6 Numerische Auswertung von Spezies-Messungen

Im vorherigen Kapitel wurde für eine anwendungsnahe Konfiguration der Einfluss der Form der Mischungsbruch-PDF auf die Lösung der Quellterm-Mittelung untersucht. Hierbei stellte sich heraus, dass sowohl die Form, als auch die Diskretisierung der PDF kaum Einfluss auf die Berechnung der zeitgemittelten Wärmefreisetzung hat. Lediglich bei der Bestimmung der Schadstoffemission ist eine möglichst genaue Abbildung der in der Realität vorhandenen PDF von Nöten.
Chemiemodelle, die Nichtgleichsgewichtseffekte mitberücksichtigen, haben gegenüber den Gleichgewichtsmodellen jedoch mehr Einflussparameter als nur den Mischungsbruch, Druck und Enthalpie. So werden für die ILDM-Methode beispielsweise noch CO_2 und H_2O als Eingabevariablen gebraucht. Auch diese sogenannten Fortschrittsvariablen sind turbulenten Schwankungen unterlegen und müssen daher bei der zeitlichen Mittelung mit einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion gewichtet werden. Es werden hier jeweils Transportgleichungen für Varianz und Mittelwert gelöst und einfache, zweiparametrige Annahmen über PDF-Formen unternommen.
Untersuchungen der gemessenen PDF-Formen von Fortschrittsvariablen sind aus der Literatur bisher nicht bekannt. Die Verteilungen der Gauß- oder β-Funktion wurden bisher angenommen, ohne einen Einblick in die genaue Form der in der Realität vorliegenden PDF zu haben. Durch die zeitlich aufgelöste optische Flammenmesstechnik ist es jedoch möglich, auch Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen dieser Größen zu messen. Im Institut für Verbrennungstechnik des DLR Stuttgart [TECFLAM,1999] ist es gelungen, verlässliche Daten an einer Methan-Drall-Flamme bereitzustellen. Diese Daten werden nun in gleicher Weise wie in Kapitel 5 analysiert. Dabei soll untersucht werden, wie stark die gemessenen PDF‘s mit der Gauß-Funktion korrelieren und ob für Berechnungen auf Basis der beiden Fortschrittsvariablen wiederum ausreicht, sich der numerisch wesentlich schneller zu bestimmenden Delta-Funktion zu bedienen.
Die Messungen liefern neben der Form der Einzel–PDF’s noch weitere Informationen, welche bisher noch nicht betrachtet wurden. Da Raman-Messungen eine Reihe von Spezies zeitgleich liefern, ist es möglich, Korrelationen zwischen den Fortschrittsvariablen zu bestimmen. Nicht nur die Annahme des Vorkommens statischer Abhängigkeiten zwischen den Fortschrittsvariablen kann verifiziert werden, sondern es kann auch überprüft werden, ob sich bei Annahme statistischer Unabhängigkeit die Lösung gravierend verändert. Ergibt sich nur wenig Veränderung, so kann die Rechenzeit deutlich reduziert werden.

6.1 Experimentelle Untersuchung

Bei der untersuchten Methan-Flamme handelt es sich um den sogenannten TECFLAM-Standard-Drallbrenner, der an mehreren deutschen Hochschulen und dem DLR mit verschiedenen Messverfahren untersucht wurde, um experimentelle Daten für die Validierung numerischer Modelle zu liefern. Die entstandenen Messdaten sind im Internet zugänglich [TECFLAM,1999]. Methan wurde als Brennstoff gewählt, da dieser gegenüber höherwertigen Kohlenwasserstoffen einfacher zu vermessen ist. Die Flamme ist drallstabilisiert, was typisch für viele Anwendungen ist. Die Wände sind auf etwa 75°C gekühlt.
Bild 6.1.1 zeigt Schema des ca. 70 cm hohen Brenners. Die Versuchsbedingungen wurden an allen Prüfständen möglichst gleich gehalten.

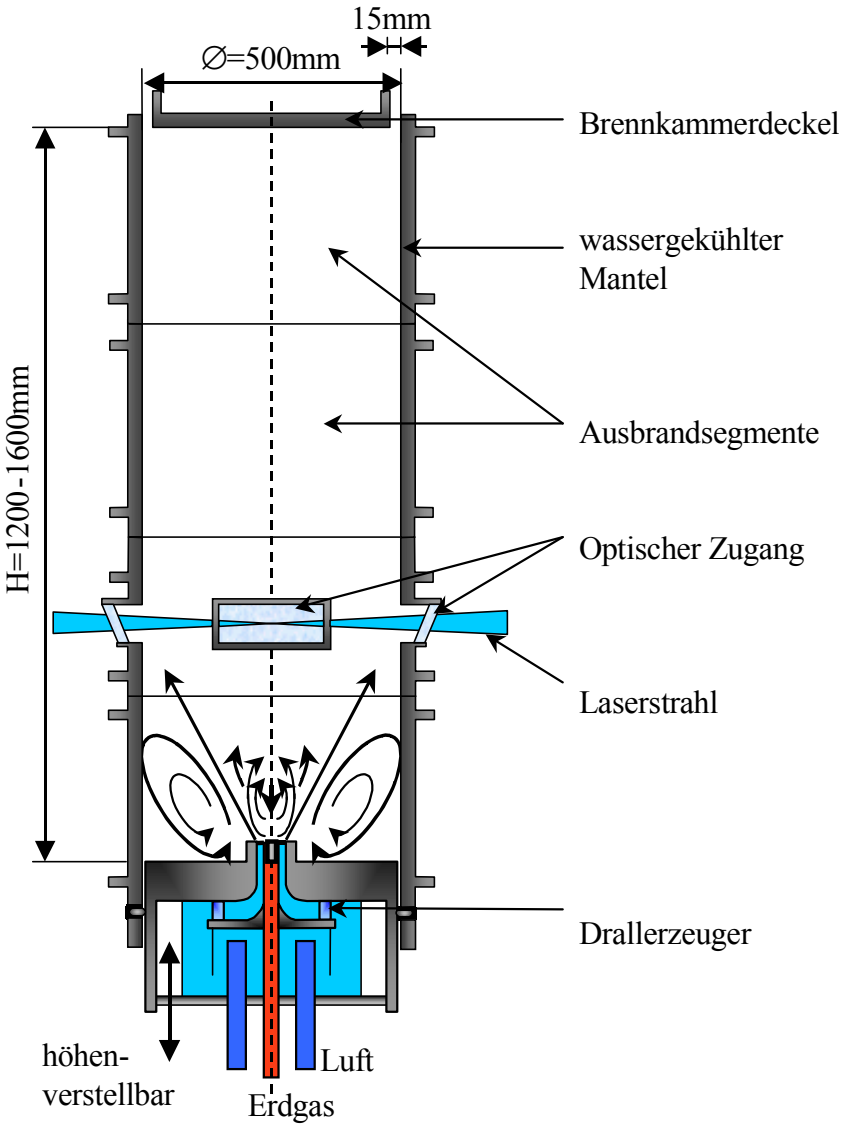

Bild 6.1.1 TECFLAM –Drallbrenner

Mit der Laser-Raman-Messtechnik [Meier et al., 1999] wurde der Tecflam-Drallbrenner am Institut für Verbrennungstechnik des DLR-Stuttgart detailliert untersucht. Diese Messungen liefern experimentelle Daten zu Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen vieler Haupt-Spezies und werden daher in dieser Arbeit für numerische Zwecke genauer betrachtet werden.
Gegenüber Sonden-Messtechniken bieten Laser-Messverfahren den Vorteil, dass sie störungsfrei anwendbar sind, eine räumliche Auflösung im Submillimeterbereich aufweisen und als Einzelpulsverfahren eine zeitliche Auflösung von typischerweise 10^{-6} bis 10^{-9} Sekunden erlauben. Spontane Raman-Streuung bietet darüber hinaus die Möglichkeit, alle Spezieskonzentrationen und die Temperatur simultan zu bestimmen. Ein Nachteil dieses Messverfahrens ist jedoch der geringe Streuquerschnitt für den Raman-Prozess und die damit verbundenen kleinen Signalintensitäten, die in der Praxis nur durch sehr hohe Laserenergien und äußerst effiziente Detektionssysteme ausgeglichen werden können. In „sauberen", partikelfreien Flammen ist dann im Einzelpuls eine Bestimmung von Konzentrationen bis in den Bereich von etwa 1% möglich [Meier et al., 1999].

Die in diesen Untersuchungen benutzte Raman-Anlage basiert auf einem blitzlampengepumpten Farbstofflaser (λ=489 nm) mit Pulsenergien von 3J und ist für hohe Signalintensitäten und Genauigkeit optimiert. Damit können im Einzelpuls die Konzentrationen der Hauptspezies (O_2, N_2, CH_4, H_2, CO, CO_2 und H_2O) und die Temperatur in punktförmigen Messungen mit einer räumlichen Auflösung von 0,6 mm nachgewiesen werden. Durch die gleichzeitige Detektion aller Hauptspezies ist zudem die Bestimmung des Mischungsbruches möglich, eine Größe, die für die Charakterisierung der Flamme und den Vergleich mit Modellrechnungen von fundamentaler Bedeutung ist.
Zur Untersuchung einer Drallflammenkonfiguration wurden an ca. 120 Messpositionen jeweils 300 Einzelpulsmessungen durchgeführt, aus denen die Wahrscheinlichkeitsdichteverteilungen der Speziesmolenbrüche, der Temperatur und des Mischungsbruches berechnet wurden [Meier et al., 1999]. Neben den Mittelwerten, Fluktuationen und höheren Momenten sind aus den PDF's auch die Korrelationen zwischen unterschiedlichen Messgrößen ableitbar, die detaillierte Informationen über den thermochemischen Zustand und die Turbulenz-Chemie-Wechselwirkung enthalten. Diese umfassenden, korrelierten Messdaten sind derzeit mit anderen Verfahren nicht zu erzeugen, und machen die spontane Raman-Streuung zu einem wichtigen Werkzeug für die genaue Charakterisierung turbulenter Flammen.

Um einen Überblick über die verschiedenen Flammenbereiche zu bekommen, sind in den folgenden Bildern Mittelwerte und die auf den lokalen Mittelwert bezogenen RMS-Werte dargestellt. Die x-Achse stellt hier die axiale Koordinate und die y-Achse die radiale Koordinate dar.

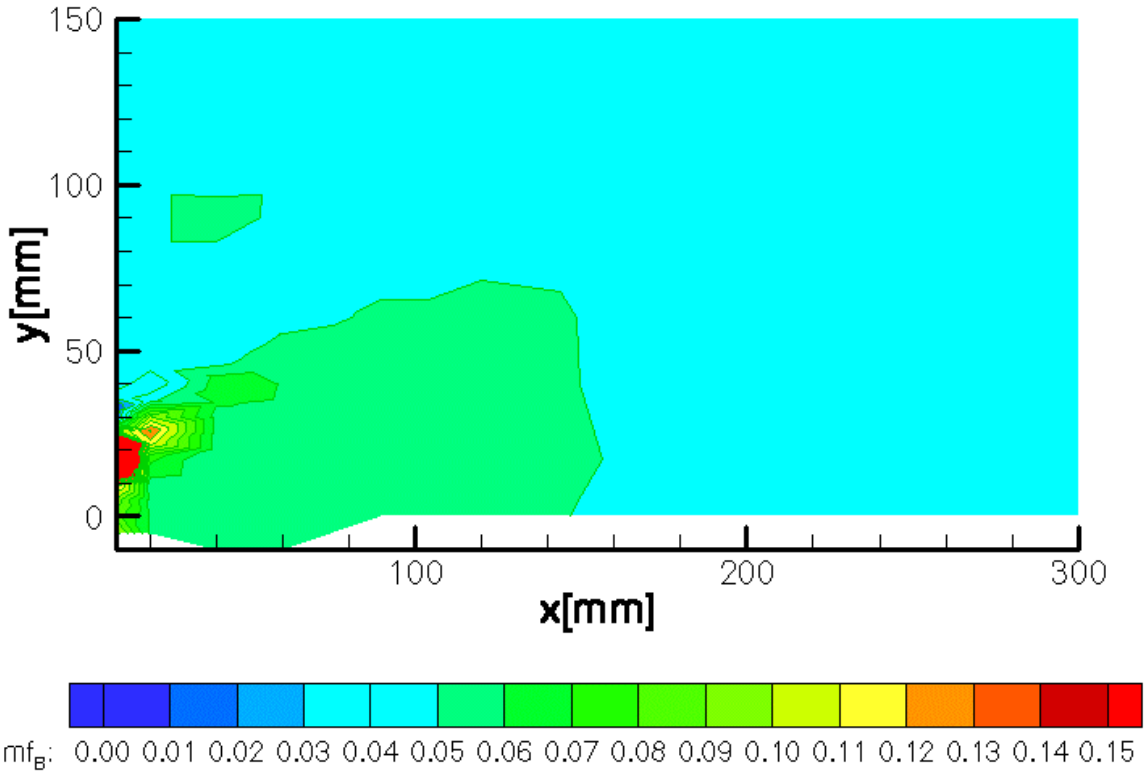

Bild 6.1.2 gemessene Verteilung des Mischungsbruchs (zeitgemittelte Werte)

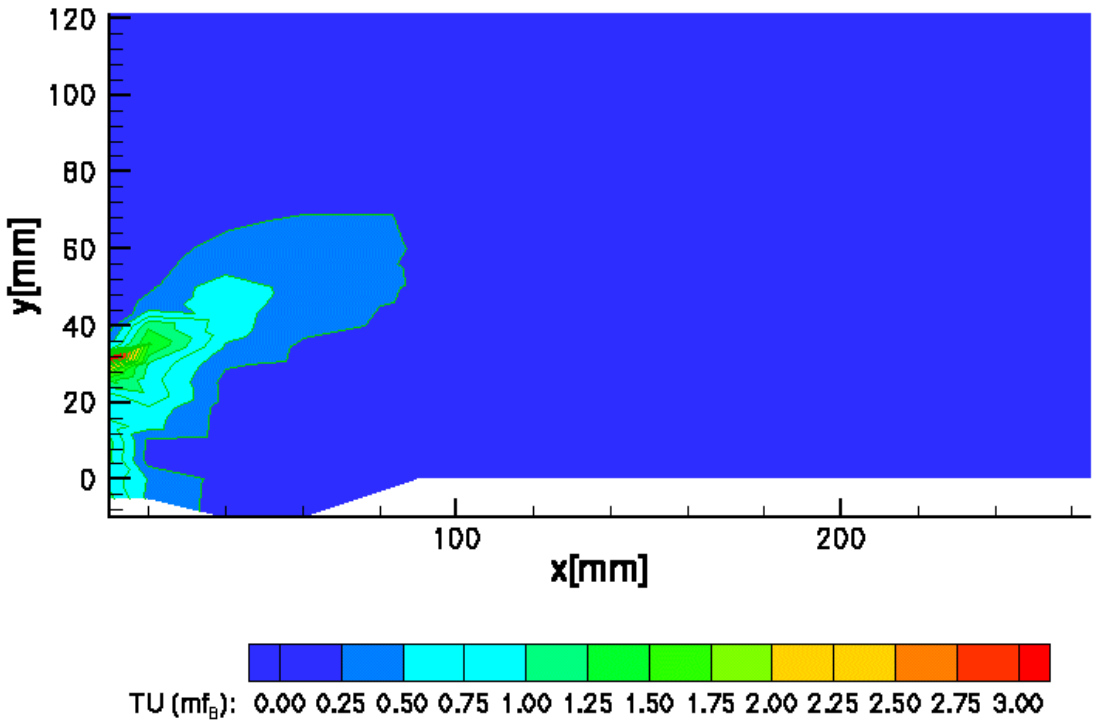

Bild 6.1.3. gemessene Verteilung der relativen Mischungsbruch-Fluktuation (RMS-Werte bezogen auf Mittelwerte)

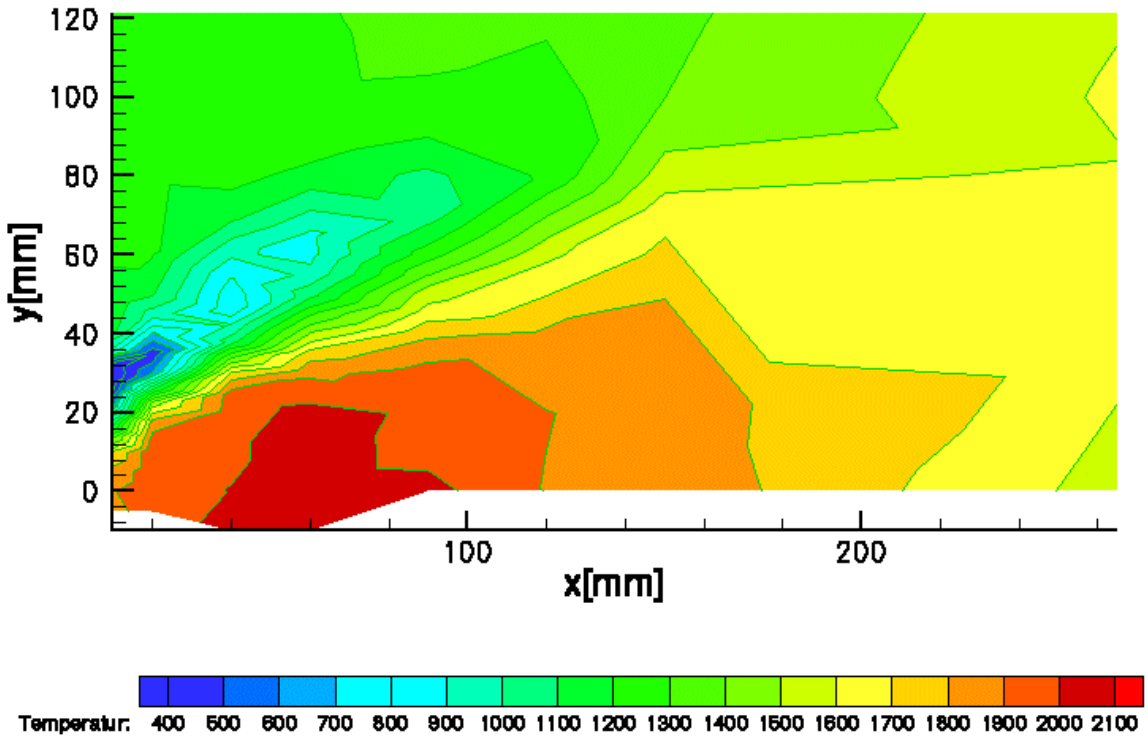

Bild 6.1.4 gemessene Verteilung der Temperatur (zeitgemittelte Werte)

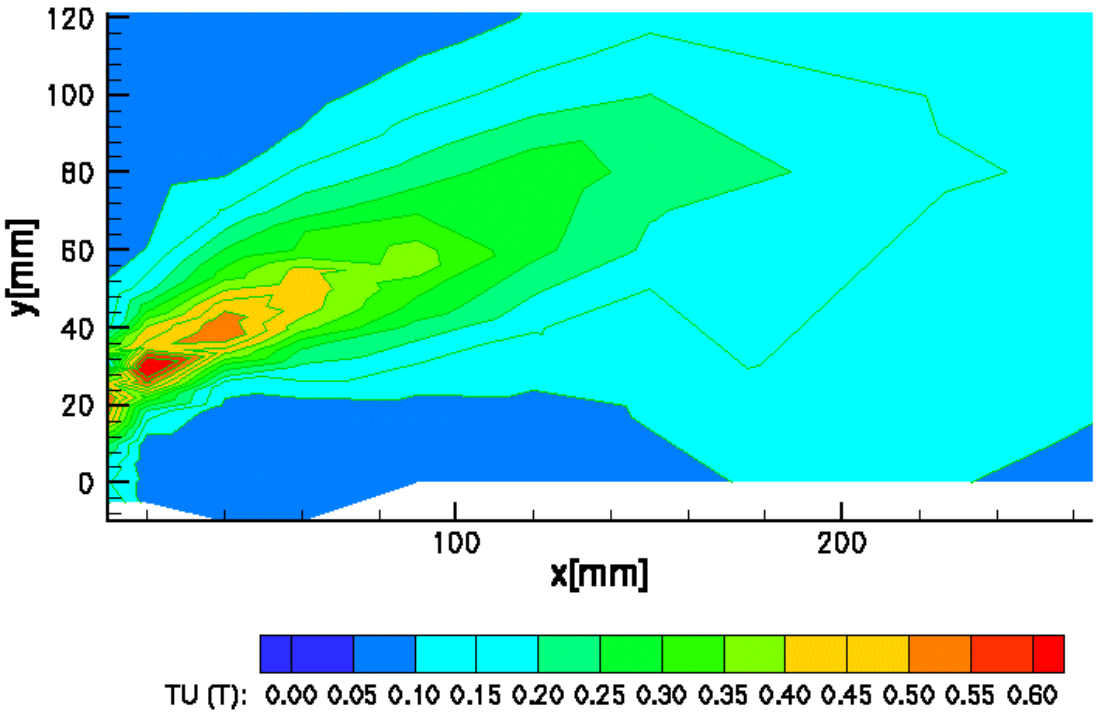

Bild 6.1.5 gemessene Verteilung der relativen Temperatur-Fluktuation (RMS-Werte bezogen auf Mittelwerte)

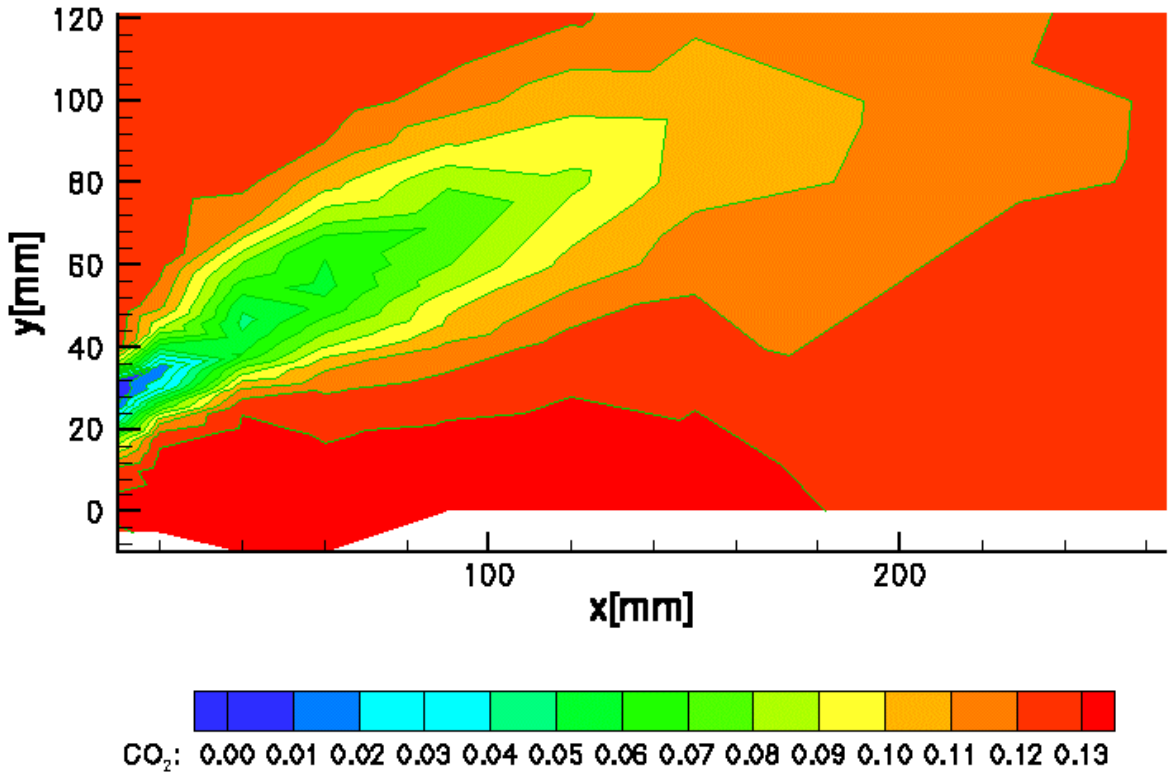

Bild 6.1.6 gemessene Verteilung der Massenkonzentration des Kohlendioxids (zeitgemittelte Werte)

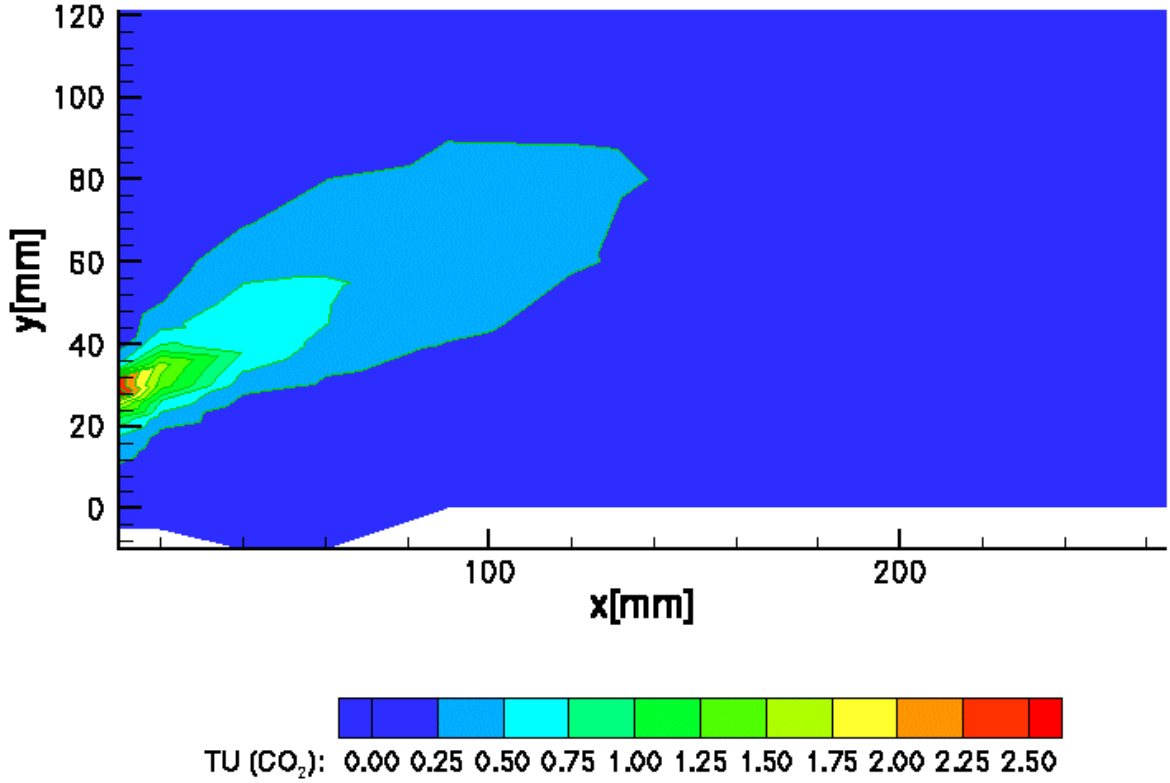

Bild 6.1.7 gemessene Verteilung der relativen Fluktuation der Massenkonzentration des Kohlendioxids (RMS-Werte bezogen auf Mittelwerte)

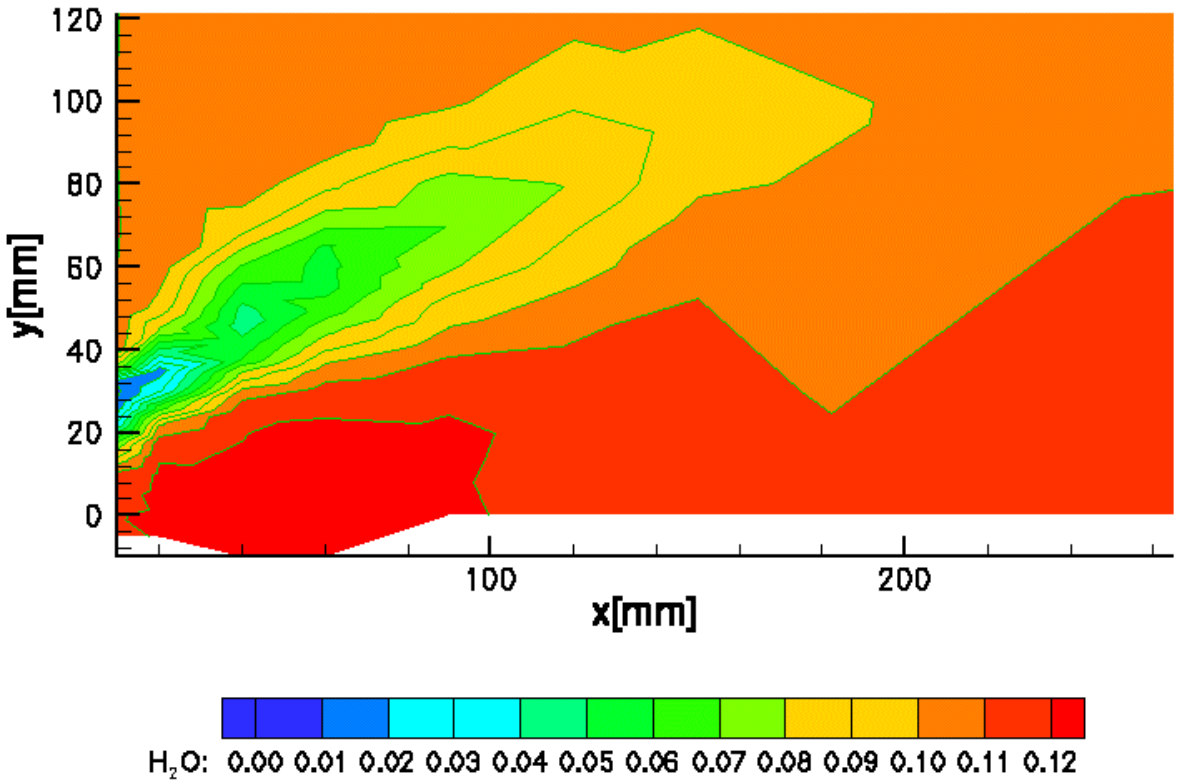

Bild 6.1.8 gemessene Verteilung der Massenkonzentration des Wasserdampfs (zeitgemittelte Werte)

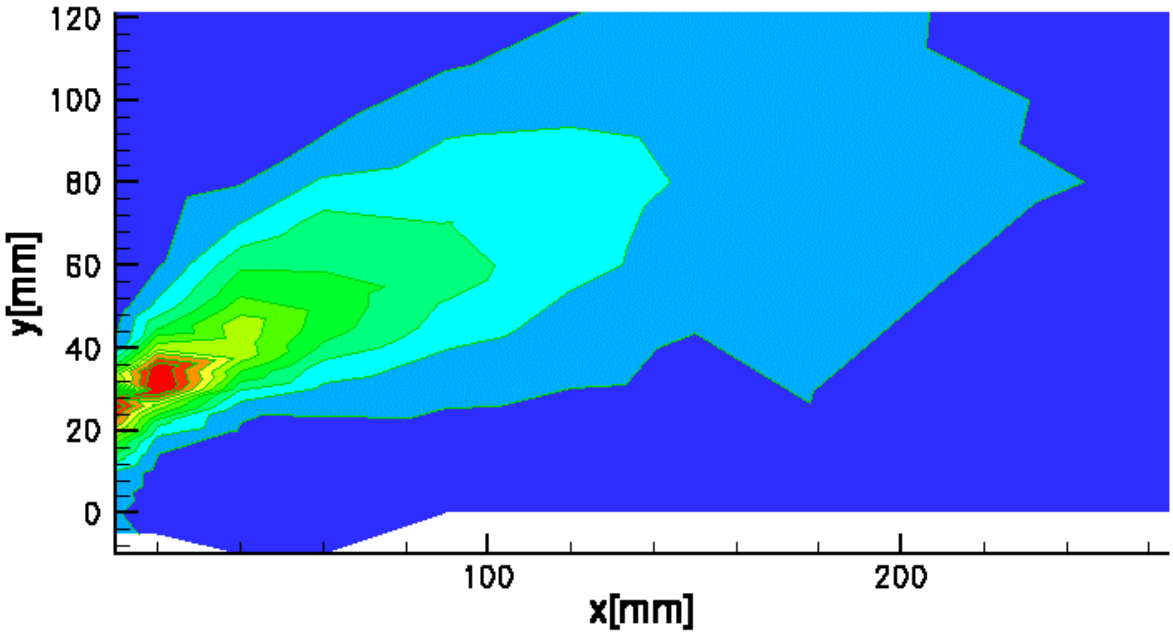

Bild 6.1.9 gemessene Verteilung der relativen Fluktuation der Massenkonzentration des Wasserdampfs (RMS-Werte bezogen auf Mittelwerte)

Die Mischungsbruch-Verteilung zeigt, dass die eingestellte mittlere Luftzahl von λ = 1.2 bereits bei x=80mm erreicht wird. Die Strömung weist die typischen Merkmale einer eingeschlossenen Drallflamme auf:
Zwei Rezirkulationsgebiete kennzeichnen die Strömung. Im zentralen Rezirkulationsgebiet findet bei hohen Aufenthaltszeiten annähernd stöchiometrische Verbrennung statt. Da die Luftzufuhr durch den äußeren Ringspalt stattfindet, mischen sich in der äußeren Rezirkulationszone Verbrennungsprodukte mit kalter Verbrennungsluft.
Bild 6.1.10 zeigt die Temperaturen der Einzelpulsmessungen bei x=10mm in Abhängigkeit des Radius [TECFLAM, 1999]. Neben den Messungen sind auch die Ergebnisse von Rechnungen eingetragen, die von J.Y. Chen durchgeführt wurden. Hierbei handelt es sich um Flamelet-Rechnungen für zwei verschiedene Streckungsraten, die Aufschluss darüber geben sollen, ob die Abweichungen der Messungen vom Gleichgewichtszustand auf lokale Flammenstreckungen zurückzuführen sind.

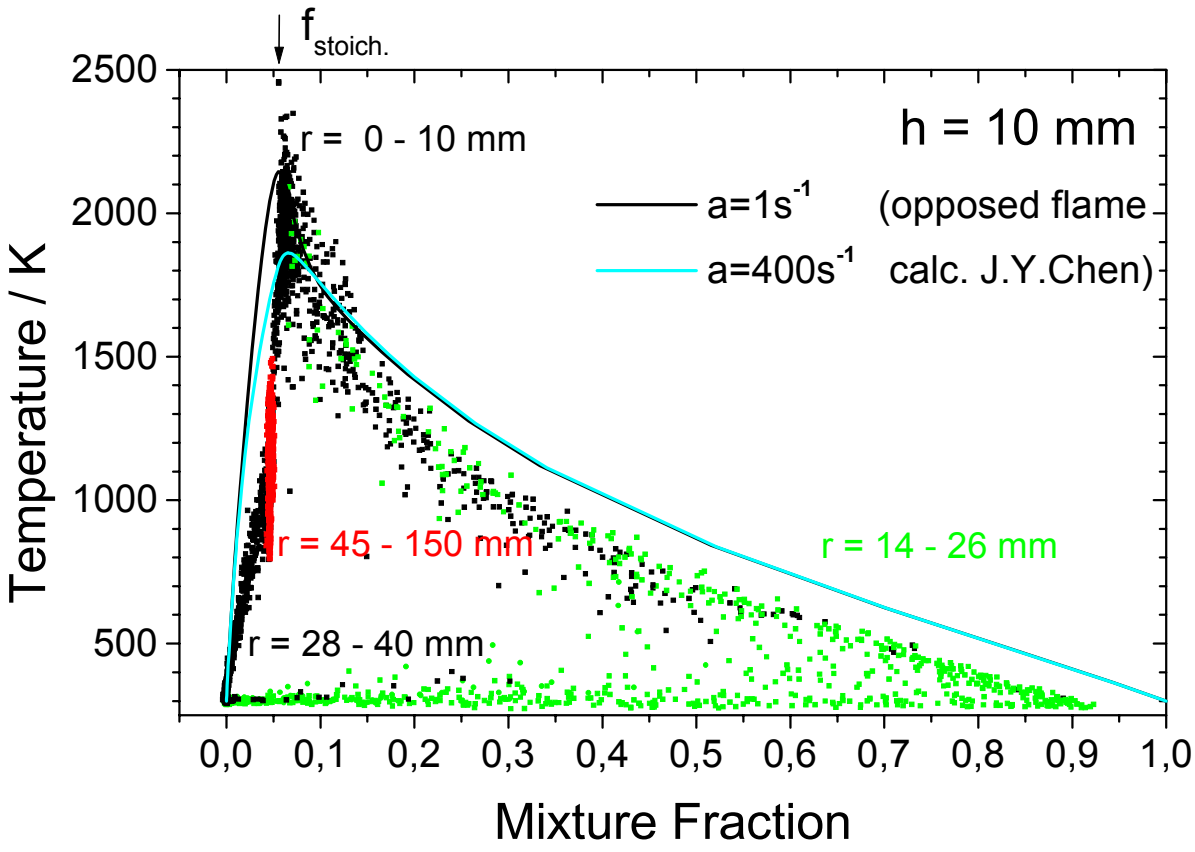

Bild 6.1.10 Verteilung der Temperaturen bei x=10mm für verschiedene Radien [TECFLAM, 1999]

Bei r<10mm (innere Rückströmung) liegt die gemessene Temperatur im Bereich adiabater Gleichgewichtsverbrennung. Dies deutet darauf hin, dass hier genügend Zeit zum Erreichen des chemischen Gleichgewichts zur Verfügung steht und die Strahlungsverluste gering sind.
Anders sieht dies im Bereich von r=14mm bis r=26mm aus. Hier gibt es neben Gleichgewichtslösungen auch Punkte, die darauf schließen lassen, dass hier zeitweise durch hohe

Scherung der Strömung die Streckgrenze der Flamme erreicht ist oder durch kalte Luft Quenching stattfindet.
Zwischen r=28mm und r=40mm liegt die äußere Verbrennungszone. Dieser Bereich ist geprägt durch die Mischung von heißen Reaktionsprodukten mit Verbrennungsluft. Zu erkennen sind auch Wärmeverluste, die wahrscheinlich auf Turbulenzeffekte oder auf die Kühlungwirkung der nahegelegenen Wand zurückzuführen sind.
Der Randbereich bei r=45mm zeichnet sich durch geringe Turbulenz und nahezu konstanten Mischungsbruch aus. Hier tritt trotz nahezu konstantem Mischungsbruch ein gemessener Temperaturbereich von etwa 800 K bis 1500 K auf. Dies deutet auf Wärmeverluste hin, die entweder auf Strahlungsverluste oder auf die stark gekühlte Brennkammerwand (T_{Wand} ca. 75°C) zurückzuführen sind.

Die höchsten Fluktuationen aller Größen liegen im Bereich der einströmenden Verbrennungsluft. Bild 6.1.11 zeigt einen *‚scattered-plot‘* an einem repräsentativen Punkt P_1, in dem die Fluktuationen aller Größen sehr hoch sind. Aufgetragen sind die gemessenen Massenanteile von CO_2 und H_2O in Abhängigkeit vom Mischungsbruch. Der Messort befindet sich bei x = 20 mm und r = 30 mm.

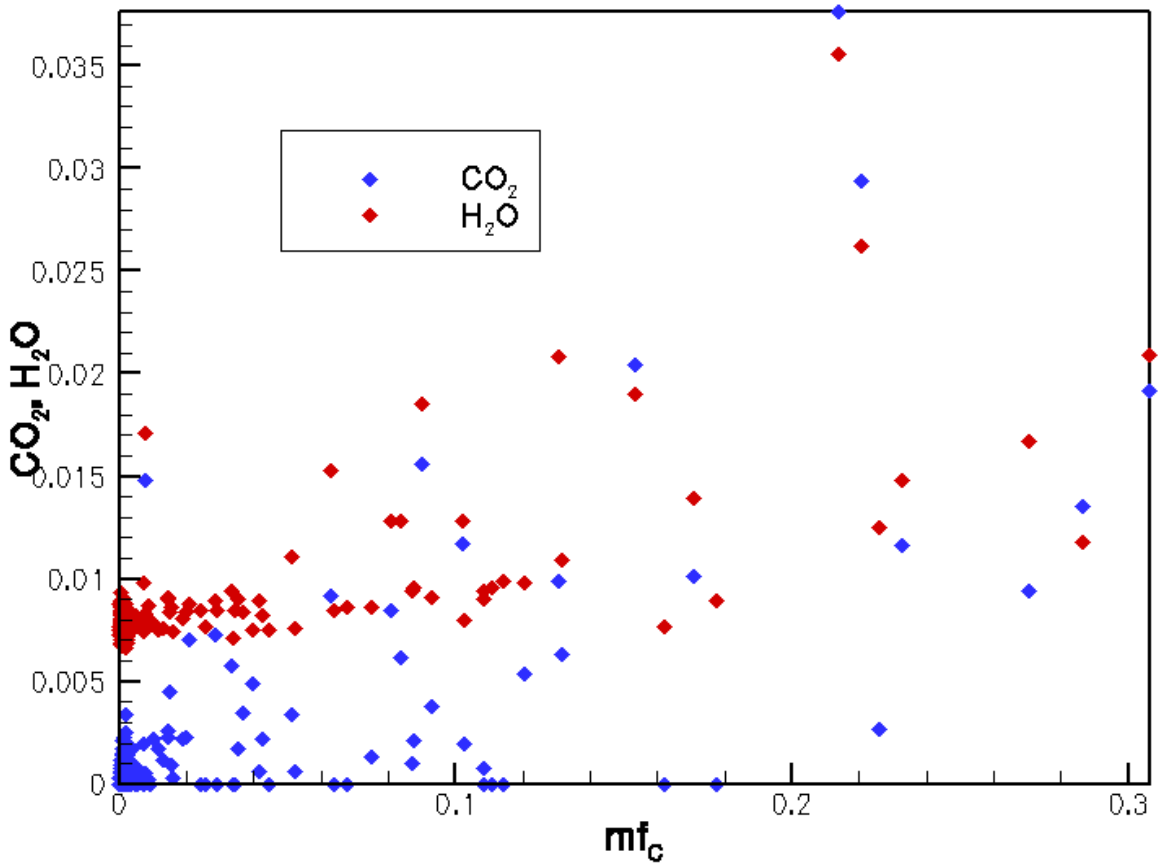

Bild 6.1.11 Einzelpulsmessungen bei x = 20 mm und r = 30 mm

Der Mischungsbruch ist sehr großen Schwankungen unterlegen. Jedoch scheinen diese unabhängig von den Fluktuationen von CO_2 und H_2O zu sein. Wenn CO_2 und H_2O nicht eindeutig an den Mischungsbruch koppeln, müssen Nichtgleichgewichtseffekte eine Rolle spielen.

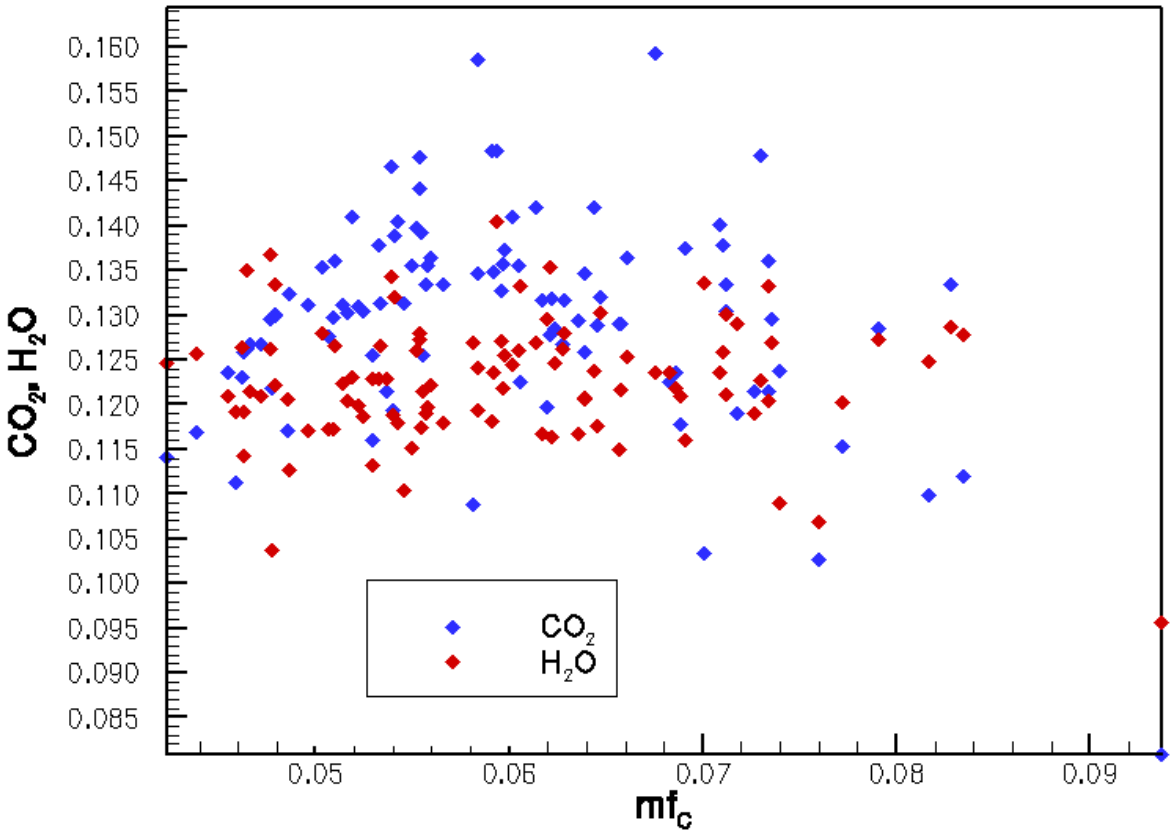

Bild 6.1.12 Einzelpulsmessungen bei x = 60 mm und r =0 mm

Bild 6.1.12 zeigt die gleiche Auftragung für einem Punkt geringerer Fluktuation im inneren Rezirkulationsgebiet. Auch hier sind Nichtgleichgewichtseffekte zu erkennen. Anders sieht es bei x = 300mm und r = 0 mm aus. Bild 6.1.13 zeigt die gleiche Auftragung wie in Bild 6.1.12 an dieser Stelle.

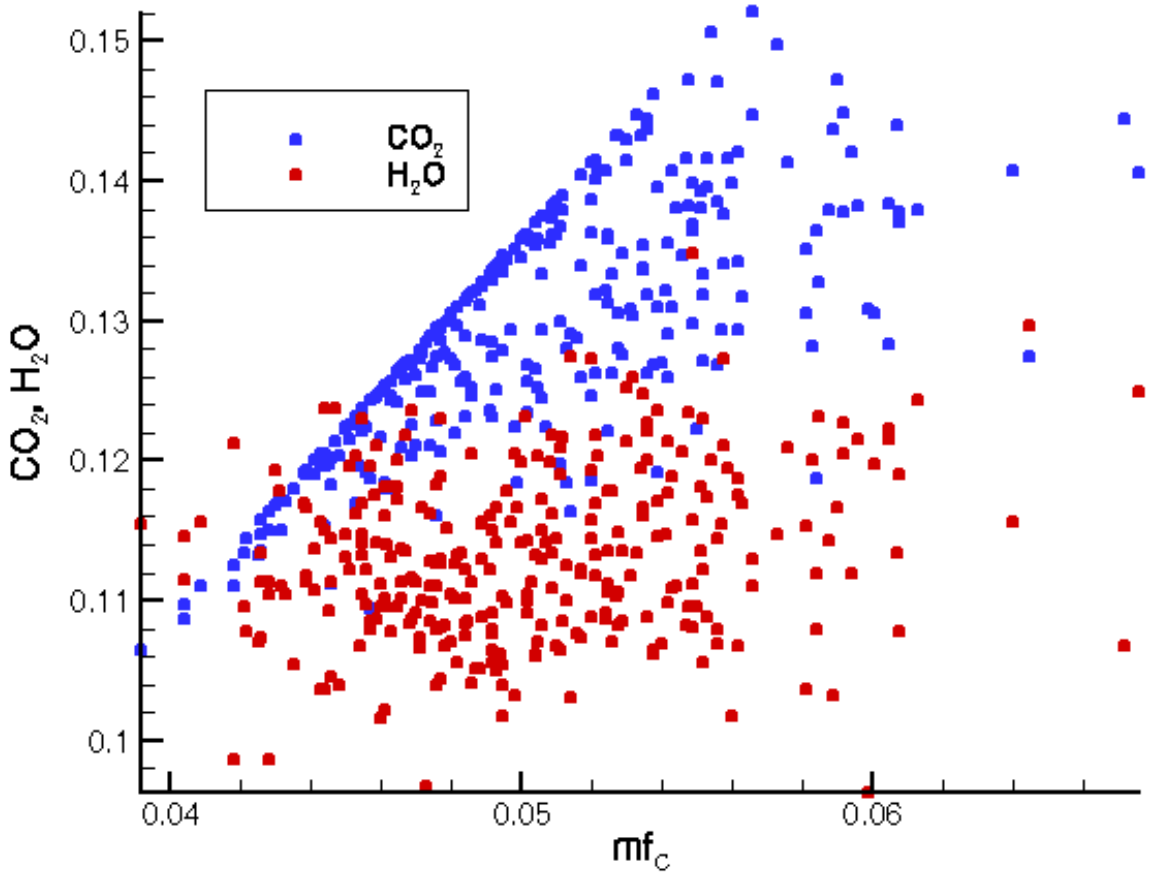

Bild 6.1.12 Einzelpulsmessungen bei x = 300 mm und r =0 mm

Insbesondere bei CO_2 ist eine Abhängigkeit vom Mischungsbruch zu erkennen. Ob nun zumindest eine schwache Korrelation von CO_2 und H_2O mit dem Mischungsbruch vorliegt, oder ob sich CO_2 und H_2O eher statistisch unabhängig von der Mischung verhalten, zeigen die folgenden Korrelationsbilder. Der Korrelationskoeffizient wurde nach Gleichung (2.63) gebildet.
In Bild 6.1.13 bis Bild 6.1.15 ist die räumliche Verteilung des Korrelationskoeffizienten zwischen Mischungsbruch und CO_2 und H_2O aufgetragen. Strebt er gegen eins, so gibt es einen direkten Zusammenhang zwischen den Variablen.

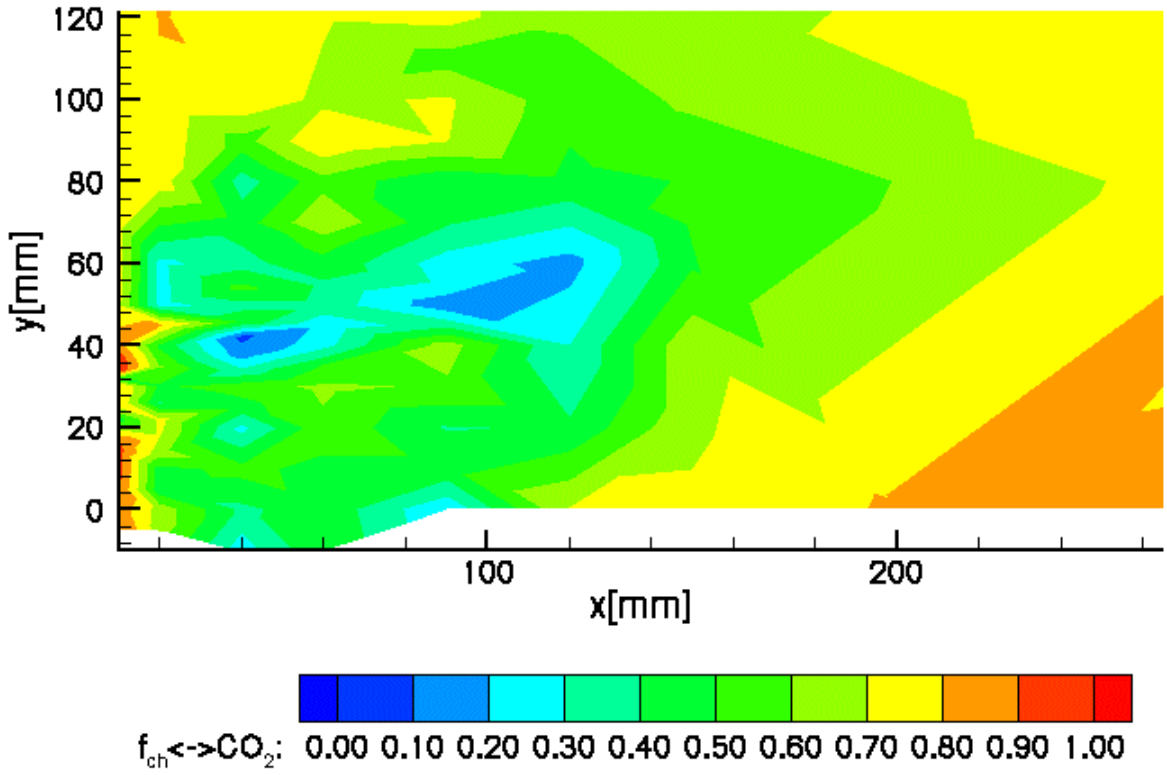

Bild 6.1.13 Korrelationskoeffizient zwischen Mischungsbruch und CO_2

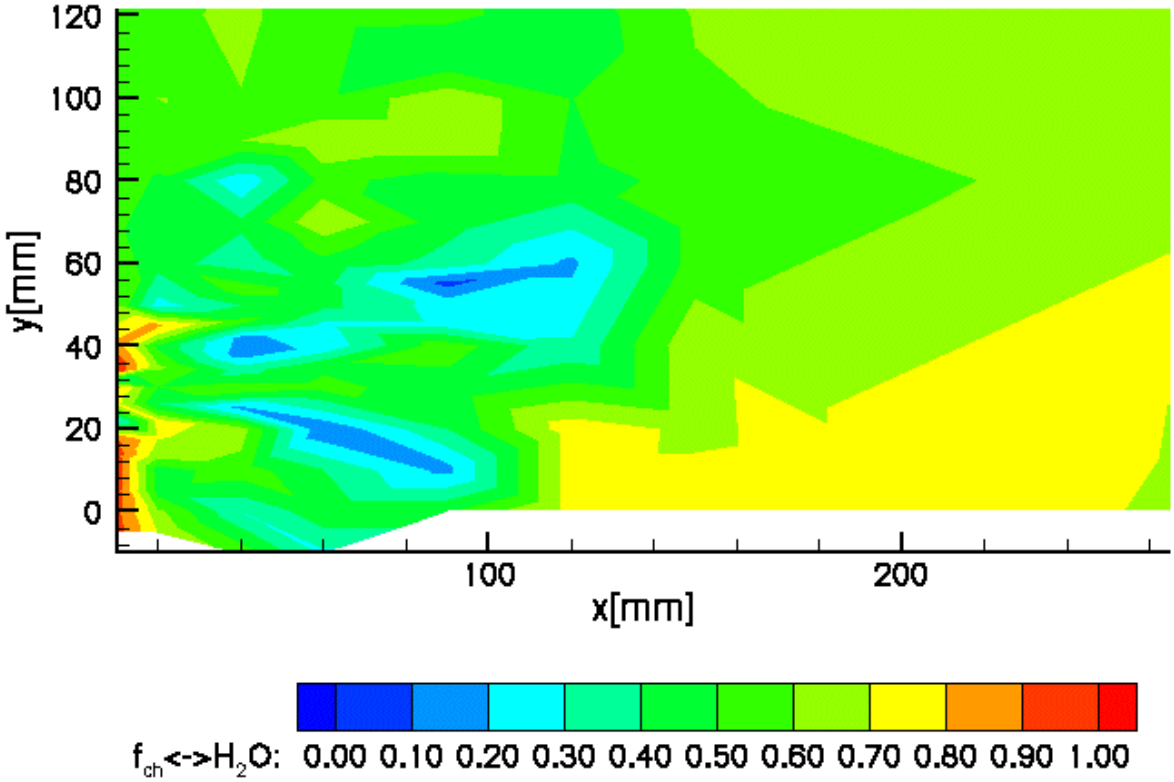

Bild 6.1.14 Korrelationskoeffizient zwischen Mischungsbruch und H_2O

Die Korrelation zwischen Mischungsbruch und CO_2 und die zwischen Mischungsbruch und H_2O sehen sich sehr ähnlich. In beiden Fällen sinkt die statistische Abhängigkeit in Einströmbereich auf fast Null. Das Maximum der Korrelation tritt erst stromabwärts der Flamme bei x>120mm auf, was auf das Ende der Verbrennung zurückzuführen ist. Insgesamt herrscht im ganzen Gebiet nur eine geringe Korrelation. Dies lässt vermuten, dass die Annahme der statistischen Unabhängigkeit in weiten Bereichen als sinnvoll angesehen werden kann. An späterer Stelle werden Lösungen mit und ohne der Annahme der statistischen Unabhängigkeit miteinander verglichen werden.

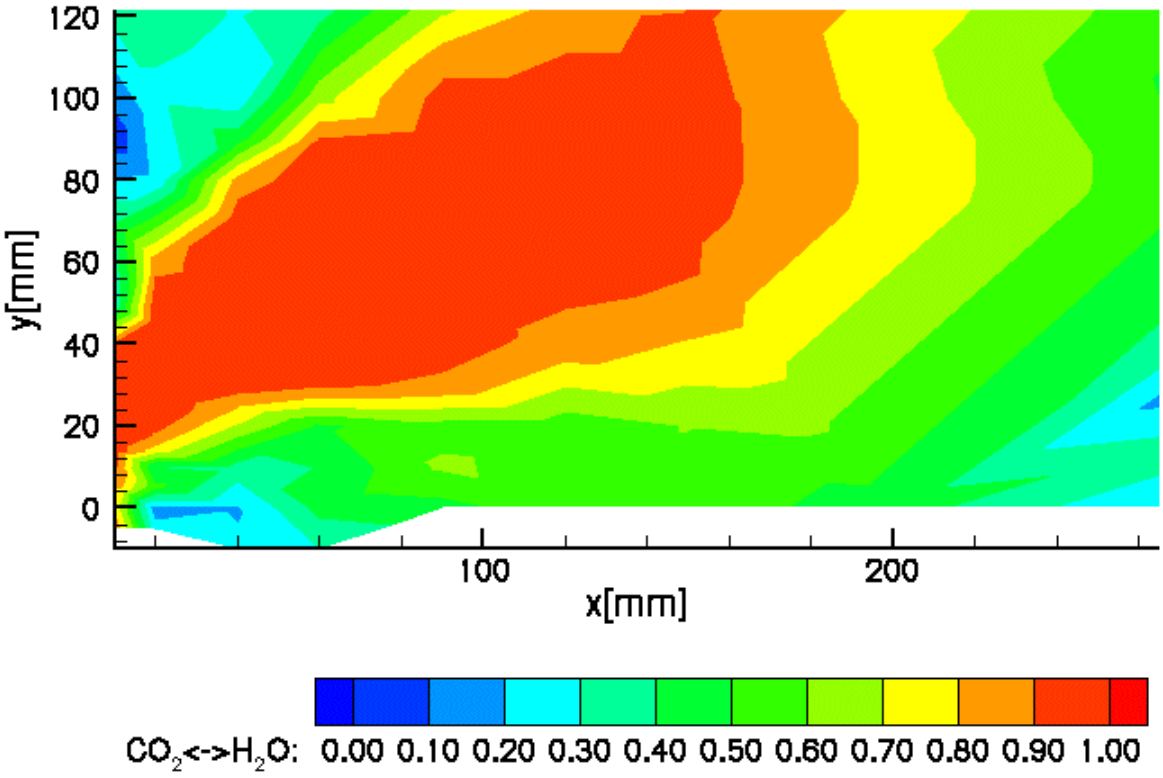

Bild 6.1.15 Korrelationskoeffizient zwischen CO_2 und H_2O

Etwas anders sieht die Korrelation zwischen CO_2 und H_2O aus. Hier ist eine starke Abhängigkeit der Variablen im Hauptstrahlbereich zu erkennen. Dies lässt darauf schließen, dass sich die Reaktion nahe am Gleichgewichtszustand bewegt, da dann der Reaktionsfortschritt der CO_2- und H_2O-bildenden Reaktionen nahezu identische verläuft. In diesem Fall ist es egal, ob die sich Lösung des chemischen Systems aus einer Gleichgewichtsrechnung oder aus einer ILDM-Rechnung ergibt. Beide Berechnungsmethoden sollten das gleiche Ergebnis liefern. Den direkten Zusammenhang zwischen den beiden Fortschrittsvariablen verdeutlicht Bild 6.1.16, in der die gemessenen CO_2-Konzentrationen gegenüber den H_2O-Konzentrationen an einer beispielhaften Stelle aufgetragen sind.

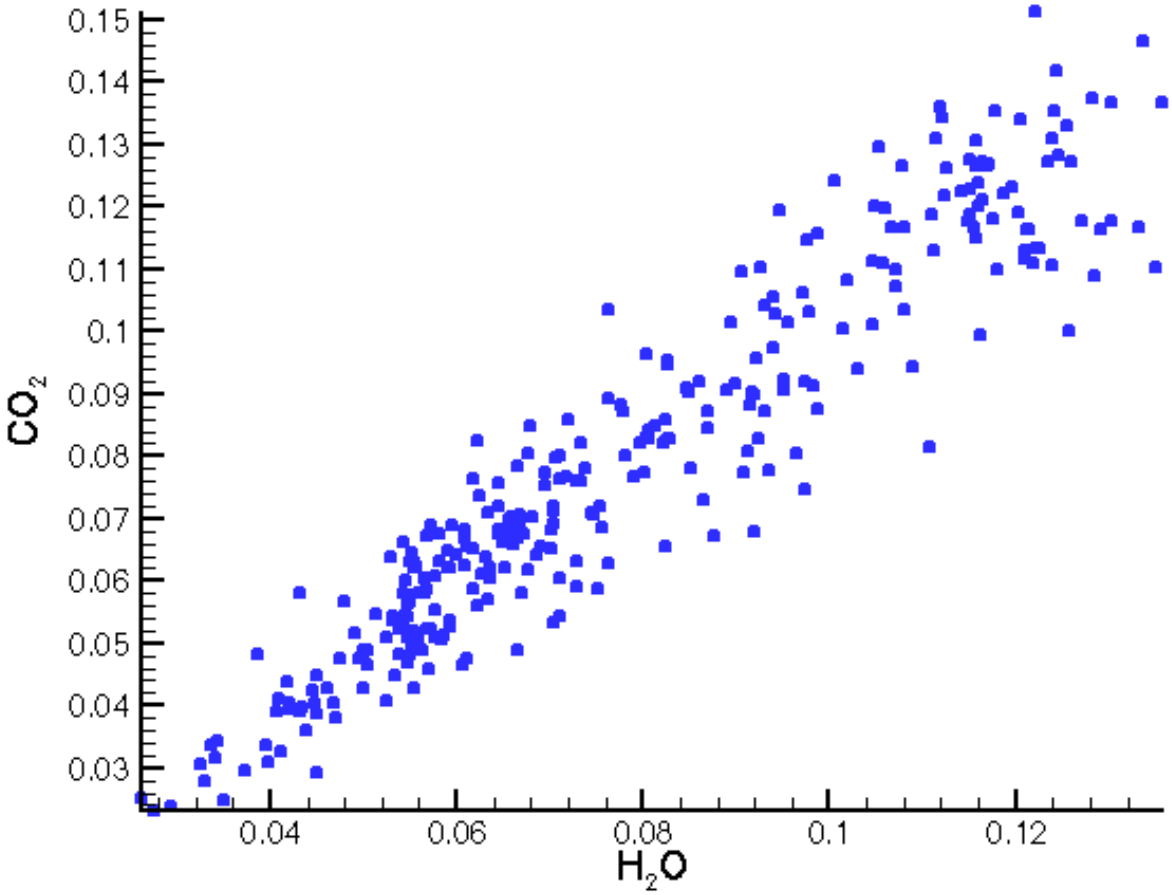

Bild 6.1.16 Einzelpulsmessungen bei x = 90 mm und r =30 mm

6.2 Vergleich der gemessenen PDF's mit berechneten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen

Die Strömungslösung liefert nur zwei Parameter für die Bestimmungsgleichung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion. Dies begrenzt die Auswahl der möglichen PDF-Formen. Es soll nun, wie im vorangegangenen Kapitel, untersucht werden, welche angenommene PDF die Form der gemessenen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion am besten approximiert. Zur Auswahl stehen wiederum Delta- und Gauß-Funktion, wobei die Hoffnung besteht, an möglichst vielen Messorten mit der schnell zu berechnenden Delta-PDF gute Ergebnisse zu erzielen, da hier erhebliches Potential zur Einsparung von Rechenzeit liegt (vgl. Kap.5). Es werden hier nur CO_2 und H_2O untersucht werden, da dies die gängigen Fortschrittsvariablen in den ILDM-Tabellen sind.

In Bild 6.2.1 ist die gemessene PDF des Mischungsbruchs und daraus resultierenden Gauß- und Delta-PDF's bei x=20mm und r=30mm dargestellt. Die Mischungsbruch-Verteilung stellt sich sehr breit dar. Die Gauß-Funktion nähert die gemessene PDF in weiten Bereichen gut an, unterschätzt aber im Bereich sehr geringen Mischungsbruchs die gemessene Verteilung. Ob die Integration über die Delta-PDF auch das gleiche Resultat liefert, kann nur numerisch untersucht werden. Das Maximum der gemessenen Verteilung liegt in kalten Berei-

chen, wobei das Maximum der Gauß-Verteilung dem stöchiometrischen Punkt deutlich näher ist. Die Delta-Funktion besitzt einen Peak nahe dem Maximum der gemessenen Verteilung. Dies ist ein Beispiel für einen Fall, in dem die Delta-PDF trotz der geringen Diskretisierung ihres Wertebereiches in diesem Punkt bessere Lösungen liefern könnte als die Gauß-Funktion. Welche der beiden Funktionen hier die bessere ist, kann aber nur an Hand eines numerischen Tests entschieden werden.

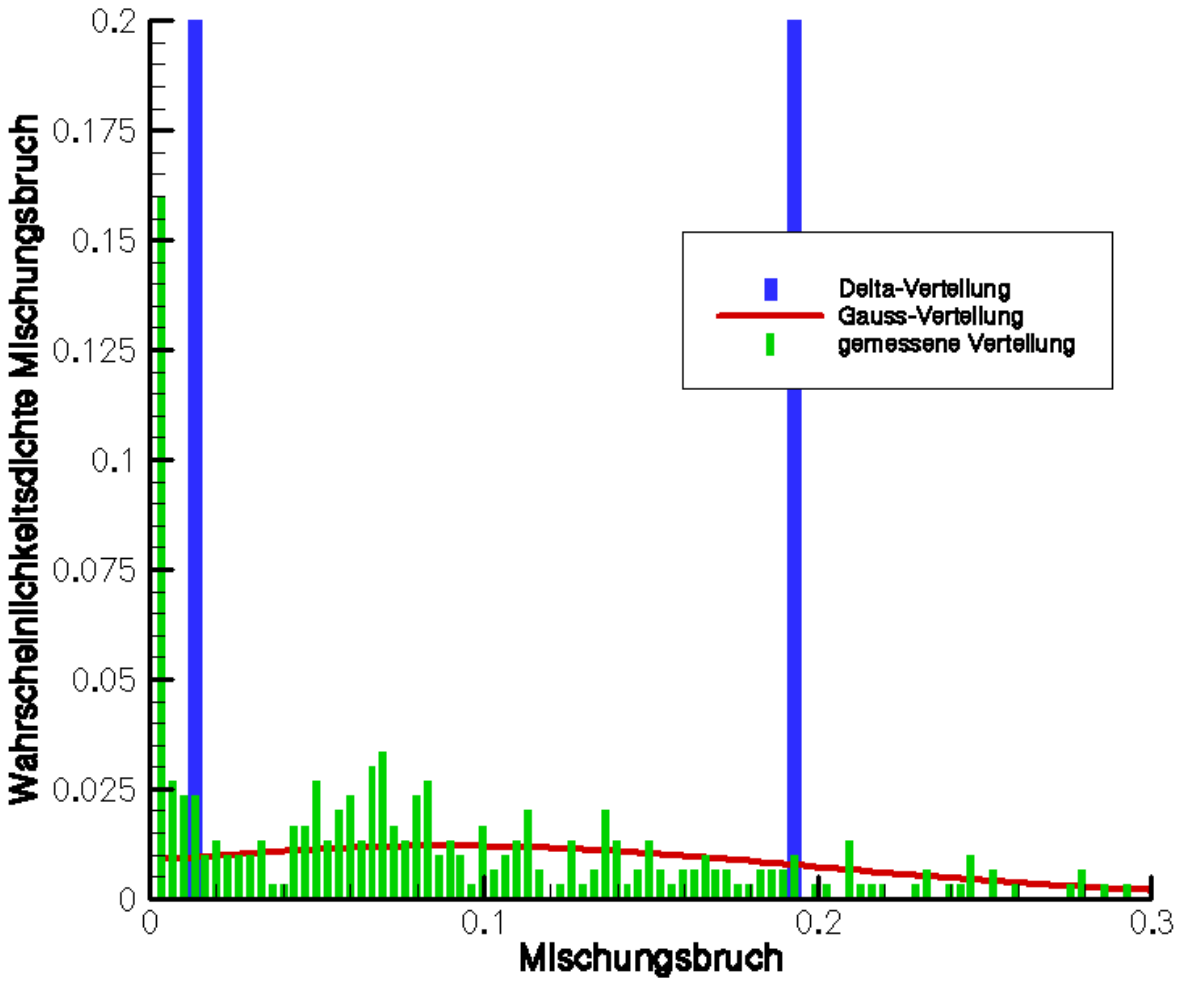

Bild 6.2.1 Mischungsbruchverteilung bei x=20mm und r=30mm

Beim zweiten betrachteten Punkt P_2 handelt es sich wieder um den Punkt bei x = 60mm und r=10mm. Er liegt im zentralen Rezirkulationsgebiet. Für diesen Punkt liefert die Gauß-Verteilung eine gute Approximation für alle Fortschrittsvariablen. Hier wird im numerischen Experiment abzuklären sein, ob die Delta-Funktion geeignet ist, die Gauß-Funktion zu ersetzen. Diese Untersuchung wird an späterer Stelle folgen.

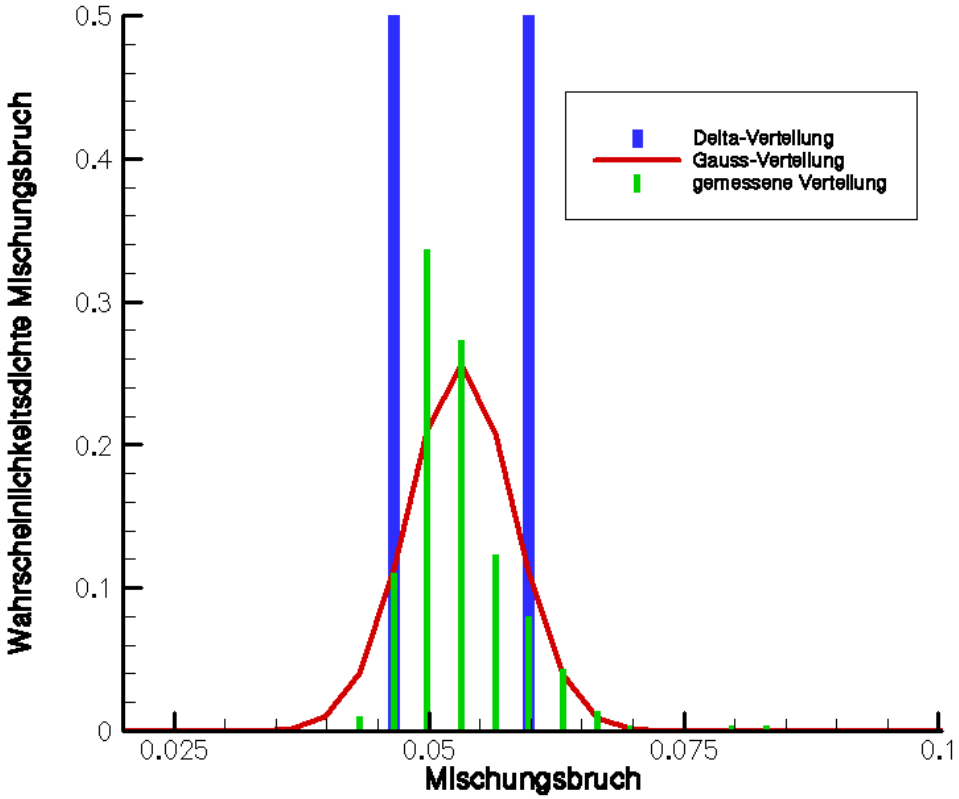

Bild 6.2.2 Mischungsbruch-Verteilung Punkt bei x = 60mm und r=10mm

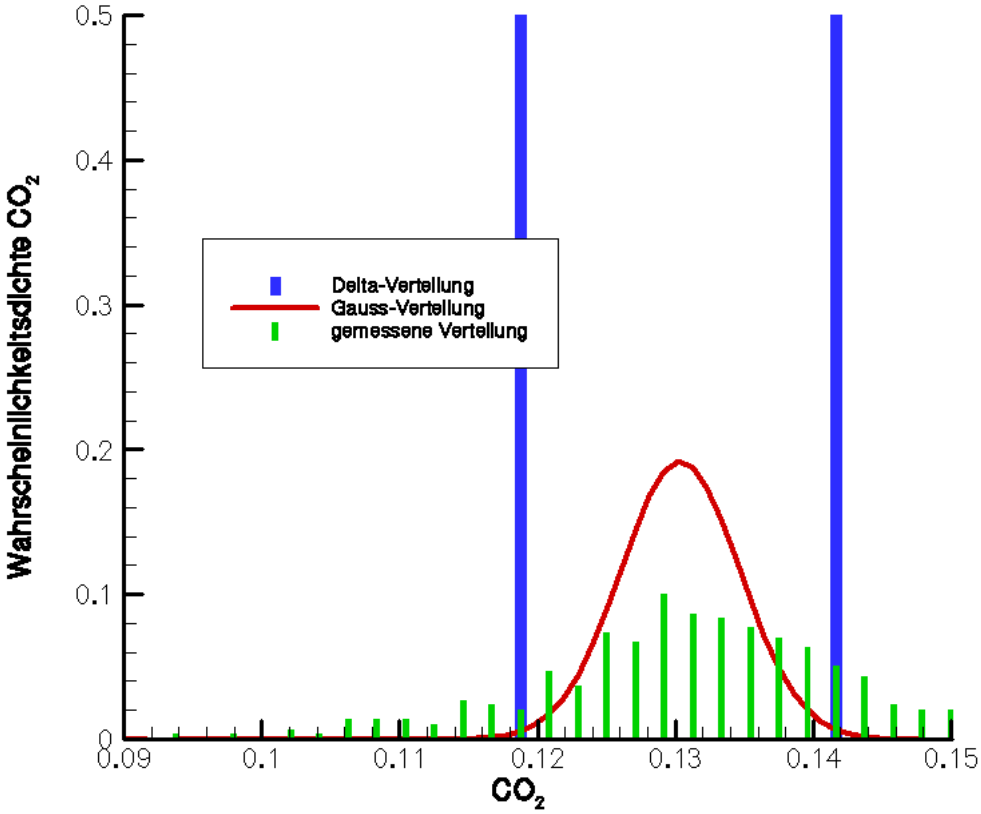

Bild 6.2.3 CO_2-Verteilung Punkt bei x = 60mm und r=10mm

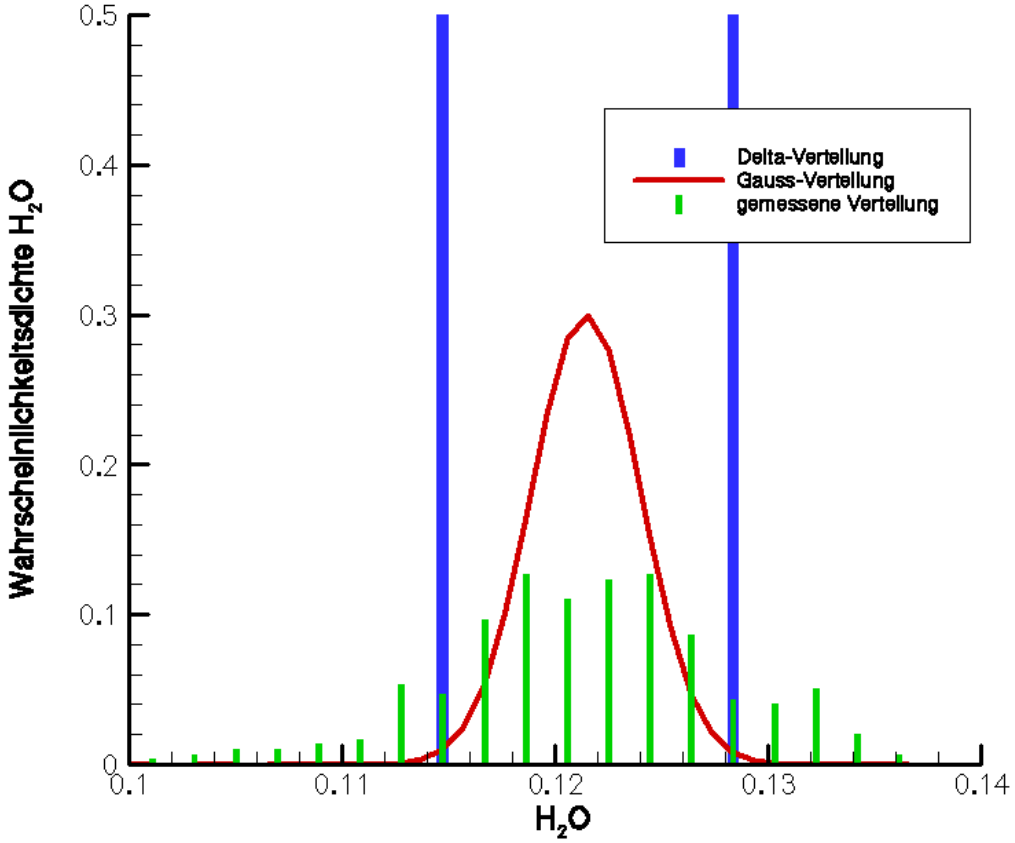

Bild 6.2.4 H_2O-Verteilung Punkt bei x = 60mm und r=10mm

Die Bilder 6.2.3 und 6.2.4 zeigen die gleiche Auftragung für die beiden Fortschrittsvariablen CO_2 und H_2O an einem Punkt im inneren Rezirkulationsgebiet. Hier ist die Übereinstimmung mit der Gauß-Verteilung etwas schlechter als beim Mischungsbruch. Auch hier wird nur das numerische Experiment zeigen, in wie fern im Falle der Wichtung der Lösung eines stark nicht-linearen chemischen Systems mit den angenommenen PDF's adäquate Lösungen bringt.
Zusammenfassend ergibt sich, dass die Gauß-Funktion immer dann die gemessenen PDF's gut beschreibt, wenn die gemessene PDF annähernd symmetrisch um ihren Mittelwert liegt. Bei CO_2 und H_2O ist dies insbesondere dann nicht mehr der Fall, wenn es sich um Gebiete nahe der Einströmung handelt. Durch starke Turbulenzen in Scherschichten entstehen immer wieder Zustände, in denen das Gemisch nicht zünden kann, wodurch auch keine Produkte wie CO_2 und H_2O gebildet werden können. Durch Verlöscheffekte und Zündinstabilitäten herrscht dann ein Übergewicht hin zu geringen Konzentrationen der Reaktionsprodukte, welches eine Asymmetrie der zugehörigen PDF verursacht. Symmetrische PDF's entstehen vorzugsweise dann, wenn die Schwankungen durch Turbulenzeffekte begründet sind.

Im folgenden numerischen Experiment soll beispielhaft untersucht werden, in welchen Bereichen welche PDF-Form die besten Ergebnisse liefert. Hierzu wird, ähnlich wie in Kapitel 5.3 eine Test-Funktion benötigt, welche den funktionalen Zusammenhang zwischen Fortschrittsvariablen und Verbrennungslösung darstellt. Bei Mischungsbruch, CO_2 und H_2O ist dies eine dreidimensionale adiabate ILDM-Tabelle. Die resultierende Temperatur ist in Bild 6.2.5 in Abhängigkeit der drei Variablen dargestellt.

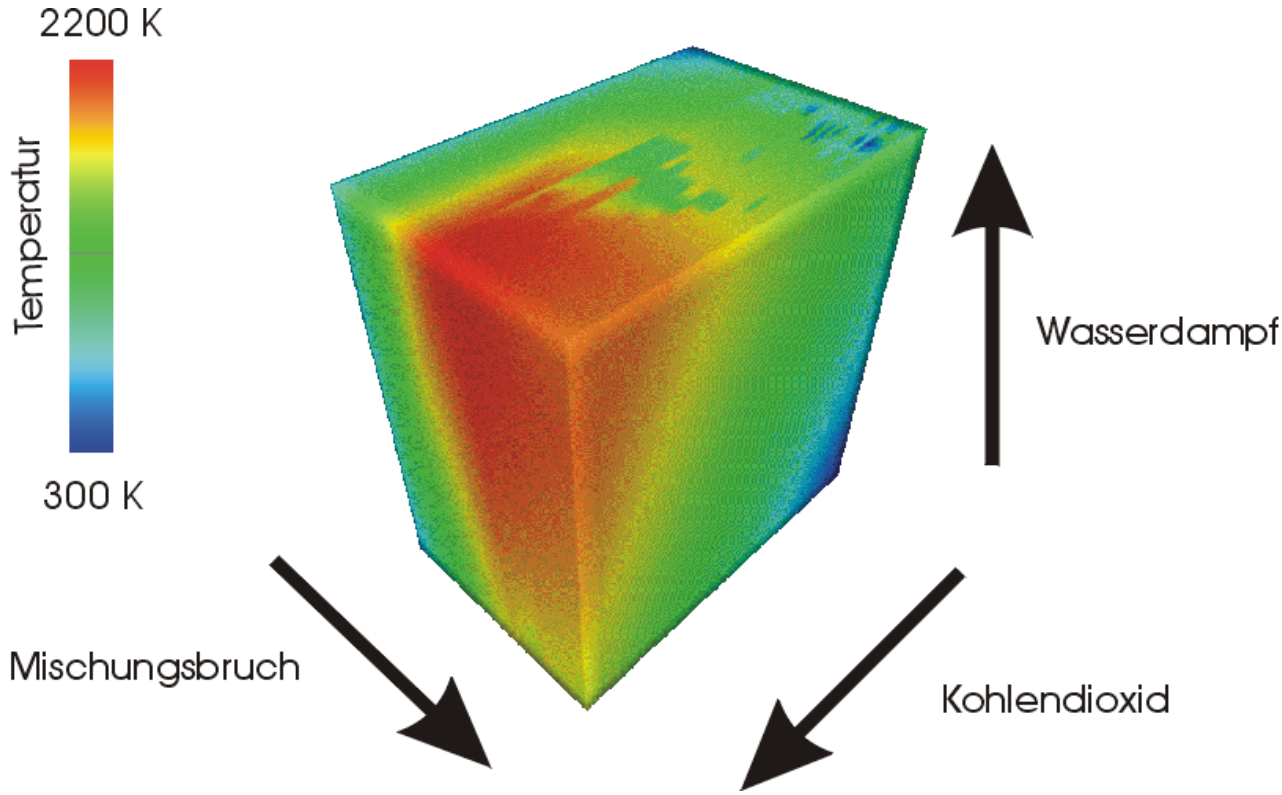

Bild 6.2.5 Temperaturverteilung der ILDM-Lösung

Die maximalen Temperaturen werden im Bereich des stöchiometrischen Mischungsbruchs bei maximalen CO_2 und H_2O erreicht. Mit zunehmender Entfernung von der maximalen CO_2- oder H_2O-Konzentration weicht der Zustand vom chemischen Gleichgewicht ab, was zu geringeren Temperaturen führt.
An Hand dieser Tabelle ist es auch möglich, Zugang zu Größen zu bekommen, die im Experiment nicht bestimmt werden können. So liefert die Tabelle beispielsweise für CO_2 und H_2O die Reaktionsraten in Abhängigkeit von den Eingabeparametern. CO_2 und H_2O selbst sind messtechnisch an Hand von Raman-Messungen erfassbar. Ihre Reaktionsraten können dann aus den gemessenen Werten numerisch bestimmt werden. Die Bilder 6.2.6 und 6.2.7 zeigen die Reaktionsraten der beiden Fortschrittvariablen. Für die stark negativen Werte in Bild 6.2.6 wurde keine physikalische Begründung gefunden. Sie sind wahrscheinlich auf numerische Fehlstellen in der ILDM-Tabelle zurückzuführen.

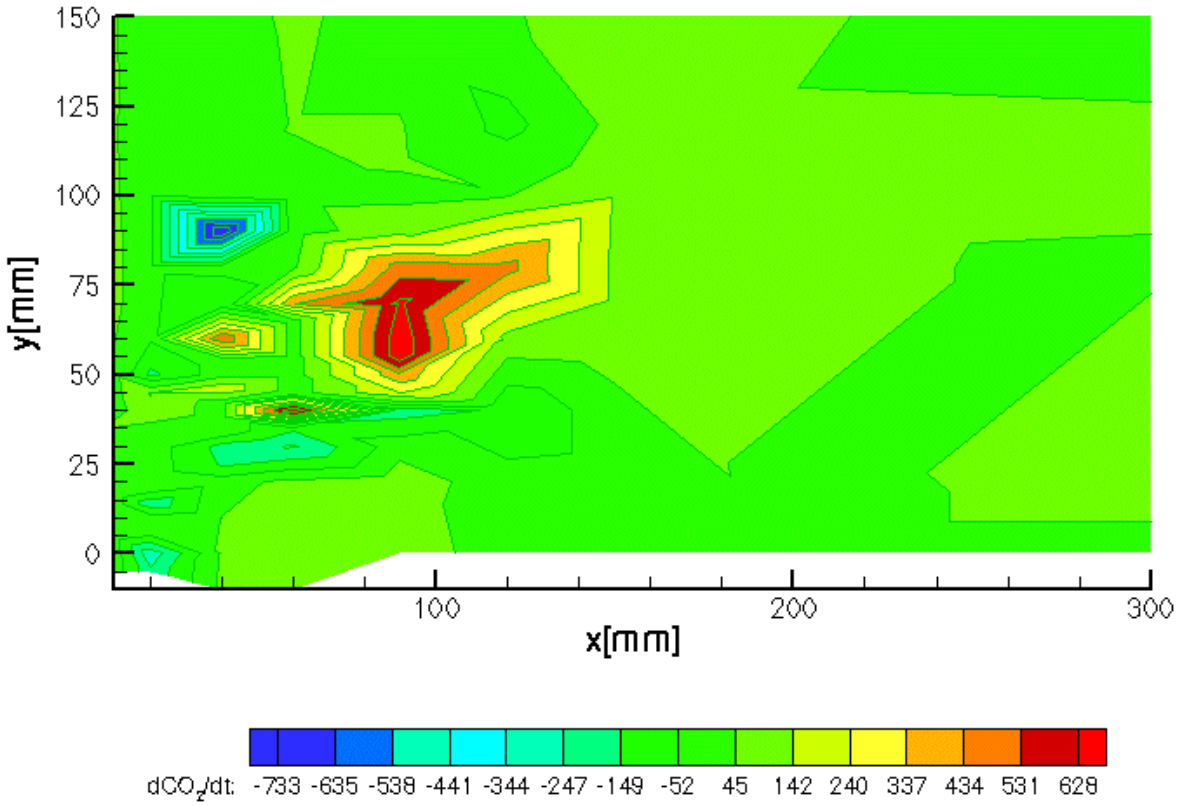

Bild 6.2.6 Reaktionsrate CO_2 , aus gemessenen Werten an Hand der ILDM-Lösung berechnet

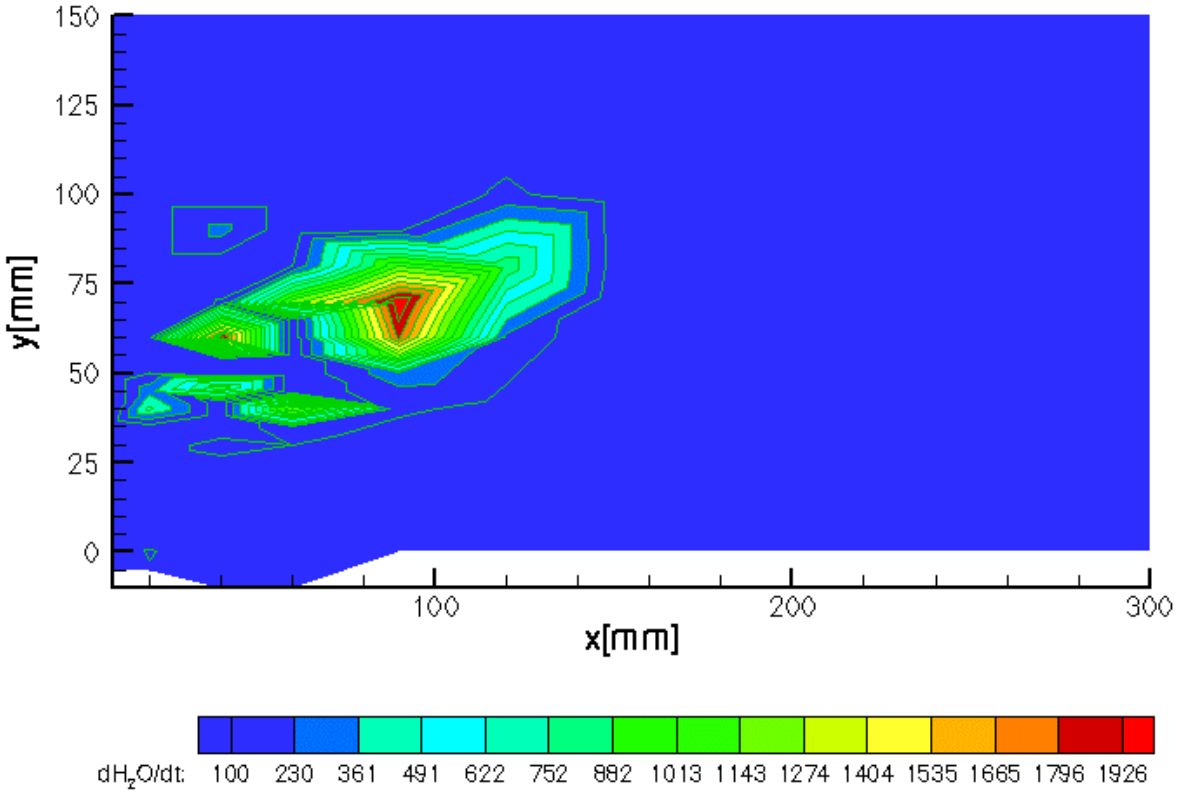

Bild 6.2.7 Reaktionsrate H_2O , aus gemessenen Werten an Hand der ILDM-Lösung berechnet

Für die Bewertung der verschiedenen PDF-Formen wurde zuerst eine Lösung aus den gemessenen Daten erzeugt, welche der Realität am nächsten sein soll. Die Messung liefert eine dreidimensionale *‚Joint-PDF‘* mit der dann die Daten der ILDM-Tabelle gewichtet werden können. Das Ergebnis sind Verteilungen von Temperatur und Verbrennungsprodukten in der Brennkammer.
Die Bilder 6.2.8 und 6.2.9 zeigen die so errechneten Verteilung von Temperatur und Kohlenmonoxid. Wie bereits erwähnt, unterscheidet sich die Lösung der Temperatur insbesondere in den wandnahen Bereichen durch die Annahme adiabater Verbrennung in den ILDM-Tabellen von den Messwerten (vgl. Bild 6.1.4). Kohlenmonoxid tritt erwartungsgemäß primär in der Verbrennungszone auf und wird stromabwärts zunehmen verbrannt.

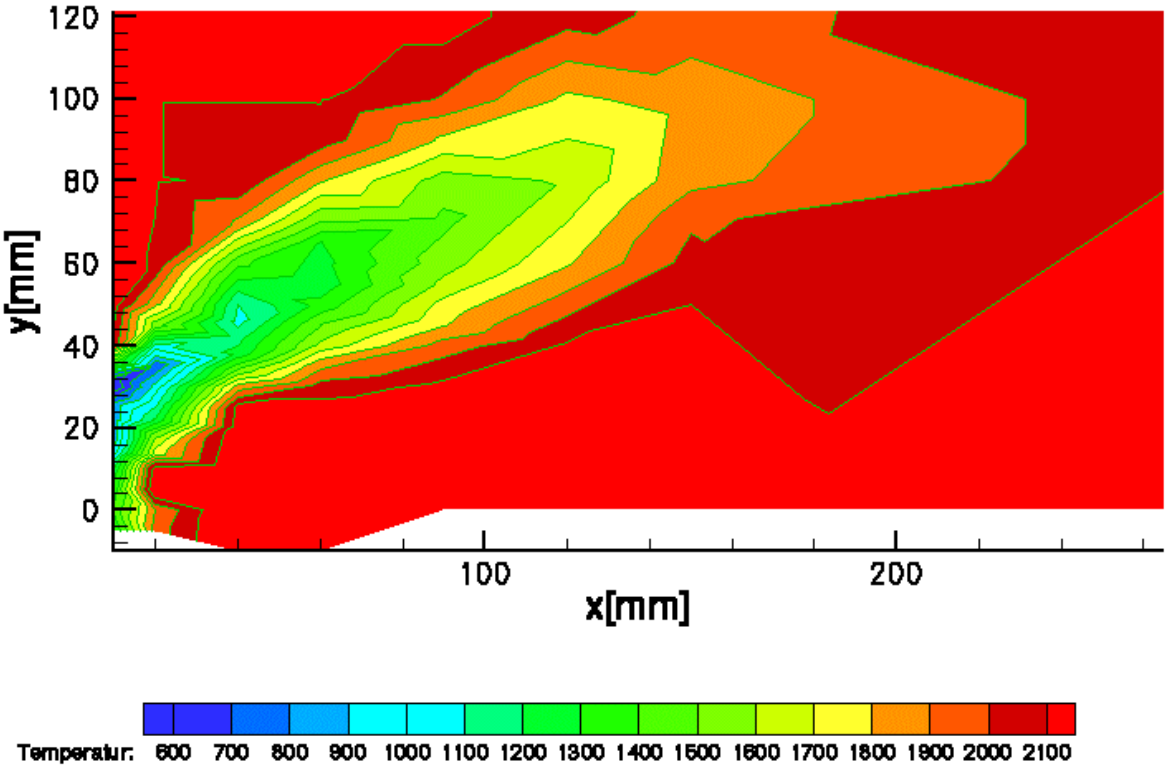

Bild 6.2.8 Temperatur-Verteilung auf Basis der gemessenen Joint-PDF von Mischungsbruch, CO_2 und H_2O mit ILDM berechnet

Durch die Annahme adiabater Verbrennung in der ILDM-Tabelle können leider keine Rückschlüsse auf die Güte des ILDM-Verfahrens geschlossen werden. Auch die Frage, ob zwei Fortschrittsvariablen für diesen Anwendungsfall ausreichend sind, kann nicht geklärt werden, weil die Ergebnisse sich nicht mit dem in der Realität stark nicht-adiabaten Anwendungsfall vergleichen lassen. An dieser Stelle sei auf die einschlägige Literatur zu diesem Thema hingewiesen [Schmidt,1995; Niemann,1996].

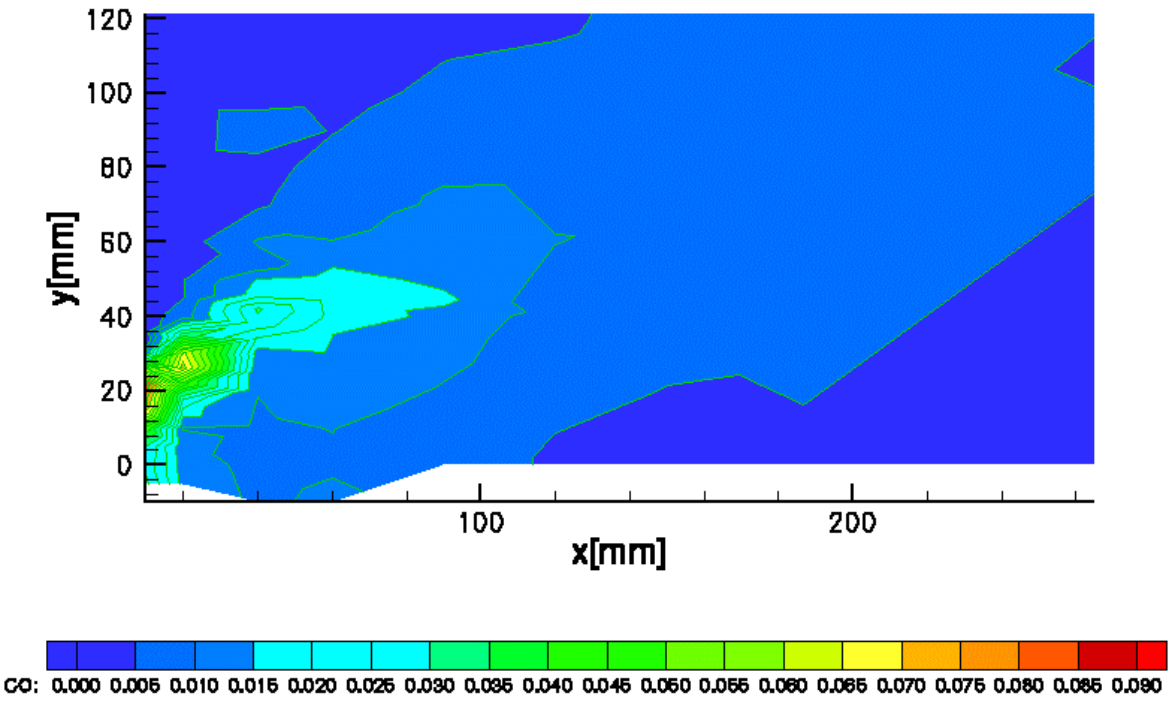

Bild 6.2.9 CO-Verteilung auf Basis der gemessenen Joint-PDF mit ILDM berechnet

Zur Überprüfung der statistischen Unabhängigkeit ist in Bild 6.2.10 und Bild 6.2.11 die Verteilung von Temperatur und CO dargestellt, die entsteht, wenn aus der gemessenen Joint-PDF durch Projektion auf die drei Integrationsrichtungen zuerst Einzel-Pdf's erzeugt werden, die dann während der Integration als statistisch unabhängig behandelt werden. Aus der Definition für statistische Unabhängigkeit ergibt sich also, dass sich die Gesamtwahrscheinlichkeit aus dem Produkt der Einzelwahrscheinlichkeiten berechnet.

$$\overline{\varphi_i} = \iiint \varphi_i\left(f, CO_2, H_2O\right) \cdot P(f) \cdot P\left(CO_2\right) \cdot P\left(H_2O\right) \cdot df \cdot dCO_2 \cdot dH_2O \tag{6.1}$$

Dabei ist φ_i die zu errechnende Größe (z.B. Temperatur oder CO). Der Einfachheit halber sind bei den folgenden Ergebnisbildern nur die Kohlenmonoxid- und Temperatur-Verteilungen dargestellt, da dies oftmals die Zielgrößen numerischer Berechnungen sind.

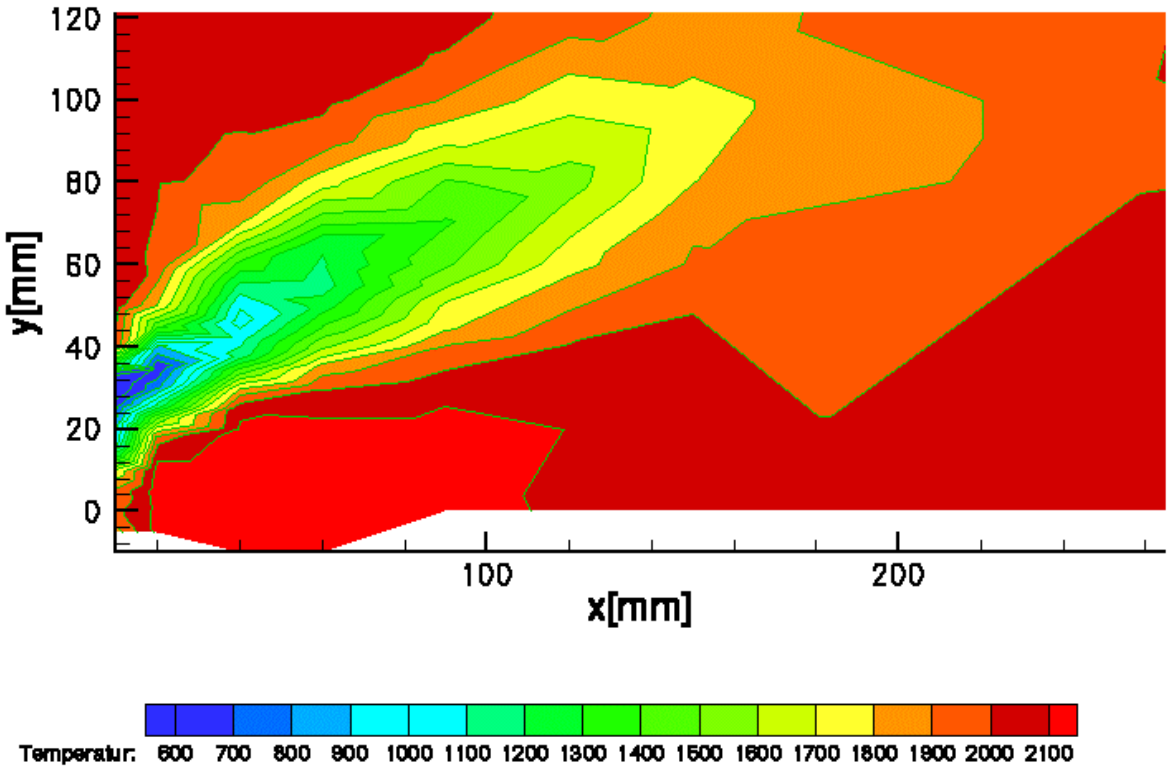

Bild 6.2.10 Temperatur-Verteilung, berechnet unter Annahme der statistischen Unabhängigkeit auf Basis der gemessenen PDF

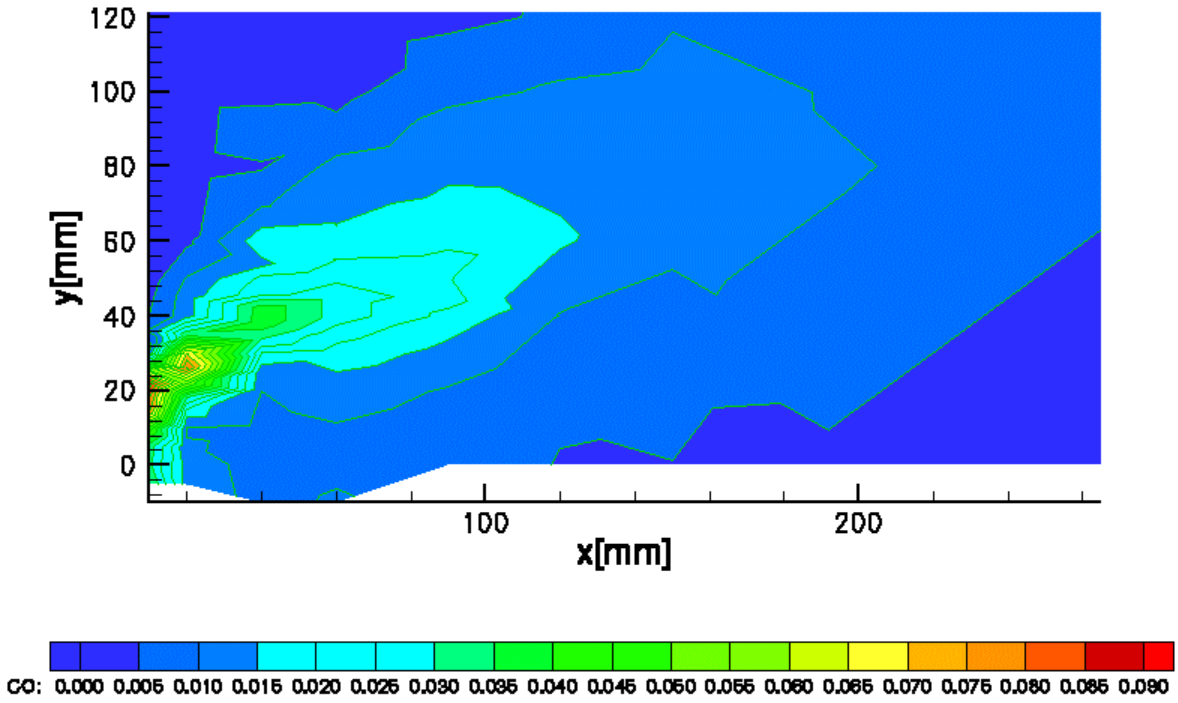

Bild 6.2.11 CO-Verteilung, berechnet unter Annahme der statistischen Unabhängigkeit auf Basis der gemessenen PDF

Erstaunlicherweise ist der Unterschied zwischen der Lösung der Mittelung mit der Verbundwahrscheinlichkeit (Bilder 6.2.8 und 6.2.9) und der Lösung mit der Annahme der statistischen Unabhängigkeit (Bilder 6.2.10 und 6.2.11) verhältnismäßig gering. Bei der Temperatur sind stromab kleine Abweichungen zu erkennen. Dies war auch zu erwarten, da hier das entsprechende Korrelationsbild (Bild 6.1.15) eine starke Korrelation zwischen den beiden Fortschrittsvariablen zeigt. Im Vergleich zu Fehlern, die in anderen Modellen, wie beispielsweise Turbulenzmodellen, in Kauf genommen werden müssen, stellt sich dieser Fehler jedoch verhältnismäßig gering dar.
Bleibt die Frage, ob sich in diesem Fall die oft verwendete Normierung der Fortschrittsvariablen mit den Gleichgewichtswerten [Repp, 1999], welche die Korrelation zwischen Mischungsbruch und Fortschrittsvariablen abschwächen soll, wirklich so viele Vorteile bringt, dass sich der Mehraufwand hierfür lohnt. Aus der Sicht des vorgestellten Beispieles ergeben sich viele andere Effekte, die wesentlich wichtiger für die Modellierung sind, als eine allzu genaue Korrektur der statistischen Abhängigkeit der Fortschrittsvariablen vom Mischungsbruch. Eine Verallgemeinerung dieser Aussage ist jedoch erst dann möglich, wenn weitere Untersuchungen dieser Art an anderen Anwendungsfällen folgen und die zu Grunde liegenden Phänomene besser verstanden sind.
Bild 6.2.12 zeigt das Ergebnis der Integration mit drei statistisch unabhängigen Gauß-Verteilungen, die aus Mittelwert und Varianz der gemessenen Verteilungen berechnet wurden.

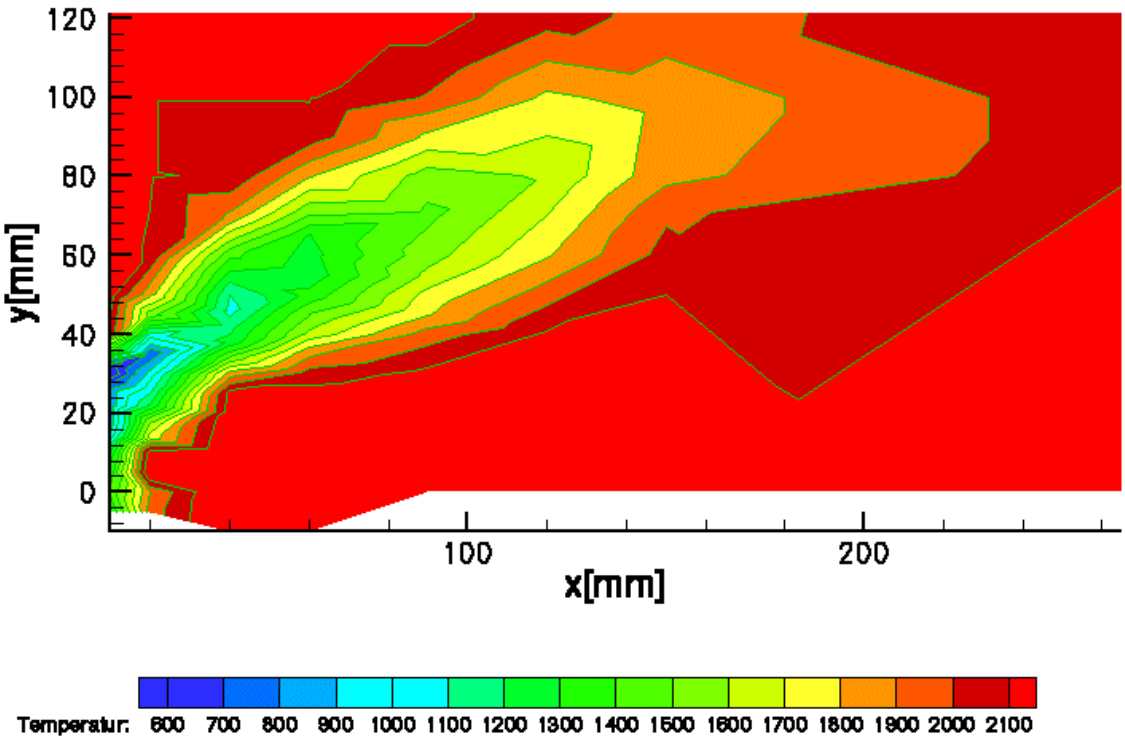

Bild 6.2.12 Temperatur-Verteilung, Gauß-PDF

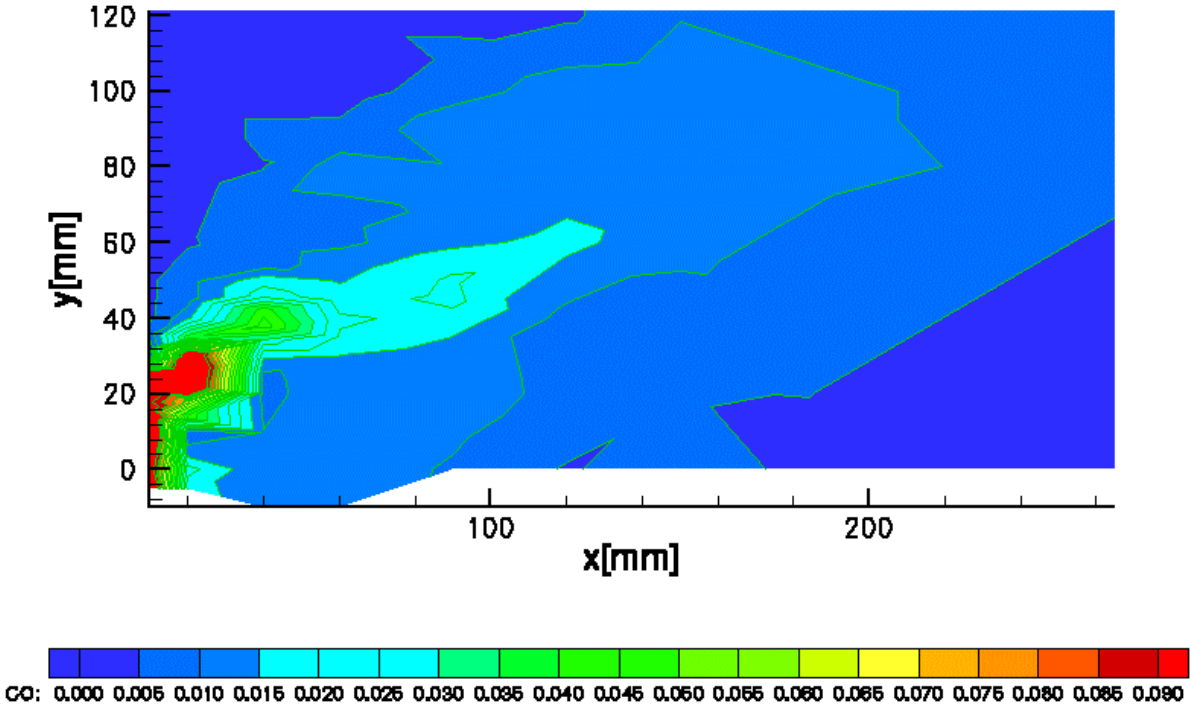

Bild 6.2.13 CO-Verteilung, Gauß-PDF

Der Unterschied der Temperatur-Verteilung ist im Vergleich zu den Mittelungen an Hand der gemessenen PDF's (Bild 6.2.10) im gesamten Rechengebiet verhältnismäßig gering. Allerdings ist der Fehler, der durch die approximierte PDF-Form entsteht, größer als die Abweichung, die sich aus der Annahme der statistischen Unabhängigkeit ergibt. Hier werden die Grenzen des Presumed-PDF-Modells klar erkennbar. Bei der Annäherung der realistischen Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion durch einen zweiparametrigen Ansatz gehen vor allem in Bereichen hoher Strömungsgradienten zu viele Informationen verloren. In vielen praxisrelevanten Fällen reicht diese Genauigkeit allerdings aus und dieser Fehler kann toleriert werden. Ist eine höhere Genauigkeit gefordert, so muss die Form der PDF genauer modelliert werden. Hier bieten sich die Methoden an, bei denen die komplette PDF transportiert wird. Diese Methoden sind bisher allerdings nur für einfache Brennraumformen anwendbar, da der Rechenzeitaufwand um Größenordnungen steigt. Anstatt zweier Transportgleichungen für Mittelwert und Varianz pro Integrationsrichtung muss hier für jeden Diskretisierungspunkt der PDF eine Transportgleichung gelöst werden. Dieses Problem wird auf Grund der großen Anzahl von zu lösenden Unbekannten mit Monte-Carlo-Methoden gelöst [Pope,1981].
Die CO-Konzentrationen (Bilder 6.2.11 und 6.2.13) sind im Brennraum mit Ausnahme des Bereichs nahe der Einströmung recht gut getroffen. Durch extreme Turbulenzen, Verlöscheffekte und verzögerte Zündung liegen hier stark asymmetrische PDF-Formen vor, die mit einer zweiparametrigen PDF wie der Gauß-Verteilung nicht mehr gut beschrieben werden können.

Um Rechenzeit zu sparen, ist es sinnvoll, möglichst weitgehend die Gauß-Verteilung durch eine Delta-Funktion zu ersetzen. Aus den Erfahrungen aus Kapitel 5.3 leitet der erste Ansatz ab, dass zuerst nur die Richtungen der Fortschrittsvariablen durch die Delta-PDF ersetzt werden. In den Bilden 6.2.14 und 6.2.15 wurde für die Mischungsbruch-Verteilung die

Gaußannahme getroffen und in die Richtung der beiden anderen Variablen mit der Delta-Funktion gewichtet.

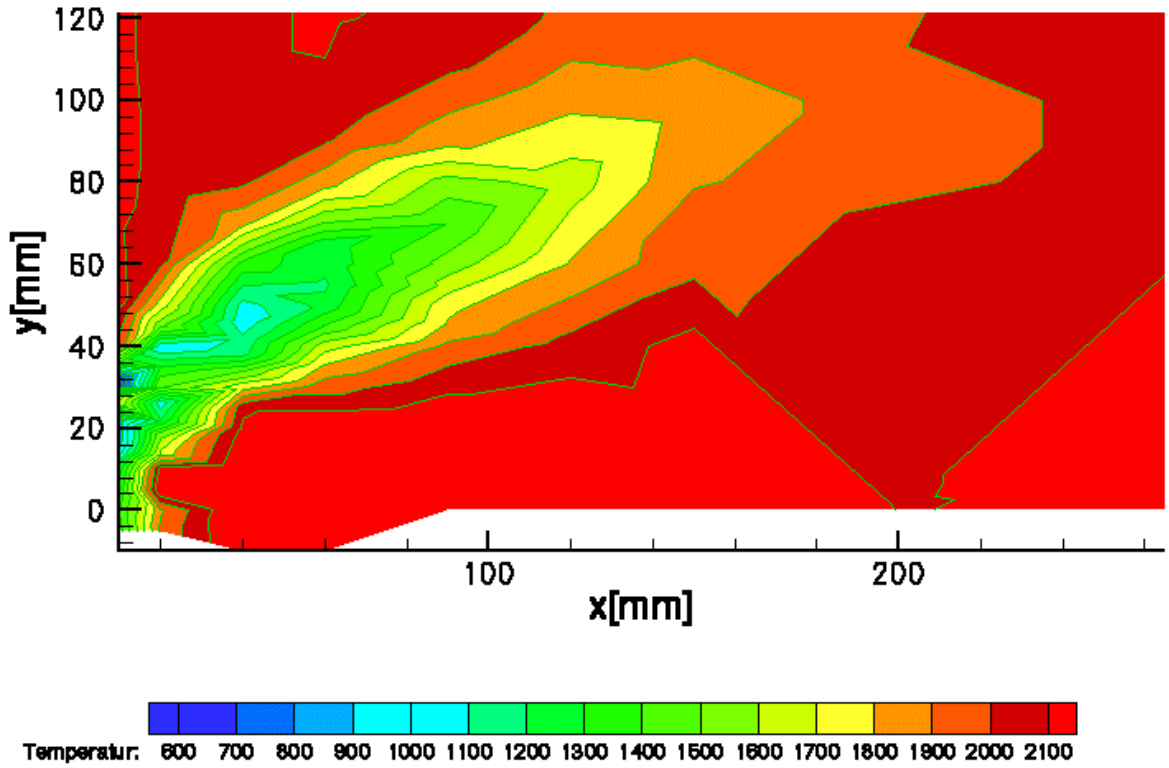

Bild 6.2.14 Temperatur-Verteilung, Gauß-PDF für Mischungsbruch, Delta-PDF für CO_2 und H_2O

Es sind wenig Unterschiede zur Lösung mit drei unabhängigen Gauß-Verteilungen zu erkennen. Ob die Mittelung mit drei Gauß-Verteilungen (Bilder 6.2.12 und 6.2.13) oder die Mittelung mit einer Gauß-Verteilung für den Mischungsbruch und einer zweidimensionalen Delta-Funktion für die Fortschrittsvariablen (Bilder 6.2.14 und 6.2.15) im Vergleich zu den der Mittelung an Hand der projizierten, gemessenen PDF's (Bilder 6.2.10 und 6.2.11) besser abschneidet, kann nicht entschieden werden. Die Qualität der Lösung hängt hier also nur schwach von der Form der PDF in Richtung der Fortschrittsvariablen ab. Dies ist auch verständlich, weil sich in der Nähe des chemischen Gleichgewichts die meisten Zustandsgrößen linear zu den Fortschrittsvariablen verhalten. Es ist also nicht notwendig, die Mittelwerte von Zustandsgrößen über eine aufwendige Gauß-Integration zu bestimmen, deren Momentanwerte nur geringe Gradienten in Integrationsrichtung aufweisen. Dadurch reduziert sich der numerische Mehraufwand, der durch den Einsatz der ILDM-Methode gegenüber einer Gleichgewichtsrechnung in Kauf genommen werden muss, um etwa zwei Größenordnungen.
Die dreidimensionale Gauß-Funktion besitzt noch einen weiteren Nachteil gegenüber der Delta-Verteilung: Da die abgeschnittene Gauß-Verteilung eine kontinuierliche Funktion innerhalb des Definitionsbereichs ist, werden bei der Integration über die dreidimensionale PDF alle theoretisch vorkommenden Kombinationen von Einflussparametern in die Berechnung mit einbezogen. Hierbei werden auch die Kombinationen berücksichtigt, die physikalisch nicht möglich sind, wie beispielsweise ein Mischungsbruch von 0 mit einer Gleichge-

wichtskonzentration von CO_2 und H_2O. Für diese Fälle müssen in der ILDM-Tabelle Werte angenommen werden, die so geartet sind, dass sie das Ergebnis der Rechnung möglichst wenig verfälschen. Da die Delta-Funktion nie Punkte benötigt, die weit von den Mittelwerten entfernt sind, reduziert sich dieses Problem bei der Integration an Hand der Delta-Verteilung deutlich.

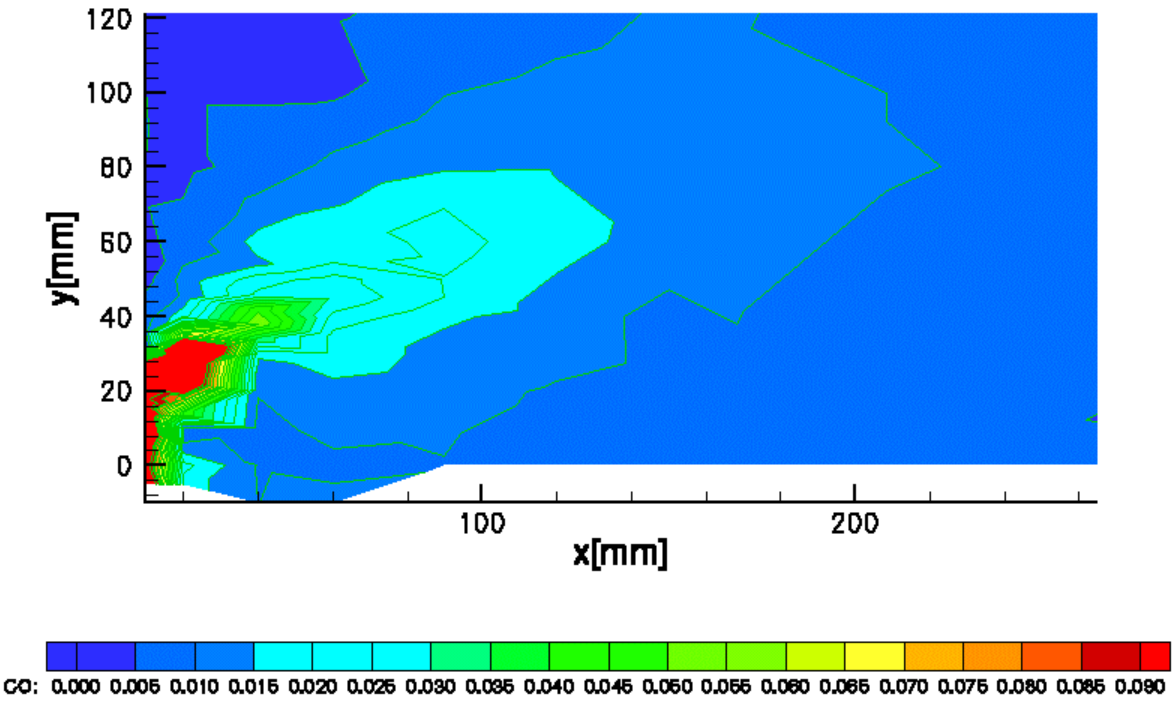

Bild 6.2.15 CO-Verteilung, Gauß-PDF für Mischungsbruch, Delta-PDF für CO_2 und H_2O

Bisher wurde das Problem der extremen Rechenzeiten für die Integration dadurch gelöst, indem die Integration bereits im Preprozessing durchgeführt und die Lösung in Tabellen abgelegt wurde. Durch jede zusätzlich abgelegte Integration erhöht sich die Dimension der Tabellen um eins. Damit der Speicherbedarf der Tabellen noch praktikabel bleibt, können nur wenige Tabellenpunkte zur Interpolation bereitgestellt werden. Dadurch wird die Lösung der späteren Interpolation aus den Tabellen jedoch sehr ungenau. Wegen einer Genauigkeitserhöhung wurde allerdings bisher die Gauß-Verteilung gewählt, die dazu führt, dass eine weitere Dimension hinzugenommen werden musste. Dies sollte in jedem Fall bedacht werden, bevor eine Tabelle um eine Dimension vergrößert wird. Ferner ist die Erstellung einer solchen Tabelle sehr aufwendig und muss für jeden Brennstoff und jede Änderung der Randbedingungen, wie Temperaturen der Stoffströme oder Drücke neu erstellt werden. Es erscheint also sinnvoll, lediglich die Vorintegration über die Mischungsbruch-Richtung mit einer Gauß-Funktion in Tabellen abzulegen und die Mittelung der Fortschrittsvariablen an Hand der Delta-Funktion durchzuführen. Dadurch wird Flexibilität gewonnen und bei der Tabellierung bleiben Reserven für weitere wesentlichere Parameter, wie beispielsweise die Enthalpie für die Berücksichtigung von Wärmeverlusten.

In den bisherigen Untersuchungen wurde die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion jeweils an Hand der Gauß-Verteilung approximiert. Im Folgenden wird der Fall untersucht, bei dem für alle drei Integrationsrichtungen die Delta-PDF verwendet wurde. Die Bilder 6.2.16 und

6.2.17 zeigen die Lösungen bei Integration mit drei statistisch unabhängigen Delta-Funktionen.

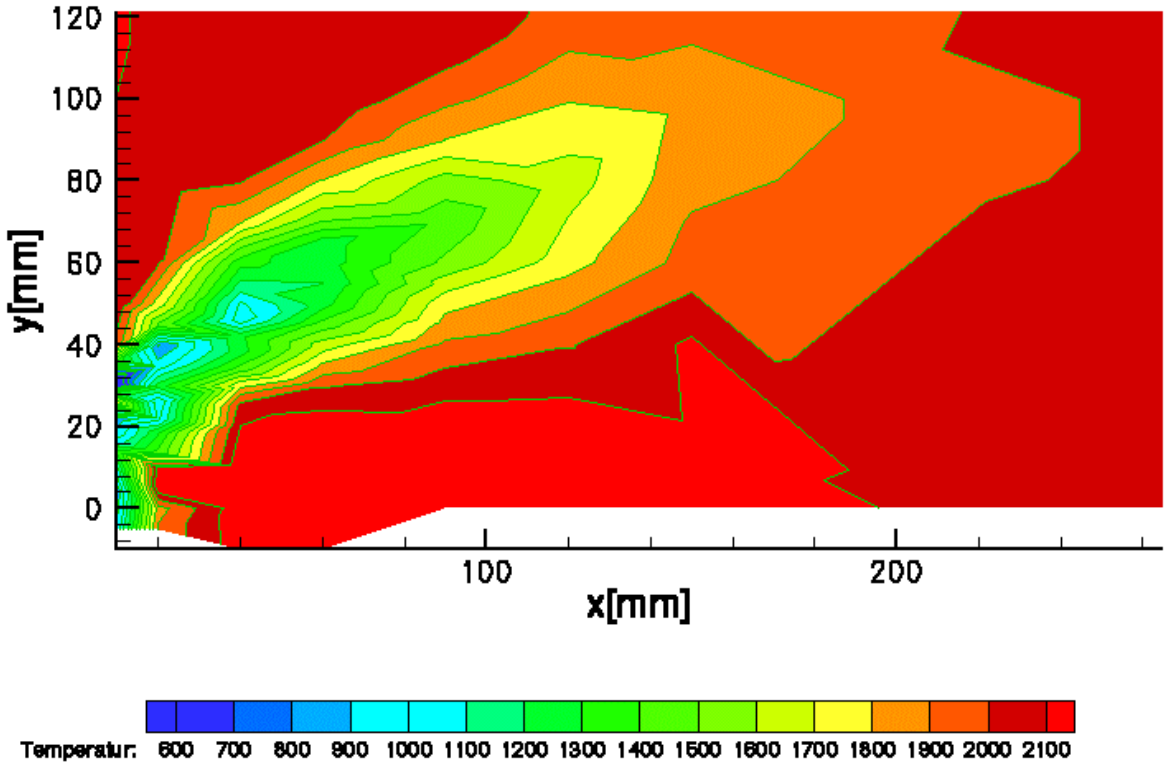

Bild 6.2.16 Temperatur-Verteilung, Delta-PDF

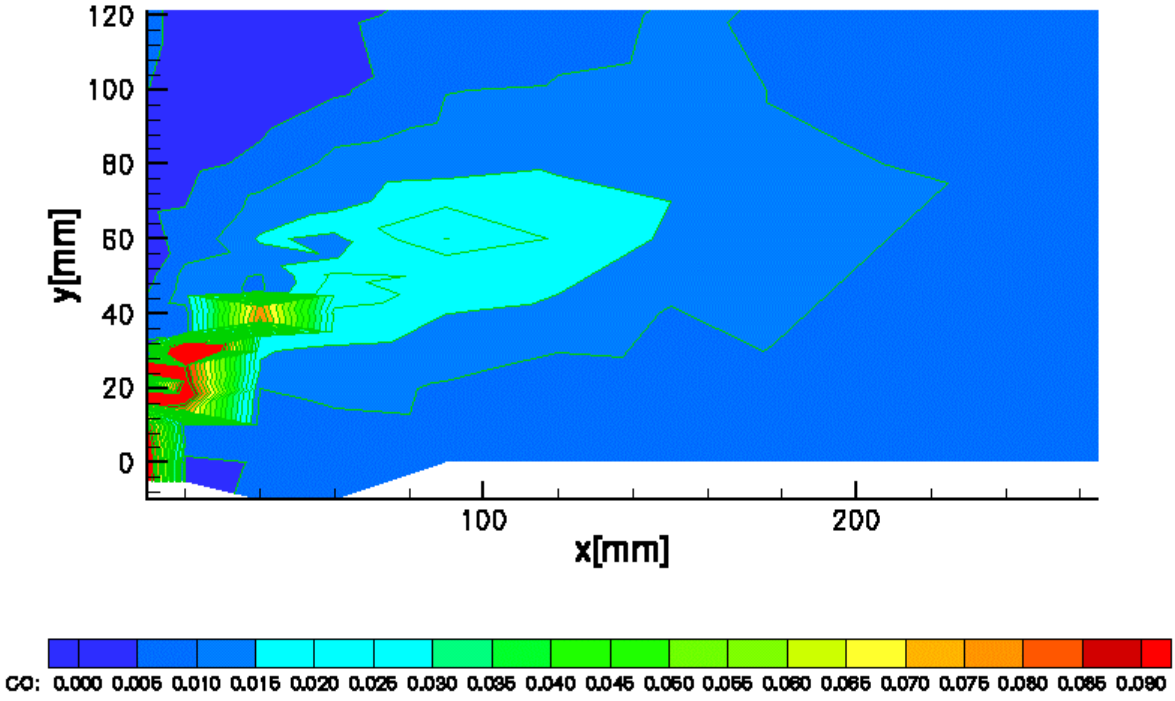

Bild 6.2.17 CO-Verteilung, Delta-PDF

Die Delta-Funktion liefert bei der Bestimmung der Temperatur im Vergleich zu den Berechnungen an Hand der statistisch unabhängigen, gemessenen PDF's recht gute Ergebnisse. Kohlenmonoxid wird etwas schlechter vorhergesagt als dies bei der Integration mittels der Gauß-Funktion der Fall war. In Kapitel 5.3 wurde bereits festgestellt, dass die Stickoxid-Verteilung nicht gut durch die Delta-Funktion beschrieben wird, weil die dafür notwendigen Sauerstoffradikale nur in einem sehr schmalen Mischungsbruchbereich in ausreichender Menge vorhanden sind. Die numerisch besonders einfache Vorgehensweise der Integration aller drei Richtungen mittels dreier Delta-Funktionen ist also nur dann geeignet, wenn man nur an der Rückwirkung der Verbrennung auf die Strömung interessiert ist und das ist im Wesentlichen die Wärmefreisetzung. Hierbei erhöht sich die Rechenzeit einer turbulenten Nicht-Gleichgewichtsrechnung nur um den Faktor 6 gegenüber einer Gleichgewichtsrechnung ohne Berücksichtigung der turbulenten Schwankungen. Diese Lösung reicht in vielen Fällen bereits aus. Für stationäre Probleme ist es sinnvoll, diese Lösung während der Iteration des Strömungsfeldes zu bevorzugen und dann im Postprozessing erst die Gauß-Funktion zu benutzen, damit Schadstoffe wie beispielsweise Stickoxid genauer bestimmt werden.

7 Simulation des TECFLAM-Drallbrenners

7.1 Berechnung der Mischung

7.1.1 Problemstellung

Der TECFLAM-Drallbrenner wurde als Testfall zur Erprobung und Weiterentwicklung von numerischen Modellen konzipiert. Als Brennstoff wurde Methan gewählt, da Methan im Gegensatz zu höherwertigeren Kohlenwasserstoffen sauberer verbrennt und somit für optische Messverfahren besser geeignet ist. So kann die Flamme mit vielen verschiedenen Messverfahren untersucht werden, unter anderen auch mit denen, die nur ein schwaches Messsignal liefern, wie beispielsweise die RAMAN-Spektroskopie (vgl. Kapitel 6). Die Randbedingungen wurden möglichst praxisnah gewählt, um die Übertragbarkeit der Ergebnisse für praxisrelevante Anwendungsfälle zu gewährleisten. Durch die Annäherung an die Praxis bekommt der Fall eine wesentlich höhere Komplexität, als dies bisher bei anderen Validierungsflammen, wie beispielsweise den Jet-Flammen von Barlow [Barlow,1999;Meier et al.,1999] der Fall war. Dies hat zur Folge, dass die einzelnen physikalischen Effekte in der Simulation nicht mehr entkoppelt betrachtet werden können. Um wirklich gute Ergebnisse erzielen zu können, müssen alle Phänomene, wie Turbulenz, chemische Reaktion und Strahlung mit hoher Genauigkeit gelöst werden. Bestimmt beispielsweise die Strömungssimulation eine falsche Mischung, so ist der Vergleich der Ergebnisse der Bestimmung des chemischen Umsatzes mit den Messergebnissen obsolet.

Im Folgenden werden die Punkte aufgezählt, die während der Gesamt-Simulation des TECFLAM-Drallbrenners zu Schwierigkeiten führen:

a) Geschwindigkeiten am Eintritt:

Die Eintrittsgeschwindigkeiten wurden vom Engler-Bunte-Institut der Universität Karlsruhe und dem Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik der Uni Darmstadt mit LDA (**l**aser-**d**oppler-**a**nemometrie) in der y-z-Ebene mit einem Abstand von 5mm vom Düsenaustritt bestimmt [P. Schmittel et al., A. Kremer et al.]. Aus geometrischen Gründen war es nicht möglich, die Geschwindigkeiten direkt hinter dem Düsenaustritt zu ermitteln. Diese Geschwindigkeiten werden als Randbedingung in der Strömungssimulation für den Düsenaustritt benutzt.

b) Turbulenzgrößen am Eintritt:

Auch über die Turbulenzgrößen am Eintritt sind keine genauen Daten bekannt. Auf Grund hoher Scherung am Düsenaustritt wird die Turbulenzenergie im Abstand von 5mm schon größer sein als direkt am Brennkammereintritt. Ferner sind die turbulenten Längenskalen messtechnisch nicht erfassbar. Um diese Probleme zu lösen, wäre es sinnvoll, bei der Strömungsberechnung die Strömung durch die Düse mit einzubeziehen. Jedoch erweist sich der Drallerzeuger auf Grund einer variablen Einstellmöglichkeit der Drallzahl als geometrisch sehr komplex, so dass bisher eine solch aufwendige Strömungsberechnung noch nicht durchgeführt wurde.

c) Variable Höhe:

Die Brennkammer ist so konzipiert, dass der Brennkammerkopf höhenverstellbar ist. Die absolute Messposition bleibt konstant. So wird die axiale Messposition durch Veränderung der Höhe der Düseneinströmung eingestellt. Da der Brennkammeraustritt seine Position während des Verfahrens nicht ändert, kommt es zu einer Veränderung der Brennkammerhöhe. Es wurde bisher noch nicht untersucht, ob verschiedene Brennkammerhöhen zu verschiedenen Strömungsverläufen führen.

d) Austrittsgitter:

Um zu gewährleisten, dass kein Rückströmen von Verbrennungsgasen oder Umgebungsluft durch den Brennkammeraustritt in die Brennkammer hinein stattfindet, wurde am Austritt ein Drahtgitter angebracht. Der Druckverlust, den dieses Gitter verursacht, ist bisher nicht gemessen worden und steht der Simulation nicht zur Verfügung.

e) Große Scherkräfte am Eintritt:

Am Eintritt wird die Strömung sehr stark geschert. Dies hat zur Folge, dass es in diesen Bereichen entweder zu Zündinstabilitäten oder zu lokalem Flammenverlöschen kommt. Diese Effekte sind numerisch nur mit großem Aufwand zu bestimmen, haben aber großen Einfluss auf die Axialimpulserhöhung durch die Verbrennung. Ferner muss am Eintritt das Rechengitter sehr stark verfeinert werden, um Ungenauigkeiten durch eine zu grobe Diskretisierung zu vermeiden.

f) Gekühlte Wände:

Die Brennkammerwände wurden etwa auf 70°C gekühlt. Daraus resultiert eine Wärmeabfuhr durch Strahlung und Konvektion an der Wand von etwa zwei Drittel der zugeführten thermischen Leistung. Die Verbrennungsrechnung konnte jedoch nur adiabat durchgeführt werden. Dies muss beim Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Messungen beachtet werden.

In den folgenden Kapiteln werden die Ergebnisse der Gesamtsimulation dargestellt. Die aufgeführten Schwierigkeiten verdeutlichen, dass bei der Interpretation des Vergleichs der Rechnung mit den Messungen die unterschiedlichen Bedingungen immer Berücksichtigung finden müssen, um Fehlinterpretationen zu vermeiden.

7.1.2 Vorgehensweise bei der Rechnung

Auf Grund der hohen Scherung der Strömung am Eintritt musste bei der Simulation der Brennkammer sehr großen Wert auf ein gutes Netz gelegt werden. Durch ein sukzessives Verfeinern des Netzes im Eintrittsbereich konnten die Ergebnisse deutlich verbessert werden. Um durch die Verfeinerung nicht zu viele Punkte zu erhalten, wurde mit unstrukturierten Netzten gearbeitet. Hierdurch konnte die Anzahl der Punkte unter 10000 gehalten werden. Bild 7.1.1 zeigt das verwendete Rechengitter. Es handelt sich um ein rotationsperiodisches 0.5°-Segment mit ca. 5500 Punkten. Lokale Verfeinerungen wurden im Eintrittsbereich und an den gekühlten Wänden vorgenommen.

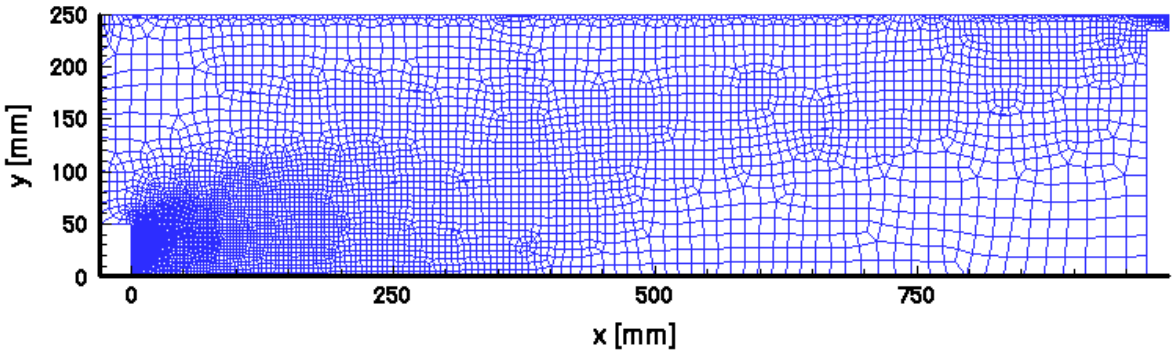

Bild 7.1.1 Rechengitter des TECFLAM-Drallbrenners

Als Eintrittsgeschwindigkeiten wurden die mit LDA gemessenen Geschwindigkeitsprofile bei x=5mm benutzt. Die Brennkammerwand wurde mit einer konstanten Temperatur von 350K belegt. Der innere Ringspalt wurde mit Methan einer Temperatur von 300K und eines Massenstromes von 2.8 g/s beaufschlagt. Der äußere Ringspalt führt die Verbrennungsluft mit 300K und einem Massenstrom von 57.5 g/s. Die Rechnung wurde mit insgesamt 23 Spezies durchgeführt. Diese hohe Anzahl von Spezies war bedingt durch die spätere Hinzunahme von ILDM-Tabellen. Für die Gleichgewichtsrechnung wären etwa zehn Spezies ausreichend gewesen. Die Berechnungen wurden für eine Brennkammerlänge von 970mm durchgeführt. Die Druck in der Berechnung wurde durch den Gegendruck am Brennkammeraustritt auf ca. 1.013 bar fixiert.

Bei allen Rechnungen sind die Fluktuationen des Mischungsbruchs mit berücksichtigt. Die in diesem Kapitel gezeigten Rechnungen wurde das f-g-Modell mit einer Gauß-Verteilung für die Mischungsbruch-Fluktuation benutzt. Die Wärmefreisetzung wurde mit einem Gleichgewichtsmodell bestimmt. Die Gleichgewichtszustände wurden nicht während der Strömungssimulation bestimmt, sondern bereits im Preprozessing in einer dreidimensiona-

len Tabelle, die vom Mischungsbruch, der Mischungsbruchfluktuation und dem Druck abhängt, abgelegt.

Der TRUST-Code benutzt ein instationäres Verfahren, d.h. der Iterationsverlauf beschreibt den tatsächlichen zeitlichen Verlauf der Verbrennung. Es stellte sich heraus, dass der stationäre Zustand physikalisch erst nach einigen Sekunden erreicht wird. Um diesen Zustand in der numerischen Simulation schneller zu erreichen, wurde die Brennkammer bei Programmstart bereits mit Verbrennungsprodukten bei einer Temperatur von 1500K vorbelegt. Durch diese Vorgehensweise trat der stationäre Zustand bereits nach der Simulation von etwa einer physikalischen Sekunde ein.

7.1.3 Ergebnisse der Strömungssimulation

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Strömungssimulation dargestellt. Eine adäquate Beschreibung der Strömung erwies sich als sehr schwierig. Die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse sind das Resultat von einer Reihe von Rechnungen, die in ihrer Qualität immer weiter verbessert wurden. Auf Grund seiner Komplexität erweist sich der TECFLAM-Drallbrenner für ein detailliertes Austesten von Verbrennungsmodellen als kritisch. An dieser Stelle sei wiederum darauf hingewiesen, dass die Schwierigkeiten der Simulation eines solch komplexen Falles bei der Interpretation der Mess- und Rechenergebnissen nicht aus den Augen verloren werden dürfen.

Die Bilder 7.1.2 und 7.1.3 zeigen die Verteilungen der axialen Komponente der Geschwindigkeiten. Die Rechnungen sagen eine größere zentrale Rückströmung als die Messungen voraus. Somit wird der Strahl in den Messungen nicht so stark nach außen abgelenkt, wie dies in den Rechnungen der Fall ist. Der Grund hierfür ist zum jetzigen Zeitpunkt noch nicht bekannt. Es ist nicht klar, ob hier die Grenzen der Turbulenzmodelle deutlich werden oder ob die Abweichung durch die im vorherigen Kapitel genannten Schwierigkeiten bedingt sind.

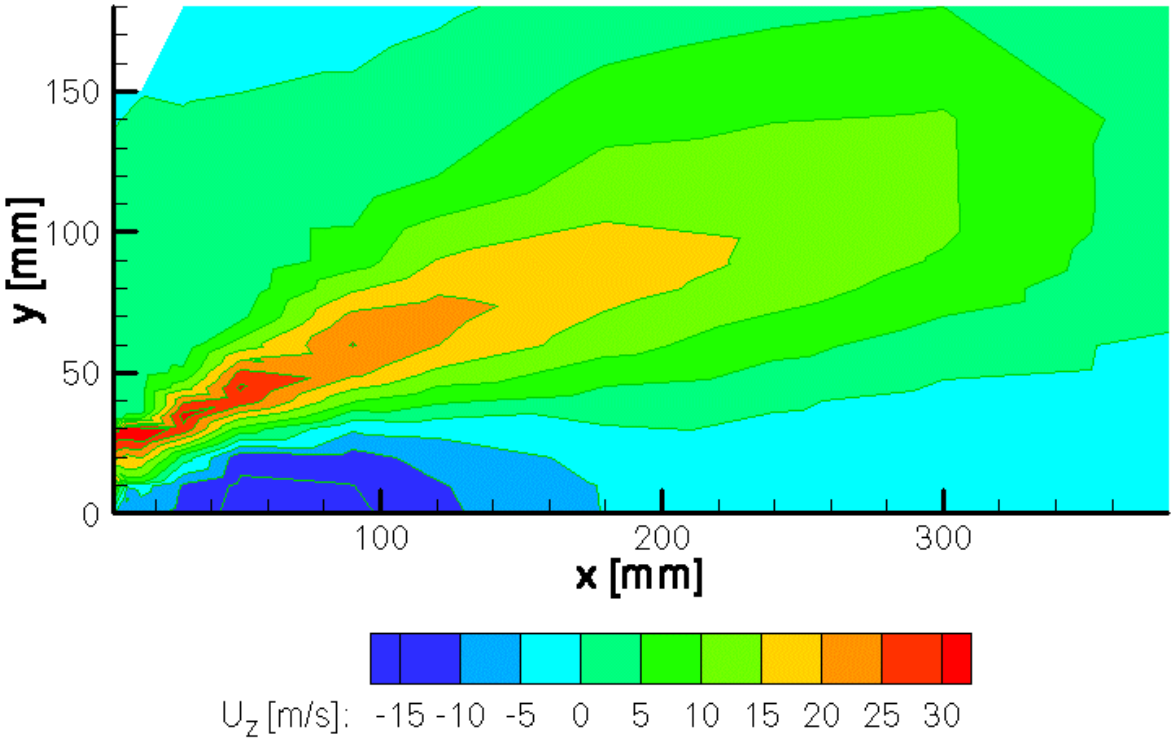

Bild 7.1.2 gemessene Axialgeschwindigkeitsverteilung

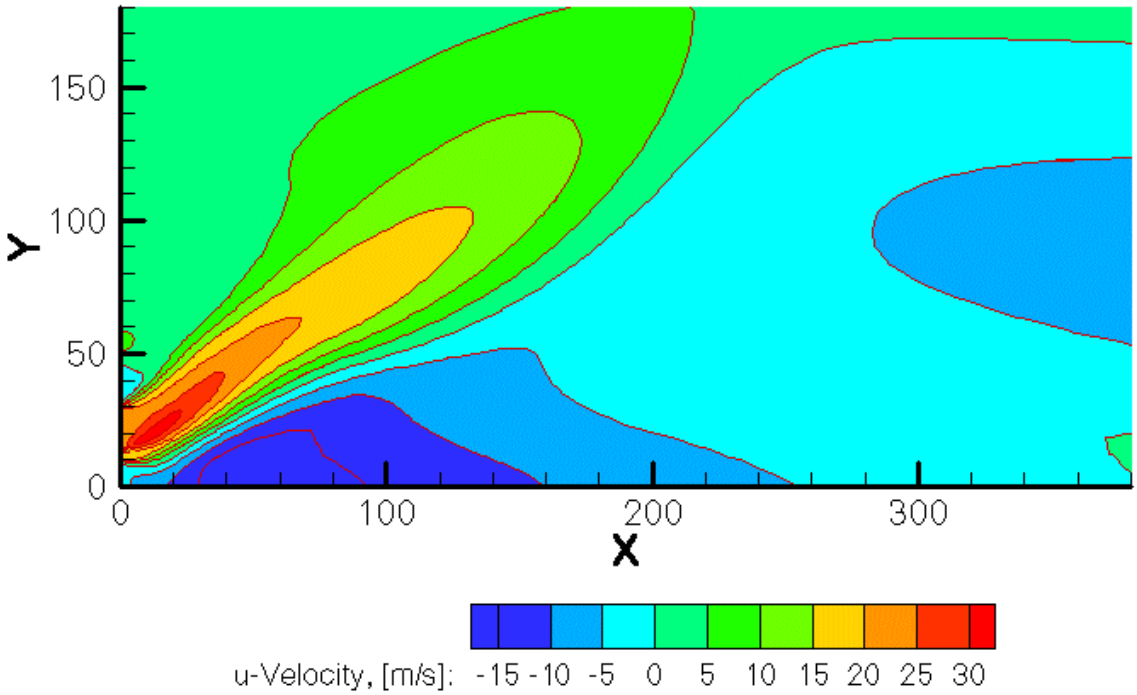

Bild 7.1.3 berechnete Axialgeschwindigkeitsverteilung

Für die Untersuchungen, die in dieser Arbeit im Vordergrund stehen, ist die Übereinstimmung allerdings als ausreichend anzusehen. Eine Fokussierung in Richtung wesentlich verbesserter Strömungsergebnisse würde den Rahmen dieser Arbeit aufgrund der oben genannten Schwierigkeiten deutlich sprengen.

Die Bilder 7.1.4 und 7.1.5 zeigen die Mischungsbruch-Verteilung der Rechnung und der Messung. Der sich stromabwärts einstellende mittlere Mischungszustand ist in beiden Fällen gleich. Ein wesentlicher Unterschied ist im Einströmbereich zu erkennen. Die Strahlen bleiben in der Rechnung länger erhalten als in der Messung. Das heißt, dass der turbulente Queraustausch deutlich unterbestimmt ist.

Da die chemische Reaktion stark nichtlinear vom Mischungsbruch abhängt, wird sich dieser Unterschied beim Vergleich der Simulation der chemischen Reaktion mit den Messergebnissen auch bemerkbar machen. Das bedeutet, dass bei der Interpretation der Ergebnisse der Verbrennungssimulation überprüft werden muss, ob Unterschiede zwischen Messung und Rechnung durch das Verbrennungsmodell oder durch die unzureichend bestimmte Mischung verursacht werden.

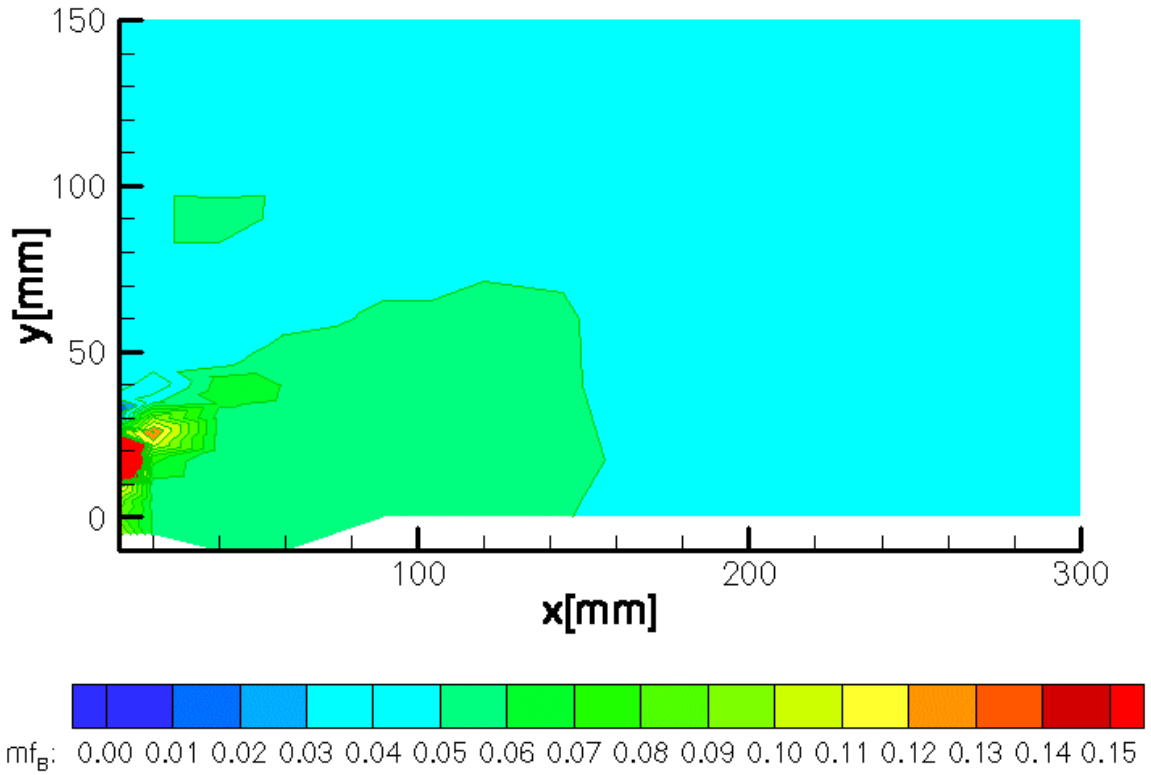

Bild 7.1.4 gemessene Mischungsbruch-Verteilung

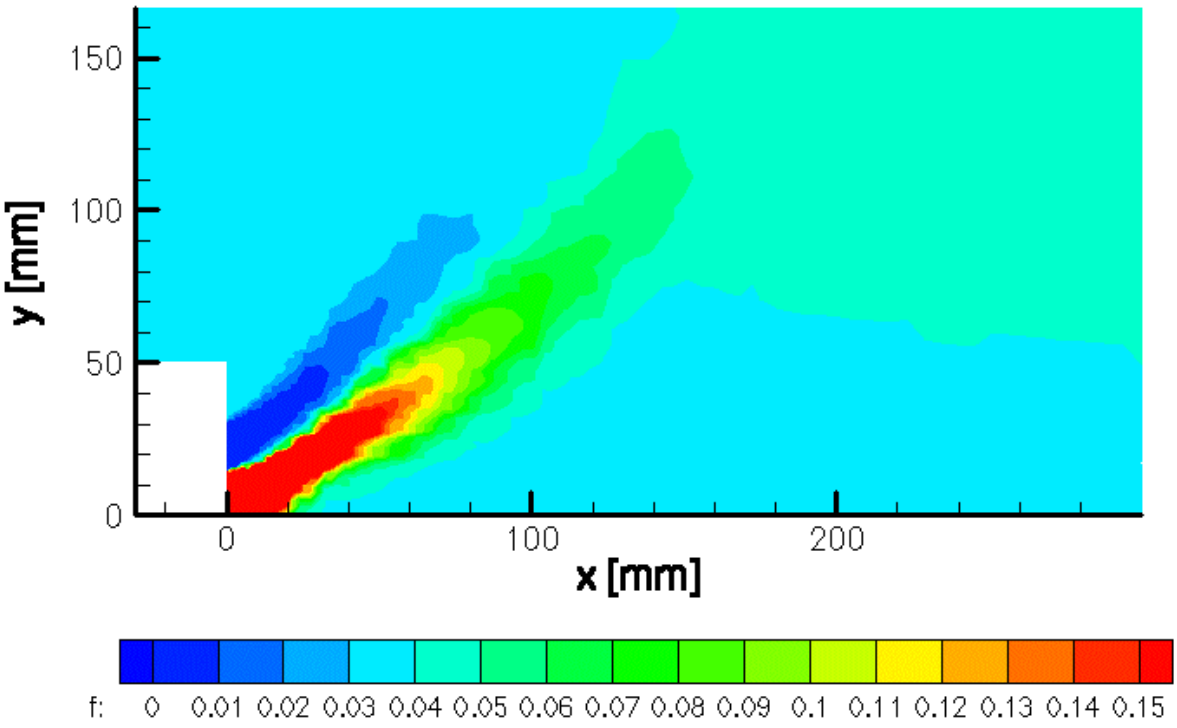

Bild 7.1.5 berechnete Mischungsbruch-Verteilung

7.2 Berechnung der Wärmefreisetzung

7.2.1 Rechnung mit der Annahme chemischen Gleichgewichts

In diesem Kapitel sind die Ergebnisse für die Wärmfreisetzung mittels der Annahme des chemischen Gleichgewichts erzeugt worden. Aus den Ergebnissen der RAMAN-Messungen (vgl. Kapitel 6) ist bekannt, dass im Bereich der Einströmung Nichtgleichgewichtseffekte auftreten, die bei dieser Art der Berechnung nicht berücksichtigt werden. Da die Mischung in diesem Fall nicht ausreichend genau bestimmt werden konnte, wird im Folgenden der Fokus auf den Vergleich verschiedener Berechnungsmethoden gelegt werden. Der Vergleich mit den Messungen (Bild 6.2.10 oder 6.2.12) spielt dabei eine untergeordnete Rolle.
Die beiden folgenden Bilder zeigen die berechneten Temperatur-Verteilungen zweier unterschiedlicher Mittelungsmethoden. In Bild 7.2.1 ist die Gauß-Annahme getroffen. Bild 7.2.2 zeigt zum Vergleich die Temperatur-Verteilung, die durch die Mittelung an Hand der Delta-Funktion erzeugt wurde.
Es ist zu erkennen, dass in weiten Bereichen die Temperaturen nur wenig voneinander abweichen. Im Bereich der Einströmung ist der Unterschied zwischen den Temperaturen jedoch sehr groß. Der Grund dieser hohen Abweichung wurde in Kapitel 6.2 deutlich, wo die an dieser Stelle vorliegenden PDF's miteinander verglichen wurden. Die Abweichung der berechneten Mitteltemperaturen zwischen der Mittelung an Hand der Gauß- und der Delta-Verteilung werden immer genau dann sehr groß, wenn große Standardabweichungen bei kleinen Mischungsbruchwerten vorliegen. Während die Mittelung an Hand kontinuierlicher Funktionen immer noch nahstöchiometrische Punkte mit berücksichtigt, werden bei Delta-Funktionen meist nur Punkte in kalten Gebieten in die Berechnung des Mittelwertes miteinbezogen (vgl. Kapitel 6.2). So kommt es, dass die Mittelung mit der Gauß-Funktion im Bereich der Einströmung tendenziell höhere Temperaturen liefert als die Mittelung an Hand der diskreten Delta-Verteilung. An dieser Stelle sei noch einmal darauf hingewiesen, dass die Gauß-Verteilung nicht immer die ideale Approximation darstellt. In Abbildung 6.2.1 ist im Vergleich zu den Messungen zu erkennen, dass die tatsächlich vorliegenden Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion durch ihre bimodale Form nicht mehr durch die Gauß-Verteilung abzubilden ist.

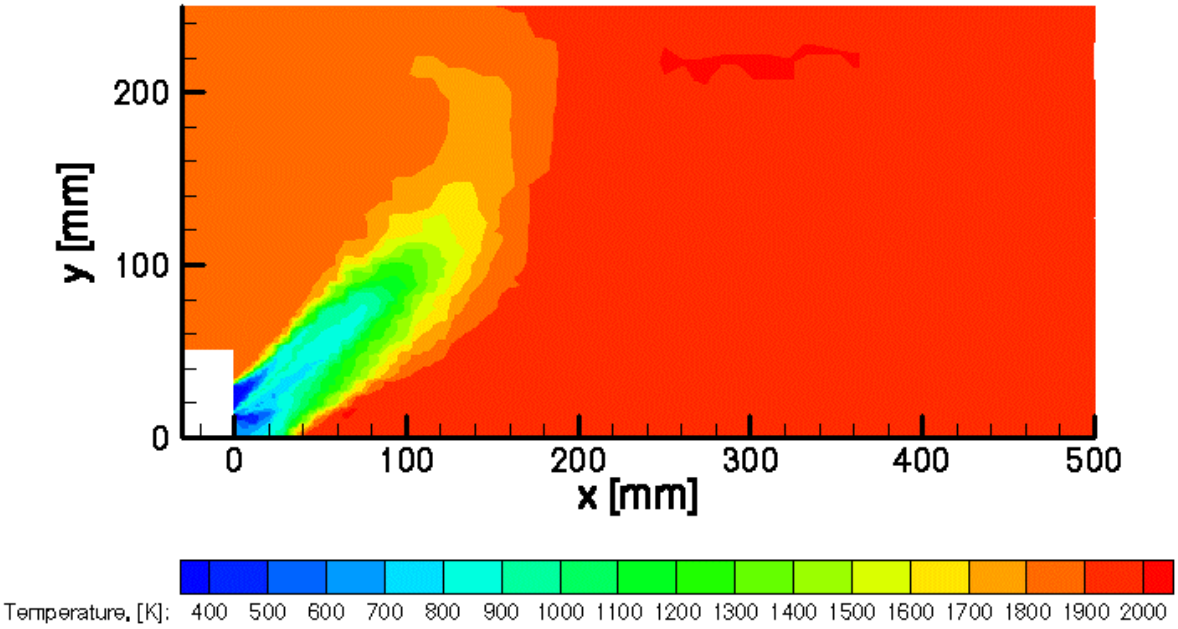

Bild 7.2.1 mit Gauß-Funktion gemittelte Temperatur-Verteilung

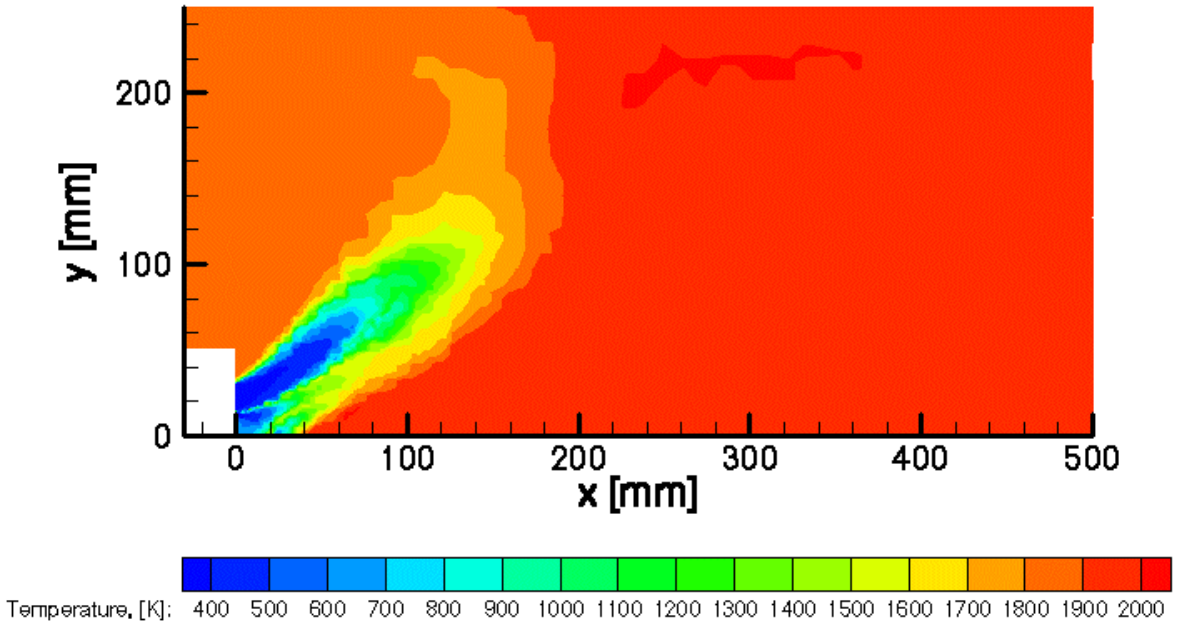

Bild 7.2.2 mit Delta-Funktion gemittelte Temperatur-Verteilung

Nach den bisherigen Kenntnissen bietet die Gauß-Verteilung unter den zwei-parametrischen PDF's jedoch eine bessere Annäherung an die Realität, als etwa die Delta-Funktion. Die Rechenzeiten liegen hierbei jedoch etwa um das Zehnfache höher als bei der Delta-Approximation. Der Bearbeiter eines Problems muss also von Fall zu Fall neu entscheiden, ob kurze Rechenzeiten oder möglichst hohe Genauigkeiten im Vordergrund stehen. Eine oft verwandte Möglichkeit ist die, die Genauigkeit der einzelnen Modelle mit zunehmender Annäherung an den stationären Endzustand zu erhöhen. Es bietet sich also auch hier an, die Delta-Funktion zu Beginn der Rechnung zu verwenden und dann gegen Ende der Berechnung zu einer Berechnung an Hand der Gauß-Funktion umzuschalten.

Eine weitere Möglichkeit, die Rechenzeit so gering wie möglich zu halten, ist die Verwendung von Tabellen, bei deren Erstellung im Preprozessing die Integration schon durchgeführt wurde. Das die Erstellung nur einmal geschehen muss, kann hier ohne Weiteres die Gauß-Verteilung benutzt werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde eine 3D-Tabelle benutzt, die den Mischungsbruch, die Mischungsbruchfluktuation und den Druck als Eingabegröße hat. Die Zeit, die im Preprozessing für die Erstellung dieser Tabelle benötigt wird, beträgt in etwa 30 Minuten. Die Tabelle besitzt einen Speicherbedarf von 2.9 Megabytes.

Gauß-Approximation	Delta-Approximation	3D-Tabelle
79.49 s	0.67 s	0.78 s

Bild 7.2.3 Rechenzeitvergleich für die Berechnung der Mittelwert der chemischen Quellen in der TECFLAM-Brennkammer

Bild 7.2.3 zeigt den Rechenzeitbedarf der drei benutzten Berechnungsmethoden. Dargestellt sind die Zeiten, die das Chemie-Modul während der Berechnung der TECFLAM-Brennkammer für die Ermittlung der mittleren chemischen Quellen aller Zellen benötigt. Wie bereits erwähnt, benötigt die Online-Berechnung an Hand der Gauß-Verteilung etwa hundertmal mehr Rechenzeit als die anderen beiden Methoden. Die Delta-Approximation und das Auslesen der 3D-Tabelle dauert etwa gleich lang, weil die Zugriffszeit auf eine Tabelle etwa um den Faktor 2 pro Dimension ansteigt. Dagegen muss bei der hier verwendeten Doppel-Delta-Funktion zweimal auf eine 2D-Tabelle zugegriffen werden.

7.2.2 Rechnung mit Berücksichtigung von Nichtgleichgewichtseffekten

In diesem Kapitel wird das Ergebnis der Berechnung des TECFLAM-Drallbrenners mit Berücksichtigung der Wärmefreisetzung vorgestellt. Für die Bestimmung der Wärmefreisetzung wurde eine ILDM-Tabelle benutzt, welche wiederum Mischungsbruch, CO_2 und H_2O als Eingabeparameter besitzt. Wie schon bei den Gleichgewichtsrechnungen ist die Brennkammer auch in diesem Fall adiabat gerechnet worden, was beim Vergleich mit den Messungen berücksichtigt werden muss. Zur Bewertung des Ergebnisses eignet sich an dieser Stelle aus den oben genannten Gründen nur der relative Vergleich mit den adiabaten Gleichgewichtsrechnungen.
Die für diese Verbrennungsrechnung erstellte ILDM-Tabelle basiert auf einem Zeitschritt von 5µs und wurde als Grundlage für eine weitere im Preprozessing erstellte vierdimensionale Tabelle benutzt. Diese 4D-Tabelle beinhaltet neben den Fortschrittsvariablen auch die Fluktuation des Mischungsbruchs als Eingabegröße und enthält die integrierten Werte. Die Berechnung der Mittelwerte dieser Tabelle erfolgte an Hand der Gauß-Approximation. Durch diese Vorgehensweise wurde erreicht, dass sich die Berechnung der chemischen Quellen an Hand der ILDM-Chemie nur um den Faktor zwei verlängerte, was die Methode für den praxisnahen Anwendungsfall anwendbar erscheinen lässt. Die ILDM-Daten stammen aus einer Original-Tabelle, die lediglich Momentanwerte enthält und einen Speicherbedarf von ca. 200 Megabytes besitzt. Die daraus extrahierte Tabelle belegt nach der Hinzunahme einer weiteren Dimension für die Mischungsbruch-Fluktuation einen Speicherplatz von 10.2 Megabytes. Neben dem erhöhten Speicherbedarf der Original-Tabelle musste auch

aus Gründen der Recheneffizienz auf diese Tabelle verzichtet werden. Die Zugriffszeit auf die Original-Tabelle lag um etwa zwei Größenordnungen höher, als die Zugriffszeit auf die extrahierte Tabelle.
Die Fluktuationen in Richtung der Fortschrittsvariablen wurden in diesem Fall vernachlässigt, weil diese nur wenig Einfluss auf die Lösung haben [Landenfeld,1999] und der Mehraufwand auf Grund der langen Rechenzeiten für die Strömungslösung nicht in Kauf genommen werden sollte.

Bild 7.2.4 zeigt die Temperaturverteilung, die mittels der ILDM-Methode berechnet wurde. Im Vergleich zur Berechnung mit der Annahme chemischen Gleichgewichts (Bild 7.2.1) sind insbesondere Unterschiede nahe der Einströmung zu erkennen. Durch die hohen Strömungsgeschwindigkeiten bleibt der chemischen Reaktion hier nicht mehr genügend Zeit, um vollständig auszureagieren. Die Temperatur steigt nicht so schnell an und der kalte Bereich erscheint größer.

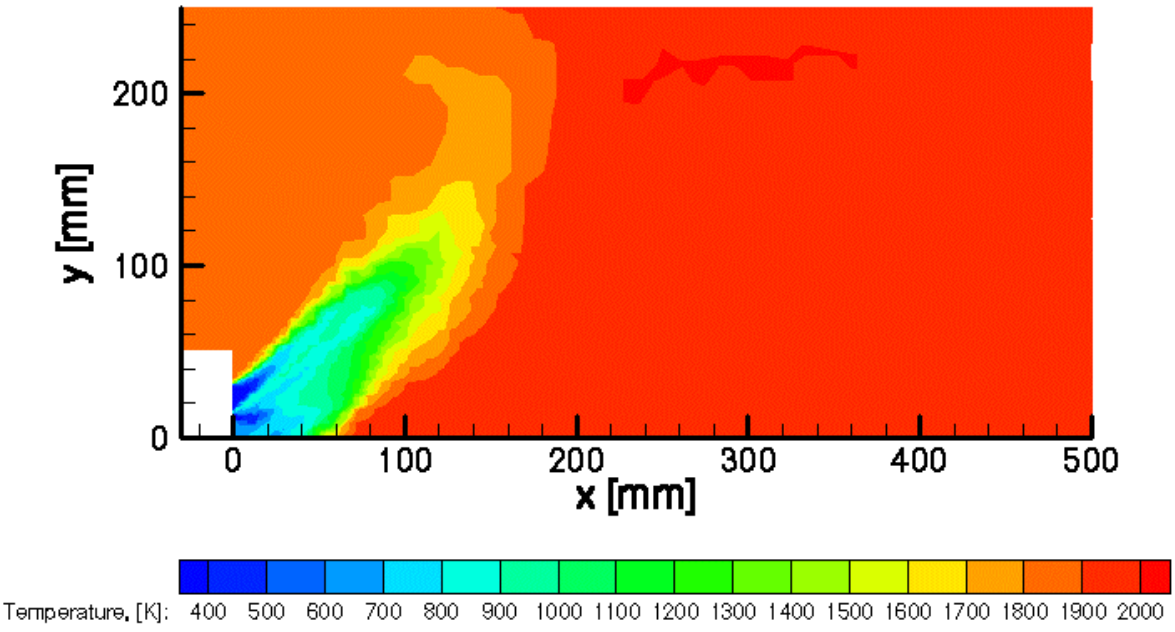

Bild 7.2.4 mittels reduzierter Chemie berechnete Temperatur-Verteilung

Dies entspricht genau den Erwartungen. Die Rückwirkung auf das Strömungsfeld ist marginal, jedoch werden die Temperaturen in weiten Bereichen geringer. Die Flamme beginnt im Mittel erst später zu brennen, was darauf hindeutet, dass es durch die hohe Turbulenz im Einströmbereich auch zu Verlöscheffekten kommen könnte.
Auf einen tiefergehenden Vergleich der Ergebnisse mit Messungen wird an dieser Stelle verzichtet. Die Probleme, die in Kapitel 7.1 aufgeführt wurden verhindern genaue Aussagen über Detail-Phänomene. Hier kommen so viele verschiedene Effekte zusammen, so dass die Gefahr besteht, Ergebnisse den falschen Ursachen zuzuordnen.
Festzuhalten ist jedoch, dass die Methode bei nur viermal höherem Rechenbedarf für die Bestimmung der Quellterme gut funktioniert und die Ergebnisse in die erwartete Richtung verändert. Sie steht nun zur Anwendung zur Verfügung und kann bei der Untersuchung neuer Anwendungsfälle Effekte vorhersagen, die bisher mit dem Gleichgewichtsmodell nicht zu beschreiben waren.

8 Zusammenfassung und Ausblick

Die Modellierung turbulenter Strömungen bei gleichzeitiger chemischer Reaktion stellt nach wie vor eine große Herausforderung dar. Durch die Vielzahl von gekoppelten Phänomenen, die für eine gute Vorhersage der realistischen Verbrennungsvorgänge in Betracht gezogen werden müssen, verbrauchen die heute gebräuchlichen Rechner auch für einfache Probleme noch sehr viel Rechenzeit. Daher müssen Modelle gefunden werden, die die Berechnungen soweit vereinfachen, dass möglichst komplexe Anwendungsfälle mit vertretbarem Aufwand gerechnet werden können. Weiterhin müssen bestehende Modelle in ihrer numerischen Effizienz optimiert werden.
Diese Arbeit liefert einen Beitrag zur Optimierung der Berechnung der Chemie-Turbulenz-Interaktion. In enger Zusammenarbeit mit dem Experiment wurden Wege gesucht, die komplizierten Zusammenhänge in angemessener Zeit mit einer angemessenen Genauigkeit zu beschreiben.
Während ihrer Entwicklung werden Modelle meist zuerst theoretisch hergeleitet und daraufhin auf einfache Testfälle angewandt, die so geartet sind, dass möglichst nur der physikalische Effekt zum Tragen kommt, der durch das neue Modell besser beschrieben werden soll. Ein Vergleich der Rechenergebnisse mit den Messungen dieses Testfalls soll dann entscheiden, ob das neue Modell wirklich bessere Ergebnis liefert. Bei turbulenten Strömungen gibt es leider nur wenige Testfälle, bei denen davon ausgegangen werden kann, dass die Ergebnisse der Strömungssimulation so gut sind, dass Abweichungen vom Experiment nur vom Verbrennungsmodell herrühren. Um die Modellierung der chemischen Reaktion dennoch betrachten zu können, wurde im Rahmen dieser Arbeit ein anderer Weg beschritten:

Messverfahren, wie die RAMAN-Spektroskopie oder die Quantitative-Lichtschnitt-Analyse, liefern mit einer hohen zeitlichen Auflösung die wesentlichen Eingabe-Parameter für die Beschreibung der chemischen Reaktion. Um nun die Modellierung der Strömung als Fehlerquelle zu umgehen, wurde in dieser Arbeit von den Messergebnissen praxisnaher Anwendungsfälle ausgegangen. Diese Messergebnisse lieferten die Anfangsbedingungen für den Vergleich verschiedener Chemie-Modelle. So wurde zum einen erreicht, dass tatsächlich nur das Chemie-Modell für die Qualität der Ergebnisse verantwortlich ist und zum anderen hatte diese Vorgehensweise den Vorteil, dass direkt mit praxisnahen, verdrallten Flammen gearbeitet werden konnte und so eine Übertragbarkeit der Ergebnisse auf andere realistische Brennkammern eher gewährleistet ist, als das bei einfachen Testfällen der Fall ist.
Der Schwerpunkt dieser Arbeit lag unter anderem in der adäquaten Beschreibung der Fluktuationen der Einflussparameter auf die chemische Reaktion. Die zeitlich aufgelösten Messungen lieferten die tatsächlich vorliegenden Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen der Einflussparameter. Diese PDF's konnten einerseits als Eingabe-Funktionen für die Berechnung der chemischen Quellterme genommen werden, andererseits lieferten sie aber auch die Parameter für Ersatzfunktionen wie beispielsweise die Gauß- oder Delta-Funktion. Die Ergebnisse der Berechnungen mit den Ersatzfunktionen wurden dann mit den Ergebnissen der Mittelung an Hand der gemessenen PDF's verglichen.

Folgende Ergebnisse wurden bei diesen Untersuchungen gefunden:

- Für die Beschreibung der Mischungsbruchfluktuation genügt während des Iterationsverlaufs des Strömungslösers die Delta-Funktion. Zur Bestimmung von Schadstoffen und bei hochturbulenten Strömungen ist die Gauß-Verteilung zu bevorzugen.
- In fast allen Bereichen, außer in Bereichen nahe der Einströmung, korrelieren die Schwankungen der thermodynamischen Größen und der Spezies mit der Gauß-Funktion
- Für die Beschreibung der Fluktuationen der Fortschrittsvariablen genügte in diesem Anwendungsfall die Delta-Approximation
- Der Fehler, der durch die Annahme der statistischen Unabhängigkeit der Fortschrittsvariablen entsteht, ist gegenüber anderen Fehlern (Turbulenzmodelle) in diesem Anwendungsfall verhältnismäßig gering.

Sollten sich diese Erkenntnisse bei weiteren Untersuchungen an anderen Anwendungsfällen bestätigen, so kann die Modellierung der chemischen Reaktion in turbulenten Flammen in vielen Fällen stark vereinfacht werden. Der Benutzer eines CFD-Codes sollte sich immer im klaren sein, welche Zielgrößen für ihn wirklich wichtig sind. In vielen Untersuchungen, insbesondere bei zeitaufwendigen Parameterstudien, kann die Berechnung der mittleren chemischen Quellen an Hand der Delta-Approximation unnötige Rechenzeit sparen.

Um Erkenntnisse in der Art, wie sie oben beschrieben sind, nutzen zu können, muss es möglich sein, sehr flexibel zwischen den einzelnen Berechnungsmethoden und Chemie-Modellen hin- und herzuschalten. Aus diesem Grund wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Chemie-Modul entwickelt, bei dem durch eine Modularisierung die Übersichtlichkeit des Programm-Codes gesichert wurde. Es wurde eine Struktur entwickelt, die es erlaubt, ohne viel Aufwand neue Modelle einzubinden. Der Programm-Code bleibt dadurch weiterhin übersichtlich und ist somit auch für neue Nutzer schnell zu verstehen und anzuwenden. Durch die modulare Struktur verliert der Code zwar an Effizienz, jedoch wird der dabei gewonnene hohe Standard an Qualitätssicherung aus der Sicht dieser Arbeit bevorzugt.

Das Chemie-Modul beinhaltet zur Berechnung der chemischen Quellen einen Gleichgewichtsalgorithmus der auf dem Gleichgewichtskonstanten-Verfahren basiert. Zur Beschreibung von Nichtgleichgewichtseffekten wurden ILDM-Tabellen implementiert. Die Fluktuationen können für alle Integrationsrichtungen wahlweise mit der Gauß- oder Delta-Funktion beschrieben werden.
Für eine effiziente Berechnung der chemischen Quellen ist es sinnvoll, Berechnungen, die sehr oft durchgeführt werden müssen, bereits im Preprozessing durchzuführen und deren Ergebnisse in Tabellen abzulegen. Daher wurde im Rahmen dieser Arbeit ein Tabellensystem entwickelt, das es erlaubt, beliebige Daten, die von mehreren Parametern abhängen dürfen, effizient abzulegen. Die Tabellen optimieren sich automatisch während ihrer Erstellung in Bezug auf Zugriffszeit und Speicherbedarf.

Zum Abschluss der Arbeit wurde mit dem entwickelten Chemie-Modul inklusive Tabellensystem in Verbindung mit dem DLR-eigenen Strömungslöser TRUST ein praxisnaher Anwendungsfall gerechnet. Hierzu bot sich der TECFLAM-Drallbrenner an, weil auf ihm ein Teil der Grundlagenuntersuchung beruhte und hierzu viele Messungen und Rechnungen zum Vergleich vorlagen. Die Ergebnisse aus der Strömungssimulation wiesen in einigen Punkten Schwächen auf, so dass ein detaillierter Vergleich mit den Messungen keine neuen Erkenntnisse gebracht hätte. Jedoch ist das Verständnis dieses Falles unter anderem durch

die vorangegangene Grundlagenuntersuchung so weit fortgeschritten, dass die Ergebnisse aus der Verbrennungssimulation durchaus bewertet werden konnten.
In einem ersten Schritt wurde eine Berechnung mit der Gleichgewichtsannahme durchgeführt. Die Ergebnisse, die durch Mitteln an Hand der Delta-Funktion entstanden, wichen erwartungsgemäß im Bereich der Einströmung am stärksten von der Lösung mit Gauß-Mittelung ab. Jedoch war die Delta-Approximation in weiten Bereichen der Brennkammer genügend genau.
In einem zweiten Schritt wurde der Fall mit der ILDM-Methode berechnet. Auch hier trat die erwartete Veränderung auf. Die Flamme wurde im Bereich hoher Strömungsgeschwindigkeiten nahe der Düsenmündung nicht so heiß, wie dies bei der Gleichgewichtslösung der Fall war. Die Methode funktioniert nun problemlos und die Ergebnisse werden durch sie in die erwartete Richtung verändert. Wesentlich für die Anwendung der Methode auf zukünftige komplexe Brennkammern ist die im Rahmen dieser Arbeit erreichte hohe Berechnungsgeschwindigkeit. Die Berechnung der Quellterme einer ILDM-Lösung benötigt nur etwa viermal mehr Rechenzeit, als die dazugehörige Gleichgewichtslösung. Diese Zeit liegt immer noch weit unter der Zeit, die der Strömungslöser benötigt.
Den zur Zeit implementierten Chemie-Modellen liegt die Annahme adiabater Verbrennung zu Grunde. Beim TECFLAM-Drallbrenner stellte sich heraus, dass diese Annahme die Ergebnisse stark verfälscht. Der Effekt der Wärmeabfuhr durch Strahlung und Konvektion ist noch mehr als die fehlerhaft berechnete Mischung dafür verantwortlich, dass die berechneten Temperaturen stark von den Messungen abweichen.
Zusammenfassend kann festgehalten werden, dass ein wesentlicher Fortschritt für zukünftige Modellierung der chemischen Reaktion in turbulenten Strömungen erreicht wurde. Zum einen wurde ein gut strukturiertes Programm-System geschaffen, welches die weitere Entwicklung von Verbrennungsmodellen stark vereinfachen wird. Es ist nun möglich, Ideen ohne allzu großen Programmieraufwand austesten zu können. Ferner wurde die Berechnung von Nichtgleichgewichtseffekten für praxisrelevante Fälle verfügbar gemacht. Es wird in Zukunft keine Schwierigkeit sein, neue Tabellen, wie beispielsweise für Kerosin, dem Chemie-Modul hinzuzufügen und damit einen komplexen Anwendungsfall zu berechnen.
Auf Grund der Komplexität der Physik der turbulenten Verbrennung bleiben noch eine Reihe von Problemstellungen, die im Rahmen dieser Arbeit nicht mehr gelöst werden können. Für die Berechnung vieler praxisrelevanter Brennkammern erscheint es unabdingbar, schnellst möglich die nichtadiabate Behandlung der chemischen Reaktion mit einzubeziehen. Bei Brennern wie beispielsweise dem TECFLAM-Drallbrenner ist die Strömung merklich von der Wärmefreisetzung abhängig. Die Temperatur-Absenkung durch Wärmeabfuhr ist in diesem Fall relevanter als die Effekte der zeitabhängigen Chemie. Ferner hat sich wieder gezeigt, dass die Berechnung der Mischung auch für Strömungsfälle mit Verbrennung absolut im Vordergrund steht. Gute Netze mit hoher Auflösung, genaue Randbedingungen und gute Turbulenzmodelle erscheinen für die Untersuchung von komplexen Brennkammern wichtiger als ausgefeilte Verbrennungsmodelle. Eine tiefergehende Modellierung der turbulenten Verbrennung in praxisnahen Brennkammern wird wohl mittelfristig nur durch gezielte Vereinfachungen möglich sein.
Das Ergebnis dieser Arbeit setzt die Grundlage dafür, in Zukunft praxisrelevante Fälle mit einfachen reduzierten Systemen beschreiben zu können und gleichzeitig durch die modulare Struktur des Chemie-Moduls viele neue Ansätze der Modellierung der mittleren chemischen Quellen austesten zu können.

Literaturverzeichnis

P. W. Atkins
Physikalische Chemie
Spektrum, 1992

Barlow, Flame D
Sandia Piloted CH_4/Air Jet Flames, 1999
http://www.ca.sandia.gov/tdf/3rdWorkshop/M3APilot97/FlameD.html

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

T. Blasenbrey, D. Schmidt, U. Maas
An improved tabulation strategy for reduced chemical kinetics based on t ILDM
http://www.uni-stuttgart.de/itv/

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

V. J. Bousinisque
Théorie de l'écoulement tourbillant
Mem. Pres. Acad. Sci. 23, p. 46, 1877

I. N. Bronstein, K. A. Semendjajew
Taschenbuch der Mathematik
Verlag Harri Deutsch, 1989

J.-Y. Chen
Chemical Models for PDF Modeling of Hydrogen-Air Nonpremixed turbulent Flames
Combustion and Flame 79, pp. 75-99, 1990

K. Döbbeling
Experimentelle und theoretische Untersuchungen an stark verdrallten turbulenten isothermen Strömungen
Dissertation an der Fakultät für Chemieingenieurwesen der Universität Karlsruhe, 1990

Dubbel
Tschenbuch für den Maschinenbau
Springer-Verlag, 1981

C. P. Fenimore
Formation of Nitric Oxide in Premixed Hydrocarbon Flames
13th Symposium (international) on Combustion, pp. 373-380, 1971

Frenklach Group
GRI-Mech
http://www.me.berkeley.edu/gri_mech

G. M. Goldin, S. Menon
A Comparison of Scalar PDF Turbulent Combustion Models
Combustion and Flame 113: 442-453, 1998

P. Griebel
Untersuchung zur schadstoffarmen, atmosphärischen Verbrennung in einem Fett-Mager-Brennkammersektor für Flugtriebwerke
DLR-Forschungsbericht 97-48, Dissertation, 1997

P. Habisreuther, P. Schmittel, P. Idda, H. Eickhoff, B. Lenze B
Experimentelle und numerische Untersuchungen an einer eingeschlossenen Drall-Diffusionsflamme
VDI Bericht 1313, S.127-132, 1997

Ch. Hirsch
Ein Beitrag zur Wechselwirkung von Turbulenz und Drall
Dissertation an der Fakultät für Chemieingenieurwesen, Uni Karlsruhe, 1996

H. C. Hottel, A.S. Sarofim
Radiative Transfer
McGraw-Hill Book Company, 1967

J. Janicka, W. Kollmann
A two-variables Formalism for the Treatment of chemical Reactions in turbulent H_2-Air Diffusion Flames
17. Comb. Symp. 1978

J. Johannes
Berechnung turbulenter Wasserstoff-Luft-Diffusionsflammen
Dissertation, Institut für technische Thermodynamik, RWTH Aachen, 1979

W. P. Jones
Models for Turbulent Flows with Variable Density and Combustion Prediction Methods for Turbulent Flows
Hemisphere Publ. Corp. , New York, 1980

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

KIVA II, Manual
National Energy Software Center
U.S. Department of Energy, Argonne USA, 1989

F. Knobloch, M. Seeboerger-Weichselbaum
JAVA
bhv Verlag, 1997

J. Koopman, C. Hassa, P. Griebel, P. Theisen
Investigation of a Rectangular Rich Quench Lean Combustor Sector
The American Society of Mechanical Engineers, USA 1998

Kremer, E.P. Hassel, J. Janicka
Velocity measurements in a strongly swirling natural gas flame
VDI Engineering Research, 63, 1997

Kremer, T. Landenfeld, E.P. Hassel, J. Janicka
Velocity measurements in a unconfined and confined swirling natural gas flames
18. Deutsch-Niederländischer Flammentag, Delft/NL, 1997

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

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

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

B. Lehmann
interne Mitteilung
Forschungszentrum für Luft- und Raumfahrt, Berlin, 1998

P. A. Libby, F. A. Williams
Turbulent Reacting Flows
Academic Press, 1994

H. Lübcke
Berechnung turbulenter reagierender Strömungen mit Hilfe einstufiger Reaktionsmodelle
Diplomarbeit am Hermann-Föttinger-Institut für Strömungsmechanik
Technische Universität Berlin, 1996

U. Maas, S.B. Pope
Simplifying chemical kinetics: intrinsic low-dimensional manifolds in composition space
Combustion and Flame, 1992

U. Maas, S.B. Pope
Implementation of simplified chemical kinetics based on intrinsic low-dimensional manifolds
24th Symposium Combustion, 1993

W. Meier, S. Prucker, M.-H. Cao, W. Stricker
Characterization of Turbulent H2/N2/Air Jet Diffusion Flames by Single-Pulse Spontaneous Raman Scattering
Combust. Sci. Technol. Vol. 118, 293-312 (1996)

W. Meier, A. O. Vyrodov, V. Bergmann, W. Stricker:
Simultaneous Raman / LIF Measurements of Major Species and NO in Turbulent H2/Air Diffusion Flames
Appl. Phys. B 63, 79-90 (1996)

W. Meier, O. Keck, W. Stricker
Temperatur- und Speziesverteilungen in TECFLAM-Drallflammen
Ergebnisse aus Raman-Einzelpulsmessungen
Bericht TECFLAM, 1999

C. E. S. S. Migueis
Untersuchung zur Optimierung der Mischzone einer
Fett-mager gestuften Ringbrennkammer
DLR-Forschungsbericht 96-33, Dissertation, 1996

J.A. Miller, R.J. Kee, M.D. Smoke, J.F.Grcar:
Paper WSS/CI 84-10, Western State Section of the Combustion Inst.,
Spring Meeting 1984

MSC Netzgenerierungssoftware
http://www.marc.com/

P. Mühleck, H. Schütz
3D Numerical Simulation of Combustion Chamber and Nozzle Flow including NO_x-Formation
Space Course, TU München, 1993

P. Mühleck
Numerische Untersuchungen turbulenter, reagierender Strömungen in Brennkammern und Schubdüsen von Hyperschall-Staustrahltriebwerken
DLR-Forschungsbericht 95-18, Dissertation, 1995

NAG Compiler Libraries
blas-libraries
http://www.nag.co.uk/numeric/flolch.html

H. Niemann, D. Schmidt, U. Maas
An Efficient Storage Scheme for Reduced Chemical Kinetics Based on Orthogonal Polynomials
ZIB-Preprint SC-96-18, 1996

B. Noll
Numerische Strömungsmechanik
Springer-Verlag, 1993

Ch. Ohl
Untersuchung des Strömungsfeldes in einer industrienahen Brennkammer
Diplomarbeit am Fachgebiet Energie- und Kraftwerkstechnik, TU Darmstadt, 1997

N. Peters
Laminar flamelet concepts in turbulent combustion
21th Symposium Combustion, Pittsburgh, 1987

M. Philipp
Experimentelle und theoretische Untersuchungen zum Stabilitätsverhalten von Drallflammen mit zentraler Rückströmzone
Dissertation, Universität Karlsruhe, 1991

S.B. Pope
The Probability Approach to the Modeling of Turbulent Reacting Flows
Comb. Flame, 27, pp 299-312, 1976

S.B. Pope
A Monte Carlo Method for the PDF Equations of Turbulent Reaktive Flow
Combust. Sci. Techn. 25, pp. 159-174, 1981

S.B. Pope
Computations of Turbulent Combustion: Progress and Challenges
23th Symposium on Combustion, pp.591-612, 1990

W.H. Press
Numerical Recipes
Cambridge University Press, 1989

M. Rachner
Die Stoffeigenschaften von Kerosin Jet A-1
DLR-Mitteilung 98-01, 1998

J. D. Ramshaw, A. A. Amsden
J. Comput. Phys. 59, 3, 484, 1985

J. C. Rotta
Turbulente Strömungen
B. G. Teubner Stuttgart, 1972

Sandia National Laboratories
CHEMKIN™
http://www.ca.sandia.gov/chemkin/index.html

H. Schade
Kontinuumstheorie strömender Medien
Springer-Verlag, 1970

H. Schlichting
Grenzschicht-Theorie
Verlag G. Braun, 1965

D. Schmidt
Modellierung reaktiver Strömungen unter Verwendung automatisch reduzierter Reaktionsmechanismen
Dissertation, Uni Heidelberg, 1996

P. Schmittel, P. Habisreuther, P. Idda, B. Lenze
TECFLAM Drallbrenner: Experimentelle und Numerische Untersuchung am Engler-Bunte-Institut
Festschrift Wolfgang Leukel, 1997, ISBN 3-00-001593-0

B. Schramm
Erstellung reduzierter Reaktionsmechanismen und deren Anwendung bei der Simulation turbulenter Flammen
Diplomarbeit, Fakultät für Physik und Astronomie,
Ruprecht-Karls-Universität Heidelberg, 1999

H. Schütz, H. Eickhoff, P. Theisen J. Koopman
Analysis of the mixing zone of an air staged combustor
American Institut of Aeronautics and Astronautics, USA 1997

M. A. S. Serag-el-Din
The Numerical Prediction of the Flow and Combustion Processes in a Three-Dimensional Can Combuster
PhD Thesis, Department of Mechanical Engineering
Imperial College of Science and Technology, London, 1977

R. Siegel, J. R. Howell, J. Lohrengel
Wärmeübertragung durch Strahlung, Teil 3
Springer Verlag, 1993

D.R. Stull, H. Prophet
JANAF Thermochemical Tables
2nd ed., U.S. Department of Commerce/National Bureau of Standards
NSRDS-NBS 37, 1971

A. W. Cook, J. J. Riley
Subgrid-Scale Modeling for Turbulent Reacting Flows
Combustion and Flame 112: 592-606, 1998

Arbeitsgemeinschaft technische Flammen TECFLAM
TECLFAM Swirl Burner Data Archive
http://www.dlr.de/VT/Datenarchiv/TECFLAM.html

P. Theisen, P. Voigt
Experimental Analysis of Unsteady Mixing in an RQL Combustor Segment aimed for Validation of PDF-Models in the TRUST Code
AG-STAB, Germany 1998

P. A. Thompson
Compressible-Fluid Dynamics
Advanced Engineering Series, 1972

P. Voigt
Entwicklung und Einsatz eines Laserlichtschnittverfahrens zur quantitativen Konzentrationsmessung bei Mischungsprozessen
Dissertation, DLR 1999

J. Warnatz, U. Maas, R.W. Dibble
Verbrennung
Springer-Verlag, 1996

D. C. Wilcox
Turbulence Modeling for CFD
DCW Industries, ISBN 0-9636051-0-0, 1994

B. Yang, S. B. Pope
An Investigation of the Accuracy of Manifold Methods and Splitting Schemes in the Computational Implementation of Combustion Chemistry
Combustion and Flame 112: 16-32, 1998

Y. B. Zeldovic', P. Y. Sadovnikov, D. A. Frank-Kamenetzkij
Oxidation of Nitrogen in Combustion (translated by M. Shelef)
Academy of Sciences of the USSr, Moscow, 1947

W. Zinser
Zur Entwicklung Mathematischer Flammenmodelle für die Verfeuerung Technischer Brennstoffe
VDI Verlag, 1985

R. Zurmühl
Praktische Mathematik für Ingenieure und Physiker, 5.Auflage
Springer-Verlag, Berlin, 1965

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name:	Peter Theisen
Geburtsdatum:	30.07.1970
Geburtsort:	Wittlich
Familienstand:	ledig

Schulausbildung

08.1977 - 06.1981	Grundschule Wittlich-Wengerohr
08.1981 - 05.1990	Staatliches Cusanus-Gymnasium, Wittlich
23. Mai 1990	Schulabschluss mit der allgemeinen Hochschulreife

Studium

10.1990 - 04.1995	Maschinenbau, Fachrichtung Wärmetechnik, RWTH Aachen
24. April 1995	Studienabschluss mit dem Hauptdiplom

Berufspraxis

06.1995 – 06.2000	Wissenschaftlicher Mitarbeiter im Bereich Verbrennungssimulation, Institut für Verbrennungsstechnik, Deutsches Forschungszentrum für Luft- und Raumfahrt, DLR, Köln

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Mitarbeiter am Institut für Verbrennungstechnik des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Köln.

Dem Leiter des Instituts, Herrn Prof. Dr.-Ing. M. Aigner, möchte ich meinen herzlichen Dank für die Förderung und Unterstützung dieser Arbeit sowie für die Übernahme des Hauptreferats aussprechen. Ebenso gilt mein Dank dem Koreferenten Herrn Prof. Dr.-Ing. B. Weigand für sein Interesse an dieser Arbeit.

Herrn Prof. Dr.-Ing. H. Weyer und Prof. Dr.-Ing. H. Eickhoff danke ich für ihr Vertrauen, das sie mir entgegen brachten, als sie mir die Möglichkeit gaben, beim DLR zu arbeiten.

Ferner danke ich Herrn Dr. Berthold Noll, der die fachliche Betreuung übernommen und mit seinen Anregungen und Hinweisen wesentlich zum Gelingen der Arbeit beigetragen hat.

Herrn Dr. Harald Schütz und Herrn Guido Schmitz danke ich für die Unterstützung, die sie mir in der Vergangenheit nicht nur in fachlicher Hinsicht gegeben haben und damit maßgeblich am Erfolg der Arbeit beteiligt waren.

Von allen Mitarbeitern des Instituts möchte ich Herrn Oliver Kunz, Herrn Michael Rachner, Herrn Johannes Koopman, Herrn Dr. Hassa, Herrn Dr. Peter Voigt, Herrn Thomas Behrend und Herrn Martin Carl besonders hervorheben, die mir immer sehr hilfsbereit bei Seite standen und zu einem angenehmen Arbeitsklima beigetragen haben.

Nicht zuletzt möchte ich meiner Familie und meinen Freunden meinen herzlichen Dank aussprechen. Nur durch ihre stetige Unterstützung ist ein erfolgreicher Abschluss dieser Arbeit erst möglich gewesen.