

DISS. ETH NO. 20914

# Scale Separation Modeling of Turbulent Gas-Phase Combustion Using PDF Methods

A dissertation submitted to

ETH ZURICH

for the degree of

Doctor of Sciences

presented by

BENJAMIN TIMO ZOLLER

MSc. ETH in Mechanical Engineering

born on November 7, 1981

citizen of Germany

accepted on the recommendation of

Prof. Dr. Patrick Jenny, examiner

Prof. Dr. Ulrich Maas, co-examiner

2013

## Abstract

In turbulent combustion, a variety of different fluid dynamic and chemical processes are present. Therefore, turbulent gas phase combustion is an interesting field of research and despite the great success over the past decades, it is also still an active research area. One fundamental problem arising is the large range of scales present in turbulent combustion, which prohibit the direct numerical solution of the governing equations and generates a need of combustion models enabling computationally more efficient approaches. One method to describe turbulent combustion in a statistically general manner are probability density function (PDF) methods, which solve transport equations of the joint velocity scalar PDF. This thesis presents three new combustion models utilizing the advanced statistical information and level of closure provided by PDF methods.

The first model for turbulent premixed flames closes the PDF transport equation for the flame progress variable with a flame surface density approach, which itself utilizes a modified flame residence time. The advancement of the modified flame residence time is altered by a stretch factor to account for the variation of the flame surface due to strain and burn-out. The stretch factor is defined by comparing the flame surface transport equation derived from the model PDF equation with existing models. The flame surface density is then employed to close the stochastic Bray, Moss and Libby model by Hack and Jenny [34]. The validation proved the model's capability to predict turbulent premixed flames in the wrinkled and corrugated flamelet regime.

The second model presented was designed to predict partially premixed turbulent flames. Therefore, the idea of representing inert scalar fields by parametrized scalar profiles introduced by Meyer and Jenny [70] was extended for reactive scalars. For this purpose, reconstructions of the local flamelet solution are derived from a tabulated flame table. The flame table is generated by conducting confined two dimensional triple flame calculations. Additionally, a progress variable is employed to capture flame propagation occurring in partially premixed flames. The model was tested in a zero dimensional partially stirred reactor to study its capability of predicting global extinction. In the validation with the Sandia jet flames the predictiveness of the model is demonstrated with equally setup simulations of two flames with highly varying degree of local extinction. Moreover, scatter data and marginal PDFs are compared with experimental findings.

The third model predicts nitrogen oxide emissions in non-premixed flames by parametrizing the nitrogen oxide source term. The parametrization is performed by extracting initial conditions from flamelet solutions and evolve the nitrogen oxygen chemistry exclusively. This prevents artificial nitrogen oxide production from the nitrogen oxide/dioxide mechanism, which leads to significant over-predictions in existing approaches. Radiation effects are also considered by deriving transient flamelet solutions from a non-radiative steady state solution by switching on the radiation sink term. The temporal evolution is parametrized by a radiation time. Hence, the model achieves a new diffusion-chemistry-radiative heat loss-equilibrium. After demonstrating certain model properties in homogeneous reactors, a validation with a turbulent jet flame is presented. Furthermore, it is shown that the amount of thermal nitrogen oxide is very moderate in this test case and that radiation effects reduce the nitrogen oxide emissions significantly.

## Zusammenfassung

In der turbulenten Verbrennung treten verschiedene komplexe fluiddynamische und chemische Prozesse auf, was diese zu einem interessanten Forschungsfeld macht. Trotz der grossen Erfolge, welche dank intensiver Forschung der letzten Jahrzehnte erreicht wurde, bleibt die Gasphasenverbrennung weiterhin ein aktives Forschungsgebiet. Ein grundlegendes Problem der turbulenten Verbrennung ist das grosse Spektrum verschiedener Skalen, welche für eine direkte numerische Integration unüberwindbar hohe Anforderungen an die Rechenleistung stellen. Dieser Umstand schafft eine Nachfrage nach Ansätzen mit geringerem Rechenaufwand; einer dieser Methoden ist die generelle statistische Beschreibung der turbulenten Verbrennung durch Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (PDF), in welcher eine Transportgleichung der Verbundwahrscheinlichkeitsdichtefunktion von Geschwindigkeiten und Skalaren gelöst wird. In dieser Arbeit werden drei neue Verbrennungsmodelle vorgestellt, welche den hohen Schliessungsgrad von PDF-Methoden zu ihrem Vorteil nutzen.

Das erste Modell für Vormischflammen bietet eine Schliessung der PDF Transportgleichung für die Flammenfrontdichte mittels einer modifizierten Flammenaufenthaltszeit. Das Fortschreiten dieser modifizierten Flammenaufenthaltszeit wird von einem Streckungsfaktor bestimmt, welcher den Einfluss von Scherung und Ausbrand auf die Flammenfrontveränderung modelliert. Um den Streckungsfaktor zu bestimmen, werden die aus der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionstransportgleichung berechnete und die modellierte Reynolds gemittelte Erhaltungsgleichung für die mittlere Flammenfrontdichte verglichen. Mit der so erhaltenen Flammenfrontdichte wird das stochastische Bray, Moss und Libby Modell von Hack und Jenny [34] geschlossen, welches für Vormischflammen im gewickelten Flammenregime und im Regime der Inselbildung gültig ist.

Das zweite Verbrennungsmodell, welches hier vorgestellt wird, ist für teilvorgemischte turbulente Flammen entworfen worden. Hierzu wurde die Idee, inerte Skalenfelder mittels parametrisierter Profile darzustellen, wie sie von Meyer und Jenny [70] eingeführt wurde, auf reaktive Skalare erweitert. Zu diesem Zweck wurden lokale Flamelet Lösungen aus tabelierten Flammentabellen konstruiert. Die Flammentabellen werden durch die Simulation von restriktierten Tripleflammen erstellt. Desweiteren wird eine Fortschrittsvariable eingesetzt, um die Flammenpropagation, welche in teilvorgemischten Flammen auftritt, zu erfassen. Um das Potential des Modells, globale Verlöschung vorherzusagen, zu testen, wurden Rührreaktor Simulationen durch-

geführt. In der Validierung, mittels der Sandia Freistrahlfammen, konnte dann die Voraussagekraft des Modells an zwei Flammen mit stark unterschiedlichem Grad lokaler Verlöschung demonstriert werden. Zusätzlich zu den statistischen Momenten, wurden auch Streudaten und marginale Wahrscheinlichkeitsdichten der Simulation und des Experiments verglichen.

Das dritte Modell sagt Stickoxidbildung in turbulenten Diffusionsflammen voraus, wozu der Stickoxidquellterm parametrisiert wurde. Die Parametrisierung wurde durchgeführt, indem Anfangsbedingungen aus Flameletlösungen extrahiert wurden, von welchen aus dann die zeitliche Entwicklung nur der Stickstoffchemie betrachtet wurde. Das verwendete Vorgehen verhindert künstliche Quellterme, die aus inkonsistenten Stickoxid/Stickstoffdioxid Verhältnissen resultieren, und zu signifikanter Mehrbildung von Stickoxid in bisherigen Ansätzen führte. Die Berücksichtigung von Strahlungseffekten wird durch transiente Berechnungen mit Strahlungssenkterm sicher gestellt, welche mittels stationären Flameletlösungen ohne Strahlungseffekte initialisiert werden. Die Transiente wird durch eine Strahlungszeit parametrisiert und folglich wird ein neuer Gleichgewichtszustand von Strahlung, Diffusion und Chemie erreicht. Nach der Demonstration von einigen Modelleigenschaften in homogenen Reaktoren, wird eine Validierung mittels einer turbulenten Freistrahlfamme vorgestellt. Des weiteren wird aufgezeigt, dass der Anteil an thermischen Stickoxid in diesem Testfall einen moderaten Anteil ausmacht und dass Strahlungseffekte die Stickoxidemissionen signifikant reduzieren.