

## PDF-Berechnung einer turbulenten Flamme unter Verwendung des Repromodellierens

Dipl.-Phys. A. Obieglo, Dr. J. Gass, Zürich/CH;  
Dr. A. Buki, Dr. T. Turányi, Budapest/HU



### Zusammenfassung

In der Arbeit werden Ergebnisse einer numerischen Simulation einer axialsymmetrischen, turbulenten nichtvorgemischten Wasserstoff-Jet-Flamme präsentiert und mit experimentellen Daten verglichen. Das Konzept des Repromodellierens wird präsentiert und Resultate einer numerischen Simulation eines perfekt vorgemischten Reaktors mit den Ergebnissen detaillierter Chemie verglichen. Es wird aufgezeigt, wie sich chemische Abläufe mittels Repromodellieren sehr genau beschreiben lassen. Ebenso wird erläutert, wie gut sich Temperaturen und Hauptspezies im physikalischen Raum einer turbulenten Verbrennung mittels PDF Methode abbilden lassen und wo Limitierungen seitens der Chemie auftreten, wenn ein Ansatz mit Gleichgewichts-Chemie gewählt wird. Die Verwendung des Repromodellierens für den Einsatz in turbulenten Verbrennungsvorgängen wird diskutiert und anhand der Koppelung einer Transportgleichung für die PDF mit der Methode des Repromodellierens vorgestellt.

### 1 Einleitung

Die in der Simulation turbulenter Verbrennung verwendeten Transportgleichungen werden meist in zeitlich gemittelter Form verwendet [1].

$$\frac{\partial \bar{\rho} \tilde{Y}_n}{\partial t} + \frac{\partial \bar{\rho} \tilde{u}_j \tilde{Y}_n}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left\{ \left( \bar{\rho} D_n + \frac{\mu_t}{Sc_t} \right) \frac{\partial \tilde{Y}_n}{\partial x_j} \right\} + \bar{\omega}_n \quad (1)$$

Dabei beschreibt  $Y_n$  den Massenbruch der Spezies  $n$ ,  $\rho$  die Dichte,  $D$  die Diffusion,  $\mu_t$  die turbulente Viskosität und  $Sc_t$  die turbulente Schmidtzahl. Die zeitliche Mittelung ist durch ein Querstrich (-) markiert und die dichtegewichtete Mittelung durch eine Tilde ( $\sim$ ). Der Quellterm  $\bar{\omega}_n$  hat eine stark nichtlineare Abhängigkeit von der Temperatur und der Spezieskonzentration. Es ist daher nicht möglich, ihn durch gemittelte Größen darzustellen. Vielmehr erfolgt die Darstellung durch einen statistischen Ansatz mit Hilfe von Wahrscheinlichkeits-Dichtefunktionen, kurz PDF (*probability density function*). Dadurch ergibt sich für den Quellterm folgende Darstellung:

$$\bar{\omega}_n = \int_0^1 \dots \int_0^1 \int_0^\infty \dot{\omega}_n(Y_1, \dots, Y_N, T) P(Y_1, \dots, Y_N, T) dY_1 \dots dY_N dT \quad (2)$$

$\dot{\omega}_n$  gibt die lokale Produktionsrate der Spezies  $n$  an und  $P$  beschreibt eine mehrdimensionale Wahrscheinlichkeitsdichte-Funktion (Verbund-PDF). Die Berechnung der PDF erfolgt entweder durch die Annahme einer vorgegebenen Form (*assumed PDF*) oder Lösung der Transportgleichung der Verbund-PDF. Der Vorteil einer Transportgleichung für die PDF liegt u.a. in der geschlossenen Form des Quellterms. Eine allgemeine Form der Transportgleichung lässt sich wie folgt angeben ([2], [3]):

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \bar{P} + \frac{\partial}{\partial x_i} \tilde{u}_i \bar{P} - \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \langle \rho \rangle D \frac{\partial}{\partial x_i} \bar{P} \right) + \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial \Psi_{\alpha}} [S_{\alpha} \bar{P}] = \\ - \frac{1}{\langle \rho \rangle} \frac{\partial}{\partial x_i} \langle u_i'' | \Phi = \Psi \rangle \bar{P} - \sum_{\alpha=1}^{\sigma} \sum_{\beta=1}^{\sigma} \frac{\partial}{\partial \Psi_{\alpha}} \frac{\partial}{\partial \Psi_{\beta}} \left[ \left\langle D \frac{\partial \Phi_{\alpha}}{\partial x_i} \frac{\partial \Phi_{\beta}}{\partial x_i} \right| \Phi = \Psi \right] \bar{P} \end{aligned} \quad (3)$$

Die Terme der linken Seite treten in geschlossener Form auf, die Terme der rechten Seite müssen modelliert werden. Der erste Term auf der rechten Seite, die turbulente Konvektion, wird durch ein Gradienten-Diffusionsmodell beschrieben. Der zweite Term, die turbulente Mischung, durch ein IEM Modell [4].

Wegen der hohen Dimensionalität des thermochemischen Raumes für Verbrennungssysteme ist es notwendig, das chemische System mit nur wenigen Variablen darzustellen. Neben der Entwicklung reduzierter Mechanismen (Chens 5-Schritt Mechanismus für  $H_2$ , [5]), mathematischen Methoden zur Beschreibung der Manigfaltigkeiten im thermochemischen Raum (Maas' ILDM Methode, [6]) gibt es den Ansatz, die Mehrdimensionalität durch eine lokal beschränkte aber vollständige Auflösung zu erfassen (Popes ISAT Methode, [7]). In dem hier vorgestellten Ansatz beschreiben wir die chemischen Reaktionsabläufe im Raum mit Hilfe von Splines: das von Turanyi für den Einsatz in der Verbrennung entwickelte Repromodellieren ([8], [9]). Die endgültige Version für das Fitten wurde mit bikubischen Splines durchgeführt.

## 2 Repromodellieren

Die Methode des Repromodellierens bedeutet die Durchführung vieler Simulationen eines grossen Modells mit denen der gesamte Anwendungsbereich des Modells abgedeckt wird. Die Ergebnisse der Simulation werden in einer Datenbank gespeichert und anschliessend durch entsprechend angepasste Funktionen dargestellt. Diese empirischen Funktionen können sehr schnell bestimmt werden und das Ausgangsmodell in weiteren Berechnungen

ersetzen. Eine typische Situation ist die mehrfache Verwendung des Repromodells als Teil eines komplizierteren Modells. Zum Beispiel kann das komplizierte Modell ein Programm für turbulente Flammen sein, und die häufig genutzte Repromodellierung berechnet die zeitliche Konzentrationsänderung aufgrund chemischer Reaktionen [10].

Die detaillierten chemischen Abläufe bei der Wasserstoff-Verbrennung werden durch bikubische Splines als Funktion der lokalen Massenbrüche von  $Y_{H_2O}$  und  $Y_{N_2}$  beschrieben.

Die Datenbank basiert auf der Bildung von brennbaren Gemischen aus Verbranntem und Unverbranntem. Die zeitliche Entwicklung der Verbrennung wurde in Form von Konzentrationsänderungen aufgenommen. Die Prozedur wurde für eine Reihe von Mischungen von  $\Phi = 0.5$  bis  $\Phi = 6$  durchgeführt, wodurch die Wasserstoffverbrennung für einen grossen Bereich von Äquivalenzverhältnissen untersucht wurde [11]. Die gesammelten Daten wurden dann mit Hilfe von bikubischen Splines angepasst [9].

Die Verbund-PDF reduziert sich damit auf zwei Dimensionen:

$$\bar{\omega}_n = \int_0^1 \int_0^1 \dot{\omega}_n(Y_{H_2O}, Y_{N_2}) P(Y_{H_2O}, Y_{N_2}) dY_{H_2O} dY_{N_2} \quad (4)$$

Das Verfahren benötigt keine *look-up* Tabellen für die Speicherung der Zwischenzustände, wie es sonst bei der Verwendung reduzierter Mechanismen notwendig ist. Die Verbesserungen in der Rechengeschwindigkeit sollten Möglichkeiten für den Einsatz in einfachen technischen Applikationen schaffen. Anhand von Berechnungen einer turbulenten nicht-vorgemischten Wasserstoff-Jetflamme werden die Möglichkeiten und Limitierungen einer auf dem Mischungsbruch basierende PDF-Berechnung vorgestellt. Die Ergebnisse des Repromodellierens eines gemischten Reaktors werden im Vergleich zu einer detaillierten Behandlung der Chemie diskutiert. Die Koppelung der beiden Methoden wird vorgestellt.

### 3 Ergebnisse und Diskussion

Bei der Behandlung turbulenter reaktiver Strömungen ist die genaue Abbildung des Strömungsfeldes entscheidend für eine weitere Diskussion. Im Fall der nichtvorgemischten Wasserstoff-Flamme wurden erste Berechnungen mit einer auf dem Mischungsbruch basierten PDF Methode durchgeführt. Es soll gezeigt werden, wie genau mit diesem einfachen Ansatz die Hauptkomponenten und Temperaturen berechnet werden können und welche Limitierungen mit der Annahme einer Gleichgewichts-Chemie auftreten.

Die Geometrie der untersuchten Flamme ist in der Figur 1.a gegeben. Wasserstoff strömt mit einer mittleren Geschwindigkeit von  $\sim 300 \text{ m/s}$  durch ein  $3.75 \text{ mm}$  weites Rohr, vermischt sich mit der Luft, die mit  $\sim 1 \text{ m/s}$  einströmt und bildet eine  $H_2$ -Flamme mit einer experimentell ermittelten Flammenlänge von  $675 \text{ mm}$  ([12],[13],[14],[15]). Die Berechnung der turbulenten Strömung erfolgt durch ein  $k - \epsilon$  Modell mit *Pope-Korrektur*. Die PDF Transportgleichung wurde in diesem Fall für den Mischungsbruch gelöst.

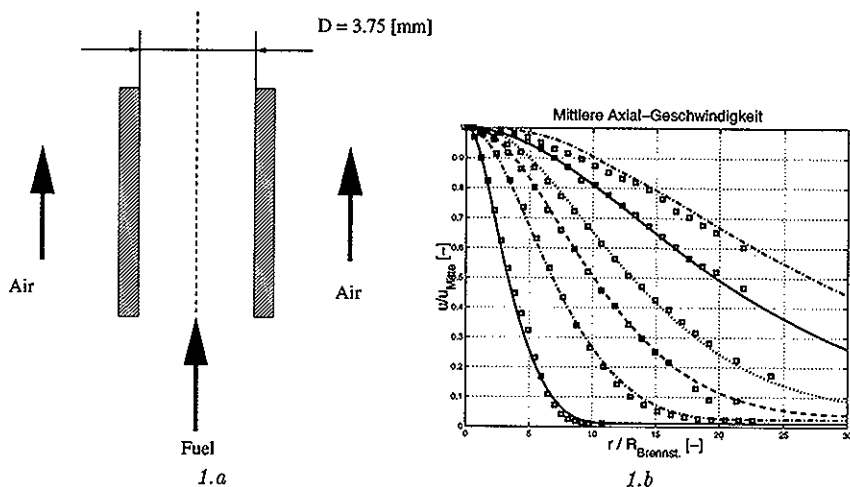


Abbildung 1: a) Düse der  $\text{H}_2$  Flamme mit  $D = 3.75 \text{ mm}$ . b) Geschwindigkeitsprofile aus  $k-\epsilon$  und  $P(Z)$  Berechnung. Schnittlinien: (—)  $x/L = 1/8$ ,  $x/L = 3/4$ ; (— · —)  $x/L = 1/4$ ,  $x/L = 1/1$ ; (— —)  $x/L = 3/8$ ; (...)  $x/L = 1/2$ ; (o) Experiment ( $L = 675 \text{ mm}$ , sichtbare Flammenlänge)

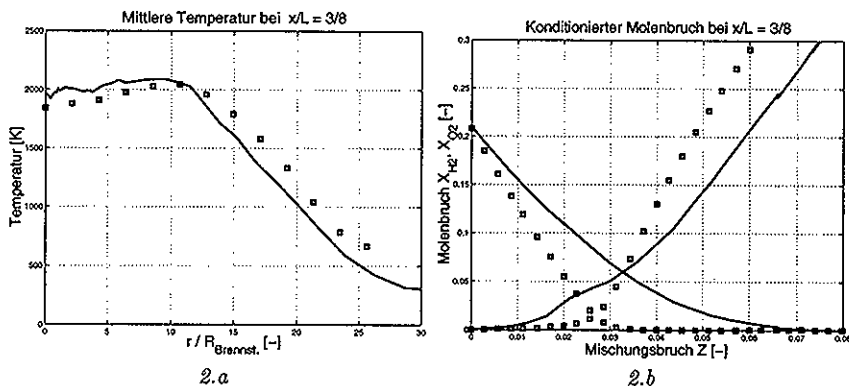


Abbildung 2: a) Temperaturprofil für  $P(Z)$  Berechnung bei  $x/L = 3/8$  und b)  $X_{\text{H}_2}$  und  $X_{\text{O}_2}$  in  $Z$ -Raum bei  $x/L = 3/8$ ; (—) Simulation (o) Experiment

Das Temperaturprofil in Figur 2.a zeigt eine gute Übereinstimmung der berechneten Werte mit den Ergebnissen des Experiments. Im Mischungsbruch-Raum (Figur 2.b) ist zu erkennen, dass mit der Annahme chemischen Gleichgewichts die chemischen Abläufe nicht so detailliert abgebildet werden, und es treten Abweichungen zum Experiment auf. Hinsichtlich einer gewünschten Vorhersage der Schadstoffbildung ist eine Verbesserung bei der Vorhersage der Massenkonzentrationen im Mischungsbruchraum insbesondere für Zwischenprodukte anzustreben. Es wird erwartet, dass durch die Verwendung des Repromodellierens diese Möglichkeit besteht.

Basierend auf detaillierten Angaben über die chemischen Reaktionen im Zustandsraum, werden alle Daten über den Reaktionsfortschritt des Systems gesammelt. Die Vielzahl der verfügbaren Daten und Informationen aus der Wasserstoff-Verbrennung wird mit Hilfe der bikubischen Splines angepasst. Für die Koppelung mit der PDF Transportgleichung wurden Splines generiert, die den Reaktionsfortschritt zweier für die Wasserstoff-Verbrennung geeigneter Zeitschritte,  $\Delta t = 10^{-4}$  s und  $\Delta t = 10^{-5}$  s, vorhersagen.

Zur Validierung der Vorhersagen des Repromodells wurden Berechnungen in einem perfekt gemischten Reaktor durchgeführt und mit Ergebnissen detaillierter Berechnungen verglichen. Als Beispiel ist in Figur 3.a für einen Anfangszustand, der durch einen willkürlich gewählten Massenbruch für Wasser und Stickstoff vorgegeben ist, die zeitliche Entwicklung des Brennstoffs  $H_2$  aufgetragen. Die Kurve der detaillierten Berechnung stimmt mit der des Repromodellierens praktisch überein (Figur 3.a). Neben der zeitlichen Entwicklung der einzelnen Spezies liefert die Methode auch den Verlauf der Temperatur. In Figur 3.b ist nur eine minimale Abweichung des Maximumwertes zu erkennen.

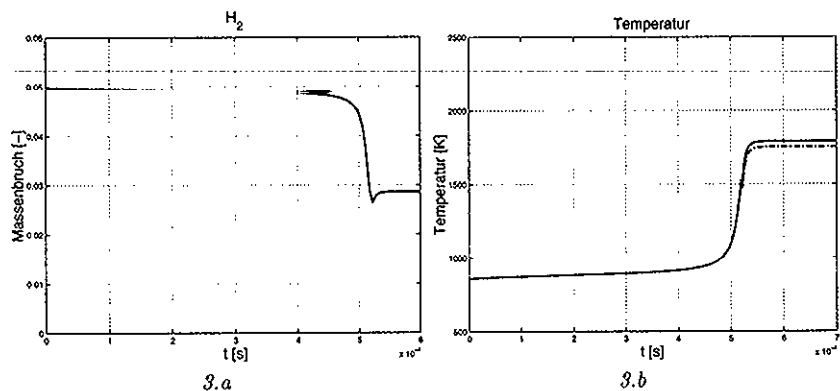


Abbildung 3: a)  $Y_{H_2}$  über der Zeit und b) Temperaturentwicklung bei einer Startbelegung  $Y_{H_2O} = 0.0754$  und  $Y_{N_2} = 0.723$ ; (- -) Detaillierte Berechnung, (-) Repro-Fit

Bei der Koppelung der PDF-Transportgleichung mit der Methode des Repromodellierens

wurde folgender Ansatz gewählt: Die PDF-Transportgleichung wird für zwei Größen, die Massenkonzentration von Wasser und Stickstoff, mit einem Monte Carlo Verfahren gelöst. Den Quellterm für jeden Zeitschritt erhält man aus den Splines für den vorliegenden Ausgangszustand. Die Lösung des Strömungsfeldes und die Berechnung der turbulenten Größen erfolgt durch Koppelung an einen Strömungslöser, der über die Dichte an den PDF-Löser gebunden ist.

Die Koppelung des Systems ist inzwischen abgeschlossen und Ergebnisse werden bald erwartet. Die Zwischenresultate aus der PDF-Berechnung der turbulenten Wasserstoff-Flamme mit der Annahme chemischen Gleichgewichts haben bereits gute Ergebnisse für die Hauptgrößen im physikalischen Raum geliefert. Die sehr gute Übereinstimmung der Repro-fits mit den Berechnungen detaillierter Chemie in einem gemischten Reaktor lassen erwarten, dass die Koppelung auch detaillierte Ergebnisse über die einzelnen Spezies liefern kann, was hinsichtlich der Vorhersage von Schadstoffen sehr hilfreich und nützlich sein wird.

## Danksagung

Die Autoren möchten den Herren Dr. R. Barlow und Dr. M. Flury für die Bereitstellung der experimentellen Daten danken. Das Projekt wurde unterstützt durch Herrn Dr. A. Hintermann vom Bundesamt für Energiewirtschaft, durch den SNSF, Grant Nr. 7UNPJ48687 und durch die Ungarische Wissenschaftsstiftung, Vertragsnr. T025875.

## Literatur

- [1] P.A. Libby and F.A. Williams. Academic Press, 1994.
- [2] S. B. Pope. *Prog. Energy Combustion. Sci.*, 11, 1985.
- [3] A. Laxander. PhD thesis, TU Stuttgart, 1996.
- [4] C. Dopazo. *Physics of Fluids*, 18:4, 1975.
- [5] J.-Y. Chen, W.-C. Chang, and M. Koszykowski. *Comb. Sci. and Tech.*, 110, 1995.
- [6] U. Maas and S.B. Pope. *Comb. and Flame*, 88, 1992.
- [7] S.B. Pope. *Combust. Theory Modelling*, 1, 1997.
- [8] T. Turányi. *25th Symp. (Int.) on Comb.*, 1994.
- [9] P. Dierckx. Oxford University Press, 1993.
- [10] T. Turányi. *Computers Chem.*, 18, 1994.
- [11] A. Buki, T. Perger, T. Turányi, and U. Maas. manuscript. *in preparation*, 1999.
- [12] R. S. Barlow. Release 1.1. Technical report, Sandia Nat. Lab., Livermore, 1997.
- [13] R.S. Barlow and C.D. Carter. *Comb. and Flame*, 97, 1994.
- [14] R. S. Barlow and C. D. Carter. *Comb. and Flame*, 104, 1996.
- [15] M. Flury and M. Schlatter. Technical report, ETH Zurich, 1997.