

Jahresbericht 1998

Über die Arbeiten gemäss Auftrag: EF – 55100

Titel des Projektes: NO_x-Modellierung mittels PDF-Transportgleichungen

Zusammenfassung:

Neben der experimentellen und der theoretischen Untersuchung spielen Simulationen auf dem Gebiet der Verbrennungsforschung eine wichtige Rolle. Wachsende Computerkapazitäten ermöglichen dabei die Untersuchung komplexer Modelle für turbulente reaktive Strömungen. Insbesondere die Vorhersage der Hauptspezies sowie der Schadstoffbildung sind von allgemeinem Interesse. Experimentelle Daten werden zur Validierung von Ergebnissen herangezogen.

Das Projekt behandelt die Gasverbrennung von Wasserstoff und Methan. Während bei der Wasserstoffverbrennung die Bildung thermischen Stickstoffoxyds im Vordergrund steht, spielt bei der Verbrennung von Methan ebenso die Bildung von prompt Stickstoffoxyd eine wichtige Rolle. Die Erweiterung des bestehenden Programm-Moduls durch die erforderlichen Reaktionsmodelle soll es ermöglichen, Vorhersagen zu treffen, die später bei einer Entwicklung von realen Brennern Anwendung finden können.

Vergleichende Berechnungen einer Wasserstoff-Flamme mit einem einfachen Eddy Dissipation Model, bestehenden Daten aus einer PEUL (Probabilistic Euler Lagrange) Model Berechnung und PDF (Probability Density Function)-Simulationen zeigten das Potential der PDF-Methode. Die Mittelwerte des Strömungsfeldes und der Hauptspezies konnten sehr gut wiedergegeben werden. Für die Bestimmung von Radikalen und insbesondere von Schadstoffen wird derzeit eine Koppelung des Repro-Modelling für die Behandlung des chemischen Quellterms mit dem PDF-Programm vorgenommen.

Dauer des Projektes: : 1. Januar 96 – 31. Dezember 98, verlängert

Beitragsempfänger: Institut für Energietechnik, ETH

Berichterstatter: Dr. J. Gass und A. Obieglo

Adresse: Laboratorium für Thermodynamik in neuen Technologien
ETH-Zentrum

Telephon: 8092 Zürich
01 632 54 45 (Gass)
gass@ltnt.iet.mavt.ethz.ch
<http://www.ltnt.ethz.ch>

Projektziele

Die Ziele des Projektes NO_x -Modellierung in nicht vorgemischten Systemen mittels PDF-Transportgleichungen lassen sich in folgende Abschnitte einteilen:

- Koppelung des Strömungslösers CFX-TASCflow mit dem PDF-Transportgleichungscode, der am ICA (Institut für Computeranwendungen) Stuttgart entwickelt wurde.
- Einarbeitung des Doktoranden in CFD anhand einer konkreten Aufgabe, sowie Einarbeitung in die Programme CFX-TASCflow und PDF/Monte Carlo.
- Erweiterung des Programmoduls. Als erster Schritt wird die Implementierung der Wasserstoff-Chemie durchgeführt. Die Erweiterung soll anhand von Vergleichen mit experimentellen Daten und Berechnungen früherer Arbeiten am Labor validiert werden. Für die Vorhersage der Stickoxidbildung sind zusätzliche Erweiterungen notwendig. Nach der Behandlung der Wasserstoff-Chemie ist die Behandlung der Methanverbrennung vorgesehen.

In diesem Jahr lag der Schwerpunkt auf der Erweiterung des Programmoduls und der Durchführung von Rechnungen. Die ersten beiden Punkte wurden bereits abgeschlossen.

Arbeiten und Ergebnisse

Auf dem Gebiet der Verbrennungsforschung gewinnt die numerische Simulation immer stärker an Bedeutung und ergänzt die experimentellen und theoretischen Forschungen. Für die Validierung durchgeführter Berechnungen sind Vergleiche mit experimentellen Daten unerlässlich, um Voraussagen treffen zu können. Es hat sich als sinnvoll erwiesen, ähnlich wie auf dem Gebiet der Turbulenz-Forschung, Standardfälle zu definieren, an denen unterschiedliche Modelle getestet werden können. Ein internationaler Workshop ist seit 1996 damit beschäftigt, einen Satz von Standardflammen aufzustellen: umfassende Messungen der charakteristischen Größen ermöglichen einen genauen Vergleich der angewandten Modelle und Methoden. Daher wurde auch in unserem Fall eine dieser Standardflammen, eine Wasserstoff-Diffusions-Flamme, ausgewählt (siehe Abbildung 1), um die Vergleiche der PDF-Rechnungen mit dem Experiment durchführen zu können. In der Abbildung ist eine Skizze der verwendeten Flammgeometrie zu sehen. Dabei handelt es sich um einen Wasserstoffsstrahl der mit einer mittleren Geschwindigkeit von $u = 296 \text{ m/s}$ durch ein Rohr mit Durchmesser $D = 3.75 \text{ mm}$ einströmt und von einem Luftstrom mittlerer Geschwindigkeit von 1 m/s eingeschlossen ist. Die Reynoldszahl für diese Konfiguration beträgt 10000.

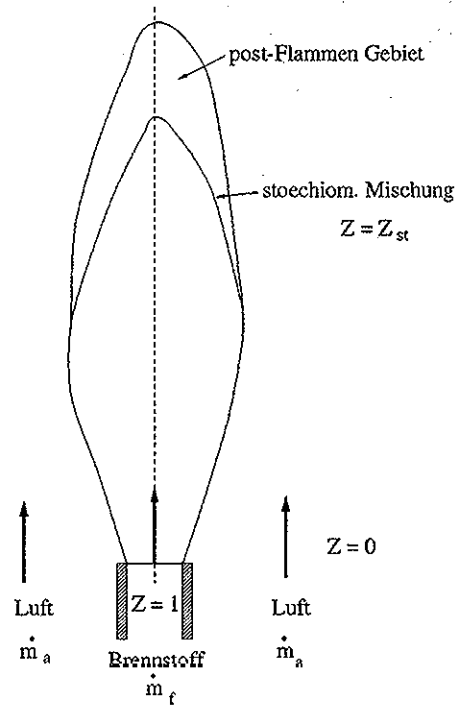


Abb.1 Schema der Wasserstoff-Diffusions-Flamme

Gitterunabhängige Lösung

Bei der PDF-Methode ist die Zahl der möglichen Gitterpunkte beschränkt. Durch geeignete Wahl der Gitterverfeinerungen ist es trotzdem möglich, gitterunabhängige Lösungen zu finden; das bedeutet, dass eine weitere Verfeinerung des gewählten Gitters keine Verbesserung der Rechengenauigkeit mit sich bringt. Für die Berechnung des Strömungsfeldes im PDF-Fall wurde ein Gitter mit $131 \times 51 \times 3$ Knoten gewählt, das im Einlassbereich sowie um die Mittelachse verfeinert wurde und radial nach aussen grober wird. Als Vergleich diente ein feineres Gitter mit einer dreimal grösseren Knoten-Gesamtzahl als im PDF Fall. Die Ergebnisse zeigten keine signifikanten Unterschiede der Geschwindigkeitsprofile. Diese Beobachtung lässt den Schluss zu, dass es sich um eine gitterunabhängige Lösung handelt.

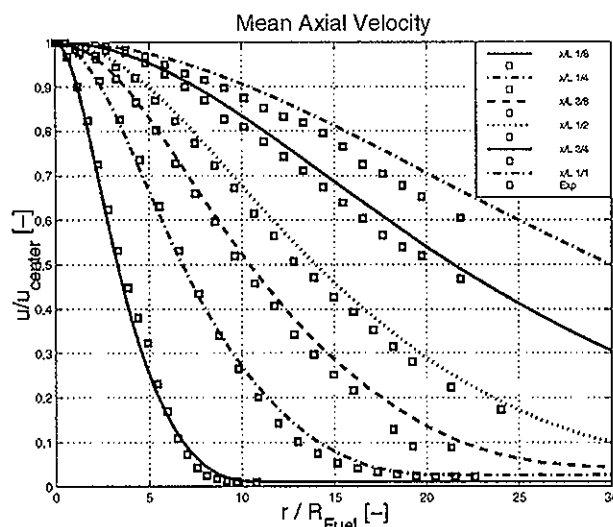


Abb.2 Normalisierte Geschwindigkeitsprofile verglichen mit experimentellen Daten.

Die sichtbare Flammenlänge L beträgt 675 mm

In der oberen Abbildung sind die in Bezug auf die Einströmgeschwindigkeit normalisierten Geschwindigkeitsprofile über dem (bezüglich des Düsenradius) normalisierten Radius aufgetragen. Es handelt sich dabei um verschiedene Schnittebenen entlang der sichtbaren Flamme. Die sichtbare Flammenlänge L ist mit 675 mm aus dem Experiment gegeben. Der Abstand vom Brennstoffaustritt aus dem Rohr ist mit x gegeben. Die experimentellen Daten wurden mittels LDA Messungen gewonnen, die in unserer Gruppe durchgeführt wurden [10]. Die Berechnungen zeigen eine gute Übereinstimmung der Voraussagen mit dem Experiment.

PDF Rechnungen

Für die Durchführung von PDF Rechnungen ist es hilfreich, eine Startlösung zu generieren. Als einfaches Modell wurde dafür das Eddy Dissipation Modell verwendet. Dieses Modell basiert auf den Mischungszuständen und nimmt einen unendlich schnellen Verlauf der Chemie an. Das PDF Modul wurde für die Verbrennung von Wasserstoff erweitert. Aufgrund der schnellen Wasserstoffchemie wurde für die Durchführung der H_2 -Rechnungen Gleichgewichtschemie angenommen. Der chemische Zustand kann dann allein durch den Mischungsbruch beschrieben werden. Der Mischungsbruch ist so definiert, dass er im Brennstoff den Wert *eins* und im Luftstrom den Wert *Null* annimmt. Die anderen thermochemischen Variablen werden in Abhängigkeit des Mischungsbruches bestimmt. Die Ergebnisse werden im folgenden Abschnitt vorgestellt.

Neben den experimentellen Daten stehen unserer Gruppe Berechnungen der H_2 -Flamme aus einer früheren Arbeit zur Verfügung. Diese wurden im Rahmen einer Dissertation mit dem PEUL (*Probabilistic Eulerian Lagrange*) Modell durchgeführt [11]. Die Daten der drei verschiedenen Modelle wurde miteinander verglichen und sollen demnächst veröffentlicht werden [1]. In Abbildung 1 ist eine Skizze der verwendeten Flammgeometrie zu sehen.

Dabei handelt es sich um einen Wasserstoffstrahl der mit einer mittleren Geschwindigkeit von $u = 296$ m/s durch ein Rohr mit Durchmesser $D = 3.75$ mm einströmt und von einem Luftstrom mittlerer Geschwindigkeit von 1 m/s eingeschlossen ist. Die Reynoldszahl für diese Konfiguration beträgt 10000.

Zur Veranschaulichung der Ergebnisse wurden zum Vergleich die Temperaturprofile an der Stelle $x/L = 1/2$ ausgewählt. Dabei ist L die sichtbare Flammenlänge – in diesem Fall 675 mm – und x der Abstand der Schnittlinie von der Brennstoffmündung.

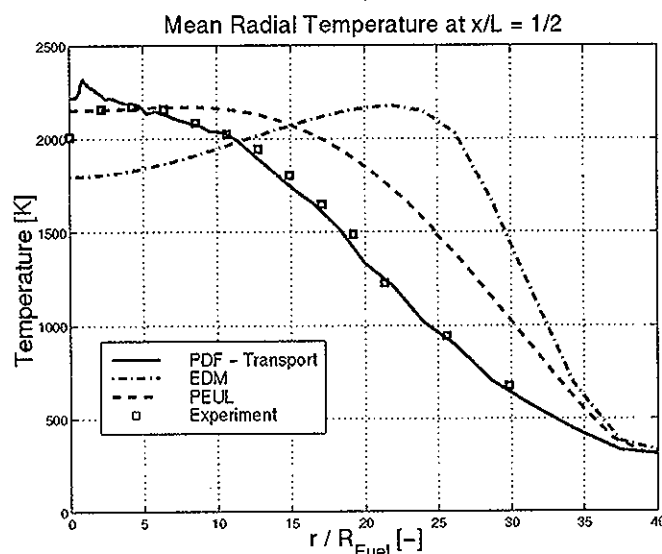


Abb.3 Temperaturprofil an der Stelle $x/L = 1/2$. Vergleich von drei Modellen mit experimentellen Daten

In Abbildung 3 sind experimentelle Daten aus Raman Messungen ([13], [14]) und die Ergebnisse der Berechnungen mit den drei Verbrennungsmodellen über dem normierten Radius aufgetragen. Die Ergebnisse zeigen, dass die Ergebnisse der EDM Rechnungen das Temperaturmaximum zu weit von der Mittelachse entfernt vorhersagen. Dies liegt an der Tatsache, dass dieses Modell mischungs-bestimmt ist, d.h. sobald Brennstoff und Luft sich vermischen, findet Verbrennung - ohne Berücksichtigung der Zündgrenzen - statt. Bei den Berechnungen mit dem PEUL Modell und der PDF Methode hingegen liegen die Berechnungen deutlich näher an den experimentellen Daten. Die leichten Abweichungen bei der PEUL Berechnungen sind möglicherweise darauf zurück zu führen, dass bei diesem Modell *presumed pdf* Funktionen verwendet werden. Das bedeutet, die Form der verwendeten Wahrscheinlichkeitsfunktionen wird als *beta*-Funktion angenommen. Zwei Parameter, der Mischungsbruch und die Varianz, bestimmen dann die genaue Dimension der Funktion. Bei der PDF Methode hingegen wird die Form in einem stochastischen Prozess durch Lösen der Transportgleichung direkt bestimmt [12]. Für eine genauere Aussage zum Verhalten der Radikalen- und Schadstoffbildung wird eine detaillierte Chemie benötigt. Durch Koppelung des Repro-Modeling mit dem PDF-Modul soll diese Möglichkeit geschaffen werden.

Zusammenarbeit

Industrie

Die Berechnungen des Strömungsfeldes - unabhängig von der Wahl des Verbrennungsmodelles - basieren alle auf dem Strömungslöser **CFX-TASCflow** der Firma AEA. Zu dieser Firma besteht enger Kontakt - u.a. über einen ehemaligen Mitarbeiter unserer Gruppe, Dr. J.C. Ferreira. Für die Anbindung des PDF-Programmes an die neueste Version von CFX-TASCflow war er im Frühjahr zu Besuch in Zürich. Die bisherigen Ergebnisse des PDF-Projektes konnten auf der *User-conference* vorgestellt werden [2]. An der Konferenz nahmen neben den Entwicklern von AEA auch Vertreter der Industrie und Hochschule teil, um sich über die Erfahrungen bei der Anwendung sowie die neuesten Entwicklungen zu informieren und auszutauschen. Die vorgestellte Arbeit fand reges Interesse sowohl bei den Teilnehmern als auch bei Mitarbeitern von AEA selbst.

Eine Zusammenarbeit mit **ABB** wurde durch eine Diplomarbeit möglich, die zur Hälfte bei **ABB** und zur Hälfte in unserer Gruppe durchgeführt wurde [3]. Der Vergleich von *presumed* PDF-Ansätzen mit Ergebnissen aus der Lösung der Transportgleichung hat gezeigt, dass mit der Transportgleichungs-Methode genauere Aussagen möglich sind. Eine Fortsetzung der Zusammenarbeit auf diesem Gebiet wurde seitens **ABB** begrüsst. Dies wäre im Rahmen einer Diplomarbeit wieder möglich.

Hochschule

Weiterhin besteht ein enger Kontakt zur **TU Delft** über den Austausch mit Professor Roekaerts. Für die aktuellen Berechnungen wurden LDA-Daten verwendet, die in unserer Gruppe gemessen wurden sowie Raman/Rayleigh/LIF Daten, die an den **Sandia National Laboratories, USA**, unter Leitung von R. Barlow gewonnen wurden. Im Rahmen eines Projektes des schweizerischen Nationalfonds mit der **Eötvös University in Budapest, Ungarn**, hat sich eine Zusammenarbeit bei der Entwicklung und Implementierung eines neuen chemischen Modells in die PDF-Transportgleichung ergeben. Durch Besuche im April und August von Mitgliedern der Budapester Gruppe in Zürich und einem Gegenbesuch in Budapest im November konnte der Austausch intensiviert werden. Die Ergebnisse sind Teil der aktuellen Arbeit - dabei soll die in Budapest unter Leitung von T. Turányi entwickelte Methode des Repro-Modellierens mit dem PDF-Ansatz gekoppelt werden. Durch die Teilnahme am *3rd International Workshop on Measurement and Computation of Turbulent Nonpremixed Flames* und dem *27th Symposium (International) on Combustion* in Boulder, USA, wurde der Austausch mit den weltweit führenden Gruppen auf dem Gebiet der Verbrennungsforschung gewährleistet [4].

Transfer

Der Transfer der bisher geleisteten Arbeit erfolgte durch eine Reihe von öffentlichen Vorträgen und einer Vorlesung an der **ETH Zürich** [5], [6], [7] und am **PSI** in Villigen im Rahmen des schweizerischen **ERCOFTAC** - Seminars, [8]. Im Ausland wurde die Arbeit in Unterhaching, **Deutschland**, [2], Budapest, **Ungarn** [9] und Boulder, **USA**, [4], vorgestellt.

Perspektiven

Für das kommende Jahr sind folgende Arbeiten geplant:

- Die begonnene Arbeit einer Kopplung des Repro-Modelling mit dem PDF-code zu Ende führen.
- Rechnungen der H₂-Flamme mit dem erweiterten Programmpaket.
- Ein Vergleich der Ergebnisse mit bisherigen Berechnungen.
- Erweiterung des Programmes für die Bestimmung von thermischem NO_x bei der Wasserstoff-Verbrennung.

- Eventuell eine Erweiterung des Programmpaketes mit Repro-Modellieren für die Methanverbrennung.
- Präsentation der Ergebnisse auf dem 4th *International Workshop on Turbulent Nonpremixed Flames* und dem 19. *Deutschen Flammentag*.

Publikationen und Vorträge

- [1] A. Obieglo, J. Gass, and D. Poulidakos. Comparative study of a hydrogen no premixed turbulent flame. *in preparation*, 1998.
- [2] A. Obieglo. Turbulent Non-Premixed Combustion. PDF Modelling Combined with CFX-TASCflow. In *AEA Technology, User-conference*, Unterhaching, 1998
- [3] Th. Herrmann. Vergleich von PDF-Ansätzen in turbulenter reaktiver Strömung. Diplomarbeit, ETH Zürich, 1998.
- [4] A. Obieglo and J. Gass. Hydrogen Jet Flame – a comparative study of three models for turbulent non-premixed combustion. *WIP-Poster, 27th Symposium (International) on Combustion*, Boulder, 1998.
- [5] A. Obieglo. Modelling of NO_x Formation in Turbulent Non-Premixed Combustion using the PDF Method. In *5th CFD Day*, ETH Zürich, 1998.
- [6] A. Obieglo. NO_x Modellierung in nicht vorgemischten Systemen mittels PDF-Transportgleichungen. In *Kontakt-Seminar/Workshop über LES und Verbrennung*. ETH Zürich, 1998.
- [7] A. Obieglo. Turbulente Verbrennungsmodellierung – PDF-Transportgleichungsmodell. In *Vorlesung Numerische und experimentelle Methoden in der Verbrennungsforschung*. ETH Zürich, 1998.
- [8] A. Obieglo. Turbulent Non-Premixed Combustion in a H₂ Jet-Flame. In *ERCOFTAC joint Annual Meeting of the Competence Centres on Measuring Techniques and Combustion and Pollution Formation*, PSI Villigen, 1998.
- [9] A. Obieglo. PDF-Modelling of a Turbulent Non-Premixed Hydrogen Jet Flame. In *Seminar*, Eötvös University, Budapest, 1998.

Referenzen

- [10] M. Flury. *Experimentelle Analyse der Mischungsstruktur in turbulenten nicht vorgemischten Flammen*. Dissertation, ETH Zürich, 1998.
- [11] M. Schlatter. *Modelling of Turbulent-Chemistry Interactions with Respect to the NO_x Formation in Turbulent Non-Premixed Flames*. Dissertation, ETH Zürich, 1998.
- [12] A. Laxander. *Numerische Simulation von turbulenten Diffusionsflammen mit einem PDF-Transportgleichungsmodell*. Dissertation, Universität Stuttgart, 1996.
- [13] R.S. Barlow and C.D. Carter. Relationships among nitric oxide, temperature, and mixture fraction in hydrogen jet flames. *Combustion and Flame*, 104, pp.288-299, 1996.
- [14] R.S. Barlow and C.D. Carter. Raman/Rayleigh/LIF Measurements of Nitric Oxide Formation in Turbulent Hydrogen Jet Flames. *Combustion and Flame*, 97, pp.261-280, 1994