

**Rheinisch- Westfälische Technische Hochschule  
Aachen**

**Institut für Industrieofenbau und Wärmetechnik im Hüttenwesen  
Lehr- und Forschungsgebiet für Energie- und Stofftransport  
Prof. Dr.-Ing. H. Köhne**

Rechnergestützte Simulation der Verbrennungsvorgänge eines luftgestuften  
100 kW-Ölbrenners - qualitativer Vergleich verschiedener  
Simulationsstrategien zur Verifizierung der in der Praxis ermittelten Werte

Studienarbeit

vorgelegt von

Mathias Dietzel

Matr.-Nr. 200963

Aachen, August 1998

Referent: Prof. Dr.-Ing. H. Köhne

Korreferent: Prof. Dr.-Ing. K. F. Knoche

Betreuer: Dipl.-Ing. F. Kleine Jäger

**Inhaltsverzeichnis**

<b>1 Einleitung</b> .....	<b>3</b>
<b>2 Aufgabenstellung</b> .....	<b>5</b>
<b>3 Schadstoffbildung und ihre Reduzierung</b> .....	<b>6</b>
3.1 Stickoxide.....	6
3.2 Möglichkeiten der Stickoxid-Reduzierung.....	7
3.2.1 Nahstöchiometrische Verbrennung.....	7
3.2.2 Luftstufung.....	7
3.2.3 Brennstoffstufung.....	7
3.2.4 Rezirkulation von Abgas.....	7
3.3 Die numerische Simulation als Werkzeug zur Emissionsreduzierung.....	8
<b>4 Theorie der mathematischen Modellbildung</b> .....	<b>10</b>
4.1 Allgemeines und Voraussetzungen für die Modellbildung.....	10
4.2 Mathematische Grundmodelle.....	11
4.2.1 Vorstellung der für die Flammensimulation notwendigen Grundmodelle.....	13
4.2.2 Analogiebetrachtung.....	19
4.2.3 Verknüpfung der Grundmodelle untereinander.....	21
4.2.4 Verschiedene Typen der mathematischen Ausgangsgleichungen.....	22
4.3 Zusätzliche Modelle zur Schließung des Gleichungssystems.....	22
4.3.1 Allgemeines.....	22
4.3.2 Druckberechnung.....	23
4.3.3 Temperaturbestimmung.....	25
4.3.4 Dichteberechnung.....	25
4.4 Modellierung spezieller Phänomene zur Reduzierung des Rechenaufwandes.....	26
4.4.1 Erfassung und Modellierung der Turbulenz.....	26
4.4.2 Turbulenzmodelle.....	27
4.4.3 Das $k, \epsilon$ -Modell.....	28
4.4.4 Das Eddy-Break-Up-Modell.....	31
4.4.5 Das Mixed = Burned-Modell.....	31
<b>5 Numerische Umsetzung des Problems im Programmpaket PHOENICS</b> .....	<b>34</b>

5.1 Allgemeines.....	34
5.1.1 Entwicklung.....	34
5.1.2 Programmstruktur.....	34
5.2 Funktionsweise des Lösungsalgorithmus von PHOENICS.....	35
5.2.1 Gittersystem.....	35
5.2.2 Numerische Umsetzung der allgemeinen Transportgleichung.....	37
5.2.3 Lösungsalgorithmen von PHOENICS.....	43
5.2.4 Allgemeine Randbedingungen.....	43
5.2.5 Relaxation.....	44
5.2.6 Fehlerbetrachtung.....	45
5.3 Realisierung des zweidimensionalen Modells mit Verbrennungssimulation.....	45
5.3.1 Gitter.....	45
5.3.2 Kontur.....	46
5.3.3 Problemspezifische Randbedingungen.....	46
5.3.4 Annahmen und Vereinfachungen.....	48
5.3.5 Probleme bei der numerischen Berechnung.....	48
5.4 Realisierung des isothermen, dreidimensionalen Modells.....	51
5.4.1 Gitter.....	51
5.4.2 Kontur.....	53
5.4.3 Problemspezifische Randbedingungen.....	54
5.4.4 Annahmen und Vereinfachungen.....	55
5.4.5 Probleme bei der numerischen Berechnung.....	55
<b>6 Vorstellung der Ergebnisse.....</b>	<b>58</b>
6.1 Zweidimensionale Verbrennungsrechnung.....	58
6.1.1 Temperaturfeld.....	58
6.1.2 Qualitativer Vergleich der errechneten Temperaturverteilung mit Meßwerten	61
6.1.3 Verteilung des Mischungsbruches $f$ .....	62
6.1.4 Verteilung des Oxidatormassenanteils $\xi_{Ox}$ .....	63
6.1.5 Verteilung des Produktmassenanteils $\xi_{Pr}$ .....	64

6.1.6 Geschwindigkeitsfeld.....	65
6.2 Isotherme, dreidimensionale Rechnung.....	68
<b>7 Vergleich und Bewertung der verschiedenen numerischen Konzepte.....</b>	<b>69</b>
7.1 Vergleich 2D-Verbrennungsrechnung mit isothermer 2D-Rechnung.....	69
7.2 Bewertung der Ergebnisse der Verbrennungsrechnung.....	71
7.3 Vergleich isotherme 3D-Rechnung mit isothermer 2D-Rechnung.....	71
7.4 Einsatzmöglichkeiten der numerischen Simulation für ein Brenner-Scale-Up.....	71
<b>8 Zusammenfassung / Ausblick.....</b>	<b>74</b>
<b>Anhang I - Literaturverzeichnis.....</b>	<b>75</b>
<b>Anhang II - Nomenklatur.....</b>	<b>78</b>
II.1 Chemische Formelzeichen.....	78
II.2 Formelzeichen.....	78
II.3 Indizes.....	79
<b>Anhang III - Herleitungen.....</b>	<b>81</b>
II.1 Herleitung der Kontinuität mit Diffusion.....	81
<b>Anhang IV - Ausformulierung von Kurzschreibweisen.....</b>	<b>82</b>
IV.1 Ausformulierung des <i>Stokes'</i> schen Spannungstensors $\underline{\underline{\sigma}}$ in Zylinderkoordinaten	82
IV.2 Ausformulierung des Doppelpunktprodukts $\underline{\underline{\tau}}:\nabla\vec{v}$ .....	82
<b>Anhang V - Verwendete <i>q1-files</i>.....</b>	<b>83</b>
V.1 - <i>q1-file</i> für zweidimensionale Verbrennungsrechnung.....	83
V.2 - <i>q1-file</i> für dreidimensionale, isotherme Rechnung.....	94

## 1 Einleitung

Die zunehmende Umweltbelastung und die damit verbundene Beeinträchtigung der Menschen und der Natur machen es nötig, daß auch Kleinf Feuerungen trotz ihres prozentual geringen Anteils am Gesamtstickoxidausstoß von 4% (Wert für BRD, 1991)[1] hinsichtlich ihres Wirkungsgrades und ihrer Umweltverträglichkeit optimiert werden müssen.

Wie bei jeder Verbrennung fossiler Brennstoffe, entstehen auch in diesen Anlagen neben Kohlendioxid die Schadstoffe Kohlenmonoxid, Schwefeldioxid, unverbrannte Kohlenwasserstoffe, Ruß sowie Stickstoffoxid und Stickstoffdioxid. Die beiden letzteren werden unter dem Sammelbegriff Stickoxide geführt.

Da praktisch die gesamte Brennerleistung auf der Kohlenstoffoxidation zu Kohlendioxid beruht, kann der Kohlendioxidausstoß bei gleichbleibender Leistung des Brenners nicht vermindert werden. Dagegen kann die Bildung von Ruß, Kohlenmonoxid und Stickoxid durch geeignete Prozeßführung reduziert werden, während eine Senkung des Schwefeldioxidausstoßes in erster Linie nur durch eine Entschwefelung des Brennstoffs oder durch entsprechende Nachbehandlungsmethoden erzielt werden kann.

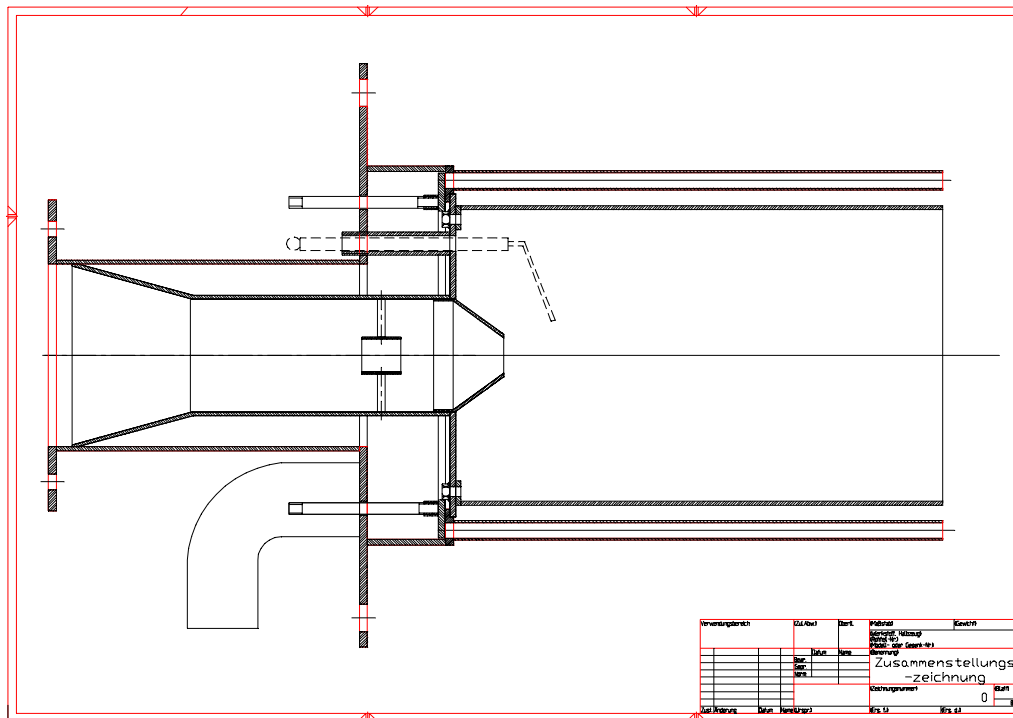
Die Bildung von Ruß und Kohlenmonoxid läßt auf eine unvollkommene Verbrennung schließen, da sie vornehmlich in Gebieten auftreten, in denen das örtliche Luftverhältnis  $\lambda < 1$  ist. Während Ruß bei langfristiger Exposition Krebs auslösen kann, ist Kohlenmonoxid ein starkes Gift, da es die Sauerstoffaufnahme des Blutfarbstoffs Hämoglobin hemmt und so zur Erstickung führt.

Stickoxide sind maßgeblich an der photochemischen Bildung des bodennahen Ozons und der Bildung des 'sauren Regens' beteiligt. Dabei entsteht aus  $\text{NO}_2$  in Verbindung mit Regentropfen Salpetersäure ( $\text{HNO}_3$ ). Der zur Bildung der Stickoxide nötige Stickstoff hat zwei Quellen. Zum einen kann die starke Dreifachbindung des in der Verbrennungsluft enthaltenen Luftstickstoffs ( $\text{N}_2$ ) durch hohe Temperaturen aufgetrennt werden, wodurch dieser Stickstoff an der Verbrennungsreaktion teilnimmt und als nicht mehr inert angesehen werden kann. Zum anderen sind brennstoffgebundene Stickstoffverbindungen eine Ursache für die Bildung der Stickoxide, da diese Verbindungen (in der Regel mit Wasserstoff) leichter aufgetrennt werden können als Luftstickstoff.

Bei dem in dieser Arbeit untersuchten Ölbrenner handelt es sich um eine 100 kW-Kleinf Feuerungsanlage, die nach dem Prinzip der Luftstufung arbeitet. Dabei wird die zur Verbrennung notwendige Luft in zwei Stufen zugeführt. Das heißt, daß im ersten Abschnitt eine unterstöchiometrische Verbrennung vorliegt, und der Brennstoff erst nach dem Sekundärluftaustritt vollständig umgesetzt werden kann. Durch diese Maßnahme werden Temperaturspitzen vermieden. Da aber die Bildung von thermischem  $\text{NO}_x$  aus Luftstickstoff im wesentlichen durch hohe Temperaturen ausgelöst wird, ist die Luftstufung ein wichtiges Hilfsmittel, den  $\text{NO}_x$ -Ausstoß zu senken.

Desweiteren wird ein Flammenrohr verwendet, wodurch eine Rezirkulation von Verbrennungsprodukten ermöglicht wird, die der Flamme aus seitlichen Öffnungen wieder zugeführt werden. Auf diese Weise wird die Massenkonzentration inerter Stoffe in der Reaktionszone erhöht, wodurch wiederum die Verbrennungstemperatur gesenkt werden kann. Durch die Zufuhr von Verbrennungsprodukten wird der Partialdruck dieser Komponenten in der Reaktionszone künstlich erhöht. Im Gegenzug werden die Partialdrücke und die Konzentrationen der Reaktionsprodukte und folglich die Reaktionsgeschwindigkeit der Verbrennung verringert, wenn man von dem üblichen *Arrhenius*-Ansatz für die Reaktionsgeschwindigkeit für Elementarreaktionen ausgeht. Durch gezielte Mengenregulierung des rezirkulierten Abgases wird insbesondere eine Möglichkeit geschaffen, die Verbrennungstemperatur innerhalb des Flammenrohres beeinflussen zu können.

Eine Maßnahme, die nicht direkt die Minderung der  $\text{NO}_x$ -Entstehung zum Ziel hat, ist die Verdrallung der Verbrennungsluft. Dabei strömt die Primärluft durch ein Gitter mit zur Hauptströmungsrichtung angestellten Luftleitblechen, wodurch die Strömungsgeschwindigkeit neben der axialen noch eine Umfangskomponente erhält. Zunächst wird die Flamme auf diese Weise stabilisiert. Der Luftdrall hat nebenbei aber noch die Eigenschaft, ein Unterdruckgebiet auf der Strahlachse zu schaffen, in dem zusätzliches Abgas rezirkuliert wird. Ein Schema des verwendeten Brenners ist in Abbildung (1.A1) zu finden.



**Abbildung 1.A1:** Konstruktionszeichnung des simulierten Brenners

Als geeignetes Mittel die Strömungsführung im Brenner gezielt zu untersuchen und weiterzuentwickeln, hat sich die numerische Simulation bewährt. Mit diesem Werkzeug lassen sich Strömungsfelder und Verbrennungen simulieren und die Ergebnisse mit gemessenen Werten vergleichen. Insbesondere lassen sich Vorhersagen über die Geschwindigkeitsverteilung machen, die durch Messungen nur sehr schwierig und unter großem Aufwand zu ermitteln sind. Ein prinzipielles Problem der numerischen Simulation ist immer der Mangel an Rechnerkapazität, um alle Effekte betrachten zu können. Die Vernachlässigungen von Zusammenhängen machen die Simulation aber fehleranfällig und führen zu Abweichungen von der Realität. In dieser Arbeit wurde insbesondere versucht, aufbauend auf einer vorangegangenen isothermen Rechnung des vorliegenden Problems, das Strömungsmodell durch die Verbrennungssimulation zu ergänzen. Es wurde auf das zur Verfügung gestellte Programmpaket PHOENICS zurückgegriffen.

## 2 Aufgabenstellung

Das Verständnis der komplexen Phänomenologie der Verbrennungsvorgänge innerhalb der Mischeinrichtung von Ölbrennern ist die Grundlage einer gezielten Brennerauslegung / -dimensionierung. Die Simulation der Verbrennungsvorgänge innerhalb des Brenners stellt ein immer wichtigeres Auslegungs- und Entwicklungswerkzeug von Brennern dar. Das Ziel dieses Einsatzes der Simulation ist die Generierung von Kriterien zur Brennerauslegung hinsichtlich:

- der Minimierung der Schadstoffemission der Verbrennung
- der Optimierung der Strömungsführung (Druckverluste, Ablagerungen von unverbrannten Komponenten, vollständiger Ausbrand) und
- des Scale-Up von Brennern.

Mit Hilfe des Programmpaketes PHOENICS werden am Lehr- und Forschungsgebiet für Energie- und Stofftransport Simulationsmodelle von Ölbrenner-Mischeinrichtungen erstellt und hinsichtlich der berechneten Strömungsprofile untersucht.

Im Rahmen dieser Studienarbeit soll das bestehende zweidimensionale Modell eines nach dem Prinzip der Luftstufung arbeitenden Ölbrenners umstrukturiert und erweitert werden. Grundlegendes Ziel ist in dem ersten Schritt die Implementierung der notwendigen Reaktionsgleichungen des Verbrennungsprozesses in das bestehende isotherme Strömungsmodell (2D), was durch die in PHOENICS vorhandenen Teilmodelle unterstützt wird.

In einem weiteren Schritt soll ein dreidimensionales Modell dieses Brenners generiert werden, mit dem eine differenzierte Betrachtung spezieller, nicht rotationssymmetrischer Phänomene möglich sein soll. Aufgrund der damit verbundenen notwendigen Rechenkapazität, soll dieses Modell lediglich für den isothermen Fall eingesetzt werden.

Neben der Strukturierung / Generierung dieser Modelle ist die komplexe Einarbeitung in die Software-Struktur von PHOENICS und die Grundlagen der relevanten Bilanzgleichungen Gegenstand dieser Arbeit.

Der Vergleich der gewonnenen Ergebnisse mit den vorhandenen Ergebnissen der zweidimensionalen, isothermen Simulation sowie den in der Praxis gemessenen Werten soll Aufschluß über die Verifizierung der in den Modellen getroffenen Annahmen geben und den qualitativen Vergleich verschiedener Simulationsstrategien ermöglichen.

### 3 Schadstoffbildung und ihre Reduzierung

#### 3.1 Stickoxide

Der zur Bildung von Stickstoffmonoxid (NO) und Stickstoffdioxid (NO<sub>2</sub>) notwendige Stickstoff hat zwei Quellen. Zum einen kann die starke Dreifachbindung im molekularen Stickstoff (N<sub>2</sub>) aufgebrochen werden, wodurch die getrennten Stickstoffatome reaktiv werden. Zum anderen werden die im Brennstoff enthaltenen Kohlenstoff-Stickstoff- und Wasserstoff-Stickstoff-Verbindungen gelöst, da sie im Vergleich zum Luftstickstoff eine relativ kleine Bindungsenergie besitzen. Aus Feuerungen wird primär NO emittiert, die Aufoxidation zu NO<sub>2</sub> geschieht nur in etwa 5% der Fälle [2]. Es sollen daher nur die verschiedenen Entstehungsmechanismen von NO kurz behandelt werden. Außerdem ist der NO<sub>2</sub>-Anteil als Folgereaktion von NO betrachtbar. Die drei verschiedenen Entstehungsmechanismen von NO sind:

- **Thermisches NO**

Bei der thermischen NO-Bildung wird der in der Verbrennungsluft enthaltene molekulare Stickstoff durch Radikalreaktionen zu NO oxidiert. Bei dieser Reaktion läuft ein nach *Zeldovich* benannter Kettenmechanismus ab, der aus drei Elementarreaktionen besteht. Da die durch die starke Dreifachbindung des N<sub>2</sub>-Moleküls hohe Aktivierungsenergie aufgebracht werden muß, läuft dieser Mechanismus ausschließlich bei Temperaturen über 1200 °C ab [3].

- **Prompt-NO**

Wie bei der thermischen NO-Bildung ist auch bei der Prompt-NO-Bildung die Verbrennungsluft der Stickstoff-Lieferant. Bei dieser Reaktion reagieren die N<sub>2</sub>-Moleküle in kurzer Zeit mit Kohlenwasserstoffradikalen CH<sub>i=1..3</sub>. Da nicht sofort jedes freigesetzte Stickstoff-Atom in den dabei entstehenden Cyaniden HCN<sub>i</sub> und Aminen NH<sub>i</sub> gebunden wird, entsteht zusätzlich NO. Eine Besonderheit ist die niedrige Aktivierungsenergie dieser Reaktion, wodurch sie auch bei niedrigeren Temperaturen zu beobachten ist [4]. Der Anteil des Prompt-NO steigt mit der Konzentration der Kohlenwasserstoffradikale, das heißt mit zunehmend fetterer Verbrennung und kleinerem Luftverhältnis  $\lambda$  [5].

- **Brennstoff-NO**

Stickstoff aus der großen Anzahl der verschiedenen organischen Stickstoffverbindungen im Brennstoff bildet schließlich das sogenannte Brennstoff-NO. Dabei wird der organisch gebundene Stickstoff vollständig zuerst in Cyanide und dann in Amine umgewandelt. Wie bei dem Prompt-Mechanismus entstehen dabei isolierte N-Moleküle, aus denen dann NO entsteht. Brennstoff-NO ist auf eine ausreichende Sauerstoff-Konzentration angewiesen[6,7].

Es ist zu betonen, daß der Stickstoff im Prompt-NO aus der Verbrennungsluft, während der Stickstoff in Brennstoff-NO aus dem Brennstoff selber stammt. In beiden Fällen bilden sich neben den Zwischenprodukten Cyaniden und Aminen zusätzlich NO aus N-Radikalen. Da die Ursache der NO-Bildung sowohl beim Prompt-NO als auch beim Brennstoff-NO in der Bildung von den genannten Zwischenprodukten liegt, kann zwischen den beiden Mechanismen im Reaktionsverlauf nicht klar unterschieden werden.

Die aufgeführten Bildungsmechanismen lassen sich auch nach dem Wirkungsort innerhalb der Flamme unterscheiden. So entsteht Prompt-NO vornehmlich im

- **primären Reaktionsgebiet**, da dort der Brennstoff noch nicht vollständig verbrannt ist und eine hohe Konzentration von unverbrannten Kohlenwasserstoffradikalen vorliegt. Die Aufspaltung des Brennstoffs in diese Cyanide ist die Ursache für das Brennstoff-NO, wodurch dieser Mechanismus ebenfalls in der primären Reaktionszone abläuft. Thermisches NO entsteht dagegen im
- **sekundären Reaktionsgebiet**, in einem Gebiet also, in dem der Brennstoff unter überstöchiometrischen Verhältnissen (für Heizöl EL:  $\lambda \approx 1.2-1.3$ ; [8]) vollständig umgesetzt wird und dementsprechend hohe Temperaturen auftreten.

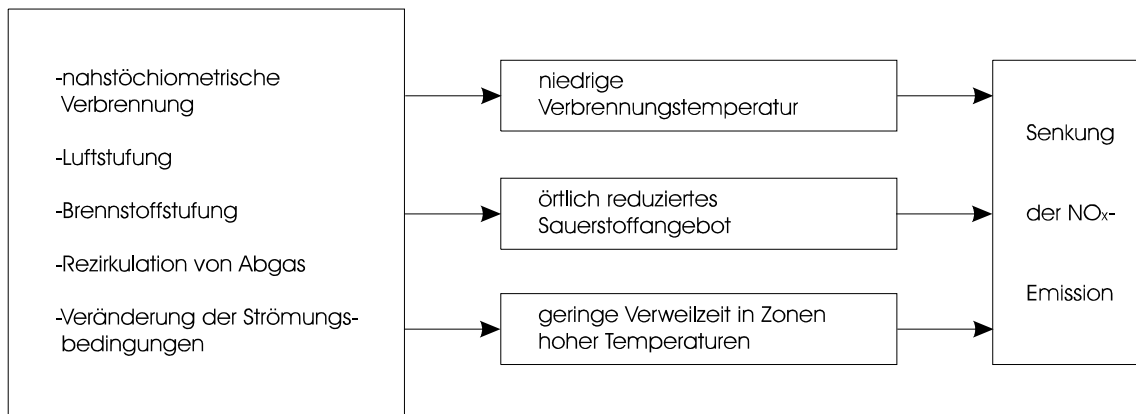
Für tiefergehende Behandlungen der verschiedenen Entstehungsmechanismen wird auf die einschlägige Literatur verwiesen.

### 3.2 Möglichkeiten der Stickoxid-Reduzierung

Wie bereits in der Einleitung angedeutet, lassen sich Schadstoffe allgemein durch drei verschiedene Wege vermindern:

- Maßnahmen, die **vor** der Verbrennung greifen. Dazu gehören die Beeinflussung der Brennstoffqualität, wie die Entstickung des Brennstoffs (sogenannte Tertiärmaßnahmen).
- Maßnahmen, die gezielt die Prozeßführung **während** der Verbrennung beeinflussen. Dazu gehören beispielsweise Rezirkulationsströmungen (sogenannte Primärmaßnahmen).
- Maßnahmen, die **nach** der Verbrennung die Stickoxid-Konzentration mindern. Die Verwendung von katalytischen Abgasreinigungsanlagen gehört zu diesen Maßnahmen (sogenannte Sekundärmaßnahmen).

In dieser Arbeit soll ausschließlich die Problematik der Bildung von Stickoxiden und deren Verringerung durch Primärmaßnahmen behandelt werden. Alle hier vorgestellten, strömungstechnischen Maßnahmen zur Minderung der NO-Emission verwenden ein ähnliches Konzept. Es wird versucht Temperaturspitzen, die die Stickstoff-Molekülbindung in der Verbrennungsluft aufsprengen könnten, zu vermeiden. Dies kann einerseits durch eine Vergrößerung der Reaktionszone oder durch direkte, flammeninterne Kühlung erreicht werden. Diese Eingriffe sollen in erster Linie den Anteil des nach dem Prinzip der thermischen NO-Bildung entstehenden NO reduzieren. Eine Sammlung der Primärmaßnahmen ist nach *Mehring* [29] in Abbildung 3.2.A1 zu finden.



**Abbildung 3.2.A1:** Primärmaßnahmen zur NO<sub>x</sub>-Reduzierung

Eine Möglichkeit ist die

### 3.2.1 Nahstöchiometrische Verbrennung

Diese Maßnahme zielt darauf ab, die Sauerstoff-Konzentration so gering wie möglich zu halten, um isolierten N-Molekülen keine O-Reaktionspartner zu bieten. Durch die Verkleinerung des Luftverhältnisses  $\lambda$  wird die NO-Bildung nach dem Brennstoff-Mechanismus eingeschränkt, wogegen der Prompt-NO-Mechanismus verstärkt wird. Zusätzlich steigt der CO-Anteil aufgrund unvollständiger Verbrennung bei zunehmender Annäherung an  $\lambda = 1$  stark an, so daß der nahstöchiometrischen Verbrennung Grenzen gesetzt sind. Außerdem kann die Kühlwirkung einer überstöchiometrischen Verbrennung nicht genutzt werden, was eine negative Folge auf das thermische NO hat [9].

### 3.2.2 Luftstufung

Durch örtliche Trennung der Verbrennungsluftzufuhr in mindestens zwei Stellen kann eine Verminderung des thermischen und brennstoffbedingten NO erzielt werden [10]. Dabei wird in der ersten Stufe unterstöchiometrisch verbrannt, wodurch der Brennstoff nicht vollständig umgesetzt werden kann. Erst in der zweiten Stufe kann der Brennstoff durch ausreichende Zufuhr des Oxidators vollständig verbrennen. Die unterstöchiometrische Verbrennung in der ersten Stufe erreicht nicht die Temperaturen der stöchiometrischen oder leicht überstöchiometrischen Verbrennung. Zusätzlich senkt die Aufteilung der Verbrennungsluftzufuhr die örtliche Sauerstoffkonzentration in der ersten Stufe. Als direkte Folge steht für die Bildung von NO prozentual weniger Sauerstoff zur Verfügung und die Reaktionsgeschwindigkeit sinkt. Dies ist aus dem *Arrhenius*-Ansatz für Elementarreaktionen ersichtlich [28]:

$$\dot{r}_{NO,molar}''' = k_f c_{O_2} c_N - k_b c_{NO} c_O \quad (3.2-1)$$

Dabei sind  $k_f$  und  $k_b$  die Geschwindigkeitskonstanten der Vor- und Rückreaktion. Die angegebene Reaktionsgeschwindigkeit basiert auf der zum *Zeldovich*-Mechanismus gehörenden Elementarreaktion



und ist als Beispiel zu betrachten. Durch die verminderte Reaktionsgeschwindigkeit verteilt sich die bei der Umsetzung frei werdende Wärme auf ein größeres Gebiet, wodurch die Reaktionszone vergrößert und das Temperaturniveau zusätzlich gesenkt wird. Durch die Temperaturreduzierung wird weniger thermisches NO gebildet. Mit einer geringeren Bildungsrate von NO, die durch die Verkleinerung der stark temperaturabhängigen Geschwindigkeitskoeffizienten [11] weiter verringert wird, geht nach Gleichung (3.2-2) auch eine Reduzierung der Bildungsrate von Sauerstoffradikalen einher. Diese Radikale werden aber von dem Brennstoff-NO-Bildungsmechanismus benötigt.

### 3.2.3 Brennstoffstufung

Brennstoffstufung ist zur Stickoxidreduzierung besonders bei stickstoffhaltigem Heizöl effektiver als die Luftstufung [12]. Allerdings ist zur Verwirklichung ein konstruktiver Mehraufwand erforderlich. Es soll aber nicht näher auf diese Maßnahme eingegangen werden, da sie im vorliegenden Anwendungsfall nicht benutzt wird. Ausführungen lassen sich in [13,14] finden.

### 3.2.4 Rezirkulation von Abgas

Bei der Abgasrezirkulation wird für den Verbrennungsprozeß inertes Abgas zurück in die Reaktionszone gebracht, wodurch die Flammentemperatur gesenkt wird. Dies beruht im wesentlichen auf zwei Effekten. Zum einen hat das rezirkulierte Abgas eine größere spezifische Wärmekapazität  $c_{p,Abgas}$  als das Brennstoff-Luftgemisch. Dies ist auf die große Konzentration von CO<sub>2</sub> und insbesondere Wasser zurückzuführen [11]. Durch die Zumischung des Abgases wird der Wärmekapazitätsstrom

$$\dot{W} = \dot{m}c_{p,Gemisch} \quad (3.2-3)$$

des Gasgemisches vergrößert. Dadurch sinkt die Temperatur, weil sich der eingebrachte thermische Enthalpiestrom

$$\dot{H} = \dot{W}(T - T_0) \quad (3.2-4)$$

nur unmerklich ändert ( $T_0$  ist beliebige Bezugstemperatur). Zum anderen wird der Partialdruck der Reaktionskomponenten, insbesondere die Sauerstoffkonzentration, durch diese Maßnahme reduziert und die Umsetzung verlangsamt sich. Dieser Effekt ist vergleichbar mit dem, der bei der Luftstufung erläutert wurde. Wie bei der Luftstufung wird die Temperaturabsenkung durch eine Vergrößerung der Reaktionszone erreicht. Es hat sich gezeigt, daß durch diesen Eingriff bei Feuerungen gerade die thermische NO-Bildung gehemmt werden kann [13].

Bei der Rezirkulation von Abgas unterscheidet man die interne und die externe Rezirkulation. Bei der externen Rezirkulation wird das Abgas durch außerhalb der Brennkammer liegende Leitungen und Gebläse zurückgeführt. Bei der internen Rezirkulation übernehmen diese Aufgabe spezielle geometrische Einbauten oder Änderungen an der Kontur der Brennkammer. In dem hier betrachteten Brenner zählen dazu die Verwendung eines Flammenrohres, durch dessen hintere Öffnungen Verbrennungsgase der Hauptreaktionszone der ersten Stufe zugeführt werden. Desweiteren erzeugt die flammenstabilisierende

Drallströmung ein Unterdruckgebiet auf der Strahlachse, wodurch ebenfalls Verbrennungsgase der zweiten Verbrennungsstufe rezirkuliert werden. Es handelt sich um eine flammenrohrinterne Rezirkulation.

Die maximale Rezirkulationsrate ist durch verschiedene Randbedingungen begrenzt. Durch zu große Rezirkulationsmengen kann die Reaktion zum Erliegen kommen und der Brennstoff nicht vollständig umgesetzt werden. Die Flammen neigen deshalb auch zur Instabilität [15,16]. Als Folge der unvollständigen Verbrennung würde der Ruß- und der CO-Anteil steigen.

Der Druckverlust

$$\Delta p_v = \zeta_{Carnot} \frac{1}{2} \rho u_\infty^2 \quad (3.2-5)$$

durch den *Carnot*'schen Stoßverlust am Luftdüsenaustritt sinkt bemerkenswerter Weise mit zunehmender Menge rezirkulierten Abgases. Diese Erscheinung ist noch nicht ganz geklärt. Es ist aber zu vermuten, daß durch eine größere Menge rezirkulierten Abgases der Druck im Totwassergebiet oberhalb der Luftdüse zunimmt. Dadurch wird weniger Masse des am Totwassergebiet vorbeiströmenden Brennstoff-Luftgemisches angesaugt und damit umgelenkt. Als Folge sinkt der Druckverlust.

### 3.3 Die numerische Simulation als Werkzeug zur Emissionsreduzierung

Alle Werkzeuge, mit denen man Strömungen und in ihnen ablaufende Verbrennungsvorgänge untersuchen kann, haben zum Ziel, sich ein Bild von den herrschenden Strömungsverhältnissen und Vorgängen machen zu können. Sie sollen das Interesse auf Prozesse lenken, die für die Problemstellung wichtig sind, und die dem Ingenieur nicht unmittelbar zugänglich sind. Zu diesen Werkzeugen gehören

- alle Arten der Meßtechnik
- phototechnische oder sonstige filmische Aufnahmen
- theoretische Überlegungen und
- die numerische Simulation

Alle diese Möglichkeiten haben Vor- wie Nachteile.

Die Meßtechnik liefert im allgemeinen das realitätsgetreue Abbild der Strömung. Nachteilig ist, daß nur punktuell Messungen durchgeführt werden können, mit denen kein vollständiges Strömungsprofil ermittelt werden kann. Außerdem beeinflussen die Meßsonden, wie beispielsweise *Prandtl*-Rohre zur Geschwindigkeitsmessung, die Meßwerte durch ihre endliche Größe. Integrale Messungen (beispielsweise Massenstrom) haben den Nachteil, daß durch die grobe Auflösung wichtige Informationen verloren gehen. Außerdem ist die für die vorliegenden Probleme anwendbare Meßtechnik aufwendig und teuer.

Filmische Aufnahmen können immer nur qualitative Aussagen liefern und dem Entwickler nur mögliche Schwachstellen des Prozesses andeuten. Diesen Hinweisen muß der Ingenieur dann mit genaueren Meßmethoden nachgehen.

In gewissem Sinne stellt die numerische Simulation ein Kombinations-Werkzeug aus den Möglichkeiten der Meßmethodik und der filmischen Aufnahme dar. Einerseits kann sie

dem Benutzer ein qualitatives, anschauliches Bild der Strömung geben. Andererseits kann sie quantitative Aussagen machen, und dies nicht nur punktuell, sondern im gesamten, aufgelösten Strömungsfeld. Für ein Simulationsprogramm ist es notwendig, ein physikalisches System in ein Modellsystem abzubilden, das aus einem Satz miteinander gekoppelter, partieller Differentialgleichungen besteht. Diese Gleichungen werden so modifiziert, daß sie numerisch lösbar sind. Eine analytische Lösung ist wegen der Komplexität von vornherein ausgeschlossen. Nachteilig ist, daß nicht alle Effekte und Einflüsse mangels Rechnerkapazität betrachtet werden können. So muß der Gewinn an physikalisch detaillierterer Abbildung des Problems oft durch eine Reduzierung der Gitterauflösung bezahlt werden (vergleiche Abschnitt 5.2.1). Aufgabe des Programmentwicklers und -anwenders ist es, die Einflüsse aus der Fülle herauszufiltern, die für das vorliegende Problem am wichtigsten sind. Trotz dieser Nachteile ist die numerische Simulation ein kostengünstiges und schnelles Werkzeug, mit dem auf jeden Fall erste Abschätzungen einfach durchgeführt werden können.

Für die Problematik der Stickoxidbildung eignet sich die numerische Simulation dahingehend, daß vorher unbekannte Gebiete erhöhter NO-Bildung auffindig gemacht und mit genaueren Methoden der Meßtechnik näher untersucht werden können. Oft genügt dem Ingenieur aber auch die numerische Lösung, um geeignete Gegenmaßnahmen einleiten zu können. Gerade mit Rechnungen, welche die Reaktionsvorgänge berücksichtigen, können Gebiete hoher Temperaturen lokalisiert werden. Die Genauigkeit der numerischen Lösung reicht dabei meistens aus.

## 4 Theorie der mathematische Modellbildung

### 4.1 Allgemeines und Voraussetzungen für die Modellbildung

Wie jedes Modell, dient auch das mathematische Modell eines Vorganges dazu, sich ein Abbild der Realität zu entwickeln. Das Besondere an Modellen ist, daß sie nur die Aspekte der Realität beinhalten, die für das vorliegende Problem von Bedeutung sind. Ein Modell stimmt auf diese Weise immer mehr mit der Realität überein, je mehr Aspekte Beachtung finden. Leider steigt damit aber auch der Aufwand der Modellbildung.

Nach *Görner* [17] setzt sich das mathematische Gesamtmodell aus einer Anzahl von Teilmodellen zusammen, die jeweils bestimmte Aspekte der Realität in ihren wesentlichen Punkten wiedergeben. Ein Teilmodell wird durch eine oder mehrere, gewöhnliche oder partielle Differentialgleichungen repräsentiert, die den physikalischen Prozeß auf der geforderten Genauigkeitsstufe abbilden. Dabei muß die Abbildung so sein, daß das Verhalten des Modells gegenüber Eingangsgrößen und Störungen dieser Eingangsgrößen identisch mit dem des tatsächlichen physikalischen Prozesses ist. Partielle Differentialgleichungen sind dabei Gleichungen, die Ableitungen nach mehreren Koordinaten (Zeit, Ort) enthalten.

Damit das Problem durch mathematische Modelle angenähert werden kann, muß das Problem bestimmte Voraussetzungen erfüllen. Dazu gehören u.a.:

- Gesamtproblem muß in Teilprobleme zerteilbar sein
- Teilprobleme müssen durch Zustandsgleichungen mathematisch beschreibbar sein
- numerisches Lösungsverfahren muß wirtschaftlich arbeiten und eine endliche Lösungszeit haben [17]

Ein wichtiger Bestandteil der Modellbildung ist die Festlegung auf eine Darstellungsart von Modellen. Man unterscheidet die

- **Lagrange-Darstellung** (Einzelteilbetrachtung), bei der einzelne Partikel betrachtet und beschrieben werden. Es werden die Verhältnisse wiedergegeben, die ein mitbewegter Beobachter erfahren würde.
- **Euler-Darstellung** (Summenbetrachtung), bei der die Gesamtheit der Moleküle als Kontinuum betrachtet und die Individualität des einzelnen Moleküls vernachlässigt wird. Diese Darstellung ist für die vorliegende Problematik am günstigsten, da sie den geringeren numerischen Aufwand erfordert. Außerdem interessieren nur gemittelte Zustände an bestimmten Orten.

Neben der Festlegung auf eine Darstellungsart muß man noch die beschreibende Raumkoordinatenform festsetzen. Die Wahl einer Koordinatenform wird im wesentlichen durch die jeweils vorliegende Geometrie bestimmt. Hier sollen Zylinderkoordinaten verwendet werden, da der verwendete Brenner rotationssymmetrisch ist.

## 4.2 Mathematische Grundmodelle

### 4.2.1 Vorstellung der für die Flammensimulation notwendigen Grundmodelle

Bei einem Verbrennungsvorgang, insbesondere bei dem vorliegenden Fall einer Tröpfchenverbrennung, spielen eine Reihe von physikalischen Teilvorgängen eine Rolle. Das Hauptaugenmerk muß bei der Modellbildung auf die

- Strömung,
- Wärmeübertragung,
- Mischung,
- Verdunstung und
- Reaktion

gelegt werden.

Das **Strömungsmodell** berechnet das Geschwindigkeits- und Druckfeld. Es beruht im wesentlichen auf der Kontinuitätsgleichung und der Impulserhaltungsgleichung, die, vereinfacht ausgedrückt, wiederum eine strömungstechnische Anwendung des *Newtonschen* Kraftgesetzes

$$\text{Kraft} = \text{Masse} \times \text{Beschleunigung} \quad (4.2-1)$$

ist. Im folgenden sollen  $\mathbf{u}, \mathbf{v}, \mathbf{w}$  die Geschwindigkeitskomponenten in **tangentialer-, radialer** und **axialer** Richtung sein. Diese Definition entspricht der, die das Programmpaket PHOENICS für die Geschwindigkeitskomponenten verwendet. Für eine rotationssymmetrische Strömung lauten die oben genannten Gleichungen:

Kontinuität:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r}(r\rho v) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial z}(\rho w) = 0 \quad (4.2-2)$$

Mit dem Nabla-Operator

$$\nabla = \begin{pmatrix} \frac{\partial}{\partial r} \\ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (4.2-3)$$

für Zylinderkoordinaten [18] und dem Geschwindigkeitsvektor, entsprechend der PHOENICS-Darstellung

$$\vec{v} = \begin{pmatrix} v \\ u \\ w \end{pmatrix} \quad (4.2-4)$$

folgt daraus:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) = -\nabla \cdot [(\rho)\vec{v}] \quad (\text{Kontinuität}) \quad (4.2-5)$$

$\nabla \cdot (\rho\vec{v})$  ist hierbei die Divergenz des flächenbezogenen Impulses  $(\rho\vec{v})$ . Zu betonen ist, daß in Zylinderkoordinaten die Divergenz eines Vektors nicht dem Skalarprodukt zwischen dem Nabla-Vektor (4.2-3) und dem Geschwindigkeitsvektor (4.2-4) entspricht. Die in dieser Arbeit verwendeten Nabla-Operationen lassen sich in [18] finden. Das im untersuchten Ölbrenner verwendete Gasgemisch ist inhomogen (Diffusionsflamme). Es werden jedoch scheinbar bei der Betrachtung der Massenbilanz keine Diffusionsströme berücksichtigt. Es würde folgende Schreibweise der Kontinuität naheliegen (Herleitung vergleiche Anhang II.1):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho) = -\nabla \cdot [(\rho)\vec{v}] + \nabla \cdot \sum_i \vec{j}_i'' \quad (4.2-6)$$

Nach *Fick* ist aber die Summe der Diffusionsströme gleich null [30], es gilt also:

$$\sum_i \vec{j}_i'' = 0 \quad (4.2-7)$$

Daraus folgt unmittelbar Gleichung (4.2-5)

Impuls (*r*-Koordinate):

$$\rho \frac{\partial}{\partial t} v + \rho v \frac{\partial}{\partial r} v + \frac{\rho u}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} v + \rho w \frac{\partial}{\partial z} v - \rho \frac{u^2}{r} = -\frac{\partial}{\partial r} p + \phi_{Dissipation,r} \quad (4.2-8)$$

Hierbei ist  $\phi_{Dissipation}$  die durch die Fluidreibung verursachte Dissipation. Die Wirkung des Gravitationsfeldes wurde vernachlässigt. Unter Verwendung des Gradienten  $\nabla v$  läßt sich schreiben:

$$\Leftrightarrow \rho \left\{ \frac{\partial}{\partial t} v + \vec{v} \cdot \nabla v - \frac{u^2}{r} \right\} = -\frac{\partial}{\partial r} p + \phi_{Dissipation,r} \quad (4.2-9)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \rho \left\{ \vec{v} \cdot \nabla v - \frac{u^2}{r} \right\} - v \frac{\partial}{\partial t} \rho = -\frac{\partial}{\partial r} p + \phi_{Dissipation,r} \quad (4.2-10)$$

Mit der Kontinuitätsgleichung (4.2-5) folgt:

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \rho \bar{v} \cdot \nabla v + v \nabla \cdot (\rho \bar{v}) - \rho \frac{u^2}{r} = -\frac{\partial}{\partial r} p + \phi_{Dissipation,r} \quad (4.2-11)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \nabla \cdot (\rho v \bar{v}) - \rho \frac{u^2}{r} = -\frac{\partial}{\partial r} p + \phi_{Dissipation,r} \quad (4.2-12)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) = -\nabla \cdot (\rho v \bar{v}) + \rho \frac{u^2}{r} - \frac{\partial}{\partial r} p + \phi_{Dissipation,r} \quad (4.2-13)$$

Die entsprechenden Gleichungen für die anderen Koordinatenrichtungen lauten:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u) = -\nabla \cdot (\rho u \bar{v}) - \rho \frac{uv}{r} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} p + \phi_{Dissipation,\varphi} \quad (\varphi\text{-Richtung}) \quad (4.2-14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho w) = -\nabla \cdot (\rho w \bar{v}) - \frac{\partial}{\partial z} p + \phi_{Dissipation,z} \quad (z\text{-Richtung}) \quad (4.2-15)$$

Zusammenfassend kann man schreiben:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) = -\nabla \cdot [(\rho \bar{v}) \bar{v}] - \nabla p + \bar{\phi}_{Dissipation} \quad (4.2-16)$$

Das Auftreten der die Symmetrie störenden Terme

$$-\rho \frac{uu}{r} \quad \text{und} \quad \rho \frac{uv}{r} \quad (4.2-17)$$

liegt an der Verwendung von Zylinderkoordinaten. Der Ausdruck

$$\nabla \cdot [(\rho \bar{v}) \bar{v}] \quad (4.2-18)$$

enthält aber auch diese Terme. Dabei stellt der Term  $(\rho \bar{v}) \bar{v}$  das dyadische Produkt zweier Vektoren da. Es ergibt einen Tensor 2. Ordnung. Der Ausdruck  $-\nabla p + \bar{\phi}$  lässt sich durch den Stokes'schen Spannungstensor  $\underline{\underline{\sigma}}$  verknüpft mit dem Nabla-Operator darstellen. Eine Ausformulierung von  $\underline{\underline{\sigma}}$  befindet sich im Anhang IV.1. Es folgt:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) = -\nabla \cdot [(\rho \bar{v}) \bar{v}] - \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}} \quad (4.2-19)$$

Mit der Umformung

$$\underline{\underline{\sigma}} = p Id_3 + \underline{\underline{\tau}} \quad , \quad (4.2-20)$$

wobei  $Id_3$  die Identität ist, lässt sich auch schreiben:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) = -\nabla p - \nabla \cdot [(\rho \bar{v})\bar{v}] - \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}} \quad (\text{Impuls}) \quad (4.2-21)$$

Das **Wärmeübertragungsmodell** wird durch die Energiegleichung wiedergegeben. Für die vorliegende radialsymmetrische Strömung lautet sie:

Energie [19]:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial}{\partial t} h + r \rho v \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} h + \rho u \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} h + \rho w \frac{\partial}{\partial z} h = \\ \frac{\partial}{\partial t} p + \bar{v} \cdot \nabla p - \underline{\underline{\tau}} : \nabla \bar{v} + \nabla \cdot [\lambda \nabla T + \sum_i \bar{j}_i'' h_{\text{Diffusion},i}] \end{aligned} \quad (4.2-22)$$

Es gilt:

$$p = p(t, r, \varphi, z) \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} p + \bar{v} \cdot \nabla p = \frac{d}{dt} p \quad (4.2-23)$$

Unter Verwendung der Kontinuität folgt:

$$\begin{aligned} \rho \frac{\partial}{\partial t} h + r \rho v \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} h + \rho u \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} h + \rho w \frac{\partial}{\partial z} h = \\ \rho \frac{\partial}{\partial t} h + r \rho v \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} h + \rho u \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} h + \rho w \frac{\partial}{\partial z} h + h \underbrace{\left( \frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot [(\rho)\bar{v}] \right)}_{=0} \end{aligned} \quad (4.2-24)$$

$$\Leftrightarrow \rho \frac{\partial}{\partial t} h + r \rho v \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} h + \rho u \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \varphi} h + \rho w \frac{\partial}{\partial z} h = \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot [(\rho h)\bar{v}] \quad (4.2-25)$$

Eingesetzt in Gleichung (4.2-20):

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) + \nabla \cdot [(\rho h)\bar{v}] = \frac{d}{dt} p - \underline{\underline{\tau}} : \nabla \bar{v} + \nabla \cdot (\lambda \nabla T + \sum_i \bar{j}_i'' h_{\text{Diffusion},i}) \quad (4.2-26)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) = -\nabla \cdot [(\rho h)\bar{v}] + \nabla \cdot (\lambda \nabla T + \sum_i \bar{j}_i'' h_{\text{Diffusion},i}) - \underline{\underline{\tau}} : \nabla \bar{v} + \frac{d}{dt} p \quad (4.2-27)$$

Der Ausdruck

$$\underline{\underline{\tau}} : \nabla \bar{v} \quad (4.2-28)$$

stellt das sogenannte Doppelpunktprodukt zwischen dem Schubspannungstensor  $\underline{\underline{\tau}}$  und dem Nablatensor  $\nabla \bar{v}$  dar. Er repräsentiert die Reibleistung des Fluides und ist im Anhang ausformuliert. Für den symmetrischen Tensor  $\tau$  kann nach [18] wie folgt umgeformt werden:

$$\underline{\underline{\tau}} : \nabla \bar{v} = \nabla \cdot [(\underline{\underline{\tau}})\bar{v}] - \bar{v} \cdot (\nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}) \quad (4.2-29)$$

Die Beziehung

$$\dot{H}_{Diffusion}'' := \sum_i \bar{j}_i'' h_{Diffusion,i} \quad (4.2-30)$$

beschreibt die flächenbezogene Enthalpiezufuhr durch Diffusion.

Es ist zu berücksichtigen, daß in Gleichung (4.2.23) der Energieaustausch durch Wärmestrahlung nicht betrachtet wird. Die Vernachlässigung der Wärmestrahlung ist bei Verbrennungsvorgängen aber nicht selbstverständlich und läßt sich nicht verallgemeinern. Berücksichtigt man die Strahlung, so hat man die Schwierigkeit, daß die Energiegleichung nicht mehr linear mit der Temperatur ist, da folgender Quellterm berücksichtigt werden muß:

$$\dot{q}_s'' = \sigma T^4 \quad (\text{flächenbezogene Wärmestrahlung eines schwarzen Körpers, [20]}) \quad (4.2-31)$$

Hierbei ist  $\sigma$  die *Stefan-Boltzmann-Konstante* und  $T$  die Temperatur des Fluides. Für numerische Zwecke muß diese Gleichung linearisiert werden. Rein formal kann man die Strahlung durch einen Quellterm  $\Gamma$  in der Energiegleichung berücksichtigen. Es gilt:

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) = -\nabla \cdot [(\rho h)\bar{v}] + \nabla \cdot (\lambda \nabla T + \sum_i \bar{j}_i'' h_{Diffusion,i}) - \underline{\tau} : \nabla \bar{v} + \frac{d}{dt} p + \Gamma_{Strahl} \quad (4.2-32)$$

Mit Gleichung (4.2-27) folgt:

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\rho h) = -\nabla \cdot [(\rho h)\bar{v} + (\underline{\tau})\bar{v}] + \nabla \cdot (\lambda \nabla T + \sum_i \bar{j}_i'' h_{Diffusion,i}) + \bar{v} \cdot (\nabla \cdot \underline{\tau}) + \frac{d}{dt} p + \Gamma_{Strahl} \quad (\text{Energie}) \quad (4.2-33)$$

Das **Mischungsmodell** ist eng mit dem Strömungsmodell verknüpft, da mit dem Strömungsmodell der konvektive Transport bereits berücksichtigt wird. Zusätzlich muß der diffusive Transport berücksichtigt werden. Dieser wird durch jeweils eine Stofferhaltungsgleichung mit Quellterm (es finden chemische Reaktionen statt) für jede Komponente modelliert. Es gilt in Operator Schreibweise:

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t}(\rho \xi_i) = -\nabla \cdot [(\rho \xi_i)\bar{v}] + \nabla \cdot \left[ \frac{\eta}{Sc_i} \nabla(\xi_i) \right] + \dot{r}_i''' \quad (\text{Stoff}) \quad (4.2-34)$$

Dabei ist  $Sc_i$  die Schmidtzahl der Komponente  $i$  und  $\eta$  die dynamische Viskosität des Fluides.

Das **Verdunstungsmodell** muß die vor der Verbrennung stattfindende Verdunstung (keine Verdampfung, da es sich um ein Gemisch handelt) des Öls beschreiben. Wesentliche Einflußgröße ist der Konzentrationsgradient des Öls. Der verdunstende, flächenbezogene Massenstrom läßt sich durch

$$\dot{m}_{\text{Öl}}'' = \rho_{\infty} u_{\infty} St_D \frac{\xi_{\text{Öl,Wand}} - \xi_{\text{Öl},\infty}}{1 - \xi_{\text{Öl,Wand}}} \quad (4.2-35)$$

angeben [22]. Dabei ist  $St_D$  die *Stanton-Zahl* für die Diffusion.

Da im vorliegenden Fall die reale heterogene Mehrkomponenten-Strömung im Programm PHOENICS durch eine inhomogene, kontinuierliche Mehrkomponenten-Strömung angenähert wird, soll hier nicht näher auf die Möglichkeiten einer geeigneten Modellierung der Verdunstung eingegangen werden. Man muß sich aber bewußt machen, daß das Vernachlässigen der heterogenen Strömung eine recht grobe Annahme ist, die sowohl das Strömungsfeld als auch das Temperaturfeld stark verfälscht. So wird der reale, sehr kleinvolumige, da flüssige Brennstoffeinsatz durch einen großvolumigen, gasförmigen Brennstoffeinsatz ersetzt. Allein diese Annahme wird das Strömungsfeld, insbesondere vor der Brennstoffdüse verfälschen.

Das **Reaktionsmodell** macht Aussagen über den zeitlichen Ablauf von chemischen Reaktionen. Es beruht auf dem empirischen Ansatz für Elementarreaktionen:

$$\dot{r}_{i,molar}''' = \frac{\partial}{\partial t} c_i = k \prod c_i^{\nu_i} \quad (4.2-36)$$

Hierbei ist  $c_i$  die Konzentration in  $\text{kg/m}^3$  und  $\nu_i$  der stöchiometrische Koeffizient der Komponente  $i$  in der betrachteten Reaktionsgleichung.

Der Geschwindigkeitskoeffizient  $k$  läßt sich mit einer *Arrhenius*-Beziehung angeben:

$$k = k_0 \exp(-E / R_m T) \quad (4.2-37)$$

Für komplexere chemische Reaktionen lassen sich auch noch andere Geschwindigkeitsansätze angeben. So kann der natürliche Logarithmus des Geschwindigkeitskoeffizienten  $k$  nicht nur in erster Ordnung von der Temperatur abhängen. Dies wird durch den Ansatz

$$k = k_0 T^n \prod [c_i^{\nu_i} \exp(-E / R_m T)] \quad (4.2-38)$$

berücksichtigt. Das Ganze soll nicht weiter vertieft werden. Es wird aber deutlich, daß eine Vielzahl von Ansätzen für die Reaktionsgeschwindigkeit existieren. Jeder kann aber nur eine Approximation an die Realität sein, lediglich mit einer unterschiedlichen Genauigkeit. Aus diesem Grund kann eine numerische Simulation von Verbrennungsvorgängen, die auf diesen Ansätzen beruht, niemals eine absolut zuverlässige Aussage über die Abläufe geben. Kontrollierende Messungen sind daher unablässig.

Zu beachten ist, daß die Reaktionsgeschwindigkeit  $\dot{r}_{i,molar}'''$  (Gleichung (4.2-36)), der Quellterm in der Stoffhaltungsgleichung der Komponente  $i$  (Gleichung (4.2-34)), ist. Es gilt:

$$M_{Fluid} \dot{r}_i''' = \dot{r}_{i,molar}''' \quad (4.2-39)$$

$\dot{r}_i'''$  ist dabei die Fluidmenge in  $\text{kg/m}^3$  und  $\dot{r}_{i,molar}'''$  die Fluidmenge in  $\text{kmol/m}^3$ .  $M_{Fluid}$  ist die Molmasse in  $\text{kg/kmol}$ .

### 4.2.2 Analogiebetrachtung

Betrachtet man die Erhaltungsgleichungen für Masse, Impuls, Energie und Stoff genauer, so stellt man eine ähnliche Struktur fest. Es ist daher möglich sie mit einer einzigen, allgemeinen Schreibweise zu erfassen. Diese lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\psi) = -\nabla \cdot [(\psi)\vec{v} + \phi_\psi] + \sigma_\psi^F + \sigma_\psi^Q \quad (4.2-40)$$

Diese Gleichung kann allgemein für eine extensive Prozeßgröße  $\Psi$  hergeleitet werden. Extensive Prozeßgrößen sind abhängig von der Systemgröße. Dagegen sind intensive Größen unabhängig von der Größe des betrachteten Systems [21].  $\Psi$  steht mit der intensiven Größe  $\psi$  durch folgende Gleichung in Beziehung:

$$\Psi = \int_{V(t)} \psi dV \quad (4.2-41)$$

Hierbei ist  $V$  das Bilanzraumvolumen, und  $\psi$  kann sowohl eine skalare Größe wie auch ein Vektor sein kann. Die Herleitung von Gleichung (4.2-38) läßt sich bei *Marquardt* [19] finden. Die Bedeutungen der Terme in Gleichung (4.2-38) sind im folgenden zusammengestellt:

- $\frac{\partial}{\partial t}(\psi)$  ist die lokale, zeitliche Änderung von  $\psi$
- $\nabla \cdot (\psi)\vec{v}$  ist der konvektiver Transport von  $\psi$  über die Bilanzhülle
- $\nabla \cdot \phi_\psi$  ist der Leitungstransport, wie Wärmeleitung oder Diffusion
- $\sigma_\psi^F$  ist die Zufuhrdichte, welche die zeitliche Änderung von  $\psi$  durch Feldeinflüsse (Gravitation, Magnetfeld) beschreibt
- $\sigma_\psi^Q$  ist die Produktionsdichte, die die zeitliche Änderung von  $\psi$  durch Vorgänge im Inneren des Bilanzraums charakterisiert (Strahlung,...)

Zu betonen ist, daß Gleichung (4.2-38) unabhängig von der verwendeten Koordinatenform ist. Für die verschiedenen Koordinatensysteme muß dann ein geeigneter Nabla-Operator verwendet werden.

Die Feststellung, daß sich die Transportgleichungen strukturell ähneln, ist wichtig für die numerische Berechnung. Auf diese Weise benötigt man nur einen Lösungsalgorithmus, der die allgemeine Transportgleichung löst. Die Gleichungen für Masse, Impuls, Energie und Stoff werden daher simultan gelöst und der numerische Aufwand erheblich reduziert.

Für die Zwecke einer numerischen Strömungssimulation kann die allgemeine Erhaltungsgleichung umgeformt werden, so daß die Bedeutung der einzelnen Terme besser ersichtlich ist. Hierzu wird die allgemeine Variable  $\psi$  durch das Produkt  $\rho\phi$  ersetzt.  $\rho$  ist die Dichte des Fluides und  $\phi$  eine allgemeine, intensive Systemvariable. Desweiteren kann  $\phi_\psi$  durch den Ausdruck

$$\phi_\psi = -\Gamma_\phi \nabla \phi \quad (4.2-42)$$

wiedergegeben werden.  $\Gamma_\phi$  ist ein allgemeiner Austauschkoefizient der Transportvariable  $\phi$ . Abschließend wird die Quelltermsumme durch einen einzigen Quellterm ersetzt. Es gilt:

$$\sigma_\psi^F + \sigma_\psi^Q =: S_\phi \quad (4.2-43)$$

Damit lautet die allgemeine Transportgleichung

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = -\nabla \cdot [(\rho\phi)\vec{v}] + \nabla \cdot [\Gamma_\phi \nabla \phi] + S_\phi \quad (4.2-44)$$

Auf diese Gleichung greift das PHOENICS-Programmpaket zurück, worauf in Kapitel 5 näher eingegangen wird. Die einzelnen Terme können nun in ihren Eigenschaften charakterisiert werden:

- $\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi)$  ist die lokale, zeitliche Änderung der Transportvariablen  $\rho\phi$  im betrachteten, infinitesimalen Kontrollvolumen
- $\nabla \cdot [(\rho\phi)\vec{v}]$  ist der konvektive Transport von  $\rho\phi$  in das Kontrollvolumen
- $\nabla \cdot [\Gamma_\phi \nabla \phi]$  ist der diffusive Transport von  $\rho\phi$  in das Kontrollvolumen
- $S_\phi$  ist der Quellterm von  $\phi$

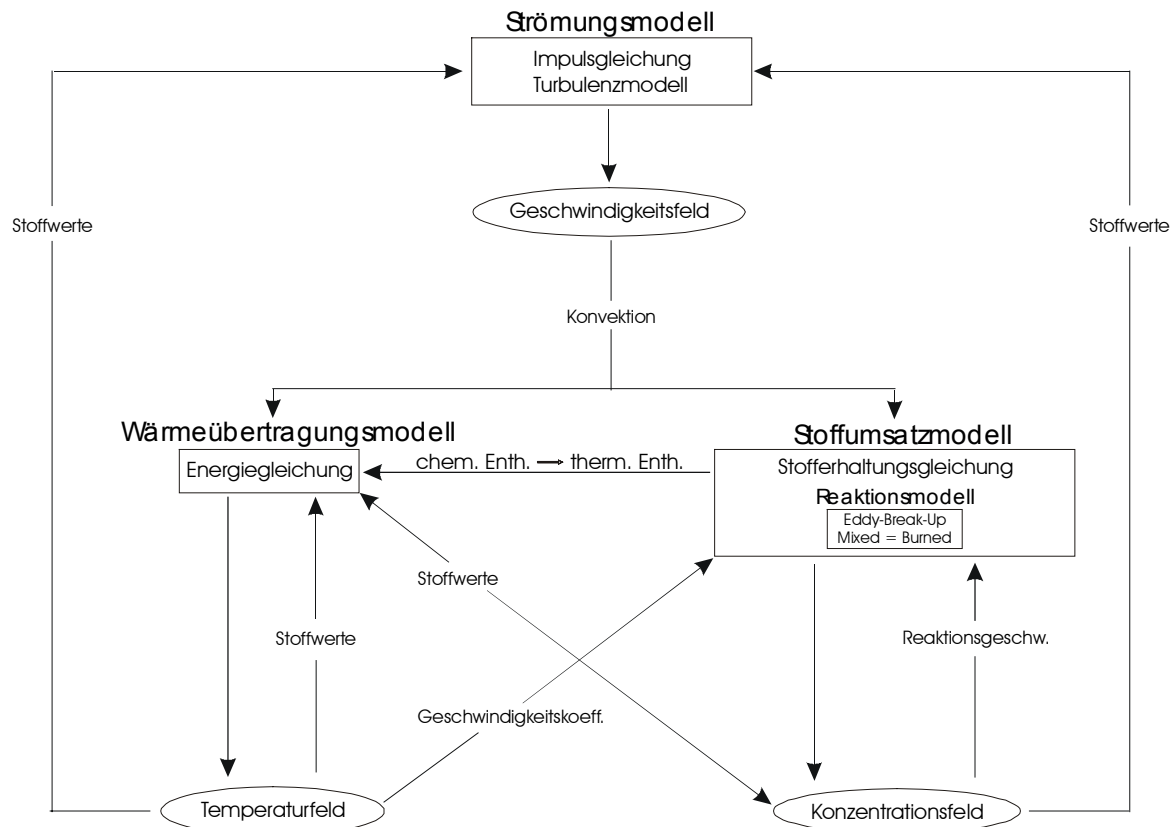
Beispiele für  $\phi$ ,  $\Gamma_\phi$  und  $S_\phi$  für die verschiedenen Erhaltungsgleichungen sind in Tabelle 4.2.T1 zu finden.

Gleichung	$\phi$	$\Gamma_\phi$	$S_\phi$
Kontinuität	1	0	0
Impulsbilanz	$(u, v, w)$	$\eta$	$-\nabla p + \nabla \cdot (\eta \nabla) \vec{v}$ $-\frac{2}{3} \nabla(\eta \nabla \cdot \vec{v}) + \{\rho \vec{g}\}$
Enthalpiebilanz	$h$	$\eta/Pr$	$-dp/dt$
Massenkonzentration	$\xi_i$	$\eta/Sc_i$	$\dot{r}_i'''$

**Tabelle 4.2.T1:** Terme in der allgemeinen Transportgleichung

### 4.2.3 Verknüpfung der Grundmodelle untereinander

Wie man bereits aus den Transportgleichungen erkennen kann, sind die Modelle zur Strömungs-, Wärmeübertragungs-, Mischungs- und Reaktionsbeschreibung nicht unabhängig voneinander. Sie stehen untereinander in Wechselwirkung. Eine anschauliche Darstellung der Kopplungen liefert das folgende Schaubild, das auf Arbeiten von *Mehrwald* [23] beruht.



**Abbildung 4.2.A1:** Verknüpfung der Grundmodelle untereinander

Das Grundgerüst dieses Bildes wird durch die drei Hauptmodelle *Strömungsmodell*, *Wärmeübertragungsmodell* und *Stoffumsatzmodell* aufgebaut. In den Kästchen unter den jeweiligen Modellen sind die zum betreffenden Modell gehörenden Gleichungen und gegebenenfalls Untermodelle wie das Reaktionsmodell dargestellt. Durch die Ovale werden die interessierenden Verteilungsfelder von Geschwindigkeit, Temperatur und Konzentration abgebildet. Die Pfeile deuten die Verknüpfungsrichtungen zwischen den Elementen dieses Schaubildes (Teilmodelle, Verteilungsfelder) an. Die Pfeile werden durch die Kopplungsart unterbrochen.

Das Schaubild besitzt jedoch keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Dies liegt zum einen daran, daß nur die Komponenten dargestellt sind, die auch in dieser Arbeit erläutert werden. Zum anderen ist eine vollständige Darstellung nahezu unmöglich. Abbildung (4.2.A1) zeigt aber auf überschaubare Weise die wichtigsten Verknüpfungen zwischen den Komponenten einer Strömungsberechnung.

#### 4.2.4 Verschiedene Typen der mathematischen Ausgangsgleichungen

Partielle Differentialgleichungen wie die Erhaltungsgleichungen lassen sich in verschiedene Typen unterscheiden. Die Kenntnis des vorliegenden Gleichungstyps ist wichtig für die spätere Auswahl eines effizienten Lösungsalgorithmus der in eine numerische Gleichung transformierten allgemeinen Erhaltungsgleichung. Man unterscheidet

- den elliptischen Typ
- den hyperbolischen Typ
- und den parabolischen Typ

Eine Differentialgleichung bezeichnet man als elliptisch, wenn sie zweiter Ordnung ist, alle zweiten Ableitungen nach den drei Koordinatenrichtungen existieren und die Koeffizienten dieser Ableitungen alle größer null sind.

Hyperbolische Differentialgleichungen unterscheiden sich von elliptischen nur dadurch, daß einer der Koeffizienten der zweiten Ableitungen kleiner null ist. Bei parabolischen Differentialgleichungen fehlt eine zweite Ableitung.

Nach dieser Einteilung sind die Transportgleichungen elliptische, partielle Differentialgleichungen zweiter Ordnung [17].

### 4.3 Zusätzliche Modelle zur Schließung des Gleichungssystems

#### 4.3.1 Allgemeines

Grundsätzlich unterscheidet man bei der Ermittlung von Variablen zwischen den Variablen, die sich aus der Lösung einer Erhaltungsgleichung ergeben und denen, die durch spezielle, analytische Berechnungsgesetze aus den zuvor ermittelten Erhaltungsvariablen berechnet werden. Diese Berechnungsgesetze sind unbedingt notwendig, um ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten. Nur dann ist sichergestellt, daß eine numerische, iterative Rechnung, die vereinfacht durch die Fixpunktgleichung

$$\phi_{(s+1)} = f(\phi_{(s)}) \quad (4.2-1)$$

ausgedrückt werden kann, zu einem Ergebnis führt. Größen, die durch eine Erhaltungsgleichung berechnet werden, bezeichnet man als **gelöste Variablen**. Gelöste Variablen sind:

- der Geschwindigkeitsvektor  $\bar{v}$  (aus Kontinuität und Impulsbilanz)
- die spezifische Enthalpie  $h$  (aus Energiebilanz)
- $(k-1)$  Massenanteile  $\xi_i$  (Stoffhaltungsgleichung)

Die übrigen in den Erhaltungsgleichungen auftauchenden Variablen bezeichnet man als **berechnete Variablen**. Dazu gehören:

- der Druck  $p$ , wobei dieser eine im folgenden erläuterte Sonderstellung einnimmt
- die Temperatur  $T$  und
- die Dichte  $\rho$

Die Berechnungsgesetze der obengenannten, berechneten Variablen sollen im folgenden kurz erläutert werden.

### 4.3.2 Druckberechnung

Für die Druckberechnung gibt es mehrere Ansätze. Zwei bekannte Ansätze sind:

- die *Poisson*-Gleichung und
- die Druckkorrekturgleichung

Die *Poisson*-Gleichung kann exakt abgeleitet werden. Dazu wendet man auf die Impulsgleichung (4.2-21)

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) = -\nabla p - \nabla \cdot [(\rho \bar{v}) \bar{v}] - \nabla \cdot \underline{\underline{\tau}}$$

den Divergenzoperator an. Es folgt:

$$\nabla \cdot \frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{v}) = -\nabla^2 p - \nabla^2 \cdot [(\rho \bar{v}) \bar{v}] - \nabla^2 \cdot \underline{\underline{\tau}} \quad (4.3-2)$$

Umformen liefert:

$$\nabla^2 p = -\frac{\partial}{\partial t}[\nabla \cdot (\rho \bar{v})] - \nabla^2 \cdot [(\rho \bar{v}) \bar{v}] - \nabla^2 \cdot \underline{\underline{\tau}} \quad (4.3-3)$$

Mit der Kontinuität (4.2-5)

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho = -\nabla \cdot (\rho \bar{v})$$

folgt weiter:

$$\nabla^2 p = -\frac{\partial^2}{\partial t^2} \rho - \nabla^2 \cdot [(\rho \bar{v}) \bar{v}] - \nabla^2 \cdot \underline{\underline{\tau}} \quad (\text{Poisson-Gleichung}) \quad (4.3-4)$$

Zu betonen ist, daß diese Gleichung im Gegensatz zu der Impulsgleichung eine skalare Gleichung für  $p$  ist. Da der Spannungstensor  $\underline{\underline{\tau}}$  nur aus Gradienten von Geschwindigkeitskomponenten besteht, läßt sich somit der Druck bei Kenntnis der Dichte und des Geschwindigkeitsvektors an einem Ort bestimmen. Die iterative Lösung dieser Gleichung ist aber ebenso aufwendig, wie die Lösung einer Erhaltungsgleichung im bisher

verwendeten Sinne. Dies liegt daran, daß die *Poisson*-Gleichung aus der Impulserhaltungsgleichung hergeleitet wurde. Aus diesem Grunde wird für numerische Berechnungen meistens auf die Druckkorrekturgleichung zurückgegriffen.

Es existieren zwei Formen der Druckkorrekturgleichung:

- der aus dem korrigierten Druck bestimmte Geschwindigkeitsvektor soll nur die Kontinuität erfüllen
- der aus dem korrigierten Druck bestimmte Geschwindigkeitsvektor soll sowohl die Kontinuität als auch die Impulsbilanz erfüllen

Der letztgenannte Weg soll näher betrachtet werden. Als Start geht man von einer Druckgleichverteilung als Schätzwert für  $p$  aus. Damit wird aus der Impulsgleichung der Geschwindigkeitsvektor  $\bar{v}$  in jedem Punkt des Feldes bestimmt. Dieser Vektor erfüllt zunächst nicht die Kontinuität, was durch eine Korrektur  $\Delta\bar{v}$  berücksichtigt wird. Dabei gilt:

$$\bar{v}^* = \bar{v} + \Delta\bar{v} \quad (4.3-5)$$

Diese Geschwindigkeit  $\bar{v}^*$  erfüllt nicht mehr die Impulsgleichung, was die Einführung einer Druckkorrektur  $\Delta p$  erfordert. Zwischen Druckkorrektur und Geschwindigkeitsvektor wird die Beziehung

$$\Delta p \sim -\nabla \cdot \bar{v} \quad (4.3-6)$$

angesetzt. Dies läßt sich verstehen, indem man beachtet, daß der Ausdruck

$$\nabla \cdot \bar{v}^* = 0 \quad (4.3-7)$$

die Kontinuität für den stationären, inkompressiblen Fall darstellt. Diese wird aber nur von der korrigierten Geschwindigkeit  $\bar{v}^*$  und nicht von  $\bar{v}$  (s.o.) erfüllt. Nach *Gauss* gilt

$$\int_{A(t)} \bar{v} \cdot \bar{n} dA = \int_{V(t)} \nabla \cdot \bar{v} dV \quad (4.3-8)$$

Somit läßt sich auch schreiben:

$$\text{sgn}(\bar{v} \cdot \bar{n}) = \text{sgn}(\nabla \cdot \bar{v}) \quad (4.3-9)$$

Wenn nun

$$\text{sgn}(\nabla \cdot \bar{v}) = 1 \quad (\nabla \cdot \bar{v} > 0) \quad (4.3-10)$$

ist, so gilt auch

$$\text{sgn}(\bar{v} \cdot \bar{n}) = 1 \quad (\bar{v} \cdot \bar{n} > 0) \quad (4.3-11)$$

und Masse strömt aus dem betrachteten Element heraus. Folglich wurde der Druck zu hoch geschätzt, was eine negative Druckkorrektur zur Folge haben muß.

Für die korrigierte Druckverteilung gilt:

$$p^* = p + \Delta p \quad (4.3-12)$$

Mit dem korrigierten Druck wird die Geschwindigkeit wieder aus der Impulsgleichung ermittelt und das Vorgehen beginnt vom neuen. Der vorgestellte Algorithmus wird im Programmpaket PHOENICS im sogenannten SIMPLE-Algorithmus abgebildet (SIMPLE-Semi Implicit Pressure Linked Equations).

Die *Poisson*- sowie die Druckkorrekturgleichung erfordern ein iteratives Vorgehen. Aus diesem Grunde nimmt die Druckberechnung die erwähnte Sonderstellung in der Reihe der berechneten Variablen ein.

### 4.3.3 Temperaturbestimmung

Die Temperatur wird aus der (gelösten) Enthalpiegröße  $h$  nach folgender Beziehung berechnet:

$$dT = c_{P,Gemisch} dh_{therm} \quad (4.3-13)$$

Diese Berechnungsart ist nur für ideale Gase möglich. Die Verbrennungsgase können aber als solche betrachtet werden, da der Druck relativ klein ist (entspricht Größenordnung 0 (Umgebungsdruck)). Es gilt außerdem:

$$h = h_{therm} + h_{chem} \quad (4.3-14)$$

Die Gesamtenthalpie besteht also aus einem Anteil thermischer und chemisch gebundener Enthalpie. Aufgrund dieser Definition weist die Energiegleichung keinen Quellterm auf, der den chemischen Umsatz berücksichtigt.

### 4.3.4 Dichteberechnung

Die Gleichung idealer Gase lautet:

$$\frac{p}{\rho} = RT \quad (4.3-15)$$

Hierbei ist  $R$  die spezifische Gaskonstante. Die Dichte  $\rho$  lässt sich also bestimmen durch:

$$\rho = \frac{p}{RT} \quad (4.3-16)$$

## 4.4 Modellierung spezieller Phänomene zur Reduzierung des Rechenaufwandes

### 4.4.1 Erfassung und Modellierung der Turbulenz

Die oben genannten Grundgleichungen, mit denen das Verhalten von Flammenströmungen wiedergegeben werden kann, gelten auch für turbulente Vorgänge, wie sie bei technischen Verbrennungen auftreten. Das Phänomen der Turbulenz ist von stochastischer, instationärer Natur und bezieht sich auf die Schwankungsbewegung von sogenannten Flüssigkeitsballen quer zur Hauptströmungsrichtung. Dabei tritt das Phänomen der Turbulenz oberhalb einer kritischen Reynoldszahl auf. Flüssigkeitsballen sind Ansammlungen von Fluidteilchen und haben unterschiedliche Größe.

Turbulenz ist ein Stabilitätsproblem der Strömung, das auftritt, wenn die Turbulenzdämpfungseigenschaften zu schwach sind. Stochastische Vorgänge zeichnen sich dadurch aus, daß sie untereinander nicht in Verbindung, nicht korreliert sind. Bei der Berechnung möchte man zur Vereinfachung den instationären Turbulenzanteil in den Erhaltungsgleichungen nicht betrachten. Bei numerischen Simulationen kommt noch die begrenzte Auflösungsmöglichkeit hinzu. Die Schwankungsbewegungen sind von der Größenordnung  $O(1\text{mm})$ , während die Größenordnung des hier verwendeten Brenners mit  $O(1\text{m})$  um den Faktor 1000 größer ist. Die Verwirklichung solcher Auflösungen würde die in dieser Studienarbeit zur Verfügung gestellte Rechnerkapazität überfordern. Dies wäre außerdem nicht sinnvoll, da bei herkömmlichen Anwendungen nur zeitliche Mittelwerte interessieren [17].

Statt dessen wird jede Transportgröße  $\psi(u, v, w, p \text{ etc.})$  in ihren zeitlichen Mittelwert  $\bar{\psi}$  und in einen turbulent schwankenden Anteil  $\psi'$  aufgespalten. Es gilt also:

$$\psi = \bar{\psi} + \psi' \quad (4.4-1)$$

Der zeitliche Mittelwert von  $\psi'$ , also  $\overline{\psi'}$ , ist definitionsgemäß gleich null. Für  $\bar{\psi}$  gilt:

$$\bar{\psi} = \frac{1}{\Delta t} \int_t^{t+\Delta t} \psi(\tau) d\tau \quad (4.4-2)$$

Bei diesem Integral wird der Ort, wovon  $\psi$  im allgemeinen auch abhängt, konstant gehalten. Führt man die Mittelwerte und Schwankungsgrößen für jede Transportgröße in die Transportgleichungen ein und mittelt diese über den Zeitabschnitt  $\Delta t$ , so erhält man die modifizierten Erhaltungsgleichungen. Im Anwendungsfall verschwinden die instationären Terme, da die lokale zeitliche Änderung der allgemeinen Transportvariablen  $\bar{\psi}$  gleich null ist. Der Satz der modifizierten Transportgleichungen in Operatorschreibweise lautet für den vorliegenden Fall:

$$\nabla \cdot [(\bar{\rho})\bar{\vec{v}}] = 0 \quad (\text{Kontinuität}) \quad (4.4-3)$$

$$\nabla \cdot [(\bar{\rho}\bar{\vec{v}})\bar{\vec{v}}] + \nabla \cdot [\underline{\underline{\sigma}} + (\bar{\rho}\bar{\vec{v}}')\bar{\vec{v}}'] = 0 \quad (\text{Impuls}) \quad (4.4-4)$$

Der hinzugekommene Ausdruck  $(\bar{\rho}\bar{\vec{v}}')\bar{\vec{v}}'$  wird scheinbare oder turbulente Schubspannung genannt. Es ist zu beachten, daß grundsätzlich jede Größe in den *Navier-Stokes*-Gleichungen in einen Mittelwert und eine Schwankungsgröße aufgeteilt werden muß. Nach [24] sind aber

Dichtefluktuationen von sehr kleiner Größenordnung und können vernachlässigt werden. Um den Aufwand in Grenzen zu halten, wird nur die turbulente Schwankung der Geschwindigkeit betrachtet und mit an späterer Stelle erläuterten Turbulenzansätzen modelliert.

$$\begin{aligned} \nabla \cdot [(\overline{\rho h})\bar{\mathbf{v}} + (\overline{\tau})\bar{\mathbf{v}} + (\overline{\tau'})\bar{\mathbf{v}}'] - \nabla \cdot (\lambda \nabla \bar{T} + \sum \bar{j}_i \bar{h}_{Diffusion,i}) \\ + \bar{\mathbf{v}} \cdot (\nabla \cdot \overline{\tau}) + \overline{\mathbf{v}' \cdot (\tau')} - \frac{d}{dt} \bar{p} - \Gamma_{Strahl.} = 0 \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \text{(Energie)} \\ \end{array} \quad (4.4-5)$$

$$\nabla \cdot [(\overline{\rho \xi_i})\bar{\mathbf{v}}] - \nabla \cdot \left[ \frac{\eta}{Sc_i} \nabla (\xi_i) \right] - \dot{r}_i''' = 0 \quad \text{(Stoff)} \quad (4.4-6)$$

Die allgemeine Schreibweise der modifizierten Erhaltungsgleichungen lautet somit für den behandelten Fall:

$$\nabla \cdot [(\overline{\psi})\bar{\mathbf{v}} + \phi_{\psi} + \phi_{\psi,turb}] - \sigma_{\psi}^F - \sigma_{\psi}^Q - \sigma_{\psi}^{turb} = 0 \quad (4.4-7)$$

Zeitgemittelte Transportgleichungen werden auch *Reynolds'sche* Gleichungen genannt. Es wird deutlich, daß die allgemeine Erhaltungsgleichung im turbulenten Fall um einen konvektiven, turbulenten Term

$$\phi_{\psi,turb} \quad (4.4-8)$$

und einen turbulenten Quellterm

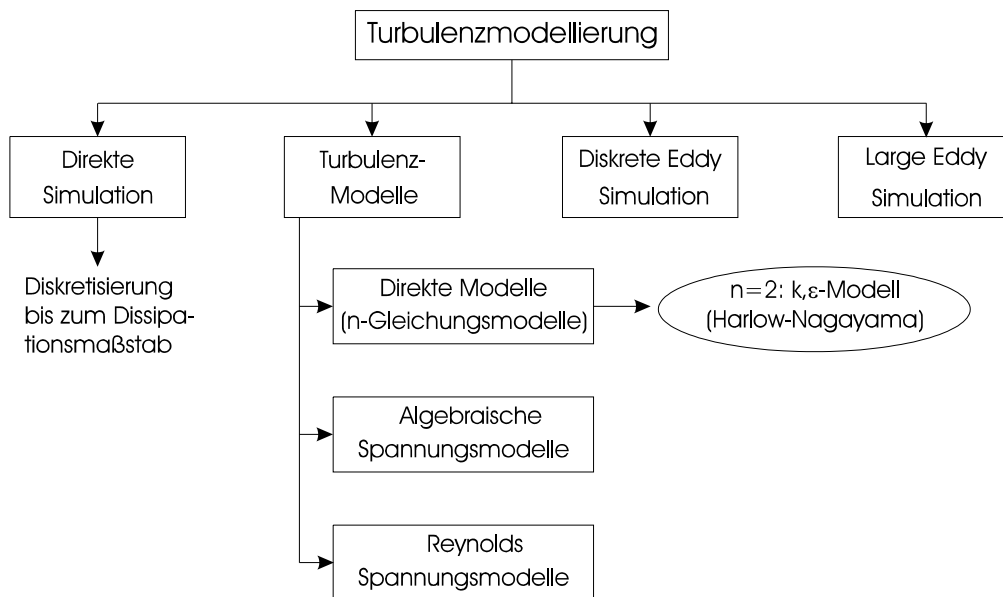
$$\sigma_{\psi}^{turb} \quad (4.4-9)$$

ergänzt werden muß. Bei der Impulsgleichung ist  $\phi_{\psi,turb}$  zum Beispiel identisch mit dem turbulenten Schubspannungstensor  $(\overline{\rho \mathbf{v}'})\bar{\mathbf{v}}'$ , während der turbulente Quellterm nicht besetzt wird. Bei der Kontinuitätsgleichung dagegen tritt kein zusätzlicher, turbulenter Term auf.

Durch diese Terme bekommt man zusätzliche Unbekannte, die ein zusätzliches Gleichungssystem benötigen (Schließungsbedingung der Turbulenz). Würde man außer den Schwankungsbewegungen der Geschwindigkeit noch turbulente Schwankungen von anderen Transportgrößen berücksichtigen, würde man eine Vielzahl von zusätzlichen Gleichungssystemen benötigen. Um den Aufwand zu reduzieren, wird darauf verzichtet. Diese Gleichungssysteme werden durch phänomenologische Ansätze gewonnen. Allgemein nennt man sie

#### 4.4.2 Turbulenzmodelle

Die grundsätzliche Vorgehensweise in den Turbulenzmodellen besteht in der Beschreibung des Energietransfers von kinetischer zu thermischer Energie. Dabei wird die in den Turbulenzwirbeln gespeicherte Energie dissipiert. Die Wirbel werden in immer kleinere Wirbel zerlegt. Diesen Vorgang nennt man Energiekaskade. Für die Wiedergabe dieses Dissipationsweges der turbulenten Energie bestehen eine Vielzahl von Spannungsmodellen. Eine Übersicht bietet nach [17] Abbildung (4.4.A1).



**Abbildung 4.4.A1:** Einteilung der Turbulenzmodelle

Diese verschiedene Modelle unterscheiden sich in ihrem Aufwand und ihren Eigenschaften in der Turbulenzmodellierung teilweise erheblich. Für numerische Zwecke hat sich

#### 4.4.3 Das $k,\varepsilon$ -Turbulenzmodell

bewährt. Dieses Modell wird häufig, wie hier auch, für technische Verbrennungssysteme verwendet. Es gehört zu der Gruppe der direkten Turbulenzmodelle und verwendet zwei Transportgleichungen, die jeweils eine charakteristische Turbulenzlänge und -zeit beschreiben. Der Nachteil von direkten Turbulenzmodellen besteht in der Beschreibung der Turbulenz als isotropes Phänomen. Isotrope Turbulenz bedeutet, daß die mit der Turbulenz verbundenen Eigenschaften, wie die Schwankungsbewegungen, örtlich richtungsunabhängig sind. Gerade die stark richtungsabhängigen Strömungen bei Strahlflammen und die anisotrope Turbulenzstruktur von Rezirkulationsströmungen stellen die Verwendung dieses Turbulenzmodelles in Frage [25]. Modelle, die die Anisotropie besser modellieren sind aber aufwendiger und daher für die numerische Simulation weniger gut geeignet. Ein Beispiel ist das *Reynolds*-Stress-Turbulenzmodell.

Zur Erläuterung des  $k,\varepsilon$ -Modells soll noch einmal die modifizierte, stationäre Impulsgleichung betrachtet werden (Gleichung (4.4-4)):

$$\nabla \cdot [(\overline{\rho \vec{v}}) \vec{v}] + \nabla \cdot [\underline{\underline{\sigma}} + \overline{(\rho \vec{v}') \vec{v}'}] = 0$$

Trennt man den Druckgradienten vom *Stokes*'schen Spannungstensor wieder ab, so folgt:

$$\nabla \cdot [(\overline{\rho \vec{v}}) \vec{v}] - \nabla \cdot [(-\underline{\underline{\tau}}) - \overline{(\rho \vec{v}') \vec{v}'}] = -\nabla \bar{p} \quad (4.4-10)$$

Den Ausdruck

$$\underline{\underline{(-\underline{\underline{\tau}})}} - \overline{(\rho \vec{v}') \vec{v}'} \quad (4.4-11)$$

nennt man turbulenten oder *Reynolds'schen* Spannungstensor.

Liegt nun isotrope Turbulenz vor, so läßt sich die Turbulenz mit skalaren Größen beschreiben. Der Turbulenzzustand eines Ortes im Strömungsfeld wird durch Angabe dieser noch zu verifizierenden Größen vollständig beschrieben. Als skalare Größen führt man die effektive dynamische Viskosität

$$\eta_{eff} = \eta_{lam} + \eta_{turb} \quad (4.4-12)$$

und die kinetische Energie der Turbulenz

$$k = \frac{1}{2} \overline{\vec{v}' \cdot \vec{v}'} \quad (4.4-13)$$

$$\Leftrightarrow k = \frac{1}{2} (\overline{v'^2} + \overline{u'^2} + \overline{w'^2}) \quad (4.4-14)$$

ein.  $\eta_{turb}$  wird als turbulente Viskosität bezeichnet und ist im Gegensatz zur laminaren Viskosität  $\eta_{lam}$  kein Stoffwert, sondern eine charakteristische Turbulenzgröße der Strömung. Setzt man

$$\underline{\underline{\tau}}_{lam} := (-\underline{\underline{\tau}}) \quad (4.4-15)$$

so läßt sich dann nach [26] schreiben:

$$\underline{\underline{\tau}}_{eff} = \underline{\underline{\tau}}_{lam} - \overline{(\rho \vec{v}') \vec{v}'} = \underline{\underline{\tau}}_{lam} + \underline{\underline{\tau}}_{turb} \quad (4.4-16)$$

$$\Leftrightarrow \underline{\underline{\tau}}_{eff} = \underbrace{\eta_{lam} [2\underline{\underline{\Delta}} - \frac{2}{3} \nabla \cdot (\vec{v}) Id_3]}_{\underline{\underline{\tau}}_{lam}} + \underbrace{\eta_{turb} [2\underline{\underline{\Delta}} - \frac{2}{3} \nabla \cdot (\vec{v}) Id_3] - \frac{2}{3} \rho k Id_3}_{\underline{\underline{\tau}}_{turb}} \quad (4.4-17)$$

$$\Leftrightarrow \underline{\underline{\tau}}_{eff} = \eta_{eff} [2\underline{\underline{\Delta}} - \frac{2}{3} \nabla \cdot (\vec{v}) Id_3] - \frac{2}{3} \rho k Id_3 \quad (4.4-18)$$

Der symmetrische Dehnungstensor

$$\underline{\underline{\Delta}} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \bar{v}}{\partial r} & \frac{1}{2} [\frac{1}{r} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \varphi} + r \frac{\partial}{\partial r} (\frac{\bar{u}}{r})] & \frac{1}{2} [\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial r}] \\ \frac{1}{2} [\frac{1}{r} \frac{\partial \bar{v}}{\partial \varphi} + r \frac{\partial}{\partial r} (\frac{\bar{u}}{r})] & \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{u}}{\partial \varphi} + \frac{\bar{v}}{r} & \frac{1}{2} [\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{w}}{\partial \varphi}] \\ \frac{1}{2} [\frac{\partial \bar{v}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial r}] & \frac{1}{2} [\frac{\partial \bar{u}}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial \bar{w}}{\partial \varphi}] & \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \end{pmatrix} \quad (4.4-19)$$

beschreibt die Volumenverzerrung eines infinitesimal kleinen Elementes durch Dehnung [18,27].

Da  $k$  die Summe aus quadrierten Schwankungsgrößen darstellt, Gleichung (4.4-15), ist die kinetische Energie der Turbulenz sehr klein und wird in den meisten Literaturquellen vernachlässigt. Es gilt daher näherungsweise:

$$\underline{\underline{\tau}}_{eff} = \eta_{eff} \left[ 2\underline{\underline{\Delta}} - \frac{2}{3} \nabla \cdot (\bar{\underline{\underline{v}}}) Id_3 \right] \quad (4.4-20)$$

Damit lautet die modellierte Impulsgleichung mit dem turbulenten Schubspannungstensor:

$$\nabla \cdot [(\bar{\rho}\bar{\underline{\underline{v}}})\bar{\underline{\underline{v}}}] - \nabla \cdot [\underline{\underline{\tau}}_{eff}] = -\nabla \bar{p} \quad (4.4-21)$$

Wesentliches Ergebnis der oben beschriebenen Umformungen ist, daß man die Turbulenz berücksichtigen kann, wenn man an Stelle der laminaren Viskosität die effektive Viskosität betrachtet. Diese ergibt sich aus der Summe der laminaren und turbulenten Viskosität. Ziel des  $k, \varepsilon$ -Modell ist es nun, einen Ausdruck für  $\eta_{turb}$  zu finden. Dabei werden die kinetische Turbulenzenergie  $k$  und die Dissipationsrate  $\varepsilon$  betrachtet. Wie für jede intensive, systemgrößenunabhängige Variable kann für  $k$  und  $\varepsilon$  jeweils eine Transportgleichung nach dem Vorbild der allgemeinen, modifizierten Transportgleichung aufgestellt werden. Aus diesem Grund gehört das  $k, \varepsilon$ -Modell zu der Gruppe der 2-Gleichungsmodelle:

$$\nabla \cdot [(\bar{\rho}\bar{k})\bar{\underline{\underline{v}}}] + \frac{\eta_{eff}}{\sigma_{k,eff}} \bar{k} + \bar{\rho}k'\bar{\underline{\underline{v}}}' + \bar{\rho}\bar{\varepsilon} - P = 0 \quad (k\text{-Transportgleichung}) \quad (4.4-22)$$

$$\nabla \cdot \left[ (\bar{\rho}\bar{\varepsilon})\bar{\underline{\underline{v}}}] + \frac{\eta_{eff}}{\sigma_{\varepsilon,eff}} \bar{\varepsilon} + \bar{\rho}\varepsilon'\bar{\underline{\underline{v}}}' \right] + c_{2,\varepsilon} \bar{\rho} \frac{\bar{\varepsilon}}{k} \bar{\varepsilon} - c_{1,\varepsilon} P \frac{\bar{\varepsilon}}{k} = 0 \quad (\varepsilon\text{-Transportgleichung}) \quad (4.4-23)$$

Das Produkt von Schwankungsgrößen in den Transportgleichungen ist klein und wird im allgemeinen vernachlässigt.  $\sigma_{k,eff}$  und  $\sigma_{\varepsilon,eff}$  sind die *Prandtl-Zahlen* der kinetischen, turbulenten Energie und der Dissipation. *Prandtl-Zahlen* sind Austauschkoefizienten der jeweils betrachteten Größe. Bei Stoffübertragungsgleichungen ist dies beispielsweise die *Schmidt-Zahl*  $Sc_i$ .  $c_{1,\varepsilon}$  und  $c_{2,\varepsilon}$  sind empirische Konstanten, die experimentell bestimmt werden müssen. In der  $k$ -Transportgleichung stellt  $\varepsilon$  die Senke und  $P$  die Quelle turbulenter, kinetischer Energie dar.  $P$  wird durch die Stärke der Wirbelbildung bestimmt, wobei man  $P$  wie folgt formulieren kann:

$$P = \underbrace{\approx}_{turb} \left[ \begin{pmatrix} \sqrt{2}e_1 & e_4 & e_5 \\ e_4 & \sqrt{2}e_2 & e_6 \\ e_5 & e_6 & \sqrt{2}e_3 \end{pmatrix} : [\nabla \cdot \bar{\underline{\underline{v}}}] \right]^2 \quad (4.4-24)$$

Dabei ist der Ausdruck in der Klammer ein sechsdimensionaler Vektor mit den Einheitsvektoren  $e_i$ , während  $P$  ein Skalar ist. Dies dient nur der kompakten Schreibweise. Eine ausgeschriebene Darstellung findet man in den Ausführungen von *Görner* [17].

Nachdem man die beiden oben genannten Transportgleichungen gelöst hat, und man damit das  $k, \varepsilon$ -Feld kennt, läßt sich  $\eta_{turb}$  nach der *Prandtl-Kolmogorov-Beziehung* bestimmen:

$$\eta_{eff} = c_{\eta} \bar{\rho} \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (4.4-25)$$

$c_{\eta}$  ist wie  $c_{1,\varepsilon}$  und  $c_{2,\varepsilon}$  eine empirische Konstante. Zahlenwerte für diese Konstanten lassen sich in [17] finden.

Aus der Tatsache, daß  $\eta_{eff}$  bereits in den Transportgleichungen für  $k$  und  $\varepsilon$  enthalten ist, erkennt man, daß die Bestimmung der effektiven dynamischen Viskosität  $\eta_{eff}$  ein iterativer Prozeß ist.

#### 4.4.4 Das Eddy-Break-Up-Modell

Das in Abschnitt 4.2.1 behandelte Reaktionsmodell behandelte zunächst nur den Umsatz für den Fall, daß benötigte Edukte zu jeder Zeit ausreichend vorhanden sind. Es handelte sich dabei um die sogenannte kinetische Reaktionsgeschwindigkeit. Das Vorhandensein einer ausreichenden Menge Edukt ist gerade bei Diffusionsflammen, wie beim vorliegenden Brenner, keineswegs immer der Fall. Vielmehr wird die Reaktionsgeschwindigkeit zusätzlich mischungskontrolliert. Der in der oben aufgeführten turbulenten Stoffhaltungsgleichung vorkommende Quellterm  $\dot{r}'''$  muß dahingehend modifiziert werden. Dies leistet das Eddy-Break-Up-Modell.

Die bei turbulenten Strömungen durch die Turbulenz ausgelöste Durchmischung ist um Größenordnungen größer als die reine Durchmischung durch Diffusion. Deshalb läßt sich die mischungskontrollierte Reaktionsgeschwindigkeit durch die in Kapitel 4.4.3 vorgestellte Turbulenzenergie  $k$  und die Dissipation  $\varepsilon$  beschreiben. Es gilt nach [17,11]:

$$\dot{r}''' = \min \left\{ \begin{array}{l} c_{EBU} \bar{\rho} \xi_{Pr} \frac{1}{(1 + l_{stoch})} \frac{\bar{\varepsilon}}{k} \\ \dot{r}'''_{Arrhenius} \end{array} \right\} \quad (4.4-26)$$

Obere Gleichung gilt für die mischungskontrollierte und die untere Gleichung für die kinetisch kontrollierte Reaktionsgeschwindigkeit. Die effektive Reaktionsgeschwindigkeit ist die kleinere von beiden.  $c_{EBU}$  ist eine spezielle Konstante des Eddy-Break-Up-Modells,  $\xi_{Pr}$  ist der Massenanteil Produkt und  $l_{stoch}$  ist der stöchiometrische Luftbedarf,

$$l_{stoch} = \frac{\dot{m}_{L,stoch}}{\dot{m}_{Br}} \quad (4.4-27)$$

#### 4.4.5 Das Mixed = Burned-Modell

Die meisten technischen Verbrennungsrechnungen gehen von einer vollständigen Verbrennung aus und betrachten daher bei einphasigen Reaktionen nur die Komponenten Brennstoff, Oxidator und Produkt. Man benötigt also zwei Erhaltungsgleichungen für zwei Massenkonzentrationen. Die dritte Massenkonzentration ergibt sich aus

$$\sum_i \xi_i = 1 \quad (4.4-28)$$

Das Eddy-Break-Up-Modell macht lediglich eine Aussage über den zeitlichen Reaktionsumsatz, wenn man voraussetzt, daß Zündbedingungen vorliegen. Es fehlt also ein Modell, das angibt, wann eben diese Zündbedingungen eintreten. Hier wird nun häufig das Mixed = Burned-Modell verwendet, das davon ausgeht, daß ein Gemisch zündet, wenn ein stöchiometrisches Verhältnis von Brennstoff und Oxidant vorliegt. Das Modell benötigt deshalb eine Größe, die den Mischungszustand charakterisiert. Hierzu wird die Größe  $\zeta$  definiert:

$$\zeta = \frac{\dot{m}_{Ox,stöch} - \dot{m}_{Ox}}{\dot{m}_{ges}} = \frac{\dot{m}_{Ox,stöch}}{\dot{m}_{Br}} \frac{\dot{m}_{Br}}{\dot{m}_{ges}} - \xi_{Ox} \quad (4.4-29)$$

$$\Leftrightarrow \zeta = l_{stöch} \xi_{Br} - \xi_{Ox} \quad (4.4-30)$$

Hieraus folgt:

$$\begin{aligned} \zeta > 0 &\quad \Rightarrow \text{Brennstoffüberschuß} \\ \zeta = 0 &\quad \Rightarrow \text{stöchiometrische Verbrennung} \\ \zeta < 0 &\quad \Rightarrow \text{Luftüberschuß} \end{aligned}$$

Für numerische Rechnungen ist es günstiger die Mischungsvariable dimensionslos zu machen. Es wird der sogenannte Mischungsbruch oder mixture-fraction  $f$  verwendet:

$$f = \frac{\zeta - \xi_{Ox}}{\xi_{Br} - \xi_{Ox}} \quad (4.4-31)$$

mit  $\xi_{Ox} = -1; \xi_{Br} = l_{stöch}$  folgt:

$$f = \frac{1 + l_{stöch} \xi_{Br} - \xi_{Ox}}{1 + l_{stöch}} \quad 0 \leq f \leq 1 \quad (4.4-32)$$

Bei Berechnungen geht man nun so vor, daß man eine Transportgleichung für  $f$  und  $\xi_{Br}$  löst. Die Massenkonzentrationen des Oxidators und des Produktes lassen sich dann aus  $f$  und  $\xi_{Br}$  berechnen. Prinzipiell ist die Erhaltungsgleichung von  $f$  eine Kombination der Erhaltungsgleichungen von  $\xi_{Br}$  und  $\xi_{Ox}$ .

Zündung des Brennstoff / Luft-Gemisches tritt dann ein, wenn sich für den Mischungsbruch  $f$  der stöchiometrische Wert  $f_{stöch}$  einstellt. Bei stöchiometrischem Brennstoff - Luft - Verhältnis gilt:

$$\frac{\xi_{Ox}}{\xi_{Br}} = \frac{\dot{m}_L}{\dot{m}_{Br}} = (!) l_{stöch} \quad (4.4-33)$$

$$\Leftrightarrow f_{stöch} = \frac{1 + (l_{stöch} - \frac{\xi_{Ox}}{\xi_{Br}}) \xi_{Br}}{1 + l_{stöch}} = \frac{1 + (l_{stöch} - l_{stöch}) \xi_{Br}}{1 + l_{stöch}} \quad (4.4-34)$$

Es ergibt sich also für  $f_{stoch}$ :

$$f_{stoch} = \frac{1}{1 + l_{stoch}} \quad (4.4-35)$$

## 5 Numerische Umsetzung des Problems im Programmpaket PHOENICS

### 5.1 Allgemeines

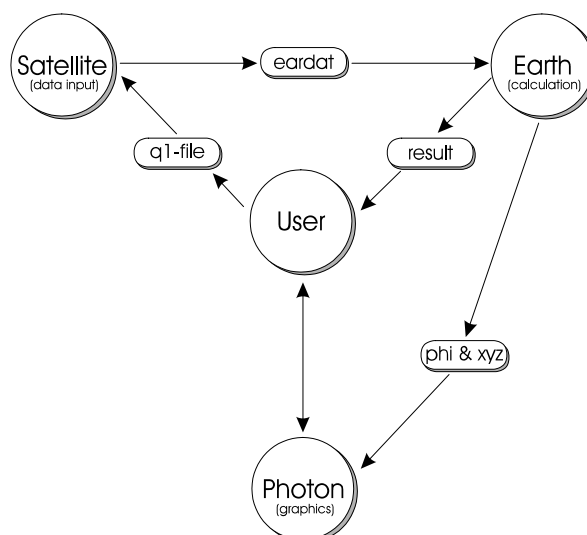
#### 5.1.1 Entwicklung

Das kommerzielle Programmpaket PHOENICS ist ein Produkt der Firma CHAM (Concentration, Heat and Momentum) im Bereich CFD-Techniken (Computational Fluid Dynamics) und basiert auf Arbeiten von Professor *D.B. Spalding*, der 1969 CHAM gegründet hat. Im Laufe der Jahre wurde der in FORTRAN geschriebene Programmcode erweitert und 1981 zum ersten Mal kommerziell weitergegeben. Seit 1984 arbeitet PHOENICS mit einer eigenen, auf FORTRAN basierenden Eingabesprache, der sogenannten PIL (PHOENICS Input Language).

Es ist geeignet für die Simulation von ein- oder zweiphasigen Strömungsproblemen mit oder ohne Verbrennung, mit oder ohne Wärmetransport, mit oder ohne Wärmestrahlung. Die Probleme können stationär oder auch instationär sein. Turbulente Strömungen können durch die im Paket enthaltenen Zusatzmodelle simuliert werden. Berechnungsgesetze für bestimmte Größen sind im Paket integriert und können vom Benutzer je nach Bedarf verwendet werden. Der Anwender hat aber auch die Möglichkeit eigene, selbst definierte Berechnungsgesetze zu implementieren.

#### 5.1.2 Programmstruktur

Zu dem in dieser Arbeit verwendeten PHOENICS-2.1-Paket gehören verschiedene Teilprogramme, die jeweils unterschiedliche Aufgaben übernehmen. Einen Überblick über die Zusammenhänge zwischen den Teilprogrammen gibt Abbildung (5.1.A1)



**Abbildung 5.1.A1:** PHOENICS-Programmstruktur

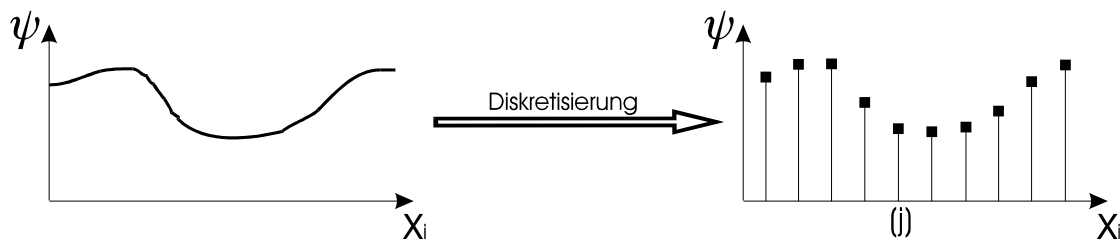
‘*Satellite*’ ist die wesentliche Eingabeschnittstelle zum Benutzer. Mit diesem Programmteil wird der ‘*q1-file*’ kompiliert, der für den jeweiligen Problemfall die Befehle für die Gittergenerierung, für die Geometrieerstellung und für die Festsetzung der Randbedingungen

enthält. 'eardat' ist der compilierte *q1-file*, wodurch er in eine Form gebracht worden ist, die für das Berechnungsprogramm 'Earth' geeignet ist. *Earth* enthält den eigentlichen Lösungsalgorithmus, also auch die in Differenzenform abgebildete allgemeine Transportgleichung. Ergebnis dieses Programmabschnittes ist der 'result-file' und der 'phi-file', in denen die Ergebnisse zur zahlenmäßigen und graphischen Auswertung gespeichert werden. So greift das Graphikprogramm 'Photon' auf den *phi-file* zurück, um die Ergebnisse, wie Geschwindigkeits-, Druck- oder Temperaturverteilung graphisch zu veranschaulichen.

## 5.2 Funktionsweise des Lösungsalgorithmus von PHOENICS

### 5.2.1 Gittersystem

Numerische Lösungen basieren darauf, daß man die stetige Verteilung einer allgemeinen Variablen  $\psi$  durch Stützpunkte wiedergegeben kann. Dabei wird versucht, die Stützstellenanzahl so zu wählen, daß sie möglichst gering ist, ohne einen wesentlichen Informationsverlust für die Variable  $\psi$  in Kauf nehmen zu müssen. So kann man auch in Gebieten, in denen man ein diffizileres Strömungsbild erwartet, die Diskretisierung feiner wählen. Die Diskretisierung wird in Abbildung (5.2.A1) veranschaulicht.



**Abbildung 5.2.A1:** Diskretisierung einer stetigen Kurve

Wesentlich ist nun, daß Differentialausdrücke durch Differenzenquotienten abgebildet werden können. Sei  $x_i$  eine beliebige Koordinate der Variable  $\psi$ , dann gilt:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x_i} = \lim_{\Delta x_i \rightarrow 0} \frac{\Delta \psi}{\Delta x_i} \approx \frac{\psi_2 - \psi_1}{x_2 - x_1} \quad (5.2-1)$$

Für die zweite Ableitung sind schon drei Stützstellen erforderlich. Zu betonen ist, daß die Zeit ebenfalls eine Koordinate darstellt. Im allgemeinen Fall hängt  $\psi$  von der Zeit  $t$  und den drei Raumrichtungen, also vier Koordinaten ab. Man unterscheidet die zeitliche und örtliche Diskretisierung.

Die **zeitliche** Diskretisierung wird durch den Zeitabstand zweier Momentanbetrachtungen charakterisiert. Dieser Zeitabstand muß so gewählt werden, daß wichtige, instationäre Informationen nicht verlorengehen. Man orientiert sich bei der Zeitdiskretisierung an einer für das Problem charakteristischen Zeit. Dies kann die mittlere Durchströmzeit durch eine Gitterzelle sein. Da der vorliegende Anwendungsfall als stationär angesehen werden kann, soll auf die zeitliche Diskretisierung nicht näher eingegangen werden.

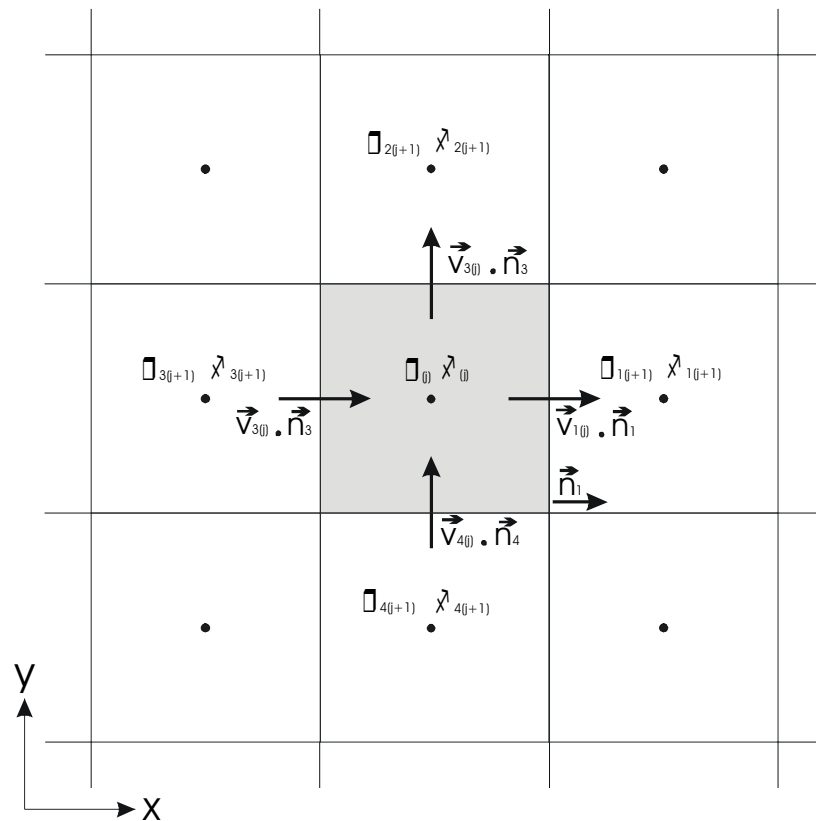
Die **örtliche** Diskretisierung wird durch das Gittersystem wiedergegeben. Ein Gitterplatz entspricht einer (örtlichen) Stützstelle. Man unterscheidet

- Finite Elemente-Gitter und
- Finite-Differenzen-Gitter

**Finite-Elemente-Gitter** sind integrale, unstrukturierte Gitter, deren Elementform sich in weiten Grenzen variieren läßt. Auf diese Weise lassen sich kompliziertere Körperkonturen nachbilden. Insbesondere müssen die Gitterelemente keine Viereckelemente sein. Diese Gitter werden vorwiegend in FEM-Anwendungen in der Festigkeitsberechnung von Strukturen verwendet.

**Finite-Differenzen-Gitter** sind strukturierte Gitter, die aus Viereckelementen bestehen. Der numerische Aufwand ist erheblich geringer, als bei Finite-Elemente-Gittern. Aus diesem Grunde sind sie bei CFD-Rechnungen am weitesten verbreitet. Nachteilig ist, daß Körperkonturen oft nur durch Treppenfunktionen wiedergegeben werden können. Dies verfälscht die Einflüsse der Wandreibung. Um diesen Nachteil zu umgehen, können auch sogenannte körperangepaßte Koordinaten (*bfc*-body fitted coordinates) verwendet werden. Diese wurden in dieser Arbeit für die isotherme, dreidimensionale Vergleichsrechnung verwendet, nicht aber für die Verbrennungsrechnung, um den numerischen Aufwand in Grenzen zu halten. Vorteil der *bfc*-Simulation ist die realistischere Darstellung von Körperkonturen, wodurch Einflüsse der Wandreibung originalgetreuer untersucht werden können. Außerdem läßt sich die Gitterform der Hauptströmungsrichtung anpassen, wodurch die Geschwindigkeitsvektoren bei *bfc*-Gittern meistens nahezu senkrecht zu der Gitterelementoberfläche stehen. Dies führt zu genaueren Lösungen, da die Geschwindigkeitsvektoren für die Bilanzierung am Gitterelement weniger häufig auf verschiedene Durchtrittsflächen aufgeteilt werden müssen. Für die Bilanzierung ist ein senkrechter Durchtritt der (Teil-)Geschwindigkeitsvektoren durch die Elementoberfläche erforderlich. Wesentlicher Nachteil ist die erheblich größere numerische Komplexität, da allein die Gittergenerierung bereits großen Aufwand erfordert. Aber auch *bfc*-Gitter verwenden verzerrte Viereckelemente und gehören deshalb zu der Gruppe der Finite-Differenzen-Gitter.

Das verwendete Finite-Differenzen-Gitter von PHOENICS ist nach Görner [17] ein versetztes Gitter, da die skalaren Eigenschaftswerte des Elements (Temperatur, Konzentration etc.) an anderen Stellen definiert sind als die vektoriellen Geschwindigkeitsgrößen. Bei dem hier verwendeten zentrierten Gitter sind die skalaren Eigenschaftswerte im geometrischen Mittelpunkt der Zelle, die Stützpunkte der Geschwindigkeitskomponenten dagegen an der jeweiligen Grenzfläche der Volumenzelle definiert. Weil die Geschwindigkeitskomponenten den konvektiven Transport einer skalaren Eigenschaft in die Volumenzelle bestimmen, kann dieser Transport ohne zusätzlich erforderliche Interpolation genau wiedergegeben werden. Durch die Wahl eines zentrierten Gitters wird die Anzahl der notwendigen Interpolationen verringert und die Kontinuitätsgleichung auf einfache Weise erfüllt. Nachteilig ist die etwas aufwendigere Programmierung. In Abbildung (5.2.A2) ist die verwendete Gitterstruktur veranschaulicht. Die verwendeten Indizes werden im folgenden Abschnitt 5.2.2 erläutert.



**Abbildung 5.2.A1:** Gitterdefinition nach [31]

Abschließend ist zu betonen, daß die zu berechnende Approximation unabhängig von der zeitlichen und örtlichen Diskretisierung sein muß. So darf sich die Lösung durch die Verwendung eines zunehmend feineren Gitters nicht grundlegend ändern [17]. Das Gitter muß aber immer so fein aufgelöst sein, daß der Gitterabstand von gleicher Größenordnung ist, wie der Weg, in dem sich Strömungsgrößen wesentlich ändern. Eine zu grobe Diskretisierung, örtlich wie zeitlich, führt zu Konvergenzschwierigkeiten.

### 5.2.2 Numerische Umsetzung der allgemeinen Transportgleichung

Wie in Kapitel 4 beschrieben, lautet die auf numerische Zwecke zugeschnittene, allgemeine Transportgleichung in Operator Schreibweise, Gleichung (4.2-44):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\phi) = \nabla \cdot [\Gamma_{\phi} \nabla \phi] - \nabla \cdot [(\rho\phi)\vec{v}] + S_{\phi}$$

Diese Gleichung muß in jedem Punkt des  $\phi$ -Feldes erfüllt sein. Daher muß auch die numerische Berechnung auf dieser Gleichung basieren. Da, wie beschrieben, in einer numerischen Simulation ein stetiges, differenzierbares Feld durch eine Anzahl von repräsentativen Stützstellen wiedergegeben wird, kann die obere Differentialgleichung nur durch eine Differenzengleichung angenähert werden.

Gittervolumenelemente sind nicht infinitesimal klein. Aus diesem Grund wird die obere Gleichung über das Elementvolumen  $V_E$  integriert:

$$\int_{V_E} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV = \int_{V_E} \nabla \cdot [\Gamma_\phi \nabla \phi] dV - \int_{V_E} \nabla \cdot [(\rho\phi)\vec{v}] dV + \int_{V_E} S_\phi dV \quad (5.2-2)$$

Diese Differentialgleichung muß nun für die numerische Simulation in eine Differenzgleichung umgeschrieben werden. Die Transformation soll für die einzelnen Terme einzeln betrachtet werden:

### Transienter Term:

$$\int_{V_E} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV \approx \frac{V_E}{t_2 - t_1} [(\rho\phi)_{t_2(j)} - (\rho\phi)_{t_1(j)}] \quad (5.2-3)$$

Hierbei ist  $\Delta t = t_2 - t_1$  der Zeitschritt in der gewählten Diskretisierung. Der rechte Klammerausdruck ist die Änderung der Größe  $\rho\phi$  im betrachteten Volumenelement ( $j$ ) während dieses Zeitschrittes. Zu beachten ist, daß  $t_2$  den momentanen Zeitpunkt darstellt. Weitere Ausformulierung ergibt:

$$\int_{V_E} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV \approx \frac{V_E}{\Delta t} (\rho_{t_2(j)} \phi_{t_2(j)} - \rho_{t_1(j)} \phi_{t_1(j)}) \quad (5.2-4)$$

### Konvektiver Term:

Mit dem *Gauß'schen* Divergenz-Satz läßt sich ein Volumenintegral in ein Oberflächenintegral überführen. Er lautet:

$$\int_{V_E} \nabla \cdot \vec{s} dV = \int_{A_E} \vec{s} \cdot \vec{n} dA \quad (5.2-5)$$

wobei  $\vec{n}$  der nach außen gerichtete Normalenvektor der Oberfläche ist.  $\vec{s}$  sei eine allgemeine, vektorielle Größe. Damit läßt sich der konvektive Term wie folgt umformen:

$$\int_{V_E} \nabla \cdot [(\rho\phi)\vec{v}] dV = \int_{A_E} [(\rho\phi)\vec{v}] \cdot \vec{n} dA \approx \sum_{i=1}^{6 \text{ Seitenflächen}} (\rho\phi)_{|i} \vec{v}_i \cdot \vec{n}_i A_{E_i} \approx \sum_{i=1}^6 (\rho\phi)_{|i} v_i A_{E_i} \quad (5.2-6)$$

Führt man

$$v_i = \vec{v}_i \cdot \vec{n}_i \quad (5.2-7)$$

als jeweilige Geschwindigkeitsnormale zur betrachteten Seitenfläche  $A_{E_i}$  ein, so folgt aus Gleichung (5.2-6):

$$\int_{V_E} \nabla \cdot [(\rho\phi)\vec{v}] dV \approx \sum_{i=1}^6 (\rho\phi)_{|i} v_i A_{E_i} \quad (5.2-8)$$

$A_{E_i}$  ist der Oberflächenteil des Kontrollvolumens, der senkrecht zur jeweiligen Richtung  $\bar{n}_i$  ist.  $A_{E_i}$  stellt außerdem die Trennfläche zwischen dem betrachteten Element ( $j$ ) und der Nachbarzelle ( $j+1$ ) in  $\bar{n}_i$ -Richtung dar. Zur Verdeutlichung: Der Index ( $j$ ) bezeichnet die betrachtete Zelle und ( $j+1$ ) eine, zunächst beliebige, der sechs Nachbarzellen. Um die Nachbarzellen unterscheiden zu können, wird nun der Index ( $i$ ) verwendet. Somit wäre  $\bar{n}_3$  der Normalenvektor der Fläche  $A_{E_3}$ , der in Richtung des dritten Nachbarelementes der Zelle ( $j$ ) weist.

Gleichung (5.2-8) wird um so genauer, je feiner diskretisiert wird. Der Schwachpunkt ist die Verwendung eines mittleren Wertes

$$(\rho\phi)_i \quad (5.2-9)$$

für die gesamte Fläche  $A_{E_i}$ . Das Oberflächenintegral kann dagegen exakt durch die Summe über die sechs Seitenflächen wiedergegeben werden, da das Gitterelement einen Quader darstellt. Zu beachten ist, daß Gleichung (5.2-9) den Wert von  $(\rho\phi)$  auf dem Volumenrand beschreibt. Dieser müßte durch Interpolation ermittelt werden, da die skalare Größe  $(\rho\phi)$ , wie erwähnt, im Zentrum des Volumenelements definiert ist. Der Algorithmus von PHOENICS geht einen etwas anderen Weg. Er betrachtet auf dem jeweiligen Teil der Volumenelementoberfläche den Strom, der konvektiv aus der aktuellen Zelle ( $j$ ) heraus und in die Nachbarzelle  $i(j+1)$  hinein transportiert wird, also  $(\rho\phi)_i$ . Analog wird der konvektive Strom von  $(\rho\phi)$  aus der Nachbarzelle  $i(j+1)$  in die Zelle ( $j$ ) berücksichtigt, also  $(\rho\phi)_{i(j+1)}$ . Der Ausdruck in der Summe von Gleichung (5.2-8) wird wie folgt formuliert:

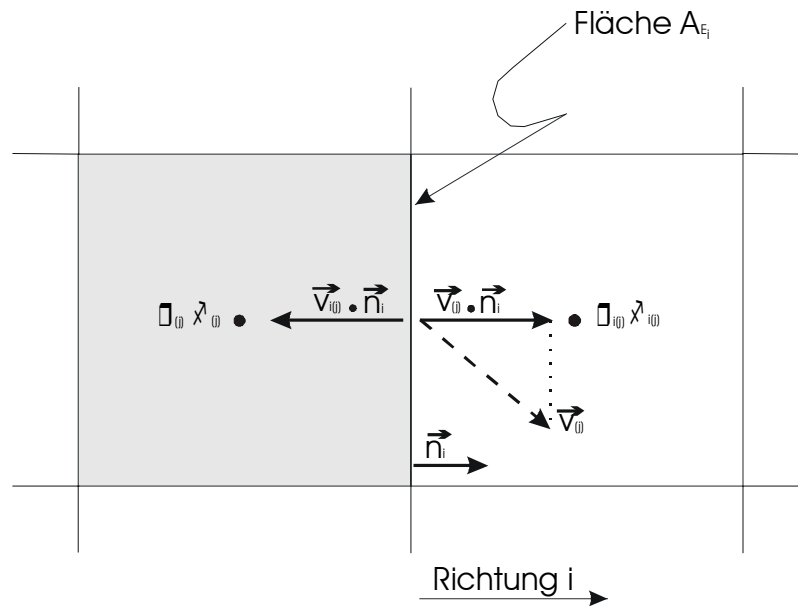
$$(\rho\phi)_i \bar{v}_i \cdot \bar{n}_i A_{E_i} = \rho_{(j)} \phi_{(j)} \bar{v}_{i(j)} \cdot \bar{n}_{i(j)} A_{E_i} + \rho_{i(j+1)} \phi_{i(j+1)} \bar{v}_{i(j+1)} \cdot \bar{n}_{i(j)} A_{E_i} \quad (5.2-10)$$

$$= \rho_{(j)} \phi_{(j)} v_{i(j)} A_{E_i} - \rho_{i(j+1)} \phi_{i(j+1)} v_{i(j+1)} A_{E_i} \quad (5.2-11)$$

mit  $v_{i(j+1)} = -v_{i(j)}$  folgt daraus:

$$(\rho\phi)_i \bar{v}_i \cdot \bar{n}_i A_{E_i} = (\rho_{(j)} \phi_{(j)} + \rho_{i(j+1)} \phi_{i(j+1)}) v_{i(j)} A_{E_i} \quad (5.2-12)$$

Die in diesen Gleichungen vorkommenden Größen sind in Abbildung (5.2.A2) dargestellt. Zu ergänzen ist, daß der Wert von  $(\rho\phi)$  in der Zelle ( $j$ ) keinen Index ( $i$ ) erhält, da er im Mittelpunkt des Gebildes definiert ist, das aus der betrachteten Zelle ( $j$ ) und den sechs Nachbarzellen aufgebaut wird. Er ist daher für alle sechs Nachbarzellenrichtungen gleich.



**Abbildung 5.2.A3:** Numerische Umsetzung des konvektiven Transportes von  $(\phi \lambda)$

Damit ergibt sich nun:

$$\int_{V_E} \nabla \cdot [(\rho \phi) \vec{v}] dV \approx \sum_{i=1}^6 (\rho_{(j)} \phi_{(j)} + \rho_{i(j+1)} \phi_{i(j+1)}) v_{i(j)} A_{E_i} \quad (5.2-13)$$

### Diffusiver Term:

Auch hier findet der *Gauß*'sche Satz Anwendung, da  $\nabla \phi$  ebenfalls ein Vektor ist:

$$\int_{V_E} \nabla \cdot [\Gamma_\phi \nabla \phi] dV = \int_{A_E} [\Gamma_\phi \nabla \phi] \cdot \vec{n} dA \approx \sum_{i=1}^6 [\Gamma_\phi (\nabla \phi) \cdot \vec{n}_{A_E}]_{i} \quad (5.2-14)$$

Da die Summe noch immer einen Differentialausdruck enthält, wird weiter umgeformt:

$$[\Gamma_\phi (\nabla \phi) \cdot \vec{n}_{A_E}]_{i} \approx \bar{\Gamma}_{\phi i} (\nabla \phi)_{i} \cdot \vec{n}_i A_{E_i} \approx \bar{\Gamma}_{\phi i} \frac{(\phi_{i(j+1)} - \phi_{(j)})}{x_{i(j+1)} - x_{i(j)}} A_{E_i} \quad (5.2-15)$$

$\Delta x_i = x_{i(j+1)} - x_{i(j)}$  stellt den Abstand zwischen den Stützpunkten  $(j+1)$  und  $(j)$  in der Koordinatenrichtung  $\vec{n}_i$  dar. Zur Vereinfachung definiert man einen mittleren Austauschkoefizienten wie folgt:

$$\bar{\Gamma}_{\phi i} := \frac{\Gamma_{\phi i(j+1)} + \Gamma_{\phi i(j)}}{2} \quad (5.2-16)$$

An der Summengleichung (5.2-15) erkennt man, daß das Skalarprodukt mit dem Normalenvektor, die in die  $n_i$ -Richtung projizierte Änderung der Variablen  $\phi$  darstellt.

**Quellterm:**

Der linearisierte Quellterm wird in der PHOENICS-Literatur wie folgt angegeben:

$$\int_{V_E} S_\phi dV \approx V_E c_{\phi(j)} (V_{\phi(j)} - \phi_{(j)}) =: (Quelle) \quad (5.2-17)$$

$c_{\phi(j)}$  und  $V_{\phi(j)}$  sind Koeffizienten in der linearisierten Form. Es können grundsätzlich nur lineare Quellterme direkt in die Differenzengleichung integriert werden. Quellterme höherer Ordnung müssen linearisiert und über Umwege implementiert werden. Dies ist in der Mehrzahl der Quellterme der Fall. Da die verschiedenen, linearisierten Quellterme eine unterschiedliche Struktur haben, soll die allgemeine, linearisierte Quelle mit *(Quelle)* wiedergegeben werden. Zu betonen ist, daß mit Gleichung (5.2-17) Quellterme definiert werden können, die entweder von  $\rho$  abhängig oder unabhängig sein können. Letzteres erreicht man durch ein großes  $V_{\phi(j)}$ ,

$$V_{\phi(j)} \gg \phi_{(j)} \quad (5.2-18)$$

bei gleichzeitig kleinem  $c_{\phi(j)}$ .

Mit den oben erläuterten Termen läßt sich die Differentialgleichung (Gleichung (5.2-2))

$$\int_{V_E} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) dV = \int_{V_E} \nabla \cdot [\Gamma_\phi \nabla \phi] dV - \int_{V_E} \nabla \cdot [(\rho \phi) \bar{v}] dV + \int_{V_E} S_\phi dV$$

somit in die Differenzengleichung

$$\frac{V_E}{\Delta t} (\rho_{i_2(j)} \phi_{i_2(j)} - \rho_{i_1(j)} \phi_{i_1(j)}) = \sum_{i=1}^6 \left\{ \bar{\Gamma}_{\phi_i} \frac{(\phi_{i(j+1)} - \phi_{(j)})}{\Delta x_i} - (\rho_{i(j+1)} \phi_{i(j+1)} + \rho_{(j)} \phi_{(j)}) v_{i(j)} \right\} A_{E_i} + (Quelle) \quad (5.2-19)$$

transformieren. Durch umformen folgt:

$$\frac{V_E \rho_{i_2(j)}}{\Delta t} \phi_{i_2(j)} + \left\{ \sum_{i=1}^6 \frac{\bar{\Gamma}_{\phi_i}}{\Delta x_i} + \rho_{(j)} v_{i(j)} A_{E_i} \right\} \phi_{(j)} = \sum_{i=1}^6 \left\{ \frac{\bar{\Gamma}_{\phi_i}}{\Delta x_i} - \rho_{i(j+1)} v_{i(j)} \right\} A_{E_i} \phi_{i(j+1)} + \frac{V_E \rho_{i_1(j)}}{\Delta t} \phi_{i_1(j)} + (Quelle) \quad (5.2-20)$$

Hierbei ist wieder zu beachten, daß  $\phi_{(j)}$  nicht von der betrachteten Orientierung  $\bar{n}_i$  abhängt, weil  $\phi_{(j)}$  in der Mitte der betrachteten Zelle definiert ist (s.o.). Aus diesem Grunde läßt sich  $\phi_{(j)}$  aus der Summe herausziehen. Definiert man

$$a_T := \frac{V_E \rho_{i_2(j)}}{\Delta t} \quad (5.2-21)$$

und

$$a_i := \left[ \frac{\bar{\Gamma}_{\phi_i}}{\Delta x_i} - \rho_{i(j+1)} v_{i(j)} \right] A_{E_i} \quad (5.2-22)$$

und setzt man

$$\phi_{t_2(j)} \equiv \phi_{(j)} \quad (5.2-23)$$

so läßt sich schreiben:

$$\left\{ \frac{V_E \rho_{t_2(j)}}{\Delta t} + \sum_{i=1}^6 \left( \frac{\bar{\Gamma}_{\phi_i}}{\Delta x_i} + \rho_{(j)} v_{i(j)} A_{E_i} \right) \right\} \phi_{(j)} = \sum_{i=1}^6 a_i \phi_{i(j+1)} + a_T \phi_{t_1(j)} + (Quelle) \quad (5.2-24)$$

Mit den weiteren Definitionen

$$a_P := \frac{V_E \rho_{t_2(j)}}{\Delta t} + \sum_{i=1}^6 \left( \frac{\bar{\Gamma}_{\phi_i}}{\Delta x_i} + \rho_{(j)} v_{i(j)} A_{E_i} \right) \quad (5.2-25)$$

$$a_i \equiv a_F \quad (5.2-26)$$

$$\phi_P := \phi_{(j)} \quad (5.2-27)$$

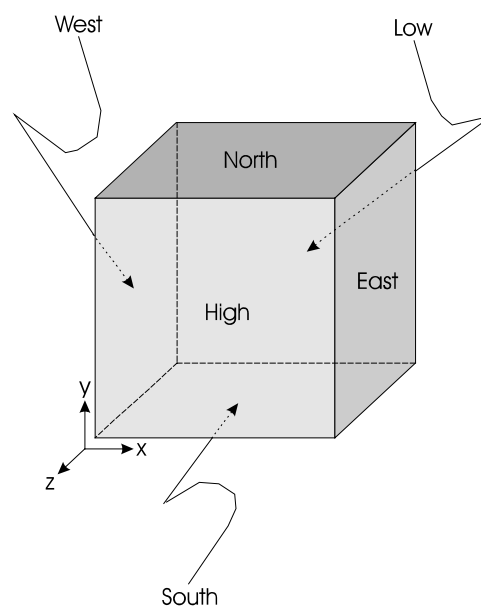
$$\phi_F := \phi_{i(j+1)} \quad (5.2-28)$$

$$\phi_T := \phi_{t_1(j)} \quad (5.2-29)$$

folgt abschließend:

$$a_P \phi_P = \left\{ \sum_{F=W,E,S,N,H,L} a_F \phi_F \right\} + a_T \phi_T + (Quelle) \quad (5.2-30)$$

(allgemeine, numerische Erhaltungsgleichung)



**Abbildung 5.2.A4:** Normalenorientierungen am Gitterelement

Hierbei stehen  $W, E, S, N, H, L$  für die verschiedenen Normalenrichtungen *West, East, South, North, High, Low*. Diese Orientierungen sind in Abbildung (5.2.A4) wiedergegeben.

Die obere Summengleichung ist nun für jede Zelle und für jede Variable  $\phi$  zu lösen. Dabei ist zu beachten, daß die Summengleichung der Variablen  $\phi$  für ein Element ( $j$ ) mit den sechs Summengleichungen der Nachbarzellen verknüpft ist, wodurch der numerische Aufwand erheblich ist. Außerdem sind die Koeffizienten von  $\phi$  nicht konstant und manchmal eine Funktion von  $\phi$  selber. Dies ist bei der numerischen Umsetzung der Impulsgleichung der Fall. Diese Art Gleichungen sind nicht mehr linear und dementsprechend schwerer zu lösen. Als weitere Erschwernis ist zu nennen, daß die verschiedenen  $\phi$ 's nicht unabhängig voneinander sind. So kommt in jeder Erhaltungsgleichung ein konvektiver Term und damit der Geschwindigkeitsvektor vor. Dadurch werden alle Erhaltungsgleichungen mit der Impulsgleichung gekoppelt. Zusätzlich sind viele Stoffwerte eine Funktion der Temperatur und so mit der Energiegleichung verknüpft. Aus diesen Gründen kommt nur eine iterative Lösung in Betracht, die nur von Rechnern effizient ausgeführt werden kann.

### 5.2.3 Lösungsalgorithmen von PHOENICS

Im PHOENICS-Paket sind drei verschiedene Lösungsmethoden implementiert, die im *q1-file* eingestellt werden können. Dies sind:

- Point-By-Point-Methode
- Slabwise-Methode
- Whole-Field-Methode

Die genannten Lösungsalgorithmen sind in der PHOENICS-Literatur leider nur schlecht erläutert.

Die Slabwise-Methode berechnet die Variablenwerte 'scheibchenweise' in  $z$ -Koordinatenrichtung. Während eines Iterationsschrittes ('SWEEP') werden für die Berechnung der Werte in der darauffolgende 'Scheibe' ( $z$ -Ebene) bereits die neuen Werte der gerade betrachteten 'Scheibe' verwendet. Dies kann zur schnelleren Konvergenz führen.

Die Whole-Field Methode bestimmt zuerst alle Größen in jedem Punkt des Strömungsfeldes während eines SWEEPs. Erst bei dem nächsten Iterationsschritt werden die zuvor berechneten, neuen Werte für die Variablen verwendet.

### 5.2.4 Allgemeine Randbedingungen

Das Programmpaket PHOENICS setzt bestimmte Randbedingungen voraus, denen die simulierte Strömung gehorchen muß. Dazu gehört die *Neumann*'sche Gradientenbedingung

$$\frac{\partial \phi}{\partial z} \Big|_{z=z_{\text{Auslaß}}} = 0 \quad (5.2-31)$$

Eine allgemeine Wandbedingung ist die sogenannte Wandhaftung, gemäß der die Geschwindigkeitsvektoren an der Wand gleich null sein müssen:

$$\bar{v}|_{Wand} = 0 \quad (5.2-32)$$

Bei radialsymmetrischen Problemen kann zusätzlich

$$\frac{\partial \phi}{\partial r}|_{r=0} = 0 \quad (5.2-33)$$

angesetzt werden, da andernfalls die Symmetriebedingung verletzt würde. Neben diesen allgemeinen Randbedingungen müssen noch problemspezifische Randbedingungen, wie Konturen, Ein- / Auslaßorte und Wandbedingungen, festgelegt werden. Diese Randbedingungen werden in Abschnitt 5.3 und 5.4 näher dargestellt.

### 5.2.5 Relaxation

Die numerische Lösung einer Gleichung ist ein iterativer Prozeß, der grundsätzlich der Lösung der Fixpunktgleichung

$$\phi_{(s+1)} = f(\phi_{(s)}) \quad (5.2-34)$$

entspricht. Eine numerische Abbildung von Ableitungen benötigt mindestens zwei Werte von  $\phi$  aus verschiedenen Iterationsschritten (erste Ableitung). Eine allgemeine numerische Fixpunktgleichung könnte daher lauten:

$$\phi_{(s+1)} = f(\phi_{(s)}, \phi_{(s-1)}, \dots, \phi_{(s-k)}) \quad (5.2-35)$$

Dabei ist  $k$  abhängig von der Ordnung der Gleichung. Durch den komplizierteren, gekoppelten Aufbau der numerischen Erhaltungsgleichungen würde ein analoges Vorgehen wie in obiger Gleichung in den meisten Fällen zu Divergenz, und damit nicht zur Lösung führen. Um die Konvergenzeigenschaften beeinflussen zu können, verwendet man beim  $(s+1)$ -ten Iterationsschritt nicht den Wert der allgemeinen Variablen  $\phi$  aus dem vorher berechneten Iterationsschritt  $(s)$  als Eingangsgröße. Statt dessen verwendet man eine Kombination von  $\phi$  aus den Iterationsschritten  $(s)$  und  $(s-1)$ . Im einfachsten Fall läßt sich schreiben:

$$\phi_{(s+1)} = \omega_{\phi} \phi_{(s)} + (1 - \omega_{\phi}) \phi_{(s-1)} \quad (5.2-36)$$

Wie stark  $\phi_{(s-1)}$  ins Gewicht fällt, bezeichnet man als Relaxation und wird mit dem Relaxationsfaktor oder Dämpfungsfaktor  $\omega_{\phi}$  eingestellt. Dabei bedeuten

- großer Dämpfungsfaktor: Schwache Relaxation und damit kurze Konvergenzzeiten, aber gleichzeitig die Gefahr von Divergenz,
- kleiner Dämpfungsfaktor: Starke Relaxation und damit geringe Divergenzgefahr, dafür aber lange Rechenzeiten mit vielen Iterationsschritten.

Der Einfluß der Dämpfungsfaktoren auf das Lösungsverhalten ist erheblich. Das Konvergenzverhalten der numerischen Rechnung kann durch geringe Änderung der

Relaxation stark verändert werden. In der Wahl geeigneter Dämpfungsfaktoren liegt eine der größten Schwierigkeiten bei der Simulation, da diese Wahl letztendlich auf ein Ausprobieren verschiedener Faktoren hinausläuft. Im allgemeinen geht man so vor, daß man zu Beginn einer Rechnung eine starke Dämpfung wählt. Mit steigender Rechenschrittzahl und erkennbarer Konvergenz kann diese Dämpfung dann herabgesetzt werden.

Das obige Vorgehen zur Bestimmung von  $\phi_{(s+1)}$  setzt sich bei den  $\phi$ 's aus den niedrigeren Iterationsschritten, die für Gleichung (5.2-35) benötigt werden, entsprechend fort.

### 5.2.6 Fehlerbetrachtung

Konvergente, numerische Rechnungen nähern sich mit jedem Iterationsschritt der eigentlichen Lösung an. Mit anderen Worten, die Abweichung (also der Fehler) zwischen Momentan- und Endwert wird immer kleiner. Aus diesem Grund wird als Konvergenzbedingung das Unterschreiten einer maximalen Fehlergrenze verwendet. Den Fehler zur richtigen Lösung bezeichnet man auch als 'Residuum' oder 'residual' (eng.). Da die richtige Lösung natürlich nicht bekannt ist, wird zur Bestimmung des momentanen Residuums im (s)-ten Iterationsschritt die folgende Gleichung verwendet:

$$res_{(s)} = \sum_{l=1}^n \left\{ a_p \phi_p - \left\{ \sum_{F=W,E,S,N,H,L} a_F \phi_F \right\} + a_T \phi_T + (Quelle) \right\}_{(s)} \quad (5.2-34)$$

Sie ergibt sich aus der numerischen Form der allgemeinen Transportgleichung (Gleichung (5.2-30)), die über alle n Gitterelemente summiert wird. Diese Summation soll lokale stärkere oder schwächere Fehler ausgleichen und so eine brauchbare Aussage über den Konvergenzzustand der Rechnung machen. Für absolut konvergente Rechnungen ist  $res_{(s)}=0$ .

## 5.3 Realisierung des zweidimensionalen Modells mit Verbrennungssimulation

### 5.3.1 Gitter

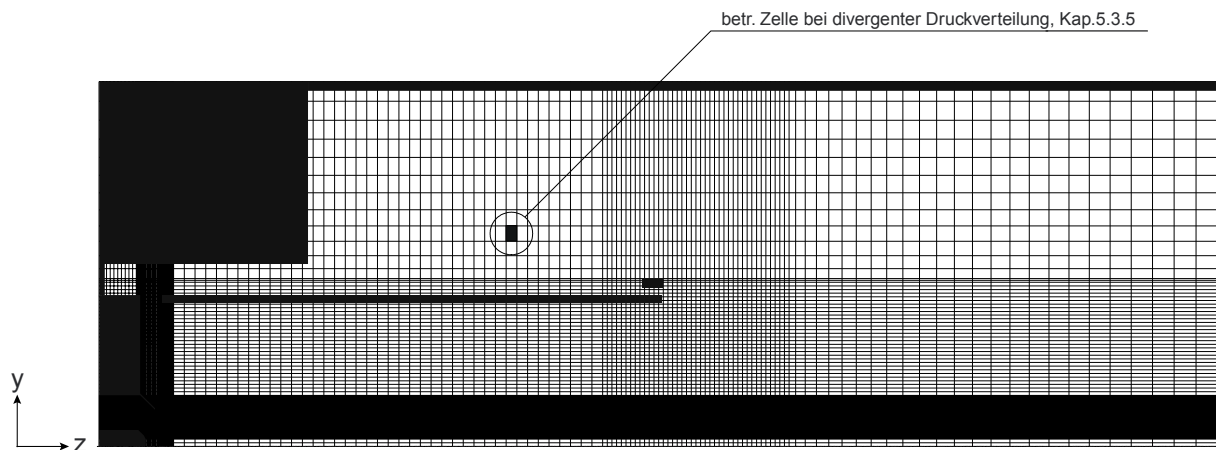
Die in guter Näherung radialsymmetrische Brennerströmung wurde durch ein zweidimensionales Gitter simuliert, wobei der radiale Winkelausschnitt etwa  $6^\circ$  beträgt. Es wird im Prinzip eine Ebene in radialer Richtung betrachtet. Die Bezeichnung 'zweidimensional' kommt daher, daß man die radiale Tiefe der Ebene vernachlässigen kann. Da das Problem nicht nur radial-, sondern auch achsensymmetrisch ist, wurde nur eine Hälfte des Brenners modelliert. Dort, wo zu erwarten war, daß sich das Strömungsbild stark ändert, wurde eine höhere Gitterauflösung verwendet. Dies ist, neben dem Sekundärluftaustritt, besonders am Luftdüsenaustritt der Fall. Das verwendete Gitter entspricht in etwa dem Gitter, das *Muellemann* [32] in seiner isothermen, zweidimensionalen Simulation verwendet hat. Der zweidimensionale Teil dieser Studienarbeit basiert auf dieser vorangegangenen Simulation. Modifikationen waren lediglich am Düsenstock notwendig, da dort abweichend zur isothermen Simulation Brennstoff eingedüst wird. Das Gitter ist zusammen mit der Brennerkontur in Abbildung (5.3.A1) zu sehen. Tabelle (5.3.T1) gibt einen Überblick über die Zellenverteilungen in den einzelnen Abschnitten.

Abschnitt	in y-Richtung		in z-Richtung	
	Länge des Abschnittes; [mm]	Zellenanzahl im Abschnitt	Länge des Abschnittes; [mm]	Zellenanzahl im Abschnitt
1	2	1	20	10
2	2	1	20	40
3	24	48	230	40
4	62	31	100	40
5	2	1	230	25
6	108	12	-	-

**Tabelle 5.3.T1:** Aufteilung der Gitterabschnitte

### 5.3.2 Kontur

Die Kontur des verwendeten Brenners wird in dem Gitter berücksichtigt, in dem Gitterzellen gesperrt werden. Durch das kartesische Gitter können Schrägen nur durch Treppenkonturen angenähert werden. Dies kann zu erheblichen Unterschieden im Wandeinfluß zur Realität führen. Mit *bfc*-Gittern kann dieses Problem umgangen werden. Darauf wird in Abschnitt 5.4 eingegangen. Die Sekundärluftrohre werden am ungenauesten abgebildet. In der Realität sind zwölf Rohre von acht Millimeter Durchmesser gleichmäßig über den Umfang verteilt. Diese treten durch die hintere Brennerwand in den Brennraum ein und enden dann am Flammenrohraustritt. In der Simulation werden lediglich zwei Gitterzellen an der Position des Sekundärluftaustrittes gesperrt. Diese entsprechen einem Sekundärluftaustritt, der wie ein Ring um das Flammenrohr angebracht ist.



**Abbildung 5.3.A1:** generiertes Gitter mit verwendeter Kontur

### 5.3.3 Problemspezifische Randbedingungen

Die wichtigste, problemspezifische Randbedingung ist die Definition der Ein- und Auslässe. Dazu werden an den Stellen des Primär- und Sekundärlufteintrittes Eintrittsgeschwindigkeiten vorgegeben. Diese müssen so gewählt werden, daß der verwendete Luftaufwand

$$l_{ges} = \lambda_{ges} l_{stoch} = \frac{\dot{m}_L}{\dot{m}_{Br}} \quad (5.3-1)$$

eingehalten wird.  $\lambda_{ges}$  ist das gesamte Luftverhältnis

$$\lambda_{ges} = \frac{\dot{m}_L}{\dot{m}_{Lstoch.}} \quad (5.3-2)$$

$l_{stoch}$  ist der bereits erwähnte stöchiometrische Luftaufwand. Außerdem muß die Aufteilung der gesamten Luftmenge auf Primär- und Sekundärlufteinlaß durch Einhaltung des primären und sekundären Luftverhältnisses,  $\lambda_p$  und  $\lambda_s$  berücksichtigt werden. Exemplarisch soll die Berechnung der Eintrittsgeschwindigkeit in Achsenrichtung am Primärlufteinlaß ausgeführt werden. Der Brennstoffmassenstrom berechnet sich durch

$$\dot{m}_{Br} = \frac{P_{Brenner}}{H_U} \quad (5.3-3)$$

mit  $P_{Brenner}$  als Brennerleistung (hier 100 kW) und  $H_U$  als unteren Heizwert des Brennstoffes (hier: Methan,  $H_U = 50$  MJ/kg). Aus dem Brennstoffmassenstrom berechnet sich der benötigte Luftmassenstrom wie folgt:

$$\dot{m}_L = \lambda_{ges} l_{stoch} \dot{m}_{Br} \quad (5.3-4)$$

Die Aufteilung in Primär- und Sekundärluft ergibt:

$$\dot{m}_{L,P} = \frac{\lambda_p}{\lambda_{ges}} \dot{m}_L \quad (5.3-5)$$

Mit  $\rho_L$  als Luftdichte und  $A_{L,p}$  als Querschnittsfläche am Primärlufteinlaß, ergibt sich die Geschwindigkeitskomponente in  $z$ -Richtung am Primärlufteinlaß,  $w_{L,P}$ , zu:

$$w_{L,P} = \frac{\dot{m}_{L,P}}{\rho_L A_{L,P}} \quad (5.3-6)$$

Ein wichtiger Unterschied zur isothermen Simulation ist die Definition eines Brennstoffeinlasses am Düsenstock. Bei der isothermen Simulation konnte auf die Berücksichtigung des Ölvolumenstroms verzichtet werden, da dieser etwa 4500 mal kleiner ist als der Luftstrom und so die Strömung nur wenig beeinflusst. Bei dieser Simulation wurde Gas (Methan  $\text{CH}_4$ ) anstelle von Öl verwendet, um nur ein einphasiges Gemisch betrachten zu müssen. Der Volumenstrom Gas, der die gleiche Brennerleistung ergibt wie der Ölstrom, ist aber nicht vernachlässigbar. Er verfälscht die Strömung, was bei der Betrachtung der Ergebnisse immer beachtet werden muß. Die Definition des Brennstoffeinlasses ist aber unverzichtbar, da nur so eine Diffusionsflamme simuliert werden kann und realitätsnahe Temperaturverteilungen zu erwarten sind. Wenn man statt dessen das Brennstoff-Luftgemisch vorgemischt in den Primärlufteinlaß einströmen lassen würde, so würde die simulierte Verbrennung schon innerhalb der Luftdüse beginnen.

Der Abgasauslaß befindet sich in der Fläche senkrecht zur Brennerachse. Variationen bestanden lediglich darin, daß man nicht den gesamten simulierten Querschnitt als

Austrittsquerschnitt definiert. So wurde eine Variante gerechnet, deren Auslaß sich nur im oberen, radialen Bereich befindet. Diese Variante sollte ausschließen, daß eine Rückströmung am Auslaß auf der Brennerachse zu Fehlern bei den Massenbilanzen führt. Nach Empfehlungen eines PHOENICS-Systembetreuers sollte am Auslaß die Geschwindigkeit nur in positive Richtung weisen, also keine Rückströmung aufweisen. Diese Problematik wird in Abschnitt 5.3.5 noch einmal aufgegriffen.

Als zusätzliche Wandbedingung wurde Wärmeleitung im Flammenrohr und an den äußeren Kesselwänden in das Modell integriert. Die hintere Brennerwand wurde als adiabat angesehen.

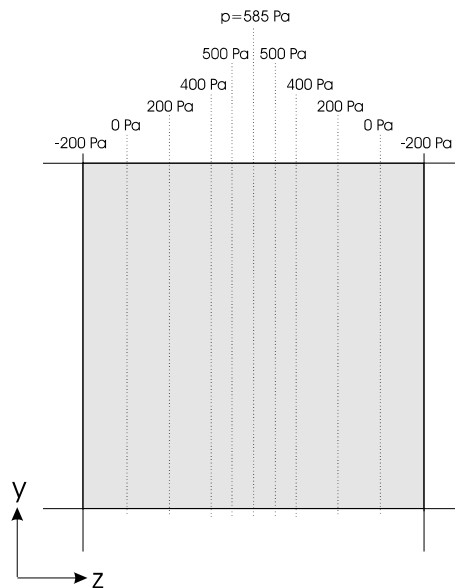
### 5.3.4 Annahmen und Vereinfachungen

Wie in den vorherigen Abschnitten bereits skizziert, wurden für die Simulation einige Annahmen und Vereinfachungen getroffen, die das Problem derart vereinfachen, daß ein Ergebnis der numerischen Simulation in vertretbarer Zeit zu erwarten ist, und der numerische Aufwand akzeptabel ist. Diese Annahmen sollen hier noch einmal kurz wiedergegeben werden:

- zweidimensionales, rotationssymmetrisches und stationäres Problem
- Ölverdunstung und -verbrennung wird durch einphasige Methanverbrennung ersetzt.
- schräge Konturen sind durch Treppenfunktionen dargestellt
- vollständige Verbrennung mit Luftüberschuß, Stickstoff wird als inerte Komponente betrachtet
- Turbulenz wird mit  $k, \varepsilon$ -Modell abgebildet
- es wurde mit drei Komponenten gerechnet: Brennstoff, Oxidator und Produkt
- Verbrennungskinetik wurde mit Eddy-Break-Up-Modell berücksichtigt
- Zündung des Brennstoff-Oxidator-Gemisches bei stöchiometrischem Verhältnis zwischen Brennstoff und Oxidator (wiedergegeben durch den stöchiometrischen Mischungsbruch  $f_{stoch}$ )

### 5.3.5 Probleme bei der numerischen Berechnung

Ein großer Nachteil des PHOENICS-Paketes ist die schlechte Dokumentation. So war es oft schwierig, Befehlen, die im *q1-file* verwendet werden sollten, eine klare Bedeutung zuzuordnen. Desweiteren eignet sich der *q1-file* zur Fehlersuche nur sehr schlecht. So war beispielsweise die Ursachensuche für das Divergieren der Druckverteilung sehr langwierig. Ein Beispiel für eine derartige Verteilung ist in Abbildung (5.3.A2) zu finden. Hierbei wurde eine beliebige Zelle des Strömungsfeldes exemplarisch dargestellt. Diese Zelle ist in der Gitterübersicht (Abbildung (5.3.A1)) markiert. Die anderen Zellen hatten vergleichbare Verteilungen.



**Abbildung 5.3.A2:** Divergierende Druckverteilung

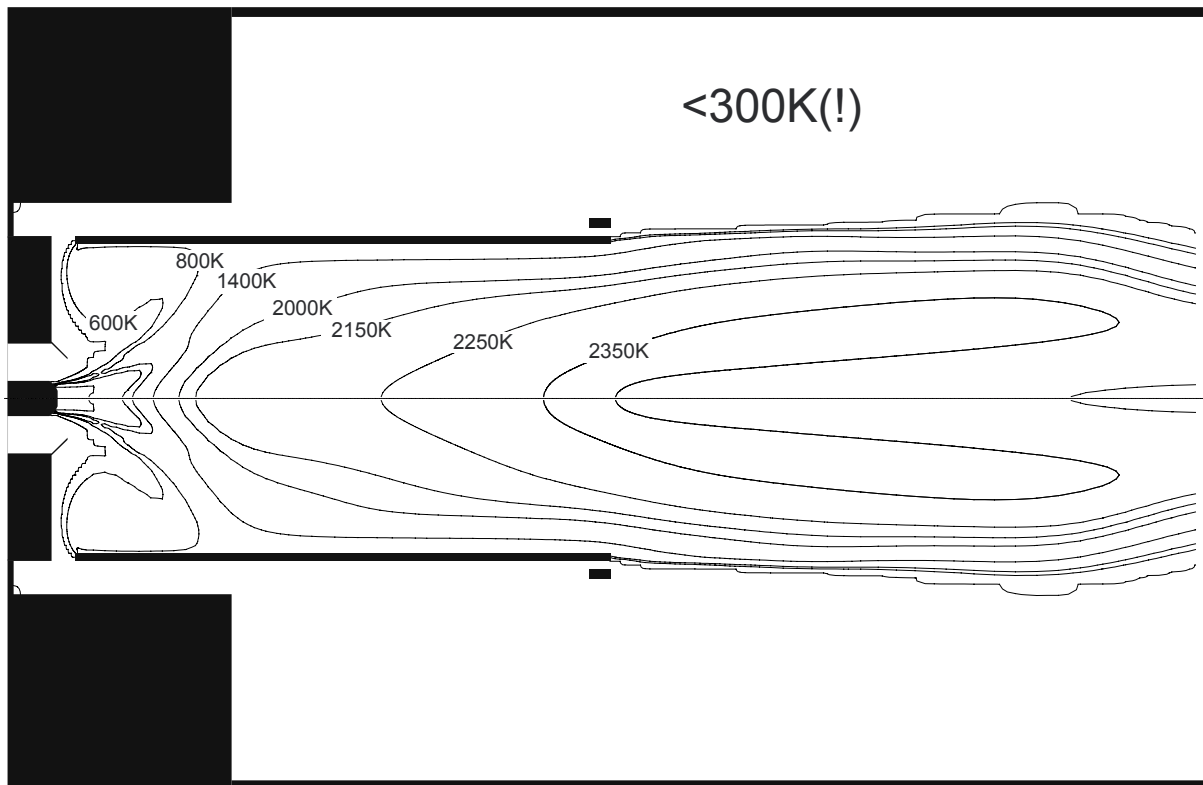
Es stellte sich heraus, daß der Druck nach der Slab-Wise-Methode (vgl. 5.2.3) und nicht nach der Whole-Field-Methode gelöst wurde. Dies wird aber in der PHOENICS-Literatur für die Druckkorrekturrechnung gefordert, da sich nur auf diese Weise Effekte der Randbedingungen und Brennraumkonturen schnell in der Rechnung auswirken können. Im *q1*-Code unterscheiden sich diese beiden Methoden aber nur durch ein Y(es) anstelle von N(o) in dem Befehl

SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,N) (5.3-7)

der Lösungsoptionen der jeweiligen Variablen festlegt.

Als weitere Schwierigkeit stellte sich die realistische Brennstoffumsetzung heraus. So wurde der ganze Brennstoff schon kurz hinter der Brennstoffdüse vollständig umgesetzt. Dies sollte aber eigentlich nicht möglich sein, da die Sekundärluft erst deutlich später zugesetzt wird und so für die vollständige Brennstoffumsetzung unbedingt notwendig sein sollte. Als Folge dieser überschnellen Reaktion stellte sich das in Abbildung (5.3.A3) zu sehende, völlig fehlerhafte Temperaturprofil ein.

Hierbei ist eine Auswahl der Isothermen, Linien gleicher Temperatur, dargestellt. Es zeigt sich, daß die seitlichen Bereiche oberhalb des Flammrohres überhaupt nicht in die Temperaturverteilung miteinbezogen werden; sie bleiben vollständig kalt. Zudem ist die maximale Temperatur mit über 2350K sehr hoch und liegt über der adiabaten Verbrennungstemperatur von Methan. Die adiabate Verbrennungstemperatur ist die Temperatur des Abgases, die sich einstellen würde, wenn das Gemisch stöchiometrisch verbrennen und keine Wärmeabfuhr zugelassen würde. Etwaige Dissoziationseffekte werden nicht berücksichtigt. Die adiabate Verbrennungstemperatur ist abhängig vom Heizwert des verwendeten Brennstoffes. Für Methan beträgt sie ca.  $T_{ad} = 2320\text{K}$  (bei Frischgemischtemperatur von  $T_{frisch} = 298\text{K}$ , Tabellenwerte zur Berechnung von  $T_{ad}$  aus [21]).



**Abbildung 5.3.A3:** Fehlerhafte Temperaturverteilung

Abhilfe schaffte die Initialisierung des Brennraumes mit (inertem) Produkt. Der Brennstoff kann dann bei der numerischen Berechnung nicht mehr auf den Oxidanten im Brennraum zurückgreifen und nur noch mit dem zugeführten Oxidanten reagieren. Diese Initialisierung gestaltete sich aber ebenfalls als diffizil, da man bei PHOENICS nur direkt gelöste (vgl. Abschnitt 4.3.1) und nicht berechnete Variablen initialisieren kann. Deswegen mußte man den (gelösten) Mischungsbruch  $f$  so vorgeben, wie er sich für reines Produkt ergibt. Aus Gleichung (4.4-33)

$$f = \frac{1 + l_{st\ddot{o}ch} \xi_{Br} - \xi_{Ox}}{1 + l_{st\ddot{o}ch}}$$

ergibt sich dieser mit  $\xi_{Br} = \xi_{Ox} = 0$  zu:

$$f_{Pr od.} = \frac{1}{1 + l_{st\ddot{o}ch}} \quad (5.3-8)$$

Mit Gleichung (4.4-36) folgt damit:

$$f_{Pr od.} = f_{st\ddot{o}ch} \quad (5.3-9)$$

Im Anwendungsfall beträgt  $f_{Pr od.}$  mit  $l_{st\ddot{o}ch} = 17.195$  (stöch. Luftaufwand von Methan):

$$f_{Pr od.} = 0.05496 \quad (5.3-10)$$

Es sei noch einmal darauf hingewiesen, daß der Mischungsbruch dimensionslos ist.

Man hat zu beachten, daß diese Initialisierung nur im ersten Rechendurchgang erfolgen darf. Bei anschließenden Rechnungen muß dieser Initialisierungsbefehl aus dem *ql-file* kommentiert werden. Statt dessen verwendet man dann den sogenannten Restart-Befehl

RESTRT(all) (5.3-11)

als Initialisierungsbefehl. RESTRT(all) ist ein Befehl, um die gelösten Variablen mit bereits berechneten Werten zu initialisieren. Man setzt also mit diesem Befehl die Rechnung dort fort, wo der vorhergegangene Rechendurchgang aufgehört hat.

Als grundsätzliches Problem erwiesen sich die extrem langen Konvergenzzeiten. Diese wurden durch die starke Dämpfung verursacht. Die starke Dämpfung wurde wiederum durch die große Anzahl der zu lösenden Variablen und des damit verbundenen komplexen Gleichungssystems verursacht. Dabei muß grundsätzlich zwischen der Konvergenz der mechanischen Strömungsgrößen wie Druck und Geschwindigkeit und der Konvergenz der aus der Verbrennungssimulation resultierenden Strömungsgrößen unterschieden werden. Das Druck- und das Geschwindigkeitsfeld konvergierte bei allen Rechnungen relativ rasch. Lediglich das Rezirkulationsgebiet an den Rezirkulationsbohrungen des Flammrohres bildete sich immer spät oder überhaupt nicht aus. Das Temperatur-, Konzentrations- und Mischungsbruchfeld konvergierte dagegen immer sehr langsam, da sich diese Größen von Rechendurchgang zu Rechendurchgang relativ stark veränderten. Außerdem waren diese Variablen erheblich empfindlicher gegen schwächere Dämpfungen.

Durch diese Konvergenzprobleme und die damit verbundenen langen Rechenzeiten wurden keine Parametervariation vorgenommen.

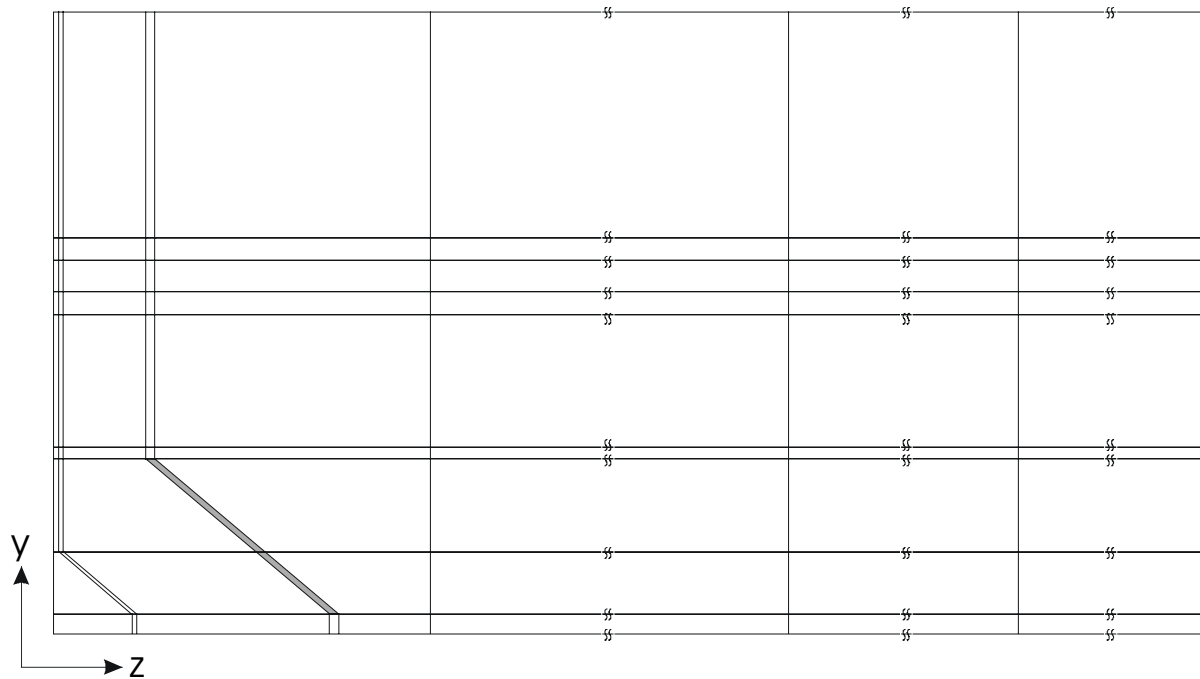
Die Reproduzierbarkeit der Ergebnisse ist stark eingeschränkt und hängt durch die jeweilige Wahl der Relaxationsfaktoren und sonstiger Parameter im großen Maße vom jeweiligen Anwender ab.

## 5.4 Realisierung des isothermen, dreidimensionalen Modells

### 5.4.1 Gitter

Bei der dreidimensionalen Simulation wurde ein Teilelement des Brennes mit einem Umfangswinkelausschnitt von  $30^\circ$  simuliert. Auf diese Weise war es möglich die in der zweidimensionalen Simulation nur schlecht abgebildeten Sekundärluftrohre und Rezirkulationsbohrungen genauer zu modellieren und die damit verbundenen, unsymmetrischen Effekte zu untersuchen. Insbesondere liegt das Interesse auf der Wiedergabe der Sekundärluftdurchmischung mit der übrigen Strömung, sowohl, radial als auch tangential. Die Untersuchung dieser unterschiedlichen Durchmischungsrichtungen erfordert ein dreidimensionales Modell. Durch die Verwendung eines *bfc*-Gitters konnte die Kontur der Luftdüse und des Düsenstockes realistischer, da ohne Treppenfunktion, dargestellt werden. Das Vorgehen bei der Erstellung eines *bfc*-Gitters soll kurz wiedergegeben werden:

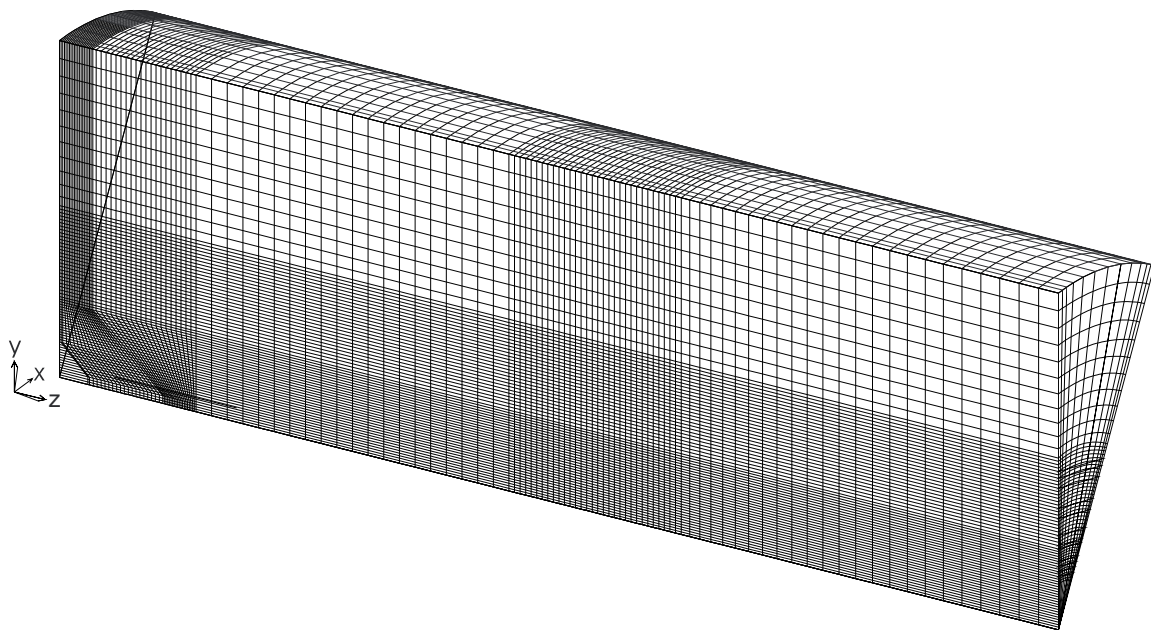
- Skizze der einzelnen Bereiche, in denen eine unterschiedliche Auflösung und Gitterstruktur vorliegen soll (Abbildung (5.4.A1))



**Abbildung 5.4.A1:** Planung des 3D-Gitters

- Zuweisung der Auflösung in tangentialer, radialer und axialer Richtung. Dabei ist zu beachten, daß die Auflösung zum Beispiel in einem axialen  $z$ -Abschnitt bis zum maximalen, radialen  $y$ -Wert durchgezogen werden muß. Es müssen also durchgehende Ebenen definiert werden. Anders ausgedrückt, in einem bestimmtem  $z$ -Bereich müssen die Auflösungen bei verschiedenen  $y$ -Werten in  $z$ -Richtung gleich bleiben. Grundsätzlich muß immer darauf geachtet werden, daß man die Gitterzellenanzahl in Grenzen hält, um so den numerischen Rechenaufwand zu reduzieren. Dies ist bei dreidimensionalen Simulationen oft schwierig, da gleichzeitig eine zu grobe Auflösung Divergenz verursacht.
- Numerische Umsetzung des geplanten Gitters. Dazu werden die Schnittpunkte der in Abbildung (5.4.A1) dargestellten Unterteilungslinien des simulierten Brennraumes im  $qI$ -file definiert und durch Linien verbunden. Diese Liniendefinition enthält dann auch die Auflösung der einzelnen Bereiche. Mit einem speziellen Befehl lassen sich dann diese Bereiche automatisch vermaschen. Abschließend wird das erstellte  $(y,z)$ -Gitter in Umfangsrichtung kopiert. Die Anzahl der Kopien entspricht der gewünschten Auflösung in Umfangsrichtung.

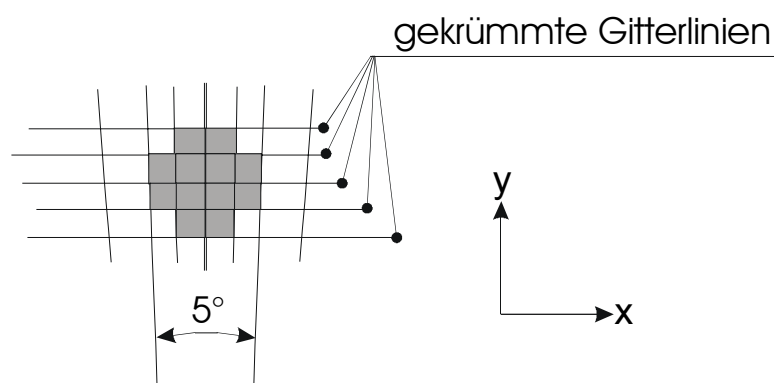
Das generierte Gitter ist in Abbildung (5.4.A2) zu sehen.



**Abbildung 5.4.A2:** 3D-Gitter der isothermen Simulation

### 5.4.2 Kontur

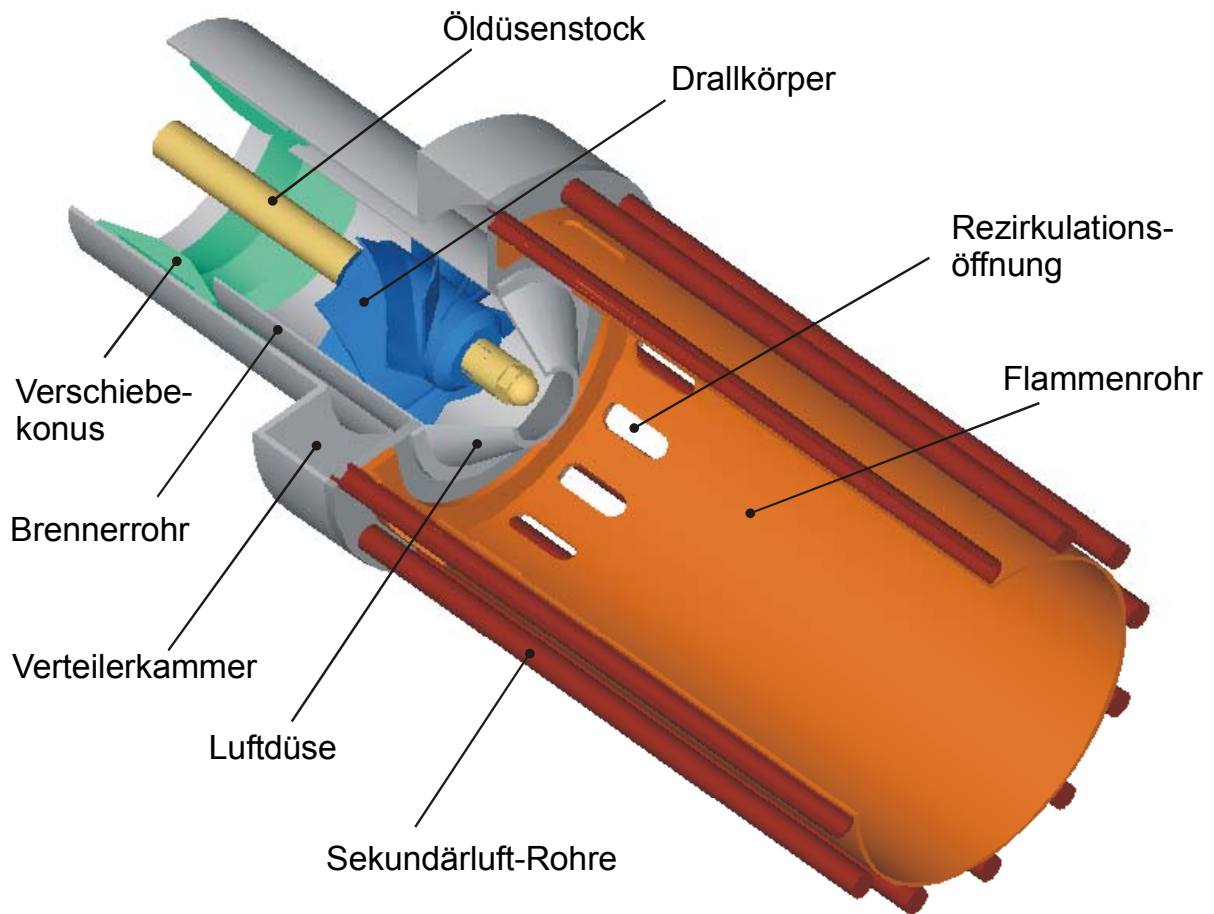
Die Kontur wird wie bei der zweidimensionalen Simulation durch Elementsperrung definiert. Der Vorteil des *bfc*-Gitters liegt in der Darstellung von Schrägen. Die körperangepaßten Koordinaten sind so gewählt, daß Gitterlinien mit den Konturbegrenzungen zusammenfallen. Treppenfunktionen sind somit am Düsenstock und an der Luftdüse überflüssig. Dadurch können Reibungseinflüsse realistischer wiedergegeben werden. Die runden Querschnitte der Sekundärluftrohre mußten allerdings durch folgende Annäherung simuliert werden:



**Abbildung 5.4.A3:** Sekundärluftrohr-Querschnitt in der numerischen Simulation

Dabei sind die Querschnittsflächen zwischen realer Kreisfläche und der Summe der simulierten Viereckflächen annähernd gleich groß. Der reale Brenner enthält zwölf Sekundärluftrohre, die gleichmäßig über dem Umfang verteilt sind. Um einen symmetrischen 30°-Winkelausschnitt simulieren zu können, wurde die Lage des Ausschnittes so gewählt, daß die Sekundärluftrohre den Winkelausschnitt in beiden Umfangsrichtungen begrenzen. Sie

liegen jeweils auf den Grenzflächen des Teilelements in Umfangsrichtung. Dadurch wurden in der Simulation zwei halbe Sekundärluftrohre abgebildet. Ein Bild des simulierten Brenners ist in Abbildung (5.4.A4) zu finden.



**Abbildung 5.4.A4:** Kontur des simulierten Brenners

Für die Simulation einer Scale-Up-Version des Brenners wurde das 3D-Gitter derart generiert, daß eine flexible Anpassung der Größenverhältnisse der gesamten Brennergeometrie möglich ist. So wurde das Gitter an der Luftdüse derart gestaltet, daß die Kontur dieser Düse in einer Gitterebene liegt. Dadurch kann der Luftdüsendurchmesser sehr einfach durch zusätzliche Zellensperrung in y-Richtung verkleinert werden. Der Bereich, in dem der simulierte Luftdüsendurchmesser variiert werden kann, ist in Abbildung (5.4.A1) grau hinterlegt. Als weitere Variationsmöglichkeit läßt sich die Zellenhöhe der Elemente beliebig variieren.

### 5.4.3 Problemspezifische Randbedingungen

Wie bei der isothermen, zweidimensionalen Simulation [32], wird auch hier auf die Modellierung der Verbrennungskinetik verzichtet. Dies ist aufgrund des aufwendigen Gitters und dem damit verbundenen Rechenaufwand sinnvoll. Daraus folgt, daß ohne Brennstoffeindüsung gerechnet wird, und nur die einströmenden Primär- und Sekundärluftvolumenströme betrachtet werden. Der Strömungsverlauf wird bei einer

konstanten Temperatur von 25°C berechnet. Ansonsten werden alle strömungstechnischen Randbedingungen wie bei der zweidimensionalen Verbrennungsrechnung (Wandhaftung, Einlaßwerte der turbulenten, kinetischen Energie, etc.) übernommen.

#### 5.4.4 Annahmen und Vereinfachungen

Zusammenstellend werden folgende Annahmen und Vereinfachungen getroffen:

- isotherme, stationäre, dreidimensionale Ausschnittssimulation
- Vernachlässigung des Ölvolumenstroms
- Strömung isovolumetrisch, da die Strömungsgeschwindigkeit klein ist ( $Ma < 0.3$ ;  $Ma \equiv$  Machzahl)
- Turbulenz wird mit  $k, \varepsilon$ -Modell abgebildet

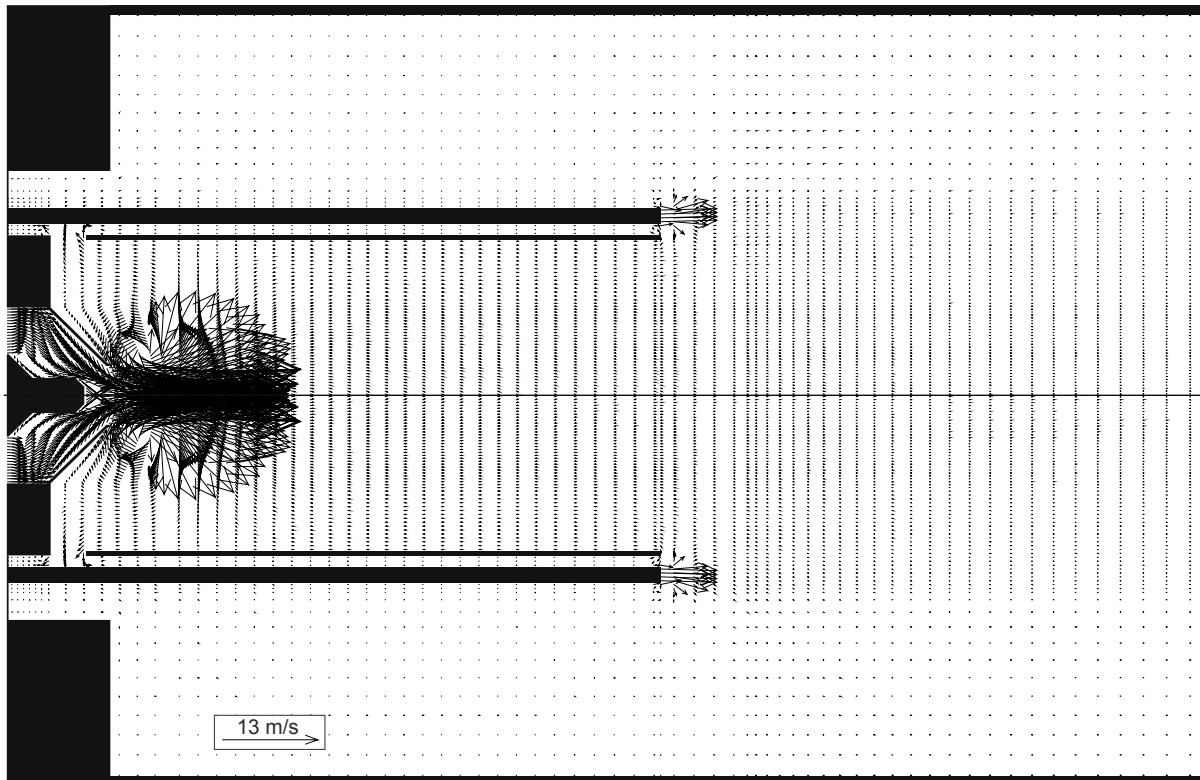
#### 5.4.5 Probleme bei der numerischen Berechnung

Wie jede dreidimensionale Simulation bereitet die große Gitterzellenanzahl Probleme. Durch Vorgabe des zu simulierenden Brennerwinkelausschnitts und den Erfahrungen der vorhergegangenen zweidimensionalen Simulationen kann diese Anzahl nicht beliebig klein gewählt werden. Der Winkelausschnitt wird durch das kleinste symmetrische Brennersegment festgelegt, das wie erwähnt durch die Anordnung der Sekundärluftrohre gebildet wird. Prinzipiell ist es sinnvoll, in der  $(r,z)$ -Ebene eine vergleichbare Auflösung zu wählen wie bei der zweidimensionalen Simulation. Diese Gitterzellenanzahl muß dann noch mit der Auflösung in Umfangsrichtung multipliziert werden. Im betrachteten Fall ergeben sich  $(12 \times 70 \times 116) = 97440$  Gitterzellen. Das zweidimensionale Gitter wird durch  $(95 \times 155) = 14725$  Zellen gebildet. Dies entspricht einem Faktor von nahezu 1/7. Durch diese Vergrößerung der Zellenanzahl waren zahlreiche Modifikationen am Programmpaket nötig, um eine Verwaltung dieser Anzahl zu ermöglichen. Die bei den Rechnungen entstehenden *phi-files* sind über 18 MB groß, die Handhabung ist entsprechend zeitaufwendig.

Um die Zellenanzahl zu minimieren werden bei der 3D-Simulation anstatt 155 Ebenen in axialer Richtung wie im 2D-Fall lediglich 116 Ebenen verwendet. Diese Maßnahme muß aber in Frage gestellt werden, da sich am Sekundärlufteintritt ein Freistrahls ausbildete, der praktisch gar nicht mit der übrigen Hauptströmung in Wechselwirkung trat. Dies deutet neben Problemen mit dem verwendeten  $k, \varepsilon$ -Turbulenzmodell auch auf eine unzureichende Auflösung an dieser Stelle hin. Eine Vergrößerung der Auflösung ist aber aus den genannten Gründen nicht unbedingt ratsam. So wurden Rechnungen durchgeführt, bei denen die Sekundärluftausströmungsgeschwindigkeit künstlich verringert wurde. Das Ziel dieser Maßnahme war, ohne Vergrößerung der Auflösung eine Wechselwirkung des Sekundärluftfreistrahls mit der Hauptströmung einzuleiten. Im fortgeschrittenen Konvergenzzustand sollte dann die Geschwindigkeit wieder erhöht werden. Diese Maßnahme funktionierte aber nicht wie gewünscht.

Bislang hat sich keine konvergente Lösung eingestellt. Das Geschwindigkeitsfeld ist nur bis zur Mitte des Flammenrohres ausgebildet. Zu größeren  $z$ -Werten scheint es, daß die Rechnung bis dort noch nicht fortgeschritten ist. Am Sekundärlufteintritt ist bei nicht verringerter Eintrittsgeschwindigkeit die Rechnung absolut divergent. Das gleiche gilt für die

Konzentration der Primärluft, deren Verteilung ebenfalls berechnet werden soll. Abbildung (5.4.A5) zeigt die bis jetzt erzielte Geschwindigkeitsverteilung.



**Abbildung 5.4.A5:** Beispiel einer berechneten Geschwindigkeitsverteilung ((y,z)-Ebene)

Es ist ersichtlich, daß die Lösung der Geschwindigkeitsverteilung nur im Bereich der Luftdüse weiter fortgeschritten ist. Der Einfluß der Drallströmung wird aber überhaupt nicht wiedergegeben. Das Rückströmgebiet auf der Strahlachse bildet sich noch nicht aus.

Um den generellen Vorteil einer dreidimensionalen Simulation anzudeuten, ist in Abbildung (5.4.A6) die Geschwindigkeitsverteilung einer (x,y)-Ebene (Ebene 23 in z-Richtung) abgebildet. Die berechnete Geschwindigkeitsverteilung ist aber auch in dieser Ansicht weit von der Realität entfernt. Es ist zu beachten, daß die dargestellte (x,y)-Ebene nicht senkrecht zur z-Achse ist. Dies liegt an der Verwendung von *bfc*-Koordinaten an dieser Stelle. Daher zeigt Abbildung (5.4.A6) die Projektion der Geschwindigkeitsverteilung in z-Richtung. Die Lage dieser Ebene im Brennraum ist in Abbildung (5.4.A7) gezeigt.

Zu erwähnen ist, daß die Konturerzeugung für die graphische Darstellung der Ergebnisse in tangentialer Richtung aufwendiger ist als in axialer. So mußte zur Konturerzeugung in Abbildung (5.4.A6) die Rechengitterdarstellung zu Hilfe genommen werden. Die ausgewählten Gitterlinien wurden dann mit einem Graphikprogramm nachbearbeitet.

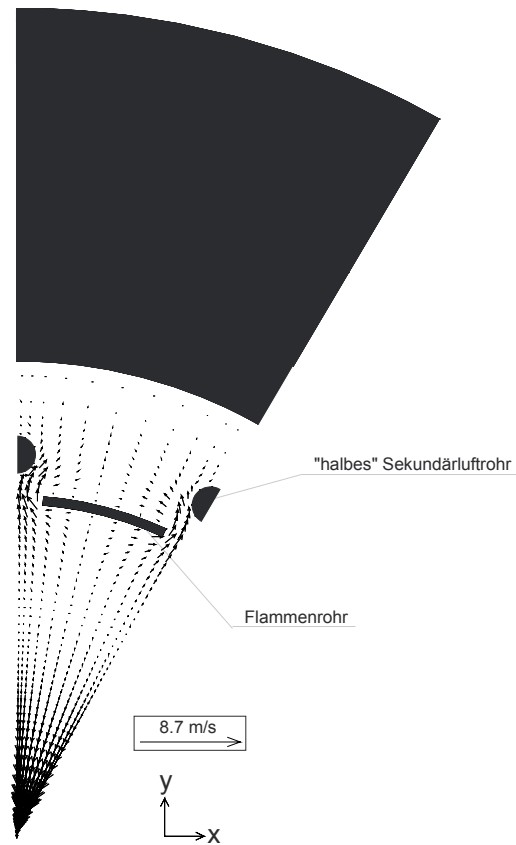


Abbildung 5.4.A6: Beispiel einer berechneten Geschwindigkeitsverteilung ((x,y)-Ebene)

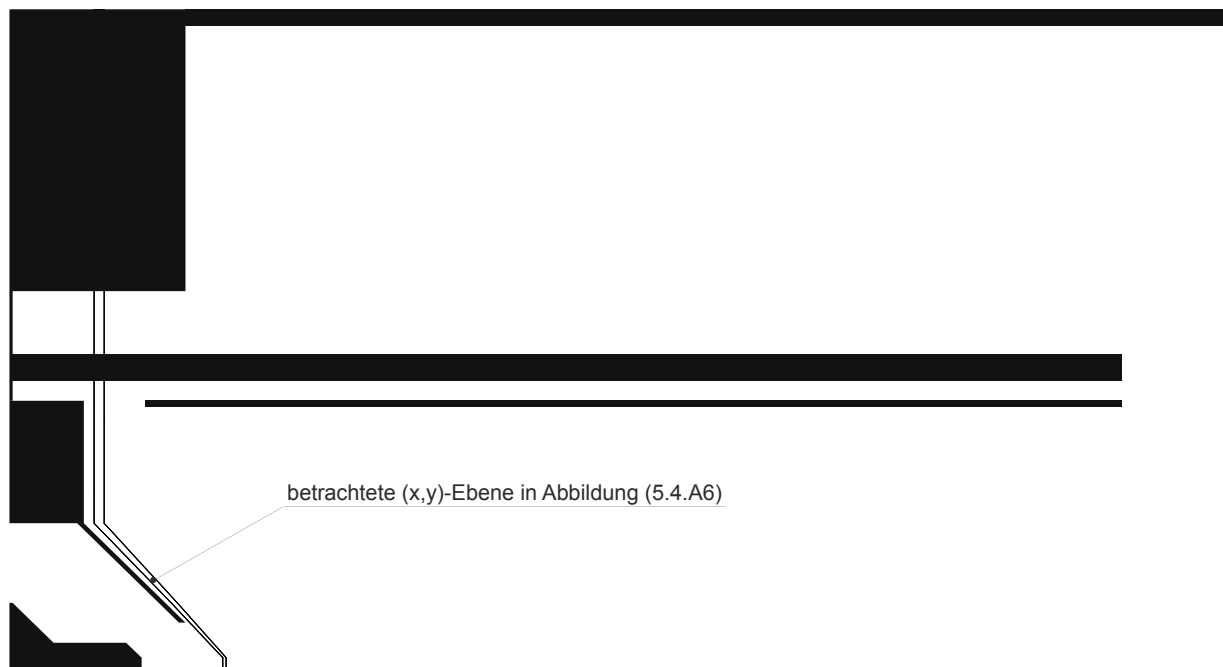


Abbildung 5.4.A7: Lage der in Abbildung (5.4.A6) gezeigten Ebene

## 6 Vorstellung der Ergebnisse

### 6.1 Zweidimensionale Verbrennungsrechnung

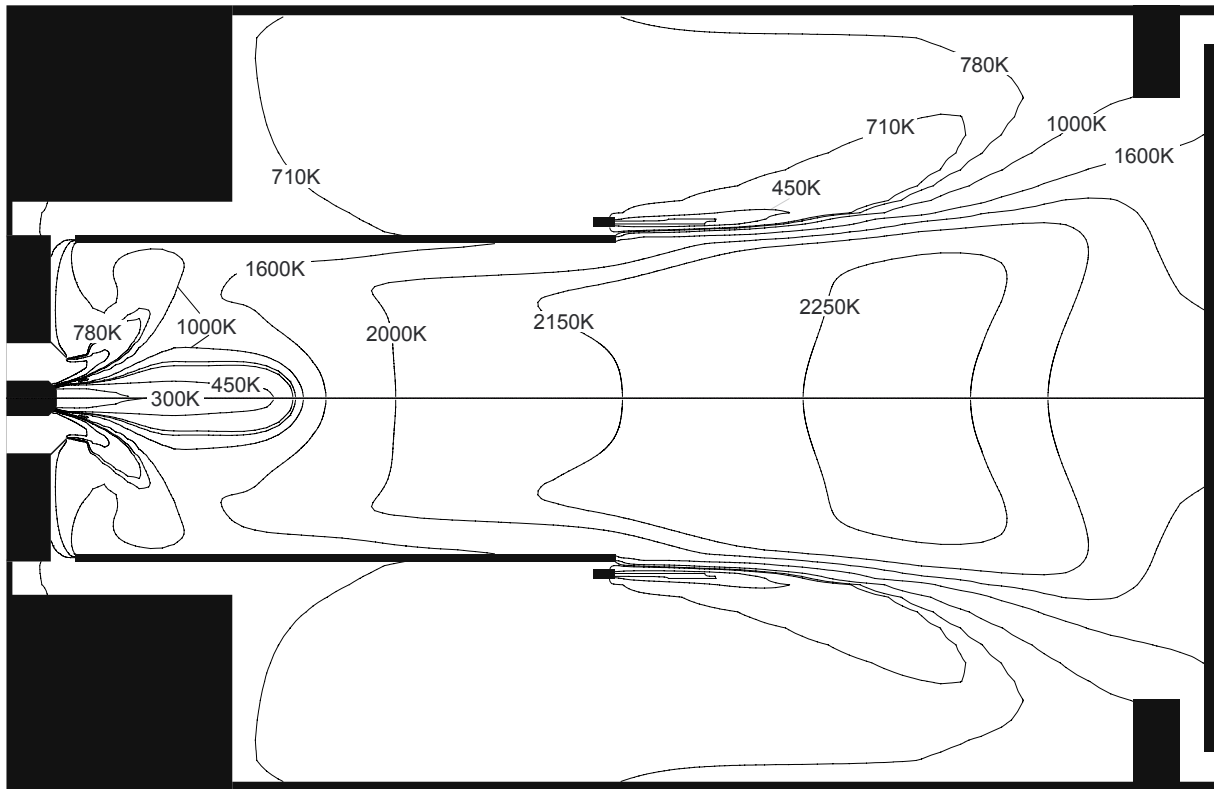
Grundlegendes Ziel der Verbrennungsrechnung war es, den Verbrennungseinfluß auf die Felder der mechanischen Strömungsgrößen abzuschätzen. Zweitrangig war die explizite Berechnung des Temperaturprofils, da dieses durch die bereits erläuterten Vereinfachungen im Vergleich zur Realität stark verzerrt ist. Es eignet sich aber zum qualitativen Vergleich mit Meßwerten. Dieser Vergleich kann auch als grundsätzliche Bewertung herangezogen werden, ob die im Programmpaket PHOENICS implementierten Verbrennungsmodelle in der Lage sind, die Verbrennungsprozesse qualitativ richtig wiederzugeben. Daher soll zunächst das Temperaturfeld, das Mischungsbruchfeld und die Verteilungen der Massenanteile von Oxidant und Produkt vorgestellt werden.

#### 6.1.1 Temperaturfeld

Für die Darstellung des Temperaturfeldes wurden Isothermen verwendet. Diese wurden so ausgewählt, daß sie das charakteristische Flammenbild und spezielle Temperaturverteilungen wiedergeben. Deshalb besteht zwischen den Werten benachbarter Isothermen im Hauptströmungsgebiet innerhalb des Flammrohres eine größere Differenz, als zwischen den Werten benachbarter Isothermen oberhalb des Flammrohres. Dort bewegen sich die Temperaturwerte innerhalb enger Grenzen. Die berechnete Temperaturverteilung ist in Abbildung (6.1.A1) (Rechnung 1) zu sehen.

Die Temperaturen bewegen sich zwischen  $T_{min} = 298\text{K}$  und  $T_{max} = 2283\text{K}$  und bleiben damit unterhalb der adiabaten Verbrennungstemperatur von Methan,  $T_{ad} = 2320\text{K}$ . Allerdings ist  $T_{max}$  für das verwendete gesamte Luftverhältnis von  $\lambda_{ges} = 1.18$  relativ hoch und läßt auf Probleme des Wärmeleitungs- und des Strahlungsmodells von PHOENICS schließen. Hinzu kommt, daß bei der numerischen Simulation die Verdunstung nicht betrachtet wird, die in der Realität einen nicht unerheblichen Wärmestrom bindet. Die grundsätzliche Lage des Temperaturmaximums in gewissem Abstand vom Sekundärlufteinlaß ist realistisch und stimmt mit Meßwerten (vgl. Abschnitt 6.1.2) gut überein.

Diese Lage erklärt sich daraus, daß erst in diesem Bereich der Verbrennung ausreichend Sauerstoff vorhanden ist, um den Brennstoff vollständig umzusetzen. Durch Vergleich mit der fehlerhaften Temperaturverteilung (Abbildung 5.3.A3) stellt man fest, daß dort das Gebiet maximaler Temperatur durch eine überhöhte Rückströmung auf der Strahlachse am Brenneraustritt stark verzerrt ist. Diese starke Rückströmung wurde bei der zur Abbildung (6.1.A1) gehörenden Rechnung durch eine Rückwand unterbunden. Der Fehler mit der überhöhten Rückströmung trat jedoch unregelmäßig auf. Zudem muß erwähnt werden, daß eine vollständige Unterbindung der Rückströmung am Brenneraustritt unrealistisch ist, da sie in der Realität beobachtet wird.

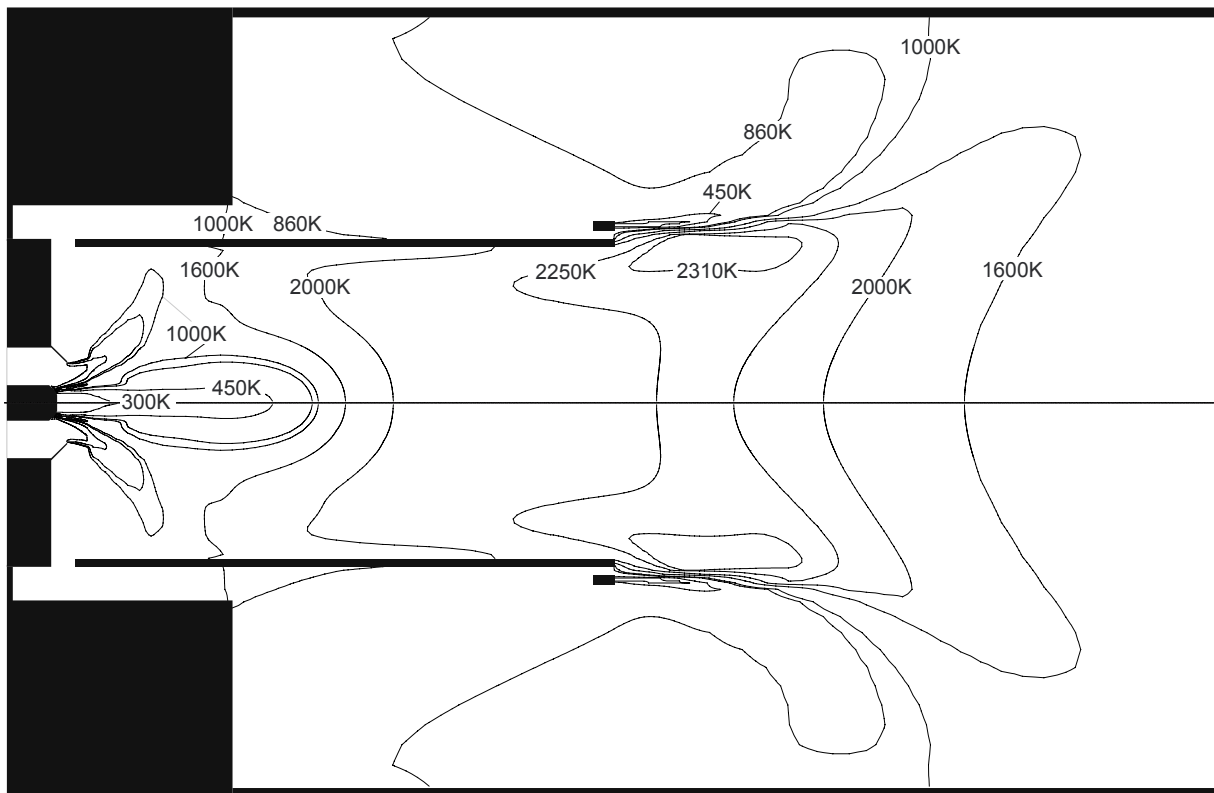


**Abbildung 6.1.A1:** Berechnete Temperaturverteilung;  $T_{min} = 298\text{K}$  ,  $T_{max} = 2283\text{K}$

Aus der Temperaturverteilung läßt sich desweiteren eine starke Trennung zwischen Brennstoff und Verbrennungsluft direkt am Primärlufteintritt erkennen. Dort wird die Primärluft durch die von den Drallgittern erzeugten Fliehkräfte radial nach außen gedrängt, wogegen der Brennstoff bis circa zur Hälfte des Flammenrohres innerhalb eines Freistrahls verbleibt. Dieser zerplatzt stromab durch Zufuhr von rezirkulierter Abgasmasse, die den Druck innerhalb des Freistrahls ansteigen läßt. Erst nach dem Auflösen des Freistrahls kann sich der Brennstoff mit der Luftströmung vermischen, die sich bis zu den Sekundäreinlässen an das Flammenrohr anlegt. Durch diese behinderte Durchmischung wird der Bereich maximaler Temperatur weiter stromab geschoben. Diese starke Trennung zwischen Primärluft und Brennstoff ist jedoch unrealistisch, da die Öltröpfchen des real verwendeten Brennstoffes durch die Primärluftströmung zu einem großen Teil mitgerissen werden. Bis zum Austritt des Flammenrohres wird die Durchmischung des Brennstoff-Luftgemisches weiter fortgeschritten sein, als in der Simulation. Auch die Reaktion wird real früher beginnen.

Gut zu erkennen ist der Einfluß und die richtige Wiedergabe des Rezirkulationsgebietes am stromauf liegenden Ende des Flammenrohres. Dort sind die Temperaturen der mit  $T_{ein} = 298\text{K}$  eingeblasenen Primärluft bereits auf circa  $750\text{K}$  angestiegen. Diese Temperaturen stimmen mit denen oberhalb der Rezirkulationsbohrungen des Flammenrohres überein. Dieses Gebiet stellt aber das Massereservoir der Rezirkulationsströmung dar. Daraus läßt sich die realistische Wiedergabe der Abgasansaugung durch dieses Rezirkulationsgebiet erkennen. Unterstützt wird dies durch das in Abschnitt 6.1.3 dargestellte Geschwindigkeitsfeld. Allerdings muß erwähnt werden, daß die Einstellung dieser Rezirkulationsströmung in der Simulation nur geringen Einfluß auf das Temperaturmaximum hatte, ganz im Gegensatz zur Realität.

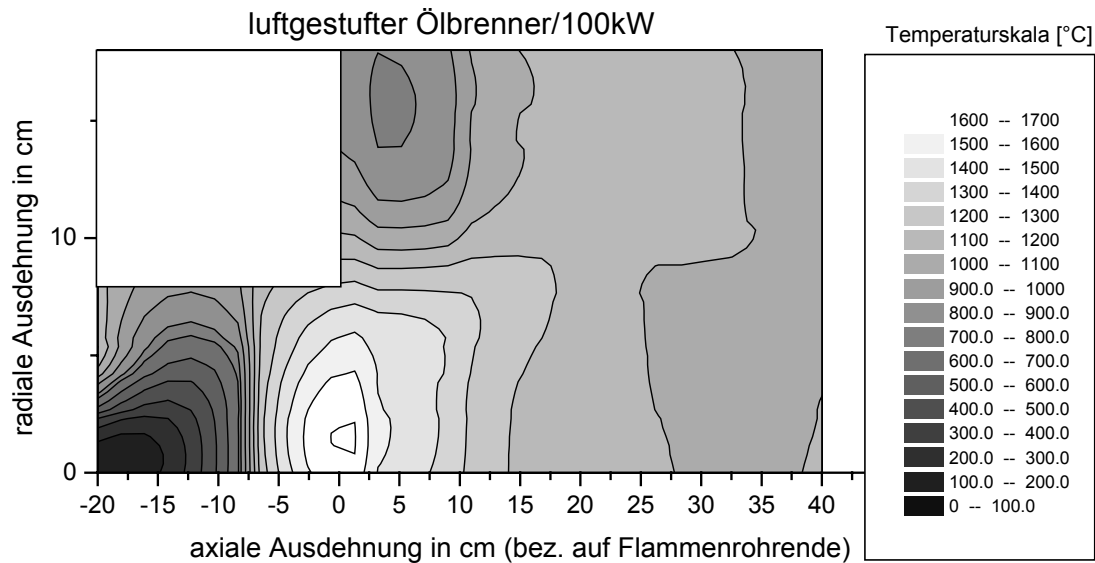
Abbildung (6.1.A2) (Rechnung 2) zeigt eine alternative Temperaturberechnung, bei der das Temperaturmaximum direkt am Flammenrohrende auftritt. Dies stimmt besser mit den Meßwerten überein, verglichen mit den Ergebnissen der Rechnung 1.



**Abbildung 6.1.A2:** alternative Temperaturverteilung;  $T_{min} = 298\text{K}$ ,  $T_{max} = 2348\text{K}$

Der Unterschied zwischen Rechnung 1 und 2 ist, daß Rechnung 2 ohne die Rückwand durchgeführt wurde. Man kann erkennen, daß sich eine stärkere Rückströmung ausbildet, die das Temperaturmaximum stromauf schiebt und die Flamme außerhalb des Flammenrohres aufweitet. Der grundsätzliche Nachteil von Rechnung 2 ist, daß sich das Rezirkulationsgebiet am Beginn des Flammenrohres nicht vollständig ausbildet. Darauf wird noch einmal in Kapitel 6.1.4 eingegangen. Man kann durch Vergleich der Temperaturverteilungen von Rechnung 1 und 2 erkennen, daß die Temperaturen von Rechnung 2 im Schnitt 50 K über denen von Rechnung 1 liegen. Dies ist auf die mangelhafte Wiedergabe der Rezirkulation zurückzuführen. Das Temperaturmaximum beträgt  $T_{max} = 2348\text{K}$ .

### 6.1.2 Qualitativer Vergleich der errechneten Temperaturverteilungen mit Meßwerten



**Abbildung 6.1.A3:** Gemessene Temperaturverteilung am Flammenrohrende ( 0 cm)

Durch Vergleich mit Abbildung (6.1.A2) erkennt man, daß die grundsätzliche Lage des Temperaturmaximums am Flammenrohrende durch die numerische Simulation richtig wiedergegeben wird. Lediglich in der radialen Lage besteht ein Unterschied. Bei dem realen Brenner liegt das Maximum in unmittelbarer Nähe zur Brennerachse, während es bei der numerischen Simulation auf Höhe der Sekundärluftrohre anzutreffen ist. Dies ist auf die schlechte Wiedergabe der Sekundärluftzumischung in die Hauptströmung bei der numerischen Simulation zurückzuführen (vergleiche Kapitel 6.1.4). Dadurch steht nur an der Grenzfläche zwischen dem Sekundärluftstrom und der Hauptströmung ausreichend Sauerstoff für einen vollständigen Umsatz zur Verfügung. Anders wie in der Realität wird die Sekundärluft hauptsächlich nicht am Flammenrohrende, sondern an den Rezirkulationsbohrungen am Beginn des Flammenrohres der Hauptströmung zugemischt. Wie an später gezeigten, berechneten Geschwindigkeitsfeldern zu sehen ist, verläßt zudem ein Teil der Sekundärluft ungenutzt den Brennraum, da die Durchmischung nicht korrekt wiedergegeben wird. In der Realität sorgt der hohe Turbulenzgrad dafür, daß die Sekundärluft schon am Flammenrohrende tief in die Hauptströmung eingemischt wird. Dadurch findet man auch in der Nähe der Brennerachse ausreichend Sauerstoff, so daß dort die höchsten Temperaturen auftreten.

An den gemessenen Isothermen kann man gut erkennen, daß zumindest Rechnung 2 den Einfluß der hinteren Rezirkulation auf die Temperaturverteilung richtig wiedergibt. So werden auch die Meßisothermen durch die Rückströmung und die damit verbundene Flammeneinengung stromauf verzerrt, so daß die Isothermen im Bereich des Temperaturmaximums einen gebogenen Verlauf haben. Außerdem erkennt man, daß sich sowohl in der Simulation als auch in den Meßwerten die Isothermen radial viel weiter ausdehnen, als axial. Dies ist ebenfalls auf die Flammeneinengung am Ende des Brenners zurückzuführen.

### 6.1.3 Verteilung des Mischungsbruches $f$

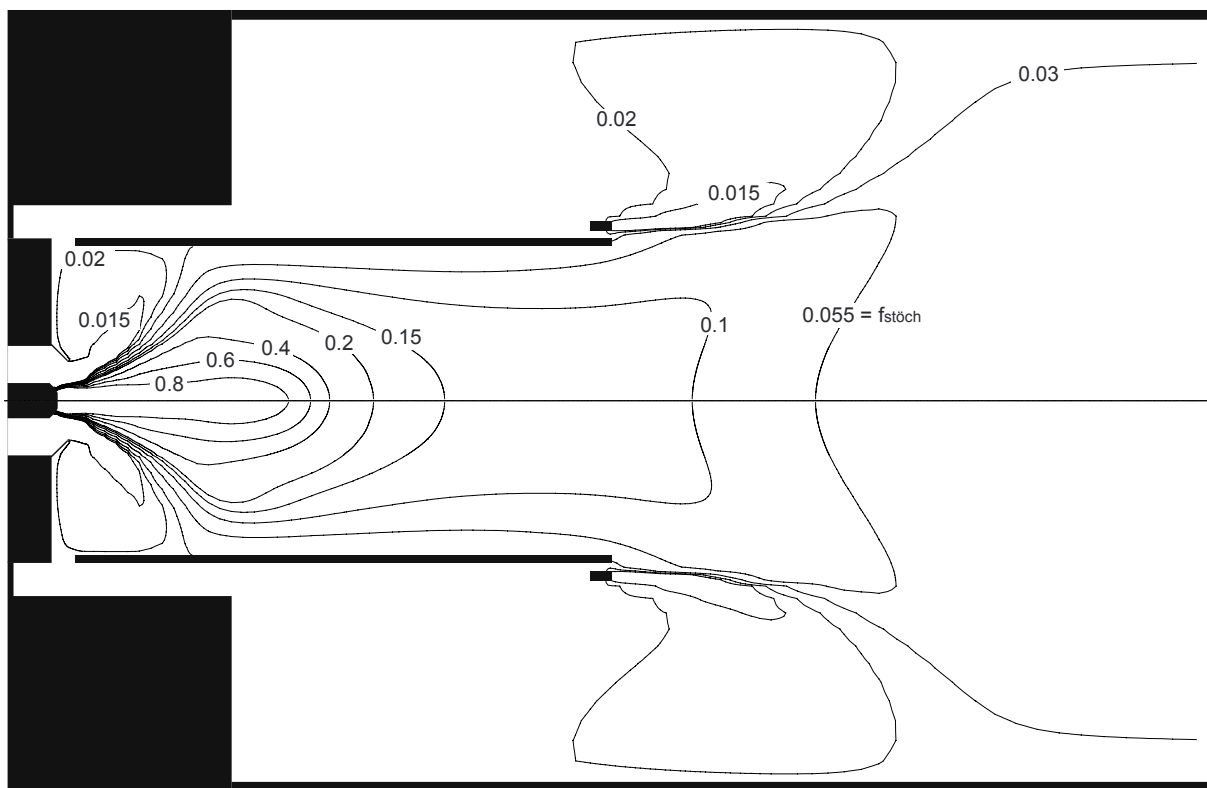
Der dimensionslose Mischungsbruch wurde eingeführt, um den Mischungszustand zwischen Oxidator und Brennstoff in jedem Punkt des Strömungsfeldes charakterisieren zu können. Er liegt im Bereich

$$0 \leq f \leq 1, \quad (6.1-1)$$

wobei Zündung für

$$f = f_{st\ddot{o}ch} = 0.05496 \quad (6.1-2)$$

eintritt. Dieser Wert ist in Abbildung (6.1.A3) ebenfalls eingetragen.



**Abbildung 6.1.A3:** Berechneter Mischungsbruch  $f$

Auch hier sieht man den starken Brennstofffreistrahle am Düsenaustritt, der bis zur Hälfte des Flammenrohres erhalten bleibt. Erst weiter stromab vermischt sich der Brennstoff in zunehmendem Maße mit Oxidant und Produkt, wodurch das Gebiet des unverbrannten Gemisches ausgedehnt wird. Eine Begrenzung dieses Gebietes stellt der Wert  $f_{st\ddot{o}ch} = 0.0546$  dar. Wie erwähnt reagiert das Gemisch definitionsgemäß bei diesem Wert für den Mischungsbruch. Außerhalb der Grenzlinie  $f_{st\ddot{o}ch} = \text{konst.}$  wird kein Brennstoff mehr zu finden sein. Kleinere Werte für  $f$  als  $f_{st\ddot{o}ch}$  kommen dadurch zustande, daß außerhalb der Grenzlinie der Oxidatormassenanteil  $\xi_{Ox}$  größer gleich null ist. Nach Gleichung (4.4-33)

$$f = \frac{1 + l_{st\ddot{o}ch} \xi_{Br} - \xi_{Ox}}{1 + l_{st\ddot{o}ch}}$$

folgt für kleinere Werte für  $f$  als  $f_{stöch}$  mit  $\xi_{Br} \equiv 0$ :

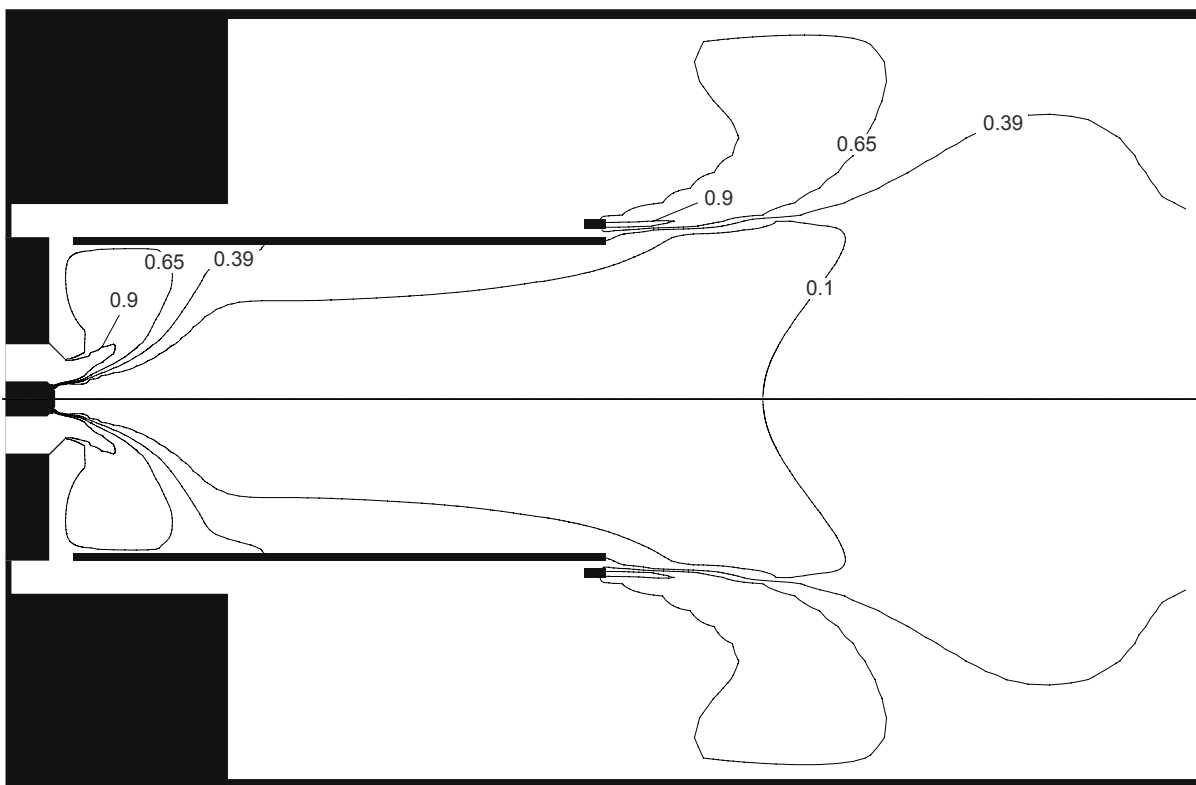
$$f = \frac{1 - \xi_{Ox}}{1 + l_{stöch}} \quad (6.1-3)$$

Damit der Mischungsbruch außerhalb der Grenzlinie die in Abbildung (6.1.A2) angegebenen Werte erreicht, muß dort der Oxidatormassenanteil

$$\xi_{Ox} \geq 0.6361 \quad (6.1-4)$$

sein. Dies ist ein relativ großer Wert und ist ein weiterer Anhaltspunkt, daß die Sekundärluft nur schlecht in die Hauptströmung mit einbezogen wird. Dies bestätigt sich auch bei der Betrachtung des reinen Oxidatormassenanteils.

#### 6.1.4 Verteilung des Oxidatormassenanteils $\xi_{Ox}$

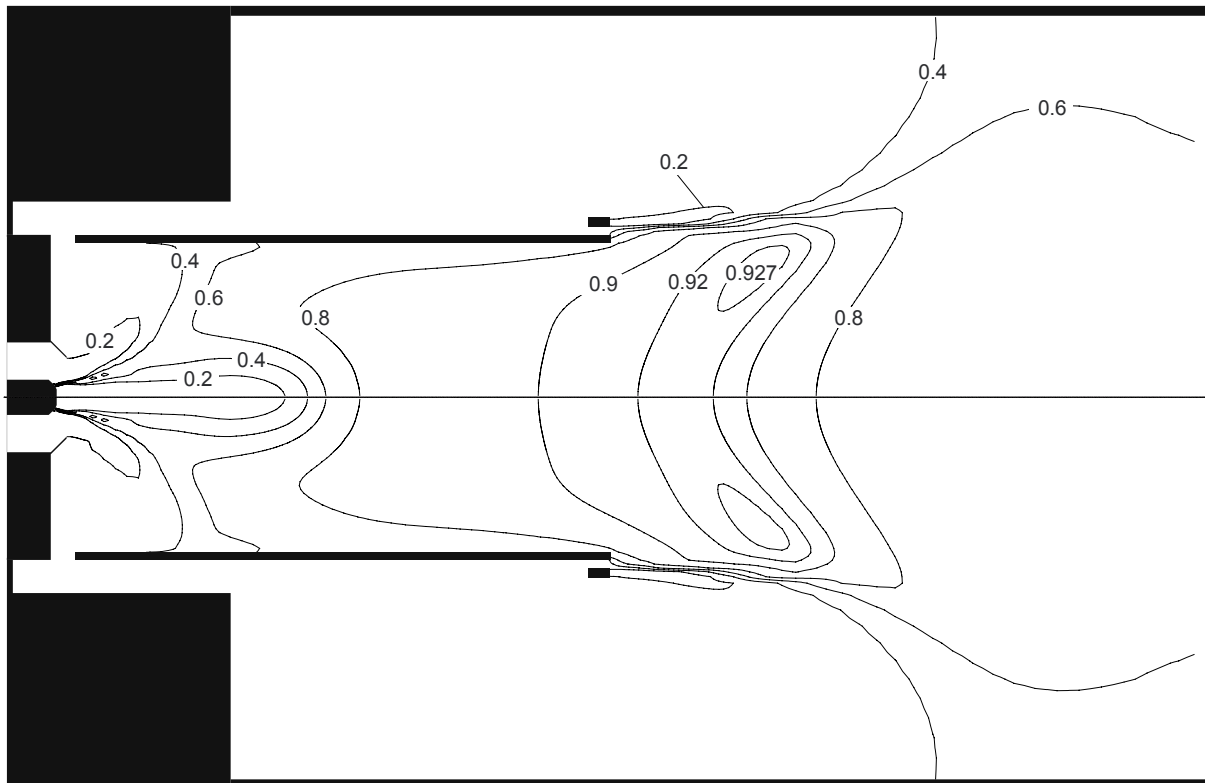


**Abbildung 6.1.A4:** Berechnete Oxidatorverteilung

Die Werte für  $\xi_{Ox}$  sind oberhalb des Flammenrohres relativ groß. Dies legt nahe, daß diese sauerstoffreiche Masse durch die Rezirkulationsströmung am Beginn des Flammenrohres die Primärluft ergänzt und das örtliche Luftverhältnis innerhalb des Flammenrohres hebt. Dies ist jedoch unrealistisch und führt zu einem erhöhten Brennstoffumsatz in der ersten Stufe der Verbrennung. Es ist zu vermuten, daß die errechnete, unzureichende Durchmischung der Sekundärluft mit der Hauptströmung am Sekundärluftaustritt ein Problem des verwendeten Turbulenzmodelles ist. Die dort real anzutreffende starke Turbulenz und die damit intensive

Mischung der beiden Strömungen wird nur reduziert wiedergegeben. Es hat den Anschein, als ob zwei unabhängige Freistrahlen, Sekundärluft und Hauptströmung, nebeneinander existieren würden, ohne in Wechselwirkung zu treten. Dieses Problem, die richtige Wiedergabe der Wechselwirkung zweier Freistrahlen, trat auch bei der dreidimensionalen Simulation auf und scheint ein grundsätzliches Problem des verwendeten  $k, \varepsilon$ -Turbulenzmodells zu sein.

### 6.1.5 Verteilung des Produktmassenanteils $\xi_{Pr}$



**Abbildung 6.1.A5:** Berechneter Produktmassenanteil

Wie man durch Vergleich der Abbildungen (6.1.A2) und (6.1.A5) feststellen kann, fallen die Gebiete hoher Temperatur und hoher Produktkonzentration zusammen. Daraus darf man aber nicht folgern, daß das Programmpaket PHOENICS einen hohen Produktmassenanteil stets mit hohen Temperaturen verbindet. Bei genauerer Betrachtung sieht man auch, daß die Temperatur- und die Konzentrationsmaxima nicht genau zusammenfallen. Die hohen Temperaturen sind auf einen schnellen Reaktionsumsatz aufgrund ausreichender Oxidantversorgung zurückzuführen. Dabei kann die entstandene Reaktionswärme aufgrund des schlecht simulierten radialen Massenaustausches nur unzureichend aus dieser Zone entfernt werden. Die Temperaturen sinken erst, wenn sich die Flamme aufgrund der Rezirkulation am Abgasauslaß aufweitet und sich auf ein größeres Gebiet verteilt. Ebenso entsteht das Produktmaximum. Die Reaktionsprodukte aus dem Gebiet  $f = f_{stoch}$  werden durch den Sekundärluftstrom daran gehindert, sich radial aus dem Reaktionsgebiet zu entfernen. Vielmehr sammeln sie sich unterhalb der Mischungsbruchgrenzlinie auf der Strahlachse. Aufgrund dieser ähnlichen Phänomene fallen die Konzentrations- und die Temperaturmaxima quasi aufeinander.

Abschließend soll erwähnt werden, daß die Darstellungen des Mischungsbruches, des Oxidatormassenanteils und des Produktmassenanteils alle der Rechnung 2 (ohne hintere Rückwand) entstammen.

### 6.1.6 Geschwindigkeitsfeld

Zur Darstellung des Geschwindigkeitsfeldes wurde eine Vektordarstellung gewählt, wobei der Referenzvektor 35 m/s beträgt. Zur Hervorhebung von Wirbeln wurden zusätzlich Isotachen, Linien gleicher Geschwindigkeit, für  $v = w = 0$  eingezeichnet.  $v$  und  $w$  sind die Geschwindigkeitskomponenten in radialer und axialer Richtung. Die Schnittpunkte dieser beiden Isotachen stellen die Drehpunkte von Wirbeln dar. Abbildung (6.1.A6) ist die Geschwindigkeitsverteilung nach Rechnung 1 mit Rückwand, Abbildung (6.1.A7) die entsprechende Verteilung nach Rechnung 2 ohne Rückwand.

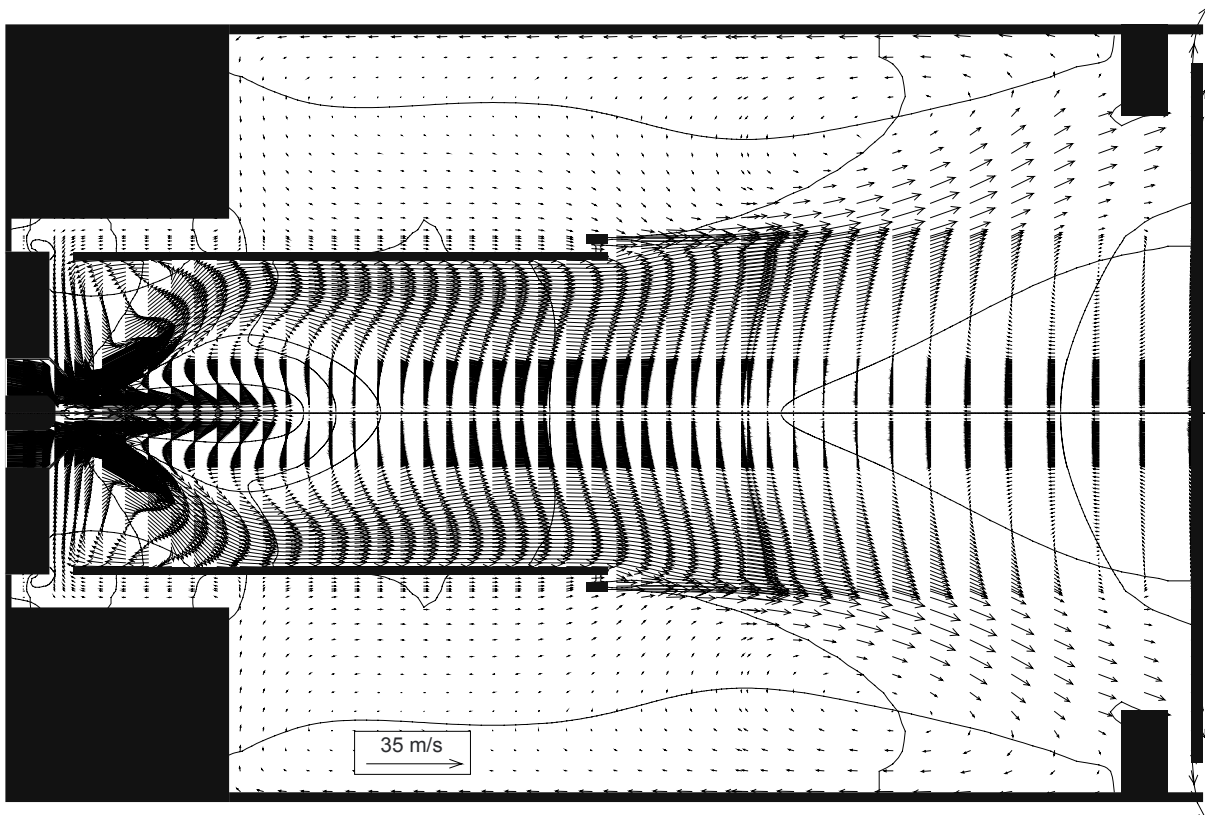
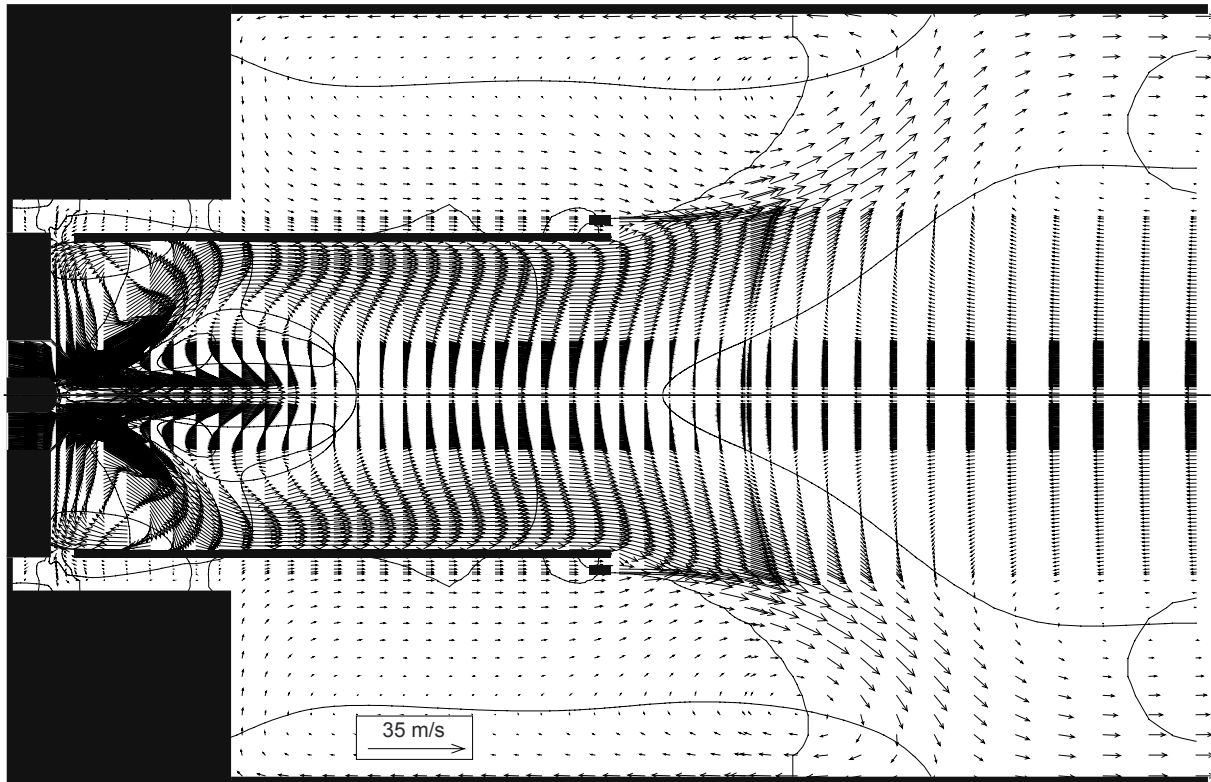


Abbildung 6.1.A6: Geschwindigkeitsfeld nach Rechnung 1

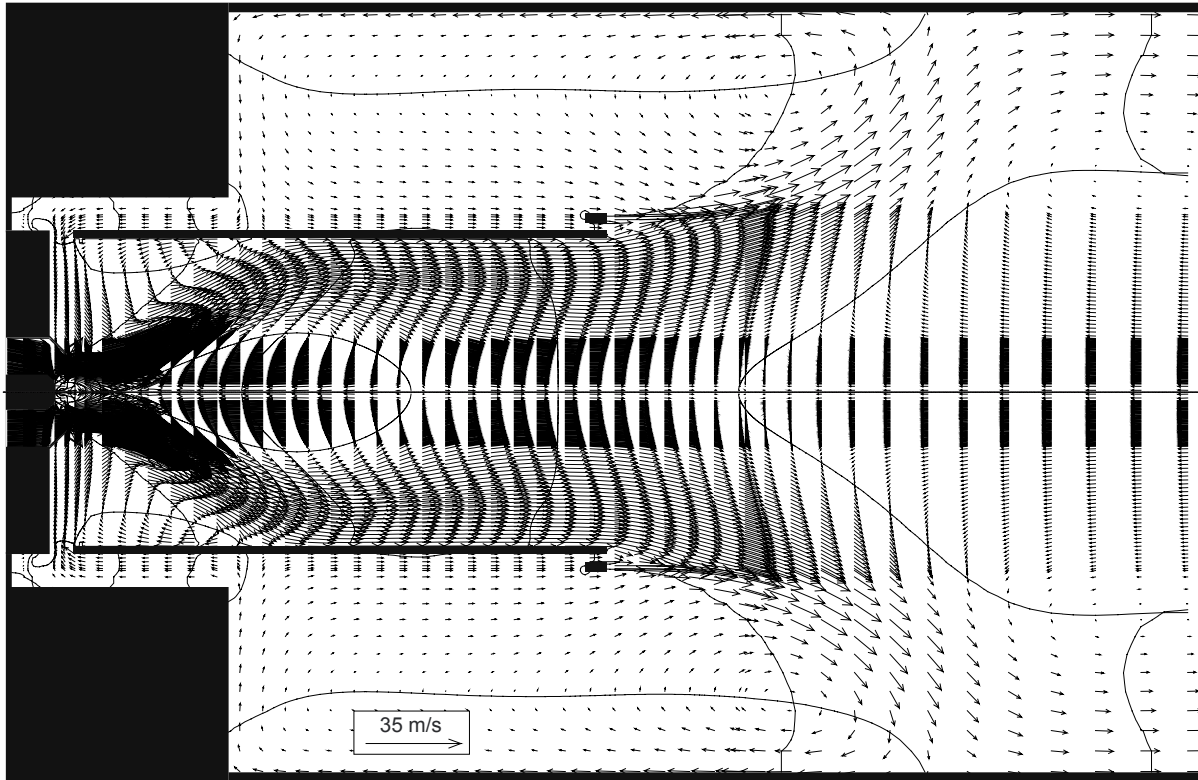


**Abbildung 6.1.A7:** Geschwindigkeitsfeld nach Rechnung 2

Deutlich ist der Einfluß der hinteren Rückwand zu erkennen. Bei Rechnung 1 bildet sich kaum eine hintere Rückströmung auf der Strahlachse aus, wogegen sie bei Rechnung 2 deutlich entwickelt ist. Diese Rückströmung wird aber in der Realität beobachtet, genauso wie die mit der Rezirkulation verbundene Flammenerweiterung, die in der Realität bis zu einem Flammenrückschlag in das Flammenrohr führen kann. Die Flammenerweiterung ist bei Rechnung 2 sehr gut wiedergegeben. Die einzige Problematik bei Rechnung 2 ist jedoch die mangelbehaftete Ausbildung des Rezirkulationsgebietes am Beginn des Flammenrohres. Zwar bildet sich bei beiden Rechnungen die nötige Walze innerhalb des stromauf liegenden Endes des Flammenrohres aus, aber nur bei Rechnung 1 führt diese Walze auch zu einem deutlichen Ansaugen von Abgas aus dem Gebiet oberhalb des Flammenrohres durch die Rezirkulationsbohrungen. Bei Rechnung 2 läßt sich nicht klar feststellen, ob Masse durch die Rezirkulationsöffnungen hereingesaugt oder herausgedrückt wird. Man könnte vermuten, daß es sich um ein Konvergenzproblem handelt und sich eine korrekte Darstellung der Rezirkulation ergibt, wenn man Rechnung 2 weiter numerisch iterieren läßt. Dabei muß erwähnt werden, daß beide Rechnungen das Ergebnis von mindestens 45000 Rechenschritten sind, wodurch man keine grundlegenden Änderungen mehr erwarten kann. Die tatsächliche Ursache für dieses Problem ist im großen Brennstoffvolumenstrom zu suchen, wie im folgenden erläutert wird.

Bei beiden Rechnungen ist der deutliche Brennstofffreistrahle auf der Strahlachse zu sehen, der durch den großen Methanvolumenstrom entsteht. In der Realität wird dieser Freistrahle nicht zu finden sein, da dazu der real verwendete Ölvolumenstrom viel zu klein ist. Außerdem können die feinen Öltröpfchen mit ihrer geringen Geschwindigkeit dem Primärluftstrom viel besser folgen, als der mit hoher Geschwindigkeit eingeblasene und damit impulsbehaftete Gasstrom. Der Brennstofffreistrahle ergibt sich in der Simulation trotz einer zur Brennerachse schrägen Einblasung unter  $30^\circ$ . Mit dieser Maßnahme sollte der Brennstoffstrom besser der Primärluft folgen und sich eine realistischere Darstellung ergeben.

Bei vergrößerter Darstellung des Brennstoffauslasses sieht man, daß der Brennstoffstrom zwar schräg ausgeblasen wird, jedoch sofort wieder durch den viel größeren Primärluftstrom auf die Strahlachse zurückgedrängt wird. Rechnungen mit einem Austrittswinkel von  $60^\circ$  werden derzeit durchgeführt. Ein Zwischenergebnis zeigt Abbildung (6.1.A8).



**Abbildung 6.1.A8:** Geschwindigkeitsfeld mit vergrößertem Brennstoffeinblaswinkel ( $60^\circ$ )

Es ist eine deutliche Verbesserung hinsichtlich der realistischeren Wiedergabe des Geschwindigkeitsfeldes im Mischungsgebiet von Primärluft und Brennstoff zu erkennen. Der unerwünschte Brennstofffreistrahle ist nicht mehr vorhanden. Somit verkleinert sich der Winkel des Primärluftkegels, wodurch wiederum Platz für die Rezirkulationswirbel am Anfang des Flammenrohres geschaffen wird. Die Rezirkulation durch die Rezirkulationsbohrungen ist deutlich ausgeprägt und trat bereits nach kurzer Rechenzeit auf. Bei Rechnung 2 liegt dieses Rezirkulationsgebiet weiter stromauf, in Richtung Brennerwand. Die Geschwindigkeitsvektoren bei Rechnung 2 laufen fast senkrecht auf die Brennerwand zu, wodurch ein Teil der Rezirkulationsströmung fälschlicherweise zentrifugal umgelenkt wird. Dies tritt bei der zur Abbildung (6.1.A8) gehörenden Rechnung nicht auf, da dort das Rezirkulationsgebiet weiter stromab liegt. Die Geschwindigkeitsvektoren laufen schräg auf die Wand zu, die diese dann zentripetal umlenkt, wie es in der Realität auch beobachtet wird. Leider bilden sich durch den vergrößerten Austrittswinkel zwei zur Brennerachse symmetrische Wirbel, die zwar klein sind aber extreme Rückströmgeschwindigkeiten aufweisen. Dies führt zu Problemen bei der Temperaturverteilung, die an dieser Stelle zur Divergenz neigt.

## **6.2 Isotherme, dreidimensionale Rechnung**

Wie in Kapitel 5 erwähnt liegen zum Zeitpunkt der Fertigstellung dieser Arbeit noch keine brauchbaren Ergebnisse der dreidimensionalen Simulation vor. Das bisher erzielte Ergebnis wurde schon im Abschnitt 5.4.5 gezeigt. Die Rechnungen werden fortgeführt.

## 7 Vergleich und Bewertung der verschiedenen numerischen Konzepte

### 7.1 Vergleich 2D-Verbrennungsrechnung mit isothermer 2D-Rechnung

Grundsätzlich können und sollen in diesem Kapitel nur die Geschwindigkeitsfelder verglichen werden, um eine Aussage darüber machen zu können, ob die Verbrennungsrechnung die mechanischen Strömungsgrößen derart verändert, daß eine rein isotherme Betrachtung bei real ablaufenden Verbrennungen zu großen Fehlern führt.

In Abbildung (7.1.A1) ist die berechnete zweidimensionale Geschwindigkeitsverteilung für den gleichen Brenner, jedoch ohne Verbrennungsrechnung zu sehen. Diese Rechnung wurde von *Muellemann* [32] durchgeführt. Abbildung (7.1.A2) zeigt noch einmal die zweidimensionale Geschwindigkeitsverteilung nach Rechnung 2 ohne Rückwand.

Wie bereits erläutert, wurde bei der isothermen Rechnung auf einen Brennstoffstrom verzichtet, da der Ölvolumenstrom in der Realität sehr klein ist. Deswegen ist auf der Strahlachse nicht der ausgeprägte Brennstofffreistrahle wie bei der Verbrennungsrechnung zu sehen, sondern ein deutliches Rückströmgebiet. Dies ist in jedem Fall realistischer. Grundsätzlich muß man feststellen, daß das Geschwindigkeitsniveau der isothermen Rechnung etwas niedriger ist, als bei der Rechnung mit Berücksichtigung der Verbrennungsvorgänge. Dies ist aus dem Vergleich der Referenzvektoren zu erkennen und mit der Volumenexpansion der Verbrennungsgase begründbar.

Gut zu erkennen ist, daß sich praktisch an den gleichen Orten Wirbel ausbilden und die grundsätzliche Strömungsform deutliche Parallelen aufweist. Durch das höhere Geschwindigkeitsniveau liegen die Wirbel der nichtisothermen Rechnung jedoch etwas weiter stromab als bei der isothermen Rechnung.

Auch die Flammenaufweitung hinter dem Flammenrohr wird bei beiden Rechnungen ähnlich wiedergegeben, insbesondere wenn man die isotherme Rechnung mit der Rechnung 2 vergleicht. Die radiale Komponente der Primärluft an der Luftdüse ist bei der isothermen Rechnung kleiner als bei der mit Verbrennungssimulation. Der Kegel verläuft deutlich flacher und weiter in den Brennraum hinein. Dies ist jedoch wieder durch den zusätzlichen Brennstoffvolumenstrom bei Rechnung 2 begründbar, der die Primärluft zusätzlich zu den wirkenden Fliehkräften radial nach außen drängt. Durch die vergrößerte radiale Komponente legt sich die Primärluft aus Rechnung 2 stärker an das Flammenrohr an als bei der isothermen Rechnung. In dem vergrößerten Kegelwinkel in der Verbrennungsrechnung ist auch die Ursache für die Probleme bei der Rezirkulation durch die Rezirkulationsöffnungen zu suchen. Durch Vergleich der beiden Geschwindigkeitsprofile stellt man fest, daß sich im Gegensatz zu den stromab liegenden Rezirkulationswalzen der für die Abgasrezirkulation verantwortliche Rezirkulationswirbel bei der Verbrennungsrechnung weiter stromauf, in Richtung der Rezirkulationsbohrungen befindet. Dadurch treffen die Geschwindigkeitsvektoren nahezu senkrecht auf die Rückwand des Brenners (in Höhe der Rezirkulationsbohrungen). Es ergibt sich eine indifferente Lage, so daß ein Teil der Vektoren zur Brennerachse abgelenkt und der andere Teil nach oben umgelenkt wird und durch die Bohrungen tritt. Auf diese Weise wird die Rezirkulationsströmung behindert. Dieses Phänomen wurde bereits in Kapitel 6.1.6 erläutert.

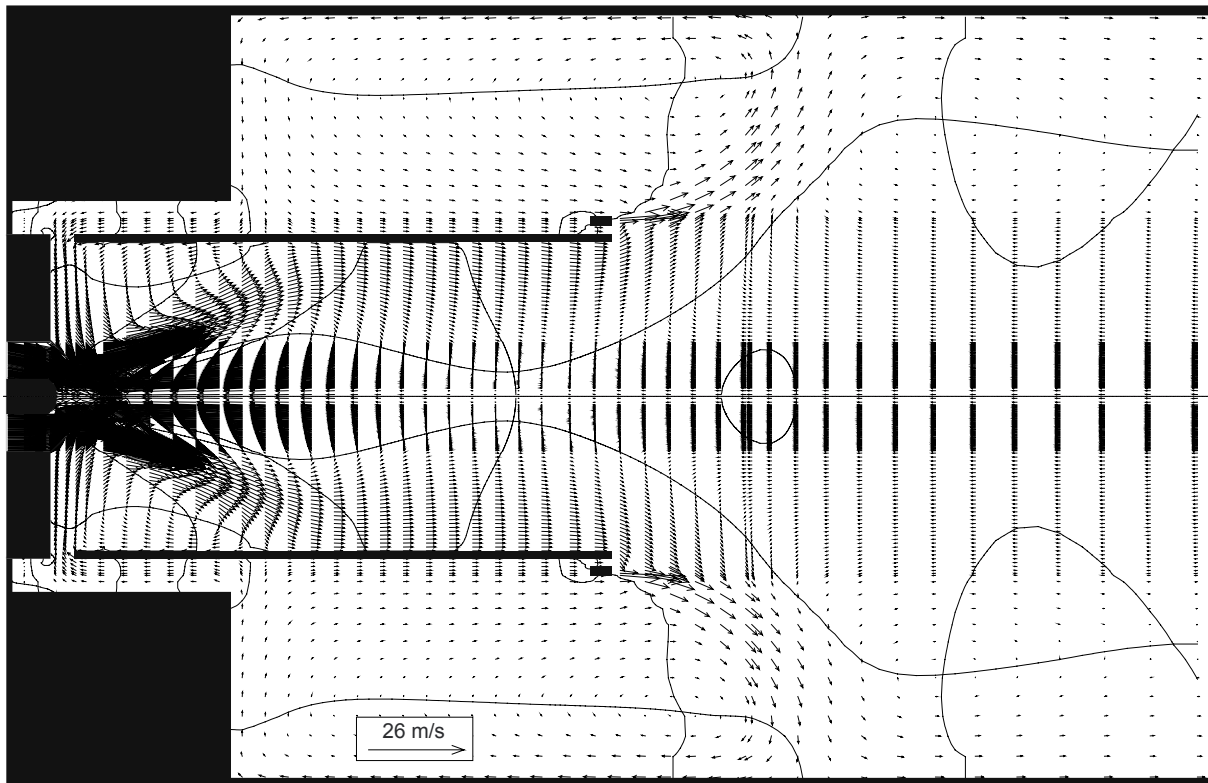


Abbildung 7.1.A1: Geschwindigkeitsverteilung nach isothermer Rechnung

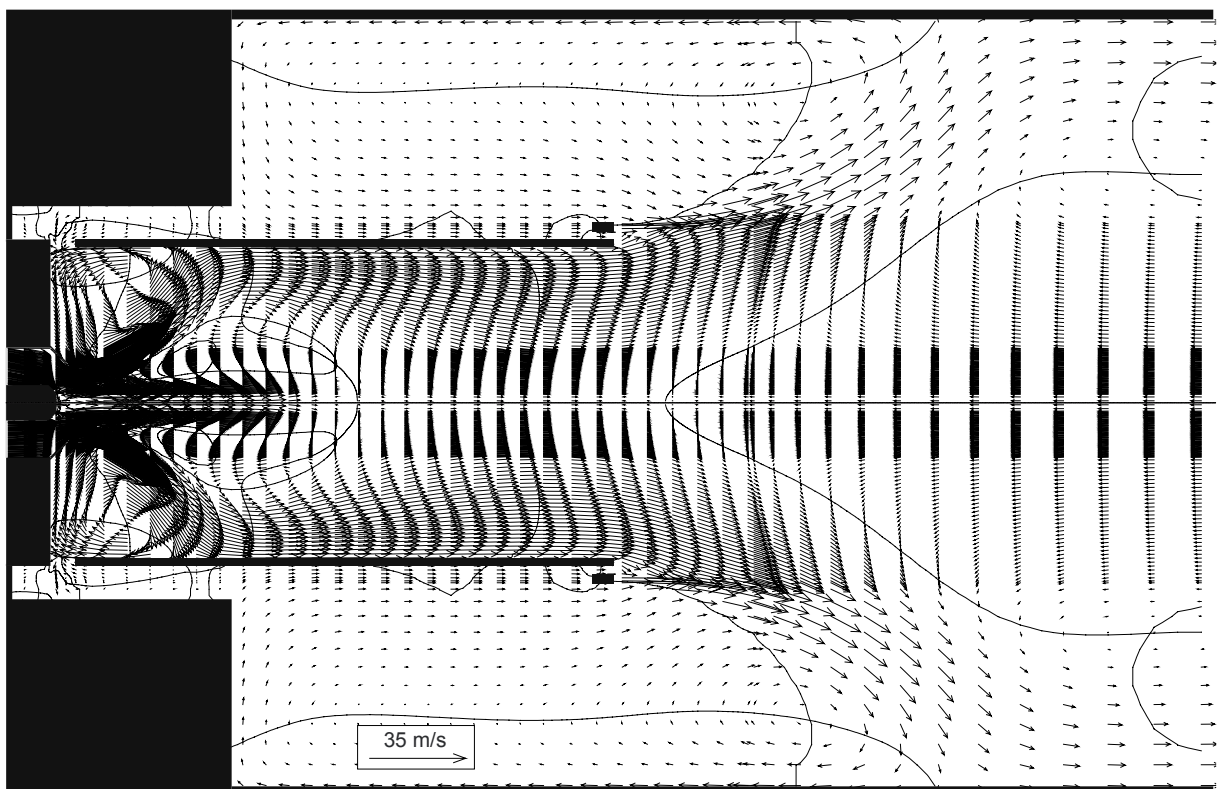


Abbildung 7.1.A2: Geschwindigkeitsverteilung nach Verbrennungsrechnung

Abschließend kann man festhalten, daß sich das Geschwindigkeitsfeld durch die Berücksichtigung einer Verbrennung qualitativ nicht stark ändert. Alle Veränderungen sind

auf den bei der Verbrennungsrechnung zusätzlich zu berücksichtigenden Brennstoffvolumenstrom zurückzuführen. Möchte man nur Aussagen über die mechanischen Strömungsgrößen gewinnen, so ist die isotherme Rechnung auch bei real ablaufenden Verbrennungen ein geeignetes Werkzeug mit deutlich verringertem Rechenaufwand. Gerade der Temperatureinfluß auf die qualitative Geschwindigkeits- und Druckverteilung ist als gering einzustufen. Der deutlich höhere Aufwand bei der nichtisothermen Rechnung liefert für die mechanischen Strömungsgrößen keine entscheidenden veränderten Aussagen, so daß dieser Aufwand, gerade bei einem Brenner-Scale-Up, fragwürdig wäre. Darauf soll aber noch einmal in Kapitel 7.3 eingegangen werden.

## 7.2 Bewertung der Ergebnisse der Verbrennungsrechnung

Nach Vergleich der gewonnenen Ergebnisse der Verbrennungsrechnung mit Meßwerten und vorausgegangen isothermen Rechnungen kann man festhalten, daß die nichtisotherme Rechnung ein grundsätzlich realistisches Abbild von den realen Prozessen liefert. Die qualitativ richtige Lage des Temperaturmaximums am Ende des Flammenrohres bekräftigt dies. Dies ist um so erstaunlicher, wenn man die teilweise doch erheblichen Vereinfachungen berücksichtigt, die bei der numerischen Simulation gemacht wurden. Man muß aber zugestehen, daß die gewonnenen Ergebnisse gerade bei den Größen, die die Verbrennung beschreiben, doch mit erheblichem Aufwand erzielt wurden. Der Lösungsalgorithmus von PHOENICS scheint für isotherme Rechnungen gut geeignet zu sein, wogegen er bei Rechnungen mit Verbrennungssimulation zu Problemen mit der Konvergenz führt. Diese sind auf die Verwendung der recht einfachen Verbrennungsmodelle, wie 'Mixed = Burned' und das Eddy-Break-Up-Modell zurückzuführen. Außerdem bereitet das  $k, \varepsilon$ -Modell gerade bei Wechselwirkungen zwischen zwei Freistrahlen Probleme. Das grundsätzlich zu hohe Temperaturniveau, sowohl bei Rechnung 1 als auch bei Rechnung 2, liegt zum einen an der Verwendung von Methan. Dieses hat eine geringere Wärmekapazität als das real verwendete Öl. Außerdem wird der Verdunstungsprozeß nicht simuliert, der ebenfalls eine nicht zu vernachlässigende Wärmemenge bindet. Zum anderen dürfte das Strahlungsmodell von PHOENICS die Realität nur begrenzt brauchbar wiedergeben.

## 7.3 Vergleich isotherme 3D-Rechnung mit isothermer 2D-Rechnung

Wegen der fehlenden brauchbaren Ergebnisse bei der dreidimensionalen Rechnung ist ein Vergleich mit den Ergebnissen der zweidimensionalen Simulation praktisch nicht möglich. Man kann lediglich den enorm erhöhten Aufwand bei der dreidimensionalen Rechnung betonen, der auch bei Initialisierung mit konvergenten Rechnungen immer erheblich größer bleiben dürfte, als bei der zweidimensionalen Rechnung.

## 7.4 Einsatzmöglichkeiten der numerischen Simulation für ein Brenner-Scale-Up

Unter einem Brenner-Scale-Up versteht man die Entwicklung des prinzipiell identischen Brenners in einem anderen Leistungsbereich. Die numerische Simulation bietet sich für diesbezügliche Voruntersuchungen an, da der materielle Aufwand sehr gering ist und kostenintensive Parameterstudien verkürzt werden können.

Bei der hier behandelten Problematik der  $\text{NO}_x$ -Entstehung sind bei einem Brenner-Scale-Up folgende Informationen gesucht:

- Aussage über veränderten Strömungsverlauf in vorgegebener Brennergeometrie.
- Aussage über Temperaturverlauf

Mit der Kenntnis des veränderten Strömungsfeldes lassen sich Rückschlüsse auf

- veränderte Rezirkulationen, insbesondere die veränderte Abgasrezirkulation durch die Rezirkulationsbohrungen
- Veränderungen in der Durchmischung von Primär- und Sekundärluft und
- Veränderungen in der Flammenaufweitung am Ende des Flammenrohres

ziehen.

Aus dem veränderten Temperaturfeld können folgende Erkenntnisse gewonnen werden:

- aus der Lage der Temperaturmaxima können kritische Stellen für die  $\text{NO}_x$ -Entstehung erkannt werden
- in Verbindung mit dem Geschwindigkeitsfeld können Orte mit hoher Aufenthaltszeit und hohen Temperaturen ermittelt werden
- aus dem Temperaturniveau läßt sich der Einfluß der Rezirkulation erkennen

Die verschiedenen Konzepte der numerischen Simulation können nun helfen, diese Fragen bei einem Brenner-Scale-Up zu klären.

Die zweidimensionale, isotherme Simulation liefert brauchbare Aussagen über das axiale Strömungsfeld. Insbesondere können Phänomene wie die Abgasrezirkulation und Flammenaufweitung näher untersucht werden. So ist die Rezirkulation von Verbrennungsgasen am stromauf gelegenen Ende des Flammenrohres sensibel auf Veränderungen in der Primärluftzuführung, wie beispielsweise die bei einem Scale-Up vorkommende Änderung der zugeführten Luftmasse.

Aus der dreidimensionalen, isothermen Simulation lassen sich Erkenntnisse über die tangentiale Vermischung von Primär- und Sekundärluft gewinnen. Durch die beschriebenen Mängel des  $k, \varepsilon$ -Turbulenzmodelles wird jedoch die Aussagefähigkeit der Ergebnisse beschränkt, da die Qualität des verwendeten Turbulenzmodelles entscheidenden Einfluß auf die korrekte Wiedergabe der tangentialen Durchmischung hat.

Die zweidimensionale Verbrennungsrechnung liefert brauchbare Aussagen über die Lage des Temperaturmaximums. Auch der Einfluß der Rezirkulation auf das Temperaturniveau wird richtig wiedergegeben. Problematisch ist, daß die errechneten Werte nur bedingt quantitativ ausgewertet werden können. So liefern die innerhalb des Flammenrohres errechneten Temperaturwerte nur Anhaltspunkte über die Temperaturverteilung. Diesen Bereich des Brenners auch quantitativ numerisch richtig zu simulieren wäre aber sehr wünschenswert, da er meßtechnisch nur schwer zugänglich ist. Dies scheitert aber an der Vereinfachung, die Ölverdunstung zu vernachlässigen.

In Verbindung mit der errechneten Geschwindigkeitsverteilung lassen sich mit der errechneten Temperaturverteilung Orte mit hohen Aufenthaltszeiten der Gaskomponenten bei

---

gleichzeitig hoher Temperatur ausfindig machen, die Aufschluß über die Entstehung von  $\text{NO}_x$  geben.

## 8 Zusammenfassung / Ausblick

Die bestehende isotherme Modellrechnung dieses Brenners wurde zu Beginn dieser Arbeit um die Modelle der Verbrennungssimulation, die in PHOENICS implementiert sind, erweitert. Anschließend wurde versucht, Ergebnisse zu erzielen, die mit den in der Praxis beobachteten Phänomenen gut übereinstimmen. Dies gestaltete sich schwierig, insbesondere bei den thermischen Zustandsgrößen. Diese Rechnungen dienten dazu, den Einfluß der Verbrennung auf die mechanischen Strömungsgrößen abschätzen zu können. Insbesondere sollte die Aussagekraft der isothermen Simulation für eine reale Strömung mit Verbrennung bewertet werden. Zur Beantwortung dieser Fragen wurden die berechneten Geschwindigkeitsfelder der isothermen und der nichtisothermen Rechnung qualitativ miteinander verglichen.

Letztendlich kann man festhalten, daß die Verbrennung qualitativ nur geringen Einfluß auf die mechanischen Strömungsgrößen hat. Die Verteilungen der mechanischen Strömungsgrößen bei der isothermen Rechnung und bei der Verbrennungsrechnung weisen deutliche Parallelen auf. Lediglich das Geschwindigkeitsniveau ist bei der Verbrennungsrechnung höher. Zur qualitativen Berechnung der mechanischen Strömungsgrößen ist es daher zulässig, die real ablaufende Verbrennung in der Simulation zu vernachlässigen.

Das Temperaturfeld aus der zweidimensionalen Verbrennungsrechnung wurde mit Meßwerten qualitativ verglichen. Dabei konnte eine gute Übereinstimmung der Lage des Temperaturmaximums und der Form der Isothermen am Flammenrohraustritt festgestellt werden. Quantitativ unterschieden sich die Verteilungen um einen Wert von circa 310K (bei Vergleich der Temperaturmaxima aus Simulation (Rechnung 1) und Messung). Dieser Unterschied ließ sich mit den getroffenen Annahmen begründen.

Aufbauend auf den Erfahrungen der zweidimensionalen Simulation wurde ein dreidimensionales Modell des gleichen Brenners erstellt. Damit sollten isotherme Rechnungen durchgeführt werden, um insbesondere die Durchmischung der Primär- und Sekundärluft am Flammenrohrende zu untersuchen. Im Unterschied zur zweidimensionalen Simulation wurde ein *bfc*-Gitter verwendet, da dieses eine realistischere Wiedergabe der Wandreibung ermöglicht.

Unter Zugrundelegung der Ergebnisse dieser Arbeit können weiterführende Parameterstudien bei der zweidimensionalen Verbrennungsrechnung durchgeführt werden. Dabei ist mit einer schnelleren Konvergenz der Simulationsrechnungen zu rechnen:

- Variation der Brennerleistung (Brenner-Scale-Up)
- Variation des Impulses der Sekundärluft
- Variation des Drallwinkels im Drallerzeuger
- weitere Variationen des Brennstoffaustrittswinkels
- Variation der Größe der Rezirkulationsöffnungen am stromauf liegenden Ende des Flammenrohrs

Als grundsätzliches Ziel für weiterführende Arbeiten kann die dreidimensionale Verbrennungsrechnung mit gleichzeitiger Integration eines Modells der Ölverdunstung angesehen werden.

**Anhang I - Literaturquellen**

- [1] Umweltbundesamt      Daten zur Umwelt 1992/93  
Erich Schmidt Verlag, 1994
- [2] Kremer, H.;  
Otto, D.                      NO<sub>x</sub>-Emission von Heizungsanlagen mit Öl- und  
Gasbrennern,  
GWI 30 Nr. 1, 1981, SS. 41-47
- [3] Wolfrum, J.                Bildung von Stickoxiden bei der Verbrennung  
Chemie-Ing.-Technik, Jg. 44 Nr. 10, 1972, SS. 656-659
- [4] Warnatz, J.                Elementarreaktionen in Verbrennungsprozessen  
BWK 37 Nr. 1-2, 1985
- [5] Fenimore, C.P.            Formation of Nitric Oxide in Primixed Hydrocarbon  
Flames; 13th Symposium (Int.) on combustion,  
Pittsburgh, Pa: The Combustion Institute, 1971, SS. 373-  
380
- [6] Kremer, H.  
et al.                        NO<sub>x</sub>-Entstehung in Feuerungen  
VGB-Taschenbuch 310, VGB-Kraftwerkstechnik,  
Essen, 1984, SS. 24-43
- [7] Morely, C.                 Combustion and Flame 27,  
The Combustion Institute, 1974, SS 189-204
- [8] Zeldovich, J.             The oxidation of nitrogen in combustion and explosions  
Acta Physicochimica, U.R.S.S. 21 Nr. 4, 1946, SS. 577-  
628
- [9] Bathke, H.;  
van Heyden, L.            Stickoxidmessungen an Feuerungsabgasen von  
Kesselanlagen,  
VDI-Berichte 211, 1974
- [10] Rennert, K.-D.           Möglichkeiten der Stickoxidreduzierung in  
Feuerungsräumen,  
BWK 38 Nr. 1 / 2, Fachreport Rauchgasreinigung, 1986
- [11] Dreher, H.                Bestimmung der Rezirkulationsrate in Brenner/Kessel-  
Kombinationen mittels numerischer Simulation,  
Dissertation, Universität Karlsruhe
- [12] Bos, H.G.;  
Veurink, J.                Praxiserfahrung mit fortgeschrittenen NO<sub>x</sub>-armen  
Brennern und Zuhilfenahme zusätzlicher NO<sub>x</sub>-  
Minderungstechniken in Feuerräumen von  
Industriekesseln und Kraftwerken,  
VDI-Berichte 765, 1989
- [13] Reidick, H.              Verbrennung mit niedriger NO<sub>x</sub>Bildung,  
VDI-Berichte 574, 1985
- [14] Strauß, W.                Übersicht über Erfahrungen und Stand feuerungs-

- technischer NO<sub>x</sub>-Minderungsmaßnahmen mit trockenem Ascheabzug,  
VGB-Handbuch NO<sub>x</sub>-Bildung und NO<sub>x</sub>-Minderung bei Dampferzeugern für fossile Brennstoffe  
VGB-B 301, 1988
- [15] Kolar, J. Stickoxide und Luftreinhaltung,  
Springer-Verlag, 1990
- [16] Rusterholz, R. Erfolgreiche Minderung der Stickoxide bei Öl-  
feuerungsanlagen,  
Sanitär- und Heizungstechnik Nr. 11, 1988
- [17] Görner, K. Technische Verbrennungssysteme  
Springer-Verlag, 1991
- [18] Bird, R. B.;  
Stewart, W. E.;  
Lightfoot, E. N. Transport Phenomena,  
John Wiley & Sons, Inc., 1960
- [19] Marquardt, W. Modellbildung und Simulation verfahrenstechnischer  
Prozesse,  
Vorlesungsmanuskript, LPT / RWTH Aachen, 1998,  
S.106
- [20] Renz, U. Grundlagen der Wärmeübertragung,  
Vorlesungsmanuskript, WÜK / RWTH Aachen, SS. 136-  
140
- [21] Pischinger, F. Chemische Thermodynamik I  
Vorlesungsmanuskript, VKA / RWTH Aachen, 1997,  
S.5
- [22] Renz, U. Wärme- und Stoffaustausch bei der Verbrennung,  
Vorlesungsmanuskript, WÜK / RWTH Aachen, 1995,  
SS. 30-31
- [23] Mehrwald, A. Mathematische Simulation und meßtechnische Unter-  
suchung des Einflusses der Rezirkulation von Abgas auf  
die Wärmeübertragung und die Schadstoffbildung in  
einer Umkehrbrennkammer,  
Dissertation, Ruhr-Universität Bochum, 1991
- [24] Hinze, J.O. Turbulence  
McGraw Hill; New York, 1975
- [25] Foli, A.K. Impuls- und Energieaustausch in Kleinfeuerungen  
Dissertation, RWTH Aachen, 1991
- [26] Gupta, A.K.;  
Lilley, D.G. Flowfield Modeling and Diagnostics  
Dep. of Mechanical Engineering,  
University of Maryland,  
Abacus Press, 1985
- [27] Krause, E. Strömungslehre II

- Vorlesungsmanuskript, AIA / RWTH Aachen, 1990, S.2/6,
- [28] Lepperhoff, G. Chemische Thermodynamik II  
Vorlesungsmanuskript, VKA / RWTH Aachen, 1997, S.26
- [29] Mehring, J. Simulation der isothermen Strömung bei stauscheiben-  
stabilisierten Ölzerstäubungsbrennern,  
Diplomarbeit, EST / RWTH-Aachen, 1994
- [30] Mersmann, A. Grundlagen der Stoffübertragung  
Springer-Verlag, 1986
- [31] Spalding, D.B. The PHOENICS-Beginner's Guide,  
London, CHAM Limited, 1989
- [32] Muellemann, A. Rechnergestützte Simulation des Verbrennungsprozesses  
eines mit einem Rückstandsheizöl gefeuerten,  
luftgestuften Brenners mit dem Ziel der brennerinternen  
Strömungsoptimierung und der Verifizierung der in der  
Praxis gewonnenen Ergebnisse,  
Diplomarbeit, EST / RWTH-Aachen, 1997

**Anhang II - Nomenklatur****II.1 Chemische Formelzeichen**

Symbole	Bedeutung
$C_xH_y$	Kohlenwasserstoffverbindungen
CO	Kohlenmonoxid
CO <sub>2</sub>	Kohlendioxid
HCN	Cyanwasserstoff
N <sub>2</sub>	Stickstoff
NO	Stickstoffmonoxid
NO <sub>2</sub>	Stickstoffdioxid
NO <sub>x</sub>	Stickoxide
O <sub>2</sub>	Sauerstoff

**II.2 Formelzeichen**

Symbole	Einheit	Bedeutung
$\alpha$	°	Winkel Drallerzeuger
$\varepsilon$	m <sup>2</sup> / s <sup>2</sup>	Dissipationsrate der kinetischen Energie k
$\phi$		allgemeine, intensive Zustandsgröße
$\lambda$	-	Luftverhältnis
$\Gamma$		allgemeiner Austauschkoefizient
$\nu_i$	-	stöchiometrischer Koeffizient (Komponente i)
$\eta$	kg / m s	dynamische Viskosität
$\rho$	kg / m <sup>3</sup>	Dichte
$\sigma$	-	allgemeine <i>Prandtl</i> -Kennzahl
$\tau$	N / m <sup>2</sup>	Schubspannung
$\omega_\phi$	-	Relaxationsfaktor

$a_i$ ; $i = F, P, T$		Koeffizient der numerischen Erhaltungsgleichung
$A_{Ei}$	$m^2$	Teiloberfläche eines Gittersegments
$C_{\circ}$		empirische Konstanten
$g$	$m / s^2$	Erdbeschleunigung
$k$	$m^2 / s^2$	kinetische Energie der Turbulenz
$n$	-	Gitteranzahl
$\bar{n}$	-	Normalenvektor
$\dot{m}$	$kg / s$	Massenstrom
$p$	$N / m^2$	Druck
$P$	$N / m s$	Produktion der kinetischen Energie
$P_{Br}$	$W$	Brennerleistung
$r$	$m$	Radius
$res_{(s)}$		Residuum
$S_{\phi}$		allgemeiner Quellterm
$T$	$K$	Temperatur
$t$	$s$	Zeit
$\Delta t$	$s$	Zeitabschnitt
$u$	$m / s$	tangentiale Geschwindigkeit
$v$	$m / s$	radiale Geschwindigkeit
$w$	$m / s$	axiale Geschwindigkeit
$x$	$m$	Tangentialrichtung
$\Delta x$	$m$	Wegabschnitt
$y$	$m$	Radialrichtung
$z$	$m$	Axialrichtung

### II.3 sonstige Indizes

Index	Bedeutung
$eff$	Effektivwert
$F$	Nachbarzelle in bestimmter

---

	Koordinatenrichtung
$i$	allgemeine Koordinatenrichtung
$(j) \equiv P$	aktuelle Zelle
$i(j) \equiv F$	Nachbarzelle in Normalenrichtung $i$
$P$	aktuelle Zelle
$s$	Iterationsschritt
$T$	Zeitkoeffizient
$turb$	turbulent
$\prime$	Schwankungsgröße
$-$	zeitgemittelter Wert
$\infty$	Umgebung

## Anhang III - Herleitungen

### III.1 Herleitung der Kontinuität mit Diffusion; Gleichung (4.2-6); Seite 12

Allgemeine Massenbilanz für Bilanzvolumen  $V(t)$  mit Hüllfläche  $A(t)$ :

$$\frac{d}{dt}m = \frac{d}{dt} \int_{V(t)} (\rho) dV = (\text{Massenquelle}) + \sum_i (\text{Diffusionsstrom})_i$$

Keine Massenquelle; Einführung des flächenbezogenen Diffusionsstromes  $\vec{j}_i''$

$$\Leftrightarrow \frac{d}{dt} \int_{V(t)} (\rho) dV = \sum_i \int_{A(t)} \vec{j}_i'' \cdot \vec{n} dA$$

$\vec{n}$  ist der nach außen gerichtete Normalenvektor des Oberflächensegmentes  $dA$ . Mit dem Satz von *Leibnitz* folgt:

$$\Leftrightarrow \int_{V(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho) dV + \int_{A(t)} [(\rho)\vec{v}] \cdot \vec{n} dA = \sum_i \int_{A(t)} \vec{j}_i'' \cdot \vec{n} dA$$

Anwendung des Satzes von *Gauss* ergibt:

$$\Leftrightarrow \int_{V(t)} \frac{\partial}{\partial t} (\rho) dV + \int_{V(t)} \nabla \cdot [(\rho)\vec{v}] dV = \sum_i \int_{V(t)} \nabla \cdot \vec{j}_i'' dV$$

$$\Leftrightarrow \int_{V(t)} \left\{ \frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \nabla \cdot [(\rho)\vec{v}] - \sum_i \nabla \cdot \vec{j}_i'' \right\} dV = 0$$

Die Gleichung ist nur erfüllbar, falls der stetige Integrand selbst identisch null ist. Daraus folgt die infinitesimale Schreibweise:

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} (\rho) + \nabla \cdot [(\rho)\vec{v}] - \sum_i \nabla \cdot \vec{j}_i'' = 0$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial}{\partial t} (\rho) = -\nabla \cdot [(\rho)\vec{v}] + \nabla \cdot \sum_i \vec{j}_i''$$

## Anhang IV - Ausformulierungen von Kurzschreibweisen

### IV.1 Ausformulierung des *Stokes'schen* Spannungstensors $\underline{\underline{\sigma}}$ in Zylinderkoordinaten

$$\underline{\underline{\sigma}} = -\eta \begin{pmatrix} 2 \frac{\partial v}{\partial r} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) & r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \varphi} & \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \\ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \varphi} & 2 \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \varphi} + \frac{v}{r} \right) - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) & \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \\ \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} & \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} & 2 \frac{\partial w}{\partial z} - \frac{2}{3} (\nabla \cdot \vec{v}) \end{pmatrix}$$

### IV.2 Ausformulierung des Doppelpunktprodukts $\underline{\underline{\tau}} : \nabla \vec{v}$

Hierbei ist

$$\underline{\underline{\tau}} = \begin{pmatrix} \tau_{rr} & \tau_{r\varphi} & \tau_{rz} \\ \tau_{r\varphi} & \tau_{\varphi\varphi} & \tau_{z\varphi} \\ \tau_{rz} & \tau_{\varphi z} & \tau_{zz} \end{pmatrix}$$

ein symmetrischer Tensor zweiter Ordnung. Damit folgt:

$$\begin{aligned} \underline{\underline{\tau}} : \nabla \vec{v} &= \tau_{rr} \left( \frac{\partial v}{\partial r} \right) + \tau_{\varphi\varphi} \left( \frac{1}{r} \frac{\partial u}{\partial \varphi} + \frac{v}{r} \right) + \tau_{zz} \left( \frac{\partial w}{\partial z} \right) \\ &+ \tau_{r\varphi} \left[ r \frac{\partial}{\partial r} \left( \frac{u}{r} \right) + \frac{1}{r} \frac{\partial v}{\partial \varphi} \right] + \tau_{\varphi z} \left( \frac{\partial u}{\partial z} + \frac{1}{r} \frac{\partial w}{\partial \varphi} \right) + \tau_{rz} \left( \frac{\partial w}{\partial r} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) \end{aligned}$$

Alle Ausformulierungen sind [18] entnommen.

**Anhang V - Verwendete *q1-files*****V.1 - *q1-file* für zweidimensionale Verbrennungsrechnung**

\* job4

\*

TALK=F;RUN(1, 1);VDU=X11-Term

\*\*\*\*\*

\* GROUP 1. Run identifiers and other preliminaries.

\*

TEXT(100 kW, j4.Standard, 110898.d)

\*

\*100 kW, drall=60, Dfl=160mm, Dld=40mm

\*Relaxierung Druck 0.1

\*Relaxierung Geschw. 0.7

\*Realxierung H1 0.7

\*Relaxierung FUEL, MIXF 0.7

\*Relaxierung Sonstige 0.7

\*Geschw.begrenzung von -35 bis 60 m/s

\*Druckbegrenzung -1000 bis 1000 Pa

\*LSWEEP=3000; Test LSWEEP=100

\*Initialisierung PROD=0.85 (durch Initialisierung von MIXF=MIXPR)

\*Anpassung des Brennstoffaustrittswinkel an Luftströ.

(aradbr=30 Grad)

\*Def. einer Wärmeleitung durch Flammrohr

\* Elliptic Simulation

PARAB=F

\*

\*\*\*\*\*

\* GROUP 2. Time-dependence and related parameters.

\*

STEADY=T

\*

\*\*\*\*\*

\* Variablen

\*\*\*\*\*

REAL(PI,RM,ML,MBR,MPR,HU,CPL,CPBR,CPPR,PH,FLST,LAMBD,LAMBP,LAMBS)

REAL(TEIN,TWAND,CEBU,ENLREF,ETURB)

\* PRESSO : Referenzdruck in N/m<sup>2</sup>

\* RM : allg. Gaskonstante in J/(kmol K)

\* ENLREF : kinematische Referenzviskosität in m<sup>2</sup>/s

\* ML, MBR, MPR : Molmasse in kg/kmol

\* TGEIN, TWAND : Temperaturen in K (Eintrittsströme, Wand)

\* PH : Brennerleistung in W

\* HU : Heizwert in J/kgBr

- \* CEBU: Konstante fuer Eddy-Break-up-Modell;(Verbrennungsmodell)
- \* FLST : stoech. Luftfaktor (massenbezogen) =  $2/0.21 * ML/MBR$
- \* ENLREF : kinematische Referenzviskosität in  $m^2/s$
- \* ETURB : Eintrittsturbulenzgrad
- \* CPL,CPBR,CPBR: Spez. Waermekapazitaeten;(luft, Brennstoff, Produkte)

PRESS0=1.0000E+05  
 RM=8314  
 PI=3.1415927  
 TEIN=273+25  
 PH=100000  
 LAMBD=1.18  
 LAMBP=0.75  
 LAMBS=LAMBD-LAMBP

- \* berechnet fuer Methan

ML=28.85  
 MBR=16.04  
 $MPR = (((2/0.21) * LAMBD * ML) + MBR) / (1 + 2 * LAMBD * (0.79/0.21 + 1))$   
 CPL=1007  
 CPBR=2227  
 CPPR=1200  
 HU=50E6  
 FLST=17.195  
 CEBU=1  
 ENLREF=1.513E-05  
 ETURB=0.1

\*\*\*\*\*

- \* Geometrie

\*\*\*\*\*

REAL(drp,drs,aradi,aradbr, RBRA,Ra1,Ra2,Ra3,Ra4,Ra5)  
 INTEGER(NBRA,NR1,NR2,NR3,NR4,NR5,NEBPHI)

- \* drp,drs,aradi,aradbr: Winkel;(rad.Pr.luft, rad.Sek.luft,  
 \* ax.Sek.luft, ax.Brennstoff)
- \*RBRA,Ra1,Ra2,Ra3,Ra4,Ra5: Abmessungen in rad. Richtung
- \*NBRA,NR1,NR2,NR3,NR4,NR5: Gitteranzahl in rad. Richtung; NBR  
 \* ist die Gitteranzahl, mit der der  
 \* Brennstoffaustritt dargestellt  
 \* wird

drp=60/180\*PI  
 drs=0/180\*PI  
 aradi=0/180\*PI  
 aradbr=30/180\*PI

RBRA=2E-3; Ra1=4E-3; Ra2=Ra1+24E-3; Ra3=Ra2+62E-3  
 Ra4=Ra3+2E-3; Ra5=Ra4+108E-3  
 \*Gesamtradius Rges=0.2m

NBRA=1; NR1=1; NR2=48  
NR3=31; NR4=2; NR5=12

REAL(L1,L2,L3,L4,L5,dz2)  
INTEGER(NL1,NL2,NL3,NL4,NL5)

\* L1,L2,L3,L4,L5:           Laengen der z-Abschnitte  
\* dz2:                       Gitterschrittweiten  
\* NL1,NL2,NL3,NL4,NL5:       Gitteranzahl der jew. z-Abschnitte

$L1=20E-3$ ;  $L2=L1+20E-3$ ;  $L3=L2+230E-3$ ;  $L4=L3+100E-3$ ;  $L5=L4+230E-3$

\*Gesamtlänge 0.6m

NL1=10; NL2=40; NL3=40; NL4=40; NL5=25  
 $dz2=(L2-L1)/NL2$

REAL(RPI,RPA,RSI,RSA)  
INTEGER(NGRPI,NGRPA,NGRSI,NGRSA,NGZS1,NGZS,NGRFL)

\* N: Gitteranzahl  
\* R: Radius  
\* P: Primaerluft  
\* S: Sekundaerluft  
\* BR: Brennstoff  
\* I / A: Innen / Aussen  
\* FL: Flammrohr  
\* G: Gesamt; Gesamtanzahl der Zellen in betr. Richt.

$RPI=9E-3$ ;  $RPA=Ra2$ ;  $RSI=90E-3$ ;  $RSA=91E-3$   
 $NGRPI=12$ ;  $NGRPA=NBRA+NR1+NR2$ ;  $NGRSI=NBRA+NR1+NR2+NR3+NR4-2$   
 $NGRSA=NGRSI+1$

\*Flammrohrhoehe  
 $NGRFL=NBRA+NR1+NR2+NR3-4$

\* Flammrohrlaenge: 300mm  
 $NGZS1=NL1+NL2+NL3$   
 $NGZS=NGZS1+12$

\*\*\*\*\*  
\* Berechnung von Zwischen-/ Eingangsgroessen  
\*\*\*\*\*

REAL(RHOLEIN,RHOP,RHOS,RHOBR,MLEIN,MLEIP,MLEIS,MBREIN)  
REAL(AXIALP,AXIALS,AXIALBR,AUMFBR)  
REAL(XLP,XLS,XBR)  
REAL(UEINP,UEINS,UEINBR,VEINP,VEINS,VEINBR,WEINP,WEINS,WEINBR)  
REAL(KEEINP,EPEINP,KEEINS,EPEINS,KEEINBR,EPEINBR)  
REAL(HWAND,HLEIN,HBREIN)  
REAL(MIXST,MIXEIN,MIXPR,MIXLP,MIXLS,MIXBR,MIXINI)

\* RHOLEIN,RHOP,RHOS,RHOBR: Dichten;(Eintrittsluft, Primaerluft  
 \* Sekundaerluft, Brennstoff)  
 \* MLEIN,MLEIP,MLEIN,MBREIN: Massenstroeme;(Luft, Pri.luft, Sek.luft,  
 \* Brennstoff)  
 \* XLP,XLS,XBR: Massenanteil;(Pr.luft,Sek.luft,Br.stoff)  
 \* AXIALP,AXIALS,AXIALBR: Flaechen in z-Richt.;  
 (Pr.luft, Sek.luft, Brennstoff)  
 \* UEINP,UEINS,UEINBR,  
 \* VEINP,VEINS,VEINBR,  
 \* WEINP,WEIS,WEINBR: Geschwindigkeit  
 \* KEEINP,EPEINP,  
 \* KEEINS,EPEINS,  
 \* KEEINBR,EPEINBR: Turbulenzmodellwerte  
 \* HWAND,HLEIN,HBREIN: spez. Enthalpien(Wand, Luft,  
 \* Brennstoff)  
 \* MIXST,MIXEIN,MIXPR,  
 MIXBR,MIXLP,MIXLS,MIXINI: Luftmischungen MBREIN/MGESEIN

\* Eintretende Massenstroeme  
 MBREIN=PH/HU  
 \*MBREIN=0.002 kg/s  
 MLEIN=MBREIN\*LAMBD\*FLST  
 \*MLEIN=0,0405802 kg/s  
 MLEIP=MLEIN\*LAMBIP/LAMBD  
 \*MLEIP=0,0257925 kg/s  
 MLEIS=MLEIN\*LAMBS/LAMBD  
 \*MLEIS=0,0147877 kg/s  
 XLP=0  
 XLS=0  
 XBR=1

\* Eintrittsdichten: [kg/m<sup>3</sup>]

RHOLEIN=PRESS0\*ML/(RM\*TEIN)  
 \*RHOLEIN=1,164 kg/m<sup>3</sup>  
 RHOP=RHOLEIN  
 RHOS=RHOLEIN  
 RHOBR=PRESS0\*MBR/(RM\*TEIN)  
 \*RHOBR=0,6474kg/m<sup>3</sup>

\* Eintrittsflaechen: [m<sup>2</sup>]

\* a)Luftinlass  
 AXIALP=PI\*(RPA\*\*2-RPI\*\*2)  
 AXIALS=PI\*(RSA\*\*2-RSI\*\*2)  
 \*  
 \* b) Brennstoffeinlass:  
 \*  
 AXIALBR=PI\*((Ra1+1E-3)\*\*2)

```

*78.53981634E-6 m^2

* Eintrittsgeschwindigkeiten: [m/s]
*
* a)Lufteinlass,primär:
WEINP=MLEIP/(RHOP*AXIALP)
*WEINP=10,0327 m/s
UEINP=WEINP*tan(drp)
*
* b)Lufteinlass, sekundär:
WEINS=MLEIS/(AXIALS*RHOS)
UEINS=WEINS*tan(drs)
VEINS=WEINS*tan(aradi)
*
* c)Brennstoffeinlass:
*
WEINBR=MBREIN/(RHOB*AXIALBR)
*WEINBR=39.333937 m/s
VEINBR=WEINBR*tan(aradbr)
UEINBR=0

* Eintrittsturbulenzwerte:
*
* a) Primaerluft
KEEINP=((ETURB*WEINP)**2)/2
EPEINP=0.09*(KEEINP**2)/(ENLREF*10)
* b) Sekundaerluft
KEEINS=((ETURB*WEINS)**2)/2
EPEINS=0.09*(KEEINS**2)/(ENLREF*10)
* c) Brennstoff
KEEINBR=((ETURB*WEINBR)**2)/2
EPEINBR=0.09*(KEEINBR**2)/(ENLREF*10)

*Eintritts-/Wandenthalpien:
*
HWAND=CPPR*TWAND
HBREIN=HU + CPBR*TEIN
HLEIN=CPL*TEIN

*mixture fraktion
* MIX = MBREIN/MGES; MGES = MBREIN+MLEIN (Luftmischung)
*
MIXBR=1
MIXLP=0
MIXLS=0
MIXST=1 / (1 + FLST)
MIXEIN=1 / (1 + LAMBD*FLST)
MIXPR=(1 - (LAMBD - 1)*FLST/(1 + LAMBD*FLST)) / (1+ FLST)
*geändert;
*vorher: MIXPR=(1 - (LAMBD - 1)*LAMBD*FLST/(1 + LAMBD*FLST)) / (1+ FLST)
*MIXPR=4.697E-02

```

```

*
MIXINI=1/(1+FLST)
*(MIXINI=MIXST)

*****
* GROUP 3. x-direction grid specification.

CARTES=F
*
XULAST=0.1
* Winkel des betrachteten Elements; d.h. # der betrachtbaren Ebenen
* ist 0.1/(2*PI)

*****
* GROUP 4. y-direction grid specification.
*
NREGY=6;REGEXT(Y,1)
IREGY=1;GRDPWR(Y,NBRA,RBRA,1)
IREGY=2;GRDPWR(Y,NR1,Ra1-RBRA,1)
IREGY=3;GRDPWR(Y,NR2,Ra2-Ra1,1)
IREGY=4;GRDPWR(Y,NR3,Ra3-Ra2,1)
IREGY=5;GRDPWR(Y,NR4,Ra4-Ra3,1)
IREGY=6;GRDPWR(Y,NR5,Ra5-Ra4,1.2)

*****
* GROUP 5. z-direction grid specification.
*
NREGZ=5;REGEXT(Z,1)
IREGZ=1;GRDPWR(Z,NL1,L1,1)
IREGZ=2;GRDPWR(Z,NL2,L2-L1,1)
IREGZ=3;GRDPWR(Z,NL3,L3-L2,1)
IREGZ=4;GRDPWR(Z,NL4,L4-L3,1)
IREGZ=5;GRDPWR(Z,NL5,L5-L4,1.3)

*****
* GROUP 6. Body-fitting and other grid distortions.

* Duesenstock; (1)
* a von -10 -> 10; a dient zur Verlaengerung des Duesenstocks
INTEGER(a)
a=-10
CONPOR(st0,0,CELL,1,1,1,-(NBRA+NR1+2),1,-(NL1+18+a))
CONPOR(st1,0,CELL,1,1,(NBRA+NR1+3),-(NBRA+NR1+10),1,-(NL1+12+a))
CONPOR(st2,0,CELL,1,1,1,-(NBRA+NR1),-(NL1+19+a),-(NL1+20+a))
*
INTEGER(II,RR)
II=3; RR=8
DO LL=(NL1+a+13),(NL1+a+18)
+CONPOR(st:II:,0,CELL,1,1,(NBRA+NR1+3),-(NBRA+NR1+RR),LL,-(LL+1))
+II=II+1; RR=RR-2; LL=LL+1
ENDDO

```

\* LL=LL+1 und nicht +2, weil 1 schon durch die Schleife  
\* hinzuaddiert wird

\* Wand ueber Duesenstock; (2)  
CONPOR(ld0,0,CELL,1,1,-(NBRA+NR1+NR2+1),-NGRFL,1,-(NL1+4))

\* Prallblech; (3)  
II=1; RR=NBRA+NR1+NR2  
DO LL=(NL1+5),(NL1+20)  
+CONPOR(ld:II:,0,CELL,1,1,-RR,-(RR+1),-LL,-LL)  
+II=II+1; RR=RR-1  
ENDDO

\* Flammrohr; (4)  
CONPOR(FLAMMR,0,CELL,1,1,-(NGRFL),-(NGRFL),-(NL1+31),-(NGZS))

\* Sekundaerluft; (5)  
CONPOR(SEKLUFT,0,CELL,1,1,NGRSI,NGRSA,(NGZS-2),NGZS)

\* Kesselrueckwand; (6)  
CONPOR(WAND,0,CELL,1,1,(NGRFL+1),(NGRFL+8),1,-1)

\* Dichtung; (7)  
CONPOR(DICHTUNG,0,CELL,1,1,-(NGRFL+9),NY,1,(NL1+NL2+12))

\*\*\*\*\*

\* GROUP 7. Variables (including porosities) named, stored & solved.

\*

SOLVE(U1)  
SOLVE(V1)  
SOLVE(W1)  
SOLVE(P1)  
SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,N)  
SOLVE(H1)  
STORE(ENUT,ENUL,TMP1,RHO1)  
NAME(16)=MIXF  
SOLVE(MIXF)

\*Eddy-Break-Up-Modell  
SOLVE(FUEL)  
PATCH(CHSO,PHASEM,1,1,1,NY,1,NZ,1,1)  
COVAL(CHSO,FUEL,GRND9,GRND9)  
STORE(OXID,PROD)

\*\*\*\*\*

\* GROUP 8. Terms (in differential equations) and devices.

\*\*\*\*\*

\* GROUP 9. Properties of the medium (or media).

TURMOD(KEMODL)

```

* Laminare kinematische Viskosität
*
ENUL=GRND2
ENULA=-1.0277318E-05; ENULB=6.6667054E-08; ENULC=6.2470577E-11

* Waermekapazitaeten/Temperaturberechnung
*
TMP1=GRND8
TMP1A=CPBR; TMP1B=CPPR; TMP1C=CPL

* Dichteberechnung
*
RHO1=GRND6
RHO1A=MBR; RHO1B=ML; RHO1C=MPR
PRNDTL(H1)=0.69
PRT(H1)=1

*****
* GROUP 10. Interphase-transfer processes and properties.
*****
* GROUP 11. Initialization of fields of variables, porosities, etc.
*
RESTRT(U1,V1,W1,P1)
RESTRT(EP,KE)
RESTRT(H1,FUEL,MIXF)
RESTRT(all)
REAL(KE0,EP0)
KE0=((0.1*WEINP)**2)
EP0=0.09*(KE0**2)/(ENLREF*WEINP)
FIINIT(KE)=KE0/2
FIINIT(EP)=EP0/2
*
* INIADD vgl. POLIS;(legt Initialisierungsart fest)
INIADD=F
PATCH(INTPROD,INIVAL,1,1,1,NY,1,NZ,1,1)
INIT(INTPROD,MIXF,0.0,MIXPR)

*****
* GROUP 12. Convection and diffusion adjustments

*****
* GROUP 13. Boundary conditions and special sources
*
INLET(EINP,LOW,1,1,NGRPI+1,NGRPA,1,1,1,1)
VALUE(EINP,U1,UEINP)
VALUE(EINP,W1,WEINP)
VALUE(EINP,KE,KEEINP)
VALUE(EINP,EP,EPEINP)
VALUE(EINP,P1,WEINP*RHOP)
VALUE(EINP,H1,HLEIN)

```

VALUE(EINP,MIXF,MIXLP)

VALUE(EINP,FUEL,XLP)

\*

INLET(EINS,LOW,1,1,NGRSI,NGRSA,(NGZS+1),(NGZS+1),1,1)

VALUE(EINS,V1,VEINS)

VALUE(EINS,U1,UEINS)

VALUE(EINS,W1,WEINS)

VALUE(EINS,KE,KEEINS)

VALUE(EINS,EP,EPEINS)

VALUE(EINS,P1,WEINS\*RHOS)

VALUE(EINP,H1,HLEIN)

VALUE(EINP,MIXF,MIXLS)

VALUE(EINP,FUEL,XLS)

\*

INLET(EINBR1,LOW,1,1,1,NBRA+NR1,NL1+21+a,NL1+21+a,1,1)

VALUE(EINBR1,V1,VEINBR)

VALUE(EINBR1,W1,WEINBR)

VALUE(EINBR1,KE,KEEINBR)

VALUE(EINBR1,EP,EPEINBR)

VALUE(EINBR1,P1,WEINBR\*RHOBR)

VALUE(EINBR1,H1,HBREIN)

VALUE(EINBR1,MIXF,MIXBR)

VALUE(EINBR1,FUEL,XBR)

\*

INLET(EINBR2,LOW,1,1,1,NBRA+NR1+1,NBRA+NR1+2,NL1+19+a,NL1+19+a,1,1)

VALUE(EINBR2,V1,VEINBR)

VALUE(EINBR2,W1,WEINBR)

VALUE(EINBR2,KE,KEEINBR)

VALUE(EINBR2,EP,EPEINBR)

VALUE(EINBR2,P1,WEINBR\*RHOBR)

VALUE(EINBR2,H1,HBREIN)

VALUE(EINBR2,MIXF,MIXBR)

VALUE(EINBR2,FUEL,XBR)

\*

OUTLET(AUS,HIGH,1,1,1,NY,NZ,NZ,1,1)

VALUE(AUS,V1,SAME)

VALUE(AUS,U1,SAME)

VALUE(AUS,W1,SAME)

VALUE(AUS,P1,0)

VALUE(AUS,KE,SAME)

VALUE(AUS,EP,SAME)

VALUE(AUS,H1,SAME)

VALUE(AUS,MIXF,SAME)

VALUE(AUS,FUEL,SAME)

\*

\* Randbed. am Außenrohr

\*

PATCH(MANTE,NWALL,1,1,1,NY,NY,1,(NZ-5),1,1)

COVAL(MANTE,U1,GRND2,0.0)

COVAL(MANTE,V1,GRND2,0.0)

COVAL(MANTE,W1,GRND2,0.0)

```

COVAL(MANTE,KE,GRND2,GRND2)
COVAL(MANTE,EP,GRND2,GRND2)
COVAL(MANTE,H1,1/PRNDTL(H1),HWAND)
*
* Randbed. am Flammrohr
*
*unten:
PATCH(FLAMMRU,SWALL,1,1,NGRFL,NGRFL,(NL1+31),NGZS,1,1)
COVAL(FLAMMRU,U1,GRND2,0.0)
COVAL(FLAMMRU,V1,GRND2,0.0)
COVAL(FLAMMRU,W1,GRND2,0.0)
COVAL(FLAMMRU,KE,GRND2,GRND2)
COVAL(FLAMMRU,EP,GRND2,GRND2)
COVAL(FLAMMRU,H1,1/PRNDTL(H1),HWAND)
*
*oben:
PATCH(FLAMMRO,SWALL,1,1,NGRFL,NGRFL,(NL1+31),NGZS,1,1)
COVAL(FLAMMRO,U1,GRND2,0.0)
COVAL(FLAMMRO,V1,GRND2,0.0)
COVAL(FLAMMRO,W1,GRND2,0.0)
COVAL(FLAMMRO,KE,GRND2,GRND2)
COVAL(FLAMMRO,EP,GRND2,GRND2)
COVAL(FLAMMRO,H1,1/PRNDTL(H1),HWAND)
*
* Randbed. an Kesselvorderwand; (9)
*
PATCH(VORWAND,HIGH,1,1,1,NY,NZ,NZ,1,1)
COVAL(VORWAND,U1,GRND2,0.0)
COVAL(VORWAND,V1,GRND2,0.0)
COVAL(VORWAND,W1,GRND2,0.0)
COVAL(VORWAND,KE,GRND2,GRND2)
COVAL(VORWAND,EP,GRND2,GRND2)
COVAL(VORWAND,H1,1/PRNDTL(H1),HWAND); funktioniert nicht!

*****
* GROUP 14. Downstream pressure (for free parabolic flow).

*****
* GROUP 15. Termination criteria for sweeps and
* outer iterations.

LSWEEP=1500
LSWEEP=3000
*für Testlauf:
LSWEEP=100

*****
* GROUP 16. Termination criteria for inner iterations.

*****
* GROUP 17. Under-relaxation and related devices.

```

```

*
REAL(MAXV,MINL,RELX1,RELX2,RELX3,RELX4)

* MAXV,MINL:           Konstanten zur Relaxierung
* RELX1,RELX2,RELX3,RELX4:       Relaxationskonstanten

```

```

MAXV=WEINP
MINL=1E-3

```

```

* Level of relaxation (100 - weak, 0.1 - strong)
*

```

```

RELX1=0.7
RELX2=0.7
RELX3=0.7
RELX4=0.7
RELAX(P1,LINRLX,0.1)
RELAX(V1,FALSDT,MINL/MAXV*RELX1)
RELAX(U1,FALSDT,MINL/MAXV*RELX1)
RELAX(W1,FALSDT,MINL/MAXV*RELX1)
RELAX(KE,FALSDT,MINL/MAXV*RELX2)
RELAX(EP,FALSDT,MINL/MAXV*RELX2)
RELAX(H1,FALSDT,MINL/MAXV*RELX3)
RELAX(MIXF,FALSDT,MINL/MAXV*RELX4)
RELAX(FUEL,FALSDT,MINL/MAXV*RELX4)

```

```

*****

```

```

* GROUP 18. Limits on variables values or increments to them.

```

```

VARMIN(P1)=-1E3; VARMAX(P1)=1E3
*max./min. Druckwerte in isothermen Fall:
*P1min=-384 Pa;P1max=460 Pa
*(Alf)
VARMAX(H1)=(CPBR*3500+HU)*1.2
*VARMAX(H1)=6.9353400E7
VARMIN(W1)=-50; VARMAX(W1)=120
VARMIN(V1)=-100; VARMAX(V1)=50
VARMIN(TMP1)=298
VARMIN(RHO1)=0.05; VARMAX(RHO1)=1.4
VARMIN(MIXF)=0; VARMAX(MIXF)=1
VARMIN(FUEL)=0; VARMAX(FUEL)=1
  VARMAX(KE)=600; VARMAX(EP)=9.0E+5
VARMIN(ENUL)=1E-5; VARMAX(ENUL)=6E-4

```

```

*****

```

```

* GROUP 19. Data communicated by SATELLITE to GROUND

```

```

CHSOA=MIXST
CHSOB=CEBU
*
TMP2A=MIXST
TMP2B=HU

```

```

*****
* GROUP 20. Control of preliminary printout

*****
* GROUP 21. Frequency and extent of field printout.

OUTPUT(TMP1,Y,N,N,Y,Y,Y)
OUTPUT(PROD,Y,N,N,N,N,N)
OUTPUT(P1,Y,N,N,N,Y,Y)

*****
* GROUP 22. Location of spot-value & frequency of residual printout.

TSTSWP=-1
IYMON=30
IZMON=80

*****
* GROUP 23. Variable-by-variable field printout and plot
*           and/or tabulation of spot-values and residuals.
ITABL=2
NPLT=1
IPROF=2

*****
* GROUP 24. Preparation for continuation runs.

NSAVE=phi0
*
STOP

```

## V.2 - *q1-file* für dreidimensionale, isotherme Rechnung

```

* job1.bfc
*
TALK=F;RUN(1, 1);VDU=X11-Term
*****
* GROUP 1. Run identifiers and other preliminaries.
*
TEXT(100 kW, job1.bfc, std, isoth,)
*
* Primärlufteintrittsaußendurchmesser = 90E-3m
* LSWEEP=400; Test: LSWEEP=7
* Relaxierung Druck 0.1
* Relaxierung Sonstige 0.0008
* wmax =120 m/s
* -2000 < p < 2000
* w2 =0,3*w2alt

```

```

* Leistung =100 kW

* Elliptic Simulation
PARAB=F
*
*****
* GROUP 2. Time-dependence and related parameters.
*
STEADY=T
*
*****
* Variablen
*****

REAL(PI,RM,ML,MBR,MPR,HU,CPL,CPBR,CPBR,PH,FLST,LAMBD,LAMBP,LAMBS)
REAL(TEIN,TWAND,CEBU,ENLREF,ETURB)

* PRESSO :      Referenzdruck in N/m2
* RM :          allg. Gaskonstante in J/(kmol K)
* ENLREF :      kinematische Referenzviskosit et in m2/s
* ML, MBR, MPR : Molmasse in kg/kmol
* TGEIN, TWAND : Temperaturen in K (Eintrittstroeme, Wand)
* PH :          Brennerleistung in W
* HU :          Heizwert in J/kgBr
* CEBU:         Konstante fuer Eddy-Break-up-Modell;(Verbrennungsmodell)
* FLST :        stoech. Luftfaktor (massenbezogen) = 2/0.21*ML/MBR
* ENLREF :      kinematische Referenzviskosit et in m2/s
* ETURB :       Eintrittsturbulenzgrad
* CPL,CPBR,CPBR: Spez. Waermekapazitaeten;(luft, Brennstoff, Produkte)

PRESSO=1.0000E+05
RM=8314
PI=3.1415927
TEIN=273+25
TWAND=273+100
PH=100000
LAMBD=1.18
LAMBP=0.65
LAMBS=LAMBD-LAMBP

* berechnet fuer Methan
ML=28.85
MBR=16.04
MPR=((2/0.21)*LAMBD*ML)+MBR) / (1+2*LAMBD*(0.79/0.21+1))
CPL=1007
CPBR=2227
CPBR=1200
*
* Verwendung von  l
HU=42.3E6
FLST=14.5

```

```

*
ENLREF=1.513E-05
ETURB=0.1

*****
* Geometrie
*****
*
* Umfangsrichtung:
*
INTEGER(NUges)

* Kuchenstückwinkel: 30°
*
NUges=12

* NUges                ges. Gitterelemntanzahl in Umfangsrichtung

* radiale Richtung:
*
REAL(Ra1,Ra2,Ra3,Ra4,Ra5,Ra6,Ra7,Ra8,Ra9)
INTEGER(NR1,NR2,NR3,NR4,NR5,NR6,NR7,NR8,NR9,NRges)
REAL(drp,drs,aradi,aradbr,winkel)
REAL(sigma1,sigma2,sigma3,sigma4,sigma5)
REAL(susi1,susi2,susi3,susi4,susi5,susi6)
REAL(susi7,susi8,susi9,susi10,susi11,susi12)

* Ra(i):                Abmessungen in rad. Richtung
* drp,drs,aradi,aradbr: Winkel;(rad.Pr.luft, rad.Sek.luft,
*                        ax.Sek.luft, ax.Brennstoff)
* sigma(i)              Drehwinkel für Gittergenerierung
* susi(i)               Summe Sigma f@r die Drehwinkel
* NR(i):               Gitteranzahl in rad. Richtung; NBR
*                       ist die Gitteranzahl, mit der der
*                       Brennstoffaustritt dargestellt
*                       wird
* NYges:               ges. Gitteranzahl radial

drp=60/180*PI
drs=0/180*PI
aradi=0/180*PI
aradbr=30/180*PI
winkel=PI/6
sigma1=1.25/180*PI
sigma2=2/180*PI
sigma3=3/180*PI
sigma4=3.5/180*PI
sigma5=(15-2.5-2-3-3.5)/180*PI
*sigma5=4/180*PI

```

susi1=sigma1  
 susi2=2\*sigma1  
 susi3=susi2+sigma2  
 susi4=susi3+sigma3  
 susi5=susi4+sigma4  
 susi6=susi5+sigma5  
 susi7=susi6+sigma5  
 susi8=susi7+sigma4  
 susi9=susi8+sigma3  
 susi10=susi9+sigma2  
 susi11=susi10+sigma1  
 susi12=susi11+sigma1

Ra1=4.5E-3; Ra2=Ra1+16.5E-3; Ra3=Ra2+24E-3  
 Ra4=Ra3+3E-3; Ra5=Ra4+34E-3; Ra6=Ra5+6E-3  
 Ra7=Ra6+8E-3; Ra8=Ra7+6E-3; Ra9=Ra8+98E-3  
 \*Gesamtradius Rges=0.2m

NR1=3; NR2=11; NR3=16; NR4=2; NR5=17  
 NR6=3; NR7=4; NR8=3; NR9=11; NRges=70  
 \*Gesamtanzahl radial NY=70

\*axiale Richtung:

\*

REAL(L1,L1b,L2,L2b,L3,L3b,L3c,L4,L4b,L4c)  
 REAL(L5,L6,L7,L8)  
 INTEGER(NL1,NL2,NL3,NL4,NL5,NL6,NL7,NL8,NLges)

\* L(i):                   Laengen der z-Abschnitte  
 \* NL(i):                 Gitteranzahl der jew. z-Abschnitte  
 \* NZges                 ges. Gitteranzahl axial

L1=1E-3; L2=L1+1E-3; L3=L2+18E-3; L4=L3+2E-3; L5=L4+60E-3  
 L6=L5+188E-3; L7=L6+100E-3; L8=L7+230E-3  
 L1b=L1+16E-3; L2b=L2+16E-3  
 L3b=L3+24E-3; L3c=L3+40E-3  
 L4b=L4+24E-3; L4c=L4+40E-3

\*Gesamtlänge 0.6m

NL1=1; NL2=1; NL3=18; NL4=1; NL5=20  
 NL6=20; NL7=30; NL8=25; NLges=116  
 \*Gesamtanzahl axial NZ=116

\* N:   Gitteranzahl  
 \* R:   Radius (y)  
 \* L:   Länge (z)  
 \* P:   Primaerluft  
 \* S:   Sekundaerluft  
 \* BR:  Brennstoff  
 \* i/a:  Innen / Aussen

\* ..ein: einströmende Größe

\*\*\*\*\*

\* Berechnung von Zwischen-/ Eingangsgroessen

\*\*\*\*\*

REAL(RHOLEin,RHOLP,RHOLS,RHOBR,MLEin,MLPein,MLSein,MBRein)

REAL(AXIALP,AXIALS,AXIALBR)

REAL(CLPein,CLSein)

REAL(ULPein,ULSein,UBRein,VLPein,VLSein,VBRein,WLPein,WLSein,WBRein)

REAL(KELPein,EPLPein,KELSein,EPLSein,KEBRein,EPBRein)

\* RHOLEin,RHOLP,RHOLS,RHOBR: Dichten;(Eintrittsluft, Primaerluft  
\* Sekundaerluft, Brennstoff)

\* MLein,MLPein,MBRein: Massenstroeme;(Luft, Pri.luft, Sek.luft,  
\* Brennstoff)

\* XLP,XLS,XBR: Massenanteil;(Pr.luft,Sek.luft,Br.stoff)

\* AXIALP,AXIALS,AXIALBR: Flaechen in z-Richt.;  
(Pr.luft, Sek.luft, Brennstoff)

\* ULPein,ULSein,UBRein,

\* VLPein,VLSein,VBRein,

\* WLPein,WLSein,WBRein: Geschwindigkeit

\* KELPein,EPLPein,

\* KELSein,EPLSein,

\* KEBRein,EPBRein: Turbulenzmodellwerte

\* Eintretende Massenstroeme

MBRein=PH/HU

\*MBRein=0.002 kg/s

MLein=MBREIN\*LAMBD\*FLST

\*MLein=0,0405802 kg/s

MLPein=MLEIN\*LAMBPP/LAMBD

\*MLPein=0,0257925 kg/s

MLSein=MLein\*LAMBS/LAMBD

\*MLSein=0,0147877 kg/s

CLPein=1

CLSein=0

\* Eintrittsdichten: [kg/m<sup>3</sup>]

RHOLEin=PRESS0\*ML/(RM\*TEIN)

\*RHOLEin=1,164 kg/m<sup>3</sup>

RHOLP=RHOLEin

RHOLS=RHOLEin

RHOBR=PRESS0\*MBR/(RM\*TEIN)

\*RHOBR=0,6474kg/m<sup>3</sup>

\* Eintrittsflaechen: [m<sup>2</sup>]

\*

\*

REAL(RiLP,RaLP,RLS)



GSET(P,E0,0,Ra4,0)  
GSET(P,F0,0,Ra5,0)  
GSET(P,G0,0,Ra6,0)  
GSET(P,H0,0,Ra7,0)  
GSET(P,I0,0,Ra8,0)  
GSET(P,J0,0,Ra9,0)

GSET(P,A1,0,0,L1b)  
GSET(P,B1,0,Ra1,L1b)  
GSET(P,C1,0,Ra2,L1)  
GSET(P,D1,0,Ra3,L1)  
GSET(P,E1,0,Ra4,L1)  
GSET(P,F1,0,Ra5,L1)  
GSET(P,G1,0,Ra6,L1)  
GSET(P,H1,0,Ra7,L1)  
GSET(P,I1,0,Ra8,L1)  
GSET(P,J1,0,Ra9,L1)

GSET(P,A2,0,0,L2b)  
GSET(P,B2,0,Ra1,L2b)  
GSET(P,C2,0,Ra2,L2)  
GSET(P,D2,0,Ra3,L2)  
GSET(P,E2,0,Ra4,L2)  
GSET(P,F2,0,Ra5,L2)  
GSET(P,G2,0,Ra6,L2)  
GSET(P,H2,0,Ra7,L2)  
GSET(P,I2,0,Ra8,L2)  
GSET(P,J2,0,Ra9,L2)

GSET(P,A3,0,0,L3c)  
GSET(P,B3,0,Ra1,L3c)  
GSET(P,C3,0,Ra2,L3b)  
GSET(P,D3,0,Ra3,L3)  
GSET(P,E3,0,Ra4,L3)  
GSET(P,F3,0,Ra5,L3)  
GSET(P,G3,0,Ra6,L3)  
GSET(P,H3,0,Ra7,L3)  
GSET(P,I3,0,Ra8,L3)  
GSET(P,J3,0,Ra9,L3)

GSET(P,A4,0,0,L4c)  
GSET(P,B4,0,Ra1,L4c)  
GSET(P,C4,0,Ra2,L4b)  
GSET(P,D4,0,Ra3,L4)  
GSET(P,E4,0,Ra4,L4)  
GSET(P,F4,0,Ra5,L4)  
GSET(P,G4,0,Ra6,L4)  
GSET(P,H4,0,Ra7,L4)  
GSET(P,I4,0,Ra8,L4)  
GSET(P,J4,0,Ra9,L4)

GSET(P,A5,0,0,L5)  
GSET(P,B5,0,Ra1,L5)  
GSET(P,C5,0,Ra2,L5)  
GSET(P,D5,0,Ra3,L5)  
GSET(P,E5,0,Ra4,L5)  
GSET(P,F5,0,Ra5,L5)  
GSET(P,G5,0,Ra6,L5)  
GSET(P,H5,0,Ra7,L5)  
GSET(P,I5,0,Ra8,L5)  
GSET(P,J5,0,Ra9,L5)

GSET(P,A6,0,0,L6)  
GSET(P,B6,0,Ra1,L6)  
GSET(P,C6,0,Ra2,L6)  
GSET(P,D6,0,Ra3,L6)  
GSET(P,E6,0,Ra4,L6)  
GSET(P,F6,0,Ra5,L6)  
GSET(P,G6,0,Ra6,L6)  
GSET(P,H6,0,Ra7,L6)  
GSET(P,I6,0,Ra8,L6)  
GSET(P,J6,0,Ra9,L6)

GSET(P,A7,0,0,L7)  
GSET(P,B7,0,Ra1,L7)  
GSET(P,C7,0,Ra2,L7)  
GSET(P,D7,0,Ra3,L7)  
GSET(P,E7,0,Ra4,L7)  
GSET(P,F7,0,Ra5,L7)  
GSET(P,G7,0,Ra6,L7)  
GSET(P,H7,0,Ra7,L7)  
GSET(P,I7,0,Ra8,L7)  
GSET(P,J7,0,Ra9,L7)

GSET(P,A8,0,0,L8)  
GSET(P,B8,0,Ra1,L8)  
GSET(P,C8,0,Ra2,L8)  
GSET(P,D8,0,Ra3,L8)  
GSET(P,E8,0,Ra4,L8)  
GSET(P,F8,0,Ra5,L8)  
GSET(P,G8,0,Ra6,L8)  
GSET(P,H8,0,Ra7,L8)  
GSET(P,I8,0,Ra8,L8)  
GSET(P,J8,0,Ra9,L8)

\*Punktverbindungen

\*

+DO JJ=(0),(8)  
+GSET(L,LAB:JJ:,A:JJ:,B:JJ:,NR1,1)  
+GSET(L,LBC:JJ:,B:JJ:,C:JJ:,NR2,1)  
+GSET(L,LCD:JJ:,C:JJ:,D:JJ:,NR3,1)  
+GSET(L,LDE:JJ:,D:JJ:,E:JJ:,NR4,1)

```

+GSET(L,LEF:JJ:,E:JJ:,F:JJ:,NR5,1)
+GSET(L,LFG:JJ:,F:JJ:,G:JJ:,NR6,1)
+GSET(L,LGH:JJ:,G:JJ:,H:JJ:,NR7,1)
+GSET(L,LHI:JJ:,H:JJ:,I:JJ:,NR8,1)
+GSET(L,LIJ:JJ:,I:JJ:,J:JJ:,NR9,1.2)
+ENDDO
*
*Power-Law im obersten Abschnitt; 1.2

+DO JJ=(0),(6)
GSET(L,LA:JJ::(JJ+1):,A:JJ:,A:(JJ+1):,NL:(JJ+1):,1)
+ENDDO
GSET(L,LA78,A7,A8,NL8,1.3)
*
*Power-Law im letzten Abschnitt; 1.3

+DO JJ=(0),(6)
GSET(L,LB:JJ::(JJ+1):,B:JJ:,B:(JJ+1):,NL:(JJ+1):,1)
+ENDDO
GSET(L,LB78,B7,B8,NL8,1.3)

+DO JJ=(0),(6)
GSET(L,LC:JJ::(JJ+1):,C:JJ:,C:(JJ+1):,NL:(JJ+1):,1)
+ENDDO
GSET(L,LC78,C7,C8,NL8,1.3)

+DO JJ=(0),(6)
GSET(L,LD:JJ::(JJ+1):,D:JJ:,D:(JJ+1):,NL:(JJ+1):,1)
+ENDDO
GSET(L,LD78,D7,D8,NL8,1.3)

+DO JJ=(0),(6)
GSET(L,LE:JJ::(JJ+1):,E:JJ:,E:(JJ+1):,NL:(JJ+1):,1)
+ENDDO
GSET(L,LE78,E7,E8,NL8,1.3)

+DO JJ=(0),(6)
GSET(L,LF:JJ::(JJ+1):,F:JJ:,F:(JJ+1):,NL:(JJ+1):,1)
+ENDDO
GSET(L,LF78,F7,F8,NL8,1.3)

+DO JJ=(0),(6)
GSET(L,LG:JJ::(JJ+1):,G:JJ:,G:(JJ+1):,NL:(JJ+1):,1)
+ENDDO
GSET(L,LG78,G7,G8,NL8,1.3)

+DO JJ=(0),(6)
GSET(L,LH:JJ::(JJ+1):,H:JJ:,H:(JJ+1):,NL:(JJ+1):,1)
+ENDDO
GSET(L,LH78,H7,H8,NL8,1.3)

```

```
+DO JJ=(0),(6)
GSET(L,LJ:JJ:,(JJ+1):,I:JJ:,I:(JJ+1):,NL:(JJ+1):,1)
+ENDDO
GSET(L,LJ78,I7,I8,NL8,1.3)
```

```
+DO JJ=(0),(6)
GSET(L,LJ:JJ:,(JJ+1):,J:JJ:,J:(JJ+1):,NL:(JJ+1):,1)
+ENDDO
GSET(L,LJ78,J7,J8,NL8,1.3)
```

```
*FRAME-Def.
*
GSET(F,FA,A0,-,B0,B1.B2.B3.B4.B5.B6.B7,B8,-,A8,A7.A6.A5.A4.A3.A2.A1)
*FA=FAB
*
GSET(F,FB,B0,-,C0,C1.C2.C3.C4.C5.C6.C7,C8,-,B8,B7.B6.B5.B4.B3.B2.B1)
*FB=FBC
*
GSET(F,FC,C0,-,D0,D1.D2.D3.D4.D5.D6.D7,D8,-,C8,C7.C6.C5.C4.C3.C2.C1)
*FC=FCD
*
GSET(F,FD,D0,-,E0,E1.E2.E3.E4.E5.E6.E7,E8,-,D8,D7.D6.D5.D4.D3.D2.D1)
*FD=FDE
*
GSET(F,FE,E0,-,F0,F1.F2.F3.F4.F5.F6.F7,F8,-,E8,E7.E6.E5.E4.E3.E2.E1)
*FE=FEF
*
GSET(F,FF,F0,-,G0,G1.G2.G3.G4.G5.G6.G7,G8,-,F8,F7.F6.F5.F4.F3.F2.F1)
*FF=FFG
*
GSET(F,FG,G0,-,H0,H1.H2.H3.H4.H5.H6.H7,H8,-,G8,G7.G6.G5.G4.G3.G2.G1)
*FG=FGH
*
GSET(F,FH,H0,-,I0,I1.I2.I3.I4.I5.I6.I7,I8,-,H8,H7.H6.H5.H4.H3.H2.H1)
*FH=FHI
*
GSET(F,FI,I0,-,J0,J1.J2.J3.J4.J5.J6.J7,J8,-,I8,I7.I6.I5.I4.I3.I2.I1)
*FI=FIJ
```

```
GSET(D,NUges,NRges,NLges,winkel,Ra9,L8)
```

```
GSET(M,FA,+J+K,1,1,1,TRANS)
GSET(M,FB,+J+K,1,NR1+1,1,TRANS)
GSET(M,FC,+J+K,1,NR1+NR2+1,1,TRANS)
GSET(M,FD,+J+K,1,NR1+NR2+NR3+1,1,TRANS)
GSET(M,FE,+J+K,1,NR1+NR2+NR3+NR4+1,1,TRANS)
GSET(M,FF,+J+K,1,NR1+NR2+NR3+NR4+NR5+1,1,TRANS)
GSET(M,FG,+J+K,1,NR1+NR2+NR3+NR4+NR5+NR6+1,1,TRANS)
GSET(M,FH,+J+K,1,NR1+NR2+NR3+NR4+NR5+NR6+NR7+1,1,TRANS)
GSET(M,FI,+J+K,1,NR1+NR2+NR3+NR4+NR5+NR6+NR7+NR8+1,1,TRANS)
```

\*Drehung des Gitters I1 in Umfangsrichtung (kopieren)

\*

GSET(C,I2,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi1,0,0)  
 GSET(C,I3,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi2,0,0)  
 GSET(C,I4,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi3,0,0)  
 GSET(C,I5,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi4,0,0)  
 GSET(C,I6,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi5,0,0)  
 GSET(C,I7,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi6,0,0)  
 GSET(C,I8,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi7,0,0)  
 GSET(C,I9,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi8,0,0)  
 GSET(C,I10,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi9,0,0)  
 GSET(C,I11,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi10,0,0)  
 GSET(C,I12,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi11,0,0)  
 GSET(C,I13,F,I1,1,NY,1,NZ,RZ,susi12,0,0)

\* Körperkonturen:

\*

\* Düsenstock; (1)

\*

INTEGER(NRduese)

NRduese=3\*3

\*

CONPOR(duese,0,CELL,1,NX,1,6,1,2+NRduese)

\*

\* Einlaufkörper; (2)

\*

CONPOR(elkoerp,0,CELL,1,NX,7,NR1+NR2,1,1)

\*

\* obere Brennerwand; (3)

\*

INTEGER(NRobwd)

NRobwd=NR1+NR2+NR3

\*

CONPOR(obrennwd,0,CELL,1,NX,NRobwd+1,NRobwd+NR4+NR5,1,20+NL4)

\*

\* Luftdüse; (4)

\*

\*Luftdüsendurchmesser=NRluftd\*1.5mm

\*

INTEGER(NRluftd,NLluftd)

NRluftd=10

NLluftd=NL1+NL2+NL3+NL4

\*

CONPOR(luftd,0,CELL,1,NX,NRluftd+1,NRobwd,NLluftd,NLluftd)

\*

\* Wandvorsatz; (5)

\*

\* Wandvorsatzinnendurchmesser ca. = 120mm

\*

INTEGER(NRwdvor,NLwdvor)

NRwdvor=NRobwd+NR4+NR5+NR6+NR7+NR8+3

NLwdvor=NLluftd+10

\*

CONPOR(wdvor,0,CELL,1,NX,NRwdvor,NY,1,NLwdvor)

\*

\* Flammenrohr; (6)

\*

INTEGER(NRflammr,NLafLammr,NLeflammr)

NRflammr=NRobwd+NR4+NR5

NLaflammr=NLluftd+7; NLeflammr=NLaflammr+15+20+15

\*

CONPOR(flammr,0,CELL,1,NX,NRflammr,NRflammr,NLaflammr,NLeflammr)

\*

\* Rezirkulation; (7)

\*

\* Rezirkulationsöffnung=12\*28mm\*12mm=4032mm<sup>2</sup> (12mm aus Bogenmaß

\* bei Radius 80mm)

\*

CONPOR(rezfl,0,CELL,4,9,NRflammr,NRflammr,NLluftd+1,NLaflammr-1)

\*

\* Luftröhrchen; (8)

\*

INTEGER(NRarohr,NRerohr,NLerohr)

NRarohr=NRflammr+NR6+1

NRerohr=NRflammr+NR6+NR7

NLerohr=NLeflammr

\*

CONPOR(rohr1a,0,CELL,1,1,NRarohr,NRerohr,1,NLerohr)

CONPOR(rohr1b,0,CELL,2,2,NRarohr+1,NRerohr-1,1,NLerohr)

CONPOR(rohr2a,0,CELL,11,11,NRarohr+1,NRerohr-1,1,NLerohr)

CONPOR(rohr2b,0,CELL,12,12,NRarohr,NRerohr,1,NLerohr)

\*\*\*\*\*

\* GROUP 7. Variables (including porosities) named, stored & solved.

\*

SOLVE(U1)

SOLVE(V1)

SOLVE(W1)

SOLVE(P1)

SOLVE(C1)

\* C1 berechnet die Konzentration der Primaerluft im Stroe.feld

SOLUTN(P1,Y,Y,Y,N,N,N)

STORE(ENUT)

STORE(ENUL)

\*\*\*\*\*

\* GROUP 8. Terms (in differential equations) and devices.

\*\*\*\*\*

\* GROUP 9. Properties of the medium (or media).

TURMOD(KEMODL)

```

* Laminare kinematische Viskosität
ENUL=ENLREF
ENULA=-1.0277318E-05; ENULB=6.6667054E-08; ENULC=6.2470577E-11
* Waermekapazitaeten/Temperaturberechnung
*
TMP1=TEIN
* Dichteberechnung
*
RHO1=RHOLEIN

*****
* GROUP 10. Interphase-transfer processes and properties.
*****
* GROUP 11. Initialization of fields of variables, porosities, etc.
*
RESTRT(U1,V1,W1,P1)
RESTRT(EP,KE)
RESTRT(all)
REAL(KE0,EP0)
KE0=((0.1*WLPein)**2)
EP0=0.09*(KE0**2)/(ENLREF*WLPein)
FIINIT(KE)=KE0/2
FIINIT(EP)=EP0/2

*****
* GROUP 12. Convection and diffusion adjustments

*****
* GROUP 13. Boundary conditions and special sources
*
* Einlaß Primärluft
*
INTEGER(NRalp,NRelp)
NRalp=NR1+NR2+1
NRelp=NRalp+NR3-1
*
INLET(einlp,LOW,1,NX,NRalp,NRelp,1,1,1,1)
VALUE(einlp,U1,ULPein)
VALUE(einlp,W1,WLPein)
VALUE(einlp,KE,KELPein)
VALUE(einlp,EP,EPLPein)
VALUE(einlp,P1,WLPein*RHOLP)
VALUE(einlp,C1,CLPein)
*
* Einlaß Sekundärluft
*
INTEGER(NRals,NRels,NLels)
NRals=NRarohr
NRels=NRerohr
NLels=NLerohr

```

\*

```
INLET(einls1a,LOW,1,1,NRals,NRels,NLels+1,NLels+1,1,1)
VALUE(einls1a,U1,ULSein)
VALUE(einls1a,V1,VLSein)
VALUE(einls1a,W1,WLSein)
VALUE(einls1a,KE,KELSein)
VALUE(einls1a,EP,EPLSein)
VALUE(einls1a,P1,WLSein*RHOLS)
VALUE(einls1a,C1,CLSein)
```

\*

```
INLET(einls1b,LOW,2,2,NRals+1,NRels-1,NLels+1,NLels+1,1,1)
VALUE(einls1b,U1,ULSein)
VALUE(einls1b,V1,VLSein)
VALUE(einls1b,W1,WLSein)
VALUE(einls1b,KE,KELSein)
VALUE(einls1b,EP,EPLSein)
VALUE(einls1b,P1,WLSein*RHOLS)
VALUE(einls1b,C1,CLSein)
```

\*

```
INLET(einls2a,LOW,11,11,NRals+1,NRels-1,NLels+1,NLels+1,1,1)
VALUE(einls2a,U1,ULSein)
VALUE(einls2a,V1,VLSein)
VALUE(einls2a,W1,WLSein)
VALUE(einls2a,KE,KELSein)
VALUE(einls2a,EP,EPLSein)
VALUE(einls2a,P1,WLSein*RHOLS)
VALUE(einls2a,C1,CLSein)
```

\*

```
INLET(einls2b,LOW,12,12,NRals,NRels,NLels+1,NLels+1,1,1)
VALUE(einls2b,U1,ULSein)
VALUE(einls2b,V1,VLSein)
VALUE(einls2b,W1,WLSein)
VALUE(einls2b,KE,KELSein)
VALUE(einls2b,EP,EPLSein)
VALUE(einls2b,P1,WLSein*RHOLS)
VALUE(einls2b,C1,CLSein)
```

\*

\* Auslaß

\*

```
OUTLET(aus,HIGH,1,NX,1,NY,NZ,NZ,1,1)
VALUE(aus,V1,SAME)
VALUE(aus,U1,SAME)
VALUE(aus,W1,SAME)
VALUE(aus,P1,0)
VALUE(aus,KE,SAME)
VALUE(aus,EP,SAME)
VALUE(aus,C1,SAME)
```

\*

\* Randbed. am Außenrohr

\*

```
PATCH(aussr,NWALL,1,NX,NY,NY,1,NZ,1,1)
```

```

COVAL(aussr,U1,GRND2,0.0)
COVAL(aussr,V1,GRND2,0.0)
COVAL(aussr,W1,GRND2,0.0)
COVAL(aussr,KE,GRND2,GRND2)
COVAL(aussr,EP,GRND2,GRND2)
*
*  Randbed. am Flammrohr
*
*unten:
PATCH(uflammr,SWALL,4,9,NRflammr,NRflammr,NLaflammr,NLeflammr,1,1)
COVAL(uflammr,U1,GRND2,0.0)
COVAL(uflammr,V1,GRND2,0.0)
COVAL(uflammr,W1,GRND2,0.0)
COVAL(uflammr,KE,GRND2,GRND2)
COVAL(uflammr,EP,GRND2,GRND2)
*
*oben:
PATCH(oflammr,SWALL,4,9,NRflammr,NRflammr,NLaflammr,NLeflammr,1,1)
COVAL(oflammr,U1,GRND2,0.0)
COVAL(oflammr,V1,GRND2,0.0)
COVAL(oflammr,W1,GRND2,0.0)
COVAL(oflammr,KE,GRND2,GRND2)
COVAL(oflammr,EP,GRND2,GRND2)

*****
*  GROUP 14. Downstream pressure (for free parabolic flow).
*****

*  GROUP 15. Termination criteria for sweeps and
*            outer iterations.
*
IDISPA=100
IDISPB=100
CSG1=SW
CSG2=B
*
LSWEEP=400
* für Test:
LSWEEP=20

*****
*  GROUP 16. Termination criteria for inner iterations.

*****
*  GROUP 17. Under-relaxation and related devices.
*
REAL(MAXV,MINL,RELX1,RELX2,RELX3,RELX4)

* MAXV,MINL:                Konstanten zur Relaxierung
* RELX1,RELX2,RELX3,RELX4:  Relaxationskonstanten

```

MAXV=WLPein  
MINL=1E-3

\* Level of relaxation (100 - weak, 0.1 - strong)  
\*

RELX1=0.0008  
RELX2=0.0008  
RELX3=0.0008  
RELX4=0.1  
RELAX(P1,LINRLX,0.1)  
RELAX(V1,FALSDT,MINL/MAXV\*RELX1)  
RELAX(U1,FALSDT,MINL/MAXV\*RELX1)  
RELAX(W1,FALSDT,MINL/MAXV\*RELX3)  
RELAX(KE,FALSDT,MINL/MAXV\*RELX2)  
RELAX(EP,FALSDT,MINL/MAXV\*RELX2)  
RELAX(C1,FALSDT,MINL/MAXV\*RELX4)

\*\*\*\*\*

\* GROUP 18. Limits on variables values or increments to them.

VARMIN(P1)=-2E3; VARMAX(P1)=2E3  
\*max./min. Druckwerte in isothermen Fall:  
\*P1min=-384 Pa;P1max=460 Pa  
\*(Alf)  
VARMIN(U1)=-100; VARMAX(U1)=100  
VARMIN(V1)=-100; VARMAX(V1)=100  
VARMIN(W1)=-50; VARMAX(W1)=120  
VARMAX(KE)=5000  
VARMAX(EP)=1E+6  
VARMIN(C1)=0; VARMAX(C1)=1

\*\*\*\*\*

\* GROUP 19. Data communicated by SATELLITE to GROUND

\*

\*\*\*\*\*

\* GROUP 20. Control of preliminary printout

\*\*\*\*\*

\* GROUP 21. Frequency and extent of field printout.

OUTPUT(P1,Y,N,N,N,Y,Y)

\*\*\*\*\*

\* GROUP 22. Location of spot-value & frequency of residual printout.

TSTSWP=-1  
IXMON=1  
IYMON=22  
IZMON=50

```
*****
* GROUP 23. Variable-by-variable field printout and plot
*   and/or tabulation of spot-values and residuals.
ITABL=2
NPLT=1
IPROF=2

*****
* GROUP 24. Preparation for continuation runs.

NSAVE=phi0
*
STOP
```