

Direct Numerical Simulation of Turbulent Premixed Syngas Flames in Closed Domains

Doctoral Thesis

Author(s):

Jafargholi, Mahmoud

Publication date:

2018

Permanent link:

<https://doi.org/10.3929/ethz-b-000274327>

Rights / license:

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

DISS. ETH NO. 25079

DIRECT NUMERICAL SIMULATION OF
TURBULENT PREMIXED SYNGAS FLAMES IN
CLOSED DOMAINS

A dissertation submitted to attain the degree of

DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

MAHMOUD JAFARGHOLI

MSc. in Computational Science and Engineering, EPFL

MSc. in Aerospace Engineering, Sharif University of
Technology

born on 14 August 1984
citizen of Iran

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Konstantinos Boulouchos, ETH Zurich, examiner

Prof. Dr. Francesco Creta, Sapienza University of Rome,
co-examiner

Dr. Christos E. Frouzakis, ETH Zurich, co-examiner

2018

ABSTRACT

In this study, Direct Numerical Simulations (DNS) of turbulent premixed Syngas flame in a confined domain are performed to investigate the effect of turbulence on the flame in a confined vessel. The initial turbulent intensity and initial integral length scale are two parameters defining the initial turbulent field. During the early growth stage, the effect of turbulence on the development of the flame kernel is studied. The long-term interactions of flame and turbulence are considered while the flame propagates in a confined space, the pressure and temperature of the unburned premixed gas will increase which will affect the laminar flame properties of the flame. Moreover, the Flame-Wall Interactions (FWI) near the cold wall are investigated. Flame quenching distance, maximum wall heat flux and decay rate of unburned gas at the wall are considered.

First, 2D simulations in a rectangular domain are performed where the low computational cost of 2D simulations enables parametric studies. Before investigating the turbulent cases, the laminar case is studied comprehensively, which provides a basis to compare with the turbulent cases. Although turbulence is a 3D phenomenon, 2D turbulent simulations are shown to be qualitatively similar to 3D simulations, and 2D simulations will guide the 3D simulation. Finally, 3D simulations in a cylindrical domain are performed, and the effects of initial integral length scale and turbulent intensity on the flame are studied.

The 2D laminar simulation demonstrated that the changing thermodynamic conditions result in an increase of the laminar flame speed of the unburned mixture by 1.5 times and a decrease of its thickness to half in comparison to propagation in an open domain. In addition, the decrease of the flame thickness triggers thermo-diffusive instabilities and small-scale cellular structures appear along the flame front during the final stages. The scatter plots of the heat release rate with respect to the progress variable show that the 1-D laminar premixed flame structures can parametrise the flame as long as it remains sufficiently far from the walls, but additional variables need to be introduced to account for the flame-wall interaction. The chemical state can then be tabulated and used for modelling.

The 2D and 3D turbulent simulations showed similar qualitative results. The initial kernel growth were dominantly affected by the initial turbulent intensity while in the cases with the similar initial turbulent intensity, the

cases with smaller turbulent length scale had larger growth rate. The relative location of the hot kernel and large-scale vortices can accelerate or delay the kernel's growth. Long-term profile of pressure or i HRR is strongly affected by the initial turbulent intensity and the effect of initial turbulent length scale is evident in the low turbulent intensity cases where the cases with the larger length scale have higher burning rate. The ratio of i HRR to flame area is enhanced due to the increased unburned temperature, pressure and the initial turbulence intensity. In the high turbulence intensity cases flame encounters larger stretch rates which have a positive effect on the consumption rate. Heat loss rate is enhanced by the initial turbulence intensity, although the total heat loss is reduced in the high turbulence intensity cases since the total combustion time is shortened. Relative to the laminar case, maximum wall heat flux / quenching distance is increased / decreased in turbulent cases and unburned gas near the walls and corners are burned faster in turbulent cases.

The high pressure simulations demonstrated that the decrease in the laminar flame speed due to increased pressure significantly reduces the burning rate in the laminar case while in the high turbulence intensity cases the burning rate is controlled by turbulence.

ZUSAMMENFASSUNG

In dieser Studie werden direkte numerische Simulationen (DNS) turbulenter, vorgemischter Syngas-Flammen in einer begrenzten Domäne durchgeführt, um den Einfluss von Turbulenzen auf die Flamme in einem abgeschlossenen Gefäß zu untersuchen. Die anfängliche Intensität der Turbulenz und die anfängliche integrale Längenskala sind zwei Parameter, die das zu Beginn vorherrschende turbulente Feld definieren. Während des frühen Wachstumsstadiums wird der Einfluss der Turbulenz auf die Entwicklung des Flammenkerns untersucht. Die anhaltenden Wechselwirkungen von Flamme und Turbulenz werden berücksichtigt, während sich die Flamme in einem abgeschlossenen Gefäß ausbreitet. Dabei werden Druck und Temperatur des unverbrannten vorgemischten Gases ansteigen, was die laminaren Flammeneigenschaften beeinflusst. Darüber hinaus werden die Wechselwirkungen zwischen Flamme und Wand in der Nähe der kalten Wand untersucht, wobei Flammenlöschabstand, maximaler Wandwärmefluss und Verbrennungsrate des unverbrannten Gases an der Wand betrachtet werden.

Zunächst werden 2D-Simulationen in einer rechteckigen Domäne durchgeführt, da der geringe Rechenaufwand von 2D-Simulationen Parameterstudien ermöglicht. Vor der Untersuchung der turbulenten Fälle wird der laminare Fall, der als Grundlage für einen Vergleich mit den turbulenten Fällen dient, umfassend behandelt. Obwohl Turbulenz ein 3D Phänomen ist, zeigen 2D-Turbulenzsimulationen qualitativ ähnliche Ergebnisse wie 3D-Simulationen und dienen als Grundlage für die durchgeführten 3D-Simulationen. Schließlich werden 3D-Simulationen in einer abgeschlossenen, zylindrischen Domäne durchgeführt und die Auswirkungen der anfänglichen integralen Längenskala und der Turbulenzintensität auf die Flamme untersucht.

Die 2D-Laminarsimulation zeigte, dass die sich ändernden thermodynamischen Bedingungen zu einer Zunahme der laminaren Flammengeschwindigkeit des unverbrannten Gemisches um das 1,5-fache und zu einer Halbierung seiner Dicke im Vergleich zur Ausbreitung in einem offenen Gebiet führen. Darüber hinaus löst die Abnahme der Flammenstärke thermo-diffusive Instabilitäten aus und kleinzellige zelluläre Strukturen treten während der Endstufe entlang der Flammenfront auf. Die Streudiagramme der Wärmefreisetzungsrates in Bezug auf die Fortschrittsvari-

ble zeigen, dass die laminaren vorgemischten 1-D-Flammenstrukturen die Flamme parametrisieren können, solange sie ausreichend weit von den Wänden entfernt bleibt, es müssen jedoch zusätzliche Variablen eingeführt werden, um die Flammen-Wand-Interaktion zu berücksichtigen. Der chemische Zustand kann dann tabellarisch dargestellt werden und zum Modellieren verwendet werden.

Die turbulenten 2D und 3D-Simulationen zeigten ähnliche qualitative Ergebnisse. Das anfängliche Kernwachstum wurde hauptsächlich durch die anfängliche turbulente Intensität beeinflusst, während in den Fällen mit der ähnlichen anfänglichen turbulenten Intensität die Fälle mit der kleineren turbulenten Längenskala eine größere Wachstumsrate aufwiesen. Die relative Position des heißen Kerns und der großen Wirbel kann das Wachstum des Kerns beschleunigen oder verzögern. Das Langzeitprofil des Drucks oder $iHRR$ wird stark von der anfänglichen turbulenten Intensität beeinflusst, und der Effekt der anfänglichen turbulenten Längenskala ist in den Fällen geringer turbulenter Intensität offensichtlich, wo die Fälle mit der größeren Längenskala eine höhere Verbrennungsrate aufweisen. Das Verhältnis von $iHRR$ zu Flammenfläche ist aufgrund der erhöhten unverbrannten Temperatur, des erhöhten Drucks und der anfänglichen Turbulenzintensität erhöht. In den Fällen hoher Turbulenzintensität trifft die Flamme auf größere Dehnraten, die sich positiv auf die Verbrauchsrate auswirken. Die Wärmeverlustrate wird durch die anfängliche Turbulenzintensität erhöht, obwohl der Gesamtwärmeverlust in den Fällen mit hoher Turbulenzintensität verringert ist, da die gesamte Verbrennungszeit verkürzt ist. Relativ zum laminaren Fall ist der maximale Wandwärmefluss / Abschreckabstand in turbulenten Fällen erhöht / verringert und unverbranntes Gas nahe den Wänden und Ecken wird in turbulenten Fällen schneller verbrannt.

Die Hochdrucksimulationen zeigten, dass die Abnahme der laminaren Flammengeschwindigkeit aufgrund des erhöhten Drucks die Verbrennungsrate im laminaren Fall signifikant reduziert, während in den Fällen mit hoher Turbulenzintensität die Verbrennungsrate durch Turbulenz gesteuert wird.