ausdehnung von ca. 1mm. Die Lage der Hochtemperaturzone stimmt mit den Messergebnissen überein, allerdings reicht bei der Simulation das Heißgebiet im hinteren oberen Bereich bis nahezu an die Wand. Wie eben erläutert, wurde bei der Messung in diesem Bereich bereits der Einfluss der an dieser Stelle seitlich versetzten Mischlufteinblasung gefunden.

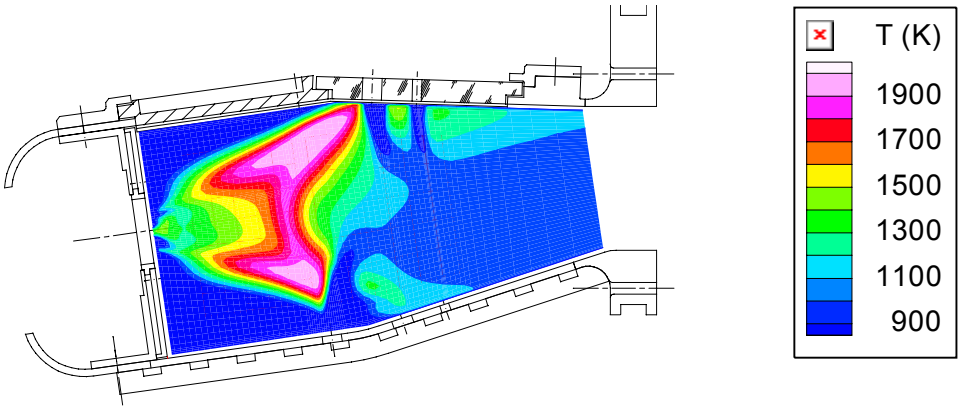


Abb. 4.36: Berechnete Temperaturverteilung in der Mittelebene

Die Erklärung dieser Diskrepanz liegt in der schon angesprochenen unterschiedlichen lateralen Auflösung von Messung und Simulation. Um diesen Einfluss zu berücksichtigen und damit einen Vergleich der Ergebnisse zu ermöglichen, werden die Rechenergebnisse mit dem Quadrat der Dichte gewichtet (vgl. Gl. 4.1) und über die Tiefe gemittelt.

$$T = \frac{\sum T_i \rho_i^{\,2}}{\sum \rho_i^{\,2}} \qquad (4.1)$$

Welche Größen die CARS-Messsignale weiterhin beeinflussen wird beispielsweise bei [Lückerath u. a. 1998] beschrieben. Detailliertere Informationen über die Vorgehensweise bei der Mittelung sind bei [Kunz u. a., 2001] zu finden.

Abb. 4.37 zeigt die Simulationsergebnisse nach einer dichtegewichteten Mittelung über einen lateralen Abstand von ±7.5mm. Der Abstand ergibt sich aus Annahmen über die Größe des Messvolumens und der Geometrie der Brennkammer (Abstand der Mischluftstrahlen).

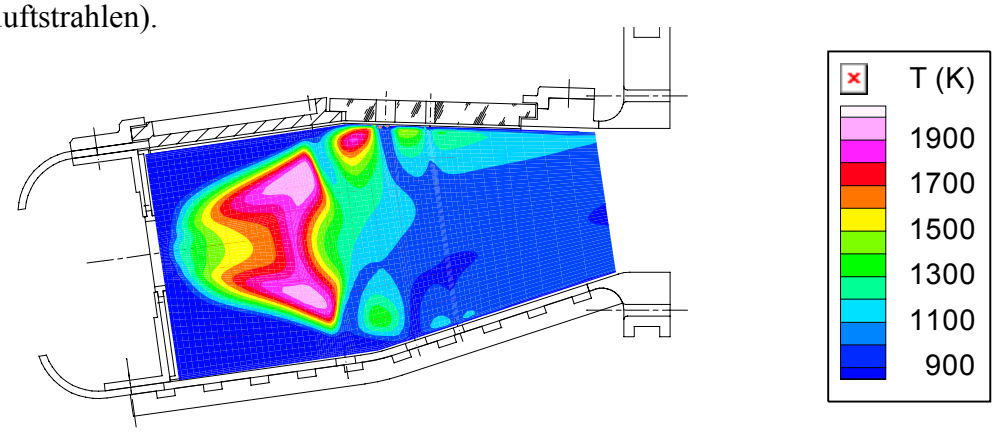


Abb. 4.37: Gewichtete berechnete Temperaturverteilung

Durch die Tiefenmittelung ist nun auch in der Simulation der Einfluss der ersten oberen Mischluftreihe zu erkennen. Das in den Rechenergebnissen erkennbare wandnahe Heißgebiet hinter der Mischluftreihe befindet sich außerhalb des messtechnisch zugänglichen Bereiches. In experimentellen Untersuchungen der Brennkammerwände war in diesem Bereich eine hohe thermische Belastung zu erkennen. Dies bestätigt die Simulation.

Abb. 4.38 zeigt die gemessene Standardabweichung der Temperatur (T_{RMS}). Je nach Messort liegen dem RMS-Wert 700-1200 Einzelmessungen zu Grunde. Orte, an denen eine geringere Anzahl von verwertbaren Messungen vorliegt, wurden in der Darstellung nicht berücksichtigt.

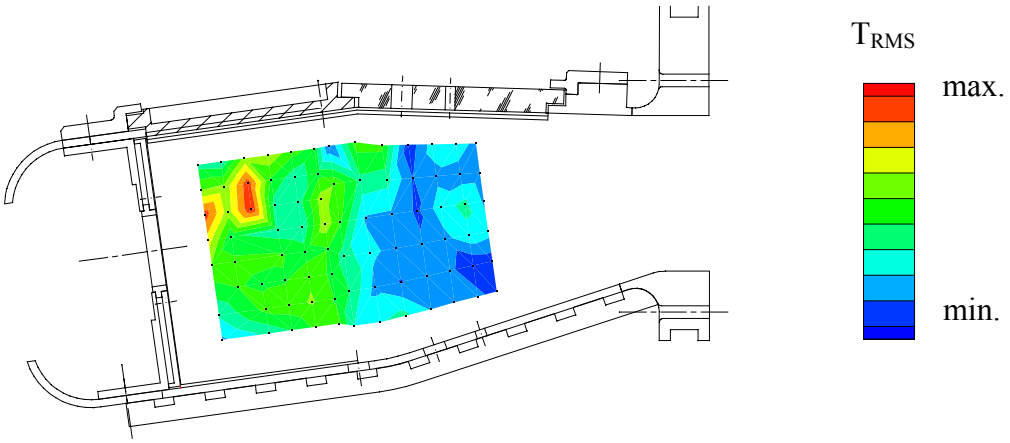


Abb. 4.38: Gemessene Standardabweichung der Temperatur

Im Bereich der oberen Mischluftzufuhr sind die Schwankungen relativ gering und bewegen sich in einer Größenordnung von etwa 100K. In der Primärzone sind die Schwankungen wesentlich größer. Auffallend ist, dass die Schwankungen im Zentrum der Verbrennungszone geringere Werte haben als an den Rändern. Der Grund hierfür ist, dass sich in den Randgebieten heiße Abgase und Kühlluft mischen und es dadurch zu einem häufigen Wechsel zwischen heißen und kalten Zuständen kommt. Gleiches gilt für die Schergebiete zwischen der Verbrennungszone und den Mischluftstrahlen. Die Temperaturschwankungen nehmen erwartungsgemäß in Richtung des Brennkammeraustritts ab. Das Abgas-Luft-Gemisch homogenisiert sich somit stromab.

Die größten Temperaturschwankungen werden im vorderen Bereich der Primärzone gemessen. Dabei sind die Schwankungen im oberen Bereich der Primärzone wesentlich größer als im unteren Teil. Hierbei muss allerdings berücksichtigt werden, dass im unteren Bereich kaum verwertbare Messpunkte liegen und die Schwankungen möglicherweise nicht korrekt erfasst wurden. Bei der Darstellung der

Temperaturschwankungen muss zudem beachtet werden, dass die Messungen punktförmig durchgeführt werden. Aufgrund des groben Rasters werden hohe Gradienten der Schwankungen nicht aufgelöst. Der Einfluss der räumlichen Auflösung ist auch bei den Temperaturschwankungen sichtbar. Obwohl Abb. 4.38 die Mittelebene zeigt, ist der Einfluss der ersten oberen Mischluftzufuhr zu erkennen. Durch die geringe Auflösung ist es problematisch, quantitative Aussagen über die Fluktuationen zu treffen. So sind beispielsweise in Mischgebieten hohe Fluktuationen der Temperatur, d.h. hohe T_{RMS}–Werte, zu erwarten. In den Temperaturmessungen werden allerdings räumlich gemittelte Werte bestimmt. Die einzelnen Messungen sind „verschmiert“ und geben einen mittleren Temperaturwert im Messvolumen an. Bei der statistischen Auswertung dieser Temperaturmessungen wird daher eigentlich nicht die Fluktuation der Temperatur, sondern vielmehr die Fluktuation der Mittelwerte der Temperatur beschrieben. Die gemessene Varianz der Temperatur ist daher geringer als die real auftretende Varianz. Diese Überlegung wird von der Form der Messwertverteilungen bestätigt. Eine Auswertung der Messergebnisse in Form von Temperaturhistogrammen ergab, dass die Messwerte auch in Gebieten mit hohen Fluktuationen ansatzweise normal-verteilt sind. Ein beispielsweise bimodales Verhalten der Temperatur kann mit der Messtechnik nicht erfasst werden. Da die Varianzmessungen aufgrund der räumlichen Mittelung keine quantitativen Aussagen erlauben, werden die T_{RMS}–Werte nur qualitativ aufgetragen.

Um dennoch einen Vergleich mit der Rechnung zu ermöglichen, sind in Abb. 4.39 die errechneten T_{RMS}–Werte in verschiedenen Schnittebenen dargestellt. Eine dichtegewichtete räumliche Mittelung (vgl. Temperatur oben) ist bei den Schwankungswerten nicht sinnvoll. In der Simulation zeigt sich, dass die größten Fluktuationen im Bereich des Brennstoff-Luft-Sprays liegen. Am Rand des zentralen Hochtemperaturgebietes und in den Bereichen zwischen heißen Gebieten und den Mischluftstrahlen sind ebenfalls hohe T_{RMS}–Werte zu finden. Wie im Experiment sind auch bei der Rechnung die Schwankungen im Zentrum der Primärzone geringer und nehmen in Richtung Turbineneintritt hin ab. Die Maximalwerte liegen deutlich über den Messwerten (vgl. Abb. 4.38). Wie bereits erwähnt, liegt der Grund aller Wahrscheinlichkeit nach in der geringen räumlichen Auflösung und damit dem „Verschmieren“ der Messwerte.

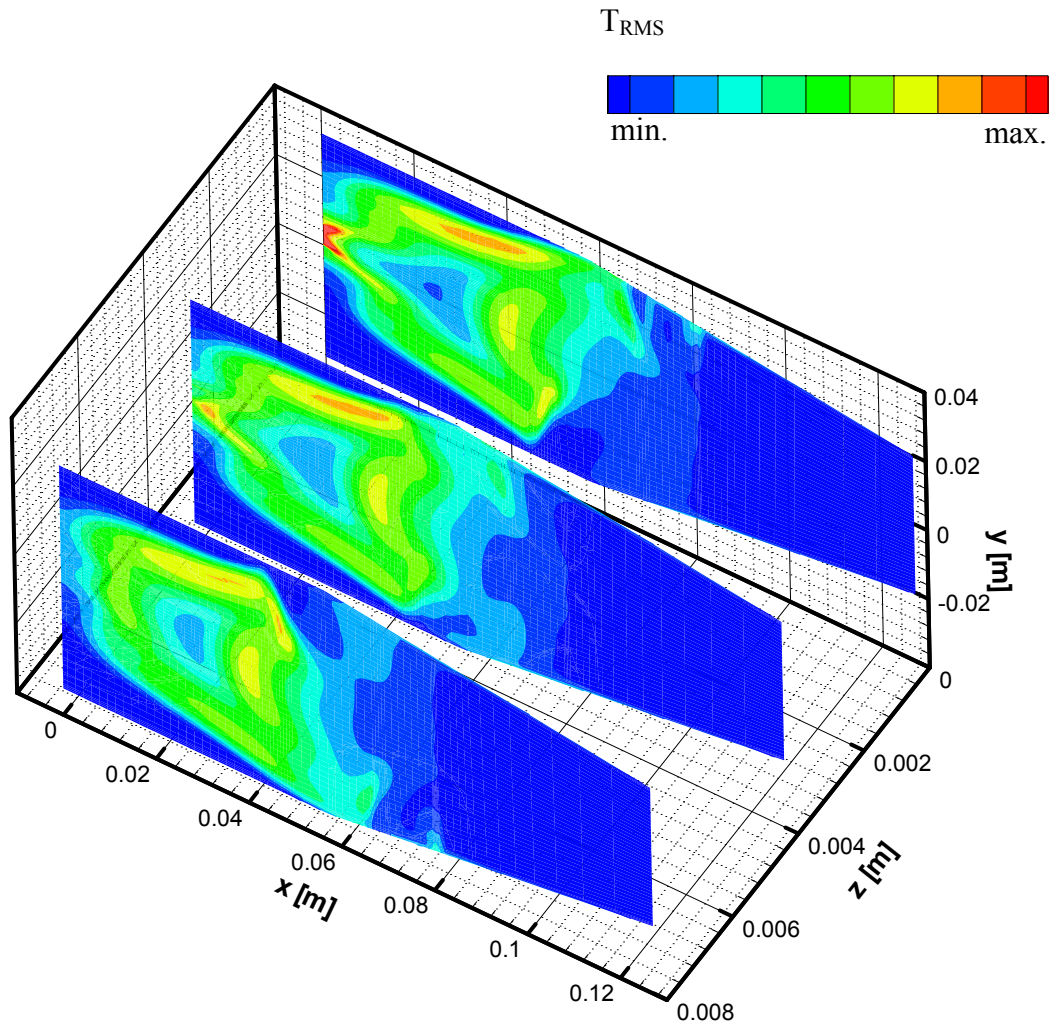


Abb. 4.39: Errechnete Standardabweichung der Temperatur in drei Ebenen Mittelebene (oben), Ebene 4mm (Mitte), Ebene 8mm (unten)

Im Folgenden wird der Einfluss verschiedener Submodelle für Turbulenz- und Verbrennung auf die Rechnung betrachtet. Die Simulationsergebnisse werden untereinander verglichen. Da kein direkter Vergleich mit den Messergebnissen vorgenommen wird, zeigen die Abbildungen jeweils ungewichtete Verteilungen in der Mittelebene.

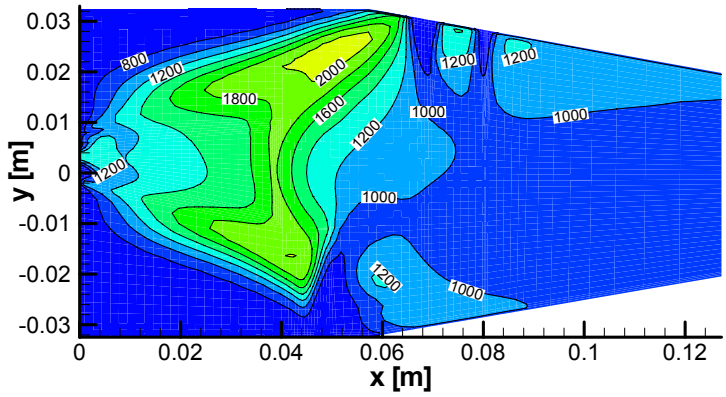


Abb. 4.40: Temperaturverteilung [K], LBV90, Gleichgewicht-Verbrennungsmodell

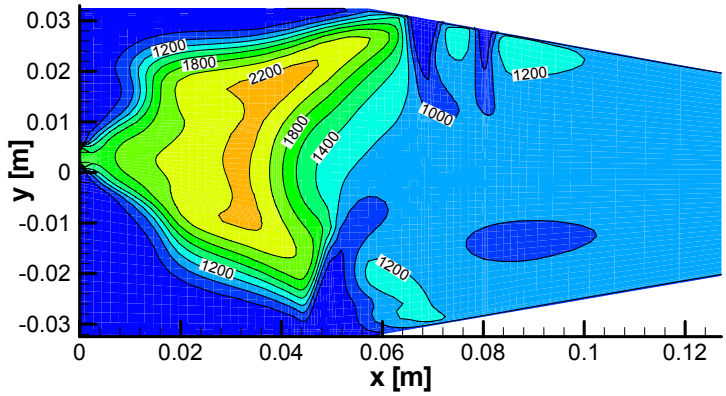


Abb. 4.41: Temperaturverteilung [K], LBV90, JPDF-Verbrennungsmodell

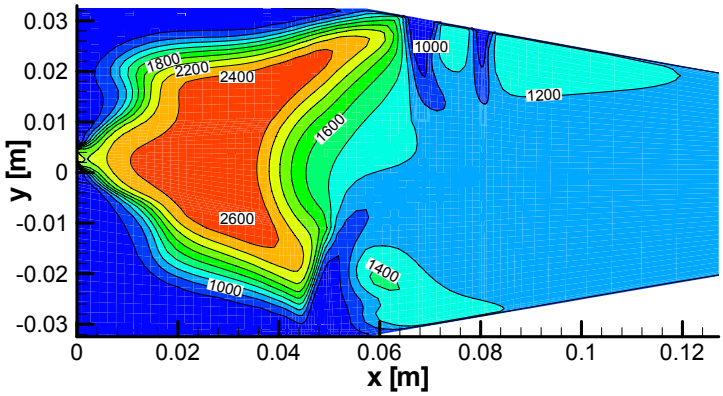


Abb. 4.42: Temperaturverteilung, LBV90, EDC-Verbrennungsmodell

Die Abb. 4.40-4.42 zeigen Rechenergebnisse für den LBV90 Lastfall. Die Turbulenz wird in allen Fällen mit einem modifizierten k-ε-Modell berechnet [Choudhury, 1993]. Die Rechnungen unterscheiden sich jeweils durch das eingesetzte Verbrennungsmodell. In allen drei Rechnungen wird der kerosinähnliche Brennstoff $C_{12}H_{23}$ verwendet. In Abb. 4.40 wird mit dem chemischen Gleichgewichtsmodell, in Abb. 4.41 mit dem JPDF-Modell (1-Schritt-Reaktion) und in Abb. 4.42 mit dem EDC-Modell gerechnet.

Während die Maximaltemperatur beim Gleichgewichtsmodell bei 2090K liegt, so treten beim JPDF-Modell Temperaturen von 2260K und beim EDC-Modell sogar Werte bis 2600K auf. Die hohen Temperaturwerte bei der Nutzung des EDC-Modells sind konsistent mit vorangegangen Untersuchungen [Kunz u. a., 2001], bei denen ebenfalls eine überhöhte Wärmefreisetzung beim EDC-Modell beobachtet wurde. Auch die maximalen Temperaturen bei der Nutzung des JPDF-Modells liegen ca. 170K über den Werten des chemischen Gleichgewichts und der Messung. Grund hierfür ist der verwendete vereinfachte Globalmechanismus (vgl. Anhang B). Die chemische Reaktion von Brennstoff mit Luft wird dabei mit nur einer Reaktionsgleichung und unter Verwendung eines Modellkraftstoffs ($C_{12}H_{23}$) beschrieben. Die Reaktionsrate dieser Globalreaktion basieret auf empirischen Werten experimenteller Untersuchungen. Die chemische Reaktion wird damit stark vereinfacht und daher möglicherweise auch fehlerbehaftet berücksichtigt.

In der räumlichen Lage und Ausdehnung der Verbrennungszone stimmen die Ergebnisse der unterschiedlichen Modelle hingegen gut überein. In allen Rechnungen liegt ein mehr oder minder zerklüftetes zentrales Heißgebiet vor. Die hohen Gradienten an den Rändern der heißen Zone werden von allen Modellen gut wiedergegeben. Auch werden bei allen Modellen die heißen Regionen zwischen den oberen Mischluftstrahlen erfasst. Die Temperaturen am Brennkammeraustritt liegen in allen Fällen im Bereich von 1100K.

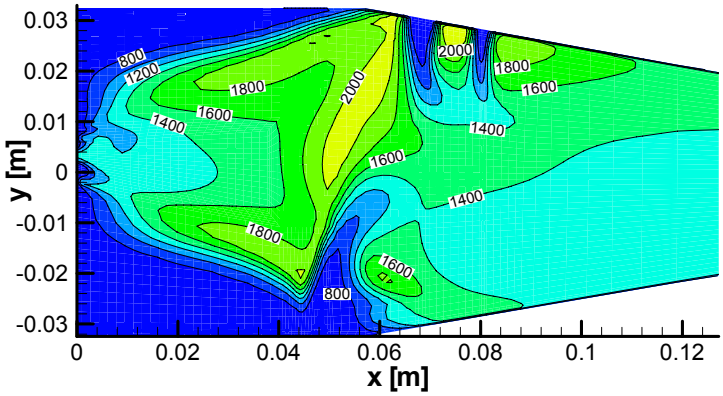


Abb. 4.43: Temperaturverteilung [K], LBV90, Heptan, Gleichgewicht-Verbrennungsmodell

Der Einfluss des in der Rechnung verwendeten Brennstoffs wird durch den Vergleich von Abb. 4.40 und Abb. 4.43 deutlich. In der zu Abb. 4.40 gehörenden Rechnung wurde der „Modell-Brennstoff“ $C_{12}H_{23}$ verwendet. Kerosin ist eine komplexe Mischung verschiedener Petroleumkohlenwasserstoffe, deren genaue Zusammensetzung je nach Raffinade und Umgebungseinflüssen stark variieren kann [Guéret, 1989; Kunz, 1998; Rachner, 1998]. Bei dem fiktiven Brennstoff $C_{12}H_{23}$ stimmt das Kohlenstoff-Wasserstoff-Verhältnis mit dem von „typischem“ Kerosin überein. In der zu Abb. 4.43 gehörenden Rechnung wurde anstelle von Kerosin der Brennstoff Heptan (C_7H_{16}) benutzt. Heptan besitzt eine ähnliche Dichte wie Kerosin, der spezifische Brennwert hat allerdings einen geringfügig höheren Wert (vgl. Tab 4.1). Die geringfügig höhere Wärmefreisetzung von Heptan zeigt sich darin, dass die Maximaltemperaturen in Abb. 4.43 höher liegen als in Abb. 4.40.

	Dichte [kg/m3]	Unterer Heizwert [MJ/kg]	Laminare Flammengeschw. Φ=1, p=1bar, T_{in}=473 K [m/s]	Adiabatische Flammentemp. Φ=1, p=1bar,T_{in}=469 K [K]
Kerosin (typ.)	783	43.2	0.90	2265
n-Heptan	771	44.7	0.95	2405

Tab. 4.1: Stoffeigenschaften von Kerosin und n-Heptan

Heptan wurde in einigen Rechnungen anstelle von Kerosin verwendet, da für die reaktionskinetischen Werte dieses Brennstoffs umfangreichere Untersuchungen vorliegen [Ciezki u. a., 1993; Pfahl u. a., 1996] und die Erstellung von Flamelet-Tabellen möglich ist [Barths u. a., 2000].

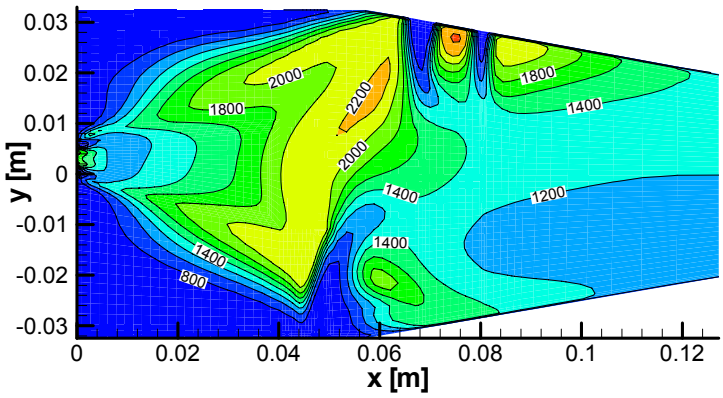


Abb. 4.44: Temperaturverteilung [K], LBV40, Heptan, Gleichgewicht-Verbrennungsmodell

In Abb. 4.44 ist die Temperaturverteilung im Vollastfall (LBV40) dargestellt. In der Rechnung wird Heptan als Brennstoff verwendet und chemisches Gleichgewicht angenommen. Im Vergleich zum mageren Fall (Abb. 4.43) hat das zentrale Heißgebiet hier eine größere Ausdehnung, die Maximaltemperaturen liegen etwa 200K höher und auch die mittlere Abgastemperatur hat einen etwa 300K höheren Wert. Weiterhin ist zu erkennen, dass das wandnahe Heißgebiet im Bereich der oberen Mischlufteinlässe eine größere Ausdehnung hat und auch hier höhere Temperaturen vorliegen als bei LBV90.

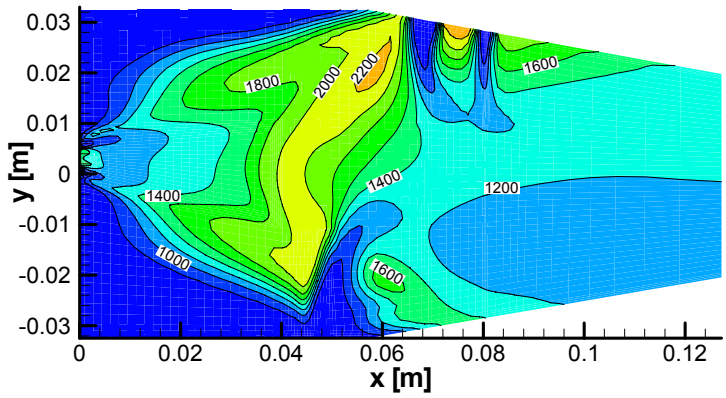


Abb. 4.45: Temperaturverteilung [K], Heptan, LBV40, Flamelet-Verbrennungsmodell

In Abb. 4.45 wird ebenfalls der LBV40 Lastfall mit Heptan als Brennstoff betrachtet. Die Verbrennung wird mit dem Flamelet-Modell berechnet. Verglichen mit der Gleichgewichtsrechnung (Abb. 4.44) liegen die Maximaltemperaturen hier geringfügig tiefer. Auch die Ausdehnung des zentralen Heißgebietes ist kleiner. Diese Beobachtungen entsprechen den Erwartungen, da sich in der Temperaturabnahme der Einfluss der skalaren Dissipationsrate in den Flamelet-Tabellen zeigt. Je größer die Streckung der Flamme, desto weiter weichen die Temperaturen von denen ab, die man bei der Gleichgewichtsrechnung erhält.

Beim Vergleich der Rechenzeiten der einzelnen Verbrennungsmodelle zeigte sich eine starke Abhängigkeit von der Anzahl der zu lösenden Transportgleichungen. Dies wurde besonders bei großen Gittern deutlich. Während beim Gleichgewichts- und Flamelet-Modell nur zwei Transportgleichungen zur Ermittlung der Speziesverteilung gelöst wurden, mussten beim JPDF-Modul pro betrachteter Spezies eine Massen- und eine Varianzerhaltungsgleichung gelöst werden. Daher ergaben sich bei dem JPDF-Modell höhere Rechenzeiten als bei der Nutzung des Gleichgewichts- oder Flamelet-Modells. Bei den hier durchgeführten Rechnungen erhöhte sich die Rechenzeit bei Verwendung des JPDF-Modells um etwa 30-40% pro Iteration. Bei der Konvergenzrate bzw. der notwendigen Anzahl von Iterationen zeigten sich nur geringe Unterschiede zwischen den Modellen. Ein Vorteil der JPDF-Vorgehensweise ist allerdings, dass keine rechen- und arbeitszeitintensiven Vorarbeiten, wie beispielsweise die Erstellung von Gleichgewichts- und Flamelet-Tabellen, notwendig sind.

5 Zusammenfassung

Eine Hauptschwierigkeit bei der rechnerischen Auslegung von Brennkammern liegt in der Beschreibung der hochturbulenten Verbrennungsprozesse. Dies betrifft nicht nur die Beschreibung der Schadstoffbildung, sondern auch schon die „wesentlich einfachere“ Wärmefreisetzung durch chemische Reaktion. Sowohl die thermische Auslegung der Brennkammer und der nachfolgenden Turbine (z.B. Kühlluftströme, Turbineneintrittstemperatur) als auch die Schadstoffproduktion (z.B. NO_X, CO) hängt stark von der Temperaturverteilung in der Brennkammer ab. Bei der Auslegung von Brennkammern kommen die komplexen Geometrien und Strömungsfelder (mehrere Lufteintritte, große Rückströmzonen, intensive Turbulenz) als zusätzliche Schwierigkeit hinzu. Weiterhin erschweren komplex zusammengesetzte Brennstoffe (Kerosin, Öl) und eine problematische Bestimmung von Randbedingungen die Berechnungen. Die vorliegende Arbeit konzentriert sich auf die Beschreibung von Verbrennungsprozessen, insbesondere auf den Einfluss der Turbulenz auf die Verbrennung. Andere zur Auslegung von Brennkammern wichtige Aspekte, wie die Wandwärmebelastung, Kühlung oder eine detaillierte Betrachtung der Schadstoffbildung werden der Arbeit nicht behandelt.

Im Rahmen dieser Arbeit wurde ein Verbrennungsmodell entwickelt, das in erster Linie zur Simulation der Wärmefreisetzung in praxisrelevanten Verbrennungsprozessen dienen soll. Das Modell basiert auf gekoppelten Wahrscheinlichkeitsdichten (JPDF) von Spezieskonzentrationen und der Temperatur und nutzt reduzierte chemische Mechanismen.

In dem neu entwickelten Programmpaket, das modular aufgebaut ist, werden die Transportgleichungen für alle beteiligten Spezies, die Temperatur und die jeweiligen Varianzen gelöst. Unter der vereinfachten Annahme von Doppel-Delta-Verteilungen werden für alle entstehenden Spezies-Temperatur-Kombinationen die chemischen Reaktionsraten berechnet und nicht-linear gemittelt an den CFD-Code zurückgegeben. Das Modell bildet eine geschlossene Einheit und kann mittels einer UDF-Schnittstelle an einen kommerziellen Strömungscode (FLUENT) gekoppelt werden.

Das JPDF-Modell wurde zur Simulation mehrerer Anwendungsfälle (DLR Jetflamme, DLR Gasfilmdüse, MTU E3E Brennkammer) eingesetzt und die Ergebnisse sowohl mit denen anderer Verbrennungsmodelle, als auch mit Messungen verglichen. Dabei konnte auf LDA-Messungen der Geschwindigkeit sowie Thermoelement-, Raman- und CARS-Messungen der Temperatur zurückgegriffen werden. Das in dieser Arbeit neu

entwickelte Modell ist bei allen untersuchten Anwendungen in der Lage, die Temperaturverteilung mit befriedigender bis guter Genauigkeit zu beschreiben. Der Einfluss der Turbulenz auf die chemische Reaktion wurde dabei durch die gewählte Vorgehensweise genauso gut erfasst, wie mit PDF-Modellen auf Basis von β- oder Gauß-Verteilungsfunktionen.

Die Validierung der Nutzungsmöglichkeit von stark vereinfachten Varianz-transportgleichungen erfolgte anhand der DLR Jetflamme. Für diese „Laborflamme“ lagen sehr genaue Raman-Messdaten vor, die eine Bestimmung der Temperaturvarianz und somit einen Vergleich mit den Simulationsrechnungen ermöglichten. Die gemessenen Temperaturvarianzen stimmten in weiten Bereichen der Flamme sehr gut mit den berechneten Werten überein. Bei diesen Vorarbeiten wurde nur ein Teil des JPDF-Moduls (Varianzberechnung) genutzt. Die chemische Reaktionsrate wurde mit dem Gleichgewichts-Verbrennungsmodell beschrieben. Das JPDF-Modell konnte hierfür nicht verwendet werden, da für den benutzten Brennstoff (eine Mischung von Methan, Wasserstoff und Stickstoff) keine geeigneten reduzierten Mechanismen zur Verfügung standen. Die Entwicklung eines stark reduzierten Mechanismus für die Reaktion des Zwei-Komponenten Brennstoffs mit dem Oxidator würde auch in diesem Fall die vollständige Berechnung mit dem JPDF-Modell ermöglichen. Der Vergleich von Messung und Simulation zeigte, dass das chemische Gleichgewichtsmodell bei diesem Anwendungsfall sehr gute Ergebnisse liefert. Die weitgehende Gültigkeit der Gleichgewichtsannahme konnte auch durch eine Auswertung der Messergebnisse auf Basis von theoretischen Gleichgewichtsüberlegungen belegt werden. Es stellte sich heraus, dass der Verbrennungsprozess in großen Teilen der DLR Jetflamme sehr nahe dem chemischen Gleichgewicht liegt und Energieverluste, beispielsweise durch Strahlung, relativ gering sind. Eine Berechnung unter Annahme des chemischen Gleichgewichts war somit gerechtfertigt.

Erstmalig wurde in der vorliegenden Arbeit die Strömung und Verbrennung in der DLR-Gasfilmdüse numerisch berechnet. Diese praxisnahe eingeschlossene Drallflamme wurde in Anlehnung an die Verhältnisse in modernen Flugtriebwerksbrennkammern entwickelt. Bei den hier durchgeführten Rechnungen zeigte sich das neu entwickelte JPDF-Modell gegenüber den anderen Verbrennungsmodellen als überlegen. Unter den untersuchten Modellen war es einzig mit diesem Modell möglich, grundlegende Charakteristika dieses Verbrennungsprozesses richtig zu erfassen. Sowohl das berechnete Geschwindigkeitsfeld als auch die Temperaturverteilung stimmte gut mit den experimentellen Ergebnissen überein.

Als praxisnächste Anwendung der vorliegenden Arbeit wurden Berechnungen an einer von der Firma MTU entwickelten Versuchsbrennkammer durchgeführt. Bei den

Simulationsrechnungen wurden verschiedene Verbrennungsmodelle genutzt und die Ergebnisse sowohl untereinander als auch mit Messergebnissen verglichen. Auch bei diesem Anwendungsfall lieferte das JPDF-Modell gute Ergebnisse. Es ergaben sich jedoch keine signifikanten Vorteile oder wesentlich bessere Resultate als bei der Berechnung mit bereits etablierten Modellen (chemisches Gleichgewichtsmodell, Flamelet-Modell). Die Defizite des JPDF-Modells liegen bei diesem Rechenfall auf Seiten des sehr einfachen chemischen Mechanismus. So konnte in der Berechnung nur ein einfacher Globalmechanismus eines Modell-Brennstoffs verwendet werden. Die Entwicklung besserer reduzierter Mechanismen würde in diesem Fall sicherlich auch die Qualität der JPDF-Verbrennungsrechnung nochmals steigern. Neben den Rechnungen mit unterschiedlichen Verbrennungsmodellen wurde der Einfluss unterschiedlicher Brennstoffe und verschiedener Lastzustände auf die Wärmefreisetzung in der Brennkammer untersucht. Die Simulationsrechnungen stellen somit einen wichtigen Beitrag in der Untersuchung realitätsnaher Brennkammerströmungen dar.

Die Rechenzeiten des JPDF-Modells liegen bei den in dieser Arbeit untersuchten Anwendungsfällen über denen der anderen angewandten Modelle. Dies liegt zum Großteil an der höheren Anzahl der zu lösenden Transportgleichungen. Im Fall der Nachrechnung der MTU-Versuchsbrennkammer erhöhte sich die Rechenzeit pro Iteration um etwa 30-40%. Allerdings war insbesondere bei der Gasfilmdüse festzustellen, dass die Anzahl der notwendigen Iterationen beim JPDF-Modul geringer war als bei der Nutzung anderer Verbrennungsmodelle. Somit stieg die Gesamtrechenzeit nur geringfügig. Auch bei der MTU-Versuchsbrennkammer ergab sich eine sehr gute Konvergenzrate. Es ist daher insgesamt festzustellen, dass sich das JPDF-Modul als numerisch sehr stabil erwies.

Das hier entwickelte JPDF-Modul bildet in seiner jetzigen Form ein eigenständiges, voll funktionstüchtiges Modul, welches zusammen mit einem CFD-Code wie Fluent in der Lage ist,. Verbrennungsvorgänge zu berechnen. Der Schwerpunkt liegt hierbei auf der Berechnung der Wärmefreisetzung in praxisnahen Anwendungen. Zukünftige Entwicklungsmöglichkeiten des Rechenprogramms bestehen in einer Verkürzung der erforderlichen CPU-Zeiten, beispielsweise durch paralleles Lösen der Transportgleichungen. In der Zukunft entwickelte reduzierte Mechanismen für weitere praktisch relevante Brennstoffe könnten das Anwendungsspektrum des Verbrennungsmodells weiter steigern. Insbesondere bei Verbrennungsvorgängen mit langsamen chemischen Reaktionen (finite rate chemistry), bietet die in dieser Arbeit entwickelte JPDF-Vorgehensweise ein hohes Ausbaupotenzial, da auch langsam ablaufende chemische Reaktionen berücksichtigt werden können.

6 Anhang

Anhang [A]

Im JPDF-Modul (vgl. Kap. 3) wird in jedem Punkt des Rechengitters ein lineares Gleichungssystem der Form A · x =b mit der Dimension (N) und

$$A = \begin{bmatrix} 1 & \frac{\tilde{\Phi}_1^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_2\right)^2} & \frac{\tilde{\Phi}_1^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_3\right)^2} & \cdots & \frac{\tilde{\Phi}_1^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_N\right)^2} \\ \frac{\tilde{\Phi}_2^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_1\right)^2} & 1 & \frac{\tilde{\Phi}_2^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_3\right)^2} & \cdots & \frac{\tilde{\Phi}_2^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_N\right)^2} \\ \frac{\tilde{\Phi}_3^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_1\right)^2} & \frac{\tilde{\Phi}_3^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_2\right)^2} & 1 & \cdots & \frac{\tilde{\Phi}_3^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_N\right)^2} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \frac{\tilde{\Phi}_N^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_1\right)^2} & \frac{\tilde{\Phi}_N^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_2\right)^2} & \frac{\tilde{\Phi}_N^{\,2}}{\left(1-\tilde{\Phi}_2\right)^2} & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

$$b = \frac{1}{2a}\begin{bmatrix} \tilde{\Phi}_1''^2 \\ \tilde{\Phi}_2''^2 \\ \tilde{\Phi}_3''^2 \\ \cdots \\ \tilde{\Phi}_N''^2 \end{bmatrix}$$

zur Bestimmung der Reaktionsraten gelöst. Die Dimension des Systems ist abhängig von der Anzahl der verwendeten Spezies. Das System wird mittels LU-Zerlegung (Noll, 1992) und anschließender Rückwärtssubstitution gelöst [Press u. a., 1992].

Anhang [B]

Reduzierte Mechanismen:
Die Reaktionsraten werden mit dem in Kapitel 2 bzw. 3 angegebenen Ansatz bestimmt.

$$\dot{\omega}_i = M_i \sum_{k=1}^{NR} \left(\nu''_{i,k} - \nu'_{i,k}\right) \left[k_{f,k} \prod_{j=1}^{NS} [C_j]^{\nu'_{j,k}} - k_{b,k} \prod_{j=1}^{NS} [C_j]^{\nu''_{j,k}} \right] \qquad \text{(vgl. Gl. 2.38)}$$

$$k_{f,k} = A_k \, T^{\beta_k} \exp\left(\frac{-Ea_k}{R \cdot T} \right) \qquad \text{(vgl. Gl. 2.39)}$$

Hierbei werden bei den einzelnen Mechanismen die folgenden Werte für die Parameter A, β und Ea benutzt:

1-Schritt Methan-Luft Mechanismus [vgl. FLUENT, 1998] Spezies: CH_4, O_2, CO_2, H_2O, (N)			
Reaktion	A [-]	β [-]	Ea [J/kmol]
$CH_4 + 2O_2 \rightarrow CO_2 + 2H_2O$	$0.21 \cdot 10^{12}$	0	$2.027 \cdot 10^{8}$

2-Schritt Methan-Luft Mechanismus [Westbrook u. a., 1981] Spezies: CH_4, O_2, CO_2, CO, H_2O, (N)			
Reaktion	A [-]	β [-]	Ea [J/kmol]
$CH_4 + 1.5O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$	$0.5012 \cdot 10^{12}$	0	$2.0 \cdot 10^{8}$
$CO + ½\ O_2 \rightarrow CO_2$	$0.2239 \cdot 10^{12}$	0	$1.7 \cdot 10^{8}$

4-Schritt Methan-Luft Mechanismus [Jones u. a., 1988] Spezies: CH_4, O_2, H_2O, CO_2, CO, H_2, CO, (N)			
Reaktion	A [-]	β [-]	Ea [J/kmol]
$CH_4 + 1.5\ O_2 \rightarrow CO + 2H_2O$	$0.44 \cdot 10^{12}$	0	$1.256 \cdot 10^{6}$
$CH_4 + H_2O \rightarrow CO + 3H_2$	$0.3 \cdot 10^{9}$	0	$1.256 \cdot 10^{6}$
$H_2 + ½\ O_2 \leftrightarrow H_2O$	$0.3 \cdot 10^{17}$	-1	$1.675 \cdot 10^{6}$
$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$	$0.275 \cdot 10^{10}$	0	$8.374 \cdot 10^{5}$

1-Schritt n-Heptan-Luft Mechanismus [vgl. FLUENT, 1998] Spezies: C_7H_{16}, O_2, CO_2, H_2O, (N)			
Reaktion	A [-]	β [-]	Ea [J/kmol]
$C_7H_{16} + 11O_2 \rightarrow 7CO_2 + 8H_2O$	$0.2868 \cdot 10^9$	0	$1.256 \cdot 10^8$

1-Schritt $C_{12}H_{23}$-Luft Mechanismus [vgl. FLUENT, 1998] Spezies: $C_{12}H_{23}$, O_2, CO_2, H_2O, (N)			
Reaktion	A [-]	β [-]	Ea [J/kmol]
$C_{12}H_{23} + 17.75O_2 \rightarrow 12CO_2 + 11.5H_2O$	$0.2587 \cdot 10^9$	0	$1.256 \cdot 10^8$

7 Literaturverzeichnis

Airbus: Zahlen und Fakten, Airbus Broschüre, Geschäftsbereich Kommunikation, Toulouse, 2001

Amano R., Goel P.: Computations of Turbulent Flow Beyond Backward-Facing Steps Using Reynolds-Stress Closure, AIAA Journal, Vol. 23, No. 9, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1985

Anderson J.: Fundamentals of Aerodynamics, McGraw-Hill Inc., New York, 1991

Atkins P.: Physikalische Chemie, Spektrum Verlag, 1992

Baldwin B., Lomax H.: Thin Layer Approximation and Algebraic Model for Separated Turbulent Flow, Technical Report AIAA-78-0257, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1978

Barth T. J., Jespersen D.: The design and application of upwind schemes on unstructured meshes, Technical Report AIAA 89-0366, AIAA 27th Aerospace Meeting, Reno, Nevada, 1989

Barths, H., Peters N., Brehm N., Mack A., Pfitzner M., Smiljanovski V.: Simulation of Pollutant Formation in a Gas-Turbine Combustor Using Unsteady Flamelets, 27th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1998

Barths H., Pitsch H., Paczko G., Peters N.: Demo-RIF User Guide, Version 1.0, Advanced Combustion GmbH, Aachen Germany, 2000

Bergmann V., Meier W., Wolff D., Stricker W.: Application of spontaneous Raman and Rayleigh scattering and 2D LIF for the characterization of a turbulent CH4/H2/N2 jet diffusion flame, Applied Physics B, Vol.: 66: 489-502, 1998

Bilger R.: Turbulent Jet Diffusion Flames, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 1, 1976

Bilger R., Stårner S., Kee R.: On Reduced Mechanisms for Methane-Air Combustion in Nonpremixed Flames, Combustion and Flame, Vol. 80: 135-149, 1990

Bilger R.: Future Progress in turbulent combustion research, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 26: 367-380, 2000

Birkby P., Cant R., Dawes W., Demargne A., Dhanasekaran P., Kellar W., Rycroft N., Savill A., Eggels R., Jennions I.: CFD Analysis of a complete industrial lean premixed gas turbine combustor, ASME Paper 2000-GT-0131, ASME Turbo Expo 2001, New Orleans, 2001

Blasenbrey T.: Entwicklung und Implementierung automatischer reduzierter Reaktionsmechanismen für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen, Dissertation, Fakultät für Energietechnik, Universität Stuttgart, 2000

Bockhorn H.: Finite Chemical Rate and Local Equilibrium Effects in Turbulent Hydrogen-Air Diffusion Flames, 22th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1988

Bollig M., Pitsch H., Hewson J., Seshadri K.: Reduced n-Heptane Mechanisms for Non-Premixed Combustion With Emphasis on Pollutant-Relevant Intermediate Species, 26th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1996

Borghi R.: Turbulent Combustion Modelling, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 14: 245-292, 1988

Borghi R.: La Modélisation et le Calcul de la Combustion turbulente: Problèmes généraux et solutions partielles, ESAIM Proceedings, Vol. 6, 1999

Boussinesq J.: Théorie de l'écoulement tourbillant, Mém. Prés. Acad. Sci. 22, 1877

Bradshaw P.: Turbulence, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1976

Bray K.: The Challenge of turbulent Combustion, 26th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1996

Brehm N., Schilling T., Mack A., Kappler G.: NO_X Reduction in a Fuel Staged Combustor by Optimisation of the Mixing Process and the Residence Time, RTO Meeting: Gas Turbine Engine Combustion, Emissions and Alternative Fuels, Lisbon, 1998

Brehm N., Baker S., Jones S.: A three Step NOx Reduction Programme: "Achievements with single annular Low-NOx Combustor for the BR 700 Engine Family", ASME Paper 97-GT-145, International Gas Turbine & Aeroengine Congress & Exhibition, Orlando, 1997

Breussin F., Pigari F., Weber R.: Predicting the Near-Burner-Zone Flow Field and Chemistry of Swirl-Stabilized Low-NOx Flames of Pulverized Coal Using the RNG-k-ε, RSM an k-ε Turbulence Models, 26th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1996

Bronstein I., Semendjajew K.: Taschenbuch der Mathematik, Verlag Harri Deutsch, 1987

Bui-Pham M., Seshadri K.: Comparison between Experimental Measurements and Numerical Calculations of the Structure of Heptane-Air Diffusion Flames, Combust. Sci. Technol., Vol. 79: 293-310, 1991

Burbank J.: Zur Berechnung der chemischen Reaktion in einer Gasturbinen-Brennkammer, Dissertation, Fakultät für Maschinenwesen, Technische Universität München, 1995

Cannon S., Adumitroaie V., Smith C.: 3D LES Modelling of Combustion Dynamics in Lean Premixed Combustors, ASME Paper 2001-GT-0375, ASME Turbo Expo 2001, New Orleans, 2001

Chen J., Kollmann W., Dibble R.: Pdf Modeling of Turbulent Methane Jet Flames, Combustion Science and Technology, Vol. 64: 315-346, 1989

Choudhury D.: Introduction to the Renormalization Group Method and Turbulence Modeling, Fluent Inc. Technical Memorandum TM-107, 1993

Ciezki H., Adomeit G.: Shock-Tube Investigation of Self-Ignition of n-Heptane-Air Mixtures Under Engine Relevant Conditions, Combustion and Flame, Vol. 93: 412-433, 1993

Correa S., Shyy W.: Computational Models and Methods for Continuous Gaseous Turbulent Combustion, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 13: 249-292, 1987

Demoulin F., Borghi R.: PDF modeling of turbulent combustion of an atomized liquid fuel, 17th International Colloquium on the Dynamics and Explosions of Reactive Systems, ICDERS, Heidelberg, 1999

DLR: Homepage des Instituts für Verbrennungstechnik: http://www.dlr.de/VT, 2001

Döbbeling K.: Experimentelle und theoretische Untersuchungen an stark verdrallten, turbulenten isothermen Strömungen, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1990

Dopazo C.: Recent Developments in PDF Methods, Turbulent Reacting Flows (Libby P. A., Williams F.A), pp. 375-457, Academic Press, London, England, 1994
Dryer F., Glassman I.: High-Temperature Oxidation of CO and CH4, 14th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1972

Eaton A., Smoot L., Hill S., Eatough C.: Components, formulations, solutions, evaluation and application of comprehensive combustion models, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 25: 387-436, 1999

EBI: LOWNOX III, Theme V: Applied CFD, Task 2: Reduced Reaction Mechanism, Brite-EuRam BRPR CT 95-0122, Final Report January 1996 - June 1997, Engler Bunte Institut, Universität Karlsruhe, 1997

Eigenmann L., Meisl J., Koch R., Wittig S.: Prediction of a Spray Diffusion Flame by a Probability Density Function Approach, AIAA-Paper, AIAA-99-3370, 1999

EKT: Homepage des Fachbereichs Energie- und Kraftwerktechnik der TU Darmstadt, Database TNF Flames, http://www.tu-darmstadt/fb/mb/ekt/flamebase, 2000

Favre A.: Statistical Equations of Turbulent Gases, Problems of Hydrodynamics and Continuum Mechanics, Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 1969

Fluent: FLUENT 5 Users Guide, Fluent Inc., Lebanon, USA, 1998

Fluent UDF: FLUENT 5.5 UDF User's Guide, Fluent Inc., Lebanon, USA, 2000

Frankel S., Drummond P., Hassan H.: A Hybrid Reynolds Averaged/PDF Closure Model for Supersonic Turbulent Combustion, Technical Report, AIAA-90-1573, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1990

Frohn A.: Einführung in die technische Thermodynamik, AULA-Verlag, Wiesbaden, 1989

Frost W., Moulden T.: Handbook of Turbulence, Volume I, Fundamentals and Applications, Plenum Press, New York, 1977

Gambit: Gambit Users Guide, Fluent Inc., Lebanon, USA, 1998

Gardiner W.: Combustion Chemistry, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New-York, 1984

Gerlinger P., Möbus H., Brüggemann D.: An Implicit Multigrid Method for Turbulent Combustion, J. Comp. Physics, Vol. 166: 1-30, 2001

Goshal S., Moin P. : The Basic Equations for the Large Eddy Simulation of Turbulent Flows in Complex Geometry, J. Comp. Physics, Vol. 118: 24-37, 1995

GRI: GRI-Mech 3.0, http://www.me.berkeley.edu/gri_mech/, 2001

Günther R.: Verbrennung und Feuerungen, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1974

Guéret C.: Elaboration d'un modèle cinétique pour l'oxydation du kérosène et d'hydrocarbures représentatifs, Dissertation, Université d'Orléans, France, 1989

Gutheil E., Bockhorn H.: The effect of multi-dimensional PDF's in turbulent reactive flows at moderate Damköhler number, Physicochemical Hydrodynamics, Vol. 9, 1987

Hassa C., Carl M., Frodermann M., Behrendt T., Heinze J., Fleing C., Meier U., Wolff-Gaßmann D., Hohmann S., Zarzalis N.: Experimental and Numerical Investigation of a Planar Combustor Sector at Realistic Conditions, ASME Paper 2000-GT-0123, ASME Turbo Expo 2000, München, 2000

Heinrich C., Janicka J.: Reynolds-Spannungsmodelle in der industriellen Anwendung, 14. TECFLAM-Seminar, CRAY-TECFLAM Abschlusskolloquium, Darmstadt, 1999
Hinze J.: Turbulence, McGraw-Hill Publishing Co., New York, 1975

Hirsch C.: Numerical Computation of Internal and External Flows, Volume 1&2 , John Wiley & Sons, New York, 1988

ICAO: International Standards and Recommended Practices, Environmental Protection, Annex 16 to the Convention on International Civil Aviation, Vol. II, Aircraft Engine Emissions, International Civil Aviation Organization, Montreal, 1981

ICAO: ICCAIA Position on Stringency of NO_X Emissions Regulations, Working Paper 28, International Civil Aviation Organization, Montreal, 1995

IPCC: IPCC Special Report, Aviation and the global Atmosphere, Intergovernmental Panel on Climate Change, 1999

Jane's: Aero-Engines, Issue 7, Jane's Information Group Ltd, Surrey, UK, 2000

Jones W., Launder B.: The Prediction of Laminarization with a Two-Equation Model of Turbulence, Int. Journal of Heat and Mass Transfer, Vol. 15: 301-314, 1972

Jones W., Whitelaw J.: Calculation Methods for Reacting Turbulent Flows: A Review, Combustion and Flame, Vol. 48: 1-26, 1982

Jyoti B., Ewing D., Matovic D.: Evaluation of Algebraic Reynolds Stress Model Assumptions Using Experimental Data, DFD96 Meeting of the America Physical Society, 1996

Keck O.: Untersuchungen zur Chemie-Turbulenz-Wechselwirkung an eingeschlossenen verdrallten Erdgas/Luft-Diffusionsflammen, Laserspektroskopische Bestimmung der

Temperatur- und Speziesverteilungen mit Einzelpulsanregung, Dissertation, Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik, Universität Stuttgart, 2001

Keck O., Meier W.: Establishment of a Confined Swirling Natural Gas/Air Flame as a Standard Flame: Temperature and Species Distributions from Laser Raman Measurements, eingereicht bei Combustion Science and Technology, 2002

Khalil E.: Flow and Combustion in axisymmetric Furnaces, Mechanical Engineering Department, Imperial College of Science and Technology, London, 1976

Kolmogorov A.: Dissipation of Energy in Locally Isotropic Turbulence, Turbulence – Classic Papers on Statistical Theory (Friedlander S.K., Topper L.), Interscience Publisher Inc., London, New York, 1961

Kunz O.: Combustion Characteristics of Hydrogen- and Hydrocarbon-Air Mixtures in Closed Vessels, California Institute of Technology, Explosion Dynamics Laboratory Report, FM98-4, Pasadena, 1998

Kunz O., Noll B., Lückerath R., Aigner M., Hohmann S.: Computational Combustion Simulation for an Aircraft Model Combustor, AIAA-Paper, AIAA 2001-3706, 2001

Kuo K.: Principles of Combustion, John Wiley and Sons, New York, 1986

Landenfeld T., Kremer A., Hassel E., Janicka J.: Ansätze zur Modellierung eingeschlossener Drallflammen, TECFLAM-Seminar, Drallflammen und Industriecodeentwicklung, Vol. 13, Arbeitsgemeinschaft TECFLAM, 1997

Landenfeld T.: Numerische Beschreibung turbulenter Methandiffusionsflammen mit Schließungsmodellen zweiter Ordnung und angenommenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen, Dissertation, Fachbereich Maschinenbau, Technische Universität Darmstadt, 1999

Landenfeld T., Hinze A., Janicka J.: Statistical Analysis of Reactive Scalars in a Turbulent Diffusion Flame using Monte Carlo PDF Method, The Combustion Institute, Joint Meeting of French, German and British Section, Nancy, 1999

Launder B., Spalding D.: Lectures in Mathematical Models of Turbulence, Academic Press, London, England, 1972

Launder B., Spalding D.: The Numerical Computation of Turbulent Flows, Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, Vol. 3: 269-289, 1974

Launder B., Reece G., Rodi W.: Progress in the Development of a Reynolds-Stress Turbulence Closure, J. Fluid. Mech., Vol. 68(3): 537-566, 1975

Launder B.: Second Moment Closure: Present ... and Future?, Int. Journal of Heat and Fluid Flow, Vol. 10: 282-300,1989

Lehmann B.: Gasfilmdüse II, Ergebnisse von Geschwindigkeits- und Temperaturmessungen in der Modellbrennkammer ohne und mit Verbrennung, Interner DLR Bericht, DLR IB – 92517-2000/B4, DLR Institut für Antriebstechnik, Abteilung für Turbulenzforschung, Berlin, 2000

Lehmann B.: persönliche Mitteilung, DLR Institut für Antriebstechnik, Abteilung für Turbulenzforschung, Berlin, 2001

Leuckel W., Lauer G., Hirsch C., Habisreuther P.: Mathematische Modellierung der Wechselwirkung von Turbulenz und Reaktion unter den in Gasturbinenbrennkammern vorliegenden Bedingungen, Vorhaben 3.1.3.4, Turboflam Abschlussbericht, Engler-Bunte-Institut, Universität Karlsruhe, 1994

Libby P., Williams F.: Turbulent Reacting Flows, Fundamental Aspects and a Review, Academic Press, London, England, 1994

Lückerath R., Bergmann V., Stricker W.: Characterization of gas turbine combustion chambers with single pulse CARS thermometry, AGARD-CP-598, 1998

Lückerath R.: persönliche Mitteilung, DLR Institut für Verbrennungstechnik, Stuttgart, 2001

Maas U., Pope S.: Simplifying Chemical Kinetics: Intrinsic Low-Dimensional Manifolds in Composition Space, Combustion and Flame, Vol. 88: 239-264, 1992

Maas U., Pope S.: Implementation Of Simplified Chemical Kinetics Based On Intrinsic Low-Dimensional Manifolds, 24th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1992

Maas U.: Automatische Reduktion von Reaktionsmechanismen zur Simulation reaktiver Strömungen, Habilitationsschrift, Fakultät für Energietechnik, Universität Stuttgart, 1993

Magnussen B., Hjertager B.: On mathematical models of turbulent combustion with special emphasis on soot formation and combustion, 16th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1976

Malecki B., Rhie J., McKinney R., Colket M., Madabhushi R., Ouyang H., Syed S.: Application of a CFD Based Analysis System to the PW6000 Combustor to Optimise Exit Temperature Distribution – Part I: Description and Validation of the Analysis Tool, ASME Paper 2001-GT-0129, ASME Turbo Expo 2001, New Orleans, 2001

Martens S.: Fluent Simulation eines Gasturbinenbrenners bei Drücken von 4 bis 14 bar – Validierung verschiedener Strahlungsmodelle anhand von Messwerten, VDI Bericht Nr. 1492, VDI Flammentag, Dresden, 1999

Meier U., Geigle K.-P.: Untersuchungen mit Laser-Messtechniken an einer RQL-Modellbrennkammer der MTU, Teil 2, DLR Internal Report, 1999

Meier U., Wolff-Gaßmann D., Stricker W.: LIF Imaging and 2D Temperature Mapping in a Model Combustor at Elevated Pressure, Aerospace Science and Technology, in Druck, 2000

Meier W., Barlow R., Chen Y., Chen J.: Raman/Rayleigh/LIF Measurements in a Turbulent $CH_4/H_2/N_2$ Jet Diffusion Flame: Experimental Techniques and Turbulence-Chemistry-Interaction, Combustion and Flame, Vol. 123: 326-343, 2000

Meier W., Keck O., Noll B., Kunz O., Stricker W.: Investigations in the TECFLAM swirling diffusion flame: Laser Raman measurements and CFD calculations, Applied Physics B, Vol. 71: 725-731, 2000

Métais O., Ferziger J.: New Tools in Turbulence Modelling, Les Houches School, May 21-31, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1996

Möbus H., Gerlinger P., Brüggemann D.: Comparison of Eulerian and Lagrangian Monte Carlo PDF Methods for Turbulent Diffusion Flames, Combustion and Flame, Vol. 124: 519-534, 2001

MTU: NOx-Reduktion durch Homogenisierung des Gemisches in Brennkammern, Abschlußbericht: Engine 3E – Förderzeichen 20T9540, Technischer Bericht MTUM-B99TPK-0007, 1999

Mühleck P.: Numerische Untersuchung turbulenter, reagierender Strömungen in Brennkammern und Schubdüsen von Hyperschall-Staustrahltriebwerken, Forschungsbericht 95-18, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt, Institut für Antriebstechnik, Köln, 1995

Narayan J., Girimaji S.: Turbulent Reacting Flow Computations Including Turbulence-Chemistry Interactions, AIAA-Paper, AIAA-90-1573, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1992

Nau M.: Berechnung turbulenter Diffusionsflammen mit Hilfe eines Verfahrens zur Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion und automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen, Dissertation, Institut für technische Verbrennung, Universität Stuttgart, 1997

Noll B.: Numerische Strömungsmechanik, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1993

Noll B., Kessler R., Lehmann B., Rachner M., Frank P., Schmitz G., Geigle K.-P., Schütz H., Wins M., Aigner M.: Projekt ’Brennkammermodellierung’ (BKM-II), DLR Forschungsbericht (in Vorbereitung), Stuttgart, 2002

Noll B., Schütz H., Aigner M.: Numerical simulation of high-frequency flow instabilities near an airblast atomizer, ASME paper 2001-GT-0041, ASME Turbo Expo 2001, New Orleans, 2001

Paczko G., Lefdal P., Peters N.: Reduced Reaction Schemes for Methane, Methanol and Propane Flames, 21th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1986

Pantakar S.: Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Corporation, Washington, 1980

Pawlik V., Klausmann W.: Calculation of the flow of a Viessmann RotriX swirl burner to assess the recirculation behaviour and the potential for NOx reduction, Progress in Computational Fluid Dynamics, Vol. 1: 131-140, 2001

Pfahl U., Fieweger K., Adomeit G.: Self Ignition of Diesel-Relevant Hydrocarbon-Air Mixtures Under Engine Conditions, 26th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, Pittsburgh, 1996

Peeters T.: Numerical Modeling of Turbulent Natural Gas Diffusion Flames, Ph.D. Thesis, Delft Technical University, Delft, 1995
Peters N.: Laminar diffusion flamelet models in non-premixed turbulent combustion, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 10: 319-339, 1984

Peters N.: Laminar flamelet concepts in turbulent combustion, 21th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1986

Peters N.: Fifteen Lectures on Laminar and Turbulent Combustion, Ercoftac Summer School, RWTH Aachen, 1992

Philipp M.: Experimentelle und theoretische Untersuchung zum Stabilitätsverhalten von Drallflammen mit zentraler Rückströmzone, Dissertation, Fakultät für Chemieingenieurwesen, Universität Karlsruhe, 1991

Pitsch H.: Unsteady Flamelet Modeling of Differential Diffusion in Turbulent Jet Diffusion Flames, Combustion and Flame, Vol.123: 358-374, 2000

Pope S.: A Monte Carlo method for the PDF equations of turbulent reactive flows, Combust. Sci. Technol., Vol. 25: 159-174, 1981

Pope S.: PDF methods for turbulent reactive flows, Prog. Energy Combust. Sci., Vol. 11: 119-192, 1985

Pope S.: Computations of Turbulent Combustion: Progress and Challenges, 23th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1990

Pope S.: Turbulent Flows, Cambridge University Press, Cambridge, 2000

Press W., Teukolsky S., Vetterling W., Flannery B.: Numerical Recipes in C, Cambridge University Press, Cambridge, 1992

Rachner M.: Die Stoffeigenschaften von Kerosin Jet A-1, DLR-Mitteilung 98-01, Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt e.V., 1998

Relation H., Battaglioli J., Ng W.: Numerical Simulation of Nonreacting Flows for Industrial Gas Turbine Combustor Geometries, ASME Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, Vol. 120, 1998

Reynolds W.: The potential and limitations of direct and large eddy simulation, Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York , 1989

Rhodes R.: Turbulent mixing in non-reactive and reactive flows (Murthy S.N.B.), Plenum Press, New York, 1979

Riegler U.: Berechnung der Verbrennung und der Schadstoffbildung in Ottomotoren unter Verwendung detaillierter Reaktionsmechanismen, Dissertation, Institut für technische Verbrennung, Universität Stuttgart, 1999

Rodi W.: A new algebraic relation for calculating the Reynolds stress, Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Mechanik, Vol. 56: 219-221, 1976

Rodi W.: Turbulenzmodelle und ihre Anwendung auf Probleme des Wasserbaus, Habilitationsschrift, Universität Karlsruhe, 1978

Røkke N., Wilson A.: Experimental and Theoretical Studies of a Novel Venturi LPP Combustor, ASME Paper 2000-GT-110, ASME Turbo Expo 2000, München, 2000

Rotta J.: Turbulente Strömungen, Teubner, Stuttgart, 1972

Schlichting H.: Boundary Layer Theory, McGraw-Hill, New York, 1979

Schlittgen R.: Einführung in die Statistik - Analyse und Modellierung von Daten, Oldenburg Verlag, 1997

Schmid C.: Drallbrenner-Simulation durch Starrkörperwirbel-Strömung unter Einbeziehung von drallfreier Primärluft und Verbrennung, Dissertation, Universität Karlsruhe, 1991

Schütz H., Noll B., Lehmann B., Aigner M.: Numerical simulation of vortex shedding at the exit of an air/fuel-nozzle, Eurotherm67, ECOS-2000 Conference, Twente, The Netherlands, 2000

Serag-Eldin A., Spalding D.: Computation of Three-Dimensional Gas-Turbine Combustor Chamber Flows, ASME-Paper 78-GT-142, ASME Gas Turbine Conference, London, 1978

Shih T., Liou W., Shabbir A., Zhu J.: A New k-ε Eddy-Viscosity Model for High Reynolds Number Turbulent Flows – Model Development and Validation, Computer Fluids, Vol. 24(3): 227-238, 1995

Smooke M., Puri I., Seshadri K.: A comparison between numerical calculation and experimental measurements of the structure of a counterflow diffusion flame burning diluted methane in diluted air, 21th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1986

Spalart P., Allmaras A.: A one-equation turbulence model for aerodynamic flows, Technical Report AIAA-92-0439, American Institute of Aeronautics and Astronautics, 1992

Spalding D.: Development of the Eddy Break-Up Model of Turbulent Combustion, 16th Symp. (Int.) on Combustion, The Combustion Institute, 1976

Spalding D.: Combustion and Mass Transfer, Pergamon Press, New York, 1979
Stöcker H.: Taschenbuch mathematischer Formeln und moderner Verfahren, Verlag Harri Deutsch, 1995

Strehlow R.: Combustion Fundamentals, McGraw-Hill Inc., 1985

Theisen P.: Modellierung der Turbulenz-Chemie-Interaktion in technischen Brennkammern, Dissertation, Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik, Universität Stuttgart, 2000

TNF: Homepage der TNF-Workshops, Datensätze
http://www.ca.sandia.gov/tnf/DataArch/DLRflames/DLRflames.html, 2000

Truckenbrodt E.: Fluidmechanik, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York,1980

Turns S.: An Introduction to Combustion, McGraw-Hill Inc., 1996

Vandoormaal J., Raithby G.: Enhancements of the SIMPLEC Method for Predicting Incompressible Fluid Flows, Numerical Heat Transfer, Vol. 7: 247-163, 1984

Wagner S.: Vorlesungsskript Strömungslehre, Institut für Aerodynamik und Gasdynamik, Universität Stuttgart, 1995

Walther R.: Verbrennungsprobleme in der Luft- und Raumfahrt, Vorlesungszusammenfassung, Institut für Thermodynamik der Luft- und Raumfahrt, Universität Stuttgart, 1997

Warnatz J., Maas U., Dibble R.: Verbrennung, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York, 1997

Wennerberg D.: Entwicklung eines vorhersagefähigen Berechnungsmodells für stark verdrallte Strömungen mit Verbrennung, Dissertation, Universität Erlangen-Nürnberg, 1995

Westbrook C., Dryer F.: Simplified Reaction Mechanisms for the Oxidation of Hydrocarbon Fuels in Flames, Combustion Science and Technology, Vol. 27: 31-43, 1981

Williams F.: Combustion Theory, The Fundamental Theory of Chemically Reacting Flow Systems, The Benjamin/Cummings Publishing Company Inc., Menlo Park, 1985

Yakhot V., Smith T.: The Renormalization Group, the ε-Expansion and Derivation of Turbulence Models, Journal of Scientific Computing, Vol. 3, 1992

Zarzalis N., Hohmann S., Hettel M., Merkle K., Leukel W., Klose G., Meier R., Koch R., Wittig S., Carl M., Behrendt T., Hassa C., Meier U., Lückerath R., Stricker W.: Low-NOx Combustor Development pursued under the Engine 3E German National Research Program in a cooperative Effort among Engine Manufacturer MTU, University of Karlsruhe and DLR German Aerospace Research Center, eingereicht bei Aerospace Science and Technology, 2000

Danksagung

Diese Arbeit entstand während meiner Tätigkeit als Doktorand am Institut für Verbrennungstechnik des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt e.V. (DLR) im Rahmen einer Nachwuchsinitiative von DLR und MTU AeroEngines.

Mein Dank gilt Prof. Dr.-Ing. M. Aigner für die Möglichkeit innerhalb seines Instituts zu promovieren.

Besonders danken möchte ich Herrn Dr.-Ing. habil. B. Noll, der die Arbeit auf fachlicher Seite betreute und mir jederzeit zur Seite stand.

Herrn Dr.-Ing. P. Gerlinger danke ich für die vielen themenbezogenen Beiträge in Gesprächen und Diskussionen.

Weiterhin danke ich Frau Dr. M. Braun und den Herren Dr. W. Meier und Dr. R. Lückerath für die informativen Gespräche und Anregungen.

Meinen Doktorandenkollegen: Anke, Karin, Olaf, Peter, Guido, Dominik, Stefan, Robert, Victor, Kejan, Martin, Fernando und Thomas danke ich für die Hilfsbereitschaft und die angenehme Zeit am DLR.

Nicht zuletzt danke ich meiner Frau Nina für ihre fortwährende Unterstützung während der Doktorarbeit.

Der MTU Aero Engines GmbH danke ich für die gewährte finanzielle Unterstützung.

Lebenslauf

Name: Oliver Christian Kunz
geb. 25.07.1970 in Heidelberg

Anschrift: Panoramastrasse 7
69226 Nussloch

Ausbildung:

1981 – 1990	Gymnasium Sandhausen
1990 – 1992	Wehrdienst NATO (SaZ2)
1992 – 1998	Studium der Luft- und Raumfahrttechnik an der Universität Stuttgart, SUPAERO Toulouse und dem CALTECH Pasadena
1999 – 2001	Promotion in Luft- und Raumfahrttechnik im Rahmen einer Nachwuchsinitiative von MTU AeroEngines und dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt DLR
2002 -...	Entwicklungsingenieur bei EADS-Astrium