



Doctoral Thesis

Numerical investigation of turbulent nonpremixed methane-air flames

Author(s):

Demiraydin, Lale

Publication Date:

2002

Permanent Link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-004518143> →

Rights / License:

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH Nr. 14947

Numerical investigation of turbulent nonpremixed methane-air flames

A dissertation submitted to the
EIDGENÖSSISCHE TECHNISCHE HOCHSCHULE ZÜRICH
for the degree of
Doctor of Technical Sciences

Presented by
LALE DEMIRAYDIN
Diplom Ingenieur (Masch.)
Technical University of Istanbul
born June 28th, 1974
Citizen of Turkey

Accepted on the recommendation of
Prof. Dr. D. Poulidakos, examiner
Prof. Dr. K. Boulouchos, co-examiner
Dr. J. Gass, co-examiner

Zurich, 2002

Abstract

Turbulent combustion is an important phenomenon in industrial applications, such as gas turbines, diesel engines, low NO_x burners, spark-ignition engines and furnaces. Improvements are often necessary, since the applications have to be effective, economical and clean. Therefore, a better understanding of the turbulent combustion is needed. Numerical simulations, so-called Computational Fluid Dynamics (CFD), help to optimize and improve the applications in reacting flows. In comparison with experimental studies, CFD is relatively cheap. Although a complete simulation of a turbulent reacting flow, which involves all physical phenomena is not possible at present, the solutions of CFD is able to facilitate the device-scale analysis and the design of many new industrial combustion applications. The study of turbulent combustion is important from a scientific point of view as from a practical point of view. The use of the numerical models for industrial applications are first handled with a continuous cycle of ‘the understanding of fundamentals of combustion’, ‘model developments’, ‘implementation of models in numerical simulations’, and ‘validation of the numerical results with experimental measurements’. When validating the numerical models, simple flame configurations are required. This fact brings the importance of studying the turbulent jet flows numerically and experimentally.

Turbulent combustion research can be classified into two categories: non-premixed combustion and premixed combustion. In general, different modeling approaches are required to deal with each combustion category. New generation low emission/low fuel consumption combustion systems are characterized by a combined concept of two combustion categories, which is called partially premixed turbulent combustion. For example, lean premixed combustion systems for reducing NO_x emissions in gas turbine combustors and gasoline direct injection spark-ignition engines for reducing the fuel consumption operate in partially premixed conditions.

This work deals with the modeling of nonpremixed and partially premixed turbulent combustion. The two common models of nonpremixed combustion are the probability density function (PDF) transport equation models and laminar flamelet models. These models have their own advantages and disadvantages. The PDF transport equation models have the important advantage that the chemical source term appears in closed form. Additionally, the statistical distributions of scalar variables are obtained by calculated probability distributions. The laminar flamelet models have the advantage of strong coupling between chemical reaction and molecular transport. The nonpremixed combustion is classified into different regimes, depending on the flame structure. In evaluating the regime of applicability, the PDF transport equation models and the laminar flamelet models are disjoint. Since the molecular transport term requires modeling in the PDF transport equation, the tight statistical correlation between chemical activity and molecular transport is not considered in the PDF transport equation models. This is a constraint for the model. Therefore, PDF transport equation models are valid only when the turbulent mixing will still be sufficiently intense to restrain the formation of coherent structures with correlated chemical kinetics. On the other hand, when the turbulence intensities decrease, the interaction between chemical reaction and molecular transport gains importance. This regime is called flamelet regime and the laminar flamelet models are valid for this regime. The most promising

approach in this direction appears to be extending the PDF methods that would properly account for the coupling between reaction and molecular transport in the flamelet regime. Therefore, the present work was focused on a new concept, combining two common types of non-premixed combustion models: the Eulerian composition PDF transport equation models and transient laminar flamelet models. The new model -the coupled TLFM/PDF model- aims to combine the advantages of the both models, while avoiding their disadvantages. The compromise here is to solve the conserved scalar -the mixture fraction- with the PDF transport equation and avoid using presumed PDF shapes as in the laminar flamelet models. The scalar dissipation rate, reaction progress variable and the turbulent time scale are the other decisive parameters, which are calculated. Then, the thermochemical variables; such as temperature and mass fractions of species are read from the transient flamelet libraries. The flamelet libraries consider for the correlation of chemistry and molecular transport. The scalar dissipation rate determines the extinction and the reaction progress variable determines the partially premixed conditions.

The first stage of the study was to improve the transient laminar flamelet model of Ferreira (ETH,Zürich) and validate the PDF transport equation model with a 4-step reduced mechanism. The studies are applied to piloted jet flames, which are the target flames of an international workshop. The velocity, mixture fraction, temperature and mass fraction of species are evaluated. The second stage was to validate the new model, -the coupled TLFM/PDF model- for the same test case and compare with the existing models, which are mentioned above. The capabilities of each model, their advantages and disadvantages are summarized. An additional study was the numerical study of an opposed jet flame with the PDF transport equation model.

Kurzfassung

Die turbulente Verbrennung ist ein wichtiges Phänomen in industriellen Anwendungen, wie Gasturbinen, Diesel- oder Benzinmotoren, "low NOx" Brennern und die Heizkesseln. Alle diese Komponenten müssen ständig weiterentwickelt werden, da die Anwendungen effizient, ökonomisch und sauber sein müssen. Folglich ist ein besseres Verständnis der turbulenten Verbrennung erforderlich. Die Numerische Simulationen, sogenannte Computational Fluid Dynamics (CFD), stellen ein wichtiges Hilfsmittel dar bei der Weiterentwicklung all dieser Komponenten. Im Vergleich mit experimentellen Studien ist CFD verhältnismässig preiswert. Obgleich eine komplette Simulation einer turbulenten reagierenden Strömung, die auf den exakten physikalischen Modellen beruht, zur Zeit nicht möglich ist, sind die Resultate von CFD in der Lage, das Verständnis der Funktionsweise und den Entwurf neuer Komponenten zu unterstützen. Das Studium der turbulenten Verbrennung ist wichtig von einem wissenschaftlichen Gesichtspunkt wie auch von einem praktischen Gesichtspunkt aus. Die Anwendung von Modellen für industrielle Entwicklungsprozesse beruht auf einem Zyklus bestehend aus der Erarbeitung des Grundlagenverständnisses, der Formulierung von Modellen, deren Validierung und Implementation in kommerziell nutzbaren Codes und schliesslich deren Anwendung im industriellen Prozess. Wenn man die numerische Modelle validiert, benötigt man einfache Flammekonfigurationen. Diese Tatsache erklärt, warum Freistrah-Flammen in Wissenschaft und Technik häufig sowohl numerisch auch als experimentell studiert werden..

Turbulente Verbrennungsforschung kann in zwei Kategorien eingestuft werden: nicht-vorgemischte Verbrennung und vorgemischte Verbrennung. Im allgemeinen sind bei der Modellbildung unterschiedliche Näherungen notwendig, um jede Verbrennungskategorie zu beschreiben. Verbrennungssysteme der neuesten Generation mit tiefen Emissionswerten und hoher Brennstoffausnutzung werden durch ein kombiniertes Konzept von zwei Verbrennungskategorien realisiert, welches teilvorgemischte turbulente Verbrennung genannt wird. Zum Beispiel beruhen magere vorgemischte Verbrennungssysteme zur Verringerung der NOx Emissionen in Gasturbineverbrennungskammern und Benzinmotoren mit Direkteinspritzung zur Verringerung des Kraftstoffverbrauchs auf teilvorgemischten Bedingungen.

Diese Arbeit liefert einen Beitrag zur Modellierung von nicht vormischter und teilvorgemischter turbulenter Verbrennung. Die zwei allgemeinen Modelle für nicht vormischte Verbrennung sind die Wahrscheinlichkeit Dichtefunktion (PDF) Transport-Gleichungsmodelle und Laminar Flamelet-Modelle. Diese Modelle haben ihre eigenen Vorteile und Nachteile. Die PDF Transport-Gleichungsmodelle haben den wichtigen Vorteil, dass der chemische Quellterm in geschlossener Form vorliegt. Zusätzlich werden die statistischen Verteilungen von skalaren Variablen durch errechnete Wahrscheinlichkeitsverteilungen erreicht. Die „Laminar Flamelet“-Modelle haben den Vorteil der starken Koppelung zwischen chemischer Reaktion und molekularem Transport. Nicht vorgemischte Verbrennung wird eingestuft in unterschiedliche Regime, abhängig von der Flammenstruktur. Die Anwendbarkeit der beiden genannten Modelle auf die verschiedenen Regimes sind unterschiedlich.. Wegen der Notwendigkeit der Modellierung des molekularen Transportes im PDF Transport-Gleichungsmodell wird die feste statistische Wechselbeziehung zwischen chemischer

Reaktion und molekularem Transport in den PDF Transport-Gleichungsmodellen nicht berücksichtigt. Das ist eine starke Beschränkung für das Modell. Deshalb sind PDF Transport-Gleichungsmodelle nur anwendbar, wenn die turbulente Mischung noch genug intensiv ist., um die Entstehung von kohärenten Strukturen mit korrelierter Reaktionskinetik zu verhindern. Andererseits, wenn die Turbulenzintensität abnimmt, gewinnt die Wechselwirkung zwischen chemischer Reaktion und molekularem Transport an Bedeutung. Dieses Regime wird Flamelet Regime genannt und die „Laminar Flamelet“-Modelle sind für dieses Regime gültig. Ein vielversprechender Weg ist demnach die Erweiterung der PDF-Transportmodelle derart, dass diese die Kopplung zwischen Reaktionskinetik und molekularem Transport besser berücksichtigen. Deshalb wurde in diese Arbeit ein neues Konzept erarbeitet, welches die zwei allgemeinen Arten der Modellierung nicht vorgemischter Verbrennung koppelt: das Eulerian PDF Transportgleichungsmodell und das transiente Laminar Flamelet-Modell. Das neue Modell - das gekoppelte TLFM/PDF Modell- zielt darauf ab, die Vorteile der beiden Modelle zu kombinieren und gleichzeitig ihre Nachteile zu vermeiden. Der Kompromiss hier soll den Mischungsbruch (skalare Erhaltungsgrösse) mit der PDF Transportgleichung lösen und die Anwendung von PDF's mit vorgegebener Form vermeiden, wie dies bei den klassischen Flamelet-Modellen der Fall ist. Als weitere Variablen treten in diesem Modell die skalare Dissipation, der Reaktionsfortschritt und eine turbulente Zeitskala auf. Dann werden die thermochemischen Variablen wie die Temperatur und Spezieskonzentrationen von den transienten Flamelet Bibliotheken gelesen. Diese Flamelet-Bibliotheken berücksichtigen die Wechselwirkung zwischen Chemie und molekularem Transport. Die skalare Dissipation bestimmt Zustände von lokalem Verlöschen und die Reaktionsfortschrittsvariable definiert die Bedingungen der Teilvormischung.

Das erste Ziel dieser Studie ist eine Weiterentwicklung des transienten Laminar Flamelet Modells von Ferreira (ETH, Zürich) und die Validierung des PDF Transport-Gleichungsmodells mit einem reduzierten vier-Schritt Mechanismus. Die Studien werden basierend auf Freistrahlfammen (mit Pilotflamme) durchgeführt, welche Arbeitsunterlage eines internationalen Workshop waren. Die Geschwindigkeit, der Mischungsbruch, die Temperatur und der Massenbruch der Spezies werden berechnet und mit dem Experiment verglichen. Das zweite Ziel ist die Validierung des neuen Modells, -das gekoppelte TLFM/PDF Modell- durch Vergleich des gleichen Testfalls und mit den Resultaten der vorhandenen Modelle, die oben erwähnt werden. Die Fähigkeiten jedes Modells, ihre Vor- und Nachteile werden zusammengefasst. Eine zusätzliche Studie war die numerische Untersuchung einer Gegenstrahlflamme mit dem PDF Transport-Gleichungsmodell.