

**Abgasrezirkulation zur Stickoxidminderung –  
Bestimmung der Rezirkulationsrate in  
Brenner/Kessel Kombinationen mittels  
numerischer Simulation**

Horst Dreher  
Dr. sc. techn.  
Dipl.-Ing.  
Universität Karlsruhe (TH)

---

IV

Juris Druck + Verlag Dietikon  
1994

**ISBN 3 260 05369 7**

## Vorwort

Die vorliegende Arbeit entstand während meiner Tätigkeit am Labor für Energiesysteme des Instituts für Energietechnik der Eidgenössischen Technischen Hochschule Zürich. Sie wurde ermöglicht, durch die finanzielle Unterstützung des Nationalen Energie-Forschungs-Fonds (NEFF) im Rahmen des Projekts 451 "Basiswissen für low NO<sub>x</sub>-Brenner und -Brennkammern".

Dem Leiter des Labors, Herrn Prof. Dr.-Ing. P. Suter, gilt mein herzlicher Dank für die Förderung und Unterstützung dieser Arbeit und für die Übernahme des Hauptreferates.

Bei Herrn Prof. Dr.-Ing. L. Reh möchte ich mich ebenfalls recht herzlich bedanken, für das meiner Arbeit entgegengebrachte Interesse, sowie die Übernahme des Koreferates.

Besonders hilfreich waren für mich die zahlreichen Messungen, welche von meinen Kollegen durchgeführt wurden, und die damit zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben. Es sind dies die Herren Dipl.-Ing. M. Flury, Dipl.-Ing. B. Lehmann, Dipl.-Phys. B. Mischler, Dipl.-Phys. M. Ochs, Dipl.-Ing. O. Schuler und Dr. P. Radi.

Herrn Dr. J. Gass danke ich für die Unterstützung bei der Durchführung der Projektarbeiten.

Allen Kollegen und Freunden, die mich während meiner Zeit am Labor unterstützten, gilt mein freundschaftlicher Dank. Herrn Dipl.-Ing. M. Schlatter danke ich ganz besonders für die stete Diskussionsbereitschaft und die kreative Zusammenarbeit.

Zürich, Januar 1994

Horst Dreher

## **Kurz Zusammenfassung**

Die vorliegende Arbeit befaßt sich mit der Wechselwirkung zwischen modernen, auf dem Prinzip der Rauchgasrezykulation basierenden Low-NOx Brennern und den Brennkammern auf denen sie betrieben werden. Dabei steht die Untersuchung der Rezykulationsrate, als der wesentliche Betriebsparameter, im Mittelpunkt.

Mit Hilfe der numerischen Strömungs- und Verbrennungssimulation werden Zusammenhänge aufgeklärt, die in der praktischen Kombination von Brenner und Brennkammer immer wieder zu wenig verstandenen Problemen führten.

Durch die Formulierung der Erkenntnisse in analytischen Gleichungen wird die leichte Umsetzung und Anwendung innerhalb der Industrie ermöglicht.

Die Simulation einer serienmäßig erhältlichen Kombination von Rezykulationsbrenner und Brennkammer zeigt die Anwendbarkeit, sowie den nötigen Aufwand, der heute verfügbaren Rechenmodelle für praxisrelevante Geometrien auf.

Umfangreiche Vergleiche mit Verifikationsmessungen verdeutlichen die erreichten Genauigkeiten. Die Gebiete zukünftiger Entwicklungsarbeiten werden aufgezeigt.

## **Abstract**

This work explores the interaction between boilers and modern low NO<sub>x</sub> burners with flue gas recirculation. The heat release of such systems is typically in the range from 10kW up to about 400kW. Of major interest is the rate of recirculation of the flue gas, since it strongly influences the emission of nitrogen oxide (NO).

The fluid flow and combustion process is simulated by the use of numerical simulation codes (finite volume method). The results of the simulations permit the understanding of effects arising from the arbitrary combination of boilers and burners of different origin.

The state of the art of oil combustion simulation is the calculation of a complete burner/boiler configuration using body fitted co-ordinates in the true geometry. A detailed discussion is given about the needs and the effort as well as the possible benefits of such a simulation.

Extensive comparisons with measurements demonstrate the accuracy of the applied models as well as the needs for further developments.

# Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung	1
1.1 Wirkung von NOx auf die Umwelt	1
1.2 Die heutige Emissionssituation	3
1.3 NOx Entstehung bei der Verbrennung	4
1.4 Emissionsminderungsmaßnahmen an Feuerungsanlagen	7
2 Bisherige Arbeiten und Zielsetzung	10
2.1 Bisherige Arbeiten	10
2.2 Zielsetzung dieser Arbeit	11
3 Numerische Simulation von Verbrennungsvorgängen	15
3.1 Fluide dynamische Simulationen	15
3.1.1 Grundgleichungen	15
3.1.2 Turbulenzmodellierung	16
3.1.3 Diskretisierung	18
3.1.4 Abschätzung des Lösungsfehlers	19
3.2 Verbrennungsmodellierung	21
3.2.1 Eigenschaften turbulenter Flammen	21
3.2.2 Gasverbrennungssimulation	23
3.2.3 Ölverbrennungssimulation	29
4 Wechselwirkung von Rezirkulationsbrenner und Brennkammer	39
4.1 Untersuchungen mit dem mixed+ignited=burned Modell	40
4.2 Variablenvariation - Trennung der Effekte	43
4.2.1 Methode	43
4.2.2 Parametervariationen	44
4.3 Analytische Parameterstudien	55
4.3.1 Rezirkulationsrate als Funktion der Temperatur des Rezirkulierten	55
4.3.2 Rezirkulationsrate als Funktion der Treibstrahltemperatur	59
4.3.3 Rezirkulationsrate als Funktion der Treibstrahlgeschwindigkeit	61
5 Simulation realer Ölbrenner	63
5.1 Geometriebeschreibung	63
5.2 Geometrische Diskretisierung	64
5.3 Isotherme Strömung	66
5.3.1 Vergleich mit LDA Messungen	67
5.4 Verbrennungssimulation	72
5.4.1 Randbedingungen und Modellparameter	74
5.4.2 Vergleich mit LDA Messungen	81
5.4.3 Vergleich mit Sondenmessungen	82
5.4.4 Vergleich mit planar LIF Messungen	86

6 Zusammenfassung	88
6.1 Modellbildung	88
6.2 Abhangigkeit der Rezirkulationsrate	90
7 Literaturverzeichnis	92
A Stoffdaten von Tetradekan (C14H30)	96
B Spezifische Warmekapazitat (Gase)	97
C Diskretisierungsverfahren	98
D Abbildungsverzeichnis	100
E Tabellenverzeichnis	104

## Symbolverzeichnis

### Lateinische Symbole

Symbol:	Bedeutung:	Einheit:
A	Fläche	$\text{m}^2$
A	Konstante	-
B	Konstante	-
CD-FF	Abstand Carnot Diffusor - virtuelle Flammenfront	m
$C_\mu$	Konstante des $k-\varepsilon$ Turbulenzmodells	-
$C_p$	Integralwert der spezifischen Wärmekapazität bei T	J/kg
D	Durchmesser	m
Da	Damköhlerzahl	-
Ea	Aktivierungsenergie	J/kmol
FF	Flammenfront, virtuelle	-
Fr	Frösslingzahl	-
Hu	unterer Heizwert	J/kg
Ka	Karlovitzzahl	-
L	Längenmaß	m
NO	Stickstoffmonoxidkonzentration	kmol/m <sup>3</sup>
Nu	Nusseltzahl	-
M	Molmasse	kg/kmol
O	Sauerstoffradikalkonzentration	kmol/m <sup>3</sup>
Pr	Prandtl Zahl	-
R	spezifische Gaskonstante	J/(kg K)
$\mathfrak{R}$	Universelle Gaskonstante	J/(kmol K)
R	Reaktionsrate	kg/(m <sup>3</sup> s)
Re	Reynoldszahl	-
RezRa	Rezirkulationsrate	-
S	Quellterm	gleichungsabhängig
S	Flammengeschwindigkeit	m/s
SD	Position Saugdüse	-
T	Temperatur	K
T	Zeitintervall	s
V	Volumen	$\text{m}^3$
X	molare Konzentration	-
$Y_i$	Massenkonzentration der Spezies i	-
Z <sub>RA</sub>	Konstante	-
c	Geschwindigkeit, allgemein	m/s
$c_w$	Widerstandsbeiwert	-
$c_p$	spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	J/(kg K)
k	turbulente kinetische Energie	$\text{m}^2/\text{s}^2$
k	Geschwindigkeitskonstante (bei Gl. 1.1-1.6)	$\text{m}^3/(\text{kmol s})$
f	Mischungsbruch (engl. mixture fraction)	-
h	Enthalpie	J/kg
$l_m$	Mischungsweglänge	m
$l_k$	Kolmogorov-Länge	m
$l_w$	typisches Längenmaß eines turbulenten Wirbels	m
m	Massenstrom	kg/s

n	Exponent	-
n	Moldichte	kmol/m <sup>3</sup>
p	Druck	N/m <sup>2</sup>
r	Rezirkulationsfaktor (nach Flame(1989))	-
r	Radius	m
s	normierte Koordinate	-
s	stöchiometrischer Koeffizient	kmol
t	Zeit	s
u	Gas-Geschwindigkeit	m/s
v	Tropfen-Geschwindigkeit	m/s
x	Länge, auch Raumkoordinate	m
y	Raumkoordinate	-
z	Raumkoordinate	-

### Griechische Symbole

$\Delta$	finite Differenz einer beliebigen Größe	-
$\Delta H_v$	Verdampfungsenthalpie	J/kg
$\Gamma$	Diffusionskoeffizient	m <sup>2</sup> /s
$\Gamma$	normalverteilte Zufallszahl	-
$\Gamma_\phi$	Austauschkoeffizient einer Transportvariablen	gleichungsabhängig
$\delta_l$	laminare Flammendicke	m
$\epsilon$	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie	m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>
$\phi$	allgemeine Transportvariable	gleichungsabhängig
$\lambda$	Luftzahl	-
$\lambda$	Wärmeleitfähigkeit	W/(m K)
$\mu$	dynamische Viskosität	kg/(m s)
$\nu$	kinematische Viskosität	m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
$\rho$	Dichte	kg/m <sup>3</sup>
$\tau_L$	Lagrangesches Zeitmaß eines typischen Wirbels	s
$\xi$	konserviertes Skalar	kg
$\zeta$	Druckverlustbeiwert	-

**Hochgestellte Indizes**

$\alpha$	stöchiometrischer Koeffizient	kmol
$\beta$	stöchiometrischer Koeffizient	kmol
$(\phi')$	zeitabhängiger Schwankungswert	
$(\bar{\phi})$	zeitlich gemittelter Wert	

**Tiefgestellte Indizes**

Arrh	Arrhenius
Br	Brennstoff
D	Dampf
EDM	Eddy Dissipation Model
Fl	Flamme, im Flammrohr
G	Gaseinlaß
L	Lufteinlaß, auch Luft
O	Oberfläche Tropfen
Ox	Oxidant
Pr	Produkt
Rez	Rezirkulat
Z	Zündung
c	chemisch
eff	effektiv
i	Koordinatenrichtung
j	Koordinatenrichtung
k	kritisch
l	laminar
ref	Referenz
rel	relativ
satt	Sattdampf
siede	Siedezustand
st	stöchiometrisch
t	Tropfen
t	turbulent
w	Wirbel
x	Raumkoordinate
y	Raumkoordinate
z	Raumkoordinate
zu	zugeführt
$\infty$	im Unendlichen

## 1 Einleitung

Das, insbesondere in den letzten Jahren, stark gestiegene Umweltbewußtsein führte auch im Bereich der haustechnischen Wärmeerzeugung aus fossilen Energieträgern zu erheblichen Forschungsanstrengungen, mit dem Ziel der Minimierung des Schadstoffaustosses.

Während den siebziger und achtziger Jahren galt das Hauptinteresse der Steigerung des wärmetechnischen Wirkungsgrades, sowie der Einführung von schwefelarmem Heizöl zur Minderung der Emission von schwefelhaltigen Verbindungen, insbesondere des Schwefeldioxids ( $\text{SO}_2$ ).

Die Maximierung des Wirkungsgrades, verbunden mit einer minimalen Emission von Kohlenmonoxid ( $\text{CO}$ ), führte zu sehr kompakten, heißen Flammen. Die später folgende Thematisierung der Stickoxidemissionen zeigte, daß zum Teil gerade durch die Maßnahmen zur Wirkungsgradsteigerung vermehrt Stickoxide gebildet wurden. Die gegenläufigen Tendenzen der Kohlenmonoxid und Stickoxidemissionen stellen die besondere Herausforderung bei der Gesamtemissionsminderung dar.

Während die Emission von schwefelhaltigen Verbindungen hauptsächlich durch Ölbrand (und Kohle) verursacht wurde, werden Stickoxide sowohl von Öl- als auch von Gasbrennern emittiert. Dies führte zur Entwicklung von Reduktionsprinzipien, welche für beide Formen der Wärmeerzeugung anwendbar sind.

Im Bereich der Haushaltbrenner (Öl und Gas) setzte sich der Einsatz einer speziellen Emissionsminderungstechnik -die **Rauchgasrezirkulation**- durch. Während der Markteinführung zeigte sich, daß neue, bisher nicht festgestellte Probleme, bei der Kombination von Brennern und Brennkammern aufraten, für die keine plausiblen Erklärungen gefunden werden konnten. Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der Klärung der offenen Fragen in diesem Problemfeld.

Die Umsetzung des erreichten technischen Standes wurde durch Einführung strengerer Emissionsgrenzwerte von gesetzgeberischer Seite (z.B. Luftreinhalteverordnung 1992 in der Schweiz) forciert.

### 1.1 Wirkung von $\text{NO}_x$ auf die Umwelt

Die Aufnahme von Luftschadstoffen erfolgt bei Mensch und Tier vorwiegend über die Lunge, die z.B. beim Menschen eine Austauschfläche von ca.  $100\text{-}200\text{m}^2$  anbietet. Demgegenüber spielt die Resorption über die Haut sowie den Magen-Darmtrakt eine untergeordnete Rolle.

Bei Pflanzen erfolgt die Aufnahme ebenfalls an der aktiven Austauschfläche mit ihrer Umgebung, was typischerweise nicht die ganze Blattoberfläche ist, sondern die zur Bewältigung der Atmungsfunktion spezialisierten Spaltöffnungen.

Während die frühesten bekanntgewordenen Smogepisoden in Belgien (Lüttich, 1930) und USA (Donora/Pennsylvanien, 1948) mit industriellen Emissionen verbunden waren, gilt die überwiegend kohlegefeuerte Hausheizung als Hauptquelle für die bisher folgenschwerste Smogsituation, die sich 1952 in London ereignete. Nach Jaekel et al. (1980) werden ihr ca. 4000 Todesopfer zugeschrieben. Insbesondere Säuglinge, ältere Personen, sowie Herz- und Lungenkranke waren davon betroffen. Der Anteil des  $\text{NO}_x$  an dieser Katastrophe ist nicht genau geklärt, hauptsächlich wird  $\text{SO}_2$  (in einer Konzentration von ca.  $3,4 \text{ mg/m}^3 \approx 1,3 \text{ ppm}$ ) für

die Auswirkungen verantwortlich gemacht, das ähnlich dem NO<sub>x</sub> bei Kontakt mit Feuchtigkeit (Schleimhäute) zur Säurebildung neigt und daher ähnliche Beschwerden verursacht.

Aufgrund der Veränderung von Energieverbrauchsgewohnheiten z.B. der Substitution von Kohle durch Öl oder Gas beim Hausbrand, sowie einem erhöhten Umweltbewußtsein, was z.B. in strengerem Emissionsgrenzwerten zum Ausdruck kommt, sind derart hohe Immissionskonzentrationen gegenwärtig in Westeuropa nicht mehr zu beobachten.

Trotz vielfältiger chemischer Zusammensetzung wird im allgemeinen zwischen dem mehr schwefelhaltigen Smog (*Londoner Typ*), sowie dem sogenannten *photochemischen Smog* unterschieden. Letzterer wird insbesondere in verkehrsreichen Ballungsgebieten beobachtet, wo er aus einer Reaktion zwischen NO<sub>x</sub>, CO, unverbrannten Kohlenwasserstoffen und Wasserdampf in bodennahen Luftsichten unter Einwirkung von ultravioletter Sonnenstrahlung entsteht. Es kommt zur Ausbildung von Sekundärärschadstoffen sogenannten *Photooxidantien*, insbesondere Ozon, organischen Peroxiden und Aldehyden.

### **Wirkung von NO auf Mensch und Tier**

Stickstoffmonoxid ist ein farb- und geruchloses Gas und daher vom Menschen direkt erst durch seine gesundheitsschädigenden Wirkungen wahrnehmbar. In Verbindung mit Feuchtigkeit von z.B. Schleimhäuten (Augen, Atemwege, Lunge) entsteht ätzende Salpetersäure (HNO<sub>3</sub>) nebst salpetriger Säure (HNO<sub>2</sub>). Die von diesen Säuren ausgehende Reizwirkung löst eine Kontraktion der Bronchien aus, wodurch der Strömungswiderstand der Atemwege meßbar ansteigt, so daß ein Gefühl der Atemnot hervorgerufen werden kann. Neben den Atemorganen reagieren vor allem die Augen mit Brennen und Tränen auf die von NO hervorgerufene Zerstörung des natürlichen Milieus.

### **Wirkung von NO<sub>2</sub> auf Mensch und Tier**

Die Mehrzahl der Studien über Stickoxide konzentriert sich auf NO<sub>2</sub>, da NO in der Atmosphäre zu NO<sub>2</sub> aufoxidiert wird. Nach Cox (1982) liegt die mittlere NO Lebenszeit in der Atmosphäre, bei Anwesenheit von ca. 30 ppb Ozon (O<sub>3</sub>), um eine Minute.

Stickstoffdioxid ist in der Gasphase gekennzeichnet von einer gelbroten bis rotbraunen Farbe und verfügt über einen stechend Geruch. Die Geruchsschwelle liegt bei ca. 0.2 ppm, während der MAK-Wert auf 5 ppm festgelegt ist. Nach Jaekel et al. (1980) kommt es bereits bei einer 10 minütigen Exposition bei 4 ppm NO<sub>2</sub> zu einem veränderten arteriellen Sauerstoffdruck.

Eine Schädigung des Erbgutes aufgrund der molekularen Angriffsmechanismen von NO<sub>2</sub> (und auch O<sub>3</sub>) kann nicht schlüssig nachgewiesen werden, wird aber in der Literatur diskutiert (Jaekel et al. (1980)).

### **Wirkungen auf Pflanzen**

Anfang der 70er Jahre wurden in der Bundesrepublik Deutschland an Tannen und im Herbst 1980 an Fichten Symptome beobachtet, die 1981 neben den Nadelhölzern auch Laubbäume erfaßten und heute als *Waldsterben* bekannt sind.

Nach Urbach (1988) werden als wesentliche Ursache für das Waldsterben Luftschaadstoffe wie SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub>, O<sub>3</sub> und weitere Photooxidantien sowie HF, HCl, H<sub>2</sub>S etc. verantwortlich gemacht. Diese Schadstoffe werden entweder über die Spaltöffnungen oder indirekt über den Boden und das Wurzelwerk von der Pflanze aufgenommen. Man unterscheidet die eintretende

Schädigung in akute, chronische und latente Schäden. Wobei insbesondere eine latente Schädigung keine signifikanten Symptome zeigt, aber den Nährboden für den Befall mit natürlichen Schädlingen bildet und eine eindeutige Ursachenermittlung dadurch erschwert. Die Erforschung der Zusammenhänge gestaltet sich schwieriger als bei Mensch und Tier, da eine geschädigte Pflanze nicht ohne weiteres gezielt einem speziell veränderten Umfeld ausgesetzt werden kann. Laboruntersuchungen beschränken sich in der Regel auf die Erforschung von akuten Schädigungen, in seltenen Fällen auch Dosis-Expositionszzeit Zusammenhängen welche eine chronische Schädigung hervorrufen.

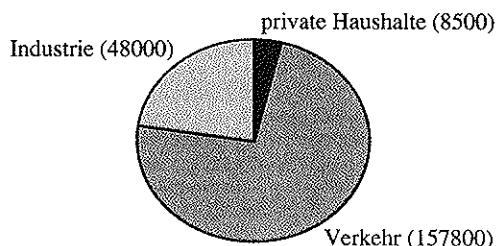
Bei einer Aufnahme über die Spaltöffnungen ist eine Einwirkung auf die Assimilationsprozesse gegeben und auch eine geringere Photosyntheseleistung zu erwarten. Bei einer Aufnahme aus dem Boden ist als Folge der Schädigung des Wurzelwerks und damit der gestörten Nährstoffaufnahme ebenfalls eine Hemmung der Photosynthese denkbar.

Urbach (1988) exponierte Spinatblätter einer Gasatmosphäre mit hoher NO<sub>2</sub> Konzentration (5ppm über 4h, 1ppm über 25h), konnte aber keine Schädigung messen (Floureszenzmethode). Die pflanzenschädigende Wirkung von NO<sub>x</sub> wird daher in der Literatur vorwiegend in dessen photooxidativen Nachfolgeprodukten gesucht.

## 1.2 Die heutige Emissionssituation

Das Wissen um die negative Beeinflussung der Umwelt durch hohe Schadstoffkonzentrationen eröffnet die Frage nach der Herkunft, den Hauptemittenten.

In einer auf den statistischen Daten von 1984 basierenden Studie des BUWAL (1987) wurde die in Abbildung 1.1 dargestellte Zuordnung der Gesamtemission von Stickoxid (und auch anderen Schadstoffen) vorgenommen. Demnach entfallen ca. 4% der Stickoxid Emissionen in der Schweiz auf die privaten Haushalte<sup>1</sup>, während auf die Industrie ca. 22% und auf den Verkehr ca. 74% fallen.



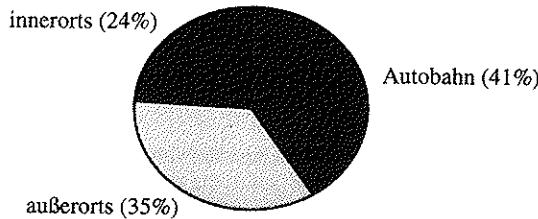
*Abbildung 1.1 Stickoxid-Emissionen 1984 in der Schweiz (in Tonnen)*

Global betrachtet ergibt sich daraus zunächst der Anreiz insbesondere im Verkehrssektor und dann auch im Industriebereich durch geeignete Maßnahmen eine Emissionsminderung herbeizuführen.

Eine Betrachtung auf der Basis lokaler Emittenten führt jedoch auf ein anderes Ergebnis. Nach Jost et al. (1985) teilt sich die Emission des Verkehrssektors (für die BRD 1985) in 3 Haupt

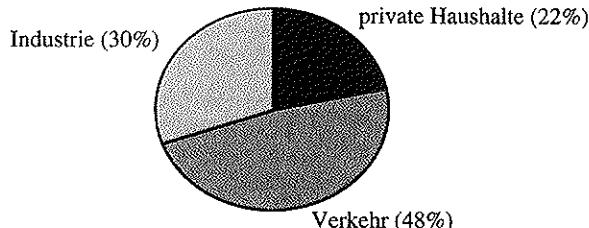
<sup>1</sup> Welche wiederum zu mehr als 90% von Öl- und Gasbrennern verursacht sind.

bereiche gemäß Abbildung 1.2 auf.



*Abbildung 1.2 Stickoxid-Emissionen des Verkehrs in der BRD nach Straßentyp*

Eine regionale Aufteilung der Industrieemissionen (außerorts, innerorts) liegt nicht vor. Wenn zur groben Abschätzung davon ausgegangen wird, daß infolge der örtlichen Trennung von Industriestandorten und Wohngebieten nur ca. 50% der Industrieemissionen in Agglomerationen erfolgen, und daß die Emission der privaten Haushalte ausschließlich im Winterhalbjahr erfolgt, so ergibt sich die in Abbildung 1.3 gezeigte Verteilung.



*Abbildung 1.3 Geschätzter Anteil der privaten Haushalte an der Stickoxid-Emission in Agglomerationen während der Heizperiode*

Da auch von der Industrie NO<sub>x</sub>-Emissionen durch Feuerungsanlagen verursacht werden (nach BUWAL (1987) ca. 34%), kann der Anteil der Öl- und Gasfeuerungen zumindest in der lokalen Betrachtungsweise nicht mehr vernachlässigt werden. Überdies ist für die Zukunft, als Folge der Einführung emissionsmindernder Maßnahmen, insbesondere des Katalysators, ein Absinken der NO<sub>x</sub>-Emissionen im Verkehrsbereich zu erwarten. Bei prognostizierten stagnierenden Emissionszahlen im Feuerungsbereich führt dies zu einem Anstieg dieses Anteils an der Gesamtemission von NO<sub>x</sub>.

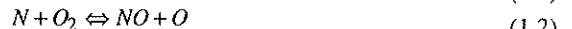
### 1.3 NO<sub>x</sub> Entstehung bei der Verbrennung

In der Literatur unterteilt man, je nach Entstehung, die Stickstoffoxide in die drei Arten:

- *thermisches* Stickstoffmonoxid
- *promptes* Stickstoffmonoxid
- *Brennstoff* Stickstoffmonoxid

### Thermisches NO

Für die thermische Bildung gilt der erstmals von Zeldovitch (1946) angegebene Reaktionsmechanismus der, für Rauchgase aus Verbrennung mit Luftüberschuss, gemäß folgenden Reaktionsgleichungen abläuft:



Die Vorwärtsreaktion von Gleichung (1.1) führt zur Bildung eines Moleküls NO und eines Stickstoffatoms N, welches gemäß Gleichung (1.2) sehr schnell mit Sauerstoff unter Bildung eines zweiten Moleküls NO reagiert. Kinetisch ist der erste Reaktionsschritt der wesentlich langsamere und somit geschwindigkeitsbestimmend. Oftmals wird daher nur die Kinetik der ersten Reaktionsgleichung berechnet und die gesamte NO-Produktion bestimmt aus:

$$\frac{d[NO]}{dt} = 2 * k_{NO} [N_2] [O] \quad (1.3)$$

$$k_{NO} = 7 * 10^{13} \exp\left(-\frac{38007}{T}\right) \quad (1.4)$$

Die Bildungsgeschwindigkeit ist stark temperaturabhängig und führt, bei den in Haushaltsbrennern typischen Verweilzeiten von weniger als einer Sekunde, erst oberhalb ca. 1700K zu nennenswerten NO Mengen.

In bestimmten Gebieten einer Flamme (insbesondere  $\lambda < 1$ ) kann zusätzlich zu den Gleichungen (1.1) und (1.2) noch die folgende Reaktion von Bedeutung sein:

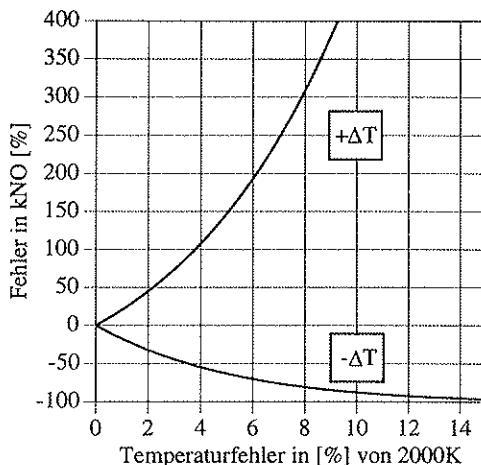


Der Reaktionsmechanismus bestehend aus den Gleichungen (1.1), (1.2) und (1.5) wird als *erweiterter Zeldovitch Mechanismus* bezeichnet.

Die Berechnung der Entstehung des *thermischen* Stickstoffmonoxids ist damit prinzipiell möglich. Aufgrund der sehr starken Temperaturabhängigkeit der Bildungsrate müssen dazu jedoch die örtlich berechneten Temperaturen sowie ihre zeitlichen Fluktuationen sehr genau bekannt sein. Daran scheitert heute die Berechenbarkeit des *thermischen* Stickstoffmonoxids für reale Konfigurationen. Wenn man annimmt, daß die durch eine Verbrennungssimulation ermittelte Temperatur von der realen Temperatur um  $\pm \Delta T$  abweicht, dann ergibt sich für die Geschwindigkeitskonstante  $k_{NO}$  der in Abbildung 1.4 dargestellte Zusammenhang. Dargestellt ist die Größe

$$k_{NO_{Fehler}} = \left[ \frac{k_{NO}(2000K \pm \Delta T)}{k_{NO}(2000K)} - 1 \right] * 100 \quad [\%] \quad (1.6)$$

für einen positiven oder negativen Temperaturfehler ( $\pm \Delta T$ ). Aufgrund des exponentiellen Verhaltens wirken sich positive Temperaturfehler weit drastischer aus als Negative.



**Abbildung 1.4** Relativer Fehler in der Reaktionsgeschwindigkeitskonstante  $k_{NO}$  für die Basistemperatur 2000 K

Das in Abbildung 1.4 dargestellte Fehlerverhalten der Geschwindigkeitskonstante lässt sich nicht ohne weiteres auf die NO Bildungsrate gemäß Gleichung (1.3) übertragen. Da die Bildungsrate das Produkt aus Geschwindigkeitskonstante und Sauerstoffradikalkonzentration ist, kann ein Temperaturfehler insbesondere bei hohen Temperaturen dadurch wirkungslos bleiben, daß an dieser Stelle die Radikalkonzentration Null ist. Andererseits zeigt gerade dieses Beispiel, daß sich Fehler in der Konzentrationsverteilung dadurch sehr drastisch auswirken können, daß Temperaturfehlern zum Durchbruch verholfen wird.

Die für die Berechnung der Bildungsrate benötigte Konzentration von atomarem Sauerstoff eröffnet ein weiteres Problemfeld. Die aus der Dissoziationsgleichung von molekularem Sauerstoff ermittelbare Konzentration stimmt selbst in einfachen Modellgasgemischen (z.B. H<sub>2</sub>-O<sub>2</sub> System) nur näherungsweise mit der Realität überein. Insbesondere führen Reaktionsmechanismen am Anfang der Verbrennung auf weitaus höhere Konzentrationen, man spricht dann von *Super-Equilibrium*. Für derart komplexe Brennstoffe wie Heizöl, bei denen auch die Reaktionswege noch nicht genau bekannt sind, ist die Berechenbarkeit nur über stark vereinfachende Annahmen möglich.

### Prompt NO

Die Bildung von *prompt* NO erfolgt in der Anfangsphase der Verbrennung, in der über die durch Zerfallsvorgänge von Kohlewasserstoffen entstandenen, Radikale der Luftstickstoff in mehreren Zwischenschritten zu NO aufoxidiert wird. Der in wenigen Millisekunden ablaufende Mechanismus ist auch heute noch weitgehend unklar. Der von Fenimore (1971) für die *prompt* NO Bildung verantwortlich gemachte einleitende Reaktionsschritt:



ist nach jüngsten quantenmechanischen Untersuchungen von Gardiner et al. (1993) nicht möglich, so daß eine Berechnung des *prompt* NO derzeit mangels ausreichendem Wissen um die ablaufenden Vorgänge noch nicht möglich ist.

Die absoluten Werte des *prompten* NO sind oft um eine Größenordnung niedriger als die des *thermischen* NO oder des NO aus Brennstoffstickstoff.

#### **NO aus brennstoffgebundenem Stickstoff**

Der im Heizöl z.B. in Form von Aminen gebundene Brennstoff wird bei der Verbrennungsreaktion in Form von Radikalen (z.B. NH<sub>2</sub>, NH, CN, N) frei. Unter sauerstoffreichen Bedingungen bilden sich über komplexe Reaktionsmechanismen Stickstoffoxide. Jansohn (1992) weist dabei dem Radikal HCN eine Schlüsselrolle zu.

Die Umsetzungsrate von Brennstoffstickstoff zu Stickstoffmonoxid ist von den jeweiligen Betriebsparametern der Verbrennung stark abhängig. Insbesondere sind die Luftzahl, die Bindungsart des Brennstoffstickstoffs, der Absolutwert des Brennstoffstickstoffs sowie der Mischungszustand (Vormisch- oder Diffusionsflamme, etc.) von signifikanter Bedeutung.

Bei der Verbrennung von Erdgas existiert die Möglichkeit der Bildung von Stickstoffoxiden aus brennstoffgebundenem Stickstoff nicht. Erdgas enthält Stickstoff in nennenswerten Mengen nur in Form von molekularem Stickstoff und dieser unterscheidet sich nicht von dem in der Verbrennungsluft vorliegenden. Da die Stickstoffkonzentration mit Ausnahme der *oxy-fuel*-Feuerungen keine limitierende Größe darstellt, bleiben hohe N<sub>2</sub> Konzentrationen im Erdgas für die Stickoxid Produktion ohne Folgen.

#### **1.4 Emissionsminderungsmaßnahmen an Feuerungsanlagen**

In der Literatur unterscheidet man zwischen Primär- und Sekundärmethoden. Unter dem Begriff Primärmethode zur Emissionsminderung werden Veränderungen an Feuerungseinrichtungen selbst verstanden, deren Ziel es ist, die Entstehung des Schadstoffes zu verringern oder zu unterbinden. Sekundärmaßnahmen hingegen entfernen, mit geeigneten Verfahren, die bereits entstandenen Schadstoffe zu einem gewissen Grad aus dem Abgas der Feuerungen.

Typisch erfordern Primärmaßnahmen sehr viel know how über den eigentlichen Verbrennungsablauf. Sekundärmaßnahmen, welche in der Regel höhere Investitions- und Betriebskosten (Material- und Energieverbrauch) aufweisen, sind von den Feuerungsbedingungen weniger abhängig.

Zur Verringerung des Stickoxidausstoßes aus Feuerungsanlagen ist eine Vielzahl von Primärmaßnahmen bekannt geworden, die heute in unterschiedlichen Verbrennungssystemen realisiert sind. In Tabelle 2.1 sind einige Methoden mit ihren typischen Anwendungsfällen, sowie die von ihnen hauptsächlich beeinflußten Schadstoffe dargestellt.

Primärmaßnahme	beeinflußter Schadstoff	Anwendungsfall
Wirbelschicht-verbrennung	NO <sub>x</sub> , N <sub>2</sub> O	Kraftwerkstechnik
Verbrennung mit Rauchgasrückführung	NO <sub>x</sub> , Ruß, C <sub>x</sub> H <sub>y</sub>	Haushaltbrenner Kraftwerkstechnik Diesel Motoren
Stufenverbrennung	NO <sub>x</sub>	Kraftwerkstechnik
Wassereindüsung in die Brennkammer	NO <sub>x</sub>	Kraftwerkstechnik

Tabelle 2.1: Primärmaßnahmen zur Beeinflussung der Schadstoffemission

Im Bereich der Haushaltbrenner (Leistungsklasse 10<sup>1</sup> - 10<sup>2</sup> kW) hat sich insbesondere in der Schweiz (und zum Teil auch in Deutschland) die Rauchgasrückführung unter Verwendung des Ejektor-Prinzips etabliert.

Moderne sogenannte *Rezirkulationsbrenner* entnehmen dabei Verbranntes aus der Brennkammer und mischen dies mit der zugeführten Verbrennungsluft. Die dadurch für den Verbrennungsprozeß zur Verfügung stehende Mischung aus Luft und Rauchgas, hat einen deutlich verminderten Sauerstoffgehalt, ist gegenüber dem Fall ohne Rauchgasrezyklation wärmer und hat aufgrund der Gase Kohlendioxid und insbesondere Wasser eine erhöhte Wärmekapazität. Zur Charakterisierung der Rezyklation wird eine Rezykulationsrate definiert:

$$\text{Rezykulationsrate} = \frac{\dot{m}_{\text{rezykuliertes Rauchgas}}}{\dot{m}_{\text{Verbrennungsluft}}} * 100 \quad [\%] \quad (2.1)$$

Typische Werte der Rezykulationsrate liegen zwischen 10% und 30% (Kremer und Otto (1981), Zinser (1985)).

Bei einer für Haushaltbrenner typischen Abgaszusammensetzung (bei  $\lambda = 1.3$ ) von CO<sub>2</sub> ≈ 13%, H<sub>2</sub>O ≈ 10%, N<sub>2</sub> ≈ 73.3% und O<sub>2</sub> ≈ 3.7% ergeben sich die in Abbildung 2.1a/b dargestellten Zusammenhänge für die oben diskutierten Größen Rezykulationsrate, Mischtemperatur der Verbrennungsluft, Rezyklationstemperatur sowie die Sauerstoffkonzentration. Ideale Mischung von Rezykulat und Verbrennungsluft wurde dabei vorausgesetzt.

Die NO<sub>x</sub> reduzierende Wirkung besteht im wesentlichen aus zwei Teileffekten. Zum einen wird der Sauerstoffpartialdruck des zur Verbrennung zur Verfügung stehenden Gasgemisches durch die Rezykulation (Restsauerstoffgehalt um 4%) reduziert. Dadurch verzögert sich die Energiefreisetzung, was aufgrund des Wärmeaustauschs zu niedrigeren Verbrennungstemperaturspitzen führt.

Zum anderen wird die durch Energiefreisetzung erreichbare adiabate Flammen temperatur aufgrund der Einmischung von Inertgas, sowie der hohen spezifischen Wärmekapazität der rezykulierten Gase, insbesondere CO<sub>2</sub> und H<sub>2</sub>O, kleiner.

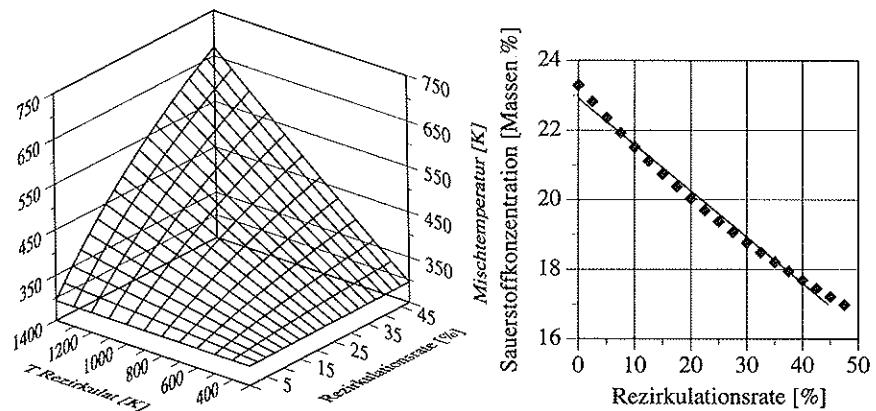


Abbildung 2.1a/b Auswirkungen der Rezirkulation auf die Mischtemperatur der Verbrennungsluft und die Sauerstoffkonzentration

Die niedrigere Verbrennungstemperatur führt zur vermindernden Bildung von thermischem Stickoxid. Aufgrund der exponentiellen Abhängigkeit der Stickoxidbildungsraten von der Temperatur kann bereits eine kleine Absenkung der Temperatur die Emission deutlich verringern.

## 2 Bisherige Arbeiten und Zielsetzung

### 2.1 Bisherige Arbeiten

Die Entwicklung des Haushaltbrenners mit Rauchgasrezirkulation geht auf Buschulte (1976) zurück. Das Problem der Rußemission bisheriger Brenner wird zurückgeführt auf die gleichzeitige (örtliche) Kombination der Verdampfung, Gemischbildung und Verbrennung (Buschulte (1982)). Die daraus resultierenden hohen Temperaturen in unmittelbarer Tropfennähe lösen Crack-Vorgänge aus, bei denen Azetylen entsteht, welches stark zur Polymerisation neigt. Der so entstandene Ruß erweist sich in sauerstoffarmen Flammenzonen als relativ stabil, weshalb eine Emission nur durch eine Verbrennung des Rußes bei hohem Luftüberschuß zu vermeiden ist. Aus diesen Überlegungen werden die Anforderungen an ein rußarmes Verbrennungssystem bei gleichzeitig niedrigem Luftüberschuß definiert. Das ursprüngliche Ziel einer optimierten Energieausnutzung bei gleichzeitig möglichst niedrigem Rußausstoß wurde durch eine weitgehende Trennung der Verbrennungsteilvorgänge: Verdampfung, Mischung, Verbrennung erreicht und führte auf die in Abbildung 2.2 dargestellte Konstruktion.

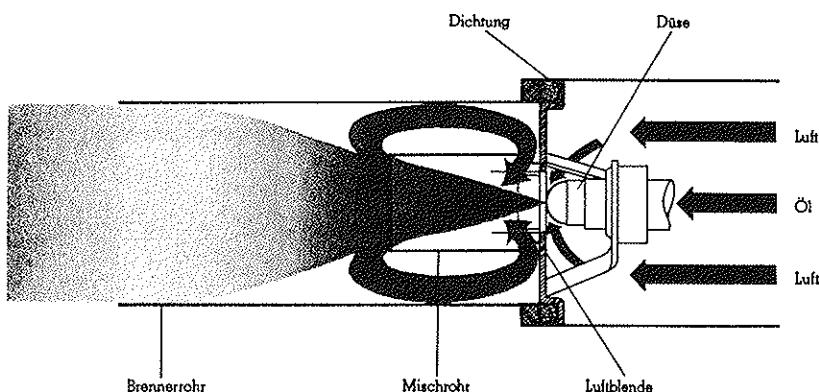
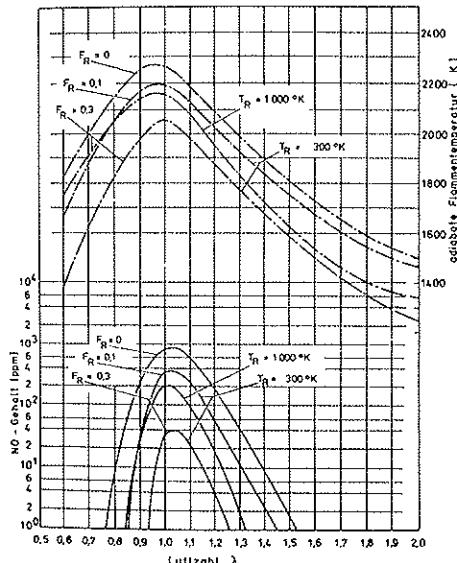


Abbildung 2.2 Raketenbrenner, nach Buschulte (1986)

Der zur Unterstützung der Tropfenverdampfung rückgeführte Rauchgasmassenstrom führt über die oben erwähnten Effekte ebenfalls zu einer Verminderung der Produktion von thermischen Stickoxiden. Aufgrund der hohen Strömungsgeschwindigkeiten innerhalb der Verdampfungsstrecke und des Mischrohres ist eine Flammenstabilisierung erst am Austritt des Mischrohres möglich. Dort liegt der Brennstoffdampf-Luft-Mischung vor. Die Tropfenverdampfung ist weitgehend abgeschlossen, das gelbe Leuchten des, durch Anwesenheit von Brennstofftropfen in der Flamme, erzeugten Rußes tritt nicht mehr auf. Die Flamme hat ein blaues Erscheinungsbild, weswegen diese Art von Brennern auch als *Blaubrenner* bezeichnet wird.

Die zahlreichen bisher durchgeführten experimentellen Arbeiten (Buschulte (1982), (1985), (1986), Mahmens (1982)) beschäftigen sich mit dem Betriebsverhalten des *Raketenbrenners* sowie den Schadstoffemissionen. Kremer (1975) berechnete das theoretische NO<sub>x</sub> Reduktionspotential für Rauchgasrezirkulation, für einen geschätzten Temperatur-Zeit Verlauf (siehe Abbildung 2.3) und führte Versuche zum Emissionsverhalten (Ruß, NO<sub>x</sub>, C<sub>x</sub>H<sub>y</sub>, CO) durch. Das Hauptaugenmerk richtete sich auf den Vergleich von Gelb- und Blaubrenner.



**Abbildung 2.3** Zusammenhang von Flammentemperatur, Luftzahl, rezirkulierter Menge ( $FR$ ), Temperatur des Rezirkulierten ( $TR$ ) und thermischem  $NO_x$  für einen geschätzten Temperatur-Zeit-Verlauf (nach Kremer (1975))

In Kremer (1981) werden Versuche zur Beeinflussung der Kohlenmonoxid (CO) Emissionen durch geometrische Variationen der Brennkammer vorgestellt. Variiert wurde die Brennkammerlänge, wobei 4 verschiedene Ölbrenner untersucht wurden. Der Einfluß der Brennkammerlänge sei nur bei kurzen Brennkammern feststellbar (CO Anstieg, keine Aussage über  $NO_x$ ), dann aber für Öl- und Gasbrenner gleichermaßen. Eine Variation des Brennkammerradius, ebenfalls für verschiedene Ölbrenner durchgeführt, ergab eine nur sehr schwache Abhängigkeit. Der Autor kommt zum Ergebnis, daß die sogenannte Brennkammerbelastung (Leistung Brenner / Volumen Brennkammer [ $\text{W/m}^3$ ]) keinen großen Einfluß auf die  $NO_x$  Emissionen hat.

Sandkuhl (1989) hat die intermittierende Betriebsweise für die Kombination von 3 Kesseln mit 6 Brennern (5 Gelbbrenner, 1 Blaubrenner) untersucht. Besonderes Interesse kam der Fragestellung zu, welche Schadstoffemissionen und Energieverluste sich aus der Intermittenz ergeben. Eine Emissionsabhängigkeit von der Brenner- und Brennkammergeometrie wurde festgestellt. Auf eine Veränderung des thermodynamischen Zustands des Rezirkulats bei Brennerstart wird hingewiesen. Eine detaillierte Begründung hierfür, sowie die Frage inwiefern die Rezirkulationsrate (also die Menge) vom Brennerstart betroffen ist, ist jedoch offen und aus den Ergebnissen nicht ableitbar.

## 2.2 Zielsetzung dieser Arbeit

Die in Abbildung 2.2 dargestellte Rauchgasrückführung hatte primär zum Ziel, die örtliche Trennung von Tropfenverdampfung, Mischung und Dampfverbrennung herbeizuführen. Zur Ausnutzung der  $NO_x$ -reduzierenden Wirkung der Rauchgasrückführung ist eine gezielte Einstellung von Rezirkulationsrate und Temperatur des Rezirkulats unumgänglich.

Daraus ergab sich die Weiterentwicklung zu Blaubrennern mit Öffnungen im Flamm- oder Brennrohr, da eine Temperaturreduktion des Abgases einen Wärmetausch bedingt, welcher in der Regel von der Brennkammer bewerkstelligt wird. Buschulte (1982) diskutierte solche Öffnungen zur Minderung der Schallemissionen. Die bisher weitgehende Unabhängigkeit des Rezirkulationsbrenners und des Verbrennungsprozesses von der Brennkammer war damit aber nicht mehr gegeben.

Bisher unbekannte Wechselwirkungen zwischen dem Brenner und den von der Brennkammergeometrie abhängigen Strömungs- und Temperaturfeldern beeinflussen die Verbrennung und Schadstoffentstehung (NO<sub>x</sub> Reduktion) zum Teil erheblich.

Eine Untersuchung dieser Wechselwirkungen auf experimenteller Basis bedarf eines erheblichen Aufwandes, da jede geometrische Veränderung (z.B. des Brennkamerradius) in der Regel eine Neukonstruktion (der Brennkammer) zur Folge hat .

Außerdem lassen sich im Experiment einzelne Effekte nur schwer oder gar nicht trennen. Dies ist auch das Hauptproblem der bisherigen experimentellen Arbeiten, die zwar eine Beeinflussung der Emissionen durch veränderte Geometrien feststellten, diese jedoch nicht theoretisch begründen konnten.

Die Methode der numerischen Verbrennungssimulation ermöglicht hier ein sehr viel flexibleres Vorgehen, insbesondere was die Untersuchung von Zusammenhängen anbelangt., welche durch Änderungen der Geometrie bedingt sind.

Die durch unzureichende Modellierung nur näherungsweise richtige Beschreibung der Vorgänge muß durch geeignete Methoden überprüft werden. Eine detaillierte Beschreibung der Effekte soll einen Beitrag leisten zu einem vertieften Verständnis der Vorgänge innerhalb eines Rezirkulationsbrenners.

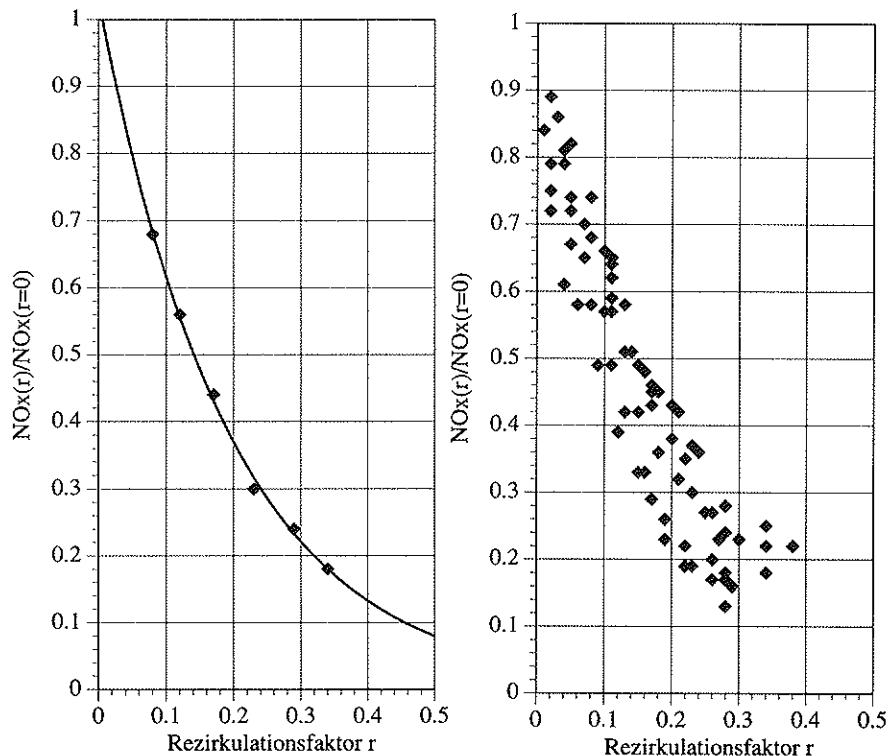
Aufgrund der extremen Sensitivität der Stickoxidproduktion auf die Ungenauigkeiten in den berechneten Temperatur und Konzentrationsfeldern (siehe Kapitel 1.3) kann ein effizientes Vorgehen nicht in dem Versuch liegen die Entstehung des thermischen Stickstoffmonoxids direkt zu simulieren. Der dafür nötige Rechenaufwand, zur Sicherung der geforderten Genauigkeit für die skalaren Größen, widerspricht dem Vorhaben einer systematischen Parametervariation mit dem dafür nötigen Aufwand von einigen hundert Simulationen. Insbesondere wenn es sich um geometrisch komplexe Konfigurationen, wie z.B. den in Abbildung 2.2 dargestellten Rezirkulationsbrenner, handelt.

Aussagen bezüglich des Stickoxidausstoßes auf der Basis von Verbrennungssimulationen sind dennoch möglich, da zwischen der durch Simulation ermittelbaren Rezirkulationsrate und dem Stickoxid-Ausstoß ein eindeutiger Zusammenhang besteht. Abbildung 2.4 links zeigt für einen Gasbrenner den von Flamme (1989) gemessenen Stickoxid-Reduktionseffekt als Funktion der rezirkulierten Abgasmenge konstanter Temperatur. Dabei ist die dimensionslose Größe  $r$  (Rezirkulationsfaktor) definiert als das Verhältnis von rezirkuliertem Gasstrom zum Abgasstrom im Kamin. Der Abgasstrom im Kamin ist aus Gründen der Kontinuität gleich der Summe von Brennstoff- und Luftmassenstrom. Der Rezirkulationsfaktor  $r$  unterscheidet sich demnach von der in dieser Arbeit verwendeten Rezirkulationsrate (RezRa) um den Brennstoffmassenstrom. Da der Brennstoffmassenstrom in der Regel sehr viel kleiner ist als der Luftmassenstrom ergeben sich für  $r$  nur geringfügig kleinere Werte als für RezRa.

Die Regressionsanalyse mit Hilfe eines Exponentialgesetzes führt auf die in Abbildung 2.4 links eingezeichnete Kurve. Nach Flamme (1989) gilt:

$$\frac{NO_x}{NO_x(r=0)} = \exp(-4.853 * r) \quad (2.2)$$

Demnach führt jede Erhöhung der rezirkulierten Abgasmenge auf einen niedrigeren Stickoxid-Ausstoß. Der streng monotone Verlauf des Reduktionseffekts spiegelt sich in allen Messungen wieder.



*Abbildung 2.4:*  $NO_x$  Emission als Funktion des Rezirkulationsfaktors (Flamme (1989))  
 links:  $\lambda=1.05$ ;  $T_{Luft}=813K$ ;  $T_{Abgas}=1425K$ ;  $NO_x(r=0)=870mg/m^3$ ;  
 Leistung ca. 160kW  
 rechts:  $\lambda=1.05$ ;  $T_{Luft}=300-813K$ ;  $T_{Abgas}=1300-1750K$ ; verschiedene  
 Brenner und Betriebsbedingungen

Abbildung 2.4 rechts zeigt die Versuchsergebnisse für eine Vielzahl unterschiedlicher Brenner und Betriebszustände.

Mit Hilfe der numerischen Simulation kann die Rezirkulationsrate ermittelt werden. In Verbindung mit obigen Messungen lässt sich aus der Veränderung der Rezirkulationsrate, als Funktion von Parametervariationen der Konfiguration, qualitativ der zu erwartende Einfluss auf die Stickoxid-Emission ermitteln.

Aufgrund der geringen Streuung des Reduktionseffekts (Abbildung 2.4 rechts) wären in Verbindung mit einer Bestimmung des Absolutwertes der rezirkulierten Menge (Typabhängigkeit) sogar quantitative Aussagen möglich.

### 3 Numerische Simulation von Verbrennungsvorgängen

#### 3.1 Fluidynamische Simulationen

##### 3.1.1 Grundgleichungen

Die allen Strömungen zugrundeliegenden Erhaltungssätze von Masse:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i)}{\partial x_i} = 0 \quad (3.1)$$

Impuls:

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j u_i)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) \right] \quad (3.2)$$

und Energie:

$$\frac{\partial(\rho h)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_j h)}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \left( \frac{\partial h}{\partial x_j} \right) \right] + S_h \quad (3.3)$$

stellen die Basis für die numerische Berechnung von Strömungsvorgängen dar. Die Berücksichtigung zusätzlicher Phänomene kann durch hinzufügen weiterer Terme erfolgen (z.B. Massenkräfte, Lewis-Zahl  $\neq 1$  Effekte, etc.).

Laminare Strömungen lassen sich mit einer räumlichen (und zeitlichen) Diskretisierung obiger Gleichungen lösen.

Für die in der Technik bei weitem am häufigsten auftretenden turbulenten Strömungen ergibt sich ein Diskretisierungsproblem. Im Prinzip lassen sich auch diese Strömungen mit hinreichend feinem Gitter mit obigen Erhaltungssätzen lösen, man spricht dann von Direkter Numerischer Simulation (DNS). Jedoch ist man dazu, bei der heutigen Leistungsfähigkeit von Großrechnern, nur für relativ kleine Re Zahlen (z.B. Re = 500; Friedrich (1992) oder Re=1000; Karniadakis und Orszag (1993)) in der Lage, da mehrere Größenordnungen von Längen- und Zeitskalen, von den geometrischen Abmessungen bis zu den sehr kleinskaligen dissipativen Wirbelstrukturen, örtlich und zeitlich aufgelöst werden müssen. Aus diesem Grunde werden zur Berechnung turbulenter Strömungen (nach O. Reynolds) zeitgemittelte Transportgleichungen herangezogen, die sogenannten *Reynoldschen Gleichungen*, bei denen die abhängigen Variablen (allgemein  $\phi$ ) in Mittelwert und turbulente Schwankung zerlegt werden gemäß:

$$\phi(t) = \bar{\phi} + \phi'(t) \quad (3.4)$$

mit

$$\bar{\phi} = \frac{1}{T} \int_{t_0}^{t_0+T} \phi dt \quad (3.5)$$

$$\Rightarrow \bar{\phi}' = 0 \quad (3.6)$$

Die Reynoldschen Gleichungen werden üblicherweise dargestellt in Form der allgemeinen Transportgleichung (stationär):

$$\frac{\partial(\rho \bar{u}_j \bar{\phi})}{\partial x_j} = \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \Gamma_{\phi} \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x_j} \right) + \bar{s}_{\phi} - \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}'_j \bar{\phi}') \quad (3.7)$$

Aus der Zeitmittelung der nichtlinearen Glieder der Transportgleichung ergeben sich unbekannte Korrelationen der Schwankungsgrößen. Da mit dem Ansatz (3.4) die Größe  $\phi$  durch zwei Größen ersetzt wird ist das Gleichungssystem nun nicht mehr geschlossen und die Terme

$$\rho \bar{u}'_j \bar{\phi}' \quad (3.8)$$

müssen auf bekannte Größen zurückgeführt, modelliert, werden. Die Bedeutung von  $\phi$  für die einzelnen Erhaltungssätze ist in Tabelle 3.1. dargestellt.

Durch die in der Verbrennungszone auftretenden Temperaturschwankungen ergeben sich nicht zu vernachlässigende Dichteschwankungen. Wird dies bei der Reynoldsmitteilung der Transportgleichungen berücksichtigt, so ergeben sich weitere unbekannte Terme, sogenannte Dichteschwankungskorrelationen ( $\rho' u'_j \bar{\phi}'$ ). Da die Berechnung dieser Terme sehr aufwendig ist, wird in der Regel eine andere Art der Mittelung, die sogenannte Favre Mittelung (dichtegewichtete Mittelung) angewandt. Die sich ergebenden Transportgleichungen haben exakt die gleiche äußere Form wie die Reynoldsgleichungen, nur die Terme für Mittelwert und Schwankung haben eine andere Bedeutung. Bei Verwendung der Reynoldsgleichungen unter Vernachlässigung der Dichteschwankungskorrelationen benutzt man daher automatisch die Mittelung nach Favre (Philipp (1991)). In dieser Arbeit wird daher die konventionelle Schreibweise benutzt, im Bewußtsein, daß in Strömungen mit Dichteschwankungen tatsächlich Favre-Mittelung vorliegt.

### 3.1.2 Turbulenzmodellierung

Zur Schließung des Gleichungssystems müssen die unbekannten Korrelationen (3.8) bestimmt werden. In Anlehnung an die Berechnung des molekularen Spannungstensors führte Boussinesq (siehe Schlichting 1982) dazu den Begriff der Wirbelviskosität ( $\mu_t$ ) ein. Die Wirbelviskosität stellt keine Stoff- sondern eine Strömungsgröße dar und trägt damit dem unterschiedlichen turbulenten Transport als Funktion des lokalen Strömungszustandes Rechnung.

$$-\rho \bar{u}'_i \bar{u}'_j = \mu_t \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad (3.9)$$

Zur Bestimmung der Wirbelviskosität sind nun sehr verschiedene Methoden eingesetzt worden. Die bekannteste analytische Methode zur Beschreibung der Wirbelviskosität ist Prandtl's Mischungswegansatz. Dabei wird die Wirbelviskosität bestimmt durch:

$$\mu_t = \rho l_m^2 \left| \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right| \quad (3.10)$$

Die Turbulenz in Rohren oder Grenzschichtströmungen lässt sich damit hinreichend genau beschreiben, da die hierbei vorausgesetzte Vernachlässigung des Transports der Reynoldschen Spannungen (Gleichung (3.8) für  $\phi' = u'_i$ ) gut erfüllt ist. Für Strömungen in komplexen Geometrien ist dieser Ansatz aber ungeeignet, da die Mischungsweglänge  $l_m$  problemabhängig ist und damit für das gesamte Strömungsgebiet vor der Berechnung experimentell ermittelt werden müsste.

Für Strömungen in komplexen Geometrien ist der Transport (konvektiv, diffusiv) der Reynoldsspannungen nicht vernachlässigbar. Turbulenzmodelle die dies berücksichtigen, lassen sich entsprechend der Anzahl der von ihnen gelösten Transportgleichungen klassifizieren.

Eingleichungsmodelle lösen *eine* Transportgleichung, typischerweise jene für das turbulente Geschwindigkeitsmaß (Turbulenzenergie), und bilden so dessen Variation im Strömungsgebiet näherungsweise ab. Das turbulente Längemaß wird jedoch nach wie vor algebraisch beschrieben. Dies impliziert die Annahme einer Turbulenz in Form von Wirbeln konstanter Durchmesser mit variablen Schwankungsgeschwindigkeiten. Aus diesem Grunde sind auch Eingleichungsmodelle nur beschränkt einsetzbar.

Eine deutliche Verbesserung der Allgemeingültigkeit wird erreicht, wenn neben einer Transportgleichung für das Geschwindigkeitsmaß eine weitere für das Längemaß der Turbulenz gelöst wird (sogenannte Zweigleichungsmodelle).

Das weit verbreitete Zweigleichungs  $k-\varepsilon$  Turbulenzmodell hat sich in einer Vielzahl unterschiedlicher Strömungsformen bewährt (siehe Rodi (1984)). Es ermittelt lokal die turbulente Wirbelviskosität aus der turbulenten kinetischen Energie  $k$  und deren Dissipation  $\varepsilon$  gemäß:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (3.11)$$

wobei  $C_\mu$  im allgemeinen Fall eine Funktion der Turbulenzproduktion und Turbulenzdissipation ist, jedoch in der Regel, mit Hilfe der Annahme des lokalen Gleichgewichts von Produktion und Dissipation, auf den konstanten Wert 0.09 gesetzt wird. Für spezielle Strömungssituatien, in denen Produktion und Dissipation nicht im Gleichgewicht stehen, wird die Vergrößerung von  $C_\mu$  um bis zu einer Größenordnung vorgeschlagen (Rodi (1984)).

Die Lösung *einer* Transportgleichung für die kinetische turbulente Energie impliziert die Annahme lokaler Isotropie der Turbulenz, was im Allgemeinen nicht gegeben ist. Darin begründen sich die hauptsächlichen Schwächen beim Einsatz des  $k-\varepsilon$  Modells, dessen Genauigkeit umso kleiner wird, je größer die Anisotropie der zu untersuchenden Strömung ist (z.B. Drallströmungen, allgemein Stromlinienkrümmung).

Eine allgemeingültigere Modellierung kann mit dem sogenannten Reynoldsspannungsmodell erfolgen, bei welchem Transportgleichungen für die einzelnen Reynoldsspannungen gelöst werden. Die Reynoldsspannungen werden darüber hinaus direkt ermittelt, weswegen der Wirbelviskositätsansatz nicht benötigt wird und die Unsicherheiten in  $C_\mu$  ebenfalls entfallen. Der größte Nachteil besteht in dem erheblich höheren Rechenaufwand. Außerdem sind die hierzu benötigten empirischen Konstanten (Schließungsproblem auf höherer Ebene) noch nicht so universell, daß sich eine generelle Verbesserung gegenüber dem  $k-\varepsilon$  Modell erreichen läßt (Weber (1993)).

Für Verbrennungssimulationen stellt das  $k-\varepsilon$  Modell derzeit den ausgewogenen Kompromiß zwischen Anwendbarkeit und Allgemeingültigkeit dar, was sich an einer Vielzahl von Simula-

tionen nachvollziehen lässt (Noll (1986), (1992), Klausmann (1989), Minkenberg (1991), Foli (1991), Philipp (1991), Weber (1993)).

Größe Gleichung	$\phi$	$\Gamma_\phi$	$S_\phi$
Kontinuität	1	0	$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \bar{\phi}')$
Impuls	$u_i$	$\mu_{eff}$	$-\frac{\partial p}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_j} \left( \mu_{eff} \frac{\partial u_i}{\partial x_j} \right)$
Energie	$h$	$\frac{\mu_{eff}}{Pr_{eff}}$	0

*Tabelle 3.1:* Bedeutung der verschiedenen Symbole in Gleichung (3.7) für die unterschiedlichen Repräsentationen der universellen Transportgleichung

### 3.1.3 Diskretisierung

Die Substitution der Differentialausdrücke in Gleichung (3.7) durch algebraische Differenzterme bezeichnet man als Diskretisierung der Differentialgleichung.

Das Ziel ist die Formulierung einer Differenzengleichung, welche die Eigenschaften der Differentialgleichung wiedergibt. Diskretisierungsverfahren werden daher beurteilt nach einer Reihe von Methoden, die sich um die Frage gruppieren, wie genau die Differenzengleichung die Differentialgleichung approximiert. Für eine ausführliche Diskussion der Problematik wird auf Lehrbücher verwiesen (z.B. Schönung (1990), Patankar (1980)).

Das Hauptproblem bei der Diskretisierung der Navier-Stokes- beziehungsweise der Reynolds-gleichungen besteht beim finiten Volumenverfahren in der Approximation der konvektiven Flüsse an den Kontrollvolumenoberflächen.

Der konvektive Term in Gleichung (3.7) schreibt sich integriert über das Kontrollvolumen als:

$$\int_V \frac{\partial(\rho \bar{u}_j \bar{\phi})}{\partial x_j} dV \quad (3.12)$$

Mit dem Satz von Gauß lässt sich dieses Volumenintegral in ein Oberflächenintegral überführen, die konvektiven Flüsse sind demnach darstellbar als Bilanz über die Kontrollvolumenoberflächen (KVO):

$$\sum_{KVO} \int_A [\rho \bar{u}_j \bar{\phi}] dA \quad (3.13)$$

Sind die Werte der Variablen  $\bar{\phi}$  an den Zellknoten gespeichert, so müssen sie an der Stelle der Kontrollvolumenoberfläche durch Interpolation ermittelt werden. Die Art dieser Interpolation entscheidet über die numerischen Eigenschaften der entstehenden Differenzengleichung.

Verfahren erster Ordnung vernachlässigen Terme zweiter (und höherer) Ordnung wodurch Abbruchfehler von der Art der Diffusionsterme (und Dissipationsterme) entstehen. Diese Abbruchfehler lassen sich in einen Normal- und einen Queranteil zerlegen. Der Querströmungsanteil wird bei UPWIND Verfahren normalerweise als *numerische Diffusion* bezeichnet, da der entstehende Fehler die Lösung in der selben Art beeinflusst, als wäre ein erhöhter (physikalischer) Diffusionskoeffizient vorhanden.

Das UPWIND (UPS) Verfahren ist von erster Ordnung und *verschmiert* hohe Gradienten sehr stark, führt aber auch in kürzester Zeit zur konvergenten, d.h. die Differenzengleichung unter den Bedingungen des vorliegenden Diskretisierungsverfahrens approximiert abbildenden, Lösung. Raw et al. (1993) erreichten durch Stromlinien stromauf Gewichtung (Mass Weighted Skew Upwind (**MWS**)) bereits eine deutliche Verbesserung der physikalischen Repräsentation, obwohl die Genauigkeit auch dieses Verfahrens von erster Ordnung ist.

Die schlechte physikalische Repräsentation von Verfahren erster Ordnung geht einher mit einem sehr stabilen numerischen Verhalten, wiederum da hohe Gradienten *verschmiert* werden und dadurch die anderen Terme der Differenzengleichung (Gradientenansätze) eine Dämpfung erfahren. Dem sehr stabilen numerischen Verhalten verdanken die Verfahren erster Ordnung ihre weite Verbreitung.

Verfahren zweiter und höherer Ordnung (z.B. Linear Profile Scheme, **LPS**, Raw et al. (1993)) sind physikalisch genauer und sollten besonders bei der Simulation von Größen, auf die die Zielgröße sensiv reagiert, sowie bei der 3D Simulation von komplexen Geometrien, für die sich mit den heute verfügbaren Großcomputern nicht immer eine ausreichende Gitterknotenanzahl realisieren lässt, zum Einsatz kommen. In Anhang C ist der Einfluß der Gitterfeinheit, sowie der Ordnung von Diskretisierungsverfahren auf die Lösung exemplarisch an einem Testfall dargestellt. Die Feingitterlösung (100x100) des UPS Verfahrens ergibt praktisch die selbe Lösung wie die Grobgitterlösung (30x30) des LPS Verfahrens. D.h. Verfahren höherer Ordnung konvergieren schneller, in Bezug auf die Gitterfeinheit, auf die physikalisch korrekte Lösung.

Es lässt sich also durch Verfahren höherer Ordnung, mit weniger Gitterzellen, die selbe Genauigkeit erreichen, wie mit einem, hier ca. 11 fach, feineren Gitter bei Verwendung eines Diskretisierungsverfahrens niedrigerer Ordnung. Oder, wenn die Anzahl Gitterknoten aufgrund der verfügbaren Hardwareresourcen beschränkt ist, lässt sich eine höhere Genauigkeit der Lösung auf dem identischen Gitter erreichen.

### 3.1.4 Abschätzung des Lösungsfehlers

Numerische Strömungssimulationen erzeugen Näherungslösungen für Strömungsprobleme. Die Qualität der Lösung hängt, neben den getroffenen Modellannahmen, insbesondere stark von der geometrischen Gitteranordnung, der Gitterdiskretisierung, ab. Eine Kontrolle der Fehler durch unzureichende Gitterfeinheit ist daher unerlässlich.

#### 3.1.4.1 Quantitative Methoden

Nach Kessler et al. (1988) und Scheuerer (1993) lässt sich eine quantitative Fehlerabschätzung mittels Extrapolationsmethoden durchführen. Extrapolationsmethoden gehen davon aus, daß eine Taylorentwicklung für die Lösung der Differenzengleichung gültig ist. Da der Lösungsfeh-

Ier definiert ist als die Differenz der auf einem Gitter erzeugten Lösung und der exakten Lösung, kann die exakte (unbekannte) Lösung durch die Formulierung der Taylorentwicklung für zwei verschiedene Gitterabstände aus dem Gleichungssystem eliminiert werden. Dadurch wird die Formulierung und Berechnung des Lösungsfehlers aus zwei Lösungen unterschiedlich feiner Gitter, mit einer Genauigkeit möglich, deren Ordnung um eins höher ist, als die des verwendeten Diskretisierungsverfahrens.

Zur konsequenten Anwendung der Extrapolationsmethoden gehört die Verfeinerung der Maschenweite in alle Raumrichtungen. Dabei steigt die Gitterknotenanzahl bei jeder Verdopplung z.B. im dreidimensionalen Fall um den Faktor  $2^3$  also 8 an, wodurch man für reale Konfigurationen sehr schnell an die Grenze der Speicherkapazität stößt. Auch die Rechenzeit steigt um den selben Faktor an. Bei iterativen Verfahren ohne Mehrgittermethode nimmt der Rechenaufwand näherungsweise sogar quadratisch zu, was einer 64 fachen Rechenzeit pro Verfeinerung entspricht.

Ein Vergleich beider Lösungen ist nur auf dem selben Gitter möglich. Ein weiterer Nachteil besteht daher in der notwendigen *Extrapolation* der Grobgitterlösung auf das Feingitter. Das verwendete Extrapolationsverfahren muß von höherer Ordnung sein als der Abbruchfehler der Taylorreihe, was den Rechenaufwand zusätzlich erhöht. Bei einigen Mehrgitterverfahren, die zur Konvergenzbeschleunigung eingesetzt werden, stehen die Lösungen auf verschiedenen Gittern sowieso zur Verfügung, so daß dort der zusätzliche Aufwand relativ klein ist.

### 3.1.4.2 Qualitative Methode

Eine einfacher anzuwendende und daher verbreiteter Methode zur qualitativen Fehlerabschätzung besteht im Vergleich einer Lösung welche mit einem Diskretisierungsverfahren 1. Ordnung erhalten wurde, mit einer Lösung höherer Ordnung. Die Methode beruht auf der Überlegung, daß für konsistente Diskretisierungsverfahren (unendliche Verfeinerung führt auf die exakte Lösung) die Lösungen erster Ordnung und höherer Ordnung auf den selben Grenzwert konvergieren müssen, d.h. der Unterschied zwischen den zwei Lösungen muß kleiner werden, mit feiner werdendem Gitter.

Voraussetzung auch bei diesem Verfahren ist, daß die Formulierung einer Taylorentwicklung gültig ist, d.h. daß das Grobgitter bereits eine hinreichende Feinheit besitzt.

Diese Art der Fehlerabschätzung hat den Nachteil keine Absolutwerte zu liefern, ist jedoch relativ einfach einsetzbar und erlaubt dadurch eine standardmäßige Überprüfung jeder Rechnung.

Wegen der beschränkten Durchführbarkeit der Extrapolationsmethode für komplexe dreidimensionale Geometrien wird in dieser Arbeit, neben dem Vergleich der Absolutwerte mit Messungen, die Methode der qualitativen Fehlerabschätzung angewandt. Die quantitative Darstellung des aus qualitativer Abschätzung erhaltenen Fehlers erlaubt im übrigen ebenso wie bei der Extrapolationsmethode die lokale Gütebeurteilung des Gitters. Globale Verfeinerungen sind ohnehin kaum durchführbar (Speicherplatzlimitierung) und führen außerdem zu einer wenig rationellen Computerausnutzung. Lokale Gitterverfeinerungen in Gebieten großer *qualitativer* Fehler stellen daher eine sinnvolle Problemlösung dar.

Die numerische Lösung auf einem bestimmten Gitter ergibt für jede Größe unterschiedlich genaue Approximationen. Für eine ebene Kanalströmung um ein quadratisches Hindernis erhielten z.B. Kessler et al. (1988) für ein Feingitter mit 190/120 Gitterpunkten für die Geschwindigkeiten einen maximalen Fehler von kleiner 10%, während die turbulente kinetische Energie noch immer lokale Gebiete mit Fehlern größer 30% aufwies. Eine hinreichende Verfeinerung zur genauen Vorhersage aller Lösungsgrößen ist für komplexe dreidimensionale Geometrien praktisch (noch) nicht möglich. Deshalb müssen einzelne, für die aus der Simulation abgeleite-

ten Schlüsse wichtige, Größen gefunden werden, für die eine Gitterunabhängigkeit der Lösung nachgewiesen wird.

## 3.2 Verbrennungsmodellierung

### 3.2.1 Eigenschaften turbulenter Flammen

Verbrennungsreaktionen stellen chemische Vorgänge auf molekularer Basis dar, gemäß der Vorstellung der Oxidation eines Brennstoffmoleküls durch ein Sauerstoffmolekül zu einem Zwischen- oder Endprodukt. Eine chemische Reaktion bedingt also die vorausgehende Mischung der Edukte.

Nach Burke und Schumann (1928) werden Flammen je nach dem Ort ihrer Mischung -im Brennraum oder außerhalb- klassifiziert. Flammen bei denen Brennstoff und Oxidant getrennt in den Brennraum eingebracht werden, werden als Diffusionsflammen bezeichnet. Bei einer Mischung vor dem Eintritt in den Brennraum spricht man von Vormischflammen.

Bei den in der technischen Anwendung vorherrschenden turbulenten Flammen gehen diese Klassifizierungen zum Teil ineinander über. Eine schärfere Betrachtungsweise ergibt sich, durch den Vergleich der Mischungszeit ( $t_t$ ) mit der chemischen Reaktionszeit ( $t_c$ ), der typischerweise durch die Bildung einer Damköhler Zahl vorgenommen wird:

$$Da_t = \frac{t_t}{t_c} \quad (3.14)$$

wobei  $t_t$  eine typische Zeit für die turbulente Mischung und  $t_c$  eine typische Zeit für die chemische Reaktion ist.

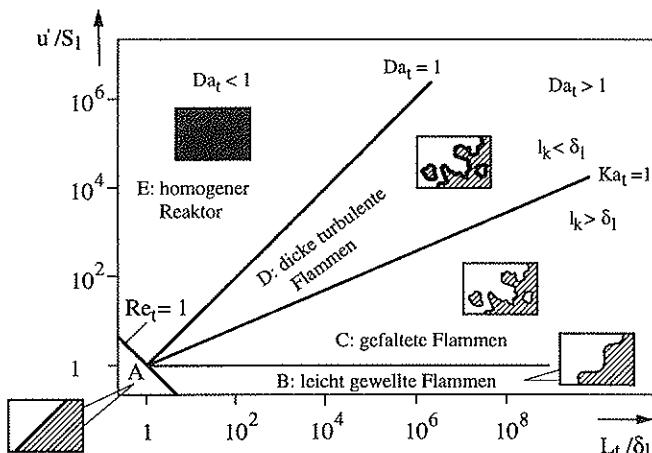
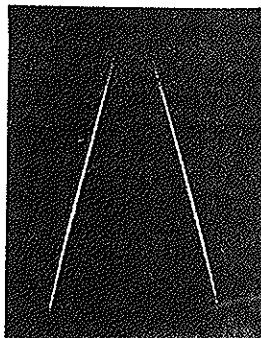


Abbildung 3.1: Borghi Diagramm

Eine von Borghi (1988) durchgeführte Klassifizierung für Vormischflammen führt auf das in Abbildung 3.1 dargestellte, nach ihm benannte Diagramm. Für nichtvorgemischte Flammen existieren analoge Bereiche, die sich mit den selben Parametern gegeneinander abgrenzen lassen und sich lediglich quantitativ unterscheiden. Das doppelt logarithmische Diagramm stellt das Verhältnis einer typischen Geschwindigkeitsschwankung zur laminaren Flammengeschwindigkeit ( $u'/S_l$ ) über dem Verhältnis eines typischen turbulenten Längenmaßes zur laminaren Flammenfrontdicke ( $L_t/\delta_l$ ) dar.

Damit lassen sich Flammen in 5 typische Arten klassifizieren:

- A: **Laminare, ebene Flammen** sind gekennzeichnet durch eine stationäre, dünne Flammenfront. Es existiert ein scharfer Übergang von der nicht reagierenden in die Reaktionszone. Jeglicher Quertransport findet nur durch Konzentrations- und Thermodiffusion statt und ist daher, im Vergleich mit turbulenten Flammen, sehr gering, weshalb sich eine sehr spitz zulaufende Reaktionszone ausbildet, siehe Abbildung 3.2.



*Abbildung 3.2: laminare Vormischflamme; nach Hoffmann (1986)*

- B: **Laminare, leicht gewellte Flammen** entstehen bei kleiner Turbulenzintensität für praktisch alle Längenmaße die eine kritische Größe übersteigen. Dabei muß insbesondere das Längenmaß der dissipativen (Kolmogorov) Wirbel größer sein als die Reaktionszonendicke. Als Folge der niederen Turbulenzintensität sind die turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen kleiner als die laminare Flammengeschwindigkeit. Aus diesem Grund sind die Turbulenzballen nicht in der Lage in die Reaktionszone einzudringen, sondern führen nur zu deren Verformung. Die instationäre Betrachtung führt auf eine dünne quasi-laminare Flammenfront. Aufgrund der Schwankungen erscheint die zeitgemittelte Flammenfront dicker.
- C: **Gefaltete Flammen** sind charakterisiert durch eine zerklüftete Flammenfront, mit einzelnen isolierten Edukte- Produktenballen. Sie entstehen bei turbulenten Schwankungs geschwindigkeiten, welche mindestens leicht größer sind als die laminare Flammengeschwindigkeit. Dies lässt sich durch Größenordnungsabschätzung ermitteln (z. B. Borghi (1988)), ist aber auch der Anschauung zugänglich, da eine Schwankungs geschwindigkeit welche größer als die laminare Flammengeschwindigkeit ist, in der Lage ist Frischgasballen durch die Reaktionszone hindurch zu verschieben, bevor diese von der (noch immer quasi-laminaren) Flammenfront durchdrungen werden.
- D: **Dicke turbulente Flammen** sind sehr viel komplizierter zu beschreiben. Sie entstehen bei  $l_k \approx \delta_l$  durch weitere Erhöhung der turbulenten Schwankungsintensität

( $Ka_t = t_l/t_k > 1$ ). Das Spektrum der turbulenten Längenmaße wird dabei größer, da die Kolmogorov Länge sich zu feinerer Turbulenz hin verschiebt, das Makrolängenmaß aber erhalten bleibt. Dadurch nimmt zum einen die Anzahl der Wechselwirkungen von turbulenten Wirbeln und Flammenfront zu, zum anderen kann dies zu dissipativen Längenmaßen führen, welche kleiner sind als die laminare Flammendicke (selbst wenn  $L_t \gg \delta_l$ ). Dadurch können Wirbel in der Reaktionszone zerfallen, wodurch die Verbrennung stark intensiviert wird. Die instantane Flammenfront erscheint deutlich dicker als die laminare. Das weite Spektrum der Turbulenz führt über Wirbel, welche größer sind als die Flammenfrontdicke nach wie vor zu einer Faltung der Flammenfront. Gleichzeitig werden die charakteristischen turbulenten Frequenzen höher, wodurch Bereiche auftreten können, in denen die laminare Flammenfront der Dynamik des turbulenten Strömungsfeldes nicht mehr folgen können. Eine Zunahme des Geschwindigkeitsgradienten durch Wirbelfadenstreckung führt in Flammen zum sogenannten *flame stretching*. Eine zu hohe Streckung kann zum Aufreißen der Flammenfront und zu lokaler Verlöschung führen. Es existieren in diesem Bereich also verschiedene Zustände nebeneinander, von eingeschlossenen Frischgasballen über die sie durchdringende Flammenfront, bis hin zu verlöschten aber nicht vollständig ausreagierten Gebieten.

- E: **Homogene Reaktoren** entstehen durch weitere Verdickung der Flammenfront, welche schließlich zur vollständigen Aufnahme aller turbulenten Längenmaße in die Reaktionszone führt. Aufgrund einer sehr intensiven turbulenten Mischung liegen alle Reaktanden in molekularer Gemischtheit vor, so daß als einzige zeitliche Limitierung des Reaktionsumsatzes die endliche Geschwindigkeit der chemischen Reaktionskinetik bestimmt wird. Der Bereich der homogenen Reaktoren ist daher charakterisiert durch eine Damköhler Zahl kleiner eins. Die Flamme erscheint nicht mehr gefaltet, die chemischen Reaktionen laufen räumlich gleichmäßig ab.

Auch diese Einteilung wird den realen Vorgängen nur näherungsweise gerecht, da die Angabe von *typischen* Turbulenzgrößen die Repräsentation der Turbulenz durch *einen* Mittelwert impliziert. Die Trennlinien der einzelnen Bereiche des Borghi Diagramms sollten daher als Übergangsbereiche interpretiert werden.

Einfache Verbrennungsmodelle machen sich diese Klassifizierung zu Nutze, indem nur bestimmte, überwiegende Effekte bei der Modellierung berücksichtigt werden, z.B. Mischungsdominanz bei *mixed=burned*, *mixed+ignited=burned* (siehe Dreher und Suter 1991), *EDM* oder aber chemische Dominanz bei perfekter Gemischtheit (homogene Reaktoren). Dies geht einher mit dem Verlust der Allgemeingültigkeit. Vor dem Einsatz solcher Modelle muß im Prinzip ihr Gültigkeitsbereich überprüft werden. Allgemeingültigere Verbrennungsmodelle (Verbundwahrscheinlichkeitsmodell z.B. nach Philipp (1991)) versuchen mehrere Bereiche des Borghi Diagramms abzudecken, zum Teil auch durch Verwendung verschiedener Modelle in unterschiedlichen Bereichen.

### 3.2.2 Gasverbrennungssimulation

Im Fall einer turbulenten Verbrennungsreaktion müßte für jede Spezies eine Transportgleichung gelöst werden, wobei die Berechnung der chemischen Quellterme, aufgrund ihrer Nichtlinearität, für die fluktuierende Temperatur zu berechnen wäre. Dies übersteigt aber bei weitem die Leistungsfähigkeit modernster Supercomputer. Darüber hinaus erscheint es aber auch zweifelhaft, ob sich die sehr steifen chemischen Gleichungssysteme (die Zeitskala überstreicht mehrere Größenordnungen) mit den heute vorhandenen numerischen Methoden zur Strömungsberechnung ohne Probleme koppeln lassen, oder ob mit noch zu entwickelnden Methoden (z.B. Berechnung von Teilsystemen mit jeweils eigenem Zeitschritt) der um Größenordnungen ver-

schiedenen Zeitskalen von chemischer Reaktion und fluidodynamischer Kinematik Rechnung getragen werden muß.

Auf der Basis der heute verfügbaren Hard- und Software lassen sich für technische Verbrennungssysteme, welche charakterisiert sind von turbulentem Strömungszustand und komplexer Geometrie, nur Simulationen auf der Basis vereinfachender Modellannahmen durchführen.

Die Modelle sind so auszuwählen, daß bei hinreichender Berücksichtigung der interessierenden Effekte der Rechenaufwand für einen Gitterunabhängigkeitstest bewältigbar bleibt. Ansonsten läge zwar eine Lösung vor, deren Güte aber nicht beurteilbar wäre. Der Simulationsaufwand muß sich ganz allgemein an der zu beantwortenden Fragestellung orientieren.

In der Literatur sind eine Reihe von Verbrennungsmodellen bekannt, welche unterschiedliche Annahmen zur Vereinfachung des Simulationsaufwandes treffen. Für eine Übersicht wird auf Khalil (1982) sowie Borghi (1988) verwiesen.

Am weitesten Verbreitung haben Modelle gefunden welche, ausgehend von einer Größenordnungsabschätzung, entweder den physikalischen Vorgang oder die chemische Reaktion als den überwiegenden Effekt betrachten und daher den jeweils anderen entweder stark vereinfacht approximieren oder auch ganz vernachlässigen.

Im Falle der physikalischen Limitierung spricht man von der Mischungsdominiertheit der Verbrennung, womit zum Ausdruck kommt, daß alle nach der Mischung stattfindenden Vorgänge der chemischen Reaktion sehr viel schneller ablaufen und damit den Gesamtreaktionsumsatz nicht mehr wesentlich beeinflussen können.

Modelle, welche die Mischung ganz vernachlässigen oder welche laminare Flammen betrachten und dabei komplexe chemische Reaktionsmechanismen (bis zu einigen hundert Reaktionen) berücksichtigen, werden überwiegend für verbrennungstechnische Grundlagenuntersuchungen eingesetzt (Warnatz (1989)).

Die in dieser Arbeit verwendeten Verbrennungsmodelle, welche zu der Klasse der mischungsdominierten gehören, werden im Folgenden dargestellt.

### 3.2.2.1 Das mixed = burned Modell (m=b)

Das mixed = burned Modell geht zurück auf einen von Burke und Schumann (1928) veröffentlichten Vorschlag, nachdem sich für Diffusionsflammen unter gewissen Bedingungen eine konservierte Größe ableiten lässt, anhand derer die Flammentemperatur, sowie die Brennstoff-, Oxidant- und Produktkonzentrationen beschrieben werden können. Die Voraussetzungen dafür sind die Annahme einer:

- einstufigen
- irreversiblen
- mischungskontrollierten

Reaktion. Dann läßt sich der Verbrennungsvorgang darstellen als eine Mischung von Brennstoff und Oxidant (Burke und Schumann bezeichnen diesen als *negativen Brennstoff*), wobei eine Koexistenz von Brennstoff und Oxidant, am gleichen Ort, nicht auftreten kann.

Obige Annahmen führen zu einem Modell, welches eine unendlich dünne Flammenhaut vorhersagt. Die Berechnung der Konzentrations- und Temperaturfelder stützt sich ab auf die Ausbreitungsrechnung der konservierten Größe  $\xi$

$$\xi = m_{Brennstoff} - \frac{m_{Oxidant}}{s} \quad (3.15)$$

mit dem stöchiometrischen Koeffizienten s der Reaktion. Mittels  $\xi$  kann nun eine Klassifizierung der Reaktion vorgenommen werden:

$\xi > 0$  brennstoffreiche Verbrennung

$\xi = 0$  stöchiometrische Verbrennung

$\xi < 0$  luftreiche Verbrennung

Für die numerischen Berechnungen ist es vorteilhaft die konservierte Größe in geeigneter Weise dimensionslos zu machen, welche dann als Mischungsbruch (engl.: mixture fraction) bezeichnet wird:

$$f = \frac{\xi - \xi_L}{\xi_G - \xi_L} \quad (3.16)$$

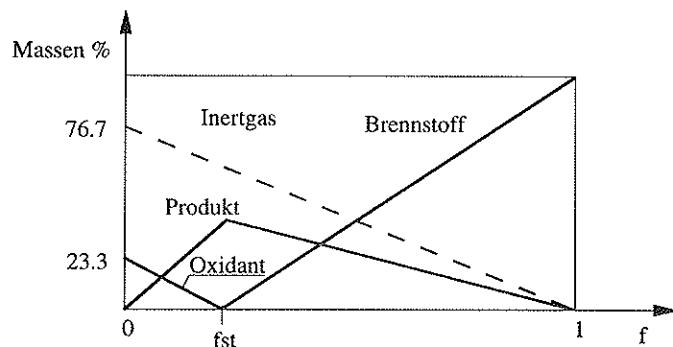
mit  $\xi_L$  = Wert von  $\xi$  am Lufteinlaß

$\xi_G$  = Wert von  $\xi$  am Gaseinlaß

Zwischen der sogenannten mixture fraction f und den Konzentrationen besteht der in Abbildung 3.3 dargestellte Zusammenhang. Zur Ermittlung des Temperaturfeldes muß noch eine Erhaltungsgleichung für die Enthalpie h (=chemisch gebundene Reaktionsenthalpie + sensible Wärme) gelöst werden. Dann kann die Temperatur über die Beziehung

$$T_1 = \frac{h - Hu m_{Brennstoff} + C_p(T_0) T_0}{C_p(T_1)} \quad (3.17)$$

errechnet werden.

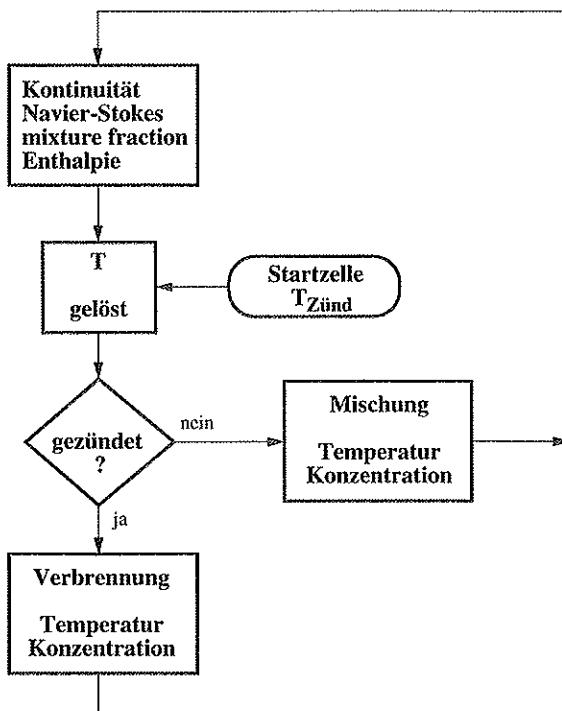


*Abbildung 3.3: Zusammenhang zwischen der mixture fraction und den Gas-, Oxidant-, Produkt- und Inertgaskonzentrationen*

### 3.2.2.2 Das mixed+ignited = burned Modell ( $m+i=b$ )

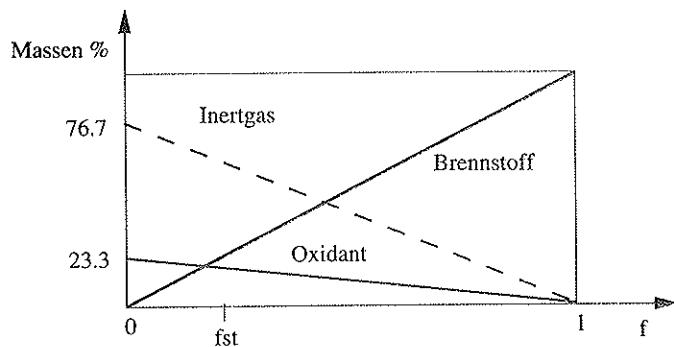
Das mixed=burned Modell führt aufgrund einer Mischungsrechnung zur Vorhersage einer Verbrennung, auch an Orten an denen in Realität eine Flammenstabilisierung aufgrund hoher Strömungsgeschwindigkeiten gar nicht vorliegt. Dreher und Suter (1991) stellten eine Erweiterung des Verbrennungsmodells vor (mixed+ignited  $\approx$  burned), das die Berücksichtigung der Zündung, für Flammen, welche durch Rezirkulationszonen stabilisiert sind, ermöglicht.

Dazu wurde der Rechenalgorithmus auf die in Abbildung 3.4 gezeigten Art erweitert. Zunächst wird in der aktuellen Rechenzelle überprüft, ob die Temperatur aufgrund der turbulenten Transportvorgänge auf einen Wert angestiegen ist, der die (vorzugebende) Zündtemperatur übersteigt. Wenn dies der Fall ist, so werden analog dem mixed=burned Modell die Verbrennungsgrößen berechnet. Wenn die Zündtemperatur nicht überschritten ist, so wird ausschließlich eine Mischungsrechnung durchgeführt, die Energiefreisetzung unterdrückt. Dieses Vorgehen beinhaltet ein Anfangsproblem. Da ausgehend von einer kalten Anfangsschätzung in keiner der Zellen die Zündtemperatur überschritten ist, muß eine Zelle durch setzen einer hinreichend großen Temperatur, in Analogie zur Realität, *gezündet* werden. Ausgehend von dieser Zelle breitete sich die Flamme dann im Rechengebiet, gemäß der zugrundeliegenden Transportgleichungen der Skalare, aus.



*Abbildung 3.4: Der mixed + ignited = burned Algorithmus*

Der in Abbildung 3.4 erwähnten Mischungsrechnung liegt der in Abbildung 3.5 dargestellte Zusammenhang zugrunde.



*Abbildung 3.5:* Der Zusammenhang zwischen der mixture fraction und den Konzentrationen beim mixed + ignited = burned Modell, im Fall der Mischungsrechnung

Das mixed + ignited = burned Modell ermöglicht die Berechnung von Flammen mit Gebieten, in denen zwar Mischung auftritt, jedoch eine Flammenstabilisierung nicht erfolgt. Es eignet sich für alle rezirkulationsstabilisierten Flammen, auch solche, welche Stellen mit kaltem Rezirkulat aufweisen. Auf diesen Punkt wird im nächsten Abschnitt noch ausführlicher eingegangen, da dies einen wesentlichen Unterschied zum EDM darstellt.

### 3.2.2.2 Das Eddy Dissipation Model (EDM)

Das von Magnussen (1976) vorgestellte Verbrennungsmodell geht ebenfalls von einer mischungskontrollierten Verbrennung aus, jedoch wird im Gegensatz zu den vorigen Modellen der Reaktionsumsatz über eine Beziehung zur Zerfallszeit der turbulenten Wirbel nach Gleichung (3.18) begrenzt. Die Reaktionsrate ergibt sich damit aus:

$$R = A \rho \frac{\epsilon}{k} \sigma_{\min} \quad (3.18)$$

mit:

$$\sigma_{\min} = \min \left( Y_{\text{Brennstoff}}; \frac{Y_{\text{Oxidant}}}{s}; B * \frac{Y_{\text{Produkte}}}{(1+s)} \right) \quad (3.19)$$

Das Modell erfordert die Lösung je einer Transportgleichung für Brennstoff und Oxidant (und auch für das Produkt, falls eine Inertgaskomponente vorliegt).

Das zugrunde liegende Modellverständnis besteht in der Vorstellung eines Transports von Edukten in die turbulente Feinstruktur, welche den die Gesamtmischung limitierenden Faktor darstellt und der über das turbulente Zeitmaß ( $k/\epsilon$ ) beschrieben werden kann.

Die Feinstruktur selber wird als homogener Reaktor betrachtet, innerhalb welchem die Umsetzungen unendlich schnell und vollständig ablaufen. Dieses Modell unterscheidet sich vom mixed=burned Modell in der Begrenzung des Reaktionsumsatzes durch eine aus dem Turbulenzzustand abgeleitete Größe, sowie in der Berücksichtigung des Produkteterms, welcher als Voraussetzung zur Reaktion betrachtet wird. Letztere Vorstellung trifft aber nur für Flammen zu, welche ausschließlich über heißes Abgas verfügen (z.B. Freistrahlfäden). Der in dieser Arbeit interessierende Fall von eingeschlossenen Flammen in Rezirkulationsbrennern läßt sich mit diesem Modell nicht für alle Betriebszustände vorhersagen. Der Zustand des Rezirkulats hängt von der Wechselwirkung mit der Brennkammer ab, in welcher der Brenner betrieben wird. Falls die Temperatur des Rezirkulats kleiner ist als die Zündtemperatur, so ist zwar Produkt vorhanden, die Zündung ist davon jedoch unberührt. Daher wäre auch mit diesem Modell die Berechnung der hier interessierenden Rezirkulationsbrenner nur eingeschränkt möglich.

Magnussen hat später eine erweiterte Variante vorgeschlagen (1989), die nach Philipp (1991) darstellbar ist als:

$$R = \min \left( 24.3 \text{Re}_t^{-1/4} \rho \frac{\varepsilon}{k} \sigma_{\min}; \bar{R}_{Arrh} \right) \quad (3.20)$$

Es wird also ein Einfluß der turbulenten Reynolds Zahl berücksichtigt. Der Berücksichtigung einer mittleren Arrheniusrate  $\bar{R}_{Arrh}$  liegt die Absicht zugrunde, das Modell auch für nicht mischungskontrollierte Bereiche, in denen die chemische Kinetik an Einfluß gewinnt, zu erweitern.

In Anlehnung an die Berechnung laminarer Arrheniusraten wird die Arrheniusrate des turbulenten Falls oft aus der mittleren Temperatur  $\bar{T}$  errechnet gemäß:

$$R_{Arrh} = A_{Arrh} [\text{Brennstoff}]^\alpha [\text{Oxidant}]^\beta \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right) \quad (3.21)$$

mit den stöchiometrischen Koeffizienten  $\alpha, \beta$ .

Damit kann dem nichtlinearen Zusammenhang, der eigentlich für instantane Temperaturen bestimmt und anschließend gemittelt werden müßte, nur näherungsweise Rechnung getragen werden, denn:

$$\bar{R}_{Arrh(T)} \neq R_{Arrh(\bar{T})} \quad (3.22)$$

Die Berechnung der effektiven Reaktionsrate kann auf mehrere Arten erfolgen, durch:

- a.) umschalten zwischen  $R_{EDM}$  und  $R_{Arrh}$  wie in Gleichung (3.20) durch die Minimalfunktion
- b.) mittels einer Überblendfunktion, wie dies, unter anderem, auch von Philipp (1991) vorgeschlagen wurde:

$$R_{eff} = \frac{1}{\frac{1}{R_{EDM}} + \frac{1}{\bar{R}_{Arrh}}} \quad (3.23)$$

- c.) durch eine Reihenschaltung der Prozesse *Transport in die Feinstruktur* und *Arrhenius Reaktion* des in der Feinstruktur vorhandenen Brennstoffs. Dazu müßte

eine weitere Transportgleichung für den in der Feinstruktur vorhandenen Brennstoff gelöst werden, da der nicht reagierte Teil in der Feinstruktur verbleibt.

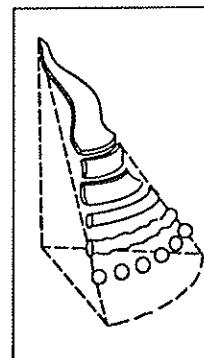
Diese Modellvarianten sind insbesondere für drallstabilisierte und Flammen mit niedriger Damköhlerzahl interessant, da dort Zonen auftreten, welche vom chemischen Reaktionsumsatz limitiert sind. Bei den in Rezirkulationsbrennern typischerweise vorliegenden teilvorgemischten Strahlflammen ist der Reaktionsumsatz in guter Näherung mischungslimitiert.

### 3.2.3 Ölverbrennungssimulation

Die numerische Simulation der Ölsprayverbrennung lässt sich in die Teilespekte Tropfenentstehung, Tropfenbewegung, Tropfenverdampfung und Öldampfverbrennung aufgliedern. Abhängig von der Prozeßführung können mehrere der Teilprozesse simultan ablaufen.

#### 3.2.3.1 Tropfenentstehung

Der Vorgang der Tropfenentstehung wird in der Literatur in der Regel auf einen Filmzerfall durch Zerwellen (siehe Abbildung 3.6) oder „turbulente“ Zerstäubung zurückgeführt.

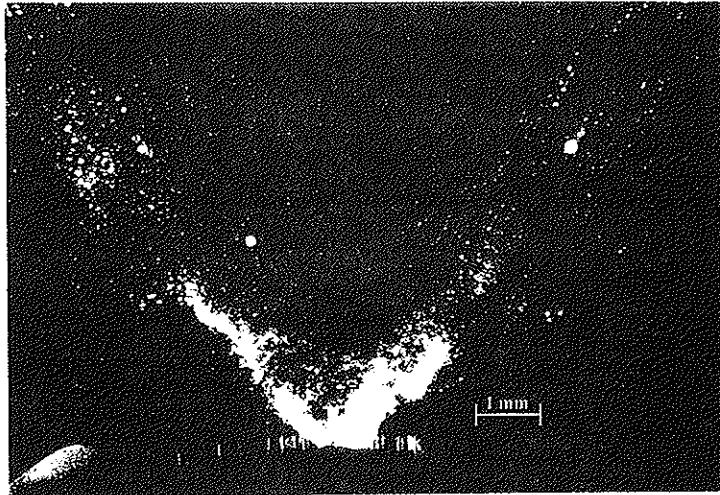


*Abbildung 3.6: Filmzerfall durch Zerwellen (nach Löffler-Mang (1992))*

Der in Abbildung 3.6 dargestellte hohlkegelförmige Flüssigkeitsfilm befindet sich mit der umgebenden Luft über Scherschichten im Impuls austausch. Aufgrund von Instabilitäten gerät der Film in Schwingungen, welche anwachsen und den Film in Bänder zerreißen. Durch die Bewegung stromab wird der Umschlag des Bandes ständig größer, das Band selber gestreckt, bis es schließlich unter Einwirkung der Oberflächenspannung zu einem Kollektiv von Einzel-tropfen unterschiedlicher Durchmesser zerfällt. Aus Ähnlichkeitsbetrachtungen lassen sich einige globale Größen wie z.B. die Zerfallslänge oder Zerfallszeit ableiten.

Die turbulente Tropfenzerstäubung wird auf die Anfachung der Turbulenz im Flüssigkeitsfilm (in der Regel durch die Turbulenz des Umgebungsmediums, oder durch die hohe Austrittsgeschwindigkeit der Flüssigkeit) zurückgeführt. Die quantitative Beschreibung ist noch nicht in dem selben Maß wie bei dem Zerfall durch Zerwellen möglich, da die Einzelvorgänge noch nicht genau genug verstanden sind.

Beide Arten der Tropfenentstehung sind heute der Berechnung noch nicht in solch einem Maß zugänglich, daß damit die zur Simulation benötigten Randbedingungen ermittelt werden können. Man ist daher auf die experimentelle Ermittlung, der das Tropfenkollektiv charakterisierenden Größen, angewiesen.



*Abbildung 3.7: Doppelpuls Fotografie ( $10\mu\text{s}$ ) einer  $80^\circ$  Hohlkegeldüse mit  $1.6\text{kg}/\text{h}$  Durchsatz (Wasser)*

Die genauesten verfügbaren Messungen werden mittels *Phase Doppler Particle Analyzer* (PDPA, siehe Ruck (1988)) durchgeführt. Das Meßverfahren erlaubt die gleichzeitige Bestimmung von zwei Geschwindigkeitskomponenten, sowie der Tropfengröße.

Die Messung einer hinreichenden Anzahl von Tropfen ermöglicht die Angabe statistisch relevanter Verteilungsfunktionen für Tropfengröße und Tropfengeschwindigkeiten.

Problematisch ist zu werten, daß der Ort an dem PDPA Messungen möglich sind (das Spray muß hinreichend optisch dünn sein) nicht identisch ist mit dem Ort der Tropfenentstehung (siehe auch Ochs (1993)). Daher müssen die Anfangsgeschwindigkeitsdaten der Tropfen durch Rückwärtsintegration der Bewegungsgleichung ermittelt werden. Die Änderung der Tropfengröße ist bei geeigneten Versuchsbedingungen, insbesondere Umgebungstemperatur und Dampfdruck, vernachlässigbar.

### 3.2.3.2 Tropfenbewegung

Die Modellierung der Tropfenbewegung kann abhängig von der Wahl des Bezugssystems auf unterschiedliche Arten erfolgen. Jede Methode hat spezielle Vor- und Nachteile auf die kurz eingegangen werden soll.

### 3.2.3.2.1 Eulersche Betrachtungsweise (ortsfestes Koordinatensystem)

Bei der Eulerschen Formulierung wird das Tropfenkollektiv ebenso wie die Gasphase als Kontinuum behandelt. Daher kann der selbe Lösungsalgorithmus auch für die zweite Phase verwendet werden, wodurch sich ein sehr kleiner programmiertechnischer Zusatzaufwand ergibt. Ein deutlicher Nachteil besteht jedoch hinsichtlich der Berücksichtigung von Verteilungsfunktionen für einzelne Größen (z.B. Durchmesserklassen, Geschwindigkeitskomponentenklassen). Für jede dieser Tropfenstartbedingungen muß das ganze Gleichungssystem für Impuls, Temperatur und Konzentration beziehungsweise Masse gelöst werden, wodurch sich schnell ein enormer Speicherplatzbedarf ergeben kann. Zudem entsteht ein sehr hoher Rechenzeitbedarf bei der hier zu berechnenden Brennkammerströmung dadurch, daß praktisch 98% des Rechengebiets keine Partikelbeladung aufweisen, aber trotzdem gelöst werden müssen.

Als vorteilhaft erweist sich die Möglichkeit der Berücksichtigung der gegenseitigen Beeinflussung der Partikel, da die Partikelkonzentrationen bei der Berechnung von physikalischen Größen (z.B. Widerstandsbeiwert) bereits bekannt sind. Für „dünne“ Tropfenkollektive kann die gegenseitige Beeinflussung von Einzeltropfen vernachlässigt werden. Die Grenze von dichten zu dünnen Sprays ist nicht scharf definierbar, jedoch kann nach Faeth (1987) davon ausgegangen werden, daß bei Partikelvolumenkonzentrationen von kleiner 1% die Partikelwechselwirkungen vernachlässigbar sind. Abbildung 3.7 zeigt, daß bereits wenig stromab von der Düse die Vernachlässigung der Wechselwirkung zwischen den einzelnen Tropfen gerechtfertigt ist.

Die Eulersche Betrachtungsweise wird in der Regel für die Berechnung von zweiphasigen Dämpfen eingesetzt (dort gibt es oft nur eine Tropfenstartbedingung), spielt jedoch in der Simulation von Ölverbrennungsvorgängen eine untergeordnete Rolle.

### 3.2.3.2.2 Lagrangesche Betrachtungsweise (mitbewegtes Koordinatensystem)

In der Realität kann ein Tropfen (des Tropfenkollektivs) eines bestimmten Durchmessers wieder unterschiedliche Geschwindigkeiten ( $v_x, v_y, v_z$ ) aufweisen.

Bei der auch als Tropfenbahnmodell bezeichneten Methode wird das Tropfenkollektiv aufgeteilt in  $N_D$  diskrete Tropfengrößenklassen. Jeder Tropfengrößenklasse ist eine diskretisierte Geschwindigkeitsverteilung zugeordnet, welche aus  $N_G$  Geschwindigkeitsklassen besteht.

Für jede sich so ergebende Tropfenstartbedingung ( $N_D * N_G$ ) wird eine Bahnberechnung durch Integration der Bewegungsgleichung (Gl. 3.27) durchgeführt.

Aus der linearen Überlagerung, unter Berücksichtigung der Häufigkeitsverteilung der einzelnen Tropfenstartbedingungen, ergibt sich das modellierte Sprayverhalten. Eine Berücksichtigung der Wechselwirkung einzelner Tropfen ist damit nur sehr aufwendig (iterativ) möglich, da die Tropfendichte am einzelnen Ort bei der Integration der Bewegungsgleichung des Einzeltropfens noch gar nicht bekannt ist.

Unterschiedlichen Startbedingungen kann relativ einfach dadurch Rechnung getragen werden, daß je eine Integration der Bewegungsgleichung durchgeführt wird.

Der Einfluß der Turbulenz der Grundströmung auf die Bewegung des Einzeltropfens wird über eine statistische Methode, die von Gosman und Ioannides (1983) vorgeschlagen wurde, berücksichtigt. Die zur Integration der Bewegungsgleichung benötigte Augenblicksgeschwindigkeit der Gasströmung wird aus dem Mittelwert, sowie einer zu bestimmenden Schwankungsgeschwindigkeit ermittelt. Diese Augenblicksgeschwindigkeit wirkt solange auf den Tropfen ein, bis dieser sich nicht mehr im momentanen Turbulenzballen befindet. Dies kann

seine Ursache im Zerfall des Turbulenzballens (Zerfallszeit  $t_Z$ ) haben oder darin, daß der Tropfen aufgrund seiner Bewegung den Ballen verlassen hat.

Unter der Annahme isotroper Turbulenz, sowie einer Gaußverteilung um den Mittelwert erhält man die Schwankungsgeschwindigkeit der Gasphase aus:

$$u'_i = \Gamma \sqrt{\frac{2k}{\varepsilon}} = \Gamma \sqrt{u_i'^2} \quad (3.24)$$

wobei  $\Gamma$  eine normalverteilte Zufallszahl ist.

Aus dem integralen Lagrangeschen Zeitmaß kann die Dissipationszeit eines Turbulenzballens nach Hinze (1975) ermittelt werden:

$$\tau_L = \frac{l_W}{\sqrt{2k/\varepsilon}} \quad (3.25)$$

$$l_W = C_\mu^{3/4} \frac{k^{3/2}}{\varepsilon} \quad (3.26)$$

In kartesischen Koordinaten lauten die Bewegungsgleichungen für einen kugelförmigen Einzeltropfen:

$$\frac{dv_{t,i}}{dt} = -\frac{3}{4} \frac{\rho}{\rho_t} \frac{c_w}{D_t} c_{rel} (v_{t,i} - u_i) \quad (3.27)$$

$$\frac{dx_{t,i}}{dt} = v_{t,i} \quad (3.28)$$

mit der Relativgeschwindigkeit  $c_{rel}$  zwischen Tropfen ( $v$ ) und Gasphase ( $u$ )

$$c_{rel} = \sqrt{\sum_i (v_{t,i} - u_i)^2} \quad (3.29)$$

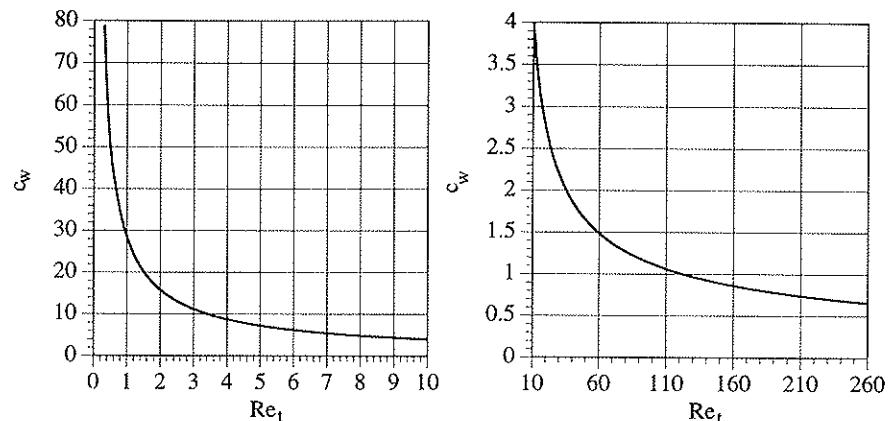
Der Widerstandsbeiwert  $c_w$  kann z.B. nach Clift et al. (1978) bestimmt werden:

$$0.01 \leq Re_t \leq 20 \quad c_w = \frac{24}{Re_t} [1 + 0.1315 Re_t^{(0.82 - 0.05 \log(Re_t))}] \quad (3.30a)$$

$$20 \leq Re_t \leq 260 \quad c_w = \frac{24}{Re_t} [1 + 0.1935 Re_t^{0.6305}] \quad (3.30b)$$

mit der Tropfen-Reynoldszahl:

$$Re_t = \frac{D_t c_{rel}}{v} \quad (3.31)$$



*Abbildung 3.8: Abhangigkeit des Widerstandsbeiwertes von der Tropfen Reynoldszahl*

Die Einbeziehung des Turbulenzeinflusses fuhrt wegen der zufallsverteilten Schwankungsgeschwindigkeit auf unterschiedliche Tropfenbahnen fur identische Startbedingungen. Die Bildung statistisch repräsentativer Mittelwerte erfolgt durch die mehrfache Berechnung von Tropfenbahnen fur identische Startbedingungen mit anschlieender Ensemble Mittelung.

Aufgrund des dadurch stark ansteigenden Rechenzeitbedarfs werden zur Berechnung von Tropfenkollektiven aus Hohlkegeldusen (bevorzugte Ausbreitung in Richtung des Offnungswinkels) in der Regel keine Geschwindigkeitsverteilungen pro Tropfengroenklasse mehr bercksichtigt.

### 3.2.3.3 Tropfenverdampfung

Bei der Verdampfung von Heizol EL handelt es sich um einen sehr komplexen Vorgang, der insbesondere aufgrund der Zusammensetzung des Ols, welches ein Gemisch aus einer Vielzahl verschiedener Kohlenwasserstoffe ist, nicht exakt beschrieben werden kann.

Fur reine Stoffe stehen in der Literatur (z.B. Faeth (1977)) Verdampfungsmodelle zur Verfugung. Mehrkomponentenansatze sind erst in jungerer Zeit in der Literatur zu finden (z.B. Kneer (1992)), wobei aufgrund des hohen Rechenzeitbedarfs diese Modelle bisher fur Brennkamersimulationen noch nicht einsetzbar sind. Die Untersuchungen haben Grundlagencharakter und zeigen den Einflu der Bercksichtigung verschiedener Komponenten unter speziellen Bedingungen. Zur Beschreibung der Olverdampfung weicht man daher heute auf die Beschreibung des Verdampfungsvorgangs eines reinen, sogenannten Ersatzstoffes, aus, der mglichst ahnliche Stoffeigenschaften aufweisen soll wie das zu untersuchende Öl. Dies stellt eine den realen Fall grob vereinfachende Methode dar, insbesondere da Heizol EL aufgrund seiner Mischungszusammensetzung eine Siedekurve gema Abbildung 3.9 aufweist, wohingegen reine Stoffe charakterisiert sind durch eine an einem Siedepunkt stattfindende Phasenumwandlung.

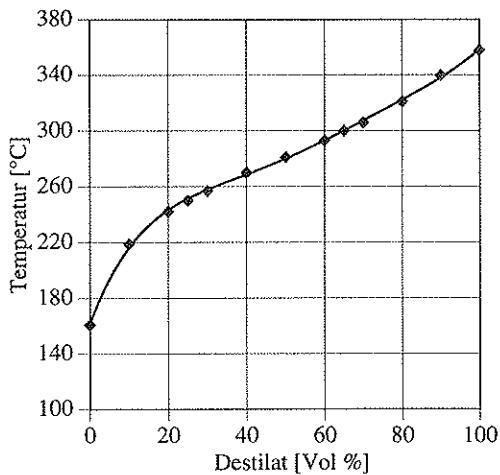


Abbildung 3.9: Siedekurve von Heizöl EL nach EMPA (1987)

Die Wahl des Ersatzstoffes hat dabei so zu erfolgen, daß die für die zu beschreibenden Vorgänge der Tropfenbewegung und Tropfenverdampfung wichtigen Stoffgrößen, denen des Heizöls am nächsten kommen.

In Tabelle 3.2 sind *typische* Stoffwerte vergleichend aufgelistet.

Eigenschaft	Stoff	Diesel (Heizöl EL)	Nonan	Dodekan	Tetra-Dekan	Ethanol
Summenformel	-	C <sub>9</sub> H <sub>20</sub>	C <sub>12</sub> H <sub>26</sub>	C <sub>14</sub> H <sub>30</sub>	C <sub>2</sub> H <sub>5</sub> OH	
Molekulargewicht [kg/kmol]	215	128.25	170.33	198.38	46.07	
Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]	0.83	0.72	0.75	0.77	0.8	
Siedetemperatur [K], (1bar)	537	423.9	489.4	526.7	351.5	
Verdampfungsenthalpie [kJ/kg], (1bar)	242	296	256.6	240.6	846	
Kinematische Viskosität *10 <sup>6</sup> [m <sup>2</sup> /s], (T=311K)	2.75	0.79	1.45	2.08	1.48	
Oberflächenspannung *10 <sup>3</sup> [N/m], (T=311K)	26.5	21.2	24.0	25.1	21.0	
Kritische Temperatur [K]	728	595.2	659.2	695.2	516.2	
Kritischer Druck [bar]	21.9	22.9	18.1	16.2	63.8	
Kritische Dichte [kg/m <sup>3</sup> ]	278	236	237	240	276	
H/C Verhältnis	1.91	2.22	2.167	2.14	3	

*Tabelle 3.2: Vergleich der Stoffwerte heizölähnlicher Substanzen; nach Kneer et al. (1989)*

Der Vorteil dieser Ersatzstoffwahl ist die prinzipielle Beschreibbarkeit des Vorgangs mittels Verdampfungsmodellen. Klausmann (1989) hat verschiedene Verdampfungsmodelle verglichen. Beim vereinfachten D<sup>2</sup> Modell wird die Verdampfung während der Aufheizung des Tropfens bis zur Gleichgewichtstemperatur vernachlässigt. Dadurch kann die Tropfentemperaturregleichung (3.37) entkoppelt von der Tropfendurchmessergleichung (3.38) gelöst werden. Er kommt zum Ergebnis, daß der vereinfachte Ansatz zur Beschreibung der Verdampfung unter hohen Gastemperaturen geeignet ist, jedoch bei der Verdampfungssimulation unter Temperaturen nahe oder unter der Siedetemperatur, wie sie in Vorverdampfungsbrennern herrschen, versagt.

Das auf Faeth (1977) zurückgehende Uniform Temperature Modell, welches von einer unendlichen Wärmeleitfähigkeit des Tropfens und daher einer homogenen Tropfentemperatur ausgeht wird als das geeignete Modell dargestellt.

Die Grundgleichungen des Modells können aus den Bilanzgleichungen für die Gemischzahl, Masse und Energie abgeleitet werden. Die wichtigsten dazu nötigen Annahmen sind:

- quasistationäre Verdampfung
- ruhender kugelförmiger Einzeltropfen
- ruhende Umgebung
- einseitige Ficksche Diffusion

Für eine vollständige Beschreibung der Voraussetzungen und Annahmen wird auf die Originalliteratur verwiesen.

Nach Kneer (1989) läßt sich Temperatur- und Durchmesseränderung eines Tropfens mit unendlicher Wärmeleitfähigkeit beschreiben durch:

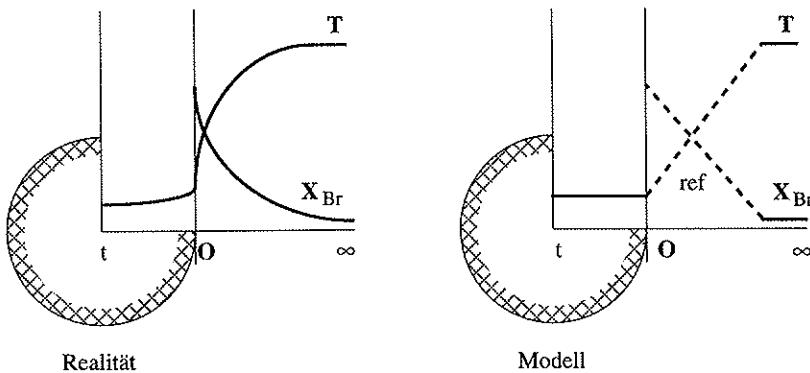
$$\frac{dT_t}{dt} = \frac{6 Nu Fr \lambda_{ref}}{\rho_t c_{p_t} D_t^2} (T_\infty - T_t) + \frac{3}{D_t c_{p_t}} \frac{dD_t}{dt} \Delta H_v \quad (3.32)$$

$$\frac{dD_t}{dt} = -Fr \frac{4 M_d n_{ref} \Gamma_{ref}}{\rho_t D_t} \ln \left( \frac{X_{d,\infty} - 1}{X_{d,O} - 1} \right) - \frac{D_t}{3 \rho_t} \frac{dp_t}{dt} \quad (3.33)$$

$$Fr = 1 + 0.276 \sqrt{Re_t} Pr^{1/3} \quad (3.34)$$

Der Frössling Faktor (Fr, nach Frössling (1938)) berücksichtigt den Einfluß der Konvektion.

Der zweite Term in Gleichung (3.33) berücksichtigt die Dichteänderung der flüssigen Phase während der Aufheizung.



*Abbildung 3.10: Temperatur- und Konzentrationsverteilung am Einzeltropfen*

Aufgrund der radialen Temperaturverteilung (Abbildung 3.10 links) besitzen auch die Stoffgrößen eine radiale Verteilung. Zur Ableitung der Gleichungen 3.32 und 3.33 mußte jedoch vorausgesetzt werden, daß die Stoffwerte konstant sind. Eine Methode zur Berücksichtigung der Temperaturabhängigkeit der Stoffwerte besteht nach Sparrow und Gregg (1958) darin, sie für eine Referenztemperatur zu berechnen. Diese Referenztemperatur kann z.B. bestimmt werden nach Gleichung 3.35 (1/3 Regel). Die Autoren weisen darauf hin, daß ohne großen Genauigkeitsverlust auch die Temperatur der flüssigen Phase als Referenztemperatur verwendet werden kann. Letztere Methode kommt in dieser Arbeit zur Anwendung.

$$T_{ref} = T_t + \frac{1}{3}(T_\infty - T_t) \quad (3.35)$$

$$X_{D,ref} = X_{D,O} + \frac{1}{3}(X_{D,\infty} - X_{D,O}) \quad (3.36)$$

$$n_{ref} = n(T_{ref}) \quad (3.37)$$

$$\Gamma_{ref} = \Gamma(T_{ref}) \quad (3.38)$$

$$\lambda_{ref} = X_{D,ref} \lambda_D(T_{ref}) + (1 - X_{D,ref}) \lambda_L(T_{ref}) \quad (3.39)$$

$$c_{p,D,ref} = c_{p,D}(T_{ref}) \quad (3.40)$$

Die Brennstoffdampfkonzentration an der Tropfenoberfläche ergibt sich aus dem Sättigungsdampfdruck und dem statischen Druck:

$$X_{D,O} = \frac{P_{satt}}{p} \quad (3.41)$$

Die Berechnung des Sättigungsdampfdruck an der Tropfenoberfläche kann nach der Cox-Antoine Gleichung (Reid et al. (1987)) gemäß Anhang A erfolgen:

$$P_{satt} = \exp \left[ A - \frac{B}{T_t + C} \right] \quad (3.42)$$

Die Temperaturabhängigkeit der Verdampfungsenthalpie wird nach Watson (1943) beschrieben durch:

$$\Delta Hv_2 = \Delta Hv_1 \left( \frac{1 - T_{r2}}{1 - T_{r1}} \right)^n \quad (3.43)$$

mit der reduzierten Temperatur:

$$T_r = \frac{T_t}{T_k} \quad (3.44)$$

In Anhang A sind die Koeffizienten angegeben.

Der Exponent n wird von Watson mit 0.38 angegeben. Eine ausführliche Untersuchung der Stoffabhängigkeit des Exponenten wurde von Silverberg und Wenzel (1965) durchgeführt. Insgesamt wurde der Exponent n in Gleichung (3.43) für 44 Substanzen bestimmt. Tetradekan befindet sich nicht darunter. Der Durchschnittswert der Exponenten wird in großer Übereinstimmung mit Watson zu 0.378 angegeben.

Die Dichte des Tropfens als Funktion der Tropfentemperatur lässt sich mittels der modifizierten Racket Gleichung (Reid et al. (1988)) bestimmen:

$$\rho_t = \frac{M_t p_k}{\mathfrak{R} T_k} Z_{RA}^{-\left(1+(1-T_r)^{2/7}\right)} \quad (3.45)$$

Die an den Stoff anpassbare Konstante  $Z_{RA}$  wurde von Spencer und Adler (1978) für 75 verschiedene Kohlenwasserstoffe ermittelt und ist in Anhang A angegeben.

Die Temperaturabhängigkeit des binären Diffusionskoeffizienten für Tetradekan in Stickstoff lässt sich gemäß VDI-Wärmeatlas (1988) bestimmen zu:

$$\Gamma_{12} = \Gamma_0 \frac{T^{1.75}}{p * 10^{-5}} \quad (3.46)$$

$\Gamma_0$  ist im Anhang A angegeben.

### 3.2.3.4 Öldampfverbrennung

Das hier vorgestellte Ölverdampfungsmodell geht von der Verdampfung eines Einzeltropfens in einem inertem Medium aus. Eine Verbrennung in der Nähe des verdampfenden Tropfens ist nicht vorgesehen. Eine chemische Reaktion in der Nähe der Tropfenoberfläche würde neben der Temperaturerhöhung insbesondere den Dampfdruck des Brennstoffs herabsetzen und dadurch zu einem deutlich veränderten Verdampfungsverhalten führen.

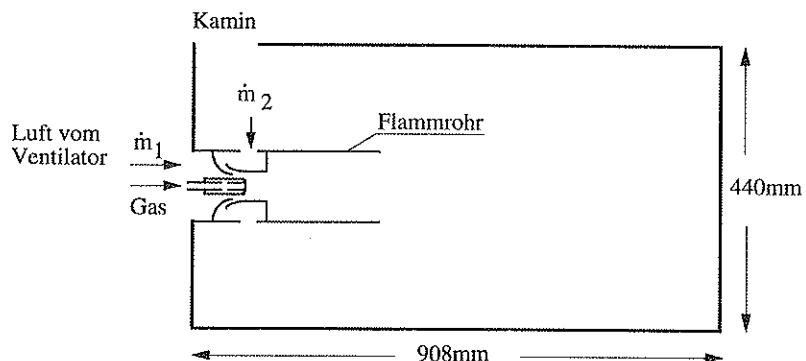
Aufgrund der Komplexität des Verdampfungsvorgangs bei realen Stoffgemischen wurde für das Verdampfungsmodell vereinfachend angenommen, daß die flüssige Phase von einem reinen Ersatzstoff repräsentiert wird. Dies führt auf Brennstoffdampfquellen, welche ebenfalls *eine* Spezies darstellen. Eine Verbrennungssimulation auf der Basis verschiedener Edukte ist daher a priori ausgeschlossen, da nur von einem Edukt die Quellenverteilung bekannt ist.

Dies schränkt die numerische Simulation jedoch nicht weiter ein, da eine komplette Erfassung der Gasphasenchemie, mit einer Vielzahl von Edukten und der detaillierten Beschreibung der Reaktionsabläufe, innerhalb einer turbulenten Strömung in einer komplexen Geometrie, aus Gründen der Rechenzeit- und Speicherplatzlimitierungen, ohnehin nicht möglich wäre.

Die Simulation des Öl-Verbrennungsvorgangs beschränkt sich daher auf die Modellierung der Energiefreisetzung, welche in Analogie der Simulation der Energiefreisetzung einer Gasverbrennung erfolgt. Prinzipiell stehen daher die selben Modelle zur Verfügung wie bei der Gasverbrennungssimulation.

## 4 Wechselwirkung von Rezirkulationsbrenner und Brennkammer

Praktische Erfahrungen im Betrieb von Rezirkulationsbrennern zeigten, daß offenbar eine Wechselwirkung von Brenner und Brennkammer besteht. Ein Brenner emittiert abhängig von der Brennkammer (Geometrie, Temperatur), in der er betrieben wird, unterschiedliche Mengen Stickoxid. Eine Kopplung von Brenner und Brennkammer besteht an den Schnittstellen beider Systeme. Für den Stoffaustausch sind dies die Rezirkulationsöffnungen und das Flammrohrende, an dem die Flamme in die Brennkammer eintritt (siehe Abbildung 4.1). Der Energieaustausch erfolgt zusätzlich noch über die heiße Wandung des Flammrohrs, das mit der Brennkammerwand via Strahlung, sowie mit dem Fluid in der Brennkammer über konvektive Wärmeübertragung in Wechselwirkung steht.



*Abbildung 4.1:* Vereinfachte Geometrie des Rezirkulationsgasbrenners in einer Zweizug-Brennkammer

Prinzipiell existiert zusätzlich noch eine Kopplung zwischen Kaminaustritt und Ventilatoreintritt, die jedoch aufgrund der ausgleichenden Wirkung der Umgebungsbedingungen sehr schwach und daher vernachlässigbar ist.

Aufgrund des streng monotonen Verhaltens, das die Stickoxid-Emission als Funktion der Rezirkulationsrate aufweist (siehe Abbildung 2.4), ist eine eindeutige, qualitative Zuordnung von Stickoxid-Emission und Rezirkulationsrate möglich. Jede Erhöhung der Rezirkulationsrate führt zu einer Verringerung des Stickoxid-Ausstoßes.

Eine direkte Berechnung des emittierten Stickoxids, auch nur des thermischen, ist für Oldiffusionsflammen in der Literatur noch nicht zu finden. Auch für Gasdiffusionsflammen sind die Ergebnisse nicht für alle Luftzahlen qualitativ richtig (siehe Ajolfi (1991)). Die Problematik besteht dabei in erster Linie in den hohen Genauigkeitsanforderungen, welche an das Temperaturfeld zu stellen sind, um das thermische Stickoxid mit sinnvoller Genauigkeit berechnen zu können. In Kapitel 1.3 wurde dieser Punkt bereits detailliert diskutiert.

In dieser Arbeit wird daher der Schwerpunkt auf die verschiedenen Möglichkeiten zur Beeinflussung der Rezirkulationsrate gelegt, mit dem Wissen, daß diese Größe die thermischen Stickoxidemissionen qualitativ eindeutig widerspiegelt. Die Problematik der Stickoxidemissionen

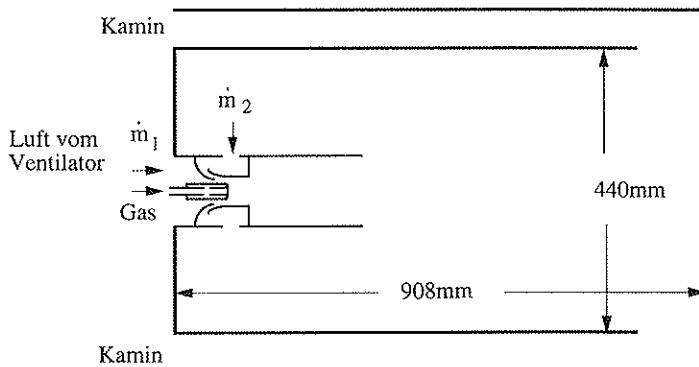
onsberechnung wird daher verschoben auf die richtige Simulation der auftretenden Rezirkulationsrate.

Weiss (1981) erhebt aufgrund der komplexen Strömungsstrukturen Zweifel an der richtigen Berechenbarkeit von Strahlapparaten mit Hilfe von Ein- oder Zweigleichungsturbulenzmodellen. Daher stellt sich zunächst die Frage, ob die Beeinflussung der Rezirkulationsrate durch die Brennkammergeometrie überhaupt mittels numerischer Simulation auf der Basis der in Kapitel 3 vorgestellten Modelle erfaßbar ist.

#### 4.1 Untersuchungen mit dem mixed+ignited=burned Modell

Die Frage der Berechenbarkeit der Rezirkulationsrate wurde anhand einer vereinfachten geometrischen Beschreibung und auf der Basis des mixed + ignited = burned Modells geklärt. Abbildung 4.1 und 4.2 zeigen die untersuchte Geometrie eines Rezirkulationsgasbrenners, in typischen Brennkammergeometrien

Das Rechengebiet wurde kartesisch und zweidimensional gewählt, da sich die Geometriebeschreibung dadurch erheblich vereinfacht. Die Rezirkulationsschlitzte wurden dabei als Porosität betrachtet, deren Porositätsfaktor proportional zum Öffnungsverhältnis der Rezirkulationsschlitzte ist. Die Randbedingungen der Simulation sind in Tabelle 4.1 aufgelistet.



*Abbildung 4.2: Vereinfachte Geometrie des Rezirkulationsgasbrenners in einer Dreizug-Brennkammer*

Luftgeschwindigkeit	35m/s
Lufttemperatur	293 K
Methangeschwindigkeit	33m/s
Methantemperatur	293 K
Luftzahl $\lambda$	1.2
Zündtemperatur CH <sub>4</sub>	883K
Brennkammerlänge	908mm, 600mm
Brennkammerradius	220mm, 150mm
T <sub>Brennkammerwand</sub>	353K

*Tabelle 4.1:* Randbedingungen der Simulationen mit dem mixed + ignited = burned Modell

Eine Berücksichtigung der Wärmestrahlung fand nicht statt. Die konvektive Wärmeübertragung an die Brennkammerwand wurde mittels logarithmischem Wandgesetz und Reynolds Analogie berechnet.

Die Variation der Brennkammergeometrie ergab die in Tabelle 4.2 dargestellten Resultate.

RezRa [%]	Zwei-Zug	Drei-Zug
<b>normal</b> BKR 220mm BKL 908mm	14.6	11.7
<b>kurz</b> BKR 220mm BKL 600mm	14.6	-
<b>dünn</b> BKR 150mm BKL 908mm	12.5	10.6

*Tabelle 4.2:* Rezirkulationsrate als Funktion der Brennkammergeometrie, Ergebnisse der Simulation mit dem mixed + ignited = burned Verbrennungsmodell

Die Simulationen zeigen eine signifikante Abhängigkeit der Rezirkulationsrate von der Brennkammergeometrie. Demnach sinkt für beide Brennkammertypen die Rezirkulationsrate mit kleiner werdendem Brennkammerradius ab, was eine erhöhte Stickoxid-Emission zur Folge hätte. Eine Abhängigkeit von der Brennkammerlänge ist nicht zu erkennen. Ein Vergleich der Absolutwerte mit Messungen ist für diese Konfiguration nicht möglich, da keine Meßwerte vorliegen. Auf die Qualität von Absolutwerten bei der Simulation einer Brenner/Brennkammer Konfiguration mit komplexer Geometrie wird in Kapitel 5 eingegangen.

Eine Analyse der Simulationsergebnisse zeigt, daß sowohl die Geschwindigkeiten als auch die Temperaturen über den Rezirkulationsschlitzten bei der Durchmesserreduktion angestiegen sind. Welche der beiden Änderungen das Absinken der Rezirkulationsrate verursachte, kann diesen Simulationen nicht entnommen werden, da die Zustandsgrößen gekoppelt sind.

Da die Wärmestrahlung nicht berücksichtigt wurde, erhebt sich die Frage, ob die qualitative Aussage von Tabelle 4.2 auch für die Realität, d.h. bei gleichzeitig vorhandenem Strahlungsaustausch, zutrifft.

Zunächst muß zwischen der Gasstrahlung und der Festkörperstrahlung des Flammrohrs unterschieden werden. Für die Gasstrahlung gilt, daß die übertragene Energie sich proportional zur Verweilzeit des Gases in der Brennkammer verhält. Eine Durchmesserreduktion führt auf höhere Geschwindigkeiten in der Brennkammer und damit zu kürzeren Verweilzeiten. Eine Berücksichtigung der Gasstrahlung hätte also zur Konsequenz, daß aufgrund der kleineren Verweilzeit weniger Wärme vom Gas an die Brennkammerwand übertragen würde und folglich die Gastemperatur noch höher wäre.

Die Festkörperstrahlung des Flammrohrs im Flammrohrinnern ist prinzipiell nicht von einer Veränderung im Brennkammerdurchmesser betroffen. Der Festkörper-Strahlungsaustausch zwischen Flammrohraussenseite und Brennkammerwand hängt von der Brennkammergeometrie ab.

Aufgrund der realen optischen Eigenschaften der Brennkammerwand, bezüglich des Strahlungsaustausches, wird neben dem von der Brennkammerwand absorbierten Anteil ein gewisser Teil auch reflektiert. Dieser von der Brennkammer reflektierte Anteil wird nun im Grenzfall des sehr kleinen Brennkammerdurchmessers ( $\approx$  Flammrohrdurchmesser) wieder auf dem Flammrohr auftreffen und so den Nettowärmestrom vom Flammrohr auf die Brennkammerwand verkleinern.

Im Fall des unendlich großen Brennkammerdurchmessers ist die Wahrscheinlichkeit des Wiederauftreffens der reflektierten Strahlung auf das Flammrohr nahe Null (*quasi Schwarzkörper*), so daß der übertragene Nettowärmestrom maximal ist.

Eine Verkleinerung des Brennkammerdurchmessers hat also bei konstanter Oberflächentemperatur der Brennkammerwand eine Verringerung der Strahlungswärmeübertragung vom Flammrohr zur Brennkammerwand zur Folge. Dies führt zu einer erhöhten Flammrohrttemperatur und dadurch auch zu einer erhöhten Gastemperatur verglichen mit dem *normalen* Fall.

Obwohl die Strahlungswärmeübertragung nicht berücksichtigt wurde, entspricht die qualitative Aussage von Tabelle 4.2 den realen Gegebenheiten. Denn wenn die Erhöhung der Geschwindigkeit der für das Absinken der Rezirkulationsrate ursächliche Effekt ist, dann würde die Gastemperatur ohnehin keine Rolle spielen. Wenn aber die Gastemperatur den Abfall verursacht, dann würde bei einer Berücksichtigung der Strahlungswärmeübertragung der Effekt, gemäß obigen Ausführungen, verstärkt und wäre damit qualitativ gleich.

Wie Messungen der Stickoxidemissionen, durchgeführt an Brennkammern unterschiedlicher Durchmesser, zeigen, ergibt sich für die Zwei-Zug Konfiguration eine Zunahme der Konzentration von 104 [mg NO<sub>x</sub>/m<sup>3</sup>] im *normalen* Fall, auf 115 [mg NO<sub>x</sub>/m<sup>3</sup>] im *dünnen* Fall (Dreher et al. (1993)).

Die Erhöhung der Emission ist erklärbar mit der Reduktion der rezirkulierten Rauchgasmenge. Geht man von einem um ca. 60% reduzierten Stickoxidaustof, bei einer Rezirkulationsrate um 15% aus, so läßt sich die emittierte Konzentration für veränderte Brennkammerdurchmesser abschätzen. Unter der Annahme einer Linearisierung des Reduktionseffekts, für Rezirkulations-

raten um 15% (Steigung  $\approx -2$ ; in Abbildung 2.4 rechts), errechnet sich die Stickoxidemission, mit der für den dünnen Fall ermittelten Rezirkulationsrate von 12.5 %, zu 115 [mg NO<sub>x</sub>/m<sup>3</sup>].

Aufgrund der Annahmen zur Linearisierung, sowie durch Meßtoleranzen ist die genaue Übereinstimmung im Zahlenwert auf Zufälligkeiten zurückzuführen. Jedoch zeigt der Vergleich, daß offenbar auch in der Realität bei geometrischen Veränderungen der Brennkammer keine weiteren Effekte auftreten. Die Änderung der Stickoxidemission ist demnach maßgeblich bestimmt, und daher auch beschreibbar, durch die Änderung der Rezirkulationsrate.

## 4.2 Variablenvariation - Trennung der Effekte

Da eine geänderte Rezirkulationsrate ein verändertes Temperatur- und Geschwindigkeitsfeld zur Folge hat, welche wiederum die Rezirkulationsrate beeinflussen, ist es auf der Basis dieser Simulationen nicht möglich, den eigentlichen Grund der Veränderung zu bestimmen. Simulationen mit Verbrennungsmodellen liefern gekoppelte Lösungen für einzelne Feldgrößen. Damit läßt sich beschreiben, wie sich die Zustände z.B. der Reaktionsfortschritt, die Temperatur etc. im Feld ändern.

Eine Entkoppelung der fluid- und thermodynamischen Zusammenhänge wird durch eine spezielle Simulationstechnik auf der Basis der numerischen Strömungsberechnungen möglich. Durch direkte Beeinflussung von Größen lassen sich gekoppelte Effekte gezielt trennen. Im Mittelpunkt steht dabei die Frage wie ein System auf, durch welche Ursachen auch immer, geänderte Zustände reagiert.

### 4.2.1 Methode

Am Beispiel des Einflusses der Temperatur des Rezirkulierten sollen die Vorteile der direkten Variablenvariation kurz erläutert werden.

Bei konventionellen numerischen Simulationen werden zur Parameterstudie typischerweise Randbedingungen variiert. Die Feldgrößen stellen sich dann entsprechend ein. Für die Temperatur würde das z.B. bedeuten, daß die Brennkammerwandtemperatur variiert wird und sich die Temperatur des Rezirkulierten entsprechend der berücksichtigten Wärmeübertragung ergibt. Unter Umständen ist die erwartete Änderung in der Temperatur recht klein oder das Resultat eine verschmierte Verteilung, so daß keine eindeutigen Aussagen möglich sind. Sofern nur eine Konfiguration untersucht werden soll mag dies genügen, da die Rezirkulationsrate dennoch bestimmbar ist. Zur Frage der Abhängigkeit der Rezirkulationsrate von der Temperatur läßt sich damit aber keine eindeutige Aussage treffen.

Zur Beantwortung der allgemeinen Frage, welchen Einfluß der Zustand einer Größe (z.B. der Temperatur des Rezirkulierten) auf eine andere Größe (z.B. die Rezirkulationsrate) hat, ist es sehr viel sinnvoller, die unabhängige Größe direkt, per Wertzuweisung, zu verändern und dann die Reaktion der Abhängigen zu beobachten. Dies eröffnet völlig neue Simulationsmöglichkeiten, da damit fiktive Experimente durchgeführt werden können, welche im Labor nicht möglich sind. Die Untersuchung von Systemen wird damit möglich, deren technische Realisierung noch gar nicht bekannt ist. Für obiges Temperaturbeispiel bedeutet dies, daß die Art der Wärmetübertragung zunächst unberücksichtigt bleibt. Die Reaktion des Systems auf eine veränderte Temperatur, wie auch immer technisch realisiert, läßt sich dennoch untersuchen.

Die so erhaltenen Ergebnisse haben einen allgemeingültigen Charakter, sofern nicht Absolutwerte, sondern deren Variation betrachtet wird.

#### 4.2.2 Parametervariationen

Gemäß der obigen Überlegung, daß eine Kopplung von Brenner und Brennkammer nur über die zwei Schnittstellen *Rezirkulationschlitz* und *Flammrohrende* möglich ist, ergeben sich die in Tabelle 4.3 dargestellten potentiellen Einflußgrößen.

Strömungsgeschwindigkeit / Druck über den Rezirkulationschlitz
Temperatur über den Rezirkulationsschlitz
Strömungsgeschwindigkeit / Druck am Flammrohrende
Temperatur am Flammrohrende

*Tabelle 4.3: Mögliche Einflußgrößen auf die Rezirkulationsrate*

Diese Größen stellen die Basis für die Parametervariationen dar. Da aufgrund von Simulationen mit dem mixed = burned Modell bekannt war, daß eine falsche Vorhersage der Lage der Flammenfront zu einem Ausblasen aus den Rezirkulationsschlitz führen kann (siehe Dreher und Suter (1991)) wurde dieser Parameter ebenfalls in die Untersuchungen aufgenommen. In Abbildung 4.3 sind die im Folgenden verwendeten Abkürzungen eingezzeichnet. Die vollständige Liste der Variationsrechnungen ist in Tabelle 4.4 dargestellt.

Brennkammerradius (BKR)
Brennkammerlänge (BKL)
Temperatur des rezirkulierten Abgases ( $T_{Rez}$ )
Temperatur am Flammrohrende ( $T_F$ )
Lage der Flammenfront

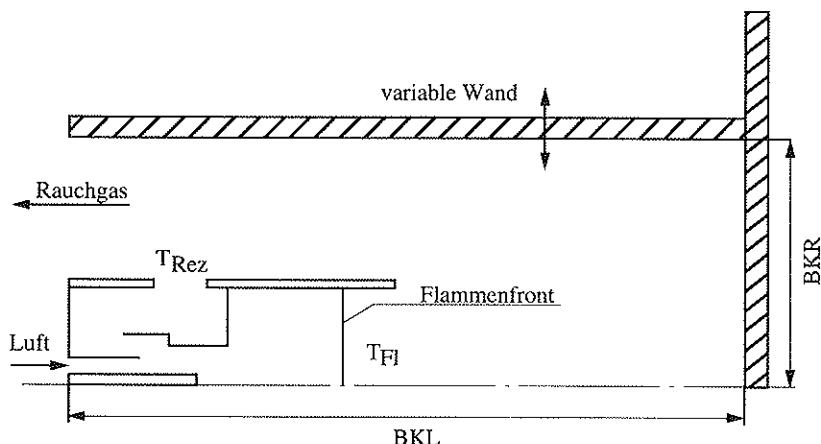
*Tabelle 4.4: Durchgeführte numerische Parameterstudien*

##### 4.2.2.1 Brennkammerradius

Ausgehend von der in Abbildung 4.3 dargestellten Konfiguration (BKR 220mm, BKL 908mm) wurde der Brennkammerdurchmesser zwischen 120mm und 500mm variiert (Flammrohrdurchmesser = 110mm). Die Berechnung erfolgte für 14 diskrete Einzeldurchmesser. Für jeden dieser Durchmesser wurde dann die Heißgasttemperatur von 293 K bis 1500 K in 8 diskreten Einzeltemperaturen variiert (= $T_F$ ). Es ergab sich eine Parametervariationsmatrix mit 112 Einzelementen. Zur Variation der Temperatur wurde der Wert der Enthalpie stromab von der Flammenfront auf den entsprechenden Wert gesetzt. Über eine Enthalpietransportgleichung, ohne Berücksichtigung von Wärmetübertragung, breite sich diese gesetzte Enthalpie aus. Die Zustands- und Stoffwerte, insbesondere Dichte und spezifische Wärmekapazität, wurden für das bei einer Methanverbrennung ( $\lambda=1.2$ ) entstehende Rauchgas gewählt und ebenfalls gesetzt. Das angesaugte Rauchgas mischte sich mit dem Luftreibstrahl, entsprechend den fluidodynamischen Transportgleichungen. Im Strahlapparat wurden also die in Realität ablaufenden Misch-

vorgänge berücksichtigt, inklusive der sich ergebenden Stoff- und Zustandsgrößen (Temperatur- und Konzentrationsabhängig).

Für jedes Element der Parametervariationsmatrix wurde eine numerische Strömungssimulation durchgeführt, welche eine Rezirkulationsrate für den entsprechenden Fall ergab.



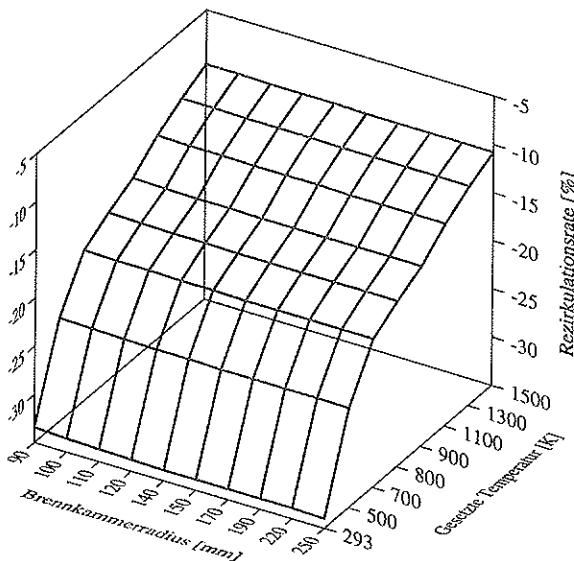
*Abbildung 4.3: Prinzipschema zur Vorgehensweise bei der direkten Variablenvariation*

In Abbildung 4.4 ist das Ergebnis dieser Simulation als dreidimensionale Grafik dargestellt. Es ist eine deutliche, nichtlineare Abhängigkeit der Rezirkulationsrate von der Temperatur zu erkennen und zwar im gesamten Temperaturbereich. Die Rezirkulationsrate nimmt bei zunehmender Temperatur des Rezirkulierten stark ab.

Dagegen ist kein Einfluß des Brennkammerdurchmessers und der dadurch veränderten isothermen Strömungsmechanik im technisch interessanten Variationsbereich ersichtlich.

Erst bei einer Verkleinerung des Brennkammerradius auf unterhalb ca. 100mm ist im Bereich kleiner Temperaturen ein schwach einsetzender Effekt zu verzeichnen. Im Bereich hoher Temperaturen ist dieser Effekt bereits nicht mehr zu erkennen, was mit einem stärkeren Einfluß der Temperatur des Rezirkulats, verglichen mit dem Effekt der Geschwindigkeitszunahme über den Rezirkulationsschlitzten erklärt werden kann. Dieses Verhalten ist auch im übrigen Feld deutlich zu beobachten.

Innerhalb des technischen Einsatzbereiches, bei Brennkammerradien um 220mm sowie Temperaturen über den Rezirkulationsschlitzten von ca. 600K bis 1400K, ist der Temperatureinfluß sehr bedeutend. Hingegen ist der Einfluß der Abnahme des Differenzdruckes zwischen Ansaugtem und Treibstrahl, aufgrund der bei einer Reduktion des Brennkammerradius auftretenden Erhöhung der Strömungsgeschwindigkeit über den Rezirkulationsschlitzten, vernachlässigbar.



**Abbildung 4.4:** Rezirkulationsrate als Funktion der gesetzten Temperatur ( $T_{fl}$ ) und des Brennkammerradius (aus Gründen der Anschaulichkeit ist die Rezirkulationsrate negativ aufgetragen)

Wenn man die Rezirkulationsrate als Funktion der Temperatur für einen bestimmten Brennkammerradius in einem doppelt-logarithmischen Diagramm darstellt (siehe Abbildung 4.5), so erhält man für den betrachteten Bereich in sehr guter Näherung eine Gerade mit der Steigung  $n = -0.76$ .

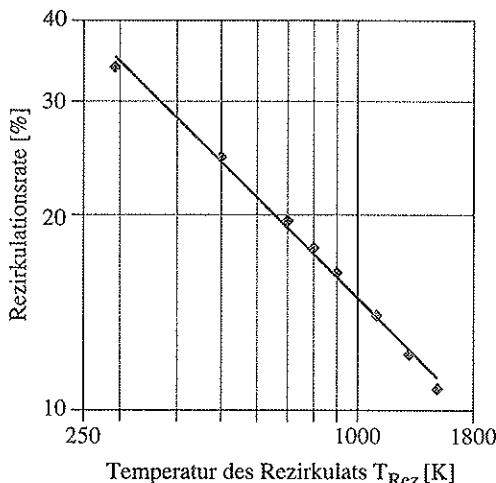
Damit lässt sich der Einfluß der Temperatur des Rezirkulierten auf die Rezirkulationsrate mit folgendem Potenzgesetz beschreiben:

$$\dot{m}_{RezRa} = \dot{m}_{RezRa_{ref}} * \left( \frac{T}{T_{ref}} \right)^n \quad (4.1)$$

Die Frage der Allgemeingültigkeit des für den Exponenten  $n$  gefundenen Werts wird durch eine analytische Ableitung in Kapitel 4.3, sowie den Vergleich mit LDA Messungen in Kapitel 5.4.2 beantwortet.

Dadurch ergibt sich die Möglichkeit, für einen bestimmten Brenner, aus einer einmal gemessenen Referenz Rezirkulationsrate, bei einer gemessenen Referenz Temperatur, für jede weitere gemessene Temperatur (unter anderen Bedingungen, z.B. in einer anderen Brennkammer) die Rezirkulationsrate rechnerisch zu bestimmen.

Damit werden direkt qualitative Aussagen bezüglich der Stickoxid-Emission möglich. Unter Zuhilfenahme von Abbildung 2.4, sowie einer  $\text{NO}_x$  Messung am Referenzpunkt, lassen sich sogar quantitative Aussagen ableiten.



*Abbildung 4.5: Rezirkulationsrate als Funktion der Temperatur des angesaugten Rauchgases (für BKR=220mm)*

#### 4.2.2.2 Brennkammerlänge

Ausgehend von der in Abbildung 4.2 dargestellten Konfiguration wurde die Brennkammerlänge in 7 diskreten Schritten von 908mm bis auf 382mm verkleinert (die Eintauchtiefe des Flammrohrs in die Brennkammer beträgt 320mm). Ein Einfluß der Brennkammerlänge auf die Rezirkulationsrate wäre vorstellbar, da der aufgrund der Staupunktströmung vorhandene Druckanstieg an der Brennkammerrückwand eventuell die Rezirkulationsströmung beeinflussen könnte.

Der Brennkammerradius war für alle Variationen auf 220mm fixiert. Für jede dieser Brennkammerlängen wurde die Heißgastemperatur in 8 Schritten zwischen 293K und 1500K variiert. Damit ergab sich eine Parametervariationsmatrix mit 56 Elementen.

Für die Abhängigkeit von der Temperatur ergab sich die in Kapitel 4.2.2.1 bereits ausführlich diskutierte Gesetzmäßigkeit.

In Übereinstimmung mit Ergebnissen der Verbrennungssimulation konnte auch hier kein Einfluß der Brennkammerlänge auf die Rezirkulationsrate festgestellt werden.

#### 4.2.2.3 Temperatur des Rezirkulierten

In Kapitel 4.2.2.1 und 4.2.2.2 wurde der Einfluß der Temperatur des rezirkulierten Abgases in Zusammenhang mit der Geometrievariation bereits erwähnt. Die Diskussion in diesem Kapitel soll sich daher auf die Art des Einflusses beschränken.

Eine erhöhte Temperatur des Abgases führt zu einer niedrigeren Dichte. Würde die Ejektorwirkung sich wie ein *konstant Volumenförderer* verhalten, so müßte der angesaugte Massenstrom

sich direkt proportional zur Dichte verhalten. Diese ist gemäß dem idealen Gasgesetz eine Funktion von  $T^{-1}$ .

Wenn sich die Ejektorwirkung wie ein *konstant Masseförderer* verhalten würde, so wäre die Rezirkulationsrate eine Funktion von  $T^0$ , also überhaupt nicht davon abhängig.

Die Simulationsergebnisse zeigen, daß die Realität zwischen diesen beiden Extrema liegt. Da die Temperatur nur über die Dichteabhängigkeit auf die Fluidodynamik einwirkt, ergibt sich ein nichtlinearer Einfluß der Dichte auf die Rezirkulationsrate.

#### 4.2.2.4 Temperatur im Flammrohr

Für die bisherigen Untersuchungen wurde gemäß Abbildung 4.3 eine Temperatur (via Enthalpie) im Flammrohr *gesetzt*. Diese breitete sich entsprechend den zugrundeliegenden Transportgleichungen aus und führte damit zu einer gewünschten Temperatur über den Rezirkulationsschlitzen. Die Temperatur des Rezirkulierten ( $T_{Rez}$ ) entsprach demnach der im Flammrohr gesetzten Temperatur ( $T_F$ ).

Ausgehend von der so ermittelten Rezirkulationsrate wurde ein formaler Zusammenhang abgeleitet (Potenzgesetz). Prinzipiell kann aber noch immer sowohl die Temperatur über den Rezirkulationsschlitzen (durch den Einfluß der Dichte), als auch die Temperatur im Flammrohr (wegen des Impulsaustauschs durch die starke Expansion) für den Einfluß verantwortlich sein.

Dies ist eine auch für die Brennerentwicklung sehr wichtige Frage, denn sowohl die Temperatur im Flammrohr als auch die Temperatur über den Rezirkulationsschlitzen ist von der Konstruktion abhängig (z.B. Wärmeübergang im Flammrohr bzw. in der Brennkammer).

Mit Hilfe einer weiteren Parameterstudie wurde der Einfluß der Temperatur des rezirkulierten Abgases ( $T_{Rez}$ ) von der Temperatur im Flammrohr ( $T_F$ ) separiert. Dazu wurde die Enthalpie an einer zweiten Stelle, zwischen Flammrohr und Brennkammerwand, auf den gewünschten Wert *gesetzt*. Abbildung 4.6 verdeutlicht die Vorgehensweise.

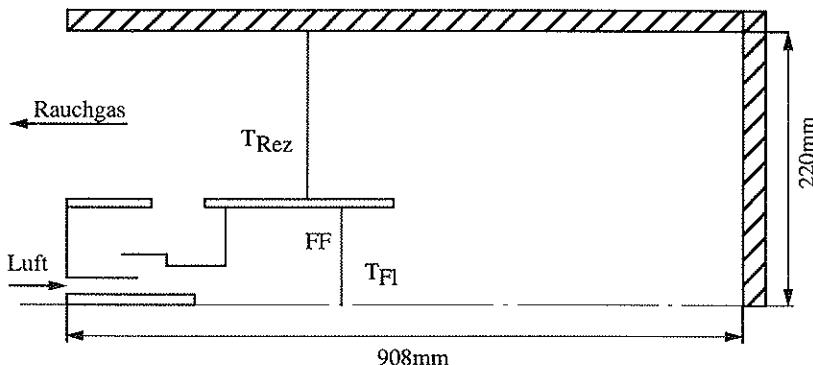
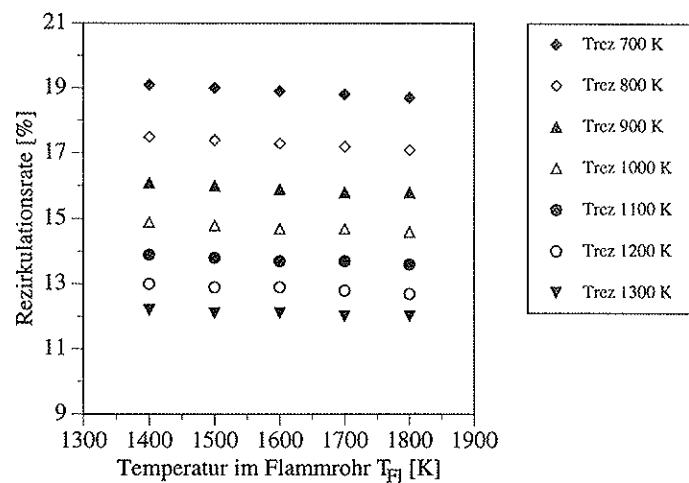


Abbildung 4.6: Prinzipschema zur Vorgehensweise

Dabei wurde die Temperatur im Flammrohr ( $T_{Fl}$ ) in 5 Schritten zwischen 1400K und 1800K, sowie die Temperatur des Rezirkulierten ( $T_{Rez}$ ) in 7 Schritten zwischen 700K und 1300K variiert, was eine Variationsmatrix von 35 Simulationen ergab.

Das Ergebnis ist in Abbildung 4.7 dargestellt. Die Rezirkulationsrate ist über der Temperatur im Flammrohr ( $T_{Fl}$ ) aufgetragen, wobei der Kurvenscharparameter die Variation der Temperatur des Rezirkulierten ( $T_{Rez}$ ) zeigt.



*Abbildung 4.7: Rezirkulationsrate als Funktion der Temperatur im Flammrohr ( $T_{Fl}$ ) und der Temperatur des Rezirkulats ( $T_{Rez}$ )*

Man erkennt eine sehr geringe Abhängigkeit von der Temperatur im Flammrohr ( $T_{Fl}$ ). Zu hohen Temperaturen hin nimmt die Rezirkulationsrate leicht ab (siehe auch Abbildung 4.13). Der Einfluß der Temperatur des Rezirkulierten ( $T_{Rez}$ ) überwiegt deutlich. Aus dieser Parameterstudie ergibt sich eine Bestätigung der in den vorigen Kapiteln getroffenen Aussagen bezüglich des Zusammenhangs von  $T_{Rez}$  und der Rezirkulationsrate. Der Ort des Wärmeentzugs, ob im Flammrohr oder in der Brennkammer, hat keinen nennenswerten Einfluß auf die Rezirkulationsrate. Wichtig ist nur die endgültig erreichte Temperatur über den Rezirkulationsschlitzten. Eine Einschränkung dieser Aussage ergibt sich, sofern die Flammenfront nicht hinreichend weit von der Ansaugstelle entfernt ist.

#### 4.2.2.5 Lage der Flammenfront im Flammrohr

Aus früheren Simulationen war bereits bekannt, daß ein unzureichendes Verbrennungsmodell, welches nicht in der Lage ist, die Position der Flammenfront hinreichend genau zu beschreiben, zu der Vorhersage einer Umkehrung der Rezirkulationsrate und damit zum Ausblasen führen kann (Dreher und Suter (1991)).

Das Ziel dieser Parametervariation ist es, einen qualitativen Zusammenhang zwischen der Lage der Flammenfront und der Rezirkulationsrate zu ermitteln.

Die Position der Flammenfront hängt in der Realität von der turbulenten Flammenausbreitungsgeschwindigkeit ab. Die laminare Flammengeschwindigkeit lässt sich für beliebige Gaszusammensetzungen relativ einfach messen (Hoffmann (1986)), es existieren auch thermische Theorien zur ihrer analytischen Herleitung (z.B. von Mallard, Le Chatelier und Michelson: dargestellt in Kuo (1986)). In Analogie zum Begriff der *laminaren Flammengeschwindigkeit* existiert in der Literatur der Begriff der *turbulenten Flammengeschwindigkeit*, der jedoch bei näherer Betrachtung Unschärfen in der Definition aufweist.

Hoffmann (1986) gibt einen Überblick, über Modelle zur Beschreibung der Fortschrittsgeschwindigkeit von turbulenten Flammenfronten. Im wesentlichen gehen auch die heutigen Vorstellungen über die Ausbreitungsmechanismen zurück auf einen Ansatz von Damköhler, der die turbulente Flamme als eine gefaltete laminare Flamme ansieht. Daher wird die turbulente Flammengeschwindigkeit angesetzt als laminare Flammengeschwindigkeit multipliziert mit einem Term, welcher der Reaktionsflächenerzeugung durch Turbulenz Rechnung trägt.

$$S_T = S_L * \sqrt{\frac{\varepsilon}{V}} \quad (4.2)$$

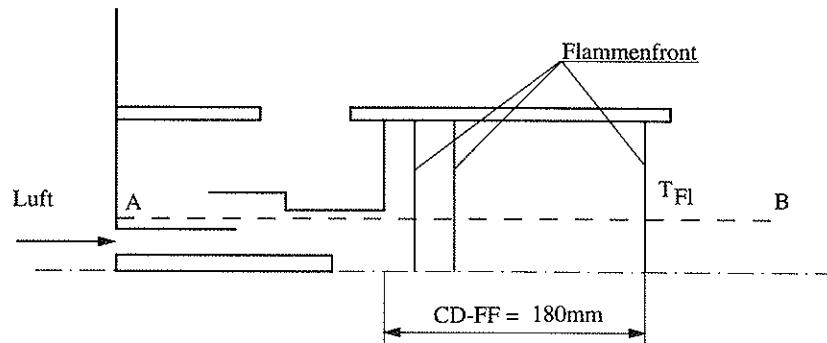
Es sei hier ausdrücklich erwähnt, daß es sich dabei um eine Modellvorstellung handelt. Eine Flammenfront besitzt nicht *eine* ihr zugeordnete turbulente Flammengeschwindigkeit, sondern je nach Position in der Flammenfront verschiedene. Der Grund dafür liegt nicht nur in der Abhängigkeit von der laminaren Flammengeschwindigkeit, welche sich über Stoffgrößen beschreiben lässt (z.B. Konzentrationen, Druck, Frischgasttemperatur, Flammtemperatur, Wärmeleitfähigkeit, Wärmekapazität, etc.). Es ist vielmehr die Abhängigkeit von turbulenten Transporteigenschaften, welche keine Stoff- sondern Strömungsgrößen darstellen. Der Zustand der Strömung ist aber z.B. im Zentrum und am Strahlrand der Flamme ganz unterschiedlich.

Da die Transportgleichungen der Schwankungskorrelationen für komplexe Strömungen heute noch nicht exakt gelöst werden können, ist man auf die Beschreibung durch geeignete Modelle angewiesen.

In Kapitel 3 wurde bereits auf die Aspekte der Modellierung näher eingegangen. Hier steht die Frage des Einflusses der Position der Flammenfront auf die Rezirkulationsrate im Mittelpunkt. Zu diesem Zweck wurden Simulationen durchgeführt, bei denen die Position der Flammenfront, innerhalb des hier untersuchten Rezirkulationsbrenners, gezielt variiert wurde.

In Abbildung 4.8 ist ein variabel angenommener Abstand zwischen Carnot Diffusor und Flammenfront (CD-FF), exemplarisch für den Abstand 180mm, eingezeichnet. Dieses Maß beschreibt die Position der *gesetzten* Flammenfront. Stromab von dieser Flammenfront wurde die Enthalpie (in völliger Analogie zu dem in Kapitel 4.2.2.1 beschriebenen Vorgehen) auf den gewünschten Wert *gesetzt*. Da reale Flammenfronten gekrümmt und ausgedehnt sind (siehe Kapitel 3.2.1), handelt es sich bei der Simulation um eine idealisierte Vorstellung einer Flammenfront.

Der Abstand CD-FF wurde innerhalb des Flammrohrs von 5mm bis auf 180mm variiert. Die Flammenfronttemperatur wurde hypothetisch von 700K bis 1800K variiert, in dem Wissen, daß Flammen mit Temperaturen um 700K im Bereich der Haushaltsfeuerungen nicht auftreten. Im Mittelpunkt stand die prinzipielle Beeinflußbarkeit der Rezirkulationsrate, die Untersuchungen haben grundlegenden Charakter.

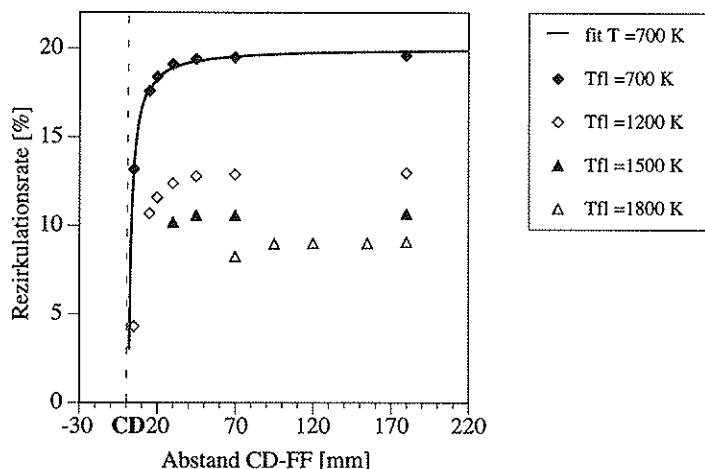


*Abbildung 4.8: Prinzipschema zur Vorgehensweise*

Die Simulationen ergaben drei wesentliche Erkenntnisse:

1. Die Rezirkulationsrate ist abhängig von der Lage der Flammenfront
2. Die Abhängigkeit wächst mit kleinerem Abstand CD-FF
3. Die Rezirkulationsrate nimmt mit abnehmendem Abstand CD-FF ab

Die Starke Nichtlinearität des Effekts wird durch Abbildung 4.9 verdeutlicht. Bei hinreichend weiter Entfernung zwischen der Ansaugstelle und der Flammenfront ist praktisch kein Einfluß auf die Rezirkulationsrate zu beobachten. Innerhalb des sensiblen Bereichs hingegen führen bereits kleinste Abstandsänderungen auf enorm unterschiedliche Rezirkulationsraten.



*Abbildung 4.9: Rezirkulationsrate als Funktion der Lage der Flammenfront*

Dieses Verhalten lässt sich Anhand des Verlaufs des statischen Drucks erklären. In Abbildung 4.10 ist der statische Druck (relativ zum statischen Referenzdruck 0 Pa) für 3 verschiedene Positionen der FF entlang der Geraden AB dargestellt.

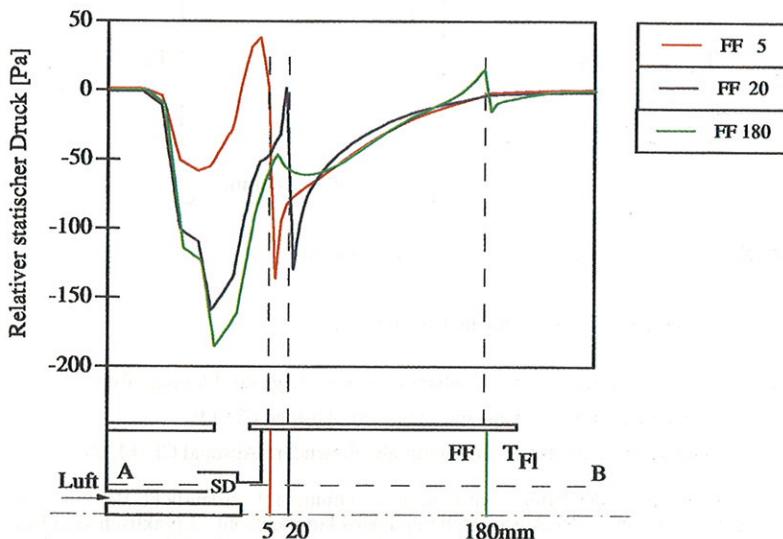


Abbildung 4.10: Verlauf des relativen statischen Drucks für 3 verschiedene Positionen der Flammenfront ( $T_{Fl} = 700K$ ); Referenzdruck 0 Pa

Die Druckverläufe lassen 3 wesentliche Effekte erkennen:

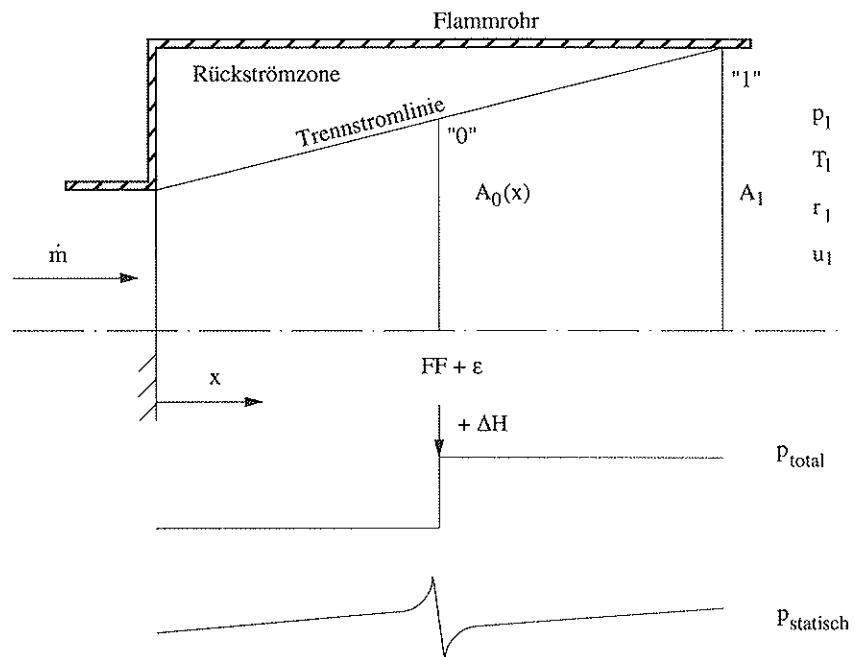
1. Die Position der Flammenfront ist gekennzeichnet durch eine positive/negative Druckspitze
2. Die Druckspitze wird größer mit kleiner werdendem Abstand CD-FF
3. Das zur Ansaugung zur Verfügung stehende Unterdruckpotential an der Position SD (Saugdüse) in Abbildung 4.9 wird bei kleinerem Abstand CD-FF kleiner

Damit lässt sich die Abhängigkeit der Rezirkulationsrate von der Lage der Flammenfront erklären. Wenn sich die Flammenfront der Ansaugstelle annähert, beeinflussen sich die beiden Druckniveaus (Flammenfront einerseits, Ansaugdruckniveau andererseits) gegenseitig und heben sich dadurch teilweise auf. Dies führt zu einer Verminderung des Unterdrucks im Ansaugbereich und damit zu einer kleineren Ansaugrate bei kleinerem Abstand CD-FF.

Der Abfall der Rezirkulationsrate bei kleiner werdendem Abstand CD-FF ist auf den Abfall im Saugpotential zurückzuführen. Die Nichtlinearität des Effekts ist ebenfalls an den größer werdenden Druckpeaks deutlich zu erkennen.

Dieser zunächst sehr überraschende Befund lässt sich mit Hilfe einer analytischen Betrachtung qualitativ bestätigen. Eine vereinfachende Betrachtung der Strömungsvorgänge im Flammrohr

führt auf einen sich aufweitenden Strahl. Die Trennstromlinie des sich stromab vom Carnot Diffusor ausbildenden Rückströmgebiets kann als feste Strahlbegrenzung aufgefaßt werden (Abbildung 4.11). Die Querschnittsfläche nimmt also in Strömungsrichtung stetig zu. Die Zustände am Ende des Flammrohrs seien bekannt. Dann führt die Formulierung der Bernoulli-Gleichung (vom Ende des Flammrohrs zurück bis kurz nach der Flammenfront = FF+ε) auf eine quadratische Abhängigkeit des statischen Drucks als Funktion des Strömungsquerschnitts dieser Stelle (Gleichung 4.3).



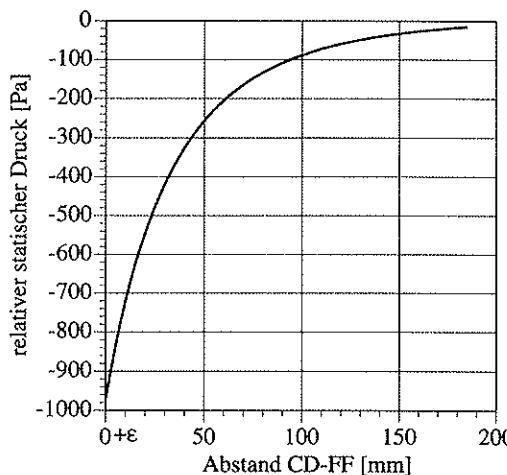
*Abbildung 4.11:* Schematische Darstellung zur Ableitung von Gleichung (4.3)

Die Enthalpiezufuhr äußert sich in einer Zunahme des Totaldrucks.

$$p_t = p_0 + \frac{\dot{m}^2 * R * T_0}{A_0^2 * p_0} \quad (4.3)$$

In Abbildung 4.12 ist der Verlauf der analytischen Lösung von Gleichung (4.3) als Funktion der Position der Flammenfront für eine angenommene Geometrie und geschätzte Zustände "1" dargestellt.

Die Erhöhung des statischen Drucks vor der FF ergibt sich aufgrund der Querschnittserweiterung, mit der eine Geschwindigkeitsabnahme und daher ein Druckrückgewinn (Diffusoreffekt) einhergeht. Aus Kontinuitätsgründen muß die Geschwindigkeit direkt nach der Flammenfront höher sein als davor, da die Temperaturerhöhung einen höheren Volumenstrom bedingt. Die Impulsbilanz über die Flammenfront führt wegen der Geschwindigkeitszunahme auf eine Abnahme des statischen Drucks. Die anschließende Druckerhöhung nach der Flammenfront ist erneut auf die Querschnittserweiterung zurückzuführen.



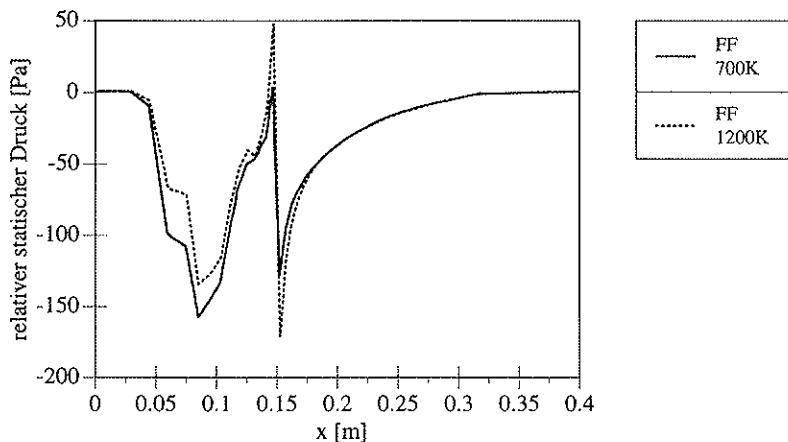
*Abbildung 4.12: Statischer Druck neben der Flammenfront (stromab); als Funktion der Position der Flammenfront im Flammrohr*

Bereits bei der Trennung der Einflüsse der Temperatur im Flammrohr und der Temperatur des Rezirkulats (Abbildung 4.7) wurde eine leichte Abhängigkeit der Rezirkulationsrate von der Temperatur im Flammrohr festgestellt. Dieser Zusammenhang lässt sich anschaulich erklären, anhand der in Abbildung 4.13 dargestellten Druckkurven (Flammenfronten unterschiedlicher Temperaturen bei gleichem Abstand CD-FF). Eine Erhöhung der Temperatur der Flammenfront führt auf eine stärkere Ausprägung der Druckspitzen in der Flammenfront, welche das Ansaugdruckniveau unterschiedlich stark beeinflussen.

Røkke (1993) führte Experimente mit strahlpumpengetriebenen Gasrezirkulationsbrennern durch und beobachtete dabei eine Abhängigkeit der NOx Emissionen von der Position, an der sich die Flammenfront stabilisierte; bei einer Flammenfront weit stromab gibt es ca. 30ppm NO<sub>x</sub> (korrigiert auf 3% O<sub>2</sub>) an. Bei stromauf stabilisierter Flammenfront ca. 40ppm.

Die Beobachtung steht in Übereinstimmung mit den hier vorgestellten numerischen Befunden.

Die Bedeutung dieses Einflusses geht über das theoretische Erklärungspotential hinaus und kann auch in der Praxis der Brennerentwicklung von Interesse sein.



*Abbildung 4.13: Verlauf des statischen Druckes für  $T_{Fl}=1200\text{K}$  und  $T_{Fl}=700\text{K}$  ( $CD\text{-FF}=20\text{mm}$ ), mit  $T_{Rez}=T_{Fl}$*

### 4.3 Analytische Parameterstudien

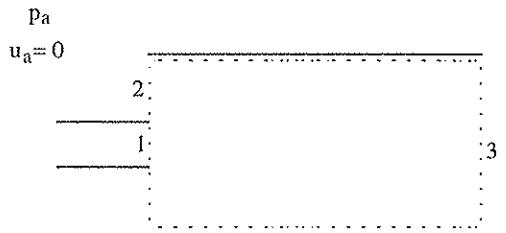
Numerische Methoden kommen zur Anwendung, wenn die geometrischen Verhältnisse derart komplex sind, daß eine analytische Untersuchung nicht mehr möglich ist. Andererseits besteht die Möglichkeit, das zu untersuchende System so stark zu vereinfachen, bis eine analytische Beschreibung möglich wird. Zunächst bleibt dabei offen, ob die dadurch möglichen Aussagen noch von Relevanz sind.

In der Literatur der Strahlapparate (z.B. Flügel (1951), Vogel (1956), Jung (1960), Syed (1971)) sind die Methoden zur Auslegung und Optimierung ausführlich dargestellt. Die überwiegende Zahl der Arbeiten beschäftigt sich mit inkompressiblen Strömungen oder Mischungsvorgängen von gleichen Stoffen unterschiedlicher Temperatur.

Das hier relevante Problem der Abhängigkeit der Rezirkulationsrate von der Temperatur des Rezirkulierten gemäß dem in Kapitel 4.2.2 gefundenen Potenzgesetz konnte hingegen in der Literatur nicht gefunden werden. Eine eigene analytische Ableitung zeigt jedoch diese Möglichkeit auf.

#### 4.3.1 Rezirkulationsrate als Funktion der Temperatur des Rezirkulierten

Ausgehend von der in Abbildung 4.14 dargestellten stark vereinfachten Geometrie des Strahlapparates wird unter Berücksichtigung der in Tabelle 4.5 dargestellten Annahmen, im Folgenden der Berechnungsweg zur analytischen Lösung dargestellt:



*Abbildung 4.14:* Stark vereinfachte Geometrie zur analytischen Lösung

Vollständige Gemischtheit am Ort "3"
homogene Geschwindigkeitsprofile
Freistrahlbedingung am Ort "3"
Gleicher statischer Druck am Ort "1" und "2"

*Tabelle 4.5:* Annahmen zur analytischen Lösung

Aus den acht Basisgleichungen:

Kontinuitätsgleichung 1:  $\dot{m}_1 + \dot{m}_2 - \dot{m}_3 = 0$  (4.4)

Impulsgleichung:  $\dot{m}_1 * u_1 + \dot{m}_2 * u_2 - \dot{m}_3 * u_3 - (p_3 - p_2) * A_3 = 0$  (4.5)

Enthalpiegleichung:  $\dot{m}_1 * h_1 + \dot{m}_2 * h_2 - \dot{m}_3 * h_3 = 0$  (4.6)

Wärmekapazität:  $c_{p_i} = \frac{\partial h_i}{\partial T} \Big|_p$  (4.6b)

Isobare Zustandsänderung:  $\frac{\rho_3}{\rho_1} = \frac{T_1}{T_3}$  (4.7)

Kontinuitätsgleichung 2:  $\dot{m}_i = \rho_i * u_i * A_i$  (4.8)

Bernoulligleichung:  $(p_a - p_2) = (1 + \zeta) * \frac{\rho_2}{2} * u_2^2$  (4.9)

Freistrahlbedingung:  $p_3 = p_a$  (4.10)

folgt mit (4.): 4,11,10 eingesetzt in Gleichung 5 (4.11)

4 eingesetzt in 6 (4.12)

8 für "3" eingesetzt in 7 (4.13)

8 für "2" (4.14)

13,14 eingesetzt in 11 (4.15)

6b für "3" integriert und nach  $T_3$  aufgelöst (4.16)

12 eingesetzt in 16 (4.17)

17 eingesetzt in 15 (4.18)

Gleichung 4.18 enthält die Information des ganzen Gleichungssystems. Wenn Medium "1" und "2" identisch sind und darüber hinaus die spezifische Wärmekapazität als Funktion erster Ordnung dargestellt wird, so lässt sich Gleichung (4.18) analytisch lösen. Da die Funktion der Wärmekapazität nach der Integration (4.17) von zweiter Ordnung ist, führt dies schließlich zu einem Polynom vierter Ordnung für Gleichung (4.18), welches sich in der Form  $\dot{m}_2 = f(T_2)$  darstellen lässt.

Alle darin auftauchenden Größen sind als Bekannte vorzugeben. Der rezirkulierte Massenstrom resultiert als Ergebnis. Die Lösung des Polynoms erfolgte maschinell, mittels eines algebraischen Gleichungslösers (Wolfram (1991)).

Eine detailliertere Darstellung des Rechenwegs und insbesondere der Lösung entzieht sich der anschaulichkeit. Daher ist in Abbildung 4.15 der funktionale Zusammenhang der analytischen Lösung dargestellt.

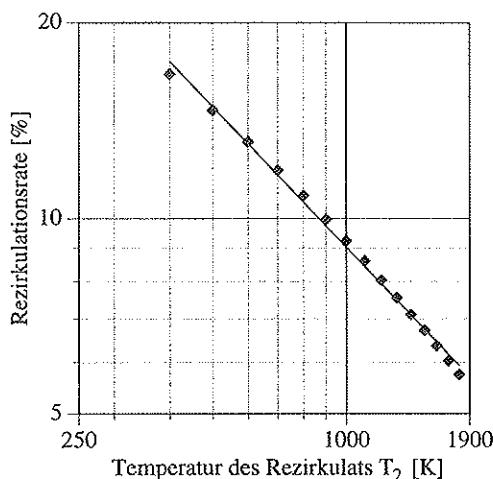
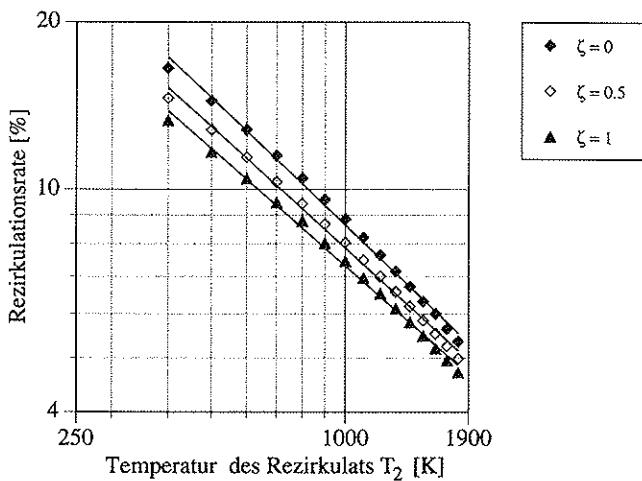


Abbildung 4.15: Analytische Lösung für identische Medien „1“ und „2“;  $n = -0.72$

Die doppelt logarithmische Darstellung verdeutlicht, daß es sich um ein Potenzgesetz handelt. Der Exponent (hier  $n=-0.72$ ) zeigt eine gute Übereinstimmung mit dem durch numerischen Simulation des Rezirkulationsbrenners ermittelten Wert ( $n=-0.76$ ). Die Absolutwerte hingegen sind aufgrund der starken geometrischen Vereinfachungen nicht in Übereinstimmung.

Wenn, zur Annäherung an den realen Fall, für die Wärmekapazitäten der beiden Medien unterschiedliche Polynome erster oder höherer Ordnung angesetzt werden, so verhindert dies die explizite Auflösbarkeit des Gleichungssystems. Nach Bronstein und Semendjajew (1983) liegen für Polynome höher als 4. Grades keine allgemeingültigen Lösungsverfahren vor. Diese algebraisch exakte Gleichung läßt sich zwar analytisch nicht mehr lösen, eine numerische Lösung für diskrete Einzelwerte (siehe Tabelle 4.6) ist aber durchaus möglich und wurde für die Berechnungen im Folgenden angewandt.

Es wurden ausgewählte Fälle betrachtet, welche von spezieller Praxisrelevanz sind. In Abbildung 4.16 ist prinzipiell der gleiche Sachverhalt dargestellt wie in Abbildung 4.15 (bei der aber identische Medien vorausgesetzt wurden). Der Einfluß der Wärmekapazität auf das Verhalten der Rezirkulationsrate ist an der leicht veränderten Steigung deutlich zu erkennen.



*Abbildung 4.16:* Analytische Lösung für zwei unterschiedliche Medien Luft „1“ und Rauchgas „2“

$u_1 = 30 \text{ [m/s]}$
$T_1 = 300 \text{ [K]}$
$\rho_1 = 1.2 \text{ [kg/m}^3]$
$A_1 = 8.15E-4 \text{ [m}^2]$
$A_2 = 3.96E-4 \text{ [m}^2]$
$\zeta = 0$

*Tabelle 4.6: Werte der jeweils nicht variierten Größen; analytische Lösung*

Der Koeffizient  $\zeta$  beschreibt den Druckverlust, der bei der Ansaugung des ruhenden Mediums "2" entsteht. Tabelle 4.7 zeigt einen leichten Einfluß des Koeffizienten auf den Exponenten  $n$ . Dies bedeutet, daß die Güte der Strahlapparatur einen leichten Einfluß auf die Temperaturabhängigkeit der Rezirkulationsrate hat.

$n \ zeta=0$	-0.76
$n \ num$	-0.76
$n \ zeta=0.5$	-0.72
$n \ zeta=1$	-0.70

*Tabelle 4.7: Exponenten für verschiedene Druckverlustbeiwerte*

Die analytische Lösung hat eine über die bloße Verifikationsmöglichkeit des numerischen Befundes hinausreichende Bedeutung. Es läßt sich damit das qualitative Verhalten des hier verwendeten Ejektor Prinzips auf alle Eingangsgrößen studieren. Die Parametervariationen in den folgenden Kapiteln stellen eine Auswahl dar.

### 4.3.2 Rezirkulationsrate als Funktion der Treibstrahltemperatur

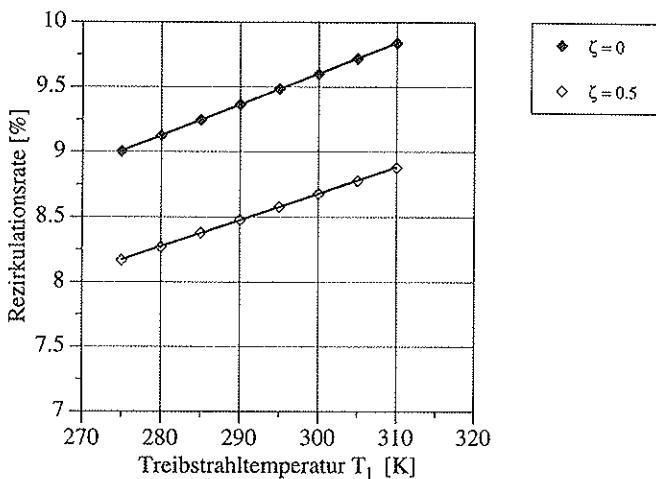
Dieser Fall entspricht der Vorwärmung der Verbrennungsluft, die sich z.B. auch durch eine erhöhte Raumlufttemperatur ergeben kann. Eine Erhöhung der Temperatur des Treibstrahls führt zu einer Verringerung seiner Dichte. Damit ergeben sich Veränderungen im Verhältnis von Impuls und Massenstrom. Je nach Betriebszustand kann einer der beiden Ströme konstant gehalten werden. Man hat zwischen 2 Fällen zu unterscheiden:

#### a.) Variation der Treibstrahltemperatur bei konstanter Luftzahl

Dieser Fall ist für Laboruntersuchungen besonders wichtig, da dort oftmals auf eine konstante Luftzahl geregelt wird, unabhängig von den jeweiligen Umgebungsbedingungen.

Hierbei ist der zugeführte Verbrennungsluftmassenstrom  $m_1$  konstant. Die eventuelle Abhängigkeit des Fördergrades des Ventilators wird also ebenfalls ausgesteuert. Bei einer Erhöhung

der Temperatur  $T_1$  verringert sich die Dichte und aus Kontinuitätsgründen muß die Geschwindigkeit  $u_1$  ansteigen. In Abbildung 4.17 ist die Reaktion der Rezirkulationsrate auf eine Erhöhung der Temperatur  $T_1$  (und letztendlich  $u_1$ ) dargestellt.



*Abbildung 4.17: Rezirkulationsrate als Funktion der Treibstrahltemperatur  $T_1$ ; konstante Luftzahl,  $T_2=900\text{K}$*

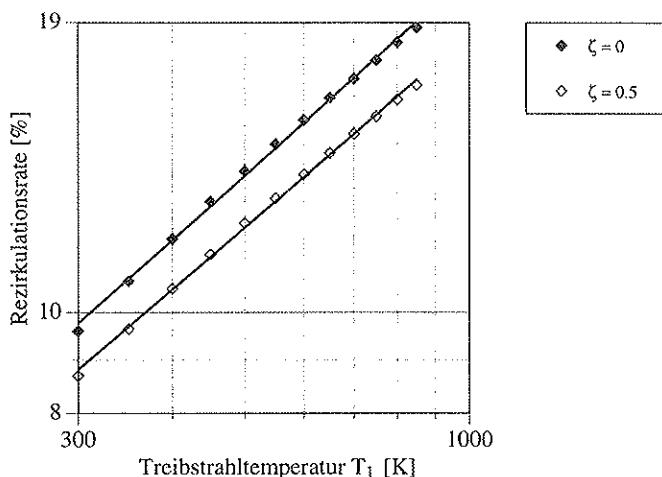
Für den druckverlustfreien Fall ( $\zeta = 0$ ) erhält man bei einer 10%igen Änderung der Temperatur eine relative Änderung der Rezirkulationsrate von 7.4% (Absolutänderung Rezirkulationsrate = 0.67%; 100% = 310K). Der Einfluß der Vorwärmung der Verbrennungsluft kann daher insbesondere für Laboruntersuchungen nicht vernachlässigt werden.

Mit Ausnahme der variierten Verbrennungslufttemperatur  $T_1$  sind die übrigen Größen gemäß Tabelle 4.6 gewählt.

#### b.) Variation der Treibstrahltemperatur bei konstantem Gebläse-Volumenstrom

Dieser Fall ist besonders für den praktischen Betrieb relevant, da ein Haushaltsbrenner typischerweise ein bis zwei mal jährlich auf eine bestimmte Luftzahl eingestellt wird und mit dieser Luftklappeneinstellung dann betrieben wird, ohne weitere Berücksichtigung von Temperaturschwankungen.

Ein Anstieg der Temperatur  $T_1$  hat eine Dichteabnahme des Treibstrahls zur Folge. Unter der Annahme, daß der vom Gebläse geförderte Volumenstrom sich nicht ändert, nimmt der Massenstrom  $\dot{m}_1$  ab. Obwohl damit auch der Massenstrom  $\dot{m}_2$  abnimmt, steigt die Rezirkulationsrate ( $\dot{m}_2/\dot{m}_1$ ) dennoch an, da die Abnahme von  $\dot{m}_1$  die von  $\dot{m}_2$  überwiegt. Das Ergebnis ist exakt das Gleiche wie in Abbildung 4.17. In Abbildung 4.18 ist das Ergebnis in doppelt logarithmischem Maßstab und für einen weiteren Temperaturbereich dargestellt.



*Abbildung 4.18:* Rezirkulationsrate als Funktion der Treibstrahltemperatur  $T_1$ ; konstanter Verbrennungsluftvolumenstrom

Eine Erhöhung der Verbrennungslufttemperatur führt demnach zu einer Erhöhung der Rezirkulationsrate. Bezuglich der Stickoxid-Bildung wirkt dieser Effekt dem primären Verbrennungslufttemperatureffekt entgegen (eine höhere Verbrennungslufttemperatur führt zu einer höheren Flammentemperatur und damit zu einer stärkeren NO<sub>x</sub> Bildung). Eine Abschätzung, mit dem Ziel den überwiegenden Effekt zu ermitteln, lässt sich nicht generell durchführen, sondern ist aufgrund der Nichtlinearität der Stickoxid-Produktion immer nur für diskrete Temperaturen möglich.

Mit Ausnahme der variierten Verbrennungslufttemperatur  $T_1$  sind die übrigen Größen gemäß Tabelle 4.6 gewählt.

Abschließend sei bemerkt, daß der maßgebliche Effekt der Dichteänderung prinzipiell auch seine Ursache in einem veränderten Druck haben kann. Aus Gründen der höheren Praxisrelevanz wurden hier die Ergebnisse jedoch in Form einer Variation der Dichte aufgrund einer Veränderung der Temperatur des Treibstrahls dargestellt.

### 4.3.3 Rezirkulationsrate als Funktion der Treibstrahlgeschwindigkeit

Eine Veränderung der Treibstrahlgeschwindigkeit  $u_1$  führt zu einem größeren statischen Unterdruck an der Ansaugstelle, also zu einem erhöhten Ansaugpotential. Auch hier lassen sich zwei Fälle unterscheiden:

#### a.) Geschwindigkeitserhöhung bei konstanter Fläche

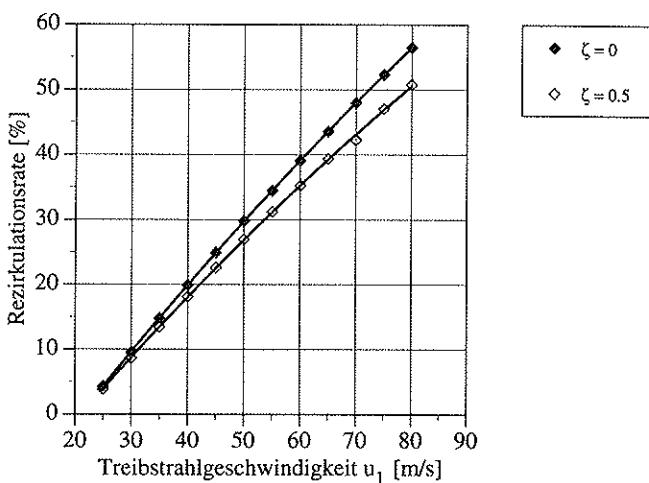
Dieser Fall entspricht der Veränderung des Massenstroms  $\dot{m}_1$  und damit der Luftzahl.

Eine Erhöhung des Massenstroms  $\dot{m}_1$  bewirkt eine Erhöhung des angesaugten Rezirkulationsmassenstromes  $\dot{m}_2$ . Die Rezirkulationsrate ( $\dot{m}_2/\dot{m}_1$ ) bleibt jedoch unverändert.

### b.) Veränderung des Treibstrahlquerschnitts

Dieser Fall entspricht einer Neukonstruktion der Düse bzw. einer neuerdings in manchen Brennern angewandten Justiermöglichkeit des Düsenquerschnitts.

Eine Verkleinerung des Querschnitts bewirkt bei konstantem Massenstrom  $\dot{m}_1$  (Luftzahl  $=$  konstant) eine Erhöhung des Rezirkulationsmassenstroms  $\dot{m}_2$ . Damit steigt die Rezirkulationsrate wie in Abbildung 4.19 dargestellt an. Deutlich zu erkennen ist hier auch die nichtlineare Abhängigkeit der Druckverluste von der Rezirkulationsgeschwindigkeit (Divergenz der Kurven), welche mit zunehmender Treibstrahlgeschwindigkeit  $u_1$  ebenfalls zunehmen.



*Abbildung 4.19 Rezirkulationsrate als Funktion der Geschwindigkeit  $u_1$ ; konstanter Massenstrom*

Zusammenfassend sei bemerkt, daß obwohl die Absolutwerte der Rezirkulationsrate aufgrund der geometrischen Vereinfachungen nicht mit der Realität in Einklang stehen, dennoch aus dem qualitativen Verhalten und einer Messung des Absolutwertes quantitative Aussagen für die Brennerauslegung möglich sind.

## 5 Simulation realer Ölbrenner

Die in Kapitel 4 vorgestellten Simulationen erlauben die qualitativ richtige Vorhersage der einzelnen Einflußgrößen auf die Rezirkulationsrate. Für den Einfluß der Temperatur des Rezirkulierten auf die Rezirkulationsrate konnte der Exponent des Potenzgesetzes sogar quantitativ richtig ermittelt werden. Der Exponent der Simulation wurde zu  $n=-0.76$  bestimmt. Der aus LDA und Thermoelementmessungen bestimmte Exponent beträgt  $n=-0.74$  (Flury (1993)).

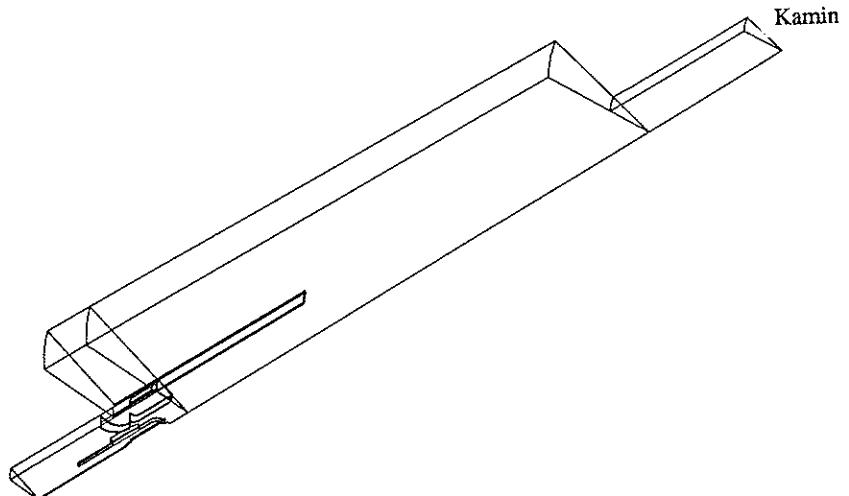
Obwohl das Systemverhalten damit detailliert beschreibbar ist, lassen sich dennoch auf der Basis dieser Simulationen keine Aussagen von hoher Genauigkeit, über den Absolutwert der Rezirkulationsrate, treffen.

Zur genauen Berechnung des Absolutwertes und zum Vergleich mit Meßwerten (Geschwindigkeit und Temperatur), können bei der Durchführung der Simulation keine geometrischen Vereinfachungen getroffen werden, wie dies für die bisher vorgestellten Simulationen der Fall war. Aus diesem Grunde wurde für die in diesem Kapitel vorzustellenden Rechnungen die Geometrie in voller Komplexität, mit Hilfe körperangepaßter Gitter, abgebildet.

Vereinfachungen wurden nur hinsichtlich der Bauteile vorgenommen, die keine strömungstechnische Relevanz besitzen (z.B. Befestigungsbauteile).

### 5.1 Geometriebeschreibung

Bei der zur Simulation ausgewählten Konfiguration handelt es sich um einen handelsüblichen Brenner (Leistungsklasse 100kW), kombiniert mit einer ebenfalls serienmäßig erhältlichen Brennkammer (Sondenmessungen) bzw. einer speziell im Hinblick auf die nötige optische Zugänglichkeit (LDA und LIF Messungen) konstruierten Brennkammer.



*Abbildung 5.1: Simulierte Brenner/Brennkammer Konfiguration (dreidimensional)*

Aus Rechenzeitgründen wurde das Simulationsgebiet auf ein  $20^\circ$  Segment beschränkt, womit ein Rezirkulationsschlitz (von insgesamt 18) betrachtet werden konnte. Die Geometrie ist in den Abbildungen 5.1 und 5.2 dargestellt.

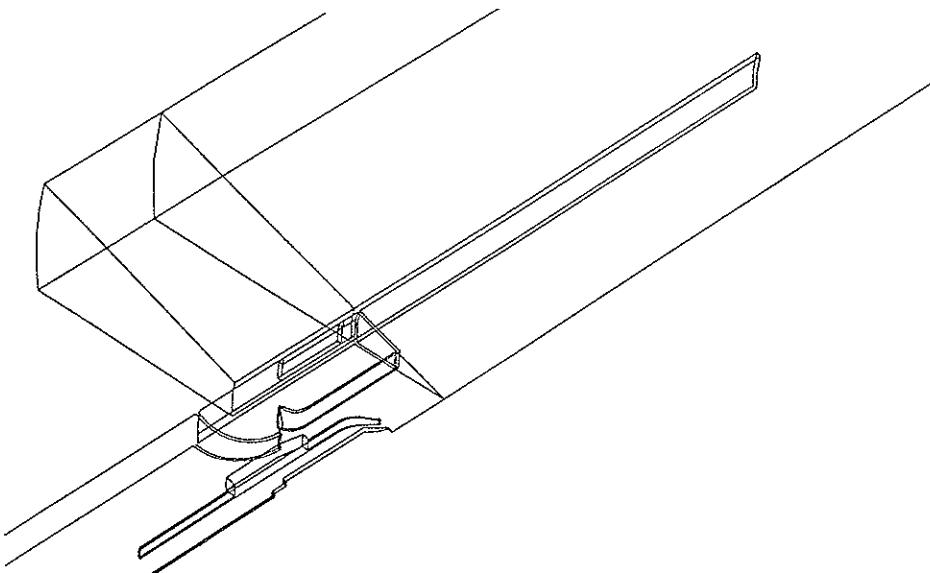


Abbildung 5.2: *Simulierte Brenner/Brennkammer Konfiguration, Ausschnitt aus Abbildung 5.1 (Brenner)*

Als besondere Merkmale sind hervorzuheben, daß der Verbrennungsluftstrom geteilt wird, in einen die Düse konzentrisch umgebenden SpülLuftstrom und einen zur Rezirkulation zur Verfügung stehenden Treibstrahl. Des weiteren ist die Position der Muffe M einstellbar, zur Optimierung der Rezirkulationsrate.

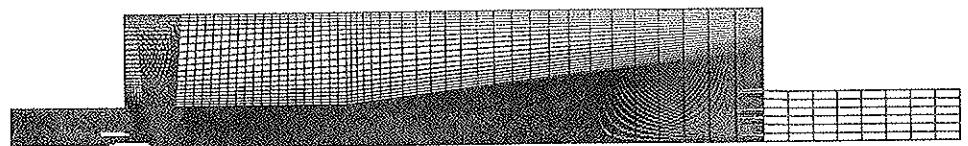
Mit zwei Ausnahmen entspricht die abgebildete Geometrie exakt der des realen Brenners. Die Form der Rezirkulationsschlitz ist aus fertigungstechnischen Gründen kein Rechteck, sondern an beiden Enden durch je einen Halbkreis abgeschlossen. Die Diskretisierung als Halbkreise würde bei einer Gitterverfeinerung in Umfangsrichtung zwar eine Annäherung an die reale Geometrie ergeben, dadurch würde sich aber gleichzeitig die Öffnungsfläche der Slitze ändern. Da dies die Rezirkulationsrate direkt beeinflussen könnte wurden die Slitze als Rechteck mit äquivalenter Öffnungsfläche beschrieben.

Die zweite Ausnahme betrifft die verschiebbare Muffe M, welche in Realität eine Hinterschneidung aufweist, die jedoch bei der Durchführung von Laser Doppler Anemometrie (LDA) Messungen mit Tracerpartikeln zugesetzt war, so daß sich eine annähernd glatte Oberfläche, wie in Abbildung 5.2 dargestellt, ergab.

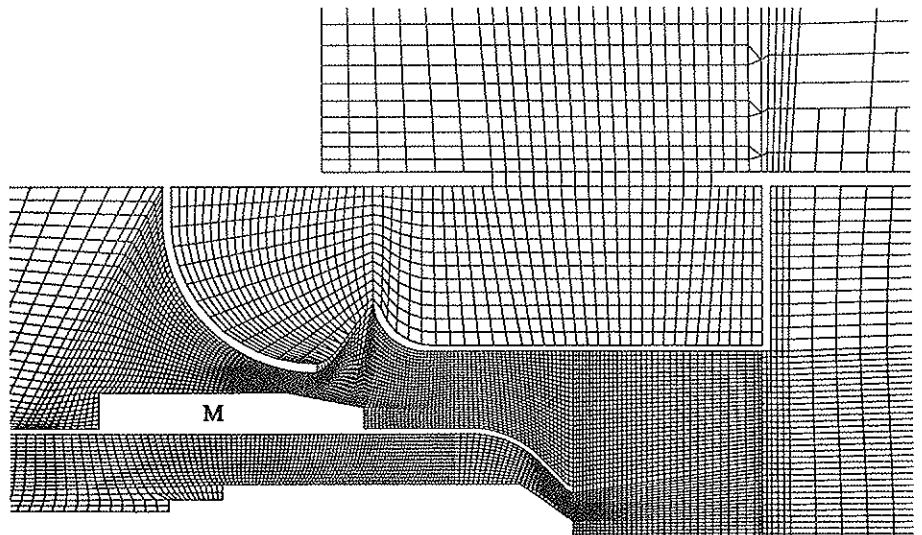
## 5.2 Geometrische Diskretisierung

Zur numerischen Simulation von Strömungsvorgängen in realen Konfigurationen müssen zunächst die kontinuierlichen geometrischen Verhältnisse mit Gitterknoten diskretisiert werden. In weiteren Schritten muß dann das Gitter an kritischen Stellen der Strömung so stark verfeinert

werden, daß alle die Zielgrößen (z.B. Rezirkulationsrate) beeinflussenden Effekte hinreichend aufgelöst sind.



*Abbildung 5.3a: Gitter für den isothermen Fall (Ebene 10°), Gesamtansicht*



*Abbildung 5.3b: Gitter für den isothermen Fall (Ebene 10°), Ausschnitt Brenner*

In den Abbildungen 5.3a und 5.3b ist exemplarisch eine Diskretisierung dargestellt, welche eine sehr gute Übereinstimmung mit den Meßresultaten bezüglich der Rezirkulationsrate ergab. Dies bedeutet aber nicht, daß alle Größen, insbesondere die Turbulenzgrößen, mit dieser Diskretisierung in der selben Genauigkeit wie die Rezirkulationsrate vorhergesagt werden. Diese Problematik wurde bereits in Kapitel 3.1.2 diskutiert. Hier ergibt sich die Konsequenz, daß aufgrund der limitierten Speicherkapazität und Rechenzeit eine Einschränkung des Blickwinkels auf die Zielgrößen, insbesondere bei dreidimensionalen Rechnungen heute noch unumgänglich ist.

Das gesamte Gitter wurde aus 5 Einzelgittern aufgebaut, welche dann miteinander verbunden wurden. Das so erzeugte Gitter besteht aus ca. 80.000 Gitterknoten.

### 5.3 Isotherme Strömung

Um die Simulationen stufenweise vergleichen und überprüfen zu können wurden parallel zur Simulation verschiedene Messungen durchgeführt, unter anderem wurde auch die Rezirkulationsrate, sowie das Geschwindigkeitsprofil am Flammrohraustritt von Flury (1993) mittels Laser Doppler Anemometrie (LDA) im kalten und heißen Fall vermessen.

Zur Messung im kalten Fall wurde zunächst der Brenner heiß, bei z.B.  $\lambda=1.3$ , betrieben (Messung von  $O_2$  im Abgas) und aus dem gemessenen Ölmassenfluß der zugeführte Luftmassenstrom errechnet. Dann wurde die Ölzufluhr unterbrochen, der Brenner kalt weiterbetrieben und die LDA Messungen durchgeführt.

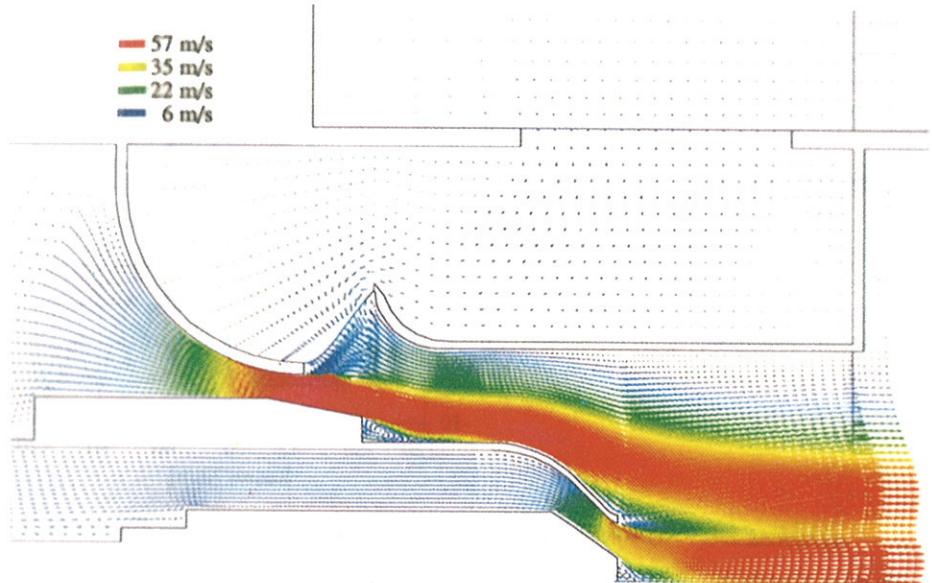
Der so ermittelte Luftmassenstrom wurde dann als Randbedingung für die Simulation verwendet. Dies setzt voraus, daß das Gebläse seinen Liefergrad zwischen den zwei Fällen (heiß/kalt) nicht ändert. In Tabelle 5.1 sind die verwendeten Randbedingungen dargestellt.

Einlaß	$\dot{m}_{zu} = 2.66E-3 \text{ [kg/s]}$ (20° Segment)
	$T_{zu} = 303 \text{ [K]}$
	$\rho_{zu} = 1.15 \text{ [kg/m}^3\text{]}$
Auslaß	konstanter statischer Druck am ganzen Querschnitt 101325 Pa
Wände	hydraulisch glatt

*Tabelle 5.1: Randbedingungen der isothermen Simulation*

In Abbildung 5.4 ist das Geschwindigkeitsfeld in Form eines Vektorbildes dargestellt.

Deutlich zu erkennen ist die Wirkung des Treibstrahls, der das in der Brennkammer befindliche Medium ansaugt. Am Ende der Muffe  $M$  zeigt sich die Ausbildung eines Wirbelgebietes, welches man in dieser Art auch erwarten würde. An den Geomtriesprüngen entlang der Öllanze hingegen sind keine Wirbel festzustellen. Dies liegt an der beschränkten geometrischen Diskretisierung und zeigt das Problemfeld der Simulation realer Konfigurationen sehr deutlich auf. Durch Limitierungen im Bereich der Rechenleistung und Speicherkapazität können nicht alle Strömungsphänomene aufgelöst werden. Eine Einschränkung auf die für bedeutsam erachteten Effekte ist unumgänglich. Der Vergleich mit Messungen oder die in Kapitel 3.1.4 vorgestellte Methode der Fehlerschätzung muß im Einzelfall belegen, ob die geometrische Diskretisierung hinreichend ist.



*Abbildung 5.4: Geschwindigkeitsfeld isothermer Fall (Ebene 10°), Ausschnitt Brenner*

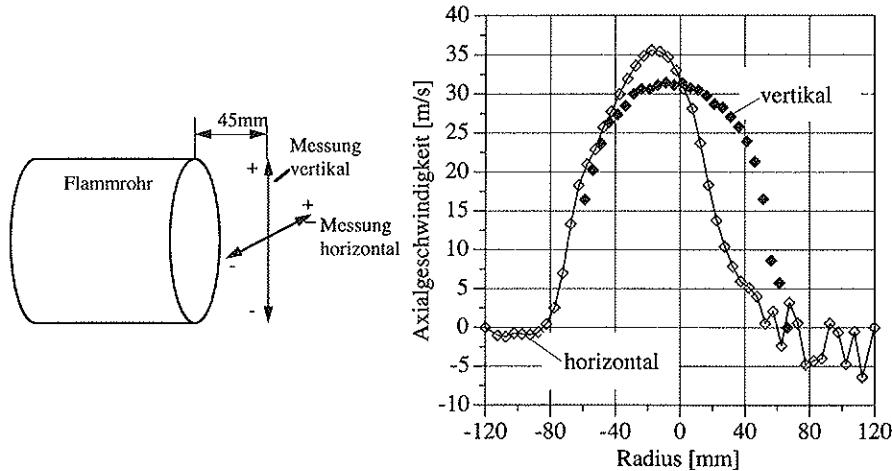
### 5.3.1 Vergleich mit LDA Messungen

Die Resultate der LDA Vergleichsmessungen, sowie eine Diskussion der potentiellen Fehlermöglichkeiten mit Größenordnungsabschätzungen sind in Flury (1993) ausführlich dargestellt. Die Darstellungen in diesem Kapitel beschränken sich daher auf die zum Vergleich mit der numerischen Simulation benötigten Fälle.

#### 5.3.1.1 Geschwindigkeitsprofil

Bei der Durchführung der LDA Messungen zeigte sich, daß der Brenner ein asymmetrisches Strömungsfeld aufweist (siehe Abbildung 5.5). Dies gilt sowohl für den heißen als auch für den kalten Fall. Die Asymmetrie ist im kalten Fall ausgeprägter (45mm, horizontal) als im heißen Fall (18mm, horizontal). Das Geschwindigkeitsprofil ist in horizontaler Richtung nach hinten verschoben. Auch eine Vertikalverschiebung ist festzustellen, welche jedoch aufgrund des breiteren Maximums schwerer zu lokalisieren ist. Die Verschiebung in vertikaler Richtung ist mit ca. 12mm etwas geringer als in horizontaler Richtung (ca. 18mm).

Eine nähere Untersuchung ergab, daß die Einbauten des Brenners aufgrund von Bauteiltoleranzen eine Exzentrizität von ca. 1mm aufwiesen. Da bei eingeschlossenen Strahlen bereits kleine Asymmetrien in der Lage sind die Grobstruktur der Strömung zu verändern (Selbstverstärkungseffekte, z.B. anlegen des Strahls an eine Wand), ergibt sich die, verglichen mit der Exzentrizität, recht große Verschiebung des Strahlprofils am Ende des Flammrohrs. Die starke Querschnittserweiterung stromab der Einbauten verstärkt diesen Effekt zusätzlich.



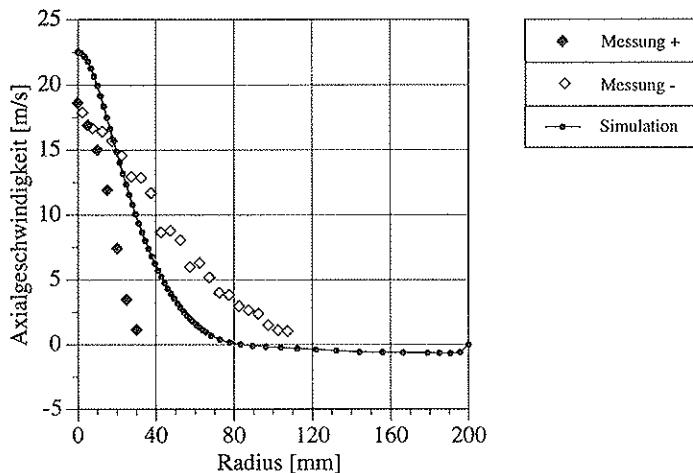
*Abbildung 5.5: Asymmetrisches Strömungsfeld des Brenners; heiß (aus Flury (1993))*

Da diese Verschiebung bei der Simulation eines 20 Grad Segmentes, aus Gründen der zu treffenden Symmetrierandbedingungen, nicht berücksichtigt werden kann, wurden die gemessenen horizontalen Geschwindigkeitsprofile in Abbildung 5.6 in radialer Richtung um 45mm verschoben dargestellt, so daß sich beide Maxima (Messung und Rechnung) an der selben radialen Position befinden. Die negative Profilflanke (Radius negativ) wurde gespiegelt dargestellt (Messung -). Zur Simulation wurde das Linear Profile Scheme Diskretisierungsverfahren (LPS) verwendet.

Die Absolutgröße wird von der Simulation gut wiedergegeben. Die Abweichungen von Messung und Simulation im Maximalwert sind auf die Verschiebung der gemessenen Profile zurückzuführen. Das Geschwindigkeitsmaximum wurde nicht vermessen.

Aufgrund der asymmetrischen Lage des Geschwindigkeitsmaximums bei der Messung ergeben sich zwei unterschiedliche Verläufe für das Geschwindigkeitsprofil. Das simulierte Geschwindigkeitsprofil liegt zwischen den beiden Flanken des Gemessenen. Bei vorliegen eines symmetrischen Brenners wären zwei gleiche Flanken, mit einer Steigung zwischen den in Abbildung 5.6 gezeigten, zu erwarten. Die Übereinstimmung zwischen Messung und Rechnung kann, insbesondere in Anbetracht der Komplexität der Geometrie, als gut bezeichnet werden. Der Unterschied in den beiden Geschwindigkeitsflanken ist größer, als der Unterschied zwischen Messung und Simulation.

Aus diesem Vergleich ergibt sich eine weitreichende Konsequenz, daß nämlich eine Verbesserung der Simulation bezüglich des Geschwindigkeitsprofils (an dieser Stelle) für diesen Brennertyp gar nicht mehr möglich ist, da die noch vorherrschende Diskrepanz zwischen Messung und Simulation durch Bauteiltoleranzen verursacht ist, welche sich bei jeder Identität eines Brenners unterschiedlich auswirken.



*Abbildung 5.6: Vergleich Simulation (LPS) und Messung (horizontal) an der Stelle  $x=45\text{mm}$  nach dem Flammrohrende (Messung in radialer Richtung um  $45\text{mm}$  verschoben, negative Flanke gespiegelt); kalt*

### 5.3.1.2 Die Rezirkulationsrate

Die experimentelle Bestimmung der Rezirkulationsrate erfolgte durch Messung der Geschwindigkeit in den Rezirkulationsschlitten in radialer Richtung mittels LDA, sowie durch eine Temperaturmessung. Aus der Temperatur konnte für die Rezirkulationsgaszusammensetzung die Dichte bestimmt werden, mit der sich dann der rezirkulierte Massenstrom errechnen ließ. Die Rezirkulationsrate wurde nach Gleichung (2.1) errechnet. Dabei mußte für den zugeführten Verbrennungsluftmassenstrom die Annahme getroffen werden, daß dieser identisch für den heißen und den kalten Fall ist, da er nur im heißen Fall bestimmt werden konnte ( $\text{O}_2$  Messung im Kamin und Messung Ölmassenstrom). Im heißen Fall sind die Strömungsgeschwindigkeiten jedoch höher (durch die Dichteabnahme), was zu erhöhten Druckverlusten führt. In Realität wird der zugeführte Verbrennungsluftmassenstrom im kalten Fall daher höher sein, da der Druckverlust im Kessel kleiner ist. Die Rezirkulationsrate wurde nun errechnet aus dem gemessenen Rezirkulationsmassenstrom und dem als unverändert betrachteten (aber in Realität höheren) Verbrennungsluftmassenstrom. Dies hat zur Folge, daß die so ermittelten Rezirkulationsraten größer sind als in Realität. Eine Abschätzung der Fehlergröße konnte nicht durchgeführt werden, da keine ausreichenden Meßdaten zur Verfügung standen und außerdem die Aufteilung des Verbrennungsluftmassenstroms in Spül- und Treibstrahl die Berechnung erschweren würde. Die auf der Basis der LDA Messung ermittelte Rezirkulationsrate kann daher als größtmöglicher Wert betrachtet werden.

Da das Flammrohr nur in einem Winkel von ca. 180 Grad für die LDA Messungen zugänglich war, wurden nur 10 der insgesamt 18 Schlitze vermessen. Durch Symmetrieannahmen wurde die totale Rezirkulationsmenge und damit die Rezirkulationsrate bestimmt zu 58.7%. Obwohl der relative Fehler des LDA Meßverfahrens mit kleiner 1% angegeben wird (Flury (1993)) liegt die Unsicherheit der Messung aus zweierlei Gründen höher. Zum einen, wird vorausgesetzt, daß der nichtvermessene Teil sich identisch verhält wie der vermessene. Zum anderen, ergibt sich im kalten Fall aufgrund des geringeren Druckverlustes ein erhöhter Verbrennungsluftmassenstrom, dessen Variation jedoch nicht abgeschätzt werden kann.

Für das in Abbildung 5.3 dargestellte Gitter wurde die Rezirkulationsrate durch Simulation mit dem MWS Diskretisierungsverfahren zu 54.8% errechnet, für das LPS Verfahren zu 56.9%. Das unterschiedliche Ergebnis der beiden Diskretisierungsverfahren zeigt, daß die Lösung nicht völlig frei ist von Fehlern durch unzureichend feine Auflösung des Strömungsfeldes. Der Unterschied ist mit ca. 2% jedoch recht klein. Die für gröbere Gitter durchgeföhrten Simulationen ergaben eine Rezirkulationsrate von ca. 53% bis 55%, je nach Diskretisierungsverfahren. Dies zeigt zum einen erneut, daß die Simulationen nicht völlig gitterunabhängig sind, zum anderen aber auch, mit welchen Fehlergrößen man im Fall von zu groben Gittern (ca. 15.000 Gitterzellen) zu rechnen hat. Die Abweichung in der Rezirkulationsrate, zwischen LDA-Messung und numerischer Simulation, beträgt selbst für das größte Gitter weniger als ca. 10% (Relativwert).

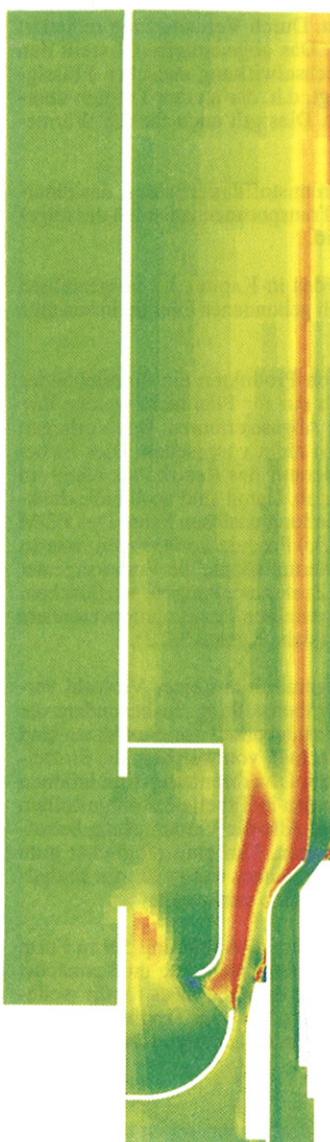
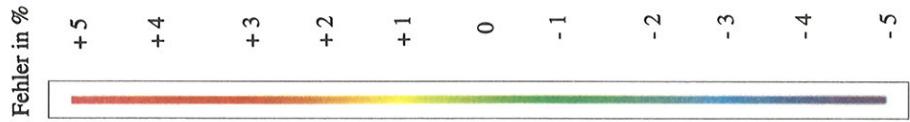
Die zwischen Messung und Simulation festgestellte relative Abweichung der Rezirkulationsrate beträgt für die genaueste Rechnung weniger als 4%. Neben dem Geschwindigkeitsprofil zeigt somit auch die Rezirkulationsrate eine sehr gute Übereinstimmung mit den LDA Messungen.

### 5.3.1.3 Fehlerabschätzung

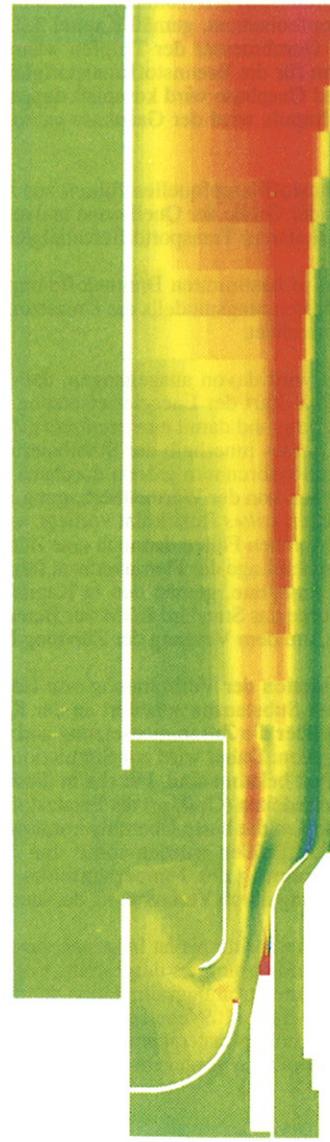
Auf der Basis der in Kapitel 3.1.4 vorgestellten qualitativen Methode zur Fehlerabschätzung soll nun der in den Größen *Geschwindigkeit ( $u$ )* und *turbulente kinetische Energie ( $tk$ )* noch enthaltene Lösungsfehler untersucht werden. Dazu wurde je eine Lösung erster Ordnung (MWS) und höherer Ordnung (LPS) erzeugt. Durch Differenzbildung (LPS-MWS) ergibt sich der Unterschied zwischen den beiden Lösungen. Durch Bezug auf das Maximum der Feldgröße ergibt sich das in Abbildung 5.7 und 5.8 dargestellte Ergebnis. Die grünen Gebiete weisen keinen Unterschied auf für verschiedene Diskretisierungsverfahren (Lösungsfehler  $\approx 0$ ), was einen qualitativen Beleg für eine ausreichende Gitterfeinheit darstellt. Gebiete großer Lösungsfehler sind in rot oder blau dargestellt.

Die hier angewandte Methode der qualitativen Fehlerabschätzung erlaubt, insbesondere wegen des relativ willkürlichen Bezugs auf den Maximalwert der Feldgröße, keinen harten Vergleich der Absolutfehler. Jedoch ist in den Abbildungen 5.7 und 5.8 deutlich zu erkennen, daß die Gebiete großer Lösungsfehler für unterschiedliche Größen an unterschiedlichen Orten liegen. Es muß also, für jede die Zielgröße beeinflussende Feldgröße, eine Überprüfung dieser Art durchgeführt werden.

Aus quantitativen Fehlerabschätzungen (Kessler et al. (1988)) ist bekannt, daß die turbulente kinetische Energie in der Regel weit größere Relativfehler beinhaltet, als die Geschwindigkeitskomponenten. Dieser Zusammenhang spiegelt sich auch in der hier vorgestellten qualitativen Abschätzung wieder, so daß, trotz aller Unsicherheiten, auch der Vergleich des prozentualen Fehlers zwischen den beiden Abbildungen erlaubt scheint.



*Abbildung 5.7:* Lösungsfehler in der Axialgeschwindigkeit ( $(u_{LPS} - u_{MWS})/u_{max,LPS}$ ) in [%], Bezugswert 57 m/s, Fehlerbandbreite: -8,5 bis 13,3 %, Ausschnitt Brenner



*Abbildung 5.8:* Lösungsfehler in der turbulenten kinetischen Energie ( $(k_{eLPS} - k_{eMWS})/(k_{emax,LPS})$ ) in [%], Bezugswert 113 m<sup>2</sup>/s<sup>2</sup>, Fehlerbandbreite: -7,4 bis 22,6 %, Ausschnitt Brenner

## 5.4 Verbrennungssimulation

Die Simulation der Ölverbrennung erfordert zusätzlich zur Lösung der Impuls-, Kontinuitäts- und Turbulenzmodellgleichungen noch die Lösung je einer Ausbreitungsgleichung für Brennstoff, Oxidant und Produkt, sowie der Enthalpie. Total sind somit 10 Transportgleichungen zu lösen.

Da der Brennstoff (Heizöldampf) zunächst noch in flüssiger Phase vorliegt, müssen zusätzlich noch Tropfenbahnen, gemäß Kapitel 3.2.3, integriert werden. Durch Verdampfung reduziert sich der Durchmesser der Tropfen während der Bewegung. Das abgedampfte Öl stellt den Quellterm für die Brennstofftransportgleichung dar. Die Wechselwirkung zwischen Flüssigkeits- und Gasphase wird komplett doppelseitig berücksichtigt, d.h. der an den Tropfen übertragene Impuls wird der Gasphase entzogen und umgekehrt. Dies gilt auch für die Wärmeströme.

Die Brennstoffdampfquellen führen zur Ausbildung eines Brennstoffdampffeldes, das einerseits von der Größe der Quellterme und andererseits von den Transportmechanismen der allgemeinen (skalaren) Transportdifferentialgleichung bestimmt wird.

Aus dem so bestimmten Brennstoffdampffeld, wird mittels des in Kapitel 3.2 vorgestellten EDM Verbrennungsmodells die Umsetzungsrate von chemisch gebundener Energie in sensible Wärme errechnet.

Im EDM wird davon ausgegangen, daß die Anwesenheit von Produkten ein hinreichendes Signal zum Start der Energiefreisetzung ist. Dies gilt jedoch nur für Flammen, welche ihre Stabilisierung und damit eine *stationäre Zündung* durch heiße Abgase erfahren. Das Vorliegen kalten Abgases innerhalb der Stabilisierungszone ist im EDM nicht vorgesehen. Dies ist bei Rezirkulationsbrennern jedoch durchaus möglich. Die Temperatur des Rezirkulats hängt im wesentlichen von der Wärmeübertragung an die Brennkammer ab. Damit sind auch Fälle denkbar, in denen *kaltes* Rezirkulat vorliegt, welches gar keine Zündung auslösen kann. Das EDM würde in solchen Fällen dennoch eine Zündung durch das (*kalte*) Produkt vorhersagen, was zu einer falschen Lage der Flammenfront führen würde. Dies wiederum könnte die Vorhersage der Rezirkulationsrate, gemäß den in Kapitel 4.2 vorgestellten Zusammenhängen, verfälschen. Daher wurde das Standard EDM zur Berechnung des hier vorgestellten Rezirkulationsbrenners erweitert, um dem Vorgang der Zündung Rechnung zu tragen (siehe Kapitel 3.2.2).

Die Simulation der Verbrennung von Heizöl, als Brennstoffgemisch aus einer Vielzahl verschiedener Substanzen scheitert an der Komplexität der Aufgabenstellung. Insbesondere die Kenntnis über die Zusammensetzung und eine hinreichende Verfügbarkeit von Stoffdaten sind nicht gegeben. Daher wird zur Simulation ein Ersatzstoff betrachtet, von welchem die Stoffeigenschaften bekannt sind. Für die in dieser Arbeit vorgestellten Ölverbrennungssimulationen wurde Tetradekan ( $C_{14}H_{30}$ ) als Ersatzstoff gewählt, da es von den in Tabelle 3.2 dargestellten reinen Stoffen die beste Übereinstimmung mit Heizöl aufweist. Alle die Verdampfung betreffenden Stoffgrößen wurden somit von Tetradekan übernommen. Um eine möglichst gute Übereinstimmung des Temperaturfeldes mit der Realität zu erreichen, wurde für die Enthalpiefreisetzung durch Verbrennung der untere Heizwert von Heizöl EL verwendet.

Der Rechenalgorithmus ist in seinen wesentlichen Modellschritten in Abbildung 5.9 in Form eines Ablaufdiagrammes dargestellt. Vor Beginn der Ölverbrennungsrechnung muß zunächst eine isotherme Strömungssimulation durchgeführt werden, welche dann die Basis für die weiteren Schritte darstellt. Neben dem Zündungsmodell, wird auch zum Start der Tropfenverdampfung eine erhöhte Gasttemperatur benötigt. Aus diesem Grunde werden an ausgewählten Stellen Initialtemperaturen vorgegeben.

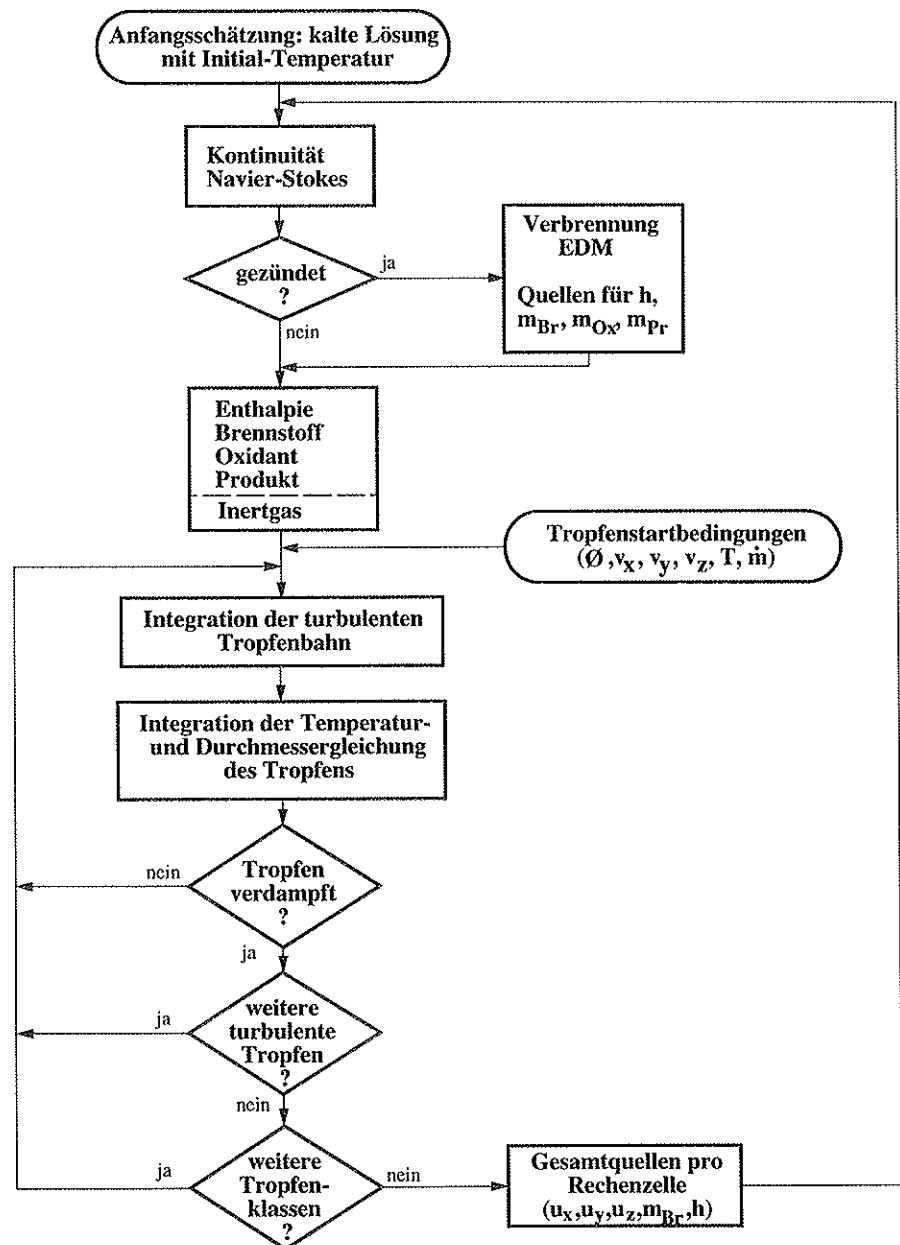


Abbildung 5.9: Ablaufdiagramm zur Modellierung der Ölverbrennung

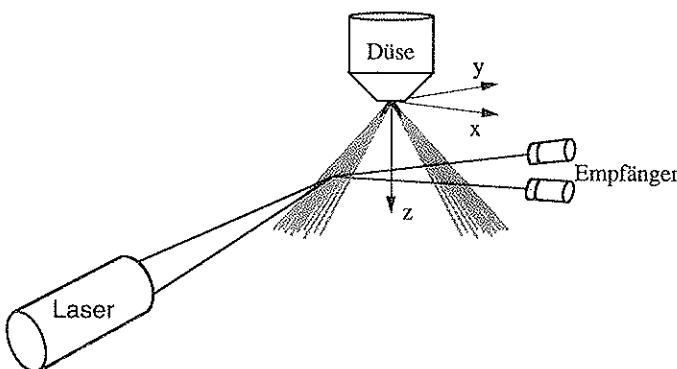
Verschiedene numerische Steuerparameter dienen zur Abstimmung der Abfolge und Häufigkeit der Berechnungen, sind aber aus Gründen der Übersichtlichkeit nicht dargestellt. So erfolgt z.B. nicht nach jeder Gasphaseniteration eine Neuberechnung der Tropfenbahnen, da die Gasphasenberechnung mehrere Iterationen benötigen kann, bis ihre Reaktion auf die veränderten Quellterme der Tropfenphase abgeschlossen ist.

### 5.4.1 Randbedingungen und Modellparameter

#### 5.4.1.1 Randbedingungen der flüssigen Phase

Das in der Realität mit Hilfe einer Druckdralldüse erzeugte Ölspray besteht aus einem Kollektiv von Tropfen, die hinsichtlich ihrer Durchmesser und Geschwindigkeiten stark von individuellen, d.h. von einander abweichenden Zuständen, charakterisiert sind. Da die Startbedingungen der Tropfen, bestehend aus Durchmesser, Geschwindigkeit und Massenstrom, die Brennstoffdampfquellen der Ölverbrennungssimulation bestimmen, ist ihre möglichst genaue Beschreibung von grundlegender Bedeutung für die Genauigkeit der Ergebnisse der Ölverbrennungssimulation.

Aus diesem Grunde wurden Phase Doppler Particle Analyzer (PDPA) Messungen zur Ermittlung der Verteilungen der Tropfen hinsichtlich ihrer Geschwindigkeit, Durchmesser und des Massenflusses durchgeführt (Ochs (1993)). Dafür wurde die identische Düse untersucht, welche auch für die anderen Messungen (LDA, Sonden, LIF) verwendet wurde. Aus Sicherheitsgründen konnte nicht mit Öl als Spraymedium gemessen werden. Es wurde daher ein Gemisch von Ethanol und Wasser verwendet, das im Verhältnis 40%/60% bei 24° C ungefähr die selbe kinematische Viskosität und Oberflächenspannung besitzt wie Heizöl EL. Der Flüssigkeitsdruck betrug 25bar, wie bei allen anderen Messungen (LDA, Sonde, LIF). In Abbildung 5.9 sind der prinzipielle Meßaufbau, sowie die Koordinatenbezeichnungen dargestellt.



*Abbildung 5.10: Versuchsaufbau zur PDPA Messung, Koordinatenbezeichnungen*

Die Messungen konnten, aus versuchstechnischen Gründen, nicht innerhalb der Brennergeometrie durchgeführt werden. Um die Düse wurde eine homogene Strömungsgeschwindigkeit von ca. 4m/s realisiert. Dieses Vorgehen setzt voraus, daß die Umströmung der Düse keinerlei Einfluß auf die Tropfenentstehung hat.

In der Literatur wird der Begriff der *turbulenten Tropfenentstehung* (siehe Kapitel 3.2.3) diskutiert, für die man annimmt, daß die Filmströmung durch Turbulenz instabil wird und schließlich zerfällt. Die Ursache der Turbulenz könnte einerseits im Film selbst liegen, der aufgrund der zunehmenden Laufänge immer anfälliger wird für einen laminar-turbulenten Umschlag, andererseits aber auch in der Aufprägung turbulenter Fluktuationen durch die umgebende Gasströmung. Sollte sich der letzte Fall bewahrheiten, so müßten Messungen dieser Art in der zu untersuchenden Strömung stattfinden, da diese den Prozeß der Tropfenentstehung dann maßgeblich beeinflußt.

Für  $y=0$  wurden an 5 verschiedenen radialen ( $x$ ) Positionen Messungen durchgeführt. In Abbildung 5.10 ist exemplarisch das Ergebnis der Messung, an der Stelle  $x=20\text{mm}$ , in Form einer Durchmesser-Massenhäufigkeits Verteilung ( $Q_3$ ) dargestellt. Für diese Meßposition wurde der maximale Ölmassenstrom gemessen.

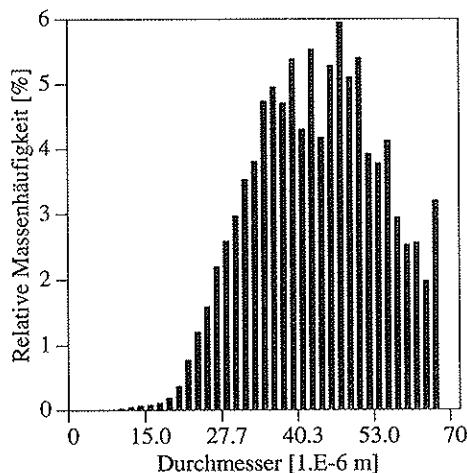


Abbildung 5.11: Verteilung Durchmesser-Massenhäufigkeit, PDPA Messung der 80° Hohlkegeldüse;  $x/y/z=20/0/35\text{ mm}$

Man erkennt deutlich ein Maximum in der massenbezogenen Durchmesserverteilung um  $50\text{ }\mu\text{m}$ . Die starken Peaks, insbesondere zu großen Durchmessern hin, deuten auf eine nicht ausreichend hohe statistische Unabhängigkeit hin. Durch die Errechnung des Massenflusses aus den gemessenen Ereignissen geht der Durchmesser des Tropfens kubisch in diese Darstellung ein. Statistische und meßtechnische Unzulänglichkeiten zeigen sich daher besonders stark für größere Durchmesser.

Da jeder Tropfen eines Durchmessers sich mit einer individuellen Geschwindigkeit bewegt, ergeben sich die in Abbildung 5.12 dargestellten Durchmesser-Geschwindigkeits Verteilungen für die Geschwindigkeitskomponenten  $v_x$  und  $v_y$ . Die Verteilung zeigt ein interessantes Phänomen. Alle Tropfen, welche kleiner sind als ein kritischer Durchmesser (hier ca.  $25\mu\text{m}$ ) besitzen ungefähr die gleiche Geschwindigkeit. Erstaunlicherweise handelt es sich nicht um die Gasgeschwindigkeit der umgebenden Strömung, da diese ca.  $4\text{ m/s}$  beträgt und die Tropfengeschwindigkeit davon deutlich abweicht. D.h. daß diese Tropfen noch nicht vollständig relaxiert sind. Eine Erklärung des Phänomens ist nicht bekannt. Eine Hypothese besteht in der Annahme von kleinen Hochgeschwindigkeitstropfen am Ort der Tropfenentstehung. Denn kleine Tropfen hätten bei konstanter Startgeschwindigkeit aller Tropfen, aufgrund der kleineren Tropfen

Reynoldszahl, einen größeren Widerstandsbeiwert, wodurch sie schneller relaxiert würden. Für weitere Schlüssefolgerungen muß noch berücksichtigt werden, daß es sich bei kleinen Tropfen, welche an der Position  $x=20\text{mm}$  gemessen wurden um untypische Tropfen handelt, da der Hauptmassenfluß einer Tropfenklasse kleinen Durchmessers in Achsnähe ( $x=10\text{mm}$ ) gemessen wurde.

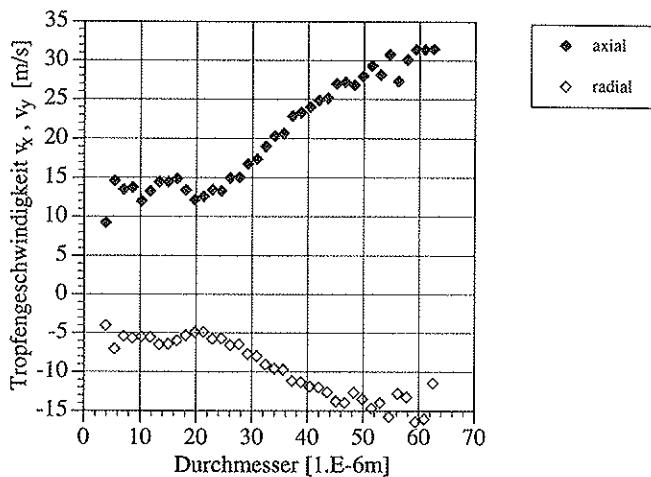
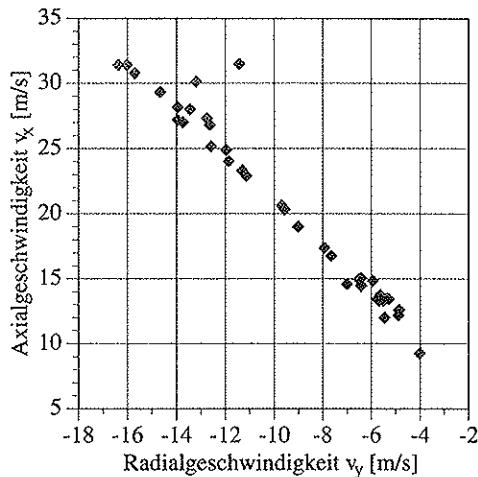


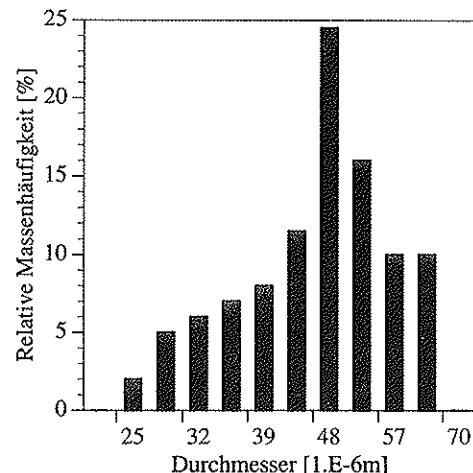
Abbildung 5.12: Verteilung Durchmesser-Axial-/Radialgeschwindigkeit,  
PDPA Messung der  $80^\circ$  Hohlkegeldüse

In Abbildung 5.13 ist die Verteilung der Axialgeschwindigkeit über der Radialgeschwindigkeit dargestellt. Die auffallend gute Korrelation der beiden Komponenten bis in den Bereich höherer Geschwindigkeiten hinein, vereinfacht die zur Simulation nötige Diskretisierung in Geschwindigkeitsklassen erheblich, da jeder Axialgeschwindigkeit genau eine Radialgeschwindigkeit zugeordnet werden kann. Mit Ausnahme weniger Ausreißer zeigt die vermessene Düse ein sehr gutes Hohlkegel-Sprühverhalten.

Eine geschlossene Beschreibung der in Abbildung 5.9 bis 5.13 dargestellten Verteilungen erscheint nicht möglich. Der Versuch einer geschlossenen Charakterisierung mit Hilfe von Verteilungsfunktionen (z.B. log-normal-, oder Rosin Rammler Verteilung) führt auf zusätzliche Fehler, da die Verteilungsfunktionen an die diskret gemessenen Häufigkeitsverteilungen angepaßt werden müssen. Aus diesem Grunde wurden die Verteilungen direkt in Klassen diskretisiert. In Abbildung 5.14a ist die in 10 Größenklassen diskretisierte Verteilung aus Abbildung 5.11 dargestellt.



*Abbildung 5.13:* Verteilung Axialgeschwindigkeit ( $v_x$ ), -Radialgeschwindigkeit ( $v_y$ ),  
PDPA Messung der  $80^\circ$  Hohlkegeldüse



*Abbildung 5.14a:* Diskretisierte Verteilung Durchmesser-Massenfluß, 10 Klassen

In dieser Darstellung erschwert sich der Vergleich mit dem gemessenen Spray durch die unterschiedliche Anzahl von Tropfenklassen. Anschaulicher zeigt Abbildung 5.14b in Summenform den Vergleich des über den Durchmesser integrierten Massenflusses, für das gemessene und das in 10 Klassen diskretisierte Spray.

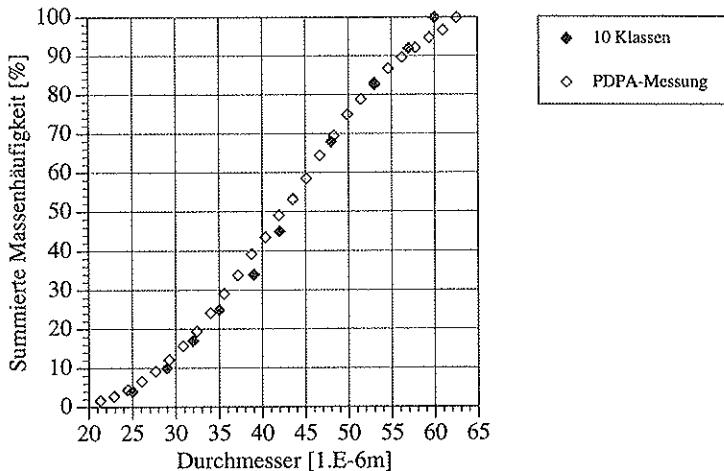


Abbildung 5.14b: Summenform der diskretisierten Verteilung der Durchmesser-Massenhäufigkeit, verglichen mit PDPA Messung

Jede dieser Größenklasse besitzt nun wiederum eine Verteilungsfunktion in der Axialgeschwindigkeit und jede diskretisierte Axialgeschwindigkeitsklasse wiederum eine Radialgeschwindigkeitsverteilung, welche jedoch aufgrund der guten, in Abbildung 5.13 dargestellten, Korrelation vernachlässigbar ist.

Die Darstellung des Tropfenkollektivs durch drei Verteilungsfunktionen (Durchmesser, Axial- und Radialgeschwindigkeit) erlaubt zwar eine genaue Beschreibung des Sprays, ist aber aus zwei Gründen nicht möglich beziehungsweise nicht sinnvoll. Erstens steigt der benötigte Rechenzeitbedarf mit dem Produkt der Anzahl dieser Einzelklassen an. Wenn  $N$  die Anzahl Klassen charakterisiert, dann wären für die Berechnung des *laminaren* Sprays  $N_{\text{Gesamt}}$  Tropfenbahnen zu berechnen.

$$N_{\text{Gesamt}} = N_{\text{Durchmesser}} * N_{\text{Axialgeschwindigkeit}} * N_{\text{Radialgeschwindigkeit}} \quad (5.1)$$

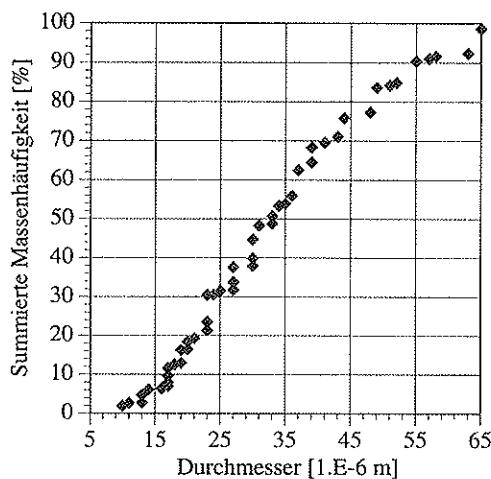
Für das *turbulente* Spray müßte dieser Vorgang hinreichend oft wiederholt werden, um statistische Unabhängigkeit zu sichern (siehe Ausführungen in Kapitel 3.2.3).

Zweitens sind die Messungen aufgrund von prinzipiellen Problemen, sowie der beschränkten Genauigkeit des PDPA Verfahrens nicht repräsentativ genug, um mit Hilfe des oben erwähnten Vorgehens gesichert zu einer realistischeren Darstellung des Spray zu gelangen. Spezielle Schwierigkeiten bereitet dabei die Tatsache, daß der Ort der Tropfenentstehung vom Meßort mindestens einige Millimeter, hier ca. 35mm, entfernt ist (Abbildung 5.9). Dieser Abstand ist notwendig, da das Spray direkt nach der Stelle des Filmzerfalls zu dicht ist, um mittels PDPA vermessen zu werden. Während dieser Strecke werden die Tropfen, unter dem Einfluß der Außenströmung, abgelenkt und insbesondere die kleinen Tropfen, wegen des nichtlinearen Zusammenhangs von Widerstandsbeiwert und Reynoldszahl (Gleichung (3.30a/b)) stärker beeinflußt. Die Geschwindigkeit kann sich dabei erheblich ändern, was mittels einer Rückwärtsintegration der Bewegungsgleichung, zum Ort der Tropfenentstehung, gezeigt werden kann. Prinzipiell sind die gemessenen Daten, wegen der Abhängigkeit vom Widerstandsbe-

wert, nur durch Integration rückwärts extrapoliert werden, sofern die Ablenkung der Tropfenbahn noch hinreichend weit von ihrem asymptotischen Limit entfernt ist. Wenn die Tropfen in ihrer Bewegung bereits stark relaxiert sind, ist die Eindeutigkeit der Extrapolation unter Umständen nicht mehr gegeben.

Ein weiterer Problempunkt der PDPA Messung im Allgemeinen und der hier vorliegenden im Besonderen, läßt jedoch auch diese Möglichkeit als nicht sinnvoll erscheinen. Der integrierte Massenfluß einer PDPA Messung wird in verschiedenen Veröffentlichungen (z.B. Li et al. (1991) oder McDonell und Samuels (1991)) mit zwischen 10% und 60% angegeben. In dem hier vorliegenden Fall sind es nur 14%. Die Ursache wird unter anderem in dem Umstand vermutet, daß das Tropfenspektrum zu großen Durchmessern hin durch Vorgabe einer Schranke begrenzt werden muß, da PDPA Meßgeräte Tropfen mit sehr kleinen Durchmessern, typische Werte liegen um  $2\mu\text{m}$ , als sogenannte *Phantomtropfen* mit sehr großen Durchmessern darstellen. Dadurch werden die Messungen verfälscht. Für eine detailliertere Diskussion der Fehlermöglichkeiten von PDPA Messungen wird auf Ochs (1993) verwiesen. Hieraus ergibt sich die Konsequenz, daß über ca. 86% der Tropfmasse nichts ausgesagt werden kann. Die Annahme, daß sich alle Tropfen entsprechend den 14% vermessenen verhalten, erscheint nicht zuverlässig genug, um den Rechenzeitaufwand für  $N_{\text{Gesamt}}$  laminare Tropfenbahnen zu rechtfertigen.

Daher wurde zur Vereinfachung die Axialgeschwindigkeit auf den konstanten Mittelwert von 35m/s gesetzt und die korrelierte Radialkomponente aus Abbildung 5.13 entnommen (~18m/s). Die Messungen wurden für 5 verschiedene x Positionen durchgeführt ( $x=10, 15, 20, 25, 28\text{mm}$ ;  $z=35\text{mm}$ ). Jedes der so erhaltenen Tropfenspektren wurde mit dem oben beschriebenen Vorgehen in 10 Durchmesser Massenflußklassen diskretisiert. Damit ergab sich eine Gesamtzahl von 50 Tropfengrößenklassen, welche das zur Simulation verwendete und in Abbildung 5.14 dargestellte Spray repräsentiert.



*Abbildung 5.15: Summenform der Verteilung Durchmesser-Massenhäufigkeit, Anfangsbedingungen für die TropfenbahminTEGRATIONEN*

In Tabelle 5.2 sind die weiteren Anfangsbedingungen der Flüssigkeitsphase dargestellt.

Temperatur	$T_1 = 300\text{K}$
Axialgeschwindigkeit	$v_x = 35\text{m/s}$
Radialgeschwindigkeit	$v_y = -18\text{m/s}$
Stoffdaten	Tetradekan $\text{C}_{14}\text{H}_{30}$ siehe Anhang A

*Tabelle 5.2: Anfangsbedingungen und Stoffgrößen der Flüssigkeitsphase*

#### 5.4.1.2 Randbedingungen der gasförmigen Phasen

Die für die Ölverbrennungssimulationen verwendeten Randbedingungen sind in Tabelle 5.3 dargestellt. Die thermische Leistung der Flamme beträgt ca. 107kW. Dies entspricht der maximalen Leistung dieses Brenners im Serieneinsatz.

Luftteinlaß	$\dot{m}_{zu} = 2.61\text{E-3} \text{ [kg/s]} (20^\circ \text{ Segment})$
	$T_{zu} = 300 \text{ [K]}$
	$\rho_{zu} = 1.16 \text{ [kg/m}^3]$
	$\text{O}_2 = 23.3 \text{ Massen \%}$
	$\text{N}_2 = 76.7 \text{ Massen \%}$
	$\text{C}_{14}\text{H}_{30} = 0.0 \text{ Massen \%}$
	geschätzte Turbulenzintensität = 10%
	geschätztes turbulentes Längenmaß = 0.01 [m]
Auslaß	konstanter statischer Druck am ganzen Querschnitt 101325 [Pa]
Quellen	$\dot{m}_{Öl,D} = 1.39\text{E-4} \text{ [kg/s]} (20^\circ \text{ Segment})$ Heizwert des Brennstoffs: $H_u = 42.700 \text{ [kJ/kg]} (\text{EMPA (1987)})$
Wände	hydraulisch glatt $T_{Wand} = 353 \text{ [K]}$

*Tabelle 5.3: Randbedingungen der Simulation mit Energiefreisetzung*

#### 5.4.1.3 Modellparameter der Ölverbrennungssimulation

Einige der in Kapitel 3 innerhalb der Modelle verwandten Parameter sind entweder reine Modell-Anpassungsparameter, oder aus der Literatur nicht als exakter Wert ermittelbar. Die Größe von Parametern dieser Art muß deshalb sinnvoll abgeschätzt werden. Die in den folgenden Simulationen verwendeten, gewählten Parameter sind in Tabelle 5.4 dargestellt.

Bei der Durchführung der Ölverbrennungssimulation zeigte sich, daß die gewählte Diskretisierung des Rechengebietes, insbesondere der Einbauten innerhalb des Ölbrener, nicht ausreichte zur Sicherung einer vollkommenen gitterunabhängigen Lösung. Der in Abbildung 5.8 dargestellte relative Lösungsfehler der turbulenten kinetischen Energie deutete dies bereits an. Gebiete mit hohem Lösungsfehler fanden sich insbesondere in den Nachlaufzonen der Öleinbauten, da dort mit den charakteristischen Querschnittsveränderungen Beschleunigungen bzw. Verzögerungen einhergehen, welche diskretisiert d.h. aufgelöst werden müssten.

EDM	Konstante A = 4
	Konstante B = 0.5
k-ε Modell	$C\mu=0.15$
Zündungsmodell	Zündtemperatur $T_Z = 600K$

*Tabelle 5.4: Modellparameter der Simulation mit Energiefreisetzung*

Da Lösungsfehler einem konvektiven Transport unterliegen hat dies zur Folge, daß auch in den Gebieten stromab der turbulente Transport fehlerbehaftet wiedergegeben wird. Diese Gebiete stromab der Öl einbauten sind von besonderer Bedeutung für die Simulation, da dort die Ausbildung und Stabilisierung der Flammenfront erfolgt. Dies hat zur Konsequenz, daß auch diese Phänomene fehlerbehaftet vorhergesagt werden. Die Flammenfront breitet sich, aufgrund des zu geringen turbulenten Transports (Mischung), zu langsam in Richtung Strahlachse aus, weshalb sie erst außerhalb des Flammrohrs den Strahl vollständig durchdrungen hat. Eine weitere Gitterverfeinerung war aufgrund der beschränkten Speicherkapazität nicht möglich. Um dennoch Vergleiche mit Verifikationsmessungen durchführen zu können wurde der turbulente Austausch künstlich, durch Erhöhung der Turbulenzmodellkonstante  $C\mu$  auf 0.15, vergrößert. Die Konstante  $C\mu$  stellt die Verbindung dar zwischen der turbulenten Wirbelvisosität und der kinetischen Turbulenzenergie  $k$ , sowie der Dissipationsrate von  $k$  (Gleichung 3.11).

Dies führt zwar zu einer globalen Erhöhung des turbulenten Transports, also des Queraustauschs, ermöglicht aber der Flammenfront eine Ausbreitung auf die Strahlachse noch innerhalb des Flammrohrs, was der Realität besser entspricht. Mit dieser Anpassung läßt sich nun ein Vergleich von Ölmodell und Verifikationsmessungen, unter der Prämisse eines global erhöhten Transports durchführen. Eine Gitterverfeinerung hätte eine lokale Erhöhung des turbulenten Austausches im achsnahen Nachlaufbereich der Einbauten des Ölbrenners zur Folge und würde daher, bei Verfügbarkeit größerer Hardwareressourcen, zu einer realistischeren Vorhersage führen.

#### 5.4.2 Vergleich mit LDA Messungen

##### 5.4.2.1 Geschwindigkeitsprofil

In Abbildung 5.16 ist das gemessene Geschwindigkeitsprofil dem durch Simulation ermittelten gegenübergestellt. Wie bereits oben ausführlich erläutert, ist auch für den heißen Fall in den Messungen ein verschobenes Geschwindigkeitsprofil zu beobachten. Auch in Abbildung 5.16 wurden daher die gemessenen Geschwindigkeitsprofile in Horizontalrichtung verschoben dargestellt (um 18mm). Im heißen Fall ist die Asymmetrie der Strömung geringer, was sich mit dem erhöhten Volumenstrom erklären läßt.

Die Übereinstimmung von Messung und Simulation kann als gut bezeichnet werden. Aufgrund der Vernachlässigung der Strahlungswärmeübertragung ergibt sich eine im Vergleich zur Messung höhere Temperatur. Dies führt infolge des erhöhten Volumenstroms zur Vorhersage erhöhter Gasgeschwindigkeiten. Die stärkere Abweichung in Nähe der Achse kann darin begründet sein, daß das Geschwindigkeitsmaximum aufgrund der Asymmetrie nicht vermessen wurde.

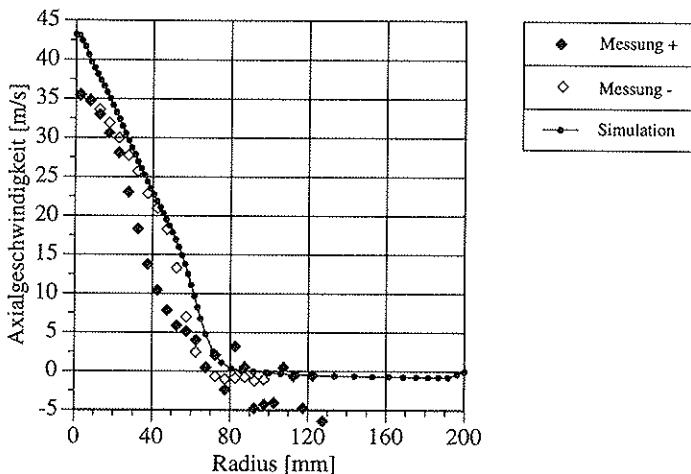


Abbildung 5.16: Vergleich Simulation und Messung an der Stelle  $z=45\text{mm}$  nach dem Flammrohrende (Messung in  $y$  Richtung um  $18\text{mm}$  verschoben); Ölverbrennung bei  $\lambda=1,27$

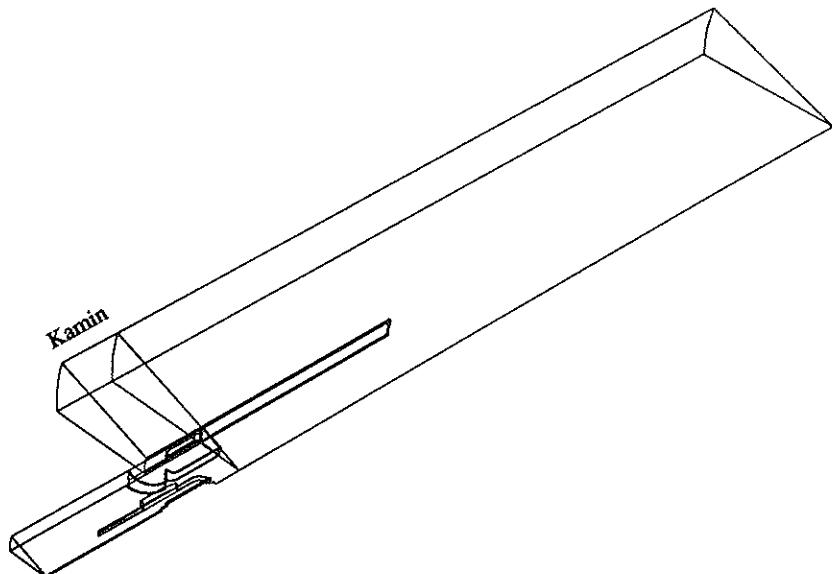
#### 5.4.2.2 Die Rezirkulationsrate

Die experimentell ermittelte Rezirkulationsrate beträgt 27.2%, bei einer Rezirkulationsgastemperatur von  $863\text{K}$ . Die durch Simulation ermittelte Rezirkulationsrate beträgt 19.6%, und zeigt damit zunächst eine relativ schlechte Übereinstimmung mit dem empirischen Befund. Berücksichtigt man jedoch die, aufgrund der in der Simulation vernachlässigten Gas- und Festkörperstrahlung, zu hohe Temperatur der rezirkulierten Gase ( $T_{Rez} \approx 1250\text{K}$ ), so ergibt sich ein anderes Bild. Eine Korrektur der simulierten Rezirkulationsrate auf der Basis der als Potenzgesetz formulierten Abhängigkeit von der Temperatur des Rezirkulierten (gemäß Gleichung (4.1), Exponent  $n=-0,76$ ), führt auf eine Rezirkulationsrate von 26.0%. Dies steht in sehr guter Übereinstimmung mit dem durch LDA Messungen ermittelten Wert.

Die Bestimmung der Rezirkulationsrate für den Fall der Ölverbrennung ist also auf der Basis der hier vorgestellten Simulationsmodelle möglich. Eine Verbesserung der Genauigkeit der Vorhersage ergibt sich automatisch mit einer Genauigkeitssteigerung der Berechnung des Temperaturfeldes (Strahlungsberücksichtigung). Weitere Effekte treten offenbar nicht in Erscheinung, insbesondere scheint die Lage der Flammenfront hinreichend genau wiedergegeben zu sein.

#### 5.4.3 Vergleich mit Sondenmessungen

Um neben dem Vergleich der Geschwindigkeitsprofile auch Aussagen über die Genauigkeit der Simulation des Temperaturfeldes machen zu können, wurden für bestimmte geometrische Konfigurationen weitere Messungen durchgeführt. In Abbildung 5.17 ist die Grundgeometrie mit Rauchgasabzug (Zwei-Zug Brennkammer) dargestellt.



*Abbildung 5.17: Geometrische Grundkonfiguration für die Sondenmessungen*

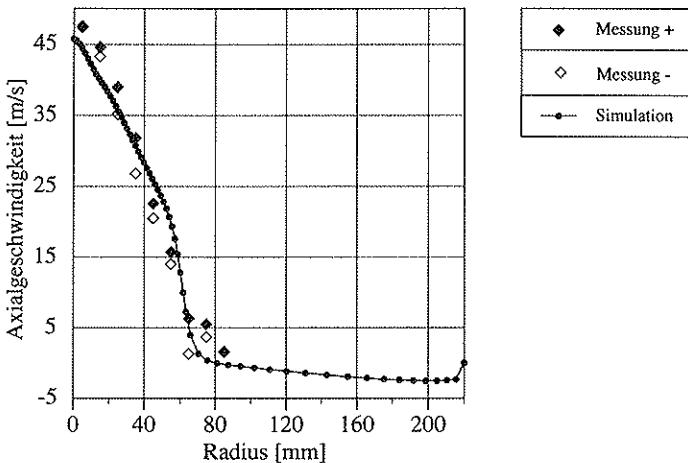
#### 5.4.3.1 Geschwindigkeitsprofil

Der in Abbildung 5.18 dargestellte Vergleich von, aus Sondenmessung und Simulation ermittelten, Geschwindigkeitsprofilen zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Die experimentell ermittelte Maximalgeschwindigkeit ist höher als im Fall der LDA-Anordnung. Dies hat mehrere Ursachen. Zum einen ist der Meßorts näher am Flammrohrende (25mm statt 45mm bei LDA). Zum zweiten ist die Luftzahl im Fall der Sondenmessung höher, und auch die Rauchgasführung ist verändert.

Da bei der Durchführung der Sondenmessung die Position des Geschwindigkeitsmaximums bestimmt wurde, konnte das Geschwindigkeitsmaximum vermessen werden (die Profilflanke bei negativen Radien ist gespiegelt dargestellt (Messung -)). Somit sind die Meß- und Simulationswerte direkt vergleichbar (ohne Verschiebung).

Die sehr gute Übereinstimmung, gerade auch der Maximalwerte, bekräftigt die Annahme, daß der beim Vergleich mit den LDA-Messungen festgestellte Unterschied im Geschwindigkeitsmaximum auf die Tatsache zurückzuführen ist, daß bei der LDA-Messung das Maximum nicht vermessen wurde.

Neben der Messung von Geschwindigkeitsprofilen mittels 5-Loch Sonde wurden auch Temperaturprofile mit Absaugepyrometern aufgenommen (Schuler (1993) sowie Dreher et al. (1993)). Gleichzeitig fand eine Analyse des Abgases im Kamin statt, womit für veränderte Brennkammerradien unterschiedliche NO<sub>x</sub> Emissionen nachgewiesen werden konnten.



*Abbildung 5.18: Vergleich 5-Loch Sondenmessung und Simulation an der Stelle  $z=25\text{mm}$  nach dem Flammrohrende; Ölverbrennung bei  $\lambda=1,37$*

#### 5.4.3.2 Temperaturprofil

In Abbildung 5.19 ist der Vergleich von errechnetem und mittels Absaugepyrometer gemessenem Temperaturprofil dargestellt. Für die Messung ergeben sich zwei unterschiedliche Profile, da in Realität der Rauchgasabzug asymmetrisch erfolgte (Abbildung 5.17), was bei der Simulation eines 20° Segmentes keine Berücksichtigung findet.

Die qualitative Übereinstimmung ist sehr gut, insbesondere wird die Lage der Maximaltemperatur bemerkenswert genau vorhergesagt. Die Absolute Größe der Temperatur hingegen weist größere Unterschiede auf. Dies ist zum einen bedingt durch die Vernachlässigung der Gas- und Festkörperstrahlung. Zum anderen aber auch durch die vereinfachende Beschreibung der Verdampfung des Brennstoffgemischs Heizöl als ein reiner Stoff. Da damit leichtflüchtige Spezies vernachlässigt werden, führt dies zur Vorhersage kleiner Brennstoffdampfquellen in Nähe der Einsprühstelle, was seinerseits eine zu geringe Energiefreisetzung in der Strahlmitte ergibt.

Da die Geschwindigkeit auf der Strahlachse ihr Maximum besitzt, und zudem die Temperatur innerhalb des Flammrohres dort ihr Minimum aufweist ist der Massenstrom auf der Strahlachse ebenfalls maximal. Das in Abbildung 5.20 dargestellte Massenstromprofil ist noch steiler als das Geschwindigkeitsprofil.

Die Vorhersage einer zu geringen Temperatur in der Nähe der Strahlachse führt also zu einem deutlich zu kleinen Enthalpiestrom an dieser Stelle und als Folge daraus zu einem deutlich zu hohen, in einiger Entfernung von der Achse. Dies ist der Hauptgrund für die falsche Vorhersage des Absolutwertes des Temperaturmaximums.

Der Einfluß der Strahlungswärmeübertragung kann am besten anhand der Temperatur der rückgeföhrten Rauchgase diskutiert werden (Radius  $> 62.5\text{mm}$ , Abbildung 5.19). Das gemessene Temperaturprofil weist dort, aufgrund der asymmetrischen Rauchgasführung, zwei unterschiedliche Verläufe auf. Die Differenz zwischen dem Mittelwert der Messungen

(enthalpiestromgewichtet) und der Simulation, ist auf die Vernachlässigung der Strahlungs-wärmeübertragung zurückzuführen.

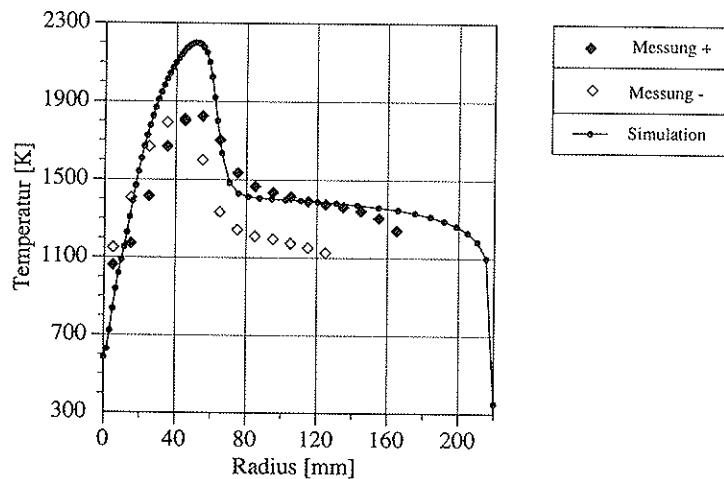


Abbildung 5.19: Vergleich Temperaturmessung (Absaugepyrometer) und Simulation an der Stelle  $z=25\text{mm}$  nach dem Flammrohrende; Ölverbrennung bei  $\lambda=1,37$

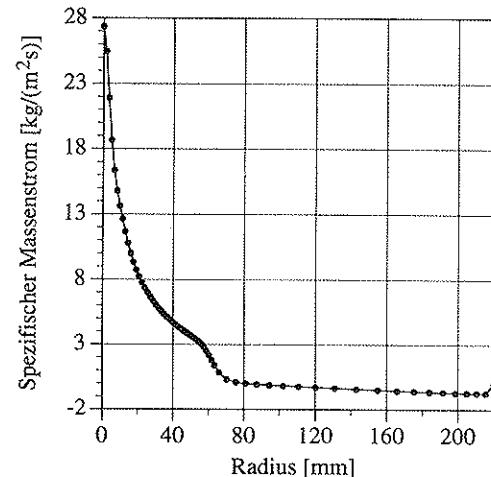


Abbildung 5.20: Massenstromprofil (Simulation), an der Stelle  $z=25\text{mm}$  nach dem Flammrohrende; Ölverbrennung bei  $\lambda=1,37$

Eine verbesserte Darstellung des Verdampfungsvorgangs, im Hinblick auf eine Diskretisierung der Siedekurve des Heizöls durch einige reine Stoffe, würde die Genauigkeit des Brennstoff-

quellenfeldes steigern und damit eine bessere Vorhersage, auch des Maximalwertes, der Temperatur ermöglichen.

#### 5.4.4 Vergleich mit planar LIF Messungen

Die im Kapitel 4.2 vorgestellten Ergebnisse zeigten eine Abhängigkeit der Rezirkulationsrate von der Lage der Flammenfront. Um eine Beeinflussung der durch Simulation ermittelten Rezirkulationsrate, durch eine falsche Vorhersage der Flammenfront, auszuschließen wurden zur Verifikation planare LIF Messungen an OH-Radikalen durchgeführt (Radi et al. (1994)).

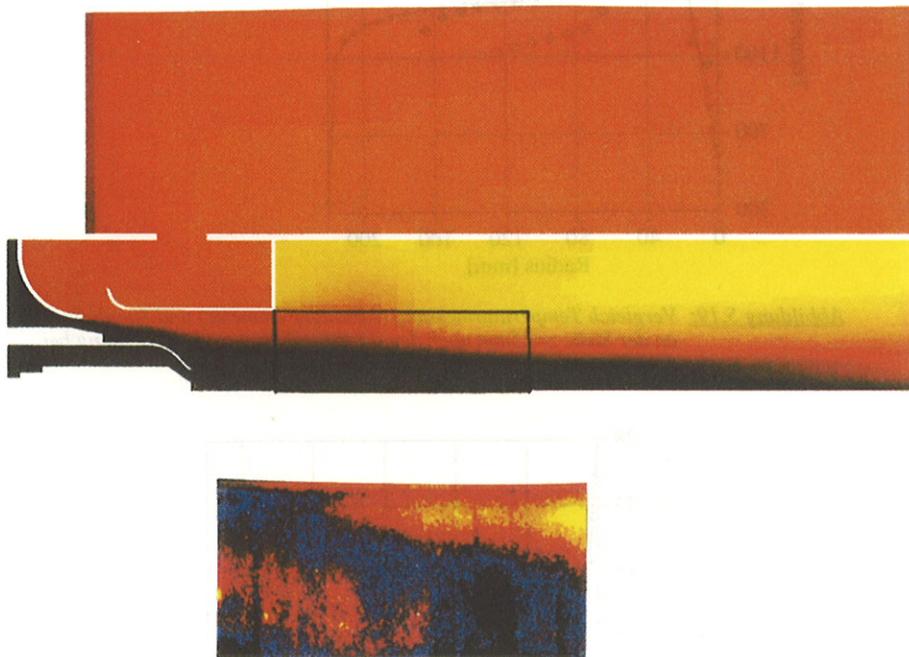


Abbildung 5.21a/b: Vergleich der Lage der Flammenfront; oberes Bild simuliertes Temperaturfeld; unteres Bild OH-Radikal Messung (LIF); Messung erfolgte innerhalb des im Temperaturfeld dargestellten Rahmens; Ölverbrennung bei  $\lambda=1,37$

Das in Strömungsrichtung erstmalige Auftreten von OH-Radikalen kann als Indikator für die Flammenfront angesehen werden. Da die Simulation sich auf die Beschreibung der Energiefreisetzung beschränkt, stehen keine Radikalkonzentrationen zum Vergleich mit Messungen zur Verfügung. Die Erzeugung von Radikalen und die damit einsetzende Verbrennung geht jedoch einher mit einer Energiefreisetzung, was zu einer Temperaturerhöhung führt. Ein qualitativer Vergleich von OH-Radikalkonzentrationserhöhung und Temperaturerhöhung wird damit möglich. Abbildung 5.21a/b zeigt im oberen Teil dargestellt, das durch Simulation ermittelte Temperaturfeld. Innerhalb des eingezeichneten Rahmens wurden am selben Brenner, der auch für die

übrigen Verifikationsmessungen verwendet wurde, OH-LIF Messungen durchgeführt. Das Ergebnis dieser Messungen ist im unteren Teil von Abbildung 5.21a/b dargestellt. Man erkennt deutlich sowohl eine Temperatur- als auch OH-Konzentrationserhöhung im oberen rechten Teil der Abbildungen. Aufgrund der Rezirkulation von heißen aber OH freien Abgasen ergibt sich ein Unterschied an der oberen linken Ecke. Bei den in Achsnähe, links unten, aufgetretenen Signalen handelt es sich nicht um OH-Radikale, sondern um Emissionen von dampfförmigem Brennstoff bzw. Reflexionen an kleinen, auf die Strahlachse mitgerissenen, Öltropfen. Für eine detaillierte Diskussion der Durchführung der Messungen, sowie der Störeinflüsse wird auf Radi (1994) verwiesen.

## 6 Zusammenfassung

Die Möglichkeit der Absenkung von Ruß und NO<sub>x</sub> Emissionen durch die Rezirkulation heißer Abgase führte zur weiten Verbreitung dieses Prinzips in fossilen Feuerungsanlagen. Aus anlagentechnischen Gründen setzten sich dabei zur Förderung des heißen Mediums Strahlpumpen durch, sofern die nötigen Fördergrade damit realisiert werden konnten.

Im Fall der als Serienprodukte vertriebenen Haushaltsbrenner, bei denen keine spezielle, konstruktive Anpassung an die Brennkammer erfolgt, zeigte sich, daß je nach Brennkammer, in der der Brenner betrieben wird, mit unterschiedlichem Betriebsverhalten gerechnet werden muß. Unterschiedliche Emissionen von Schadstoffen, insbesondere NO<sub>x</sub>, sowie Instabilitäten während der Startphase waren zu beobachten. Probleme dieser Art waren neu, und mit bisher üblichen Brennerkonstruktionen nicht in diesem Ausmaß festzustellen.

Die Klärung dieser global als Wechselwirkung von Brenner und Brennkammer umschriebenen Problematik steht im Mittelpunkt dieser Arbeit. Messungen der Stickoxidemission in Abhängigkeit der rezirkulierten Rauchgasmenge zeigen einen eindeutigen Zusammenhang auf. Jede Erhöhung der Rezirkulationsrate führt zu einer Verringerung des Stickoxidaustusses. Dies eröffnet die Möglichkeit, Aussagen zu der zu erwartenden Stickoxidemissionsänderung auf der Basis von Veränderungen der Rezirkulationsrate zu treffen.

Als primäre Untersuchungsmethode findet die numerische Simulation Anwendung, da sie sich durch eine hohe Flexibilität bezüglich geometrischen und physikalischen Zusammenhängen auszeichnet.

### 6.1 Modellbildung

Die untersuchte Fragestellung der Beeinflussung der Rezirkulationsrate steht in direktem Zusammenhang mit der Energiefreisetzung innerhalb der Brenner- und Brennkammerströmung. Chemische und oder reaktionskinetische Effekte für das Systemverhalten verantwortlich zu machen scheint ungerechtfertigt. Aus Gründen der Rechenzeiterspartnisse werden daher in dieser Arbeit nur Verbrennungsmodelle verwendet, welche auf die Beschreibung chemischer Detailvorgänge verzichten. Sie können daher auch als *Energiefreisetzungsmodele* betrachtet werden.

Das Ziel der Erfassung einzelner Einflüsse auf die Rezirkulationsrate mit Hilfe der numerischen Simulation war auf der Basis des bisher am Labor für Energiesysteme verwendeten Verbrennungsmodells (mixed=burned) nicht möglich.

Die Berechnung eines Rezirkulationsbrenners mit diesem Modell führt auf die Vorhersage einer ausblasenden Strömung anstatt einer Rezirkulation. Der Grund dieser falschen Vorhersage liegt in einem Informationsmangel des Modells bezüglich der möglichen auftretenden Zustände. Bei der Herleitung des Modells wird davon ausgegangen, daß jede Mischung zu einer Verbrennung und damit Energiefreisetzung führt. Dies ist eine für Diffusionsflammen, in einfachen geometrischen Verhältnissen und bei niedrigen Durchsätzen, berechtigte Annahme. In technischen Verbrennungssystemen, wie z.B. dem hier untersuchten Rezirkulationsbrenner, existieren jedoch oftmals Gebiete, in denen zwar Mischung stattfindet, eine Stabilisierung der Flamme aber aufgrund der lokalen Strömungszustände nicht möglich ist.

Um diesem Effekt Rechnung zu tragen wurde das Modell mit einem Zusatz erweitert, welcher die Zündfähigkeit des vorliegenden Gasgemisches anhand seiner Temperatur bewertet und nur bei Überschreiten einer vorzugebenden Zündtemperatur die Verbrennung zuläßt. Das erweiterte Modell wird wegen der Berücksichtigung der Zündfähigkeit als mixed+ignited=burned Modell bezeichnet.

Obwohl sich der Zündvorgang in Realität weit komplexer gestaltet (Abhängigkeit von einer Vielzahl anderer Größen) sind die wesentlichen auftretenden Effekte erfaßt. Das Modell ist in der Lage, die Ausbildung von rezirkulationsstabilisierten Flammenfronten qualitativ und abhängig von der geforderten Genauigkeit, auch quantitativ vorherzusagen. Dies gilt praktisch für alle in der technischen Anwendung auftretenden Brenner, da sich die Einführung von Rezirkulationsgebieten (bluff-body, Carnot Diffusoren, vortex-break-down) zur Stabilisierung, aufgrund des besseren Betriebsverhaltens, durchgesetzt hat. Die Berechnung der energiefreisetzenden Strömung innerhalb des untersuchten Rezirkulationsbrenners sowie der Rezirkulationsrate ist damit möglich.

Die Simulation des Strömungszustandes innerhalb einer ohne geometrische Vereinfachungen diskretisierten, serienmäßig erhältlichen Konfiguration, ermöglichte die Berechnung des Absolutwertes der Rezirkulationsrate und zeigt damit die Bedeutung dieser Methode für zukünftige industrielle Entwicklungen auf.

Anhand der Berechnung des isothermen Strömungsfeldes und dem Vergleich mit LDA-Messungen zeigt sich, daß integrale Größen, wie z.B. die Rezirkulationsrate, auf wenige Prozent genau durch numerische Simulationen ermittelt werden können.

Mit Hilfe einer qualitativen Methode zur Abschätzung des Lösungsfehlers wird zum einen gezeigt, daß die erreichte Genauigkeit nicht für alle Größen gleich ist. Zum anderen läßt sich feststellen, daß die Simulationen trotz des recht feinen Gitters noch nicht völlig frei sind von Lösungsfehlern, welche verursacht sind durch eine unzureichend feine Gitterdiskretisierung. Für die Durchführung von Simulationen in praxisnahen Geometrien und damit der Anwendung dieser Methode zur industriellen Entwicklung ergibt sich daraus zwangsläufig die Notwendigkeit der Abstützung durch Messungen, von gezielt ausgewählten Größen.

Der Vergleich von Axialgeschwindigkeitsprofilen führt zu einer weiteren, insbesondere für die Anwendung der numerischen Simulation auf industrielle Produkte, interessanten Erkenntnis. Bei den LDA-Messungen konnte eine Asymmetrie des Strömungsfeldes bezüglich der Brennergeometrie festgestellt werden, welche sich auf produktionssbedingte Bauteiltoleranzen zurückführen ließ. Eine Berücksichtigung dieser Asymmetrie in der numerischen Simulation erfordert die Berechnung eines in der Tangentialkoordinate mindestens  $180^\circ$  umfassenden Rechengebiets, und scheitert damit an den heute verfügbaren Rechenkapazitäten. Die Simulation von realitätsnahen Geometrien sollte sich daher sinnvollerweise auf Fragestellungen konzentrieren, welche entweder der Klärung der durch Bauteiltoleranzen hervorgerufenen Effekte dienen und das Rechengebiet stark einschränken, oder auf Zusammenhänge und Größen welche unbeeinflußt sind von diesen Effekten.

Mit der Auswahl des *Uniform-Temperature*-Ölverdampfungsmodells, welches sich in bisherigen Untersuchungen als geeignet erwiesen hat für die Anwendung unter Zuständen, wie sie für atmosphärische Brenner typisch sind, und dessen Einbindung in das fluiddynamische Rechenprogramm ist nun eine Methode aufgebaut, mit der es möglich ist die Ölverbrennung in realitätsnahen Geometrien zu simulieren. Damit werden wesentliche Einblicke in die Detailvorgänge der Ölverbrennung insbesondere der Tropfenausbreitung und Verdampfung möglich.

Besonderes Gewicht beim Aufbau des Gesamtmodells zur Ölverbrennungssimulation wurde auf ein ausgewogenes Verhältnis der Genauigkeit der Einzelmodelle gelegt. Da die Teilmobile aufeinander aufbauen, nützen einzelne hochgenaue Beschreibungen nichts, wenn die darauf folgenden Berechnungen diese Detailtreue nicht nutzen können. Die Verifikation des Gesamtmodells erfolgt anhand von Vergleichen mit LDA-Messungen der Axialgeschwindigkeit und der Rezirkulationsrate, Sondenmessungen von Axialgeschwindigkeit und Temperatur, sowie OH-LIF Messungen zur Bestimmung der Lage der Flammenfront innerhalb des Flammtohrs.

Die Vergleiche der gemessenen und simulierten Axialgeschwindigkeitsprofile ergeben eine gute Übereinstimmung. Dies gilt sowohl für die Profilform, als auch für den Maximalwert.

Für das mittels Absaugepyrometer gemessene und das simulierte Temperaturprofil ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung was die Form des Profils anbelangt, insbesondere die Position des Temperaturmaximums wird genau wiedergegeben. Die Absolutwerte hingegen weisen größere Abweichungen auf.

Mittels einer Korrektur der festgestellten Abhängigkeit der Rezirkulationsrate von der Temperatur des Rezirkulierten wird gezeigt, daß die Unterschiede zwischen gemessener und simulierter Rezirkulationsrate auf die Ungenauigkeiten des Temperaturfelds zurückzuführen sind. Weitere Einflüsse konnten nicht festgestellt werden.

## 6.2 Abhängigkeit der Rezirkulationsrate

Eine Parameterstudie zeigt die prinzipielle Erfäßbarkeit der Wechselwirkung von Brenner und Brennkammer durch die numerische Simulation, auf der Basis des mixed+ignited=burned Verbrennungsmodells. Die aus den Simulationen erhaltenen Ergebnisse, bezüglich der Veränderung der Rezirkulationsrate bei veränderter Brennkammergeometrie, stehen qualitativ in Einklang mit Messungen der Stickoxidemission bei verschiedenen Brennkammergeometrien.

Obwohl die Wechselwirkung von Brenner und Brennkammer in der Simulation erfäßt ist, kann eine Separation der Einzeleffekte (Änderung von Temperatur, Dichte, Geschwindigkeit, Wärmeübertragung etc.) aufgrund ihrer Koppelung nicht erfolgen. Die primäre Ursache der Änderung der Rezirkulationsrate ist weiterhin unbekannt und aus diesen Simulationen nicht ableitbar.

Eine Trennung dieser Koppelung ist jedoch mit einer speziellen Simulationsmethode möglich und die vorgestellten Rechnungen dieser Methode führen auf wesentliche Erkenntnisse über das Zusammenspiel der Einzeleffekte innerhalb des gekoppelten Systems.

Zur Durchführung der Berechnungen wird bewußt auf die Anwendung eines Verbrennungsmodells verzichtet, da dieses die Koppelung zwischen den Einzeleffekten herstellt. Statt dessen werden die für möglich erachteten geometrischen, fluid- oder thermodynamischen Zustände einzeln fest vorgegeben. Die jeweils anderen, dazugehörigen Zustände werden aus der numerischen Strömungssimulation ermittelt. Um Aussagen über das Systemverhalten zu gewinnen, muß jeder zu untersuchende Parameter in einer hinreichend feinen Abstufung variiert werden. Dies ist besonders zur Erfassung von nichtlinearen Zusammenhängen wichtig. Für die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse wurden z.B. mehr als 200 Strömungssimulationen durchgeführt.

Die wichtigsten Erkenntnisse aus diesen Simulationen mit direkter Variablenvariation sind die Abhängigkeit der Rezirkulationsrate von der:

- Temperatur des Rezirkulierten
- Lage der Flammenfront innerhalb des Flammrohres

Für den Einfluß der Temperatur des rezirkulierten Rauchgases kann ein Potenzgesetz angegeben werden, welches es ermöglicht, für jeden Rezirkulationsbrenner, innerhalb einer beliebigen Brennkammer, die Rezirkulationsrate zu berechnen. Dazu muß lediglich die Temperatur des rezirkulierten Rauchgases, sowie eine Referenz-Rezirkulationsrate bekannt sein.

Neben der Beeinflussung durch unterschiedliche Temperaturfelder, hervorgerufen von verschiedenen Brennkammergeometrien, ist insbesondere während der Startphase eine von der

typischen Rezirkulationstemperatur stark abweichende Temperatur in der Brennkammer vorhanden. Die beobachteten Probleme wahrend der Startphase konnen durch eine Veranderung der Rezirkulationsoffnungen, im Sinne einer Anpassung der Rezirkulationsrate an das bei Betriebstemperatur vorherrschende Niveau (Auslegungspunkt), behoben werden.

Das ermittelte Potenzgesetz konnte sowohl durch LDA-Messungen der Rezirkulationsrate, als auch durch eine analytische Ableitung anhand einer stark simplifizierten Rezirkulationsgeometrie bestatigt werden. Die analytische Ableitung eroffnet uber die Verifikationsmoglichkeit hinaus, weitere Einblicke in das Systemverhalten, insbesondere was die Einflusse der Dichte (Druck, Temperatur) und Geschwindigkeit des Treibstrahls anbelangt.

## 7 Literaturverzeichnis

- Borghi R. (1988): Turbulent Combustion Modeling; Prog. Energy Combustion Sci.; Vol 14 pp 245-292
- Buschulte W. (1976): Studie "MAN-Neue Technologie: Schadstoffarme Hausheizungen hoher Energieausnutzung (Systemanalyse) Abschnitt IV: Theoretische und experimentelle Grundlagen der Verbrennung"; pp 165-229; München
- Buschulte W. (1982): Der Raketenbrenner, eine Entwicklung zur Minderung von Energieverbrauch und Schadstoffausstoß bei Haushaltbrennern mit Leistungen um und unter 10kW; VDI 455; pp 139-151
- Buschulte W. (1985): Untersuchungen über die NOx-Reduzierung bei blaubbrennenden Haushaltsölbrennern; VDI 12. dt. Flammentag; pp 465-479
- Buschulte W. (1986): Schadstoffemissionen des "Raketenbrenners"; VDI 629; pp 79-102
- Burke S.P.; Schumann T.E.W. (1928): Diffusion Flames; Industrial and Engineering Chemistry; Vol 20; No 10
- BUWAL (1987): Vom Menschen verursachte Schadstoff-Emissionen in der Schweiz 1950-2010; erschienen in der Schriftenreihe Umweltschutz Nr. 76, Bundesamt für Umweltschutz
- ChaseM.W.; Curnutt Jr. J.L.; McDonal R.A. (1985): Janaf Thermochemical Tables; U.S. Department of Commerce; National Bureau of Standards; Third ed.; New York: American Institute of Physics
- Clift R.; Grace J. R.; Weber M.E. (1978): Bubbles, Drops and Particles; Academic Press
- Cox R.A. (1982): Chemical Transformation Processes for NOx Species in the Atmosphere; erschienen in *Air pollution by Nitrogen Oxides*; Elsevier Scientific Publishing Company
- Dreher H.; Suter P. (1991): Simulation der Gasverbrennung in einer realen Brenner/Brennkammerkonfiguration mit dem *mixed + ignited = burned* Modell; 15. Deutscher Flammentag; Bochum
- Dreher H.; Gass J.; Ochs M.; Schuler O.; Towers C.; Towers D. (1991): Basiswissen für low-NO<sub>x</sub>-Brenner- und Brennkammern; Zweiter Zwischenbericht NEFF 451; Labor für Energiesysteme; ETH Zürich
- Dreher H.; Gass J.; Schuler O.; Suter P. (1993): Optimization of Recirculating low-NO<sub>x</sub> Combustion Systems by Numerical Simulation; Second International Conference on Clean Air Environment; Lisbon
- EMPA (1987): Untersuchungsbericht Heizöl EL (D/EL); EMPA Nr. 101'259/1
- Faeth G. M. (1977): Current Status of Droplet and Liquid Combustion; Prog. Energy Combustion Sci.; Vol. 3

- Faeth G. M. (1987):Mixing, Transport and Combustion in Sprays; Prog. Energy Combustion Sci.; Vol. 13
- Fenimore C. P. (1971):Formation of Nitric Oxide in Premixed Hydrocarbon Flames; 13th. Symposium (Intern.) on Combustion
- Flamme M. (1989):Minimierung der Stickstoffoxidbildung bei der Verbrennung von Erdgas mit starker Luftvorwärmung in Hochtemperaturprozessen; Dissertation Ruhr-Universität Bochum
- Flury M. (1993):3D-LDA Messungen an einem 100kW Rezirkulations-Ölbrenner; Interner Bericht Labor für Energiesysteme; ETH Zürich
- Foli A K. (1991)Impuls- und Energieaustausch in Kleinfreuerungen; Dissertation RWTH Aachen
- Friedrich R. (1992):Grobstruktursimulation turbulenter Strömungen; Vortrag innerhalb des Turbulenz-Lehrgangs; Universität Erlangen; Lehrstuhl für Störungsmechanik
- Frössling N. (1938):Über die Verdunstung fallender Tropfen; Gerlands Beiträge zur Geophysik; Band 52; Akademische Verlagsgemeinschaft Leipzig
- Gardiner W.; Lissianski V.; Okoroanyanwu U.; Yang H.; Zhao M.(1993):Chemistry of NO<sub>x</sub> Reactions in High Temperature Gas Mixture containing Hydrocarbon Radicals; Second International Conference on Combustion Technologies for a Clean Environment; Lisbon; sowie persönliche Mitteilung
- Gosman A.D.; Ioannides E. (1983):Aspects of Computer Simulations of Liquid-Fueled Combustors; Journal of Energy; Vol. 7
- Hommel G. (1987):Handbuch der gefährlichen Güter; Springer
- Hoffmann H (1986):Turbulente Bunsenflammen Struktur und Flammengeschwindigkeit; Dissertation Universität Karlsruhe; Engler Bunte Institut
- Jaekel G.; Oden V.; Stasik M. J.; Zahn R.; Forweg W. (1980):Wirkung von Luftverunreinigungen; aus Ullman: *Enzyklopädie der technischen Chemie*; Band 6; S. 243 ff.; Verlag Chemie; Weinheim
- Karniadakis G.E.; Orszag A. (1993):Nodes, Modes and Flow Codes; Physics Today; Special Issue: High-Performance Computing and Physics; March
- Kessler R.; Peric M.; Scheuerer G. (1988):Solution Error Estimation in the Numerical Predictions of Turbulent Recirculating Flows; AGARD-CP No. 437: Validation of Computational Fluid Dynamics; Vol. 2; pp. P9-1-P9-12
- Klausmann W. (1989):Untersuchung zur turbulenten Tropfenbewegung und Verdampfung unter brennkammertypischen Strömungsbedingungen; Dissertation Universität Karlsruhe; Lehrstuhl und Institut für Thermische Strömungsmaschinen
- Kneer R.; Wittig S. (1989):Grenzen der Abmessungen von Ring- und Rohrbrennkammern kleiner Baugröße - Abstimmung von Zerstäubung und Strömungsparametern bei hohen Drücken und Temperaturen; Interner Bericht Lehrstuhl und Institut für Thermische Strömungsmaschinen; Universität Karlsruhe

- Kneer R.; Schneider M.; Noll B.; Wittig S. (1992):Effects of Variable Liquid Properties on Multicomponent Droplet Vaporization; ASME 92-GT-131
- Kremer H. (1975):Schadstoffemissionen von Ölfernern niedriger Leistung mit Druckzerstäubung unter verschiedenen Betriebsbedingungen; VDI 246; pp 199-210
- Kremer H.; Otto D. (1981):NOx-Emission von Heizungsanlagen mit Öl- und Gasfernern; Gas Wärme international Bd. 30; Heft 1. Januar
- Li X.; Chin L.P.; Tankin R.S.; Jackson T.; Stutrud J.; Switzer G. (1991):Comparison between Experiments and Predictions based on Maximum Entropy for Sprays from a Pressure Atomizer; Combustion and Flame; No. 86; pp 73-89
- Löffler-Mang M. (1992):Düsinnenströmung, Tropfenentstehung und Tropfenausbreitung bei Rücklaufgeregelten Drall-Druckzerstäubern; Dissertation Universität Karlsruhe; Engler Bunte Institut
- McDonell V. G.; Samuels S. (1991):Gas and Drop Behavior in Reacting and Non-Reacting Air-Blast Atomizer Sprays; J. Propulsion; Vol. 7 No. 5; pp 684-691
- Magnussen B.F.; Hjertager B.H.(1976):On Mathematical Modeling of Turbulent Combustion with Special Emphasis on Soot Formation and Combustion; 16th. Symposium (Intern.) on Combustion
- Mahmens (1982):Anwendungstechnische Erfahrungen mit dem Raketenbrenner; VDI 455; pp 153-160
- Minkenberg J. (1991): Ölgefeuerte Kleinbrenner: Berechnung und Vermessung der Flamme; Dissertation RWTH Aachen
- Noll B.E. (1986): Numerische Berechnung brennkammertypischer Ein- und Zweiphasenströmungen; Dissertation Universität Karlsruhe; Lehrstuhl und Institut für Thermische Strömungsmaschinen
- Noll B.E. (1992): Möglichkeiten und Grenzen der numerischen Beschreibung von Strömungen in hochbelasteten Brennräumen; Habilitation Universität Karlsruhe; Lehrstuhl und Institut für Thermische Strömungsmaschinen
- Ochs M. (1993):Bestimmung der Durchmesser und Geschwindigkeitsverteilung einer Hohlkegeldüse mittels PDPA; Interne Bericht Labor für Energiesysteme; ETH Zürich
- Ochs M. (1993b):Basiswissen für low-NO<sub>x</sub>-Brenner- und Brennkammern; Schlußbericht Phase I; NEFF 451; Labor für Energiesysteme; ETH Zürich
- Patankar S. V. (1980):Numerical Heat Transfer and Fluid Flow; Hemisphere Publishing Corporation
- Philipp M. (1991):Experimentelle und theoretische Untersuchung zum Stabilitätsverhalten von Drallflammen mit zentraler Rückströmzone; Dissertation Universität Karlsruhe; Engler Bunte Institut
- Radi P.; Mischler B.; Gerber T.; Dreher H.; Lehmann B.; Ochs M. (1994):Imaging of OH in a 100kW Oil Burning Furnace by use of a Broadband Excimer Laser; submitted to Apl. Phys. B

- Raw M.J.; Galpin P.F.; Hutchinson B.R.; Raithby G.D.; van Doormaal J.P. (1993): An Element Based Finite-Volume Method for Computing Viscous Flows; ASC Ltd.; Waterloo; Ontario; Canada N2L 5Z4
- Reid R.C.; Prausnitz J.M.; Poling; B.E.(1987): The Properties of Liquids & Gases; Mc Graw Hill; Fourth Edition
- Rodi W. (1984): Turbulence Models and their Application in Hydraulics; International Association for Hydraulic Research; Delft
- Røkke N. A.. (1993): Persönliche Mitteilungen; SINTEF; Trondheim
- Ruck B. (1988): LDA-Hochschulkurs; Universität Karlsruhe; Institut für Hydromechanik; sowie Buch Laser-Doppler-Anemometrie; AT Fachverlag; Stuttgart
- Sandkuhl L. (1989): Untersuchung des Emissionsverhaltens von intermitierend betriebenen Ölzerstäubungsbrennern an Kesseln unterschiedlicher Bauart Dissertation; RWTH Aachen
- Scheuerer G. (1993): Persönliche Mitteilungen; ASC GmbH; Holzkirchen
- Schönung B. E. (1990): Numerische Strömungsmechanik; Springer Verlag
- Schuler O. (1993): Basiswissen für low-NO<sub>x</sub>-Brenner- und Brennkammern; Schlußbericht Phase I; NEFF 451; Labor für Energiesysteme; ETH Zürich
- Silverberg P.M.; WenzelL.A. (1965): The Variation of Latent Heat with Temperature; Journal of Chemical and Engineering Data; Vol. 10; No.4; pp 363-366
- Urbach W. (1988): Wirkungen von Umweltschadstoffen (SO<sub>2</sub>, O<sub>3</sub>, NO<sub>x</sub>) auf die Photosynthese intakter Pflanzen; Abschlußbericht Forschungsvorhaben im Gesamtprojekt "Waldschadensforschung und Wirkungen von Umweltschadstoffen" des StMLU
- VDI-Wärmeatlas (1988): Berechnungsblätter für den Wärmeübergang; 5. erweiterte Auflage; VDI-Verlag
- Warnatz J.; Maas U. (1993): Technische Verbrennung; Springer Verlag
- Warnatz J.; Behrendt F. (1989): Simulation von laminaren Gegenstromdiffusionsflammen; 5. Tecflam Seminar; Stuttgart
- Watson K.M. (1943): Thermodynamics of the Liquid State-Generalized Prediction of Properties; Industrial and Engineering Chemistry;
- Weber R. (1993): Mathematical Modelling of Full Industrial Scale Combustion Equipment; Vortrag innerhalb des Joint IFRF-SIFF Seminar on Numerical Combustion; Baden (CH); 17./18. May
- Zeldovitch (1946): The Oxidation of Nitrogen in Combustion and Explosions; Acta Physicochimica; U.R.S.S.
- Zinser W. (1985): Rauchgasrückführung als NO<sub>x</sub>-Minderungsmaßnahme bei der Verfeuerung von leichtem und schwerem Heizöl; 1. Tecflam-Seminar: Schadstoffe bei Verbrennungsprozessen; Heidelberg

## A Stoffdaten von Tetradekan ( $C_{14}H_{30}$ )

$$p_{satt} = \exp \left[ A - \frac{B}{T_f + C} \right] \quad [\text{Pa}]$$

Sattdampfdruck aus der Cox Antoine Gleichung (Reid et al. (1987))

A	21.04
B	4008.5
C	-105.4

Gültigkeitsbereich:  $394\text{K} < T < 560\text{K}$

Konstanten der Dichtegleichung für flüssiges Tetradekan (Spencer und Adler (1975))

$$M_t = 198.4 \text{ [kg/kmol]}$$

$$p_k = 16.2 * 10^5 \text{ [Pa]}$$

$$T_k = 694 \text{ [K]}$$

$$ZRA = 0.24322$$

Gültigkeitsbereich:  $276\text{K} < T < 553\text{K}$

Verdampfungsenthalpie (Watson (1943))

$$\Delta Hv_2 = \Delta Hv_1 \left( \frac{1 - T_{r2}}{1 - T_{r1}} \right)^n$$

$$T_k = 694 \text{ [K]}$$

$$n = 0.38$$

$$\Delta Hv_1(T_{Siede}) = 241 \text{ [kJ/kg]}$$

$$T_{Siede} = 526.7 \text{ [K]}$$

Binärer Diffusionskoeffizient für Tetradekan (dampfförmig) (VDI-Wärmeatlas (1988))

$$\Gamma_0 = 2.77 * 10^{-6} \text{ [cm}^2/\text{s}]$$

Gültigkeitsbereich:  $0.1\text{bar} < p < 10\text{bar}$

Spezifische Wärmekapazität für Tetradekan (flüssig, VDI-Wärmeatlas (1988))

$$c_p(T=293\text{K}) = 2.186 \text{ [kJ/kg K]}$$

Normal Dichte (flüssig, Reid et al. (1987))

$$\rho(T=293\text{K}) = 0.763 \text{ [kg/m}^3]$$

## B Spezifische Wärmekapazität (Gase)

Die verwendeten spezifischen Wärmekapazitäten sind den Janaf Tables entnommen (Chase et al. (1985)) und wurden mit Polynomen dritten Grades approximativ abgebildet.

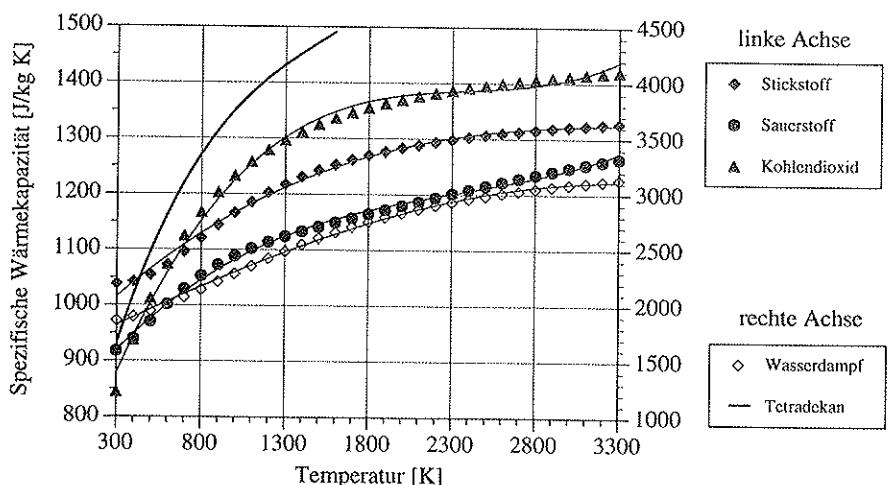
$$\text{Tetradekan:}^1 \quad c_p = \frac{1000}{198.4} \left( -10.98 + 1.338 T - 7.423 \cdot 10^{-4} T^2 + 1.598 \cdot 10^{-7} T^3 \right) \text{ [J/kg K]}$$

$$\text{Stickstoff:} \quad c_p = 929.528 + 0.3096 T - 7.988 \cdot 10^{-5} T^2 + 6.7502 \cdot 10^{-9} T^3 \text{ [J/kg K]}$$

$$\text{Sauerstoff:} \quad c_p = 812.923 + 0.3943 T - 1.463 \cdot 10^{-4} T^2 + 2.0929 \cdot 10^{-8} T^3 \text{ [J/kg K]}$$

$$\text{Wasserdampf:} \quad c_p = 1590.8 + 0.7737 T - 5.2692 \cdot 10^{-5} T^2 - 1.2764 \cdot 10^{-8} T^3 \text{ [J/kg K]}$$

$$\text{Kohlendioxid:} \quad c_p = 636.491 + 0.9099 T - 3.739 \cdot 10^{-4} T^2 + 5.2068 \cdot 10^{-8} T^3 \text{ [J/kg K]}$$

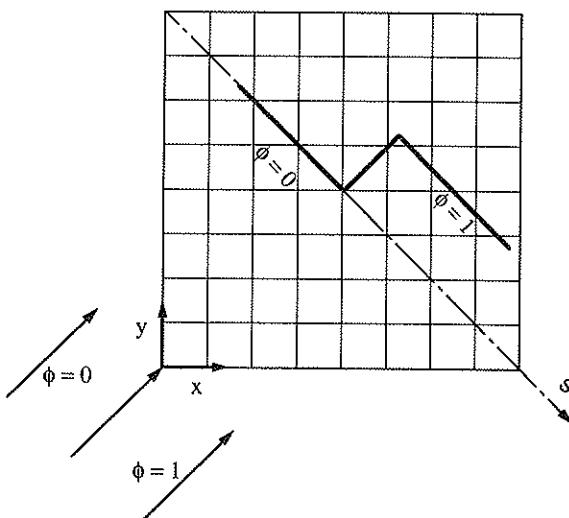


*Abbildung B1:* Spezifische Wärmekapazität von verschiedenen Gasen nach Janaf (Chase et al. (1985)); (Polynomfit dritter Ordnung)

<sup>1</sup> dampfförmig, nach Reid et al. (1987)

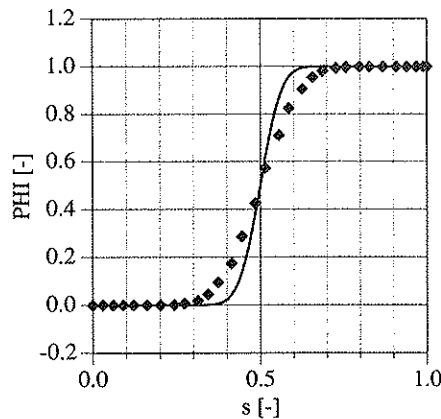
## C Diskretisierungsverfahren

Die in Abbildung C.1 gezeigte Situation stellt einen Testfall für die Beurteilung der Güte von Diskretisierungsverfahren dar. Ein kartesisches, äquidistantes Gitter von 30/30 (x/y) Gitterzellen löst einen quadratischen Simulationsraum der Diagonallänge 1m auf. Eine Strömung mit der Geschwindigkeit  $u(x)=u(y)=1$  m/s (Anströmung unter 45 Grad) wird vorgegebenen. Gelöst wird eine Transportgleichung, für ein von der Strömung mittransportiertes, konserviertes Skalar  $\phi$  (z.B. eine Konzentration). Entlang der unteren Rechengebietsgrenze wird die Größe  $\phi$  auf den Wert 1 gesetzt, entlang der linken Rechengebietsgrenze auf Null. Setzt man, zur Berechnung der Ausbreitung des Skalars im Rechengebiet, die effektive Viskosität der Strömung identisch Null, so wäre nur ein Transport in Stromlinienrichtung zu erwarten, ein Queraustausch sollte nicht vorhanden sein. Das Skalar  $\phi$  über der Koordinate  $s$  aufgetragen sollte also, wie in Abbildung C.1 dargestellt, an der Stelle  $s=0.5$  von Null auf Eins springen.

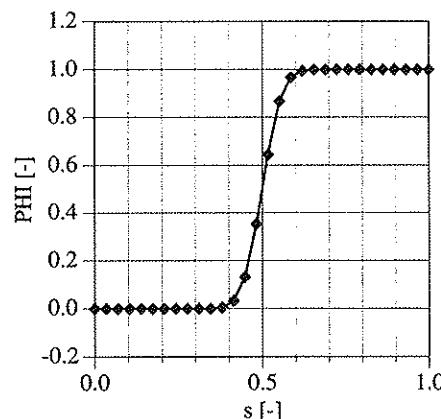


*Abbildung C.1: Testfall zur Beurteilung von Diskretisierungsverfahren*

Für das UPWIND Verfahren (**UPS**, erster Ordnung) ergibt sich der in Abbildung C.2 dargestellte Verlauf. Die Lösung für das Linear Profile Scheme (**LPS**, Raw et al. (1993)) Diskretisierungsverfahren ist in Abbildung C.3 dargestellt.



*Abbildung C.2:* Lösungen des Strömungsproblems aus Abbildung C.1, für verschiedene feine Gitter (Punkte: 30x30; Linie: 100x100) beim UPS Diskretisierungsverfahren (erste Ordnung)



*Abbildung C.3:* Lösung des Strömungsproblems aus Abbildung C.1, für das 30x30 Gitter beim Linear Profile Scheme (LPS) Diskretisierungsverfahren (höhere Ordnung)

## D Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1.1	Stickoxid-Emissionen 1984 in der Schweiz (in Tonnen)	3
Abbildung 1.2	Stickoxid-Emissionen des Verkehrs in der BRD nach Straßentyp.	4
Abbildung 1.3	Geschätzter Anteil der privaten Haushalte an der Stickoxid-Emission	4
Abbildung 1.4	Relativer Fehler in der Reaktionsgeschwindigkeitskonstante $k_{NO}$ für die Basistemperatur 2000 K	6
Abbildung 2.1a/b	Auswirkungen der Rezirkulation auf die Mischtemperatur der Verbrennungsluft und die Sauerstoffkonzentration	9
Abbildung 2.2	Raketenbrenner, nach Buschulte (1986)	10
Abbildung 2.3	Zusammenhang von Flammentemperatur, Luftzahl, rezirkulierter Menge (FR), Temperatur des Rezirkulierten (TR) und thermischem NO <sub>x</sub> , für einen geschätzten Temperatur-Zeit-Verlauf (nach Kremer (1975))	11
Abbildung 2.4:	NO <sub>x</sub> Emission als Funktion des Rezirkulationsfaktors (Flamme (1989))	13
Abbildung 3.1:	Borghi Diagramm	21
Abbildung 3.2:	laminare Vormischflamme	22
Abbildung 3.3:	Zusammenhang zwischen der mixture fraction und den Gas-, Oxidant-, Produkt- und Inertgaskonzentrationen	25
Abbildung 3.4:	Der mixed + ignited = burned Algorithmus	26
Abbildung 3.5:	Der Zusammenhang zwischen der mixture fraction und den Konzentrationen beim mixed + ignited = burned Modell, im Fall der Mischungsrechnung	27
Abbildung 3.6:	Filmzerfall durch Zerwellen (nach Löffler-Mang (1992))	29
Abbildung 3.7:	Doppelpuls Fotografie (10ms) einer 80° Hohlkegeldüse mit 1.6kg/h Durchsatz (Wasser)	30
Abbildung 3.8:	Abhängigkeit des Widerstandsbeiwertes von der Tropfen Reynoldszahl	33
Abbildung 3.9:	Siedekurve von Heizöl EL nach EMPA (1987)	34
Abbildung 3.10:	Temperatur- und Konzentrationsverteilung am Einzeltropfen	36
Abbildung 4.1:	Vereinfachte Geometrie des Rezirkulationsgasbrenners in einer Zwei-Zug Brennkammer	39

D Abbildungsverzeichnis	101
Abbildung 4.2: Vereinfachte Geometrie des Rezirkulationsgasbrenners in einer Drei-Zug Brennkammer	40
Abbildung 4.3: Prinzipschema zur Vorgehensweise bei der direkten Variablenvariation	45
Abbildung 4.4: Rezirkulationsrate als Funktion der gesetzten Temperatur (T <sub>Fl</sub> ) und des Brennkammerradius (aus Gründen der Anschaulichkeit ist die Rezirkulationsrate negativ aufgetragen)	46
Abbildung 4.5: Rezirkulationsrate als Funktion der Temperatur des angesaugten Rauchgases (für BKR=220mm)	47
Abbildung 4.6: Prinzipschema zur Vorgehensweise	48
Abbildung 4.7: Rezirkulationsrate als Funktion der Temperatur im Flammrohr (T <sub>Fl</sub> ) und der Temperatur des Rezirkulats (T <sub>Rez</sub> )	49
Abbildung 4.8: Prinzipschema zur Vorgehensweise	51
Abbildung 4.9: Rezirkulationsrate als Funktion der Lage der Flammenfront	51
Abbildung 4.10: Verlauf des relativen statischen Drucks für 3 verschiedene Positionen der Flammenfront (T <sub>Fl</sub> ≈ 700K)	52
Abbildung 4.11: Schematische Darstellung zur Ableitung von Gleichung (4.3)	53
Abbildung 4.12: Statischer Druck neben der Flammenfront (stromab)	54
Abbildung 4.13: Verlauf des statischen Druckes für T <sub>Fl</sub> =1200K und T <sub>Fl</sub> =700K (CD-FF=20mm), mit T <sub>Rez</sub> =T <sub>Fl</sub>	55
Abbildung 4.14 : Stark vereinfachte Geometrie zur analytischen Lösung	56
Abbildung 4.15: Analytische Lösung für identische Medien „1“ und „2“	57
Abbildung 4.16: Analytische Lösung für zwei unterschiedliche Medien Luft „1“ und Rauchgas „2“	58
Abbildung 4.17: Rezirkulationsrate als Funktion der Treibstrahltemperatur T <sub>1</sub>	60
Abbildung 4.18: Rezirkulationsrate als Funktion der Treibstrahltemperatur T <sub>1</sub>	61
Abbildung 4.19 Rezirkulationsrate als Funktion der Geschwindigkeit u <sub>1</sub>	62
Abbildung 5.1: Simulierte Brenner/Brennkammer Konfiguration (dreidimensional)	63
Abbildung 5.2: Simulierte Brenner/Brennkammer Konfiguration, Ausschnitt aus Abbildung 5.1 (Brenner)	64
Abbildung 5.3a: Gitter für den isothermen Fall (Ebene 10°), Gesamtansicht	65
Abbildung 5.3b: Gitter für den isothermen Fall (Ebene 10°), Ausschnitt Brenner	65

Abbildung 5.4:	Geschwindigkeitsfeld isothermer Fall (Ebene 10°), Ausschnitt Brenner	67
Abbildung 5.5:	Asymmetrisches Strömungsfeld des Brenners	68
Abbildung 5.6:	Vergleich Simulation (LPS) und Messung (horizontal) an der Stelle x=45mm nach dem Flammrohrende (Messung in radialer Richtung um 45mm verschoben, negative Flanke gespiegelt)	69
Abbildung 5.7:	Lösungsfehler in der Axialgeschwindigkeit $((u_{LPS}-u_{MWS})/u_{max,LPS})$ in [%], Bezugswert 57m/s, Fehlerbandbreite: -8,5 bis 13,3 %, Ausschnitt Brenner	71
Abbildung 5.8:	Lösungsfehler in der turbulenten kinetischen Energie $((tkc_{LPS}-tke_{MWS})/tkemax,LPS)$ in [%], Bezugswert 113m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup> , Fehlerbandbreite: -7,4 bis 22,6 %, Ausschnitt Brenner	71
Abbildung 5.9:	Ablaufdiagramm zur Modellierung der Ölverbrennung	73
Abbildung 5.10:	Versuchsaufbau zur PDPA Messung, Koordinatenbezeichnungen	74
Abbildung 5.11:	Verteilung Durchmesser-Massenhäufigkeit, PDPA Messung der 80° Hohlkegeldüse	75
Abbildung 5.12:	Verteilung Durchmesser-Axial-/Radialgeschwindigkeit, PDPA Messung der 80° Hohlkegeldüse	76
Abbildung 5.13:	Verteilung Axialgeschwindigkeit (vx), -Radialgeschwindigkeit (vy), PDPA Messung der 80° Hohlkegeldüse	77
Abbildung 5.14a:	Diskretisierte Verteilung Durchmesser-Massenfluß, 10 Klassen	77
Abbildung 5.14b:	Summenform der diskretisierten Verteilung der Durchmesser-Massenhäufigkeit, verglichen mit PDPA Messung	78
Abbildung 5.15:	Summenform der Verteilung Durchmesser-Massenhäufigkeit, Anfangsbedingungen für die Tropfenbahnenintegrationen	79
Abbildung 5.16:	Vergleich Simulation und Messung an der Stelle z=45mm nach dem Flammrohrende (Messung in y Richtung um 18mm verschoben) Ölverbrennung bei l=1,27	82
Abbildung 5.17:	Geometrische Grundkonfiguration für die Sondenmessungen	83
Abbildung 5.18:	Vergleich 5-Loch Sondenmessung und Simulation an der Stelle z=25mm nach dem Flammrohrende	84
Abbildung 5.19:	Vergleich Temperaturmessung (Absaugepyrometer) und Simulation an der Stelle z=25mm nach dem Flammrohrende	85
Abbildung 5.20:	Massenstromprofil (Simulation), an der Stelle z=25mm nach dem Flammrohrende	85
Abbildung 5.21a/b:	Vergleich der Lage der Flammenfront	86

D Abbildungsverzeichnis 103

Abbildung B1:	Spezifische Wärmekapazität von verschiedenen Gasen nach Janaf (Chase et al. (1985))	97
Abbildung C.1:	Testfall zur Beurteilung von Diskretisierungsverfahren	98
Abbildung C.2:	Lösungen des Strömungsproblems aus Abbildung C.1, für verschiedene feine Gitter (Punkte:30x30)	99
Abbildung C.3:	Lösung des Strömungsproblems aus Abbildung C.1, für das 30x30 Gitter beim Linear Profile Sceme (LPS) Diskretisierungsverfahren (höhere Ordnung)	99

## E Tabellenverzeichnis

Tabelle 2.1:	Primärmaßnahmen zur Beeinflussung der Schadstoffemission	8
Tabelle 3.1:	Bedeutung der verschiedenen Symbole in Gleichung (3.7) für die unterschiedlichen Repräsentationen der universellen Transportgleichung	18
Tabelle 3.2:	Vergleich der Stoffwerte heizölähnlicher Substanzen	35
Tabelle 4.1:	Randbedingungen der Simulationen mit dem mixed + ignited = burned Modell	41
Tabelle 4.2:	Rezirkulationsrate als Funktion der Brennkammergeometrie, Ergebnisse der Simulation mit dem mixed + ignited = burned Verbrennungsmodell	41
Tabelle 4.3:	Mögliche Einflußgrößen auf die Rezirkulationsrate	44
Tabelle 4.4:	Durchgeführte numerische Parameterstudien	44
Tabelle 4.5:	Annahmen zur analytischen Lösung	56
Tabelle 4.6:	Werte der jeweils nicht variierten Größen	59
Tabelle 4.7:	Exponenten für verschiedene Druckverlustbeiwerte	59
Tabelle 5.1:	Randbedingungen der isothermen Simulation	66
Tabelle 5.2:	Anfangsbedingungen und Stoffgrößen der Flüssigkeitsphase	80
Tabelle 5.3:	Randbedingungen der Simulation mit Energiefreisetzung	80
Tabelle 5.4:	Modellparameter der Simulation mit Energiefreisetzung	81