



Institut für Thermische Strömungsmaschinen  
Prof. Dr.-Ing. H.-J. Bauer, Ord.



Institut für  
Verbrennungstechnik

# Quantifizierung der Effekte von Parametervariationen auf die Betriebscharakteristik eines FLOX<sup>®</sup>-Brennkammersystems mit Hilfe von Verbrennungssimulationen

Bachelorarbeit  
von  
**Felix Hauger**

Betreuer: **Sven Hoffmann, M.Sc.**  
**Dr.-Ing. Jan Zanger**

---

Juli 2024



## BACHELORARBEIT

Felix Hauger

### Quantifizierung der Effekte von Parametervariationen auf die Betriebscharakteristik eines FLOX®-Brennkammersystems mit Hilfe von Verbrennungssimulationen

Für die Dekarbonisierung der Energieversorgung und Reduktion der Treibhausgasemission ist der Ausstieg aus fossilen Brennstoffen notwendig. Da Technologien wie Windkraft und Photovoltaik allein zur Deckung des Strombedarfs nicht ausreichen, ist ein Mix verschiedener dezentraler Technologien erforderlich. Mikrogasturbinen bieten hohe Flexibilität, niedrige Wartungskosten und geringe Emissionen. Sie eignen sich für dezentrale Anwendungen und die Kraft-Wärme-Kopplung, besonders mit CO<sub>2</sub>-neutralen Brennstoffen wie Wasserstoff. Das Institut für Verbrennungstechnik des DLR arbeitet an emissionsarmen Verbrennungstechnologien wie FLOX® für Wasserstoff, um die Effizienz und Flexibilität von Mikrogasturbinen zu verbessern.

Im Rahmen vorliegender Arbeit soll eine systematische Parameterstudie anhand eines Mikrogasturbinenbrenners mittels numerischer Strömungssimulation durchgeführt werden. Dabei soll die reagierende Strömung eines einstufigen Brenners ohne Mischluft unter Variation der Geometrie und der Betriebsbedingungen simuliert werden. Mit den Daten aus der CFD-Studie sollen Modelle basierend auf der statistischen Versuchsplanung (Design of Experiments) erstellt und validiert werden. Mithilfe der DoE-Modelle sollen die Abhängigkeiten verschiedener Zielgrößen von den Eingangsparametern analysiert werden. Das Ziel der Arbeit besteht darin, die Effekte der Parametervariation auf die Verbrennungscharakteristik des FLOX®-Brenners zu quantifizieren.

Die Arbeit gliedert sich in folgende Teilaufgaben:

- Einarbeitung
  - in die numerische Strömungssimulation
  - in die statistische Versuchsplanung (Definitive Screening Design)
  - in die Auswertung von Simulationsergebnissen mit Tecplot
- Erstellung der geometrischen Konfigurationen des Brennkammersystems
- Vernetzung der Brennkammervarianten
- Durchführung von Simulationen zur Vorhersage des reaktiven Strömungsfeldes
- Darstellung und Interpretation von Ergebnissen
- Dokumentation der Arbeit



Ich versichere, die Arbeit selbständig verfasst und nur die angegebenen Quellen und Hilfsmittel verwendet zu haben. Die wörtlich oder inhaltlich übernommenen Stellen sind als solche kenntlich gemacht. Die Satzung des Karlsruher Instituts für Technologie (KIT) zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis wurde von mir in der aktuellen Fassung beachtet.

Karlsruhe, 2. Juli 2024

## **Danksagung**

Ich möchte diese Gelegenheit nutzen, um all jenen, die zum Gelingen dieser Bachelorarbeit beigetragen haben, meinen herzlichen Dank auszusprechen.

Mein besonderer Dank gilt meinem Betreuer Dr. Jan Zanger, der mir stets mit Rat und Tat zur Seite stand und jeden unklaren Sachverhalt geduldig erklärte, bis ich ihn verstanden hatte. Ich schätze die lockere Arbeitsatmosphäre, seine motivierenden Worte und die wertvollen Anregungen und Ratschläge, die mir geholfen haben, mich in diesem hoch komplexen Fachgebiet zurechtzufinden.

Ein herzliches Dankeschön richte ich auch an Timo Lingstädt, der die wichtige Vorarbeit zum Aufbau der Simulationen geleistet hat und mich in die Welt der CFD eingeführt hat. Ich konnte jederzeit auf seine hilfreichen Ratschläge und wertvollen Diskussionen zählen. Ebenso danke ich Karl Planke für seine fachliche Unterstützung und die gemeinsame detaillierte Analyse auftretender Probleme. Ich bin auch meinen Kolleginnen und Kollegen am Institut für Verbrennungstechnik des DLR sehr dankbar für ihre Freundlichkeit und Offenheit während meiner dortigen Zeit.

Meine aufrichtige Dankbarkeit gilt auch Sven Hoffmann, meinem Betreuer am Institut für thermische Strömungsmaschinen am KIT, für die unkomplizierte Betreuung meiner Arbeit, sein offenes Ohr für fachliche und organisatorische Probleme sowie die zahlreichen Tipps und Anregungen.

Abschließend möchte ich meine tiefe Dankbarkeit an meine Familie, Freunde und meine Freundin aussprechen, die stets an mich geglaubt und mich durch diese Herausforderung hindurch unterstützt und motiviert haben. Danke!

## Kurzfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wird die Quantifizierung des Einflusses unterschiedlicher Designparameter auf die Betriebscharakteristika von Brennkammern in Mikrogasturbinen vorgenommen. Der Fokus liegt hierbei auf der Identifikation von Betriebs- und Geometrieparametern, die signifikante Auswirkungen auf die Flammenform, die Stabilität der Verbrennung, den Brennkammerdruckverlust und die Emissionen haben. Diese Analyse erfolgt mittels numerischer Verbrennungssimulationen eines vereinfachten FLOX®-Brennkammermodells. Zur Versuchsplanung und Auswertung wird die Methodik Definitive Screening Design aus der statistischen Versuchsplanung angewendet. Dies ermöglicht die Identifikation signifikanter Effekte mit einer geringen Anzahl an Versuchen. Zunächst werden die Grenzen der zu variierenden Parameter, unter den geforderten Rahmenbedingungen, abgeschätzt. Es wird eine Skalierung des Massenstroms durchgeführt, sodass sich vergleichbare Verbrennungs- und Stabilisierungsbedingungen einstellen. Alle Simulationen aus dem Versuchsplan sowie zwei Validierungspunkte werden bis zu einem akzeptablen Grad der Konvergenz simuliert. Mit den Ergebnissen des Definitive Screening Designs können die Variationsparameter mit einem signifikanten Einfluss auf die Zielgrößen identifiziert und gegeneinander abgewogen werden. So können die relevanten Parameter der Brennkammerentwicklung ermittelt werden. Darüber hinaus wird das Potenzial des Definitive Screening Designs bewertet, Optimierungen auf Basis einer begrenzten Datenmenge abzuleiten. Die Untersuchungen zeigen, dass die Modelle des Definitive Screening Designs teilweise in der Lage sind, die Emissionstrends abzubilden. Die Absolutwerte der  $\text{NO}_x$ -Emissionen weichen im Vergleich zu experimentellen Messungen nur geringfügig ab, während die Absolutwerte der CO-Emissionen deutlich überschätzt werden. Die Modelle für die Flammenform zeigen einen entgegengesetzten Verlauf im Vergleich zu den Experimenten, was auf die zeitliche Mittelung der Flammenbilder im experimentellen Bereich zurückzuführen ist. Es lässt sich somit festhalten, dass Definitive Screening Designs, angewendet auf numerische Verbrennungssimulationen, teilweise in der Lage sind, die Trends der Betriebscharakteristik eines Brennkammersystems vorherzusagen.

## Abstract

This study quantifies the influence of various design parameters on the operation characteristics of combustion chambers in micro gas turbines. It focuses on identifying the operating and geometric parameters, which are significantly affecting flame shape, combustion stability, combustion chamber pressure loss, and emissions. Numerical combustion simulations are performed using a simplified FLOX® combustion chamber model. The "Definitive Screening Design" methodology (DSD) from Design of Experiments is employed for test planning and evaluation, enabling the identification of significant effects with a minimal number of tests. Initially, the parameter limits are estimated based on the required framework conditions. A mass flow scaling is developed to achieve comparable combustion and stabilization conditions. All simulations from the test plan, along with two validation points, are performed to an acceptable degree of convergence. The results from the DSD enables the identification and assessment of the parameters, which significantly influence the target variables. This allows for the determination of key parameters in combustion chamber development. Furthermore, the study evaluates the potential of DSD to derive optimizations using a limited amount of data. The investigation shows that the models of the DSD are partially capable of depicting the emission trends. The absolute values of  $\text{NO}_x$  emissions deviate only slightly compared to experimental measurements, while the absolute values of CO emissions are significantly overestimated. The models of the DSD for the flame shape show an opposite trend compared to the experiments, which can be attributed to the time averaging of the flame images in the experimental area. In conclusion, Definitive Screening Designs can predict to an extent the trends of the operating characteristics of a combustion chamber system, when applied to numerical combustion simulations.

# Inhaltsverzeichnis

<b>Symbolverzeichnis</b>	<b>iii</b>
<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>v</b>
<b>Tabellenverzeichnis</b>	<b>vii</b>
<b>1 Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2 Stand der Forschung</b>	<b>3</b>
2.1 Die Verbrennungstechnologie Flameless Oxidation . . . . .	3
2.2 Die F400h Brennkammer . . . . .	6
2.3 Herausforderungen der Wasserstoffverbrennung in Mikrogasturbinen . . . . .	10
<b>3 Grundlagen</b>	<b>13</b>
3.1 Grundgleichungen reaktiver Strömungen . . . . .	13
3.2 Turbulenz . . . . .	14
3.2.1 Turbulente Strömungen . . . . .	14
3.2.2 RANS-Gleichungen . . . . .	15
3.2.3 Turbulenzmodellierung . . . . .	16
3.3 Ähnlichkeit von Strömungen . . . . .	19
3.3.1 Reynoldsähnlichkeit . . . . .	19
3.3.2 Machzahlähnlichkeit . . . . .	20
3.4 Verbrennungsmodellierung . . . . .	21
3.4.1 Grundlagen der Verbrennung . . . . .	21
3.4.2 Verbrennungsmodellierung . . . . .	22
3.5 Numerische Strömungsmechanik . . . . .	24
3.5.1 Finite Volumen Methode . . . . .	24
3.5.2 Rechengitter . . . . .	25
3.5.3 Iterative Lösungsverfahren . . . . .	26
3.6 Schadstoffbildung . . . . .	26
3.6.1 Stickoxide . . . . .	27
3.6.2 Kohlenmonoxid . . . . .	29
3.7 Statistische Versuchsplanung . . . . .	30
<b>4 Numerische Methoden und Werkzeuge</b>	<b>35</b>
4.1 Numerisches Modell der untersuchten Brennkammer . . . . .	35
4.1.1 Vereinfachte Brennergeometrie . . . . .	35
4.1.2 Rechengitter . . . . .	36
4.1.3 Randbedingungen der Simulationen . . . . .	37
4.2 Versuchsdesign . . . . .	40
4.2.1 Variationsparameter . . . . .	40
4.2.2 Parametergrenzen . . . . .	41

---

4.2.3	Zielgrößen . . . . .	42
4.2.4	Versuchsmatrix . . . . .	46
4.3	Vorbereitung und Durchführung der Simulationen . . . . .	47
4.4	Auswertemethoden . . . . .	48
<b>5</b>	<b>Ergebnisse und Diskussion der Parametervariationen</b>	<b>51</b>
5.1	Simulationsergebnisse des Mittelpunktversuchs . . . . .	51
5.2	Diskussion relevanter Verbrennungsanomalien . . . . .	57
5.3	Diskussion der Effekte auf die Zielgrößen . . . . .	61
5.3.1	NO <sub>x</sub> -Emissionen . . . . .	62
5.3.2	CO Emissionen . . . . .	66
5.3.3	Brennertotaldruckverlust . . . . .	70
5.3.4	Verteiltheit der Flamme . . . . .	71
5.3.5	Abhebehöhe der Flamme . . . . .	73
5.3.6	Flammenlänge . . . . .	75
5.3.7	Fehler der DSD-Modelle . . . . .	76
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>79</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>81</b>
	<b>Anhang</b>	<b>85</b>
A.1	Zielgrößen . . . . .	85

# Symbolverzeichnis

Formelzeichen	Einheit	Beschreibung
<i>Lateinische Symbole</i>		
$c_p$	J/(kg K)	Spezifische Wärmekapazität
$D$	m	charakteristische Länge
$e$	J/kg	spezifische innere Energie
$E$	J/kg	Gesamtenergie
$f$	m/s <sup>2</sup>	Volumenkraft
$j_{\alpha i}$	kg/(m <sup>2</sup> s)	Diffusionsmassenfluss von $\alpha$ in $i$ -Richtung
$k$	m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>	turbulente kinetische Energie
$l$	m	Länge
$\dot{m}$	kg/s	Massenstrom
$M_{\alpha}$	kg/mol	Molare Masse der Komponente $\alpha$
$p$	N/m <sup>2</sup>	statischer Druck
$R$	J/(kgK)	spezifische Gaskonstante
$S_r$	J/(m <sup>3</sup> s)	Strahlungsquellterm
$S_{\alpha}$	kg/(m <sup>3</sup> s)	chemischer Quell- und Senkenterm der Komponente $\alpha$
$t$	s	Zeit
$T$	K	Temperatur
$u$	m/s	Geschwindigkeit
$Y_{\alpha}$		Spezies-Massenanteil
<i>Griechische Symbole</i>		
$\Gamma$	m <sup>2</sup> /s	Diffusionskoeffizient
$\varepsilon$	m <sup>2</sup> /s <sup>3</sup>	Dissipationsrate von $k$
$\eta$	kg/(ms)	dynamische Viskosität
$\kappa$	-	Isentropenexponent
$\lambda$	-	Brennkammerluftzahl
$\mu_T$	kg/(ms)	Wirbelviskosität
$\nu$	m <sup>2</sup> /s	kinematische Viskosität
$\nu', \nu''$	-	Stöchiometriekoeffizient Edukt, Produkt
$\phi$		Brennstoffverhältnis
$\rho$	kg/m <sup>3</sup>	Dichte
$\tau_{ij}$	kg/(ms <sup>2</sup> )	Element des Spannungstensors
$\zeta$		Druckverlustbeiwert
<i>Ähnlichkeitskennzahlen</i>		
$Ma$		Machzahl
$Re$		Reynoldszahl
<i>Indizes</i>		

r	r-Koordinate
x	x-Koordinate
y	y-Koordinate
$\alpha$	Komponente $\alpha$

*Abkürzungen*

DLR	Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrttechnik
CFD	Computational Fluid Dynamics
FLOX <sup>®</sup>	Flameless Oxidation
RANS	Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations
URANS	Unsteady Reynolds-Averaged Navier-Stokes equations
LES	Large Eddy Simulation
$AFR_{st}$	stöchiometrisches Luft-Brennstoffverhältnis
EDM	Eddy Dissipations Modell
FRC	Finite Rate Chemistry Modell
KWK	Kraft-Wärme-Kopplungssysteme
TOT	Turbinenausstrittstemperatur
AE	Ansaldo Energia
CAD	Computer Aided Design
ThetaCOM	Turbulent Heat Release Extension of TAU
DSD	Definitive Screening Design
RMSE	Root Mean Squared Error

# Abbildungsverzeichnis

2.1	Schematische Darstellung Drallstabilisierung (Hasemann-Seeger, 2020) . . . . .	3
2.2	Vergleich der Drallstabilisierung mit der Jetstabilisierung (Hohloch et al., 2023) . . . . .	5
2.3	Schematische Darstellung der Brennkammer der AE-T100 (Zanger, 2016) . . . . .	7
2.4	F400n FLOX <sup>®</sup> -Brenner (Zanger, 2016) . . . . .	8
3.1	Vergleich einer laminaren mit einer turbulenten Strömung (Schwarze, 2012) . . . . .	15
3.2	Vergleich Originalströmung und Reynolds-Mittelung (Schwarze, 2012) . . . . .	16
3.3	Vergleich eines strukturierten Gitters (links) und eines nicht strukturierten Gitters (rechts) (Ferziger und Perić, 2008) . . . . .	26
3.4	CO-Bildung in einer Gasturbinenbrennkammer (Joos, 2006) . . . . .	29
3.5	Grafische Darstellung der Effektberechnung (Siebertz et al., 2010) . . . . .	31
4.1	Vereinfachtes geometrisches Modell der F400h-Brennkammer . . . . .	36
4.2	Rechengitter für die Simulation der reaktiven Brennkammerströmung . . . . .	37
4.3	Detailansicht der Verfeinerungszone der Luftdüse . . . . .	37
4.4	Variierte Geometrieparameter . . . . .	41
4.5	Definition des Brennraumvolumens, der Flammenlänge und der Abhebehöhe . . . . .	43
4.6	Ablauf der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung der Simulationen . . . . .	47
4.7	Schritte der Simulation . . . . .	48
4.8	Isofläche basierend auf der OH-Flammendefinition von 30% . . . . .	49
4.9	Punkte im Rechengebiet mit Referenzdruck (gelb) . . . . .	50
5.1	Wärmefreisetzung der gesamte Domain über die Iterationen (oben) und Residuen über die Iterationen (unten) . . . . .	52
5.2	Verteilung der OH-Stoffmengenkonzentration des Mittelpunktsversuchs . . . . .	53
5.3	Flamme gemäß der OH-Flammendefinition . . . . .	54
5.4	Verteilung der Absolutgeschwindigkeit (links) und Stromlinien des Mittelpunktsversuchs (rechts) . . . . .	55
5.5	Totaldruckverteilung und Isolinien einer Geschwindigkeit von Null in Axialrichtung des Mittelpunktsversuchs . . . . .	56
5.6	Verteilung des lokalen Luftverhältnisses des Mittelpunktsversuchs . . . . .	57
5.7	Flammenrückschlag in der Simulation 1 . . . . .	58
5.8	Abhebehöhe berechnet bei verschiedenen Iterationen der Simulation 1 . . . . .	59
5.9	Flammenstabilisierung nahe der mageren Verlöschgrenze in Simulation 13 . . . . .	60
5.10	Verteilung der Absolutgeschwindigkeit in Simulation 13 . . . . .	61
5.11	Haupteffekte auf die NO <sub>x</sub> -Emissionen . . . . .	62
5.12	NO <sub>x</sub> -Messungen des F400s.3-Brenners auf einem atmosphärischen Prüfstand mit unterschiedlichen Brennstoffzusammensetzungen (Hohloch et al., 2023) . . . . .	63
5.13	NO <sub>x</sub> -Emissionen für verschiedene Luftzahlen . . . . .	63
5.14	Vergleich des DSD-Modells mit experimentellen NO <sub>x</sub> -Messungen von Hohloch et al. (2023) . . . . .	64

---

5.15	NO <sub>x</sub> -Emissionen von Validierungspunkt 1 aus dem DSD-Modell . . . . .	65
5.16	NO <sub>x</sub> -Emissionen von Validierungspunkt 2 aus dem DSD-Modell . . . . .	65
5.17	Haupteffekte auf die CO-Emissionen . . . . .	66
5.18	Verteilung der CO-Konzentration und Stromlinien für $l_{\text{misch}} = 3,64$ mm (links) und $l_{\text{misch}} = 18,24$ mm (rechts) im Vergleich . . . . .	67
5.19	CO-Messungen des F400s.3-Brenners auf einem atmosphärischen Prüfstand mit unterschiedlichen Brennstoffzusammensetzungen (Hohloch et al., 2023) . .	68
5.20	CO-Emissionen für verschiedenen Luftzahlen und Randbedingungen des F4003.s- Brenner äquivalent nach Hohloch et al. (2023) . . . . .	68
5.21	Vergleich des DSD-Modells (gelb) mit experimentellen CO-Messungen von Hoh- loch et al. (2023) . . . . .	69
5.22	CO-Emissionen von Validierungspunkt 1 aus dem DSD-Modell . . . . .	69
5.23	CO-Emissionen von Validierungspunkt 2 aus dem DSD-Modell . . . . .	70
5.24	Haupteffekte auf den Brennertotaldruckverlust . . . . .	70
5.25	Haupteffekte auf die Verteiltheit der Flamme . . . . .	72
5.26	Flammenform und Verteiltheit für verschiedenen Luftzahlen . . . . .	73
5.27	Haupteffekte auf die Abhebehöhe der Flamme . . . . .	74
5.28	Abhebehöhe für verschiedene Parametereinstellungen . . . . .	75
5.29	Haupteffekt auf die Flammenlänge . . . . .	75
5.30	Flammenlänge für verschiedene Luftzahlen . . . . .	76

# Tabellenverzeichnis

3.1	Beispiel eines Definitive Screening Designs mit sechs Faktoren (Jones und Nachtsheim, 2011) . . . . .	33
4.1	Randbedingungen des Referenzfalls . . . . .	38
4.2	Mögliche Geometrieparameter und Betriebsparameter . . . . .	40
4.3	Betriebsparameter und deren Formelzeichen . . . . .	40
4.4	Geometrieparameter und deren Formelzeichen . . . . .	41
4.5	Betriebsparameter und deren Grenzen . . . . .	42
4.6	Geometrieparameter und deren Grenzen . . . . .	42
4.7	Zielgrößen und deren Formelzeichen . . . . .	43
4.8	Versuchsmatrix des Definitive Screening Designs aus JMP . . . . .	46
5.1	Parametereinstellungen des Mittelpunktversuchs . . . . .	51
5.2	Parametereinstellungen der Simulation mit Flammenrückschlag . . . . .	58
5.3	Prozentualer Fehler der mit den DSD-Modellen vorhergesagten Zielgrößen zu den Validierungspunkten . . . . .	77
A.1	Werte der Zielgrößen in den Simulationen . . . . .	85



# 1 Einleitung

Die Elektrizitätsversorgung der Zukunft muss vielfältigen Anforderungen genügen. Sie soll nachhaltig, dezentral, effizient, kostengünstig und emissionsarm sein. Die Mitgliedstaaten der Europäischen Union haben gemeinsam im „Green Deal“ eine Reduktion der Treibhausgasemissionen von 55% gegenüber 1990 festgelegt (EU-Kommission, 2023). Die Abkehr von fossilen Brennstoffen ist für die Dekarbonisierung der Elektrizitätsversorgung und das Erreichen der gesetzlichen Zielsetzungen zwingend notwendig. Einzelne Technologien, wie Windkraft oder Photovoltaik, können auch aufgrund ihrer intermediaten Natur, die wachsende Elektrizitätsnachfrage nicht allein decken. Die Elektrizitätsversorgung der Zukunft muss daher unterschiedliche Technologien in einem dezentralisierten Energiesystem kombinieren.

Mikrogasturbinen zeichnen sich durch eine hohe Brennstoffflexibilität aus, ermöglichen einen dezentralen Einsatz, haben geringe Wartungskosten und vergleichsweise geringe Emissionen auch ohne Abgasbehandlung und können schnell auf Lastschwankungen reagieren (Banihabib et al., 2023). Darüber hinaus ermöglichen Mikrogasturbinen auch die Einbindung in Kraft-Wärme-Kopplungssysteme (KWK). Bei diesen wird die Abwärme aus der Turbine zur Bereitstellung von Gebäude- oder Prozesswärme genutzt und so der Gesamtwirkungsgrad des Systems gesteigert. Mikrogasturbinen stellen bei der Verwendung von CO<sub>2</sub> neutralen Brennstoffen, wie Wasserstoff, eine wichtige Komponente der Transformation hin zu einer nachhaltigen Elektrizitätsversorgung dar (Banihabib und Assadi, 2022).

Die Verwendung neuer Brennstoffe erfordert die Entwicklung neuer oder die Verbesserung bestehender Verbrennungskonzepte, um eine effiziente, emissionsarme und stabile Verbrennung zu ermöglichen. Ein solches Konzept ist das FLOX<sup>®</sup>-Konzept (engl.: Flameless Oxidation). Dieses ermöglicht, auch bei stark vorgemischtem mageren Bedingungen eine verbesserte Verbrennungsstabilität und geringere Emissionen im Vergleich zu klassischen Verbrennungskonzepten (Hohloch et al., 2023). Das Institut für Verbrennungstechnik des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR) in Stuttgart forscht intensiv an der Entwicklung und Optimierung dieser Verbrennungstechnologie für die Verbrennung von reinem Wasserstoff, mit Wasserstoff angereicherten Brennstoffen und Schwachgasen aus Reststoffen. Der Fokus liegt hierbei auf der Minderung der Emissionen und des Druckverlusts zur Steigerung des Wirkungsgrads der Turbine. Ein weiteres Ziel ist die Steigerung der Brennstoffflexibilität der Mikrogasturbinen, wobei aktuell die Spezialisierung einer Brennerkonfiguration auf hochkalorische Brenngase erfolgt. Die Brennkammerentwicklung basiert am Institut auf CFD-Simulationen. Die Vorauslegung der Brennkammer und die Wahl der Randbedingungen für die Simulationen basiert aktuell vorwiegend auf Erfahrungswerten und qualitativen Analysen. Es fehlt die Quantifizierung des Einflusses unterschiedlicher Parameter und die Prognose der Zielgrößen bei entsprechender Variation der Parameter. Die Parametervariation ist ein wichtiger Schritt, um die Brennkammerentwicklung zukünftig zielgerichteter gestalten zu können.

Ziel der vorliegenden Arbeit ist die Quantifizierung des Einflusses unterschiedlicher Designparameter der Brennkammerentwicklung. Der Fokus liegt hierbei auf der Identifikation der Betriebs- und Geometrieparameter, die einen signifikanten Einfluss auf die Flammenform, auf die Stabilität der Verbrennung, auf den Brennkammerdruckverlust und auf die Emissionen haben. Diese systematische Analyse wird auf Basis von numerischen Verbrennungssimulationen eines vereinfachten FLOX<sup>®</sup>-Brennkammermodells durchgeführt. Für die Versuchsplanung und zur Auswertung wird die Methodik „Definitive Screening Design“, aus der statistischen Versuchsplanung angewendet. Dies ermöglicht die Identifikation signifikanter Effekte mit einer vergleichsweise geringen Anzahl an Versuchen. „Screening Designs“ werden für eine erste systematische Analyse eingesetzt, um die Parametervariationen zu finden, die den größten Effekt auf die Zielgrößen verursachen. Nachfolgend können detailliertere Methodiken aus der statistischen Versuchsplanung angewendet werden, um auch die Signifikanz Effekte höherer Ordnung genauer quantifizieren zu können. Zusätzlich soll die Fähigkeit von Definitive Screening Designs bewertet werden, Optimierungen aus einer begrenzten Anzahl an Simulationen abzuleiten und die Anwendbarkeit dieser Methodik im CFD-Bereich zu überprüfen. Die Arbeit soll also die Grundlage für zukünftige detailliertere Studien am Institut legen. Basierend auf diesen Studien lassen sich vereinfachte Modelle entwickeln, die eine Beschreibung der Zielgrößen in Abhängigkeit von Betriebs- und Geometrieparametern erlauben und somit verbesserte Prognosen während der Vorauslegung der Brennkammern ermöglichen.

## 2 Stand der Forschung

### 2.1 Die Verbrennungstechnologie Flameless Oxidation

Für die Ausbildung einer stabilen Flamme müssen drei Faktoren gegeben sein. Zunächst ist eine zündfähige Luft-Brennstoffmischung erforderlich. Der Bereich der Zündfähigkeit wird dabei durch das Verhältnis von Luft und Brennstoff sowie durch die Verbrennungseigenschaften des Brennstoffs definiert. Die Verbrennungstemperatur muss dauerhaft über der Zündtemperatur des Gemisches liegen. Zuletzt muss sich das zündfähige Luft-Brennstoffgemisch länger als die Zündverzugszeit in einem Bereich aufhalten, der eine Zündung ermöglicht.

Diese Bedingungen werden in Gasturbinenbrennkammern durch die Rezirkulation von heißen, verbrannten Abgasen eingestellt. Die Durchmischung der Frischgase mit den heißen Abgasen ermöglicht dabei das Erreichen der nötigen Verbrennungs-temperatur. In der Gasturbinenverbrennung werden zwei unterschiedliche Ansätze genutzt, um eine interne Abgasrezirkulation zur Flammenstabilisierung zu erzielen. Diese sind die Jetstabilisierung, welche auch in der von Wüning, J.A. und Wüning (1997) entwickelten Verbrennungstechnologie Flameless Oxidation (FLOX<sup>®</sup>) zur Anwendung kommt und die Drallstabilisierung. Die Drallstabilisierung ist die heute vorherrschende Flammenstabilisierung in Mikrogasturbinen. Die Drallstabilisierung basiert auf der Aufprägung eines Dralls auf das in die Brennkammer eintretende Luft-Brennstoffgemisch. Der aufgeprägte Drall erzeugt ein Druckfeld in der Brennkammer, was zu der Ausbildung einer inneren Rezirkulationszone und einer äußeren Rezirkulationszone, die tonusförmig um die Drallströmung angeordnet ist, führt. Die verschiedenen Rezirkulationszonen sind in Abbildung 2.1 schematisch dargestellt.

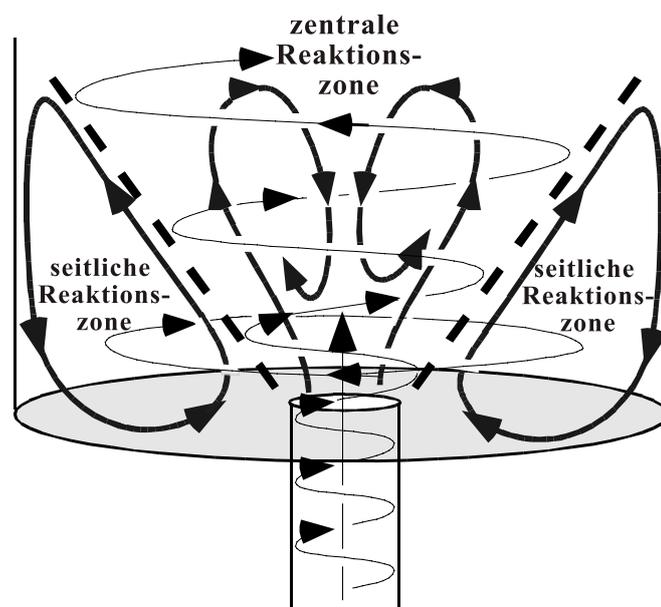


Abbildung 2.1: Schematische Darstellung Drallstabilisierung (Hasemann-Seeger, 2020)

Die Flammenfront stabilisiert sich in den hochturbulenten Scherschichten dieser Rezirkulationszonen. Drallstabilisierte Brenner zeigen kompakte Flammen mit hoher Leistungsdichte und können niedrige  $\text{NO}_x$  und CO Emissionen erzeugen (Hasemann-Seeger, 2020).

Die Verbrennungstechnologie Flameless Oxidation (FLOX<sup>®</sup>) ist in der Literatur auch unter „Moderate or Intense Low-oxygen Dilution Combustion“ (MILD), (Li et al., 2011) oder unter „High Temperature Air Combustion“ (HiTAC), (Tsuji et al., 2003) zu finden. Das FLOX<sup>®</sup>-Prinzip wurde ursprünglich für industrielle Öfen entwickelt und wird in diesem Bereich kommerziell genutzt (Wünning und Wünning, 2007). Es kommt heute auch in Gasturbinen zum Einsatz. Die FLOX<sup>®</sup>-Verbrennung zeichnet sich, sofern sie im FLOX<sup>®</sup>-Regime betrieben wird, durch eine geringe Leuchtkraft aus, sodass sie im sichtbarem Spektralbereich kaum zu sehen ist. Gasturbinen werden typischerweise nicht im FLOX<sup>®</sup>-Regime betrieben, da die Brenner im Gegensatz zu ihrem ursprünglichen Anwendungsfall, dem Ofenbau, über einen weiten Betriebsbereich betrieben werden müssten. Die Verwendung des FLOX<sup>®</sup>-Konzepts in Gasturbinen führt zu Flammen, die räumlich weiter verteilt sind im Vergleich zu den Flammen der Drallstabilisierung. Das DLR bezeichnet seine Brenner für Mikrogasturbinen daher als jetstabilisierte Brenner.

Der Vergleich der Betriebsbereiche der jetstabilisierten Brenner und der Drallbrenner zeigt, dass der Betriebsbereich der Drallbrenner kleiner ist. Bei mageren Bedingungen und hohem Vormischgrad tendiert die Drallstabilisierung zu thermoakustischen Instabilitäten, welche den Verbrennungsprozess unterbrechen und starke Druckschwankungen sowie hohe Emissionen hervorrufen können (Zanger et al., 2015). Ebenfalls erhöht sich bei der Verbrennung von Wasserstoff das Risiko von Flammenrückschlägen und der Selbstzündung des Brennstoffs in der Mischungszone (Hohloch et al., 2023). Verschiedene Brennstoffe und Brennstoffgemische weisen unterschiedliche Heizwerte auf, wodurch das Erreichen einer stabilen Verbrennung erschwert wird. Jet-stabilisierte Brenner verfügen hingegen über eine hohe Brennstoffflexibilität, da die sehr hohe Düsenaustrittsgeschwindigkeit die magere Verlöschgrenze zu einer höheren Luftzahl verschiebt (Zanger, 2016) und eine zuverlässige Flammenstabilisierung trotz unterschiedlicher Heizwerte möglich ist (Mosca et al., 2013).

In Abbildung 2.2 sind die beiden Stabilisierungsarten schematisch dargestellt. Die Jetstabilisierung basiert auf der Eindüsung des Brennstoffs mit einem hohen axialen Impuls. Die hohe Austrittsgeschwindigkeit des Luft-Brennstoffgemischs führt zu einer starken Rezirkulation der heißen Abgase und zu der Ausbildung einer volumetrisch großen Reaktionszone (Hohloch et al., 2023). Die Reaktionszone der Jetstabilisierung weist, wie in Abbildung 2.2 zu sehen, ein wesentlich größeres Volumen auf, als die Reaktionszone der Drallstabilisierung. Die kompakte Reaktionszone von drallstabilisierten Flammen ist der Grund für deren hohe Leistungsdichte. Es ist zu erkennen, dass der Bereich der Rezirkulation bei der Jetstabilisierung wesentlich größer ist.

Die Abbildung 2.2 zeigt, dass die Drallstabilisierung einen Drallkörper benötigt, der dem Luft-Brennstoffgemisch den benötigten Drall beim Eintritt in die Brennkammer aufprägt. Durch diese Strömungsumlenkung wird in der Regel ein größerer Brennerdruckverlust erzeugt als durch die höheren Strömungsgeschwindigkeiten der jet-stabilisierten Brenner.

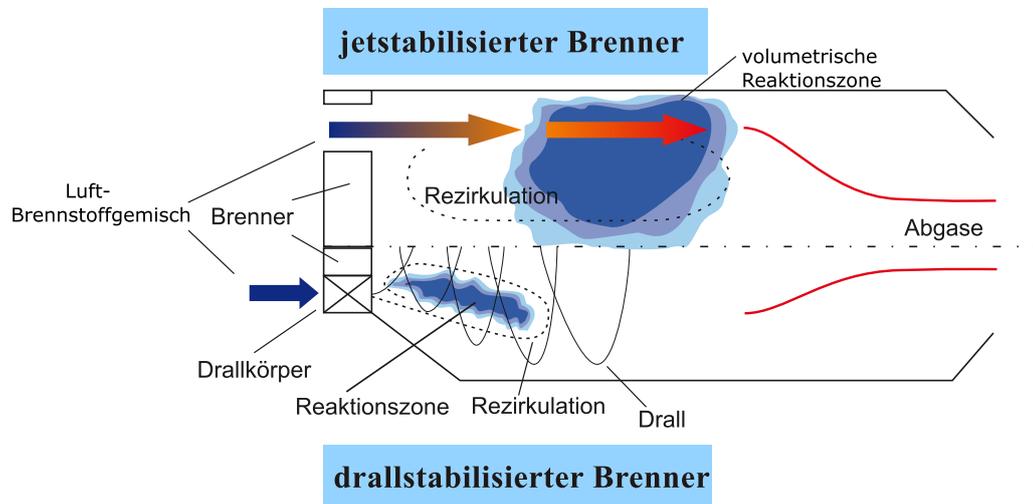


Abbildung 2.2: Vergleich der Drallstabilisierung mit der Jetstabilisierung (Hohloch et al., 2023)

Die hohe Rezirkulationsrate der Abgase der Jetstabilisierung hat einen starken Einfluss auf die Verbrennung. Sie gewährleistet, vor dem Einsetzen der chemischen Reaktion, eine intensive Vermischung des heißen Abgases mit der Frischluft. Die Mischung stabilisiert die Flamme, führt zu einer homogenen Temperaturverteilung und verringert die Reaktionsraten der Verbrennung (Zanger et al., 2015). Aus der Verringerung der Reaktionsraten resultiert auch das hohe Reaktionsvolumen (Lückerath et al., 2007). Die homogene Temperaturverteilung und damit einhergehende Vermeidung von Temperaturspitzen, führt zu geringeren  $\text{NO}_x$ -Emissionen im Betrieb (Banihabib et al., 2023).

Lückerath et al. (2007) zeigte, dass die Düsenaustrittsgeschwindigkeit des Luft-Brennstoffgemischs einen großen Einfluss auf die Durchmischung in der Brennkammer hat. Mit der Steigerung der Düsenaustrittsgeschwindigkeit erhöht sich der Betriebsbereich niedriger Emissionen (Lückerath et al., 2007). Die hohe Düsenaustrittsgeschwindigkeit der FLOX<sup>®</sup>-Verbrennung führt auch zu einer hohen Widerstandsfähigkeit gegenüber Flammenrückschlägen, auch bei stark vorgemischten Bedingungen und der Verbrennung mit hohem Wasserstoffanteil (Zanger et al., 2015). Sadanandan et al. (2011) untersuchten den Einfluss der Vormischung von Brennstoff und Luft auf die Verbrennungseigenschaften bei hohem Druck durch die Verwendung von beweglichen Brennstoffdüsen in der Mischungszone. Sie fanden heraus, dass bei fester Luftzahl, die Rezirkulationsrate der Abgase einen wesentlichen Einfluss auf die Emissionen hat. Die  $\text{NO}_x$ -Emissionen waren unter weniger vorgemischte Bedingungen, geringer. Die Forschenden erklärten dies mit der späteren Entzündung des Gemisches und einer daraus folgenden besseren Vermischung zwischen den rezirkulierenden Abgasen und der Frischluft (Sadanandan et al., 2011).

Jetstabilisierte Brennkammersysteme kommen heute vereinzelt in Gasturbinen und Mikrogasturbinen kommerziell zum Einsatz. Siemens nutzt das gemeinsam mit dem Deutschen Zentrum für Luft und Raumfahrt weiter entwickelte Brennerkonzept in der SGT6-Gasturbine. Diese Gasturbine verfügt über eine Leistungsabgabe von 440 MW und eine hohe Brennstoffflexibilität. Beim Einsatz in einem Gas- und Dampf-Kombikraftwerk wird ein Wirkungsgrad von bis zu 64% erreicht (Krebs et al., 2022). Darüber hinaus wird eine vom Institut für Verbrennungstechnik entwickelte Brennkammer für die Ansaldo Green Tech SpA T100 Mikrogasturbine eingesetzt. Das Institut für Verbrennungstechnik des DLR in Stuttgart forscht an der Optimierung und Weiterentwicklung des FLOX<sup>®</sup>-Konzepts und an der Integration von jetstabilisierten Brennern in Gasturbinen. Im folgenden Abschnitt 2.2 werden die vom Institut entwickelten Brenner detailliert beschrieben. Sie dienen als Grundlage für die im Rahmen dieser Arbeit untersuchte Konfiguration.

## 2.2 Die F400h Brennkammer

Die F400h Brennkammer wird speziell für die Ansaldo Green Tech SpA T100PH Mikrogasturbine entwickelt, mit dem Ziel die stabile Verbrennung von mit Wasserstoff angereicherten Brennstoffen oder reinem Wasserstoff zu ermöglichen. Der Fokus in der Entwicklung liegt hier auch auf der Einhaltung und Unterschreitung der gesetzlichen Emissionsgrenzwerte.

Die AE-T100PH Mikrogasturbine, produziert von Ansaldo Green Tech SpA findet Anwendung in Kraft-Wärme-Kopplungsanlagen. Die Mikrogasturbine basiert auf dem regenerativem Brayton-Kreis-Prozess und kann im Auslegungspunkt eine elektrische Leistung von 100 kW erzeugen. Die Turbine erreicht bei Volllastbedingungen einen elektrischen Wirkungsgrad von 30% mit einem maximalen Luftmassenstrom von 0,8 kg/s bei einem Druckverhältnis von 4,5. Sie verfügt weiter über einen Radialverdichter und eine Radialturbine, die gemeinsam mit einem permanent erregten Asynchrongenerator auf einer Welle montiert sind. In die Turbine ist ebenfalls ein Wasser-Wärme-Tauscher zur Auskopplung von Nutzwärme integriert (Zanger et al., 2015).

Die Brennkammer der AE-T100 ist in Abbildung 2.3 schematisch dargestellt. Die Brennkammer ist als koaxiale Topfbrennkammer ausgeführt. Das Flammrohr und der Brenner sind auf einer Grundplatte montiert, welche in einen Gusskörper eingeschraubt wird. Die auf ca. 600°C vorgeheizte Prozessluft, wird aus dem Abgasrekuperator bei 4 bar durch einen äußeren Ringkanal eingebracht. Im Flammrohr sind nahe dem Einlass neun Mischluftbohrungen in Umfangsrichtung angeordnet, durch welche ca. 60% des Prozessluftmassenstroms direkt in den Brennraum, also in die Sekundärzone des Brennraums geleitet wird. Der verbleibende Massenstrom wird entlang des Flammrohrs zum Brenner geführt, beim Einlass um 180° umgelenkt und danach zur Oxidation des Brennstoffs in der Primärzone genutzt. Die heißen Abgase der Verbrennung strömen entgegengesetzt zur Frischluft durch den Brennraum und vermischen sich am Eintritt der Mischluftbohrungen mit der einströmenden Frischluft. Durch die Beimischung der Frischluft wird sichergestellt, dass die Brennkammeraustrittstemperatur von weit über 1000°C auf unter 950°C abgesenkt wird.

Die Temperaturabsenkung ist zwingend notwendig, da sonst die maximal zulässige Materialtemperatur der ungekühlten Schaufeln überschritten wird. Die Gestaltung der Brennergeometrie sowie der Mischluftbohrungen beeinflussen direkt die Aufteilung der Prozessluft zwischen der Primärzone und der Sekundärzone der Verbrennung. Sie stellen wichtige Designparameter der Brennerentwicklung dar (Zanger, 2016).

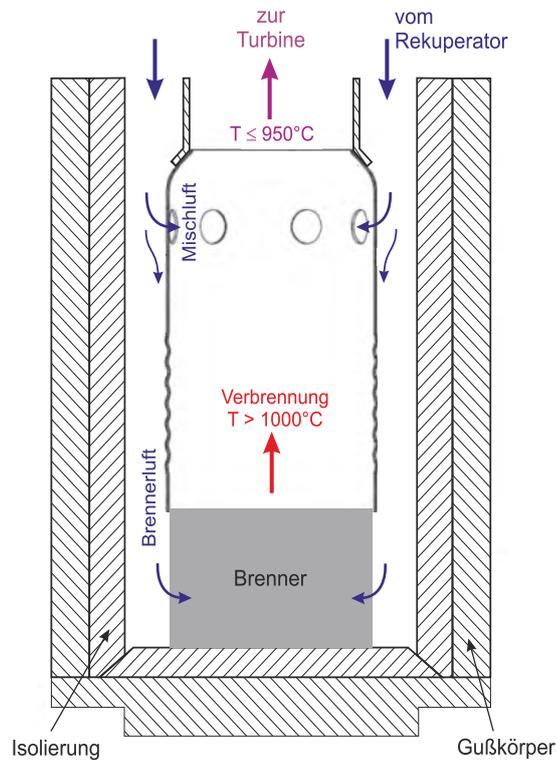


Abbildung 2.3: Schematische Darstellung der Brennkammer der AE-T100 (Zanger, 2016)

Der Standardbrenner der AE-T100 besteht aus einer drallstabilisierten Hauptstufe, die für den Betrieb mit Erdgas unter mageren Vormischbedingungen ausgelegt ist. Um die Stabilität der Flamme zu gewährleisten, ist der Brenner mit einer zusätzlichen drallstabilisierten Pilotstufe ausgestattet. Laut Herstellerangaben beträgt die maximale thermische Brennkammerleistung unter Volllastbedingungen 333kW. Im stationären Arbeitsbereich erfolgt die Regelung des Brennstoffmassenstroms in der Hauptstufe mittels der MGT-Regelung, um die geforderte Turbinenaustrittstemperatur (TOT) bei einer vorgegebenen elektrischen Leistung bzw. Turbinendrehzahl zu erreichen. Der Brennstoffmassenstrom über den Pilot wird hingegen über eine Pilotmappe gesteuert, die diesen in Abhängigkeit von Turbinendrehzahl, geforderter TOT, Brennstoffvordruck und -heizwert festlegt (Zanger, 2016).

Am Institut für Verbrennungstechnik des DLR wurden zahlreiche Forschungsprojekte mit der AE-T100 durchgeführt. Zanger (2016) hat ein erdgasbetriebenes, FLOX<sup>®</sup>-basiertes Brennersystem für die AE-T100 entwickelt, welches im gesamten Lastbereich zuverlässig und emissionsarm betrieben werden kann. Das von Zanger entwickelte System stellt die erste Version des zweistufigen FLOX<sup>®</sup>-Brennkammersystems zur Verbrennung von Erdgas dar und hat die Be-

zeichnung F400n.1. Die Entwicklung des Brenners wurde auf Basis der Analyse des Verbrenungsverhaltens, der Abgasemissionen und des möglichen Arbeitsbereiches eines einstufigen teilvorgemischten FLOX<sup>®</sup>-Brenners durchgeführt. Die Analyse zeigte die Notwendigkeit der Verbesserung der Flammenstabilisierung im Teillastbereich. Die geforderte zusätzliche Stabilisierung im Teillastbereich wurde durch die Entwicklung eines zweistufigen Brennerkonzepts, mit einer zentral angeordneten, drallstabilisierten Pilotstufe realisiert. Durch die Integration der Pilotstufe konnte der Arbeitsbereich bei Teillast erweitert werden (Zanger, 2016).

Die Hauptstufe besteht aus 20 ringförmig angeordneten Luftdüsen, in die der Brennstoff koaxial eingebracht wird. In Abbildung 2.4 ist ein schematischer Schnitt des F400n.1 dargestellt. Das Luft-Brennstoffgemisch wird mit einem hohen axialen Impuls in die Brennkammer eingebracht und erzeugt so eine zentrale, weit ausgedehnte Rezirkulationszone. Die Pilotstufe befindet sich nach hinten versetzt in einem Pilotdom auf der Brennerachse. Ein Teil der Prozessluft wird aus dem Luftplenum entnommen und durch zehn Drallerzeugerbohrungen in die Vormischstrecke des Pilotbrenners eingeleitet. Durch den Drall fächert die Strömung der heißen Pilotabgase am Austritt des Pilotdoms radial auf und vermischt sich mit den Frischgasjets der Hauptstufe. Die Beimischung der heißen Abgase am Austrittsbereich der FLOX<sup>®</sup>-Düsen verbessert die Stabilität der Flamme und ermöglicht eine stabile Verbrennung an kritischen Lastpunkten. In der abschließenden ersten Optimierung des Brennstoffaufteilung zwischen Hauptstufe und Pilotstufe hinsichtlich der Abgasemissionen konnte Zanger NO<sub>x</sub>-Emissionen von 5 ppm (bei 15% Vol-% O<sub>2</sub>), CO-Werte von 20 ppm und einen relativen Brennerdruckverlust von 2,9% erreichen. Die gemessenen Emissionen liegen damit deutlich unter den gesetzlichen Grenzwerten und der Brennerdruckverlust konnte, im Vergleich zum Originalbrenner, wesentlich gesenkt werden (Zanger, 2016).

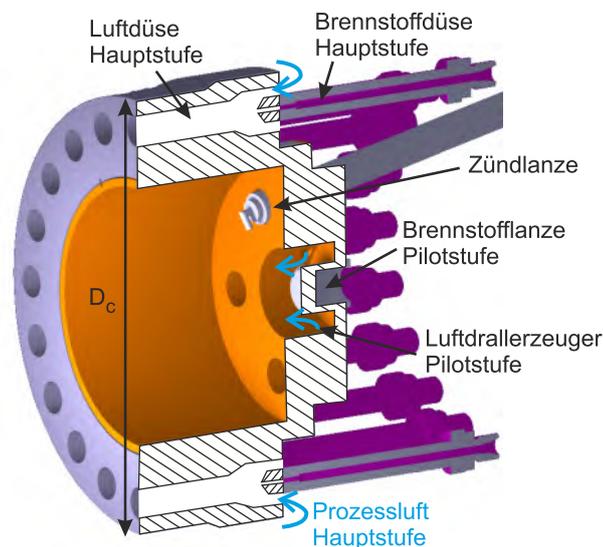


Abbildung 2.4: F400n FLOX<sup>®</sup>-Brenner (Zanger, 2016)

Zornek (2019) entwickelte ein zweistufiges FLOX<sup>®</sup>-Brennkammersystem mit der Bezeichnung F400s.1 für die AE-T100, welches den Betrieb der Mikrogasturbine mit reinem Holzgas und

anderen Schwachgasen ermöglicht. Das Brennersystem gewährleistet eine zuverlässige und effiziente Verbrennung und sorgt für einen stabilen Betrieb der Mikrogasturbine über den gesamten Betriebsbereich. Der Hauptunterschied im Aufbau des Systems zu dem von Zanger (2016) entwickelten Brennkammersystem F400n.1 besteht in der Düsenanzahl und der Art des verwendeten Brennstoffes. Die Hauptstufe des von Zornek (2019) entwickelten Brennkammersystems hat zehn FLOX<sup>®</sup>-Düsen. Das entwickelte Brennkammersystem ermöglicht weiter einen lastflexiblen Betrieb der Mikrogasturbine, da die Emissionsgrenzwerte über den gesamten Betriebsbereich eingehalten werden. Zornek konnte ebenfalls eine Steigerung der Anlageneffizienz durch die Absenkung des Druckverlusts um 30% gegenüber der Originalbrennkammer erreichen. Die hohe Brennstoffflexibilität und stabile Verbrennung über einen breiten Betriebsbereich ermöglicht den Einsatz der Turbine in unterschiedlichsten Anwendungsfällen. (Zornek, 2019)

Schwärzle et al. (2016) haben eine detaillierte Studie mit dem F400n.1 durchgeführt, in der sich zeigte, dass die drallstabilisierte Hauptstufe den Großteil der NO<sub>x</sub>-Emissionen verursacht. Es wurde weiter eine Geometrieoptimierung des Brenners von Schwärzle et al. (2017) durchgeführt, durch welche die Emissionen weiter gesenkt werden konnten.

Bower et al. (2020) haben den optimierten F400s.2 hinsichtlich der Brennstoffflexibilität auf einem atmosphärischen Prüfstand untersucht. Die Forschenden konnten eine erhöhte Abhebehöhe der Flamme und niedrigere magere Verlöschgrenzen in den Experimenten beobachten. Die NO<sub>x</sub>-Emissionen des optimierten Systems waren niedriger im Vergleich zum F400s.2 und die CO-Emissionen etwas höher. Die leichte Steigerung von CO führten die Forschenden auf die erhöhte Abhebehöhe zurück. Die Untersuchung auf dem atmosphärischen Prüfstand zeigte hingegen auch, dass sich die Flamme über dem Brenner stabilisiert, ohne sich über eine schädliche Entfernung in die Brennkammer auszubreiten. Zusammenfassend konnten die Forschenden durch das optimierte Brennkammersystem eine höhere Brennstoffflexibilität und einen größeren Betriebsbereich bezüglich der NO<sub>x</sub> Emissionen erreichen (Bower et al., 2020).

Hohloch et al. (2023) haben das F400s-Brennkammersystem weiter optimiert. Der F400s.3 basiert dabei auf der Kombination von F400s.1 und F400s.2. Die Anpassungen am F400s.2 wurde vorgenommen, da eine im Vergleich zur ersten Version des Brenners erhöhte Abhebehöhe der Flamme bei der zweiten Version nachteilig für den Einsatz in Mikrogasturbinen ist. Die Forschenden untersuchten das Brennkammersystem hinsichtlich der Fähigkeit reinen Wasserstoff und Wasserstoff angereicherte Brennstoffe auf einem atmosphärischen Versuchsstand zu verbrennen. Es konnte eine stabile Verbrennung mit reinem Wasserstoff erreicht werden und der F400s.3 zeigte einen breiten Betriebsbereich. Hohloch et al. (2023) untersuchten ebenfalls den Einfluss der Variation der thermischen Leistung auf die Emissionen sowie die Flammenform und -position. Die Variation der thermischen Leistung führte zur Änderung der Düsenaustrittsgeschwindigkeit. Die Untersuchungen ergaben auch, dass die Geschwindigkeit unter Beachtung des Druckverlustes, hoch sein muss, um eine starke Rezirkulationszone zu erreichen. Die Analyse der Pilotstufe zeigte, dass sie einen geringeren Einfluss auf eine stabile Verbrennung bei reinem Wasserstoff hat, da die jetstabilisierte Hauptstufe über alle Betriebspunkte sehr stabil funktioniert. Die Forschenden zeigten, dass die Erhöhung des Wasserstoffanteils den Bereich niedriger Emissionen zu höheren Luftzahlen verschiebt.

Der optimale Betriebsbereich für die Verbrennung von reinem Wasserstoff ist folglich oberhalb einer Brennkammerluftzahl von  $\lambda = 3$ . Für die Anwendung in der Mikrogasturbine muss also die Aufteilung der Luft auf Primär- und Sekundärzone durch eine Modifikation der Mischluftbohrungen angepasst werden. Es zeigte sich ebenfalls, dass sich die Flammenform von klar definierten einzelnen Flammen nah am Brennkammereintritt zu einer verteilten abgehobenen Flammenzone mit der Erhöhung des Erdgasanteils im Brennstoff veränderte. Die gemessenen  $\text{NO}_x$ -Emissionen waren unter fetten Bedingungen am höchsten und verringerten sich hin zu mageren Bedingungen unabhängig von der Brennstoffzusammensetzung. Das Emissionsniveau erhöhte sich ebenfalls mit sinkender thermischer Leistung, was die Forschenden auf die Verringerung der Düsenaustrittsgeschwindigkeit zurückführten. Eine geringere Düsenaustrittsgeschwindigkeit führte zu einer schwächeren Rezirkulationszone und damit auch zu einer weniger homogenen Temperaturverteilung. Diese führte zu höheren Spitzentemperaturen und dadurch auch höheren  $\text{NO}_x$ -Emissionen (Hohloch et al., 2023).

Das F400h-Brennkammersystem stellt eine Weiterentwicklung des F400s.3 dar und wurde speziell für die Wasserstoffverbrennung optimiert. Es handelt sich ebenfalls um ein zweistufiges System mit einer jetstabilisierten Hauptstufe und einer drallstabilisierten Pilotstufe. Die Pilotstufe soll, wie bei den F400n- und F400s-Systemen, die Flammenstabilität vor allem im Teillastbereich gewährleisten. Der Pilotdom ist ebenfalls nach hinten versetzt und die Hauptstufe verfügt über zehn FLOX<sup>®</sup>-Düsen. In diesen findet eine koaxiale Vermischung des Brennstoffs aus der nach hinten versetzten Brennstoffdüse und der Prozessluft statt. Je nach Betriebspunkt werden 5-15% des Brennstoffmassenstroms über die Pilotstufe geleitet. Bei Vollast ist der Brennstoffmassenstrom in der Pilotstufe und damit auch deren Einfluss auf die Flamme marginal. Die Geometrie der FLOX<sup>®</sup>-Düsen und die Durchmesser der Brennstoffdüsen sowie die Länge der Mischzone wurden basierend auf den Erkenntnissen aus den Untersuchungen des F400s Brennkammersystems entsprechend auf die Wasserstoffverbrennung optimiert. Da die Geometrie des F400h-Brenners und dessen detaillierte Beschreibung bisher noch nicht veröffentlicht sind, wird an dieser Stelle auf eine Darstellung verzichtet.

### 2.3 Herausforderungen der Wasserstoffverbrennung in Mikrogasturbinen

Wasserstoff spielt als Energieträger und Brennstoff eine wichtige Rolle in der Dekarbonisierung der Energieerzeugung. Wasserstoff wird in der künftigen Energieversorgung als Speichermedium dienen, um regenerativ erzeugten Überschussstrom chemisch zu speichern und diese Energie zu Bedarfszeiten in Gasturbinenkraftwerken nutzen zu können. Darüber hinaus ermöglicht die Nutzung von Wasserstoff anstelle fossiler Brennstoffe in Gasturbinen eine signifikante Reduktion der Treibhausgasemissionen, da bei der Verbrennung von reinem Wasserstoff keine  $\text{CO}_2$ -Emissionen auftreten. Des Weiteren hat Wasserstoff ein niedriges Gewicht und einen großen Entflammbarkeitsbereich, wodurch es sich für die Verbrennung in Turbomaschinen eignet (Banihabib et al., 2023). Allerdings birgt die Wasserstoffverbrennung einige Herausforderungen, da sich die Verbrennungseigenschaften von Wasserstoff und konventionellen Brennstoffen, wie Erdgas, signifikant unterscheiden. Die Verwendung von mit Wasserstoff angereicherten Brennstoffen oder reinem Wasserstoff in Gasturbinen erfordert sowohl eine Anpassung der

Brennkammer als auch anderer Teilsysteme.

Zuerst resultiert die Verbrennung von reinem Wasserstoff oder Brennstoffen mit hohem Wasserstoffgehalt in einer höheren adiabaten Flammentemperatur, was zu höheren  $\text{NO}_x$ -Emissionen führt und neue Anforderungen an die Brennkammerkühlung definiert (Cecere et al., 2023). Toof (1986) zeigte, dass ein signifikanter Teil der  $\text{NO}_x$ -Emissionen bei 1800K auftreten und bei weiteren Temperaturerhöhungen stark ansteigen. Die aus der Beimischung von Wasserstoff resultierende Temperaturerhöhung kann durch die Anwendung von mageren vorgemischten Verbrennungskonzepten, die mit hohen Rezirkulationsraten arbeiten, begrenzt werden (Banihabib et al., 2023). Wasserstoff zeichnet sich zusätzlich durch einen geringeren volumetrischen Heizwert als Erdgas aus, aus diesem Grund muss die Brennstoffversorgung höhere Volumenströme liefern können.

Wasserstoff kann darüber hinaus bei einem Luftverhältnis  $\lambda$  von 0,14 unter fetten Bedingungen und bis zu einem Luftverhältnis von zehn unter mageren Bedingungen verbrannt werden und ermöglicht so eine hohe Breite der Leistungsabgabe bei unterschiedlichen Luft-Brennstoffverhältnissen (Banihabib et al., 2023). Hohloch et al. (2023) konnten zeigen, dass eine stabile Verbrennung von Wasserstoff in der F400s-Brennkammer bis zu einer Luftzahl von mindestens 6,5 möglich ist. Höhere Luftzahlen konnten nicht getestet werden, da hierfür die Luftversorgung nicht ausreichte. Das Brennkammerdesign muss berücksichtigen, dass Wasserstoff auch bei sehr mageren Bedingungen eine stabile Verbrennung ermöglicht. Die Brennstoffdüsen sollten daher einen Strömungsquerschnitt aufweisen, der selbst bei niedrigen Massenströmen die erforderliche Geschwindigkeit erlaubt. Zusätzlich muss die Geometrie der Brennkammer so gestaltet sein, dass ein ausreichend hoher Luftmassenstrom für die magere Verbrennung realisiert werden kann. Die Aufteilung der Luft auf Primär- und Sekundärzone muss bei der Optimierung einer Brennkammer auf reine Wasserstoffverbrennung, durch die Anpassung der Mischluftbohrungen geändert werden. Dies ist notwendig, um deutlich magere Bedingungen in der Primärzone realisieren zu können.

Weiter führen Cecere et al. (2023) aus, dass die Verbrennung von Wasserstoff und von mit Wasserstoff angereicherten Brennstoffen in einer höheren Flammengeschwindigkeit resultiert, was das Risiko dynamischer Instabilitäten, wie Flammenrückschlägen, erhöht. Diese treten auf, wenn die Flammengeschwindigkeit die Anströmgeschwindigkeit des Luft-Brennstoffgemischs überschreitet. Die Forschenden weisen darauf hin, dass ein hoher Wasserstoffanteil zu thermoakustischen Instabilitäten führen kann. Diese können zu starken Druckschwankungen führen und damit den Verbrennungsprozess beeinflussen. (Cecere et al., 2023). Zusätzlich ist die Zündverzugszeit von Wasserstoff und von mit Wasserstoff angereicherten Brennstoffen im Vergleich zu Erdgas reduziert (Gersen et al., 2008). Dies erfordert eine angepasste Gestaltung der Vormischstrecke. Banihabib et al. (2023) stellen fest, dass die Verwendung von Wasserstoff die adiabate Flammentemperatur um  $6^\circ\text{C}$  gegenüber Erdgas anhebt, die Dichte verändert und den Volumenstrom erhöht. Diese Auswirkungen auf den Volumenstrom müssen bei der Brennkammerauslegung ebenfalls berücksichtigt werden. Die Verwendung von Wasserstoff in Gasturbinen erfordert eine sorgfältige Anpassung des Brennkammerdesigns an die spezifischen Verbrennungscharakteristika, um eine stabile und emissionsarme Verbrennung zu ermöglichen.



## 3 Grundlagen

In diesem Kapitel werden die zum Verständnis der vorliegenden Arbeit benötigten Grundlagen erläutert. Der Fokus liegt dabei auf der Vorstellung der zugrundeliegenden Gleichungen und Modelle von numerischen Verbrennungssimulationen, der Erläuterung der Emissionsbildung und einer kurzen Einführung in die statistische Versuchsplanung samt der verwendeten Methodik.

### 3.1 Grundgleichungen reaktiver Strömungen

Die Grundgleichungen reaktiver Strömungen sind partielle Differentialgleichungen. Sie bilden ein gekoppeltes Gleichungssystem, welches die vollständige Beschreibung kompressibler, reibungsbehafteter Strömungen ermöglicht. Die zu simulierende Strömung des Gasgemischs kann sich aus einer beliebigen Anzahl an Komponenten zusammensetzen und chemischer Umwandlung unterliegen (Gerlinger, 2005). Zur mathematischen Beschreibung reaktiver Strömungen sind Bilanzgleichungen für die Gesamtmasse, den Impuls, die Energie sowie die Massen der einzelnen Spezies zu lösen. Im folgenden wurden diese nach Gerlinger (2005) in Tensorschreibweise und kartesischen Koordinaten bei konservativer Formulierung dargestellt.

#### Gesamtmasse

Die Gleichung der Massenerhaltung einer instationären, kompressiblen Strömung lautet:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i) = 0. \quad (3.1)$$

Der erste Term der linken Seite beschreibt die zeitliche Änderung der Dichte  $\rho$  im Kontrollvolumen und der zweite Term der linken Seite beschreibt den Fluss über die Kontrollvolumengrenzen. Die Variable  $t$  steht hier für die Zeit und  $u_i$  für die Geschwindigkeitskomponenten in  $x_i$ -Richtung. In dieser Form stellt Gleichung 3.2 die Eulersche Betrachtungsweise dar. Die Größen werden an einem ortsfesten Punkt berechnet. Die Gleichung der Massenerhaltung lässt sich für inkompressible stationäre Strömungen mit einer Machzahl von  $Ma \leq 0,3$  wie folgt vereinfachen:

$$\frac{\partial u_i}{\partial x_i} = 0. \quad (3.2)$$

#### Komponentenmassen

Wenn sich die Strömung aus unterschiedlichen Komponenten zusammensetzt, beschreibt folgende Bilanzgleichung den Transport der einzelnen Spezies:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho Y_\alpha) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i Y_\alpha) + \frac{\partial j_{\alpha i}}{\partial x_i} = S_\alpha. \quad (3.3)$$

Dabei steht  $Y_\alpha$  mit  $\alpha = 1, 2, \dots, N_{k-1}$  für den Massenanteil der Komponente  $\alpha$  am Massenanteilsvektor  $\mathbf{Y} = (Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_k})^T$  sowie  $j_{\alpha i}$  für den Diffusionsmassenfluss der Komponente  $\alpha$  in Richtung  $x_i$  und  $S_\alpha$  für den chemischen Quell- und Senkenterm der Komponente  $\alpha$  (Gerlinger, 2005).

### Impuls

Die Gleichung für die Impulserhaltung ergibt sich aus dem Impulssatz. Dieser besagt, dass die zeitliche Änderung des Impulses gleich der Summe der angreifenden Kräfte plus des Impulsflusses über die Kontrollgrenzen ist (Laurien und Oertel, 2018):

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho u_i) = \rho f_i - \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho u_i u_j) + \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} - \frac{\partial p}{\partial x_i}. \quad (3.4)$$

Dabei beschreibt  $f_i$  die externen spezifischen Volumenkräfte,  $p$  den Druck und  $\tau_{ij}$  den Spannungstensor. Die externen Volumenkräfte umfassen zum Beispiel die Gravitation  $g_i$ , die meist als einzige externe Volumenkraft vorliegt. Die Impulsgleichung wird auch als Navier-Stokes Gleichung bezeichnet (Gerlinger, 2005).

### Energie

Die Erhaltungsgröße des Energiesatzes ist  $E$ , die Summe aus innerer Energie  $e$  und kinetischer Energie  $\frac{u^2}{2}$ . Der Energiesatz für eine Strömung lautet:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho u_i E + u_i p) - \frac{\partial}{\partial x_i}(u_j \tau_{ji}) + \frac{\partial q_i}{\partial x_i} = \rho u_i f_i + S_r. \quad (3.5)$$

In der inneren Energie  $e$  ist die Bildungsenthalpie der Gasbestandteile enthalten, weshalb in Gleichung 3.5 kein Reaktionsquellterm auftritt. In der Gleichung beschreibt  $S_r$  den Strahlungsquellterm und  $q_i$  den Wärmefluss (Gerlinger, 2005).

## 3.2 Turbulenz

Strömungen treten in zwei grundlegenden Formen auf: als laminare Strömung und als turbulente Strömung. Laminare Strömungen zeichnen sich durch parallele Bahnlinien aus, diese beschreiben die Bewegung eines Fluidteilchens mit der Strömung. Bei laminaren Strömungen ist der Druckabfall proportional zum Volumenstrom, sofern die Reynoldszahl der Strömung unterhalb der kritischen Reynoldszahl liegt. Wird diese überschritten, steigt der Druckabfall stark an und wird proportional zum Quadrat des Durchflusses. Gleichzeitig kommt es zu einer Veränderung der Strömungsform. Es bildet sich eine turbulente Strömung aus (Spurk und Aksel, 2010).

### 3.2.1 Turbulente Strömungen

Die kennzeichnenden Merkmale einer turbulenten Strömung sind die stark erhöhte Diffusität gegenüber laminaren Strömungen, die Dreidimensionalität und Instationarität der immer wir-

belbehafte Strömung sowie das stochastische Verhalten der Strömungsgrößen (Spurk und Aksel, 2010). Abbildung 3.1 zeigt den Umschlag einer laminaren zu einer turbulenten Strömung in einem Rohr mit Querschnittsänderung.

Zur Beschreibung der Strömungsform ist die Reynoldszahl essentiell. Die Reynoldszahl ist eine dimensionslose Kennzahl, die die Strömungsdynamik als Verhältnis der Trägheitskraft zur Reibungskraft charakterisiert. Die Reynoldszahl ist wie folgt definiert:

$$Re = \frac{u \cdot D}{\nu} = \frac{\rho \cdot u \cdot D}{\eta}. \quad (3.6)$$

Dabei steht  $u$  für die charakteristische Strömungsgeschwindigkeit,  $D$  für die charakteristische Länge, wie zum Beispiel der Durchmesser eines Rohres,  $\rho$  für die Dichte,  $\nu$  für die kinematische Viskosität und  $\eta$  für die dynamische Viskosität. Der Umschlag von laminarer Strömung zu turbulenter Strömung passiert bei der kritischen Reynoldszahl  $Re_{krit} = 2300$ . Weist eine Strömung eine Reynoldszahl von  $Re < Re_{krit}$  auf, ist diese laminar. Ist die Reynoldszahl der Strömung hingegen größer als der kritische Wert  $Re_{krit}$ , handelt es sich um eine turbulente Strömung (Zierep und Bühler, 2018).

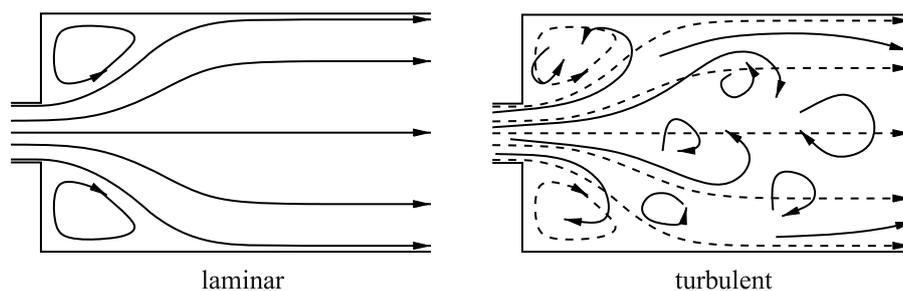


Abbildung 3.1: Vergleich einer laminaren mit einer turbulenten Strömung (Schwarze, 2012)

Der Wechsel von laminarer zu turbulenter Strömung passiert durch Stabilitätsprobleme in der Strömung. Mit steigender Reynoldszahl der Strömung wird diese anfälliger für kleine Störungen, welche eine große Wirkung entfalten und in der Änderung der Strömungsform resultieren (Zierep und Bühler, 2018).

### 3.2.2 RANS-Gleichungen

Die Navier-Stokes-Gleichungen ermöglichen die Beschreibung aller Arten von Strömungen, sowohl turbulenter als auch laminarer Form. Die Reynolds-gemittelten Navier-Stokes-Gleichungen (RANS, engl.: Reynolds-averaged Navier-Stokes-Equations) sind die aus den Navier-Stokes-Gleichungen abgeleiteten Grundgleichungen turbulenter Strömungen. Die Grundlage dieser Gleichungen ist die zeitliche Mittelung der Strömungsgrößen.

Jede Strömungsgröße, wie zum Beispiel die Geschwindigkeitskomponente  $u$ , kann dadurch als Summe eines zeitlichen Mittelwerts  $\bar{u}$  und einer Schwankung  $u'$  aufgefasst werden (Laurien und Oertel, 2018):

$$u(x, y, z, t) = \bar{u}(x, y, z) + u'(x, y, z, t). \quad (3.7)$$

Abbildung 3.2 zeigt die Reynolds-Mittelung einer turbulenten Strömung. Die großen, energie-tragenden Elemente der Turbulenz, in Abbildung 3.2 dargestellt durch die gestrichelten Linien, und der Einfluss dieser auf die mittlere Strömung werden bei den RANS-Gleichungen durch Turbulenzmodelle approximiert (Schwarze, 2012).

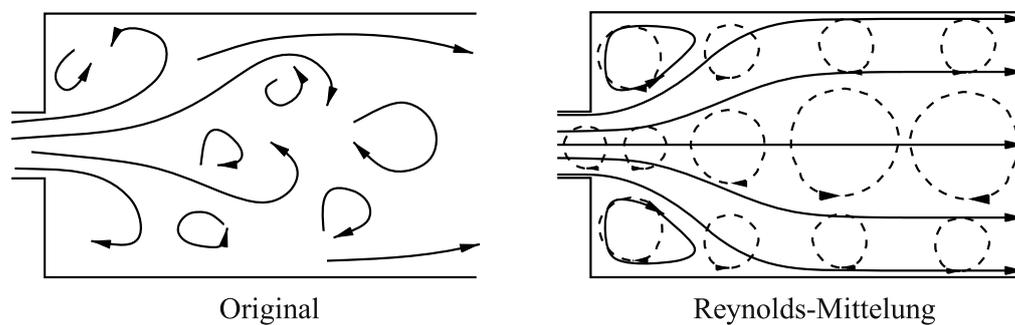


Abbildung 3.2: Vergleich Originalströmung und Reynolds-Mittelung (Schwarze, 2012)

Die Anwendung der Reynolds-Mittelung auf Gleichung 3.4 führt nach Laurien und Oertel (2018) auf die folgenden Form:

$$\frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_j \bar{u}_i) + \frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} = \frac{\partial \bar{\tau}_{ij}}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho \overline{u'_j u'_i}). \quad (3.8)$$

Durch die Mittelung entsteht der zusätzliche Term  $\rho \overline{u'_j u'_i}$  in der Gleichung. Dieser wird als Reynoldsspannungstensor  $\tau_{ij}^{Re}$  bezeichnet und beschreibt die durch die turbulente Durchmischung resultierende Wirkung auf die mittlere Strömung. Diese Wirkung ist analog zu der aus den molekularen Spannungen  $\tau_{ij}$  resultierenden Wirkung auf die Strömung (Laurien und Oertel, 2018).

### 3.2.3 Turbulenzmodellierung

Die Turbulenz ist ein kontinuumsmechanisches Phänomen und kann daher mit Hilfe der Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben werden. Die Simulation einer turbulenten Strömung wird direkte numerische Simulation genannt, da hier kein Turbulenzmodell zur Berechnung der Strömungsgrößen angewendet wird. Die Voraussetzung für die Durchführung einer direkten nume-

rischen Simulation ist eine hohe zeitliche und räumliche Auflösung aller Strukturen der Turbulenz, wie zum Beispiel der Wirbel, bis in die kleinsten Skalen (Laurien und Oertel, 2018).

Direkte numerische Simulationen können aufgrund des hohen Rechenaufwands nur für sehr einfache Problemstellungen durchgeführt werden. Für komplexere Probleme bieten sich die Reynolds-gemittelten Navier Stokes Gleichungen an. Diese stellen den größten Vereinfachungsgrad in der Modellierung von turbulenten Strömungen dar. Die Eigenschaften und Wirkung von Turbulenzelementen werden zusätzlich durch Turbulenzmodelle approximiert (Schwarze, 2012).

Der Ansatz von Turbulenzmodellen ist die Korrelation der unbekannteren Reynoldsspannungen mit den bekannten mittleren Strömungsgrößen. Die Modelle lassen sich in Wirbelviskositäts- und Reynolds-Spannungsmodelle unterteilen. Die Wirbelviskositätsmodelle basieren auf der Annahme, dass die mittleren molekularen Scherspannungen  $\tau_{ij}$  und die Reynoldsspannungen  $\tau_{ij}^{Re}$  auf ähnliche Phänomene zurückgeführt werden können (Schwarze, 2012). Die Reynolds-Spannungsmodelle hingegen werden aus der Transportgleichung für die Reynolds-Spannungen abgeleitet. Bei diesen bleibt der tensorielle Charakter von  $\tau_{ij}^{Re}$  erhalten.

Häufig verwendete Turbulenzmodelle sind nach Schwarze (2012) das Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Modell, das RNG- $k$ - $\varepsilon$ -Modell, das Wilcox- $k$ - $\omega$ -Modell, das Menter-SST- $k$ - $\omega$ -Modell und das LRR-RSM-Modell. Im Rahmen dieser Arbeit wurde nur das Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Modell verwendet, aufgrund seiner hohen numerischen Stabilität verwendet. Im Folgenden werden die genannten Turbulenzmodelle kurz charakterisiert und das Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Modell wird genauer erläutert.

Beim Renormalization-Group- oder kurz RNG- $k$ - $\varepsilon$ -Modell werden die Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie  $k$  und die Dissipationsrate  $\varepsilon$  mithilfe einer Methode der statistischen Physik entwickelt. Das Modell kann dadurch in komplexen Strömungen deutlich bessere Ergebnisse liefern, als das Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Modell. Das Wilcox- $k$ - $\omega$ -Modell nutzt die charakteristische Frequenz  $\omega$  der energietragenden Wirbel als Turbulenzgröße. Das Modell liefert, im Vergleich zum Standard- $k$ - $\varepsilon$ -Modell, speziell in der Nähe von festen Wänden eine deutlich bessere Beschreibung der mittleren Turbulenz. Daraus resultiert eine bessere Beschreibung des gesamten mittleren Strömungsfeldes. In freien Außenströmungen wird die Qualität der Turbulenz- und Strömungsmodellierung dieses Modells jedoch schlechter, während die Güte der Simulationsergebnisse mit dem Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Modell zunimmt. Dieser Zusammenhang führte auf die Herleitung des Menter-Shear-Stress-Transport- oder kurz Menter-SST- $k$ - $\omega$ -Modells. Dieses verknüpft die Ansätze aus dem Standard- $k$ - $\varepsilon$ -Modell und dem Wilcox- $k$ - $\omega$ -Modell. In der Wandnähe liegt dementsprechend ein  $k$ - $\omega$ -Modell vor und im Außenbereich der Strömung wird die  $\omega$ -Gleichung durch eine Transformation aus der Transportgleichung für  $\varepsilon$  ermittelt. Wie zuvor erwähnt, existieren neben den Wirbelviskositätsmodellen auch Reynolds-Spannungsmodelle. Ein solches ist das Launder-Reece-Rodi-Reynolds-Spannungs-Modell oder kurz LRR-RS-Modell. Reynolds-Spannungsmodelle sind wesentlich komplexer als Wirbelviskositätsmodelle, da die einzelnen Komponenten des Reynolds-Spannungstensors  $\tau_{ij}^{Re}$  direkt modelliert werden. Im Vergleich zu den anderen Modellen ermöglicht das LRR-RS-Modell die Anisotropie, also die Richtungsabhängigkeit des Reynolds-Spannungstensors, in komplexen Strömungen, zu erfassen. In der Wandnähe ergibt sich allerdings bei den meisten Strömungen kaum ein Ergebnis höherer Güte als durch das Standard- $k$ - $\varepsilon$ -Modell (Schwarze, 2012).

### Das Standard $k$ - $\varepsilon$ -Modell

Das Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Modell basiert auf der Modellierung der Strömung mittels Transportgleichungen und gehört zur Kategorie der Wirbelviskositätsmodelle. Im Rahmen des Modells werden die sechs voneinander verschiedenen Reynoldsspannungen durch den Parameter der Wirbelviskosität modelliert. Durch diesen Ansatz sind die Reynoldsspannungen nicht mehr unabhängig voneinander. Die physikalische Voraussetzung für diesen Ansatz ist die Isotropie, also Richtungsunabhängigkeit der Turbulenz. Ist dies nicht der Fall, muss die Isotropie der Strömung als vereinfachende Annahme getroffen werden. Das Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Modell verwendet die turbulente kinetische Energie  $k$  und die Dissipationsrate  $\varepsilon$  zur Modellierung der Turbulenz (Laurien und Oertel, 2018).

Damit ergibt sich für die Wirbelviskosität der folgende Ansatz:

$$\mu_t = \rho \cdot c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon}. \quad (3.9)$$

In dieser Gleichung beschreibt  $k$  die turbulente kinetische Energie,  $\rho$  die Dichte und  $\varepsilon$  die Dissipation von  $k$ , während  $c_\mu$  eine empirische Konstante darstellt. Die kinetische Energie  $k$  liefert eine Metrik für die Größe der Turbulenzwirbel, da sie als Indikator für die Intensität der Turbulenz betrachtet werden kann. In turbulenten Strömungen treten Wirbel unterschiedlicher Größen auf. Die Intensität der Reibung und Dissipation der Bewegungsenergie ist dabei von der Wirbelgröße abhängig. Je kleiner der Wirbel ist, desto größer ist die Dissipationsrate. Die kleinskaligen Wirbel werden in diesem Modell also durch die Dissipation  $\varepsilon$  und die großskaligen Wirbel durch die turbulente kinetische Energie  $k$  beschrieben (Laurien und Oertel, 2018).

Die modellierte Gleichung für  $k$  ergibt sich nach Laurien und Oertel (2018) wie folgt:

$$\rho \frac{\partial k}{\partial t} + \rho \bar{u}_j \frac{\partial k}{\partial x_j} = \mu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \frac{\partial k}{\partial x_j} + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \cdot \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] - \rho \cdot \varepsilon. \quad (3.10)$$

Der erste Ausdruck auf der linken Seite beschreibt die Veränderung der turbulenten kinetischen Energie  $k$  über die Zeit, während der zweite Ausdruck den Transport durch Konvektion darstellt. Auf der rechten Seite steht zunächst der Produktionsterm, gefolgt vom Diffusionsterm, der sowohl die molekulare Diffusion als auch die modellierte turbulente Diffusion umfasst. Der abschließende Ausdruck stellt die Dissipation der Energie pro Volumen dar (Laurien und Oertel, 2018).

Die modellierte Gleichung für  $\varepsilon$  ergibt sich nach Laurien und Oertel (2018) zu:

$$\frac{\partial \varepsilon}{\partial t} + \rho \bar{u}_j \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} = C_{\varepsilon 1} \frac{\varepsilon}{K} \mu_t \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} \left( \frac{\partial \bar{u}_i}{\partial x_j} + \frac{\partial \bar{u}_j}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \mu \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} - \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] - C_{\varepsilon 2} \cdot \rho \frac{\varepsilon^2}{K}. \quad (3.11)$$

Der erste Ausdruck auf der linken Seite beschreibt die zeitliche Veränderung von  $\varepsilon$  und der zweite Ausdruck den Transport durch Konvektion von  $\varepsilon$ . Auf der rechten Seite steht zunächst

der Produktionsterm von  $\varepsilon$ , der analog wie der Produktionsterm von  $k$  modelliert wird. Der Faktor  $\varepsilon/k$  repräsentiert eine inverse Zeitskala, die die im Vergleich zur Produktion von  $\varepsilon$  geringere Bedeutung ausgleichen soll. Anschließend folgt der Diffusionsterm mit den Komponenten der molekularen Diffusion von  $\varepsilon$  und modellierten Diffusion von  $\varepsilon$ . Am Ende der Gleichung steht der Dissipationsterm von  $\varepsilon$  (Laurien und Oertel, 2018). Die Zahlenwerte der empirischen Konstanten des Standard  $k$ - $\varepsilon$ -Modells ergeben sich aus Experimenten wie folgt:

$$c_\mu = 0.09, \quad \sigma_k = 1.0, \quad \sigma_\varepsilon = 1.3, \quad C_{1\varepsilon} = 1.44, \quad C_{2\varepsilon} = 1.92. \quad (3.12)$$

### 3.3 Ähnlichkeit von Strömungen

Die Ähnlichkeitstheorie wird vorwiegend für den Entwurf von Versuchsständen genutzt. Hier sollen sich bei geometrisch verkleinerten Modellen die gleichen Strömungsbedingungen wie in der Originalausführung einstellen. Die Anwendung dieser Theorie ermöglicht die Umrechnung der Strömungsgrößen auf die Bedingungen der Originalausführung. Die Ähnlichkeitstheorie soll im Rahmen dieser Arbeit verwendet werden, um die Vergleichbarkeit zwischen Strömungen in unterschiedlichen Geometrieconfigurationen sicherzustellen. Im Folgenden werden die Reynoldsähnlichkeit und die Machzahlähnlichkeit für den Anwendungsfall in dieser Arbeit hergeleitet.

#### 3.3.1 Reynoldsähnlichkeit

Das Ziel der Reynoldsähnlichkeit ist, dass Fluidteilchen im Modell und in der Realität eine ähnliche Bahnkurve vollziehen. Um dies zu erreichen, ist es notwendig, dass Druckkräfte und Viskositätskräfte auf ein Fluidteilchen in korrespondierenden Punkten in einem bestimmten Verhältnis bei Original und Modell stehen (Böswirth und Bschorer, 2014). Die Reynoldsähnlichkeit fordert demnach die Gleichheit der Reynoldszahlen der Strömungen:

$$Re_{\text{ref}} = Re_1. \quad (3.13)$$

Die Referenzströmung, der im Rahmen dieser Arbeit untersuchten Mikrogastrurbine, wird beschrieben mit  $Re_{\text{ref}}$  und die Strömung der jeweiligen Variation in der Simulation mit  $Re_1$ . Mit der Definition der Reynoldszahl (siehe Gleichung 3.6) ergibt sich:

$$\frac{\rho_{\text{ref}} \cdot u_{\text{ref}} \cdot D_{\text{ref}}}{\eta_{\text{ref}}} = \frac{\rho_1 \cdot u_1 \cdot D_1}{\eta_1}. \quad (3.14)$$

Durch das Einsetzen des idealen Gasgesetzes und der Definition des Massenstroms lässt sich folgender Zusammenhang herleiten:

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_{\text{ref}} \cdot \frac{D_{\text{ref}}}{D_1} \cdot \frac{\eta_1}{\eta_{\text{ref}}}. \quad (3.15)$$

Da die gleiche Zusammensetzung des Oxidators sowohl im Referenzfall als auch in der Simulation verwendet wird, also unter der Annahme gleicher Temperatur  $\frac{\eta_1}{\eta_{ref}} \approx 1$  ist, ergibt sich:

$$u_1 = u_{ref} \cdot \frac{p_{ref}}{p_1} \cdot \frac{D_{ref}^2}{D_1^2}. \quad (3.16)$$

Die Geometrie des Flammrohrs, insbesondere der Durchmesser, bleibt im Rahmen der Variationen unverändert, sodass  $D_{ref} = D_1$  gilt. Unter Vollastbedingungen weist die AE-T100 Mikrogasturbine einen Brennkammeraustrittsdruck von 4 bar auf. Soll der Brennstoffmassenstrom im Fall 1 für eine Variation mit einem Brennkammeraustrittsdruck von  $P_{out} = 1$  bar skaliert werden, ergibt sich:

$$u_1 = 4 \cdot u_{ref}. \quad (3.17)$$

Unter diesen Annahmen würde sich im Fall 1 eine viermal höhere Geschwindigkeit durch die Luft- und Brennstoffdüsen ergeben, was den Druckverlust, die Aufenthaltszeit im Brennraum und die Ausprägung der Rezirkulationszone beeinflusst. Da diese Parameter jedoch entscheidend für die Stabilisierung und Emissionen der jetstabilisierten Verbrennung sind, wären die Bedingungen der Simulation und der Mikrogasturbine hinsichtlich der Verbrennungscharakteristik nicht mehr vergleichbar. Dementsprechend kann die Reynoldsähnlichkeit im Rahmen dieser Arbeit nicht verwendet werden, um zur Maschine vergleichbare Verbrennungs- und Stabilisierungsbedingungen zu erreichen.

### 3.3.2 Machzahlähnlichkeit

Strömungen, in denen die Druckkräfte nicht nur auf Veränderungen der Geschwindigkeit und Höhe des Fluids beruhen, sondern auch auf dessen Elastizität oder Kompressibilität, zeigen Ähnlichkeit, wenn ihre Machzahlen gleich sind (Böswirth und Bschorer, 2014). Wie zuvor hergeleitet, liefert die Reynoldsähnlichkeit keine vergleichbaren Verbrennungs- und Stabilisierungsbedingungen im Rahmen dieser Arbeit. Für die angestrebten Untersuchungen ist das Erreichen vergleichbarer Verbrennungs- und Stabilisierungsbedingungen essentiell. Trotz unterschiedlicher Geometrieconfigurationen und Betriebsparameter soll eine vergleichbare Düsenaustrittsgeschwindigkeit erreicht werden. Andernfalls steigt der Druckverlust stark an und die Aufenthaltszeit sowie die Rezirkulation verändern sich im Vergleich zu den MGT-Bedingungen stark. Im Folgenden soll aus der Machzahlähnlichkeit die Skalierung des Brennstoffmassenstroms abgeleitet werden.

Die Machzahl  $Ma$  stellt das Verhältnis der Strömungsgeschwindigkeit zur Schallgeschwindigkeit dar und ist wie folgt definiert:

$$Ma = \frac{u}{\sqrt{\kappa \cdot R \cdot T}} \quad (3.18)$$

Dabei steht  $\kappa$  für den isentropen Exponent,  $R$  ist die ideale Gaskonstante und  $T$  die Temperatur des Fluids. Die Machzahlähnlichkeit fordert analog zur Reynoldsähnlichkeit die Gleichheit der

Machzahlen der Strömung in der Simulation und in der Gasturbine:

$$\frac{u_1}{\sqrt{\kappa \cdot R \cdot T_1}} = \frac{u_{\text{ref}}}{\sqrt{\kappa \cdot R \cdot T_{\text{ref}}}}. \quad (3.19)$$

Durch das Einsetzen der nach der Geschwindigkeit  $u$  umgeformten Definition des Massenstroms folgt:

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_{\text{ref}} \cdot \frac{D_1^2}{D_{\text{ref}}^2} \cdot \frac{p_1}{p_{\text{ref}}} \cdot \sqrt{\frac{T_{\text{ref}}}{T_1}}. \quad (3.20)$$

Bei gleicher Geometrie der Brennkammer  $\frac{D_1^2}{D_{\text{ref}}^2} = 1$  ergibt sich:

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_{\text{ref}} \cdot \frac{p_1}{p_{\text{ref}}} \cdot \sqrt{\frac{T_{\text{ref}}}{T_1}}. \quad (3.21)$$

Der Brennstoffmassenstrom des Referenzbetriebspunkts der Mikrogasturbine wird also mit dem Druckverhältnis aus dem Druck in der Simulation  $p_1$  und dem Druck in der Mikrogasturbine  $p_{\text{ref}}$  skaliert sowie mit der Wurzel des Temperaturverhältnisses  $\frac{T_{\text{ref}}}{T_1}$ . Ein weiterer positiver Effekt der Skalierung des Massenstroms mit der Wurzel des Temperaturverhältnisses ist die Kompensation des reduzierten Leistungseintrags bei der Absenkung der Vorwärmtemperatur. Die geringere Vorwärmtemperatur der Luft führt zu einer geringeren Luftleistung, welche sich aus dem Produkt der Temperaturdifferenz, der spezifischen Wärmekapazität und des Massenstroms berechnet. Durch die Skalierung mit der Temperatur wird der Brennstoffmassenstrom bei Absenkung der Vorwärmtemperatur, äquivalent zu den Maschinenbedingungen, erhöht und so eine Verschiebung des Lastpunkts verhindert. In den Maschinenbedingungen wird die entsprechende Skalierung, wie in Abschnitt 2.2 bereits erläutert, über die Turbinenaustrittstemperatur (TOT) geregelt.

### 3.4 Verbrennungsmodellierung

Die Simulation reaktiver Strömungen erfordert nicht nur die Berechnung der Größen des Strömungsfeldes und der Turbulenz, sondern auch die Modellierung der chemischen Reaktionen innerhalb des Strömungsfelds. Hierfür existieren Verbrennungsmodelle, die die ablaufenden Reaktionen zwischen den einzelnen Spezies vereinfacht abbilden können.

#### 3.4.1 Grundlagen der Verbrennung

Verbrennung bezeichnet die rasche, selbstunterhaltende Oxidation von Brennstoffen, wobei der Bereich, in dem hauptsächlich die chemische Reaktion stattfindet, als Flamme bezeichnet wird (Joos, 2006). Flammen variieren stark in ihrer Größe, Form, Struktur und Temperatur, abhängig von dem verwendeten Brennstoff und der Anströmgeschwindigkeit. Das Verhältnis von Luft zu Brennstoff ist ein essentieller Parameter, um eine stabile Verbrennung erreichen zu

können. Eine stöchiometrische Verbrennung liegt vor, wenn der Verbrennung exakt die Menge an Luft zugeführt wird, die zur vollständigen Verbrennung des Brennstoffs notwendig ist. Es herrschen fette Verbrennungsbedingungen vor, wenn die vorhandene Luftmenge nicht zur vollständigen Verbrennung des Brennstoffs ausreicht. Die Verbrennung läuft also unvollständig ab. Eine Verbrennung mit Luftüberschuss wird dementsprechend als mager bezeichnet. Die Luftzahl  $\lambda$  ist eine verbrennungstechnische Ähnlichkeitskennzahl und beschreibt den Sauerstoffüberschuss eines Verbrennungsprozesses (Zanger, 2016). Die Luftzahl ist reziprok zum Äquivalenzverhältnis  $\phi$ , welches den Brennstoffüberschuss widerspiegelt.

Die Luftzahl ist wie folgt definiert:

$$\lambda = \frac{1}{\Phi} = \frac{\dot{m}_L}{AFR_{st} \cdot \dot{m}_{Br}} \quad (3.22)$$

Dabei gibt  $\dot{m}_L$  den Luftmassenstrom,  $\dot{m}_{Br}$  den Brennstoffmassenstrom und  $AFR_{st}$  das Luft-Brennstoffverhältnis, das für eine stöchiometrische Verbrennung notwendig ist, an.

### 3.4.2 Verbrennungsmodellierung

Verbrennungsmodelle beschreiben die während der Verbrennung ablaufenden Reaktionen mit Hilfe von reduzierten Mechanismen. Gezielte Reduktionsmaßnahmen ermöglichen die Ableitung eines auf lediglich einige wenige Spezies reduzierten Reaktionsmechanismus aus einem detaillierten Mechanismus mit mehreren hundert Reaktionsgleichungen (Joos, 2006). Die starke Interaktion von Turbulenz und Verbrennung resultiert in einem Schließungsproblem zwischen dem reduzierten chemischen Mechanismus und den RANS-Gleichungen. Die Mittelung des chemischen Quellterms  $S_\alpha$  kann nach Gerlinger (2005) nicht auf die Mittelung der Strömungsgrößen zurückgeführt werden:

$$\overline{S_\alpha(\rho, T, Y_1, Y_2, \dots, Y_{N_k})} \neq S_\alpha(\overline{\rho}, \overline{T}, \overline{Y_1}, \overline{Y_2}, \dots, \overline{Y_{N_k}}) \quad (3.23)$$

Das Schließungsproblem resultiert aus der starken Nichtlinearität des chemischen Quellterms. Durch die Berechnung des chemischen Quellterms aus gemittelten Strömungsgrößen wird der Einfluss der Turbulenz auf die chemische Reaktionskinetik vernachlässigt (Gerlinger, 2005). Dadurch bleiben turbulente Schwankungen, wie beispielsweise Temperaturspitzen, die einen signifikanten Einfluss auf die  $\text{NO}_x$ -Bildung haben können unberücksichtigt (Joos, 2006). Diese Annahme, als „laminare Chemie“ bekannt, kann zu erheblichen Fehlern in der Berechnung führen. Die Hauptaufgabe von Verbrennungsmodellen besteht daher darin, das Schließungsproblem zu lösen, ohne den Einfluss der Turbulenz auf die chemische Reaktionskinetik zu vernachlässigen.

#### Eddy Dissipation Modell

Das Eddy Dissipationmodell (EDM) ist ein weit verbreitetes, sehr einfaches, aber dennoch robustes Verbrennungsmodell. Es basiert auf der turbulenten Mischungszeit als dominante Zeitskala. Die grundlegende Annahme dieses Modells ist eine „quasi-instantane Chemie“, wodurch

sich das Schließungsproblem auf ein Problem der turbulenten Mischung reduziert. Die Voraussetzung ist folglich eine sehr schnelle Reaktion gegenüber einer langsamen Mischung von Brennstoff und Oxidationsmittel (Joos, 2006).

Die turbulente Zeit  $t_{\text{mix}}$  als charakteristische Mischungszeit ist wie folgt definiert:

$$t_{\text{turb}} = t_{\text{mix}} = \frac{\tilde{k}}{\tilde{\varepsilon}} \quad (3.24)$$

Die Parameter  $k$  und  $\varepsilon$  werden gemäß dem  $k$ - $\varepsilon$ -Turbulenzmodell bestimmt, wobei  $k$  die turbulente kinetische Energie repräsentiert und  $\varepsilon$  die Geschwindigkeit der Energie-Dissipation angibt. Die Parameter werden dabei Favre gemittelt, weshalb sie mit einer Tilde gekennzeichnet sind. Der chemische Quellterm  $\tilde{S}_\alpha$  der Spezies  $\alpha$  wird direkt proportional zur Frequenz der turbulenten Mischung  $1/\tilde{t}_{\text{mix}}$  festgelegt. Es gilt somit:

$$\tilde{S}_{\alpha,k} \sim \frac{1}{t_{\text{mix}}} = \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}}. \quad (3.25)$$

Der chemische Quellterm  $S_{\alpha,k}$  einer Spezies  $\alpha$  in einer Elementarreaktion  $k$  wird nach Joos (2006) durch folgende Gleichung modelliert:

$$\tilde{S}_{\alpha,k}^{EDM} = AM_\alpha v'_{\alpha,k} \rho \frac{\tilde{\varepsilon}}{\tilde{k}} \min \left( \frac{\tilde{Y}_E}{v'_{E,k} M_E}, B \frac{\sum_P \tilde{Y}_P}{\sum_P v''_{P,k} M_P} \right). \quad (3.26)$$

In dieser Gleichung stehen  $Y_E$  bzw.  $Y_P$  für die Massenanteile der Edukte bzw. Produkte,  $M_\alpha$  ist die molare Masse der Komponente  $\alpha$  und  $v$  sind die stöchiometrischen Koeffizienten. Der erste Term wird für die Berechnung von nicht vorgemischten Flammen, sogenannte Diffusionsflammen und der zweite Term wird zur Berechnung von Vormischflammen verwendet. Weiter müssen die Modellparameter A und B experimentell bestimmt werden (Joos, 2006).

Eine Schwäche des Eddy-Dissipation-Konzepts liegt darin, dass es keine Berücksichtigung von Nichtgleichgewichtseffekten ermöglicht, wie zum Beispiel der NO-Bildung oder lokaler Flammenverlöschung. In Bereichen endlicher Chemie neigt das Eddy-Dissipation-Modell weiter dazu, den Brennstoffverbrauch zu überschätzen. Dies führt zu lokalen Temperaturüberhöhungen. Darüber hinaus bildet das Eddy-Dissipation-Konzept die Wechselwirkungen zwischen dem turbulenten Strömungsfeld und den chemischen Reaktionen nicht vollständig ab (Joos, 2006).

### Finite Rate Chemistry Modell

Das Finite Rate Chemistry Modell (FRC) basiert, im Gegensatz zum Eddy Dissipation Modell, auf der chemischen Umsetzung mit endlicher Geschwindigkeit (Joos, 2006). Des Weiteren wird ebenfalls die Möglichkeit einer Rückreaktion berücksichtigt. Das Modell eignet sich für Verbrennungsprozesse, bei denen die reaktionskinetischen Prozesse gegenüber den Mischungsvorgängen relativ langsam ablaufen (Joos, 2006). Diese Voraussetzung ist im Rahmen dieser Arbeit gegeben.

Der chemische Quellterm ergibt sich im Finite Rate Chemistry Modell nach Gerlinger (2005) wie folgt:

$$\bar{S}_\alpha^{FRC} = M_\alpha \sum_{r=1}^{N_r} \left[ (v''_{\alpha r} - v'_{\alpha r}) \left( k_{fr} \prod_{\beta=1}^{N_k+1} c_\beta^{v'_{\beta r}} - k_{br} \prod_{\beta=1}^{N_k+1} c_\beta^{v''_{\beta r}} \right) \right]. \quad (3.27)$$

In dieser Gleichung sind  $k_{fr}$  und  $k_{br}$  die Geschwindigkeitskoeffizienten der Vorwärts- bzw. Rückwärtsreaktion,  $M_\alpha$  die molare Masse und  $c_\alpha$  beschreibt die Konzentration der Komponente  $\alpha$ :

$$c_\alpha = \frac{\rho Y_\alpha}{M_\alpha}. \quad (3.28)$$

Die Konzentration der fiktiven Komponente  $N_k + 1$  dient im Modell zur Berücksichtigung innerer Stoßpartner. Eine Reaktion  $r$  trägt nur zu  $S_\alpha$  bei, wenn mindestens einer ihrer Stöchiometrie-koeffizienten ungleich null ist. Wenn der Reaktion unendlich viel Zeit zur Verfügung steht, stellt sich chemisches Gleichgewicht ein: Die Reaktionsraten der Hin- und Rückreaktionen sind gleich groß, was bedeutet, dass sich die Reaktionen im Gleichgewichtszustand befinden. Das impliziert, dass der Term innerhalb der runden Klammer in Gleichung 3.27 für alle Reaktionen in diesem Fall verschwindet (Gerlinger, 2005).

### 3.5 Numerische Strömungsmechanik

Die Lösung von strömungsmechanischen Problemen durch die Anwendung von numerischen, approximativen Methoden wird als numerische Strömungsmechanik oder Computational Fluid Mechanics (CFD) bezeichnet. Numerische Verbrennungssimulationen bauen auf den Grundlagen der numerischen Strömungsmechanik auf und erweitern diese durch entsprechende Verbrennungsmodelle. Im Folgenden wird ein Überblick zu diesen Grundlagen gegeben.

#### 3.5.1 Finite Volumen Methode

Für die numerische Lösung des sich aus den Erhaltungsgleichungen ergebenden Gleichungssystems partieller Differentialgleichungen ist die Umwandlung der partiellen Ableitungen in endliche Differenzen notwendig (Lecheler, 2023). Dieser Umwandelungsschritt wird Diskretisierung genannt, wobei unterschiedliche Diskretisierungsmethoden existieren. Die Finite Volumen Methode (FVM) ist dabei die in der numerischen Strömungsmechanik am häufigsten verwendete Diskretisierungsmethode. Andere Ansätze sind die Finite-Differenzen (FDM) oder die Finite-Elemente-Methode (FEM). Die Finite-Elemente-Methode basiert auf der Diskretisierung des Integrationsgebietes mit der Hilfe eines unstrukturierten Netzes und kommt in der Strukturmechanik sehr häufig zum Einsatz (Laurien und Oertel, 2018).

Die Finite Volumen Methode basiert auf der Diskretisierung des Rechengebiets in einzelne kleine Kontrollvolumina und der Integration der Erhaltungsgleichungen in ihrer allgemeinen

Form über diese Kontrollvolumina. Ein Fluidelement, das sich durch das Rechengitter bewegt, transportiert Erhaltungsgrößen, wie Masse, Impuls und Energie von einem Punkt zum nächsten. Über die Zellgrenzen der einzelnen Kontrollvolumina treten die konvektiven und diffusiven Flüsse  $F_\phi$  und  $D_\phi$  dieser Erhaltungsgrößen auf. Der Vorteil besteht, im Gegensatz zur FDM und FEM, in der expliziten Berechnung dieser Flüsse auf den Seitenflächen aller Zellen im Rechengitter (Schwarze, 2012). Der Ansatz der FVM ist die Auswertung des Integrals einer Erhaltungsgleichung über einem Kontrollvolumen mit der Erhaltungsgröße  $\phi$ :

$$\int_{KV} \frac{\partial}{\partial t} (\rho\phi) dV = \oint_{OF} (\Gamma\nabla\phi) \cdot \hat{n} dA - \oint_{OF} (u_i\rho\phi) \cdot \hat{n} dA + \int_{KV} Q_\phi dV. \quad (3.29)$$

Diese Form der Gleichung resultiert aus der Anwendung des gaußschen Satzes auf die Volumenintegrale aus der ursprünglichen Form der Gleichung (Schwarze, 2012). Dadurch entstehen Oberflächenintegrale mit dem Normalenvektor  $\hat{n}$ . Der Term auf der linken Seite der Gleichung beschreibt die zeitliche Änderung der Erhaltungsgröße  $\phi$  im betrachteten Kontrollvolumen. Der erste Term der rechten Seite repräsentiert den Diffusionsstrom von  $\rho\phi$  durch die geschlossene Oberfläche OF des Kontrollvolumens, wobei  $\Gamma$  für den Diffusionskoeffizienten steht. Der zweite Term stellt den Konvektionsstrom dar, welcher den Transport von  $\rho\phi$  mit der Strömungsgeschwindigkeit  $u_i$  durch OF beschreibt. Der letzte Term der Gleichung fasst alle anderen Quellen und Senken von  $\phi$  im Kontrollvolumen zusammen (Schwarze, 2012).

### 3.5.2 Rechengitter

Die Qualität des numerischen Simulationsergebnisses hängt maßgeblich von der Qualität des Rechengitters ab. Das Rechengitter muss das Gebiet der Strömung ausfüllen, in dem die Strömung berechnet werden soll. Wichtig ist die Definition der Ränder des Rechengebietes. Häufig können Symmetrieebenen genutzt werden, um die Anzahl der Gitterpunkte zu reduzieren und somit Rechenzeit einzusparen. Die Festkörperoberfläche bildet die Begrenzung der Geometrie, die für die Strömung undurchlässig ist. Zusätzlich müssen Ein- und Auslassgrenzen sowie periodische Grenzen festgelegt werden. An diesen Stellen tritt die Strömung in das Berechnungsgebiet ein oder verlässt es (Lecheler, 2023).

Rechengitter lassen sich in zwei Kategorien einteilen: strukturierte und unstrukturierte Gitter. Strukturierte Gitter weisen eine einheitliche Topologie auf, bei der die Nachbarschaftsbeziehungen zwischen den Kontrollvolumina und deren Geometrie über das gesamte Gitter hinweg ähnlich sind. Die Kontrollvolumina können daher in einem gleichmäßigen Raster angeordnet werden, was die Bestimmung benachbarter Zellen erleichtert. Üblicherweise bestehen geordnete Gitter aus Rechtecken im zweidimensionalen Raum oder Hexaedern im dreidimensionalen Raum. Ein einfaches Beispiel für ein geordnetes Rechengitter ist ein kartesisches Gitter, bei dem alle Kanten der Kontrollvolumen gleich lang sind und rechtwinklig zueinander verlaufen.

Unstrukturierte Gitter weisen hingegen keine festgelegte einheitliche Topologie auf und können Kontrollvolumina mit den unterschiedlichsten Geometrien kombinieren. Abbildung 3.3 zeigt zwei Beispiele der beiden Gitterkategorien. Der Unterschied in der Topologie der Gitter ist zu

erkennen. Unstrukturierte Gitter sind im Vergleich zu strukturierten Gittern wesentlich flexibler und ermöglichen die Anpassung des Gitters an die Geometrieform mit einer sehr hohen Genauigkeit. Sie sind daher in der numerischen Strömungsberechnung stark verbreitet (Schwarze, 2012).

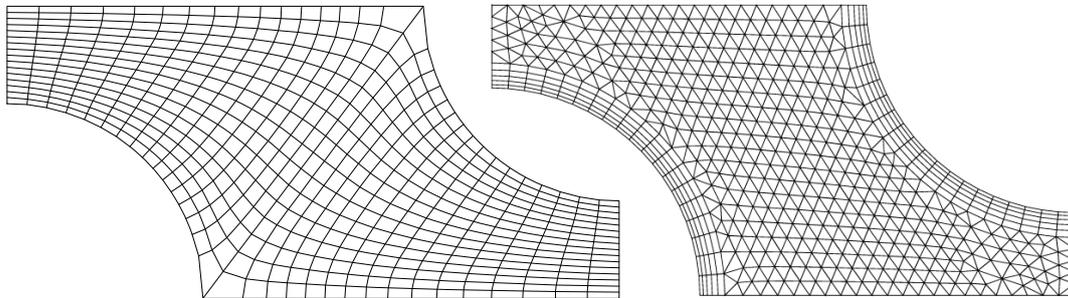


Abbildung 3.3: Vergleich eines strukturierten Gitters (links) und eines nicht strukturierten Gitters (rechts) (Ferziger und Perić, 2008)

### 3.5.3 Iterative Lösungsverfahren

Die Anwendung der beschriebenen Diskretisierungsverfahren auf die RANS-Gleichungen resultiert in einem nichtlinearen Gleichungssystem, welches die Beziehungen zwischen den Gitterpunkten beschreibt. Lösungsalgorithmen verwenden häufig einen sequentiellen Ansatz, bei dem in inneren Iterationen die nichtlinearen Gleichungen voneinander getrennt gelöst werden bis ein festgelegtes Kriterium erfüllt ist. Die Koeffizienten werden in äußeren Iterationen entsprechend dem Ergebnis der vorherigen inneren Iterationen aktualisiert, wobei diese äußeren Iterationen auch als Zeitschritte bezeichnet werden. Dieser Prozess wird wiederholt bis die Näherung der tatsächlichen Lösung ausreichend genau ist (Ferziger und Perić, 2008).

Residuen messen die Differenz zwischen dem ein- und ausströmenden Fluss in jedem Kontrollvolumina und stellen somit ein Maß für den Fehler in der Lösung der Erhaltungsgleichungen dar. Das Ziel iterativer Lösungsverfahren besteht darin, die Residuen und damit den Fehler zu minimieren. Es ist wichtig zu beachten, dass eine Minimierung der Residuen nicht zwangsläufig auch eine Minimierung des Fehlers in der Realität bedeutet. Bei der numerischen Lösung komplexer Strömungs- und Verbrennungsprobleme werden vereinfachende Annahmen und Modelle verwendet, die bereits von Natur aus einen intrinsischen Fehler mit sich bringen.

## 3.6 Schadstoffbildung

Die Verbrennung von kohlenstoffhaltigen Brennstoffen führt zu Produktion von Schadstoffen im Abgas. Diese Arbeit konzentriert sich auf die Untersuchung von Stickoxid- und Kohlenmonoxid-Emissionen. Im Folgenden werden die Reaktionswege dieser Schadstoffe sowie die Bedingungen, unter denen sie vermehrt gebildet werden, erläutert.

### 3.6.1 Stickoxide

In der Abgasanalyse werden unter dem Sammelbegriff Stickoxide ( $\text{NO}_x$ ) alle Stickstoff-Sauerstoff-Verbindungen zusammengefasst. Besonders relevant sind als Schadstoffe in der Verbrennung von Gasturbinen dabei Stickstoffmonoxid  $\text{NO}$  und das daraus teilweise umgewandelte Stickstoffdioxid  $\text{NO}_2$ . Die Bildung von Stickoxiden erfolgt durch verschiedene Kettenreaktionen, die von der chemischen Zusammensetzung des Brennstoffs, der erreichten Verbrennungstemperatur und dem vorherrschenden Druck abhängen. Die Stickoxidkonzentration am Brennkammeraustritt wird stark durch die Aufenthaltszeit des Luft-Brennstoffgemischs in der Brennkammer beeinflusst (Zanger, 2016). Im Allgemeinen lassen sich nach Joos (2006) verschiedene Reaktionspfade für Stickoxide definieren. Die thermische  $\text{NO}_x$ -Bildung, auch bekannt als Zeldovich- $\text{NO}$ , tritt beispielsweise unter hohen Temperaturen und nahezu stöchiometrischen Bedingungen auf. Unter fetten Bedingungen erfolgt die prompte  $\text{NO}$ -Bildung, auch bekannt als Fenimore- $\text{NO}$ , während Stickstoffmonoxid über Distickstoffoxid  $\text{N}_2\text{O}$  bei mageren Bedingungen und erhöhtem Druck gebildet wird. Des Weiteren kann Stickstoffmonoxid über  $\text{NNH}$ -Radikale unter mageren Bedingungen erzeugt werden. Auch die Umwandlung von brennstoffgebundenem Stickstoff, also Stickstoffverbindungen im Brennstoff, trägt zur Stickstoffmonoxid-Bildung bei (Joos, 2006).

#### Thermisches $\text{NO}$

Im Rahmen der Untersuchungen in dieser Arbeit ist der Reaktionspfad von thermischem  $\text{NO}$  am relevantesten, da dieser den Großteil der  $\text{NO}_x$ -Emissionen ausmacht. Der verwendete Reaktionsmechanismus berücksichtigt neben dem thermischen Reaktionspfad auch die Reaktionspfade für promptes  $\text{NO}$  sowie das über  $\text{NNH}$ -Radikale gebildete  $\text{NO}$  und die Konversion von brennstoffgebundenem Stickstoff (Glarborg et al., 2018). Bei hohen Verbrennungstemperaturen wird vor allem der Reaktionspfad von thermischem  $\text{NO}$  begünstigt. Dieser Pfad dominiert deshalb die  $\text{NO}$ -Bildung im stöchiometrienahen bis mageren Bereich, wobei das thermische  $\text{NO}$  nach Joos (2006) durch die folgenden drei Elementarreaktionen entsteht:



Die erste Reaktion erfolgt aufgrund der hohen Aktivierungsenergie der starken  $\text{N}_2$ -Dreifachbindung nur bei sehr hohen Temperaturen ausreichend schnell genug, weshalb dieser  $\text{NO}$ -Bildungspfad als „thermisch“ bezeichnet wird. Aufgrund ihrer vergleichsweise langsamen Geschwindigkeit ist diese Reaktion auch der geschwindigkeitsbestimmende Schritt bei der thermischen Stickoxid-Bildung. Aufgrund der langsamen Reaktionsgeschwindigkeit dauert es mehrere Hundert Millisekunden, bis ein chemisches Gleichgewicht erreicht ist. In realen Brennkammern wird dieses Gleichgewicht jedoch aufgrund der wesentlich kürzeren Verweilzeiten nicht

erreicht. Dadurch sind die thermischen NO-Konzentrationen, welche in realen Brennkammern erreicht werden, deutlich geringer als im Gleichgewichtsfall (Joos, 2006).

Die Bildung des thermischen NO kann nach Joos (2006) auf folgenden Zusammenhang zurückgeführt werden:

$$\frac{d[\text{NO}]}{dt} = 2 \cdot k_1 \cdot [\text{O}] \cdot [\text{N}_2]. \quad (3.31)$$

Dabei ist  $k_1$  ein temperaturabhängiger Geschwindigkeitskoeffizient. Die Konzentration der Sauerstoffradikale  $[\text{O}]$  steigt in der Flammfront aufgrund der hohen Temperaturspitzen, insbesondere bei niedrigem Druck, erheblich über die Gleichgewichtskonzentration an. Dies wird als Superequilibriumskonzentration bezeichnet. Aufgrund dieser nichtlinearen Reaktionskinetik wird deutlich mehr thermisches NO erzeugt, als durch eine Berechnung basierend auf der Gleichgewichtskonzentration von Sauerstoffradikalen vorhergesagt werden würde.

### Maßnahmen zur Stickoxidreduktion

Stickoxide verursachen vielfältige schädliche Effekte auf die Umwelt und die menschliche Gesundheit. Sie greifen die Schleimhäute der Atmungsorgane an und begünstigen dort Entzündungen und Infektionen wie Bronchitis und Lungenentzündungen. Sie verstärken zudem die Wirkung von Schwefeldioxid. Die Reaktion von Stickoxiden mit Luftfeuchtigkeit führt zur Bildung von salpetriger Säure und Salpetersäure, die ähnlich wie Schwefelsäure in Form von Aerosolen vorkommen. Diese Säuren tragen zum sauren Regen bei. Zusätzlich fördert NO die Bildung von bodennahem Ozon. In der Luftfahrt tragen ferner die in großer Höhe freigesetzten Stickoxide erheblich zur Klimawirkung durch Nicht-CO<sub>2</sub>-Effekte bei (Liu et al., 2022).

Die Reduktion der Stickoxidemissionen ist entscheidend, um die negativen Folgen der Verbrennung in Gasturbinen auf die menschliche Gesundheit und die Umwelt zu minimieren. Es existieren unterschiedliche Strategien in der Verbrennungsführung, um die Stickoxidemissionen zu begrenzen. Die Strategie der Abgasrückführung zielt darauf ab, die Luft mit inerten Verbrennungsprodukten zu vermischen, um die maximale Temperatur zu senken und somit die NO-Produktion zu reduzieren. Die magere-Vormischverbrennung zielt auf die Vermeidung von Zonen mit hoher NO-Produktion ab, indem Brennstoff und Luft vor der Reaktion vermischt werden. Die Reaktion erfolgt, sobald die nötigen Zündbedingungen erreicht werden. Die Fett-Mager-Verbrennung (RQL) basiert auf der stufenweisen Verbrennung des Brennstoff-Luftgemischs. Zunächst wird ein sehr fettes Gemisch, also  $\lambda < 1$ , verbrannt. Dadurch kann eine stabile Verbrennung garantiert werden. In der zweiten Stufe der Verbrennung wird der Brennstoff unter starkem Luftüberschuss oxidiert. Unter diesen stark mageren Bedingungen wird die Stickoxidbildung gehemmt (Joos, 2006).

Die jetstabilisierte Verbrennung stellt eine Kombination der Abgasrückführung und der mageren Vormischverbrennung dar. Durch die Eindüsung des Brennstoffgemischs wird eine starke Rezirkulationszone erzeugt. Die Vormischung passiert in einer entsprechenden Mischstrecke. Durch die Verdünnung der Frischgasstrahlen mit rezirkulierendem Abgas und die gleichzeitig gute magere Vormischung werden die Reaktionsraten reduziert und damit die Spitzentempera-

turen durch homogenere Temperaturfelder abgesenkt. Dies führt zu geringen  $\text{NO}_x$ -Emissionen dieser Brenner.

### 3.6.2 Kohlenmonoxid

Die Giftigkeit von CO beruht auf der Bindung mit dem roten Blutfarbstoff Hämoglobin, wodurch der Sauerstofftransport im Blut gehindert wird. Bei hoher Konzentration führt es zum Tode durch Blockade der Atmung. Gesundheitsbelastungen treten allerdings nur in Emittentennähe auf. Die Oxidation von Kohlenmonoxid führt zur Bildung von Kohlendioxid, welches wiederum einen erheblichen Einfluss auf das Klima durch den Treibhauseffekt ausübt (Joos, 2006).

Die Geschwindigkeit der Oxidationsreaktion von Kohlenmonoxid ist entscheidend für eine vollständige Verbrennung und damit für die Dimensionierung einer Brennkammer, insbesondere bei Teillast. Abbildung 3.4 zeigt die Hauptursachen der CO-Bildung in Gasturbinenbrennkammern.

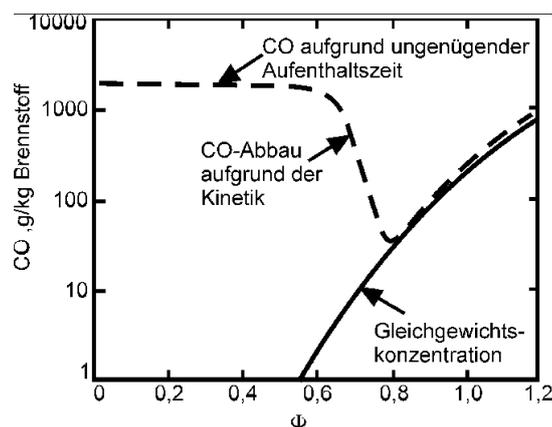


Abbildung 3.4: CO-Bildung in einer Gasturbinenbrennkammer (Joos, 2006)

Die CO-Konzentration ist hoch im stöchiometrienahen Bereich, aufgrund der hohen Temperaturen. Hier verlaufen die Reaktionen von CO zu  $\text{CO}_2$  schnell, sodass das emittierte CO nahe dem Gleichgewichts-CO liegt. Unter mageren Bedingungen ( $\phi < 0,8$ ) sinkt das Gleichgewichts-CO, aber auch die Reaktionsgeschwindigkeiten von CO zu  $\text{CO}_2$  nehmen aufgrund der kühleren Bedingungen ab. Dadurch reicht die Verweilzeit im Brennraum nicht mehr aus, um den Gleichgewichtszustand zu erreichen, weshalb die CO-Emissionen wieder ansteigen. Dieser Effekt wird als Nicht-Gleichgewichtsast bezeichnet. Das Kohlenmonoxid entsteht als Produkt einer unvollständigen Verbrennung aufgrund von Sauerstoffmangel. Dieser Sauerstoffmangel führt nach Joos (2006) dazu, dass die Oxidation von Kohlenmonoxid mit der Oxidation von Wasserstoff konkurriert:



Das Hydroxylradikal OH und atomarer Wasserstoff H wirken als Kettenträger. Die Geschwindigkeit der zweiten Reaktion ist wesentlich höher als die der ersten, wodurch sie im Gleichgewicht verläuft. Die erste Reaktion wird hauptsächlich kinetisch kontrolliert und verläuft daher langsamer. Mit zunehmender Temperatur und einem höheren Brennstoffverhältnis  $\phi$ , also unter stöchiometrienahen Bedingungen, steigt die Reaktionsgeschwindigkeit. Dadurch wird die Reaktionskinetik beschleunigt und die Konzentration von Kohlenmonoxid sinkt (Joos, 2006).

Im stöchiometrischen Bereich können nach Joos (2006) beide Reaktionen zu einer Bruttoreaktion kombiniert werden:



Es stellt sich nahezu ein Gleichgewicht ein, da unter diesen Bedingungen die Überschusskonzentrationen der Kettenträger H und OH in etwa gleich groß sind. Im mageren Bereich läuft die CO-Oxidation hingegen nicht mehr in Konkurrenz zur H<sub>2</sub>-Oxidation. Daher lässt sich nach Joos (2006) der Reaktionsablauf wie folgt definieren:



In diesem Bereich verläuft die CO-Reaktion aufgrund des Nichtgleichgewichts der ersten Reaktion und der höheren daraus resultierenden H- und OH-Konzentration gebremst ab. Unter mageren Bedingungen wäre die Kohlenmonoxid-Konzentration im Gleichgewicht normalerweise sehr niedrig. Aufgrund der begrenzten Verweilzeit in der Brennkammer wird jedoch das Erreichen eines Gleichgewichtszustands verhindert, was zu erhöhten CO-Konzentrationen führt. Unter stark mageren Bedingungen, das heißt bei einer Luftzahl von  $\lambda > 1,25$  oder einem Äquivalenzverhältnis von  $\phi < 0,8$ , wird mehr CO emittiert. Dies kann beispielsweise durch die Zugabe von Sekundärluft verursacht werden (Joos, 2006).

### 3.7 Statistische Versuchsplanung

Die statistische Versuchsplanung, auch „Design of Experiments“ (DOE) genannt, ist eine Methodik zur Planung und Auswertung von Versuchsreihen. Innerhalb der Methodik existieren zahlreiche unterschiedliche Feldkonstruktionen, welche für verschiedene Anwendungsfälle geeignet sind. Für die Durchführung erster Versuchsreihen, bei welchen eine hohe Anzahl an Faktoren untersucht werden sollen, eignen sich sogenannte Screening-Versuchspläne. Folgende Detailuntersuchungen werden oft mit quadratischen Versuchsplänen durchgeführt, um entsprechende Effekte durch Nichtlinearitäten abbilden zu können. Vollfaktorielle Versuchspläne basieren auf der Durchführung aller gewünschten Parametervariationen. Die Strategie der statistischen Versuchsplanung ist hingegen grundlegend anders. Sie untersucht gleichmäßig den Faktorraum mit einer begrenzten Kombination der Faktorvariationen. Jeder Faktor durchläuft hierbei mehrere Umstellvorgänge, ausgehend von unterschiedlichen Randbedingungen. Die unabhängige Untersuchung der einzelnen Faktoren wird in der statistischen Versuchsplanung

durch die Orthogonalität des Versuchsplans sichergestellt. Ein solcher ist orthogonal, wenn keine Kombination aus jeweils zwei Spalten miteinander korreliert (Siebertz et al., 2010).

Die Wirkung eines Faktors auf ein System wird in der statistischen Versuchsplanung als Effekt bezeichnet. Die Abbildung 3.5 stellt die Effektberechnung grafisch dar. Dabei stehen A, B und C für die Faktoren, während  $y_i$  die jeweiligen Ergebnisse aus den Versuchsdurchläufen darstellen.

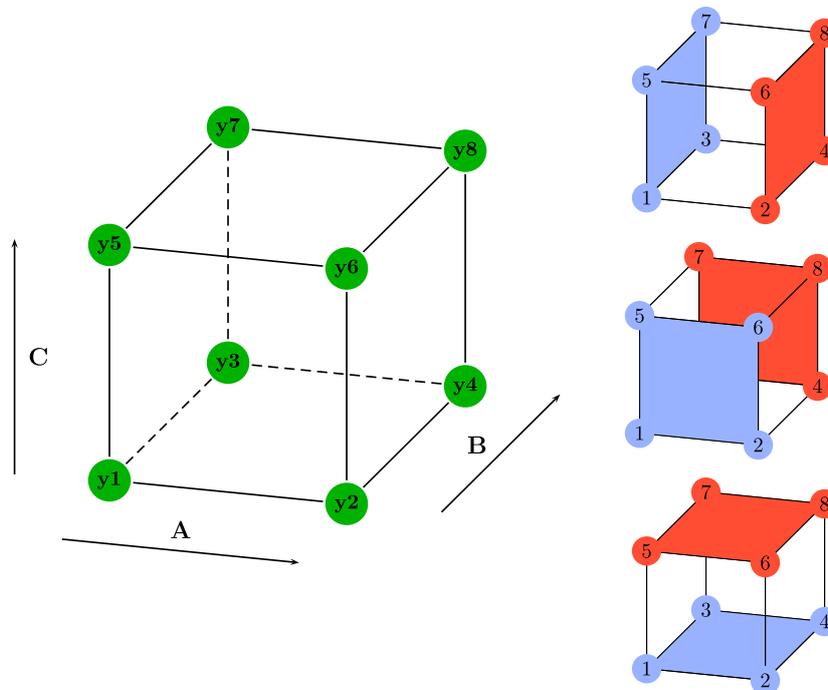


Abbildung 3.5: Grafische Darstellung der Effektberechnung (Siebertz et al., 2010)

Der Effekt quantifiziert die mittlere registrierte Veränderung der Zielgröße in Folge einer Stufenvariation. Stufen bezeichnen in diesem Kontext die Variationen, die durch die Versuchsplanung für einen Faktor festgelegt wurden. Wenn der Effekt eines Faktors von der Einstellung eines anderen Faktors abhängt, wird dies Wechselwirkung genannt (Siebertz et al., 2010).

Es stellt sich die Frage, wann diese Effekte als signifikant betrachtet werden können. Nach Siebertz et al. (2010) ist in der statistischen Versuchsplanung ein Effekt signifikant, wenn dieser nicht mit der Nullhypothese einer rein zufälligen Abweichung vereinbar ist. Die Nullhypothese ist dabei eine Annahme, die besagt, dass kein echter Effekt oder Unterschied vorliegt, also dass eine veränderte Bedingung keinen Unterschied zu einer Kontrollgruppe oder Standardbedingung verursacht (Siebertz et al., 2010). Im Rahmen der Arbeit wäre ein Beispiel für eine Nullhypothese, dass die variierten Parameter keinen Einfluss auf die  $\text{NO}_x$ -Emissionen der Verbrennung haben. Stellt sich nun hingegen heraus, dass die Zielgröße  $\text{NO}_x$  einen Wert annimmt, der unter den Bedingungen der Nullhypothese unwahrscheinlich ist, so wird der Effekt als signifikant betrachtet. Zum Beispiel, dass eine höhere Luftzahl zu niedrigeren  $\text{NO}_x$ -Emissionen führt. Der p-Wert ist die Wahrscheinlichkeit, dass die beobachteten Daten unter der Nullhypo-

these auftreten. Ein niedriger p-Wert deutet darauf hin, dass die beobachteten Daten unter der Nullhypothese unwahrscheinlich sind (Siebertz et al., 2010).

Der Begriff Auflösung beschreibt in der statistischen Versuchsplanung die Struktur der Vermengung und unterscheidet grundsätzlich vier Typen. Bei der Auflösung III sind Haupteffekte mit Zweifachwechselwirkungen vermengt. Dieses dicht besetzte Feld eignet sich nur zum Screening. Die Auflösung IV vermengt Haupteffekte mit Dreifachwechselwirkungen und Zweifachwechselwirkungen untereinander. Dadurch können Haupteffekte sicher bestimmt werden, jedoch lassen sich Zweifachwechselwirkungen nicht eindeutig zuordnen. In der Auflösung V sind Haupteffekte mit Vierfachwechselwirkungen und Dreifachwechselwirkungen mit Zweifachwechselwirkungen vermengt. Ein solches Feld unterstützt das lineare Beschreibungsmodell problemlos. Bei der Auflösung V+ sind Haupteffekte und Zweifachwechselwirkungen nahezu unvermengt. Im Vergleich zur Auflösungsstufe V bringt diese Stufe jedoch keinen wesentlichen Genauigkeitsgewinn (Siebertz et al., 2010).

### Definitive Screening Design

Im Rahmen dieser Arbeit wurde für die Quantifizierung der Effekte der Parametervariationen ein Definitive Screening Design (DSD) angewendet. Definitive Screening Designs weisen einige Vorteile gegenüber anderen Screening Versuchsplänen auf. Unterschiedliche Versuchspläne lassen sich nach ihrer Auflösung unterscheiden. Die Auflösung beschreibt dabei die Vermengungsstruktur des Versuchsplans (Siebertz et al., 2010). Eine ungewünschte Eigenschaft von Screening Designs mit Auflösung III ist die Verwechslung von Haupteffekten der Faktoren mit Ein- oder Zwei-Faktor-Wechselwirkungen. Wenn ein vermischter Effekt aktiv ist, entsteht Unklarheit bezüglich des tatsächlichen Effekts der Faktoren. In diesem Fall sind zusätzlich Versuchsdurchläufe zwingend notwendig. Wenn die Möglichkeit besteht, dass mehrere Zwei-Faktor-Wechselwirkungen auftreten ist ein Screening Design der Auflösung IV eine Alternative. Diese benötigen hingegen die zweifache Anzahl an Versuchen, im Vergleich zu Designs der Auflösung III. Das Definitive Screening Design benötigt jedoch nur  $2m + 1$  Versuchsdurchläufe bei  $m$  Faktoren. Der Versuchsplan basiert dabei auf  $m$  Faltungspaaren und einem Gesamtmittelpunkt. Jeder Versuch, ausgenommen der Versuch des Gesamtmittelpunkts, hat hierbei eine Faktorstufe auf ihrem Mittelpunkt eingestellt. Die Parametereinstellung 0 stellt hier den Mittelpunkt des Variationsbereichs dar. Die anderen Faktoren sind auf ihrer minimalen (-1) oder maximalen (1) Stufe gesetzt. Definitive Screening Designs arbeiten also mit drei Faktorstufen, dem Minimum, dem Mittelunkt und dem Maximum eines jeden Faktors (Jones und Nachtsheim, 2011).

Tabelle 3.1 zeigt eine Beispiel eines Definitive Screening Designs mit sechs Faktoren. Die Orthogonalität des Designs lässt sich an der Belegung der Hauptdiagonalen mit Mittelpunktversuchen erkennen. Innerhalb des Designs steht 0 für den Mittelpunktversuch, 1 für das Maximum und -1 für das Minimum. In der rechten Spalte werden die Ergebnisse  $y_i$  aus den Versuchsdurchläufen mit den entsprechenden Faktoreinstellungen eingetragen. In der Tabelle sind  $x_i$  die verwendeten Faktoren.

Durchlauf (i)	$x_{i,1}$	$x_{i,2}$	$x_{i,3}$	$x_{i,4}$	$x_{i,5}$	$x_{i,6}$	$y_i$
1	0	1	-1	-1	-1	-1	$y_1$
2	0	-1	1	1	1	1	$y_2$
3	1	0	-1	1	1	-1	$y_3$
4	-1	0	1	-1	-1	1	$y_4$
5	-1	-1	0	1	-1	-1	$y_5$
6	1	1	0	-1	1	1	$y_6$
7	-1	1	1	0	1	-1	$y_7$
8	1	-1	-1	0	-1	1	$y_8$
9	1	-1	1	-1	0	-1	$y_9$
10	-1	1	-1	1	0	1	$y_{10}$
11	1	1	1	1	-1	0	$y_{11}$
12	-1	-1	-1	-1	1	0	$y_{12}$
13	0	0	0	0	0	0	$y_{13}$

Tabelle 3.1: Beispiel eines Definitive Screening Designs mit sechs Faktoren (Jones und Nachtsheim, 2011)

Das Definitive Screening Design weist nach Jones und Nachtsheim (2011) die folgende Eigenschaften und Vorteile auf. Die Anzahl der erforderlichen Durchläufe eines Definitive Screening Designs beträgt lediglich eins mehr als das Doppelte der Anzahl der Faktoren. Des Weiteren sind, im Gegensatz zu Designs mit der Auflösung III, Haupteffekte vollständig unabhängig von Zwei-Faktor-Wechselwirkungen. Daher sind Schätzungen der Haupteffekte nicht durch die Anwesenheit aktiver Zwei-Faktor-Wechselwirkungen verzerrt, unabhängig davon, ob die Wechselwirkungen im Modell enthalten sind. Im Gegensatz zu Designs mit Auflösung IV werden auch Zwei-Faktor-Wechselwirkungen nicht vollständig mit anderen Zwei-Faktor-Wechselwirkungen verwechselt, obwohl sie korreliert sein können. Anders als bei Auflösungs-III-, IV- und V-Designs mit zusätzlichen Mittelpunkt sind bei Definitive Screening Designs alle quadratischen Effekte in Modellen, die aus einer beliebigen Anzahl von linearen und quadratischen Haupteffekten bestehen, schätzbar. Ein weiterer Vorteil ist, dass quadratische Effekte orthogonal zu den Haupteffekten und nicht vollständig mit Wechselwirkungen konfundiert sind, auch wenn eine Korrelation besteht. Bei sechs bis mindestens zwölf Faktoren ist ein Definitive Screening Design in der Lage, alle möglichen vollständigen quadratischen Modelle mit drei oder weniger Faktoren mit sehr hoher statistischer Effizienz zu schätzen (Jones und Nachtsheim, 2011).

Definitive Screening Designs sind also kleine Designs, die im Gegensatz zu Auflösungs-III- und IV-Screening Designs, die eindeutige Identifizierung aktiver Haupteffekte, aktiver quadratischer Effekte und bei moderatem Maß an „effect sparsity“ aktiver Zwei-Wege-Wechselwirkungen ermöglichen. Der Begriff „effect sparsity“ beschreibt hierbei, dass ein System vorwiegend durch einige wenige Haupteffekte niedriger Ordnung beeinflusst wird (Montgomery et al., 2022). Effekte höherer Ordnung können vernachlässigt werden.



## 4 Numerische Methoden und Werkzeuge

In diesem Kapitel werden die in der Studie verwendeten Werkzeuge und Methoden erläutert. Zunächst wird das numerische Modell der untersuchten Brennkammer vorgestellt. Anschließend wird das Versuchsdesign beschrieben und die Ableitung der Parametergrenzen diskutiert. Zudem werden die Zielgrößen sowie die daraus resultierende Versuchsmatrix präsentiert. Abschließend werden die für die Simulation notwendigen Vorbereitungen und die angewendeten Auswertemethoden erläutert.

### 4.1 Numerisches Modell der untersuchten Brennkammer

Das numerische Modell wird aus dem Prototypen der F400h Brennkammer des DLR-Instituts VT abgeleitet. Es werden weitere Vereinfachungen an der Geometrie des Brenners vorgenommen. Das erzeugte Rechengitter des numerischen Modells verfügt über mehrere Verfeinerungsstufen, um die Genauigkeit der Simulation zu erhöhen und eine detaillierte Darstellung der Strömungsphänomene in kritischen Bereichen der Brennkammer zu ermöglichen. Weiter wurden die Randbedingungen der Simulationen entsprechend der Anforderung der Strömungsähnlichkeit zum Referenzfall entwickelt. Das Entwerfen des Rechengitters, die Auswahl der Turbulenz- und Verbrennungsmodelle, die Gestaltung des Simulationsablaufs und das Durchführen einer ersten Testsimulation wurde von Timo Lingstädt aus der Abteilung Mikrogasturbinen am Institut für Verbrennungstechnik in Stuttgart übernommen. Basierend auf der Grundlage seiner Vorarbeit hat der Autor die Geometrien variiert, die jeweiligen Rechengitter erzeugt und die Simulationen für jede Variation durchgeführt sowie die Ergebnisse der Studie ausgewertet.

#### 4.1.1 Vereinfachte Brennergeometrie

Die F400h Brennkammer ist zweistufig ausgelegt mit einer drallstabilisierten Pilotstufe und einer jetstabilisierten Hauptstufe. Die Hauptstufe verfügt über zehn FLOX<sup>®</sup>-Düsen. Der grundlegende Aufbau des Brenners ist vergleichbar mit dem in Abbildung 2.4 zu sehenden F400n-Brenner. Der Schwerpunkt der Studie liegt auf der Untersuchung der Effekte der jetstabilisierten Hauptstufe. Die erste Vereinfachung besteht daher in der einstufigen Betrachtung. Auf der Brennerachse befindet sich also kein Pilotdom. Zusätzlich werden die in der Brennkammerwand weiter stromab zum Brennkammereintritt liegenden Mischluftbohrungen vernachlässigt. Abbildung 4.1 zeigt den Aufbau des vereinfachten geometrischen Modells. Aus der Vollgeometrie wurde ein Brennkammersektor ausgeschnitten um Symmetrieebenen zur Reduktion des Rechenaufwands ausnutzen zu können. Der Winkel des Sektors wird entsprechend der Anzahl der Düsen variiert, sodass ein Sektor immer nur eine Düse enthält. Die Geometrie der Luftdüse und der Brennstoffdüse wird ebenfalls vereinfacht. Die Brennstoffdüse verfügt im vereinfachten Modell über eine Einlaufstrecke für den Brennstoff, welche die zehnfache Länge des Innendurchmessers der Düse aufweist. Die Brennstoffdüse befindet sich innerhalb der Luftdüse mit dem Abstand  $l_{\text{misch}}$  zum Brennkammereintritt. Dieser dient als Vormischstrecke und ermöglicht die teilweise Vormischung des Brennstoffs mit der Luft vor dem Brennkammereintritt.

Aus der vereinfachten Geometrie wird ein Negativvolumen erzeugt, welches die Grundlage für die Netzgenerierung darstellt. Das CAD-Modell ist vollständig parametrisiert, um eine schnelle Variation der Geometrie zu ermöglichen.

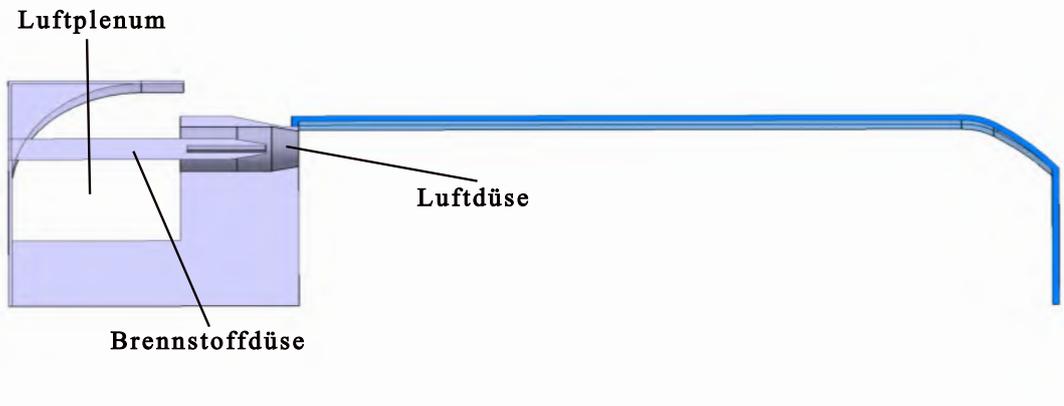


Abbildung 4.1: Vereinfachtes geometrisches Modell der F400h-Brennkammer

### 4.1.2 Rechengitter

Die grundlegende Struktur des Gitters besteht aus drei Auflösungsstufen. Aus dem allgemeinen Gitter in Brennraum und Plenum, dem feineren Gitter in der Mischstrecke und dem gröberen Gitter im Bereich der Flamme. In Abbildung 4.2 ist der Schnitt durch das Rechengitter dargestellt. Die zwei feineren Auflösungsstufen sind in Form von Zylindern unterschiedlicher Größe ausgestaltet. Der größere Zylinder soll den Bereich der Flamme abbilden und der kleinere den Bereich der Vormischstrecke. Der größere Zylinder stellt die erste Verfeinerungsstufe dar und der kleinere die zweite Verfeinerungsstufe. Im Folgenden wird sich mit größerem Zylinder auf den größeren Zylinder und mit feinerem Zylinder auf den kleineren Zylinder bezogen. Der feinere Zylinder beginnt immer stromauf des Brennstoffdüsenaustritts, unabhängig von der Länge der Mischstrecke und ragt bei jeder Variation um die gleiche Länge in den Brennraum. Der Durchmesser des feineren Zylinders entspricht dem Innendurchmesser der FLOX<sup>®</sup>-Düse. Die Geometrie des gröberen Zylinders bleibt bei jeder Variation unverändert, da sich die Geometrie des Brennraums nicht ändert. Die Größe der Zellen beträgt im Brennraum  $4 \cdot 10^{-3}$  m, im gröberen Zylinder  $1 \cdot 10^{-3}$  m und im feineren Zylinder  $5 \cdot 10^{-4}$  m. Das gesamte Rechengitter weist darüber hinaus  $1,502 \cdot 10^6$  Zellen auf. Die Außenwände der Brennkammer sind mit Prismenschichten versehen worden, während die Brennkammerwände als Symmetriefflächen definiert werden. Die Prismenschichten verbessern die Modellierung der Grenzschicht.

Die Flächen sind in Abbildung 4.2 mit roter Farbe kenntlich gemacht.



Abbildung 4.2: Rechengitter für die Simulation der reaktiven Brennkammerströmung

Abbildung 4.3 zeigt den feineren Zylinder in der Detailansicht. In dieser sind die Prismenschichten an den Wänden sehr gut zu erkennen.

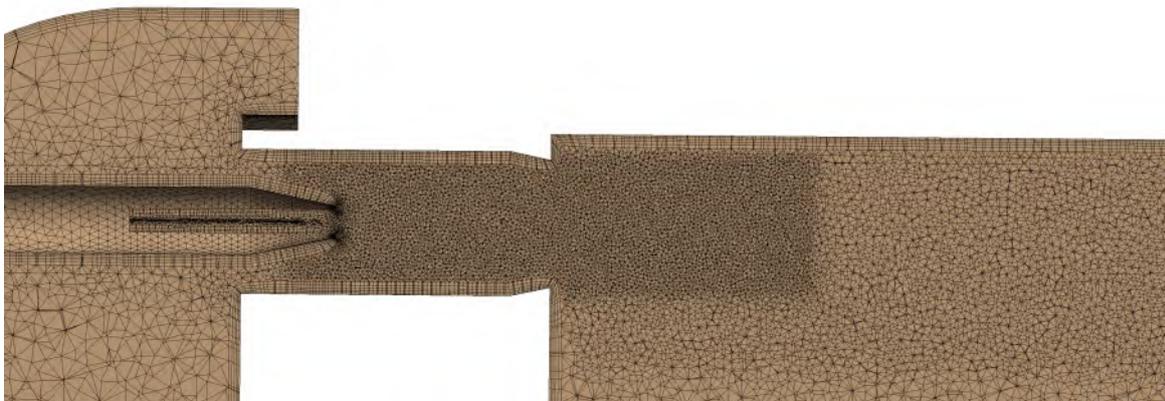


Abbildung 4.3: Detailansicht der Verfeinerungszone der Luftdüse

### 4.1.3 Randbedingungen der Simulationen

Die Abschätzung der Randbedingungen für die Simulation ist ein elementarer Schritt und hat maßgeblichen Einfluss auf das Ergebnis. Als Brennstoff wird eine 80:20 massenanteilige Wasserstoff-Methanmischung verwendet. Für die Abschätzung der Randbedingungen liegt der Referenzfall der AE-T100 Mikrogasturbine vor.

Die Randbedingungen bei Vollastbedingungen sind in Tabelle 4.2 aufgelistet.

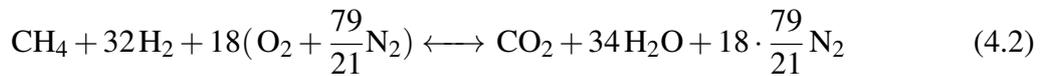
<b>Betriebsparameter</b>	
Treibstoffleistung	333 kW
Brennkammeraustrittsdruck	4 bar
Vorwärmtemperatur Luft	600 °C

Tabelle 4.1: Randbedingungen des Referenzfalls

Der erste Schritt besteht in der Berechnung des stöchiometrischen Luftverhältnisses. Dieses ist notwendig, um die Luftzahl  $\lambda$  berechnen zu können. Nach Schneider (2017) läuft die vollständige Umsetzung eines Brennstoffgemisches, bestehend aus  $\text{CH}_4$  und  $\text{H}_2$ , mit  $\text{O}_2$  nach folgendem Reaktionsschema ab:



Als Oxidator soll in den Simulationen Luft verwendet werden. Es wird vereinfacht angenommen, dass sich die Luft aus 21 Vol.-%  $\text{O}_2$  und 79 Vol.-%  $\text{N}_2$  zusammensetzt. Weitere Gasbestandteile werden vernachlässigt. Mit dieser Annahme ergibt sich folgendes Reaktionsschema für eine stöchiometrische Verbrennung:



Aus der Reaktionsgleichung lässt sich das stöchiometrische Luft-Brennstoffverhältnis  $AFR_{st}$  berechnen, welches sich zu  $AFR_{st} = 30,7$  ergibt. Es ist zu beachten, dass dem hier berechneten stöchiometrischen Luft-Brennstoffverhältnis gerundete Molmassen zugrunde liegen. Laut Joos (2006) ist diese Vereinfachung hinreichend genau. Mit  $AFR_{st}$  kann bei gegebener Luftzahl  $\lambda$  und gesetztem Brennstoffmassenstrom  $\dot{m}_{Br}$  der Luftmassenstrom  $\dot{m}_L$  berechnet werden:

$$\dot{m}_L = \lambda \cdot AFR_{st} \cdot \dot{m}_{Br}. \quad (4.3)$$

Die Luftzahl  $\lambda$  geht hierbei in der Maschine aus der Aufteilung der Luft in Primär- und Sekundärzone hervor. Eine höhere Luftzahl ist also mit einem höheren Luftmassenstrom in die Primärzone der Brennkammer gleichzusetzen, während eine kleinere Luftzahl in einem höheren Luftmassenstrom in die Sekundärzone der Brennkammer resultiert.

Der Brennstoffmassenstrom lässt sich aus der Treibstoffleistung des Referenzfalls berechnen:

$$\dot{m}_{Br,ref} = \frac{P_{therm,ref}}{H_u}. \quad (4.4)$$

In dieser Gleichung beschreibt  $H_u$  den unteren Heizwert und  $P_{therm,ref}$  die Treibstoffleistung des Referenzfalls.

Äquivalent zu DIN6976 lässt sich der Heizwert des Gemisches massenbezogen wie folgt berechnen:

$$H_u = 0,8 \cdot \frac{241,72}{2,01588} \text{MJ/kg} + 0,2 \cdot \frac{802,69}{16,043} \text{MJ/kg} = 105,933 \text{MJ/kg}. \quad (4.5)$$

Die grundlegende Forderung in der Studie ist das Erreichen ähnlicher Strömungsbedingungen und das Begrenzen des Druckverlusts. Die Variation der Betriebsparameter und der Geometrieparameter resultiert zwingend in der Änderung der Strömungsbedingungen und damit auch in der Änderung der Düsenaustrittsgeschwindigkeit. Diese beeinflusst zum einen den Druckverlust in der Brennkammer, welcher minimiert werden soll, um die Gesamteffizienz der Turbine zu erhöhen. Zum anderen ist die Düsenaustrittsgeschwindigkeit maßgeblich für die Ausbildung der Rezirkulationszone und die Aufenthaltszeit in der Brennkammer. Im Abschnitt 3.3 wurde die Machzahlähnlichkeit bereits hergeleitet und die Vorteile in diesem Anwendungsfall gegenüber der Reynoldsähnlichkeit begründet. Der Brennstoffmassenstrom in die Brennkammer wird gemäß Gleichung ?? skaliert:

$$\dot{m}_1 = \dot{m}_{\text{ref}} \cdot \frac{p_1}{p_{\text{ref}}} \cdot \sqrt{\frac{T_{\text{ref}}}{T_1}}. \quad (4.6)$$

Der Index ref steht dabei für die Bedingungen im Referenzfall und der Index 1 für die Bedingungen in der jeweiligen Variation. Der Brennstoffmassenstrom wird mit dem Druckverhältnis und der Wurzel des Temperaturverhältnisses skaliert. Diese Skalierung resultiert zum einen in einer ähnlichen Düsenaustrittsgeschwindigkeit im Vergleich zum Referenzfall. Die Skalierung mit der Temperatur berücksichtigt zum anderen den geringeren Leistungseintrag, der aus einer Temperaturabsenkung der Lufttemperatur resultiert. Dadurch wird erreicht, dass die Betriebspunkte zu AE-T100 Turbine vergleichbar bleiben. Der F400h Brenner ist zweistufig ausgeführt. Der Großteil des Brennstoffs strömt durch die Hauptstufe. Für die vorliegende Studie wurde vereinfacht angenommen, dass über den gesamten Betriebsbereich 90% des gesamten Brennstoffmassenstroms die Hauptstufe geleitet wird.

Mit folgender Gleichung ergibt sich aus dem skalierten Brennstoffmassenstrom  $\dot{m}_{\text{Br}}$  dementsprechend der Luftmassenstrom:

$$\dot{m}_L = \lambda \cdot AFR_{\text{st}} \cdot \dot{m}_{\text{Br},1}. \quad (4.7)$$

Abhängig von der Anzahl der Düsen des jeweiligen Variationsfalls ergeben sich Luft- und Brennstoffmassenstrom in der Simulation zu:

$$\dot{m}_{\text{L,Düse}} = \frac{\dot{m}_L}{n_{\text{Düse}}}, \quad \dot{m}_{\text{Br,Düse}} = \frac{\dot{m}_{\text{Br},1}}{n_{\text{Düse}}}. \quad (4.8)$$

## 4.2 Versuchsdesign

Das Versuchsdesign ist ein entscheidender Schritt zur Durchführung der Experimente. Zunächst werden die Parametergrenzen basierend auf den geforderten Randbedingungen abgeschätzt und die zu untersuchenden Zielgrößen festgelegt. Darauf aufbauend wird die Versuchsmatrix als Definitive Screening Design mithilfe des Programms JMP erstellt.

### 4.2.1 Variationsparameter

Die Variationsparameter lassen sich in zwei Kategorien aufteilen: Geometrieparameter und Betriebsparameter. Zunächst werden alle möglichen Variationsparameter vorgestellt und folgend die Auswahl der zu untersuchenden Parameter begründet.

<b>Geometrieparameter</b>	<b>Betriebsparameter</b>
Anzahl der Düsen	Vorwärmtemperatur der Luft
Innendurchmesser der Luftdüse	Brennkammeraustrittsdruck
Innendurchmesser der Brennstoffdüse	relative Brennstoffleistung
Länge Mischungsabschnitt	Brennkammerluftzahl
Abstand Brennstoffdüse	Brennstoffmischung
Brennkammerdurchmesser	

Tabelle 4.2: Mögliche Geometrieparameter und Betriebsparameter

Die Anzahl der zu variierenden Parameter, in der statistischen Versuchsplanung als Faktoren bezeichnet, beeinflusst direkt die Anzahl der Versuche im Definitive Screening Design. Aus diesem Grund ist es wichtig, die Anzahl der möglichen Parameter zu beschränken. Bei den Geometrieparametern wird die Länge des Mischungsabschnitts und der Abstand der Brennstoffdüse zum Brennraumeintritt zu einem Parameter zusammengefasst. Weiter wird festgelegt, dass die Variation des Brennkammerdurchmessers im Rahmen dieser Studie vernachlässigt werden soll. Die Variation der Brennstoffmischung soll vernachlässigt werden, um eine höhere Vergleichbarkeit zwischen den einzelnen Versuchen gewährleisten zu können. Die zu untersuchenden Betriebsparameter sind in Tabelle 4.3 angegeben.

<b>Betriebsparameter</b>	<b>Formelzeichen</b>
Vorwärmtemperatur der Luft	$T_L$
Brennkammeraustrittsdruck	$p_{out}$
rel. Brennstoffleistung	$P_{rel}$
Brennkammerluftzahl	$\lambda$

Tabelle 4.3: Betriebsparameter und deren Formelzeichen

In Tabelle 4.4 sind die Geometrieparameter angegeben.

Geometrieparameter	Formelzeichen
Anzahl der Düsen	$n$
Innendurchmesser Luftdüse	$D_L$
Innendurchmesser Brennstoffdüse	$D_{Br}$
Länge des Mischungsabschnitts	$l_{misch}$

Tabelle 4.4: Geometrieparameter und deren Formelzeichen

In Abbildung 4.4 sind die variierten Geometrieparameter, der Durchmesser der Luftdüse  $D_L$ , der Durchmesser der Brennstoffdüse  $D_{Br}$  und die Länge der Mischstrecke  $l_{misch}$  dargestellt.

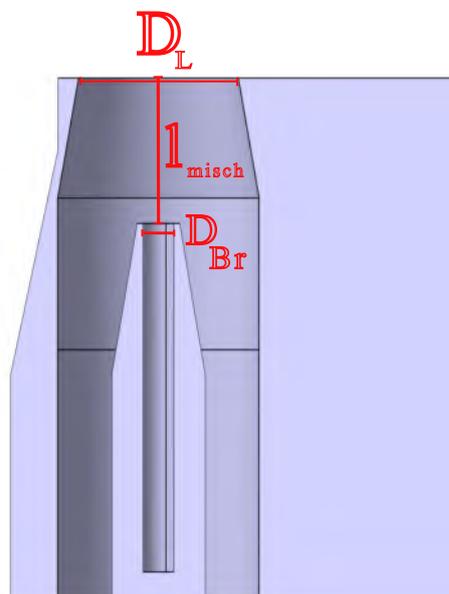


Abbildung 4.4: Variierte Geometrieparameter

### 4.2.2 Parametergrenzen

Die Beurteilungskriterien zur Abschätzung der Parametergrenzen umfassen zum einen die Düsenaustrittsgeschwindigkeit und zum anderen das Gewährleisten einer inkompressiblen Strömung. Dabei müssen die Rahmenbedingungen der Turbine und die Notwendigkeit einer stabilen Verbrennung berücksichtigt werden. Es muss ein Luftzahlbereich festgelegt werden, der eine stabile Verbrennung ermöglicht. Die Erfahrungswerte des Instituts besagen, dass die Düsenaustrittsgeschwindigkeit im Bereich von 40 m/s bis 120 m/s liegen soll, um einen Brennkammerdruckverlust von unter 5% zu erreichen.

Unter diesen Randbedingungen ergeben sich die Parametergrenzen, wie in Tabelle 4.5 und Tabelle 4.6 gezeigt.

Betriebsparameter	Untere Grenze	Obere Grenze
Lufttemperatur	400°C	600°C
Brennkammeraustrittsdruck	1 bar	8 bar
rel. Brennstoffleistung	70 %	100 %
Brennkammerluftzahl	2	4, (5)

Tabelle 4.5: Betriebsparameter und deren Grenzen

Geometrieparameter	Untere Grenze	Obere Grenze
Anzahl der Düsen	10	14
Innendurchmesser Luftdüse	9,48	10,94 (%)
Innendurchmesser Brennstoffdüse	1,45	2,04 (%)
Länge des Mischungsabschnitts	3,64	18,24 (%)

Tabelle 4.6: Geometrieparameter und deren Grenzen

Der Innendurchmesser der Luftdüse, der Innendurchmesser der Brennstoffdüse und die Länge des Mischungsabschnitts werden mit dem Brennkammerdurchmesser (mm) normiert. Des Weiteren wird die obere Grenze der Luftzahl zunächst auf  $\lambda = 5$  gesetzt. Vorläufige Simulationen zeigen, dass eine niedrige relative Treibstoffleistung, eine niedrige Temperatur und stark mageren Bedingungen von  $\lambda = 5$  zu einem Verlöschen der Flamme in der Simulation führen. Daher wird die obere Grenze auf  $\lambda = 4$  herabgesetzt, um für jeden Versuchsdurchlauf entsprechende Werte der Zielgrößen für das Definitive Screening Design zu erhalten. Bei der Abschätzung der Parametergrenzen wurde eine Abwägung getroffen zwischen dem Begrenzen der Geschwindigkeit und der Breite des Variationsbereichs. Um eine Düsenaustrittsgeschwindigkeit unterhalb  $u_{\text{Düse}} = 120 \text{ m/s}$  zu erreichen, müssten die Grenzen der Parameter, welche zu einer Geschwindigkeitserhöhung führen, sehr stark verschoben werden. Dadurch würde der zu untersuchende Variationsbereich stark verkleinert. Das Ziel der Studie ist allerdings einen möglichst großen Variationsbereich zu untersuchen, um die Grundlage für detailliertere zukünftige Studien zu legen. Die Parametergrenzen werden dementsprechend so gewählt, dass die Düsenaustrittsgeschwindigkeit in den Extrempunkten zwar über  $120 \text{ m/s}$  liegt, die Strömung allerdings weiter als inkompressibel mit einer Machzahl von  $Ma < 0,3$ , betrachtet werden kann.

### 4.2.3 Zielgrößen

Die auszuwertenden Zielgrößen können in drei Kategorien aufgeteilt werden. Es wird zwischen Emissionen, der Flammenform und der Flammenstruktur sowie dem Brennertotaldruckver-

lust unterschieden. Die Zielgrößen sind mit ihren entsprechenden Formelzeichen in Tabelle 4.7 aufgelistet.

Zielgröße	Formelzeichen
NO <sub>x</sub> Emissionen	NO <sub>x</sub>
CO Emissionen	CO
Verteiltheit der Flamme	VER
Abhebehöhe der Flamme	HAB
Flammenlänge	$l_F$
rel. Brenntotaldruckverlust	$\frac{\Delta p}{p}$

Tabelle 4.7: Zielgrößen und deren Formelzeichen

Im Folgenden werden die Zielgrößen weiter erläutert. Die NO<sub>x</sub>-Emissionen und die CO-Emissionen werden als massengewichteter Durchschnitt am Brennkammerauslass berechnet. Die Verteiltheit der Flamme ist in dieser Arbeit definiert als das Verhältnis des Flammenvolumens zum Volumen des Brennraums:

$$VER = \frac{V_{\text{Flamme}}}{V_{\text{Brennraum}}} \quad (4.9)$$

Die Flammenlänge ist die Distanz zwischen dem untersten Punkt der Flamme und dem obersten Punkt der Flamme. Die Abhebehöhe wird als Distanz des untersten Punkts der Flamme zum Boden des Brennraums definiert. In Abbildung 4.5 sind die Zielgrößen der Flammenform veranschaulicht.

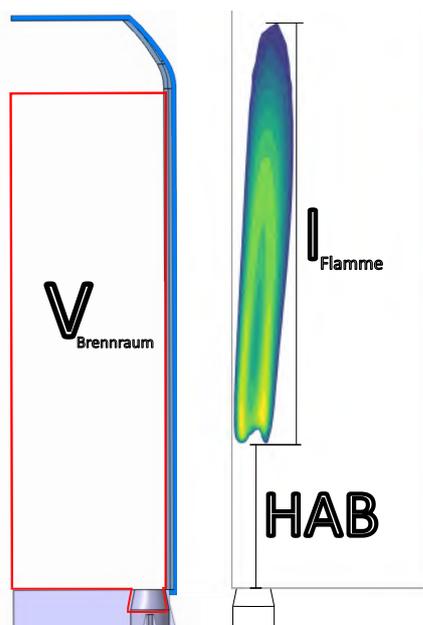


Abbildung 4.5: Definition des Brennraumvolumens, der Flammenlänge und der Abhebehöhe

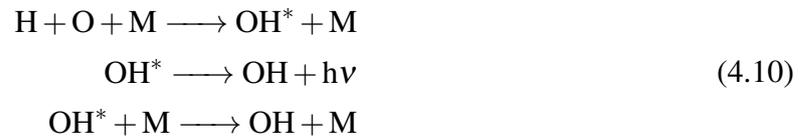
Die Definition des Brennraums ist links in Abbildung 4.5 zu sehen. Das Volumen reicht von dem Ende der Brennstoffdüse bis vor den Auslass, schließt also auch die Mischstrecke mit ein. Die Mischstrecke muss zur Definition hinzugefügt werden, um Fälle zu berücksichtigen, in welchen die Flamme in der Mischstrecke ankert.

### Flammendefinition

Für die Auswertung von sowohl experimentellen als auch numerischen Ergebnissen muss eine Flammendefinition festgelegt werden. Im experimentellen Bereich werden Flammenbilder vorwiegend mit Hilfe der OH\*-Chemlumineszenz (OH\*-CL) aufgenommen. Diese beschreibt nach Zanger (2016) die Lichtemissionen, die durch das elektronisch angeregte Hydroxyl-Radikal hervorgerufen werden. Das OH\*-Radikal wird ausschließlich innerhalb der Reaktionszone gebildet und dient aufgrund seiner sehr kurzen Lebensdauer als geeigneter Indikator für die Position der Flammenfront. Die Intensität der OH\*-Chemlumineszenz hängt exponentiell vom Brennstoffverhältnis ab, wodurch sie im mageren Bereich in Richtung des stöchiometrischen Verhältnisses stark zunimmt (Zanger, 2016). Bei der OH\*-CL handelt es sich um ein Verfahren der Sichtlinieintegration (Line-of-Sight), also um eine Integration aller Bildinformationen über die Brennkammertiefe. Wenn das Ziel einer numerischen Studie auch der Vergleich der OH\*-CL Bilder mit den Flammen aus der Simulation ist, muss dementsprechend auch für die Daten aus der Simulation eine Sichtlinieintegration durchgeführt werden. Der verwendete Finite Rate Chemistry Mechanismus liefert darüber hinaus die Möglichkeit, das OH\*-Radikal mitzurechnen. Dies wurde jedoch aus zwei Gründen nicht durchgeführt. Zum einen soll der Rechenaufwand jeder einzelnen Simulation begrenzt bleiben und zum anderen haben Erfahrungen am Institut für Verbrennungstechnik gezeigt, dass die skalare Multiplikation der Spezies O und H eine sehr genaue Näherung für die Reaktionszone liefert. Die Flammendefinition legt den Schwellenwert fest, ab dem ein Bereich der Flamme zugeordnet wird.

Zanger (2016) legt in seinen Untersuchungen der F400n Brennkammer 50% der Maximalintensität des Bildes als Flammendefinition fest. Die Sichtlinieintegration der O·H-Verteilung und die Anwendung dieser Flammendefinition führt allerdings dazu, dass nur ein verschwindend kleiner Teil des Bildes noch vorhanden ist. In den Punkten, in welchen die Flamme ankert, kommt es zu einer sehr hohen Konzentration von O-Radikalen und H-Radikalen. Durch die Multiplikation werden Punkte, an denen sich die Konzentrationen überschneiden, stark intensiviert, sodass die Maximalintensität, im Vergleich zum Rest der Reaktionszone, einen sehr großen Wert erhält. Auch der Versuch, weitere Marker der Reaktionszone zu verwenden, wie die von Chen et al. (2021) untersuchten H·CH<sub>2</sub>O- und OH·CH<sub>2</sub>O-Marker, die laut der Forschenden gute Indikatoren für die Wärmefreisetzungszone sind, führte nicht zu besseren Ergebnissen. Für die Auswertung wird daher festgelegt, dass die Berechnung auf Basis der OH-Konzentration durchgeführt wird und dass die Flammendefinition zu 30% der Maximalkonzentration von OH festgelegt wird. Der Vergleich verschiedener Schwellenwerte hat gezeigt, dass 30% die beste Näherung der Reaktionszone ermöglicht. Diese Festlegung erfolgte aufgrund subjektiver und optischer Analyse der Flammenformen.

Nach Kathrotia et al. (2010) kann die OH\*-Bildung und der Zerfall durch die folgenden elementaren Reaktionen modelliert werden:



Die erste Reaktion ist eine Dreikomponenten-Rekombinationsreaktion. Sie spielt eine wichtige Rolle bei niedrigen Temperaturen von unter 2800 K. Die entsprechende Rückreaktion, Reaktion 2, ist der dominante OH\*-Abbaumechanismus bei Temperaturen jenseits der 2800 K. Das OH\*-Radikal ist instabil und kehrt durch Lichtemission mit der Energie  $h\nu$  in Reaktion 2 oder durch kollisionalen Energietransfer auf einen Stoßpartner in Reaktion 3 in den Grundzustand zurück. Die OH-Konzentration tritt daher räumlich stromabwärts und zeitlich später auf als die OH\*-Konzentration, wobei die OH-Moleküle länger in den heißen Zonen verbleiben. In der Tendenz wird die Flammendefinition auf Grundlage der OH-Konzentration die Reaktionszone leicht überschätzen. Die Forschenden führen aus, dass Studien die hauptsächliche Bildung von OH\* in der Verbrennungszone zeigen, wo H-Atome mit atomarem Sauerstoff unter Beteiligung eines dritten Kollisionspartners in einer Rekombinationsreaktion reagieren (Kathrotia et al., 2010).

Die OH-Konzentration liefert folglich eine gute Näherung der Reaktionszone, weil das OH-Molekül das Resultat des Wärmefreisetzungsprozesses ist und den Ort der höchsten Produktkonzentration aus der Reaktion von OH\* zu OH liefert. Zur Beurteilung der Qualität des Markers werden über die Wärmefreisetzung und die OH-Flammendefinition berechneten Abhebehöhe der verschiedenen Simulationsergebnisse verglichen. Die prozentuale Abweichung beträgt hier im Durchschnitt über alle Simulationen nur 8,9%. Die Abhebehöhe ist basierend auf der mitberechneten Wärmefreisetzung in allen Simulationen etwas größer, als die Abhebhöhe aus der Flammendefinition. Für die Auswertung der Ergebnisse und die Berechnung der Zielgrößen wird keine Sichtlinienintegration durchgeführt. Dies stellt kein Problem dar, da keine experimentellen Daten für den Vergleich vorliegen. Weiter ist das Ziel der Studie das Erkennen von Trends und nicht die Berechnung absoluter Werte.

#### 4.2.4 Versuchsmatrix

Mit den festgelegten Parametergrenzen konnte die Versuchsmatrix in JMP entworfen werden. Die Versuchsmatrix ergibt sich dementsprechend wie folgt:

N	$\lambda$ -	$P_{rel}$ in %	$T_L$ in °C	$p_{out}$ in bar	$n$ -	$D_L$ in %	$D_{Br}$ in %	$l_{misch}$ in %
1	3	100	600	8	14	10,94	2,04	18,24
2	3	70	400	1	10	9,48	1,45	3,64
3	4	85	600	8	10	10,94	1,45	3,64
4	2	85	400	1	14	9,48	2,04	18,24
5	4	70	500	8	14	9,48	2,04	3,64
6	2	100	500	1	10	10,94	1,45	18,24
7	4	70	400	4,5	14	10,94	1,45	18,24
8	2	100	600	4,5	10	9,48	2,04	3,64
9	4	100	400	1	12	10,94	2,04	3,64
10	2	70	600	8	12	9,48	1,45	18,24
11	4	70	600	1	10	10,21	2,04	18,24
12	2	100	400	8	14	10,21	1,45	3,64
13	4	100	400	8	10	9,48	1,75	18,24
14	2	70	600	1	14	10,94	1,75	3,64
15	4	100	600	1	14	9,48	1,45	10,94
16	2	70	400	8	10	10,94	2,04	10,94
17	3	85	500	4,5	12	10,21	1,75	10,94

Tabelle 4.8: Versuchsmatrix des Definitive Screening Designs aus JMP

Es lässt sich die Orthogonalität des Versuchsdesigns an der Besetzung der Hauptdiagonalen mit den Mittelpunkt des jeweiligen Variationsbereichs erkennen. Die letzte Zeile stellt den Mittelpunktversuch dar. Die linke Spalte (N), stellt die Versuchsnummer dar. Im experimentellen Bereich wird nach Siebertz et al. (2010) die Randomisierung der Versuchsdurchläufe angewendet, um systematische Störungen, die zum Beispiel aus Umgebungseinflüssen resultieren, abfangen zu können. Alle Simulationen weisen die gleichen Umgebungsbedingungen auf und werden mit der gleichen Rechengitterstruktur durchgeführt. Störungen wie die Änderung der Umgebungstemperatur treten hier also nicht auf. Die Ergebnisse der CFD-Simulationen sind deterministisch, da die gleichen Randbedingungen auch immer zu dem gleichen Simulationsergebnis führen. Ein weiterer Ansatz zur Reduktion systematischer Fehler in der Versuchsplanung ist die Blockbildung. Gemäß Siebertz et al. (2010) wird diese Methode angewendet, um Fehler zu minimieren, die durch bekannte, aber unkontrollierbare Faktoren entstehen, da sie nicht zum betrachteten System gehören. Ziel ist es, den Einfluss dieser Fehler quantifizierbar zu machen und somit von der Berechnung der Faktoreffekte zu trennen (Siebertz et al., 2010). Auch Jones und Nachtsheim (2016) empfehlen die Anwendung von Blockbildung mit zusätzlichen

Mittelpunktversuchen, um die quadratischen Effekte besser abschätzen zu können. Die Anwendung der Blockbildung resultiert hier im Rahmen von numerischen Versuchen jedoch nicht in einem zusätzlichen Informationsgewinn. Die Ergebnisse der zusätzlichen Mittelpunktversuche unterscheiden sich nicht von dem Ergebnis des schon vorhandenen Mittelpunktversuchs. Im Experiment lassen sich über die wiederholten Versuche Aussagen über die statistische Güte und die Beeinflussung von externen Störgrößen treffen, was für die CFD-Simulationen jedoch nicht relevant ist.

### 4.3 Vorbereitung und Durchführung der Simulationen

Die Vorbereitung und Durchführung der Simulationen umfasste mehrere Schritte in verschiedenen Programmen. In Abbildung 4.6 ist der Ablauf der Stimulationdurchführung dargestellt. Im Folgenden werden der Ablauf sowie die einzelnen Schritte kurz erläutert.

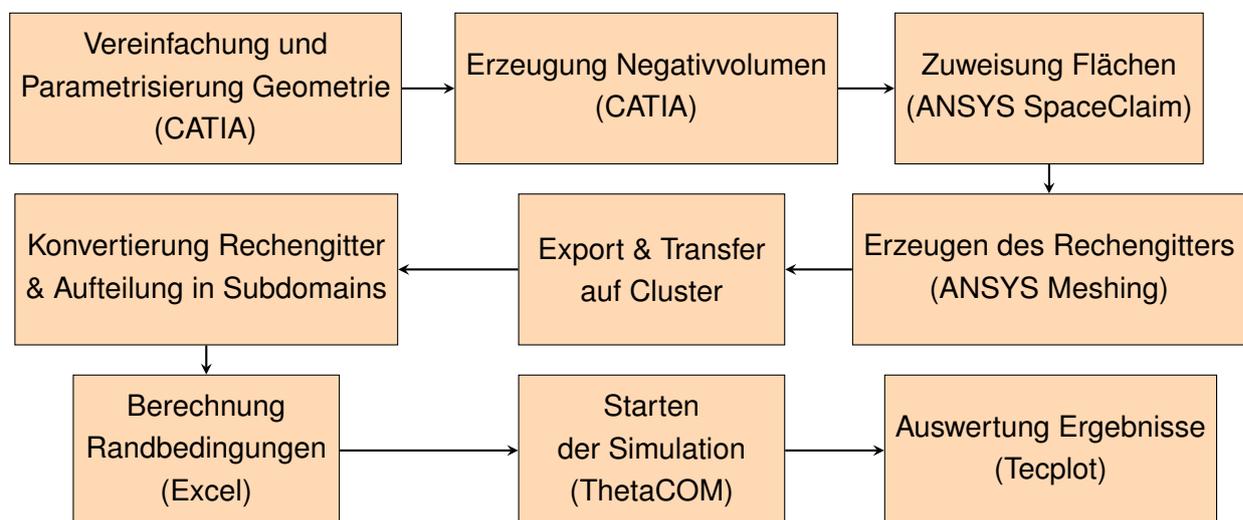


Abbildung 4.6: Ablauf der Vorbereitung, Durchführung und Auswertung der Simulationen

Der erste Schritt zur Vorbereitung der Simulationen ist das Vereinfachen der Brennergeometrie in CATIA. Darüber hinaus wird das Geometriemodell parametrisiert, um eine schnelle Anpassung der Geometrie an die jeweilige Variation zu ermöglichen. Weiter werden die in Abschnitt 4.1.2 beschriebenen Verfeinerungszylinder hinzugefügt. Aus dem Geometriemodell wird ein Negativvolumen erzeugt, welches das Strömungsvolumen beschreibt. Die Parametrisierung des CAD-Modells ermöglicht auch die Anpassung des Negativvolumens. Im Anschluss wird für die Geometrievariation die Flächenzuweisung in ANSYS Spaceclaim vorgenommen. Folgende Flächen werden zugewiesen: der Lufteinlass, der Brennstoffeinlass, der Auslass und die Symmetrieflächen. In Abbildung 4.2 sind diese gekennzeichnet. Basierend auf dieser Zuweisung wird das Rechengitter in ANSYS Meshing erzeugt, exportiert und auf das Cluster übertragen. Dafür wird das Rechengitter zunächst in ein für den ThetaCOM Solver lesbares Format konvertiert und des Weiteren in einzelne Subdomains unterteilt. Die Anzahl der Subdomains richtet sich nach der Anzahl der zu verwendenden Knoten auf dem Cluster. Die Simulationen werden mit

dem DLR eigenen Solver ThetaCOM durchgeführt. Dieser numerische RANS-, URANS- und LES-Solver zur Berechnung inkompressibler Strömungen wird als ThetaCOM bezeichnet, was für „Turbulent Heat Release Extension of the TAU-Code for COMbustion“ steht. Ursprünglich wurde ThetaCOM als Erweiterung des TAU-Solvers entwickelt. Der TAU-Solver des DLR ist ein Strömungslöser für nicht-reagierende Strömungen. Auf dessen Basis wurde der ThetaCOM-Solver speziell für die Simulation von Verbrennung entwickelt. Im Rahmen dieser Studie wird der RANS-Solver für die Simulationen verwendet. Der ThetaCOM-Solver ist für Strömungen niedriger Machzahl sowie stationäre und instationäre Strömungen optimiert. Der Solver verwendet die Finite Volumen Methode, unstrukturierte hybride Netze und einen Multi-grid Ansatz. Unter dem Multi-grid Ansatz wird die Verwendung mehrerer Gitter mit unterschiedlicher Detailtiefe verstanden, um die Konvergenzgeschwindigkeit zu erhöhen. Die eigentliche Simulation wird ebenfalls in mehreren Schritten durchgeführt, was in Abbildung 4.7 gezeigt ist.

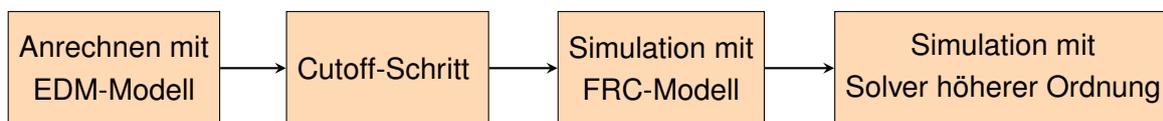


Abbildung 4.7: Schritte der Simulation

Die Simulation mit dem Anrechnen des einfacheren EDM-Modells. Diese Methode dient als Alternative zu der Anwendung einer Startlösung und kann einen hohen Grad der Konvergenz ermöglichen. Nach 2000 Iterationen wird für die nächsten 200 Iterationen ohne Verbrennungsmodell weitergerechnet. Dieser Schritt, bekannt als Cutoff, sorgt dafür, dass die Flamme von der Mischungszone getrennt wird und nicht in dieser verankert bleibt. Ab Iteration 2200 wird mit dem komplexeren Finite Rate Chemistry (FRC)-Modell bis zur Iteration 10000 weiter gerechnet. Nach 10000 Iterationen werden die Solver auf eine höhere Ordnung umgestellt, was eine bessere Konvergenz und eine Lösung höherer Qualität, im Vergleich zu den Solvern niedrigerer Ordnung, ermöglicht. Die maximale Anzahl der Iterationen variiert je nach Simulation und hängt von der Konvergenzgeschwindigkeit ab. Die maximale Anzahl von Iterationen zum Erreichen akzeptabler Konvergenz liegt bei 80000 und die maximale Dauer der Simulation bei 35 h.

#### 4.4 Auswertemethoden

Die Auswertung der Simulationsergebnisse wird in Tecplot vorgenommen. Tecplot bietet durch die Anwendung von Makros die Möglichkeit, Zielgrößen schnell und einfach zu berechnen. Das Flammenvolumen, die Flammenlänge und die Abhebehöhe der Flamme werden mit Isoflächen berechnet.

In Abbildung 4.8 ist die Flamme basierend auf der Isofläche bei einer OH-Flammendefinition von 30% dargestellt.

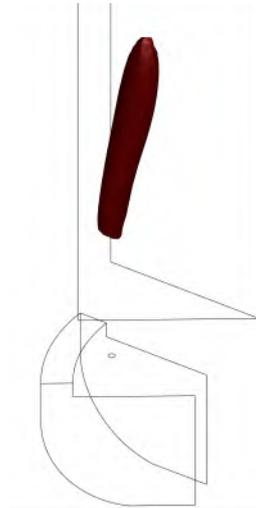


Abbildung 4.8: Isofläche basierend auf der OH-Flammendefinition von 30%

Wie in Abschnitt 4.2.3 erläutert, führt die Line-of-sight Integration zu keinen zufriedenstellenden Ergebnis. Aus diesem Grund wird die OH-Konzentration mit einer Schwelle von 30% der Maximalkonzentration als Flammendefinition für die Auswertung gewählt. Der relative Brennkammertotaldruckverlust berechnet sich wie folgt:

$$\Delta p = \frac{p_{t,in} - p_{t,out}}{p_{ref}} \cdot 100\% . \quad (4.11)$$

Der relative Brennertotaldruckverlust ergibt sich aus der Differenz des Totaldrucks am Lufteinlass in das Luftplenum und des Totaldrucks am Auslass des Brennraums, bezogen auf den Referenztotaldruck. Dieser sollte am Brennkammeraustritt gesetzt werden. Eine falsche Definition in den Eingabedateien von ThetaCOM führt jedoch dazu, dass der Referenzpunkt nicht am Brennkammeraustritt gesetzt wird, sondern im Ursprung.

Der Punkt des Referenzdrucks liegt also, wie in Abbildung 4.9 zu sehen, im Luftplenum und nicht am Brennkammeraustritt. Die gelben Bereiche beschreiben die Punkte mit Referenzdruck. Im Folgenden wird daher  $p_{out}$  mit  $p_{ref}$  bezeichnet. Bei der Berechnung des relativen Brennertotaldruckverlusts wird die Differenz zwischen Toladruck am Einlass und Totaldruck am Auslass durch den Refenzdruck geteilt, da keine absoluten Werte der Totaldrücke vorliegen. Es kann also weder durch den Totaldruck am Eingang in das Luftplenum, noch durch den Totaldruck am Brennkammeraustritt geteilt werden. Die Abweichung des totalen Referenzdrucks von dem totalen Eingangsdruck bewegt sich im Bereich von unter 2000 Pa. Dies beeinflusst folglich das Ergebnis des relativen Totaldruckverlusts nicht.

Des Weiteren hat die Abweichung des Brennkammeraustrittsdrucks von dem Referenzdruck hat keinen signifikanten Einfluss auf die Aussagefähigkeit der Modelle, da sich die Abweichung im Bereich von 6000 Pa befindet.

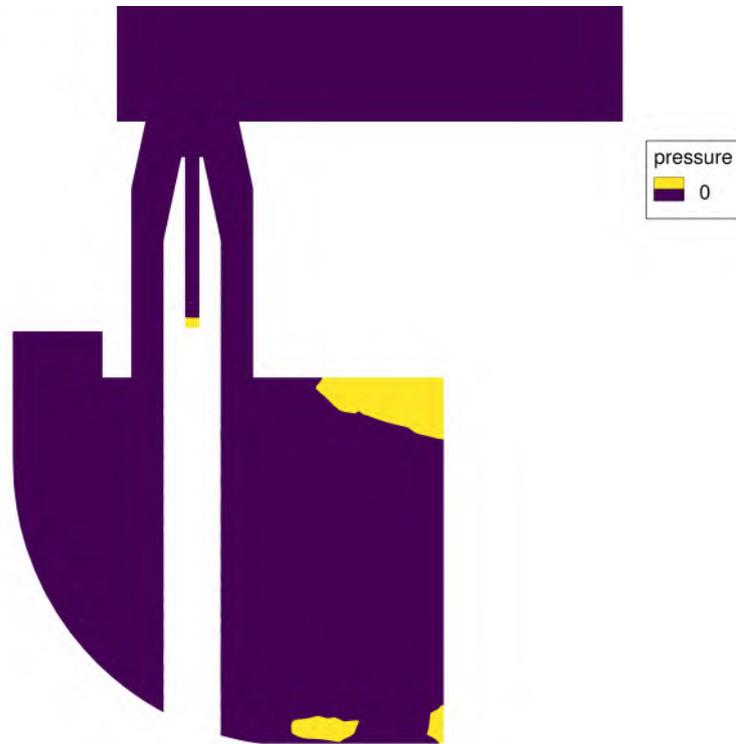


Abbildung 4.9: Punkte im Rechengebiet mit Referenzdruck (gelb)

Die  $\text{NO}_x$ - und  $\text{CO}$ - Emissionen werden nach der technischen Anleitung zur Reinhaltung der Luft (Bund, 2021) auf trockene Bedingungen und einen Sauerstoffanteil von 15% mithilfe des Tecplot Makros korrigiert. Diese Korrektur stellt die Vergleichbarkeit zwischen Emissionsmessungen sicher:

$$X_B = \frac{21 - X_{O,B}}{21 - X_{O,M}} \cdot X_M \quad (4.12)$$

$$X_{i,\text{trocken}} = \frac{X_{i,\text{nass}}}{1 - X_{\text{H}_2\text{O}}} \quad (4.13)$$

Dabei bezeichnet  $X_M$  den gemessenen Molanteil,  $X_B$  den Molanteil bezogen auf den Bezugsauerstoffgehalt,  $X_{O,M}$  den gemessene Sauerstoffgehalt und  $X_{O,B}$  den Bezugssauerstoffgehalt. In Gleichung 4.13 beschreibt  $X_{i,\text{trocken}}$  den Molanteil der auf trockene Bedingungen korrigierten Spezies,  $X_{i,\text{nass}}$  den Molanteil der Spezies unter nassen Bedingungen und  $X_{\text{H}_2\text{O}}$  den Molanteil von Wasser. Die  $\text{NO}_x$ - und  $\text{CO}$ -Emissionen werden darauf aufbauend als massengewichteter Mittelwert in der Austrittsfläche der Brennkammer berechnet. Die Anwendung des massengewichteten Mittelwerts ist hier sinnvoll, da dieser eine präzisere und repräsentativere Bewertung der Emissionen ermöglicht, indem die unterschiedlichen Strömungsbedingungen und Massenströme im Abgasstrom berücksichtigt werden.

## 5 Ergebnisse und Diskussion der Parametervariationen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der einzelnen Simulationen und des Definitive Screening Designs analysiert und diskutiert. Es werden zunächst die Ergebnisse des Mittelpunktversuchs vorgestellt. Daran anschließend sollen die Haupteffekte auf die einzelnen Zielgrößen und die optimale Parametervariation gezeigt werden. Im Anschluss sollen die relevanten Wechselwirkungen und Effekte 2. Ordnung analysiert werden. Abschließend werden die entscheidenden Parameter für die Brennerentwicklung hervorgehoben und miteinander verglichen. Die Werte der Zielgrößen in den Simulationen sind in Tabelle A.1 im Abschnitt A.1 aufgelistet.

### 5.1 Simulationsergebnisse des Mittelpunktversuchs

Der Mittelpunktversuch zeichnet sich durch die Parametersetzung im Mittelpunkt des Variationsbereichs aus. Die Parametereinstellungen werden daher wie in Tabelle 5.1 gesetzt.

Parameter	Einstellung
$\lambda$	3
$P_{rel}$	85 %
$T_L$	500 °C
$p_{ref}$	4,5 bar
$n$	12
$D_L$	10,21 %
$D_{Br}$	1,75 %
$l_{misch}$	10,94 %

Tabelle 5.1: Parametereinstellungen des Mittelpunktversuchs

Die Geometrieparameter Durchmesser der Luftdüse  $D_L$ , Durchmesser der Brennstoffdüse  $D_{Br}$  und Mischlänge  $l_{misch}$  werden mit dem Brennkammerdurchmesser normiert.

Abbildung 5.1 zeigt den Verlauf der Wärmefreisetzung im gesamten Rechengebiet (oben) und den Verlauf der Residuen über die Iterationen (unten).

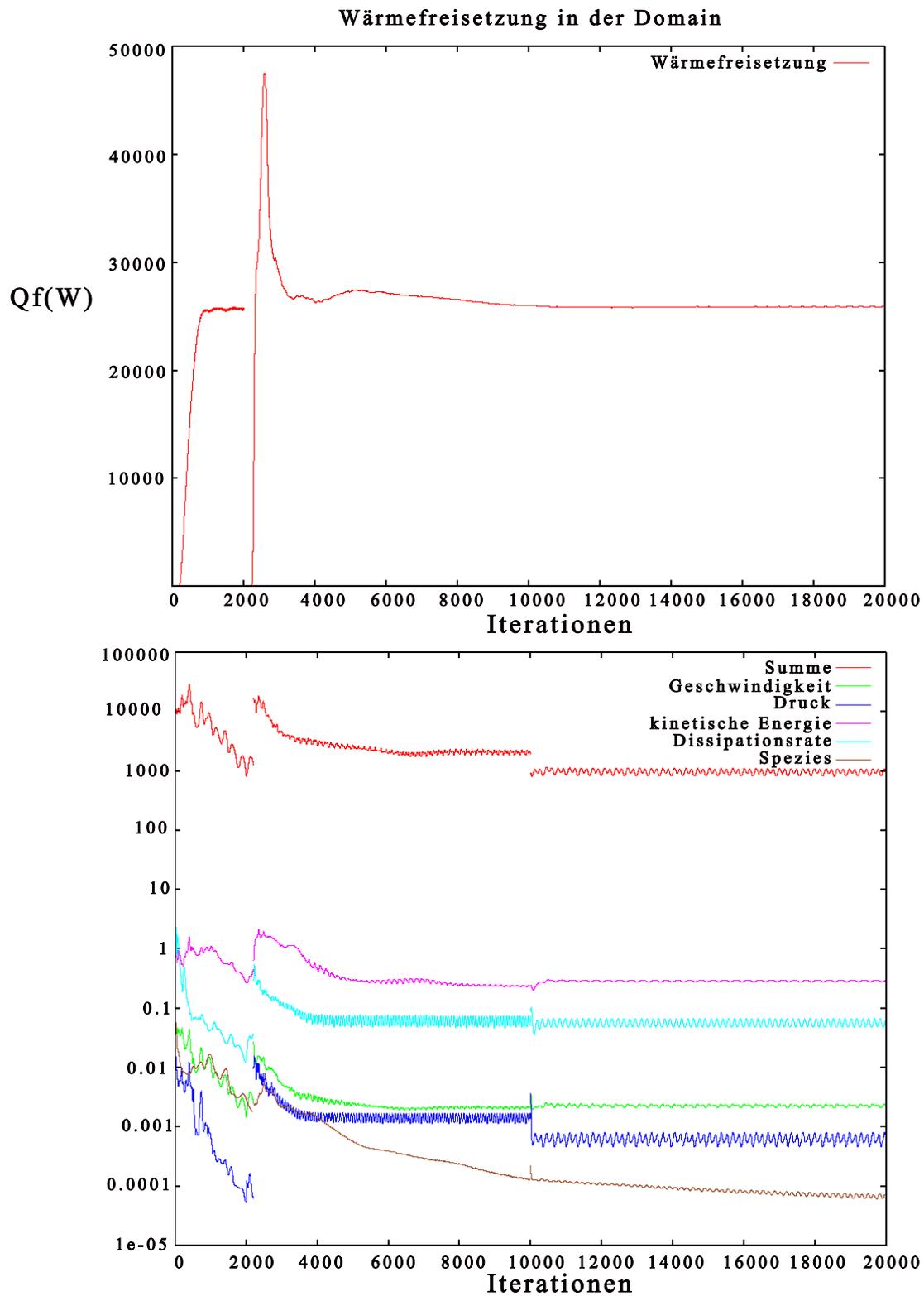


Abbildung 5.1: Wärmefreisetzung der gesamte Domain über die Iterationen (oben) und Residuen über die Iterationen (unten)

Wie in der Abbildung zu sehen, konnte ein sehr hoher Grad der Konvergenz erreicht werden. Der Cutoff-Schritt ist links von 2000 bis 2200 Iterationen sehr gut erkennbar. Wie in Abschnitt 4.3 erläutert, wird hier ohne das Verbrennungsmodell gerechnet, wodurch es auch zu keiner Wärmefreisetzung kommen kann. Die Residuen fallen mit fortschreitender Iterationsanzahl. Bei 10000 Iterationen ist ein starker, sofortiger Abfall der Residuen zu sehen, da ab hier mit einem Verfahren höherer Ordnung gerechnet wird. Die Werte der Residuen können allerdings nur im Vergleich zu anderen Simulationen zur Beurteilung der Konvergenz dienen, da es sich hier um die Summe aller Residuenwerte jeder einzelnen Zelle handelt.

Abbildung 5.2 zeigt die Verteilung der OH-Stoffmengenkonzentration im Simulationsgebiet im Mittelschnitt des Brennkammersektors. Unten links befindet sich die FLOX<sup>®</sup>-Düse, durch die das Luft-Brennstoff-Gemisch in den Brennraum eintritt. Die gelben Bereiche beschreiben Punkte mit einer hohen OH-Konzentration und damit auch hoher Reaktivität sowie Wärmefreisetzung. Die Flamme ist abgehoben und ankert, oberhalb des Endes der FLOX<sup>®</sup>-Düse, bei einer Abhebehöhe von 25%, bezogen auf den Brennkammerdurchmesser. Die Flamme weist eine normierte Länge von 28,3% auf. Die berechneten NO<sub>x</sub>-Emissionen liegen bei 6,35 ppm und die CO-Emissionen bei 0,51 ppm. Der Totaldruckverlust vom Lufteintritt in das Luftplenum zum Brennkammeraustritt beträgt 1,87%.

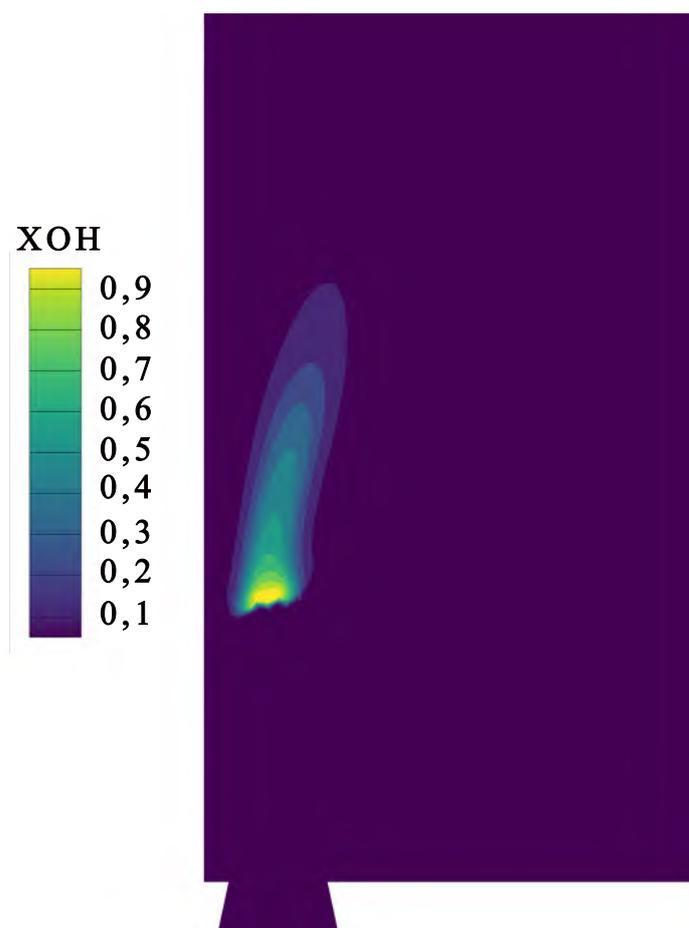


Abbildung 5.2: Verteilung der OH-Stoffmengenkonzentration des Mittelpunktsversuchs

Abbildung 5.3 zeigt die Flamme des Mittelpunktversuchs, basierend auf der festgelegten Flammendefinition von 30% der OH-Maximalkonzentration im Mittelschnitt der Brennkammer. Die Linie links neben der Flamme stellt die Brennkammeraußenwand dar. Das Ergebnis zeigt, dass die Flamme innen stärker abhebt, als auf der Seite der Außenwand. Dieses Phänomen lässt sich in allen Simulationen beobachten. Das Verhalten lässt sich anhand der Absolutgeschwindigkeitsverteilung und der Totaldruckverteilung in der Brennkammer erklären. Die Jetstabilisierung basiert auf dem Erzeugen einer hohen Rezirkulationsrate und großen Rezirkulationszone, wie in Abschnitt 2.1 erläutert.

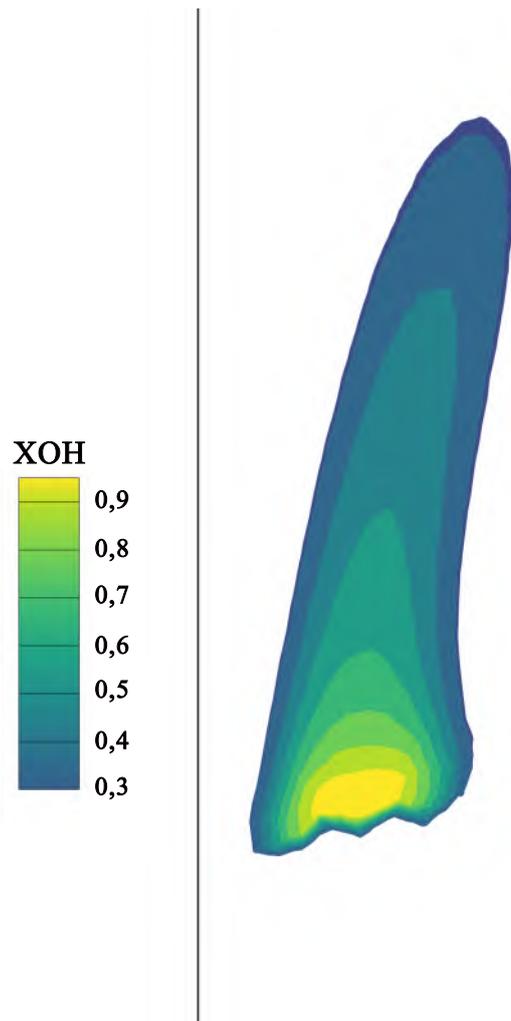


Abbildung 5.3: Flamme gemäß der OH-Flammendefinition

Die Abbildung 5.4 zeigt die Absolutgeschwindigkeit und die Stromlinien in der Simulationsdomain (rechts). Die Stromlinien verdeutlichen die entstehende, für die Jetstabilisierung charakteristische Rezirkulationszone. Links der Brennstoffdüse kann die Grenzschichtablösung in der FLOX<sup>®</sup>-Düse erkannt werden. Am Brennkammereintritt ist der hohe Austrittsimpuls des Luft-Brennstoffgemisches zu erkennen. Ebenfalls lässt sich die Ausbildung einer Rezirkulationszone von heißen Verbrennungsprodukten im Brennkammerzentrum beobachten.

In der Scherzone dieser Rezirkulationszone stabilisiert sich die Flamme.

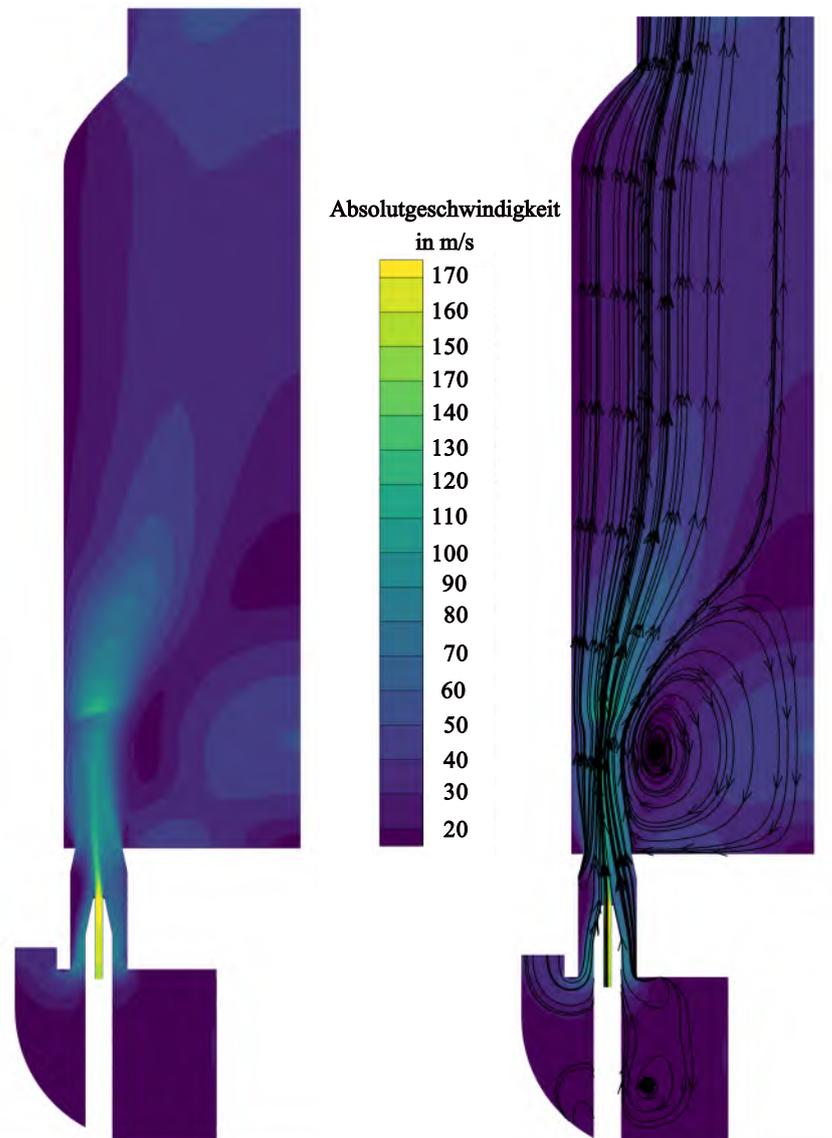


Abbildung 5.4: Verteilung der Absolutgeschwindigkeit (links) und Stromlinien des Mittelpunktsversuchs (rechts)

Abbildung 5.5 zeigt die Verteilung des Totaldrucks in der Brennkammer. Schwarze Linien repräsentieren die Isolinie einer Geschwindigkeit von Null in z-Richtung. In der Abbildung ist links von der Brennstoffdüse ein höherer Druckverlust, sichtbar durch dunkleres Grün, im Vergleich zur rechten Seite der Brennstoffdüse zu erkennen. Dieser Druckverlust resultiert aus der starken Umlenkung der Luft im Luftplenum. Dies führt zu einer Strömungsablösung an der linken Düsenwand aufgrund des geringeren Umlenkradius. An der rechten Wand hingegen wird die Strömung durch die Umlenkung an die Wand gedrückt. Der Druckverlust steigt mit steigender Luftzahl, da dann ein höherer Massenstrom stark umgelenkt werden muss. Durch diesen Totaldruckverlust ergibt sich folglich auch eine niedrigere Geschwindigkeit auf der linken Seite.

te der Brennstoffdüse. Die Flamme hebt rechts also im Mittelschnitt etwas weiter ab als links. Die Isogeschwindigkeitslinien zeigen Rezirkulationszonen und Bereiche der Grenzschichtablösung. Es ist zu beobachten, dass es auf der linken Seite der Brennstoffdüse, aufgrund der hohen Reibung, zu einer Grenzschichtablösung kommt.

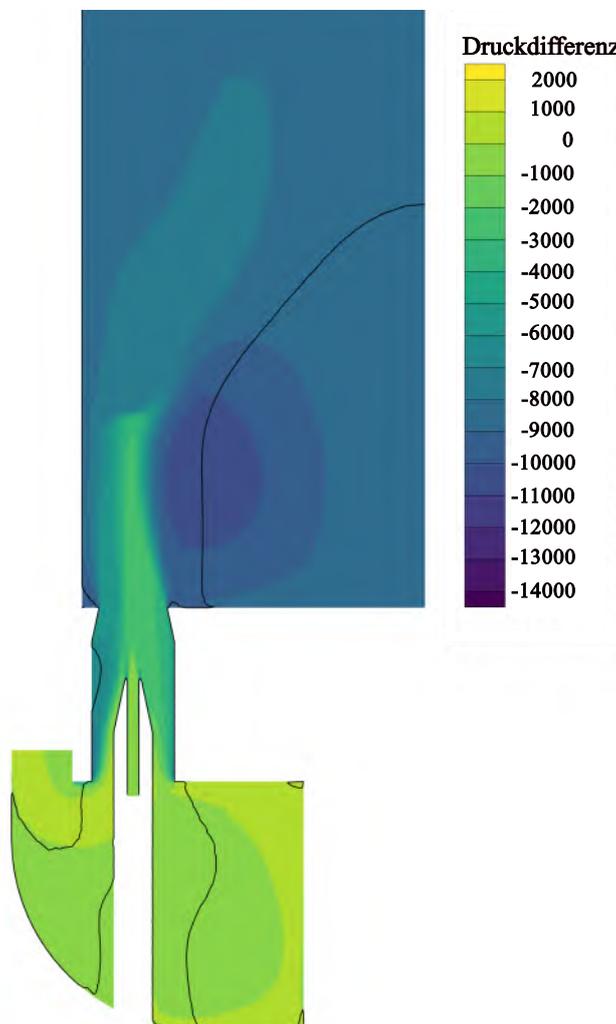


Abbildung 5.5: Totaldruckverteilung und Isolinien einer Geschwindigkeit von Null in Axial-richtung des Mittelpunktversuchs

Eine grundlegende Voraussetzung für die Ausbildung einer stabilen Flamme ist ein entsprechendes Luft-Brennstoff-Verhältnis. Die Abbildung 5.6 zeigt das lokale Lufterverhältnis in der Brennkammer. Es lässt sich das Ankeren der Flamme beobachten.

Die ermittelte, normierte Abhebehöhe von 27,05 %, entspricht der berechneten Abhebehöhe aus der Wärmefreisetzung von 27,22 %.



Abbildung 5.6: Verteilung des lokalen Luftverhältnisses des Mittelpunktsversuchs

## 5.2 Diskussion relevanter Verbrennungsanomalien

In diesem Abschnitt sollen die aufgetretenen Verbrennungsanomalien in den Simulationen vorgestellt und diskutiert werden. Zunächst kommt es im Verlauf der Studie zu divergierenden Simulationen. Bei diesen handelt es sich um die Simulationen 4, 6 und 14. Es kann beobachtet werden, dass ab 2200 Iterationen der Einschwingvorgang beim Einsatz des FRC-Modells und eines Solvers höherer Ordnung dazu führt, dass die Residuen der Spezies divergieren. In der Folge divergieren auch die Residuen der anderen Strömungsgrößen sowie die Wärmefreisetzung, was zum Abbruch der Simulation führt. Um dieses Problem zu lösen, wird der Speziestransport zunächst bis 10000 Iterationen mit einem Solver erster Ordnung berechnet. Erst danach erfolgte die Umschaltung auf einen Solver höherer Ordnung, sodass die Nutzung des FRC-Modells und die Umstellung des Speziessolvers nicht zeitgleich stattfanden.

### Flammenrückschlag

In Simulation 1 wird mit zunehmenden Iteration die Verbrennungsanomalie eines Flammenrückschlags beobachtet. Bei einem Flammenrückschlag stabilisiert sich die Flamme in der Mischzone. Der Flammenrückschlag ist in Abbildung 5.7 anhand der OH-Stoffmengenkonzentration zu sehen.

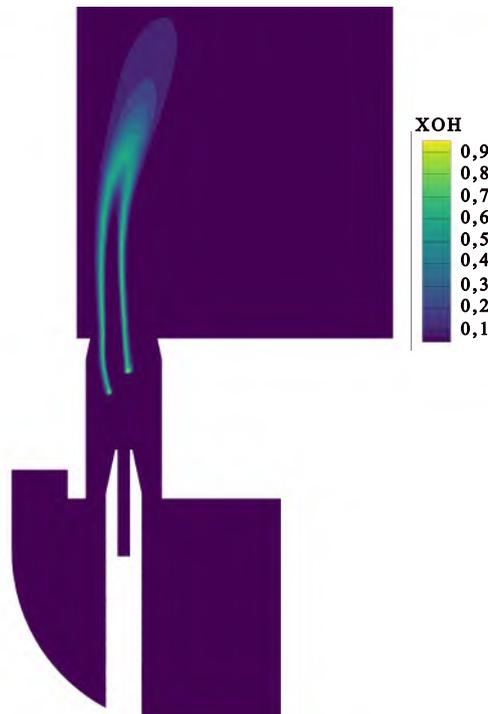


Abbildung 5.7: Flammenrückschlag in der Simulation 1

Aufgrund dieses Ergebnisses wird die Definition des Brennraums um das Volumen zwischen dem Ende der Brennstoffdüse und dem Eintritt in den Brennraum erweitert, um bei der Berechnung der Verteiltheit der Flamme auch die Simulation mit dem Flammenrückschlag zu berücksichtigen. Die Parametereinstellungen der Simulation sind in Tabelle ?? aufgeführt.

Parameter	Einstellung
$\lambda$	3
$P_{rel}$	100%
$T_L$	600 °C
$p_{ref}$	8 bar
$n$	14
$D_L$	10,94%
$D_{Br}$	2,04%
$l_{misch}$	18,24%

Tabelle 5.2: Parametereinstellungen der Simulation mit Flammenrückschlag

Der Vergleich der Parametereinstellungen dieses Falls mit den Einstellungen der restlichen Simulationen lässt erkennen, dass es sich hier um einen sehr reaktiven Fall mit einer relativen Brennstoffleistung von 100% und einem Referenzdruck von 8 bar handelt. Darüber hinaus lässt sich feststellen, dass hier die oberen Grenzen der Düsenanzahl, des Durchmessers der Luftdüse und des Durchmessers der Brennstoffdüse eingestellt sind. Dies führt zu einer Verringerung der Düsenaustrittsgeschwindigkeit. Aus den Abschätzungen ergibt sich eine mittlere Geschwindigkeit von 44,43 m/s für die Luftdüse und eine mittlere Geschwindigkeit von 104,18 m/s für die Brennstoffdüse. Diese Werte liegen im unteren Bereich der Düsenaustrittsgeschwindigkeiten des Variationsbereichs. Flammenrückschläge treten auf, wenn die Flammengeschwindigkeit die Strömungsgeschwindigkeit des Gasgemisches übersteigt. Flammenrückschläge können zur Beschädigung der Brennkammer führen und sind daher zwingend zu vermeiden.

In der Fallanalyse wird zunächst vermutet, dass der Cutoff-Schritt in der Simulation zu wenige Iterationen aufweist, wodurch die Flamme beim Wechsel zum FRC-Verbrennungsmodell in der Mischzone ankert. Diese Vermutung kann jedoch durch die Analyse der Abhebehöhe bei verschiedenen Iterationszahlen widerlegt werden. Der Verlauf der Abhebehöhe über der Anzahl der Iterationen ist in Abbildung 5.8 dargestellt. Erst nach 10000 Iterationen beginnt die Flamme sich in Richtung der Mischzone zu bewegen. Mit zunehmender Iterationszahl wird die Abhebehöhe stetig kleiner. Nach 35000 Iterationen ändert sich die Abhebehöhe nicht mehr. Dies zeigt, dass die Simulation vollständig konvergiert ist.

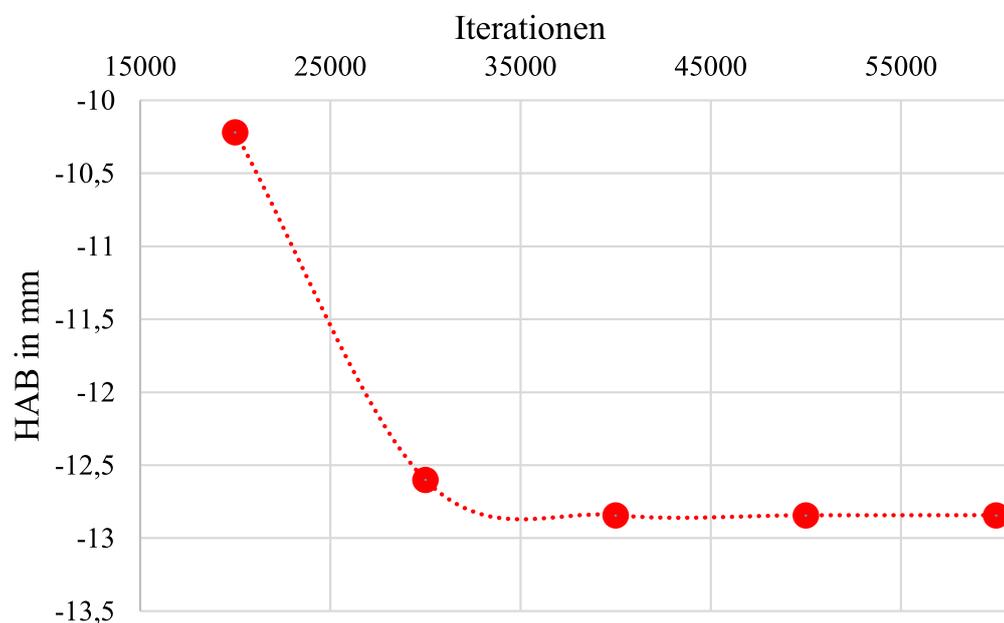


Abbildung 5.8: Abhebehöhe berechnet bei verschiedenen Iterationen der Simulation 1

### Magere Verlöschgrenze

Neben dem Flammenrückschlag kann auch in Simulation 13 die Stabilisierung der Flamme nahe der mageren Verlöschgrenze beobachtet werden. Das magere Flammenverlöschen ist mit RANS-Simulationen schwer vorauszusagen. In Abbildung 5.9 ist die OH-Konzentration dieser Variation dargestellt. Es ist zu sehen, wie sich die Flammenfront in der Brennkammer ausbreitet. Dies passiert unter stark mageren Bedingungen. Bei gleichzeitig niedriger Vorwärmtemperatur reicht die Stützwärme aus den rezirkulierenden Abgasen nicht mehr aus, um die Flamme zu stabilisieren. Folglich dehnt sich die Flammenfront in die Brennkammer aus und es besteht die Gefahr des mageren Verlöschens der Flamme. Die Grenze des Variationsbereichs der Luftzahl beträgt  $\lambda = 5$ , was bei mehreren Simulationen zum mageren Verlöschen der Flamme führt. Aus diesem Grund wird die obere Grenze der Luftzahl auf  $\lambda = 4$  herabgesetzt, wie in Abschnitt 4.2.2 erläutert. Die Absenkung der Vorwärmtemperatur führt zu einer Vergrößerung der chemischen Zeitskalen, wodurch die chemischen Reaktionen langsamer werden und sich die chemischen und turbulenten Zeitskalen annähern. Durch diesen Zusammenhang breitet sich die Flammenfront weiter im Brennraum aus und die Reaktionszone wird volumetrischer. Diesen Effekt konnte auch Zanger (2016) in seinen Experimenten mit dem F400n-Brennkammersystem beobachten.

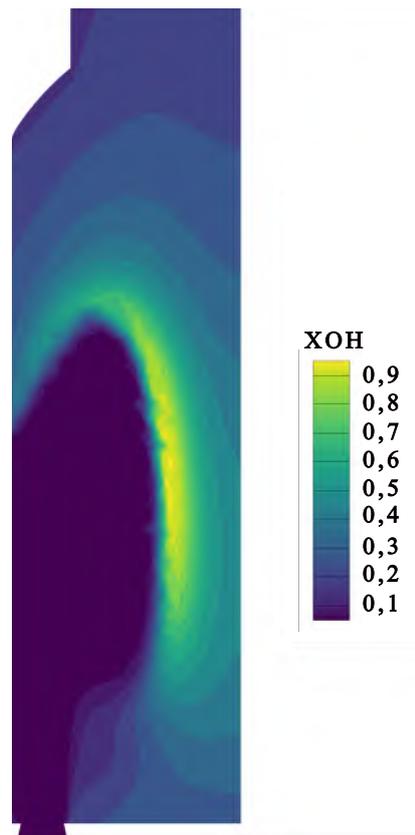


Abbildung 5.9: Flammenstabilisierung nahe der mageren Verlöschgrenze in Simulation 13

Abbildung 5.10 zeigt die Verteilung der Axialgeschwindigkeit und die Isolinien der Geschwindigkeit Null. Diese zeigen eine große Rezirkulationszone im Zentrum des Brennraums.

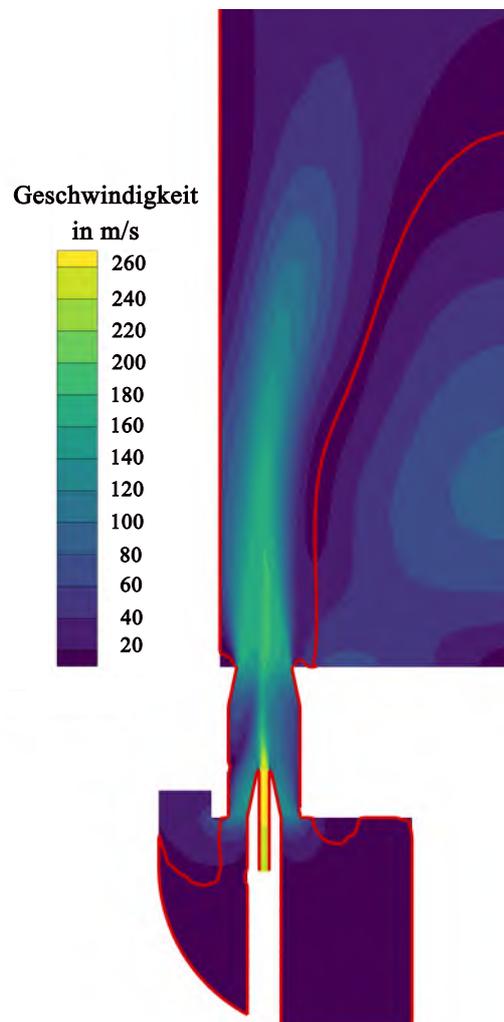


Abbildung 5.10: Verteilung der Absolutgeschwindigkeit in Simulation 13

### 5.3 Diskussion der Effekte auf die Zielgrößen

In diesem Abschnitt sollen die Haupteffekte der Parametervariationen auf die einzelnen Zielgrößen analysiert und begründet werden. Die Effekte ergeben sich dabei aus dem Definitive Screening Design. Das Programm JMP berechnet basierend auf dem Versuchsplan Modelle, welche einen funktionalen Zusammenhang zwischen den Parametern und den Zielgrößen herstellen. Basierend auf diesen Modellen kann die optimale Parametereinstellung ermittelt werden, um Ziele der Brennkammerentwicklung, wie Effizienzsteigerung, Emissionsminderung oder Bau-  
raumreduktion, zu erreichen.

### 5.3.1 NO<sub>x</sub>-Emissionen

Die Reduktion der NO<sub>x</sub>-Emissionen und der Emissionen im Allgemeinen ist ein fundamentales Ziel der Brennkammerentwicklung, um eine umweltfreundlichere Verbrennung zu ermöglichen. Abbildung 5.11 zeigt die signifikanten Haupteffekte der Parametervariationen auf die Zielgröße NO<sub>x</sub>. Die Steigung des funktionalen Zusammenhangs symbolisiert dabei die Stärke des Effekts. Die Effekte lassen sich in Haupteffekte, quadratische Effekte und Wechselwirkungen unterteilen. Im Fall von NO<sub>x</sub> sind nur Haupteffekte signifikant, weisen also einen p-Wert von unter 0,05 auf.

Die hier gezeigten Parametereinstellungen, in Abbildung 5.11 als rote Zahlen dargestellt, sind die Mittelpunkte des Variationsbereichs mit der Luftzahl  $\lambda = 3$ , einer Vorwärmtemperatur von  $T_L = 500^\circ\text{C}$  und einem Referenzdruck von  $p_{\text{ref}} = 4,5 \text{ bar}$ . Für die NO<sub>x</sub>-Emissionen ein linearer Zusammenhang zwischen den einzelnen Parametern und den NO<sub>x</sub>-Emissionen. Dieser lineare Zusammenhang ergibt sich aus der Signifikanz der Parameter. Aufgrund des festgelegten Signifikanzniveaus von 5% sind bei den NO<sub>x</sub>-Emissionen lediglich Haupteffekte signifikant, während quadratische Effekte oder Wechselwirkungen nicht signifikant sind, was die Linearität erklärt. Es ist zu erwarten, dass die Luftzahl, die Vorwärmtemperatur der Luft und der Referenzdruck die wesentlichen Haupteffekte darstellen, da der thermische NO-Reaktionspfad dominiert. Darüber hinaus führt der höhere Referenzdruck zu einer erhöhten Dichte, was wiederum höhere Reaktionsraten zur Folge hat.

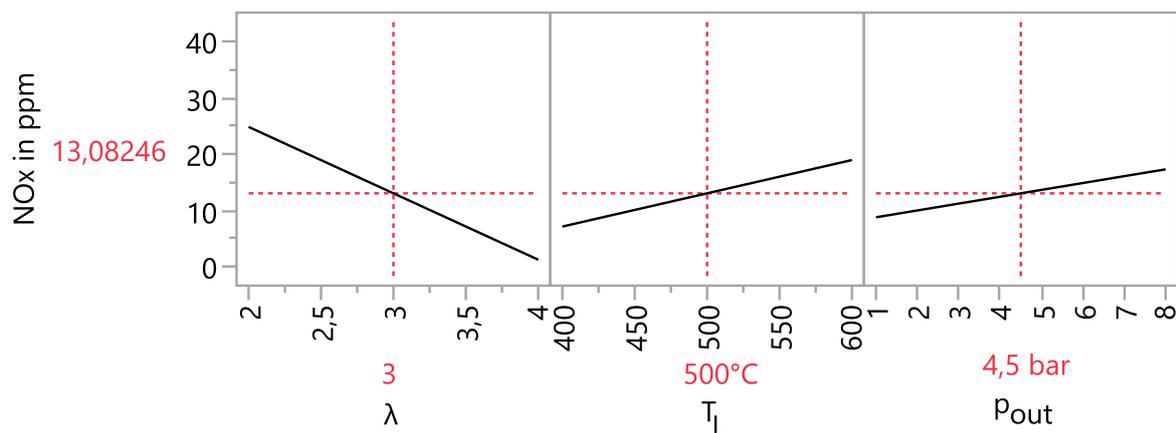


Abbildung 5.11: Haupteffekte auf die NO<sub>x</sub>-Emissionen

Hohloch et al. (2023) untersuchten den F400s.3 Brenner, welcher eine ähnliche Geometrie aufweist, auf einem atmosphärischen Prüfstand. In Abbildung 5.12 sind die  $\text{NO}_x$ -Emissionen verschiedener Brennstoffzusammensetzungen mit Luftzahlen im Bereich von  $\lambda = 2$  bis  $\lambda = 5$  dargestellt. Es zeigt sich, unabhängig von der Brennstoffzusammensetzung, ein exponentieller Abfall der  $\text{NO}_x$ -Emissionen mit steigender Luftzahl.

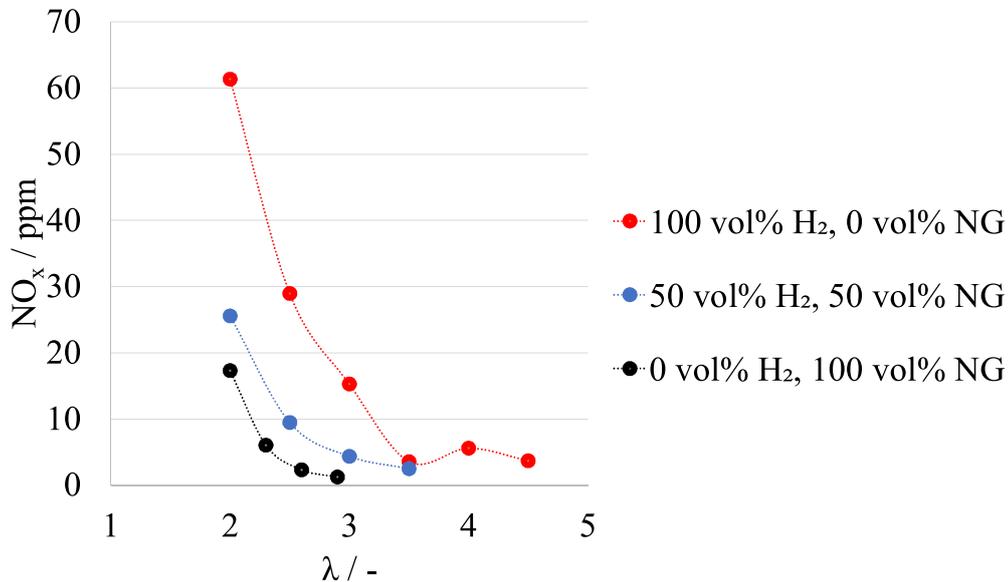


Abbildung 5.12:  $\text{NO}_x$ -Messungen des F400s.3-Brenners auf einem atmosphärischen Prüfstand mit unterschiedlichen Brennstoffzusammensetzungen (Hohloch et al., 2023)

Es muss berücksichtigt werden, dass die Brennstoffmischung hier auf Volumenbasis angegeben ist und die Menge des Gases pro Volumen in Abhängigkeit der Dichte variiert. Die im Rahmen der Studie verwendete Mischung besteht massenanteilig aus 80% Wasserstoff und 20% Methan. Der Verlauf der  $\text{NO}_x$ -Kurve ließe sich also zwischen der blauen und der roten Kurve einordnen. Die Randbedingungen im Experiment waren eine Vorwärmtemperatur der Luft von  $600^\circ\text{C}$  und ein Brennkammeraustrittsdruck von 1 bar. Diese Parametereinstellung lässt sich in JMP auswählen und die Abbildung 5.13 zeigt entsprechend die  $\text{NO}_x$ -Emissionen für Luftzahlen von  $\lambda = [2; 4]$ .

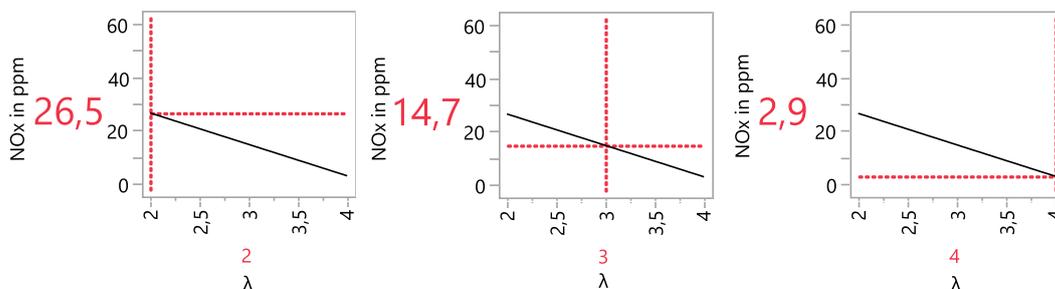


Abbildung 5.13:  $\text{NO}_x$ -Emissionen für verschiedene Luftzahlen

Um die experimentellen Messungen besser mit den Vorhersagen der Modelle des Definitive Screening Designs vergleichen zu können, sind die Vorhersagen unter den gleichen Randbedingungen, wie sie von Hohloch et al. (2023) verwendet wurden, in Abbildung 5.14 dargestellt.

Der Vergleich der Modelldaten mit den experimentellen Messungen zeigt, dass die Werte wie im Experiment einen fallenden Verlauf zeigen, sich jedoch ein linearer Zusammenhang ergibt. Aus der Literatur und auch in den Experimenten, lässt sich hingegen ein exponentieller Verlauf der  $\text{NO}_x$ -Emissionen beobachten. Die verwendete Brennstoffmischung, bestehend aus 80% Wasserstoff und 20% Methan (massenbasiert), entspricht volumenbasiert 96,9% Wasserstoff und 3,1% Methan. Damit nähert sich die Mischung der Verbrennung von reinem Wasserstoff an. Besonders die Vorhersage bei einer Luftzahl von  $\lambda = 3$  stimmen gut mit den gemessenen  $\text{NO}_x$ -Emissionen von reinem Wasserstoff überein. Allerdings kann der lineare Zusammenhang zwischen den Parametern und den Zielgrößen, der aus dem Definitive Screening Design abgeleitet wird, die experimentellen Daten nicht präzise genug abbilden. Der Zusammenhang zwischen der Luftzahl und der  $\text{NO}_x$ -Emission sollte exponentiell und nicht linear sein.

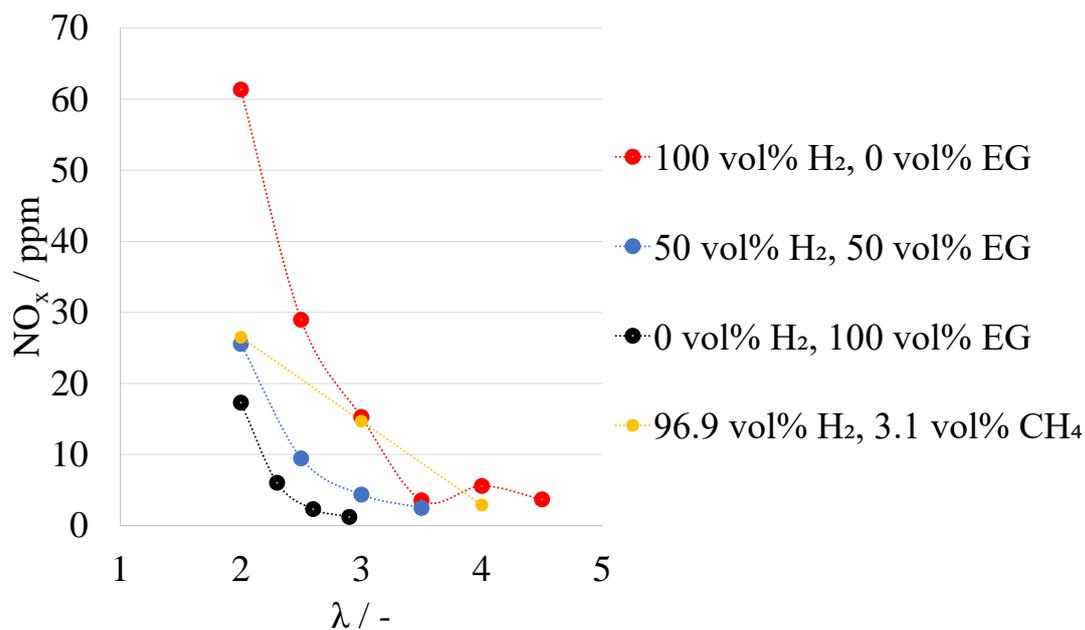


Abbildung 5.14: Vergleich des DSD-Modells mit experimentellen  $\text{NO}_x$ -Messungen von Hohloch et al. (2023)

Für die Validierung der Modelle aus dem Definitive Screening Design wurden zusätzlich zwei Validierungspunkte simuliert, welche nicht Grundlage der Modellbildung aus dem Design sind. Abbildung 5.15 und Abbildung 5.16 zeigen in rot die  $\text{NO}_x$ -Emissionen für die Einstellungen der Validierungspunkte, die sich aus den Modellen des Definitive Screening Designs ergeben. Der blaue Bereich ist das Konfidenzintervall des Modells und zeigt die mögliche Abweichung und damit die Größe der Unsicherheit an.

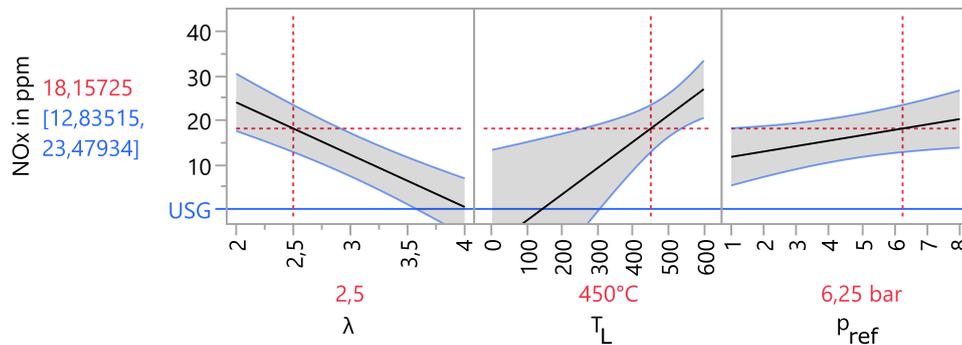


Abbildung 5.15:  $\text{NO}_x$ -Emissionen von Validierungspunkt 1 aus dem DSD-Modell

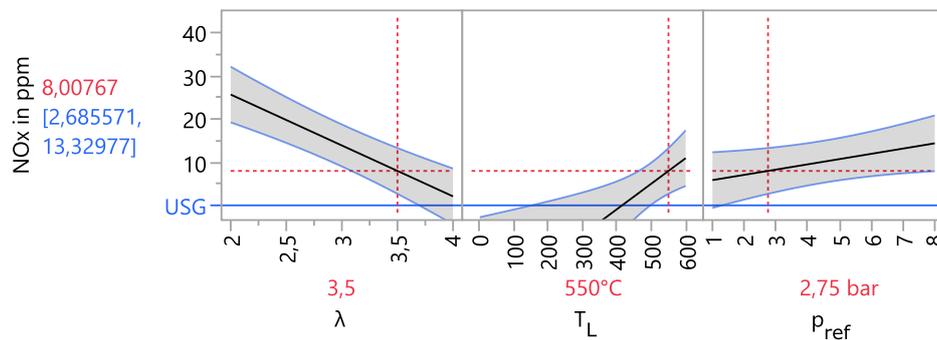


Abbildung 5.16:  $\text{NO}_x$ -Emissionen von Validierungspunkt 2 aus dem DSD-Modell

Die  $\text{NO}_x$ -Emissionen der Simulationen sind 2,68 ppm für den Validierungspunkt 1 und 1,23 ppm für den Validierungspunkt 2. Aus diesen Werten lässt sich der prozentuale Fehler berechnen, welcher gemittelt für die zwei Punkte 564 % beträgt. Die USG-Linie markiert in den Abbildungen die untere physikalische Grenze für die  $\text{NO}_x$ -Emissionen. Der Vergleich der DSD-Modelle mit den experimentellen Messungen zeigt jedoch, dass die DSD-Modelle trotz der begrenzten Anzahl an Versuchen die experimentellen Trends der  $\text{NO}_x$ -Emissionen abbilden können. Eine kurze Vorstellung der Möglichkeiten, um die Güte der Modelle zu erhöhen, lässt sich in Kapitel 6 finden.

### 5.3.2 CO Emissionen

Abbildung 5.17 zeigt die signifikanten Haupteffekte der variierten Parameter auf die Zielgröße CO. Aus dem Definitive Screening Design ergibt sich auch hier ein linearer Zusammenhang zwischen den Variationsparametern und den Zielgrößen.

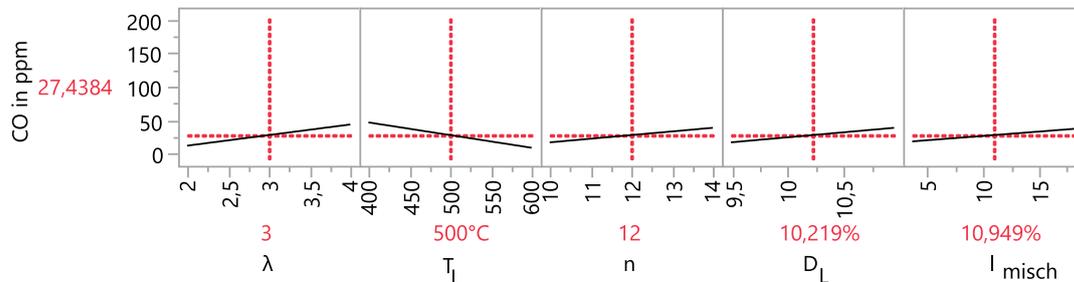


Abbildung 5.17: Haupteffekte auf die CO-Emissionen

Die funktionalen Zusammenhänge zwischen den Parametern und den CO-Emissionen, die sich aus den DSD-Modellen ergeben, sind nachvollziehbar. Die Menge an CO-Emissionen korreliert direkt mit der Aufenthaltszeit in der Brennkammer. Eine geringere Düsenaustrittsgeschwindigkeit führt zu einer verminderten Rezirkulationsrate und damit auch einer kürzeren Aufenthaltszeit der Spezies in der Brennkammer. Die Erhöhung der Düsenanzahl und die Vergrößerung des Strömungsquerschnitts der Luftdüse resultieren beide in einer Absenkung der Düsenaustrittsgeschwindigkeit und damit auch in höheren CO-Emissionen. Der Verlauf der Luftzahl bildet die zu erwartenden Emissionen hingegen nicht präzise ab. Wie in Abschnitt 3.6.2 bereits erläutert, sinkt die CO-Konzentration in einer Gasturbinenbrennkammer zunächst mit steigender Luftzahl, wie von Joos (2006) beschrieben. Nachdem ein Minimum erreicht ist, steigt die CO-Konzentration jedoch wieder an. Dies ist darauf zurückzuführen, dass die Aufenthaltszeit in der Brennkammer aufgrund höherer Geschwindigkeiten und eines größeren Massenstroms abnimmt.

Auch die Mischlänge hat einen Einfluss auf die CO-Emissionen. Das Ergebnis aus dem Definitive Screening Design zeigt, dass, je größer die Mischlänge ist, desto höher sind auch die CO-Emissionen. Es lässt sich darüber hinaus feststellen, dass es einen Zusammenhang zwischen der Mischlänge und der Rezirkulation in der Brennkammer gibt.

In Abbildung 5.18 sind die CO-Konzentrationen von zwei Simulationen mit einer Mischlänge von  $l_{\text{misch}} = 3,64\%$  und  $l_{\text{misch}} = 18,24\%$  dargestellt. Der Vergleich zeigt, dass bei erhöhter Mischlänge eine geringere CO-Konzentration im Rezirkulationsgebiet auftritt. Daraus lässt sich schlussfolgern, dass bei erhöhter Mischlänge die homogenere Mischung dazu führt, dass weniger CO in die Rezirkulationszone transportiert wird.

Dadurch verschiebt sich die Verteilung der Aufenthaltszeiten in der Brennkammer hin zu kürzeren Zeiten und damit erhöhen sich die CO-Emissionen.

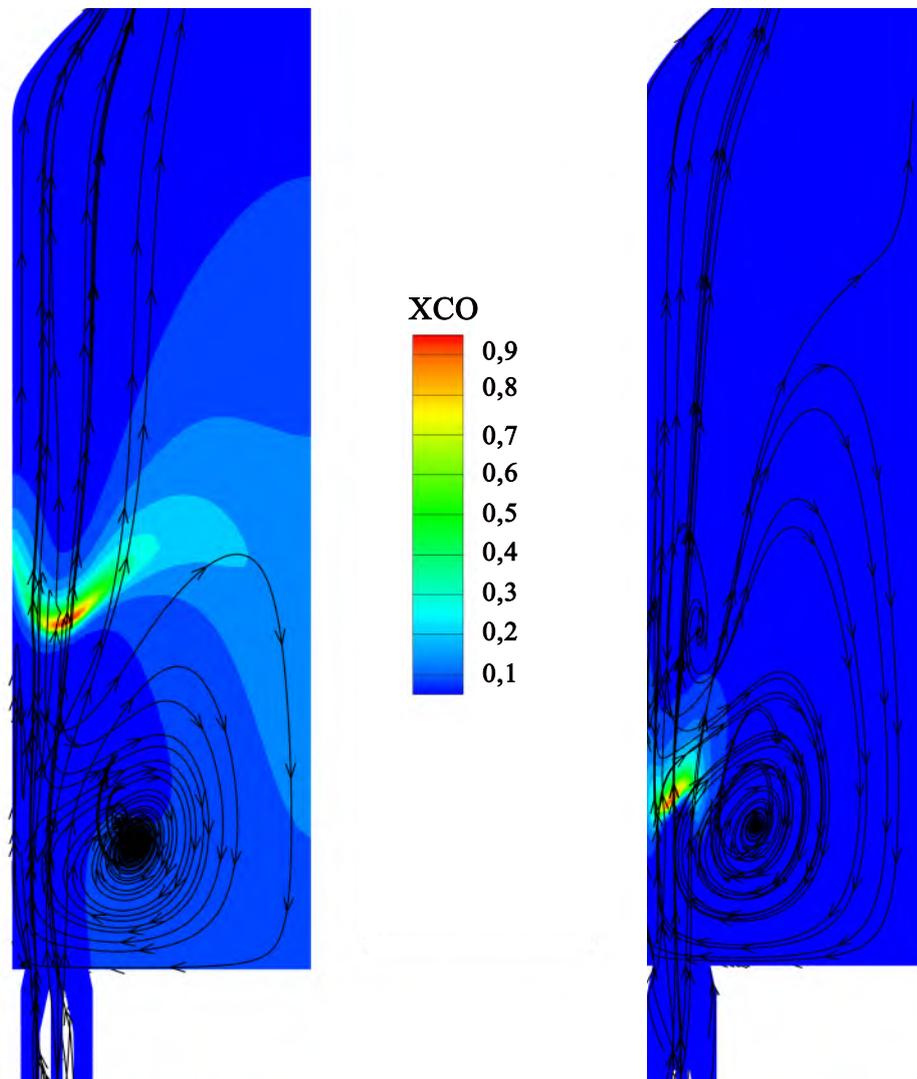


Abbildung 5.18: Verteilung der CO-Konzentration und Stromlinien für  $l_{\text{misch}} = 3,64 \text{ mm}$  (links) und  $l_{\text{misch}} = 18,24 \text{ mm}$  (rechts) im Vergleich

Mit dem F400s.3-Brennkammersystem führten Hohloch et al. (2023) auch CO-Messungen auf dem atmosphärischen Prüfstand durch. In Abbildung 5.19 sind die Ergebnisse des Experiments dargestellt. Diese bestätigen den von Joos (2006) erläuterten Verlauf von CO-Emissionen in Gasturbinenbrennkammern.

Bei der Verbrennung von reinem Wasserstoff treten keine CO-Emissionen auf, da keine Kohlenstoffatome im Brennstoff vorhanden sind.

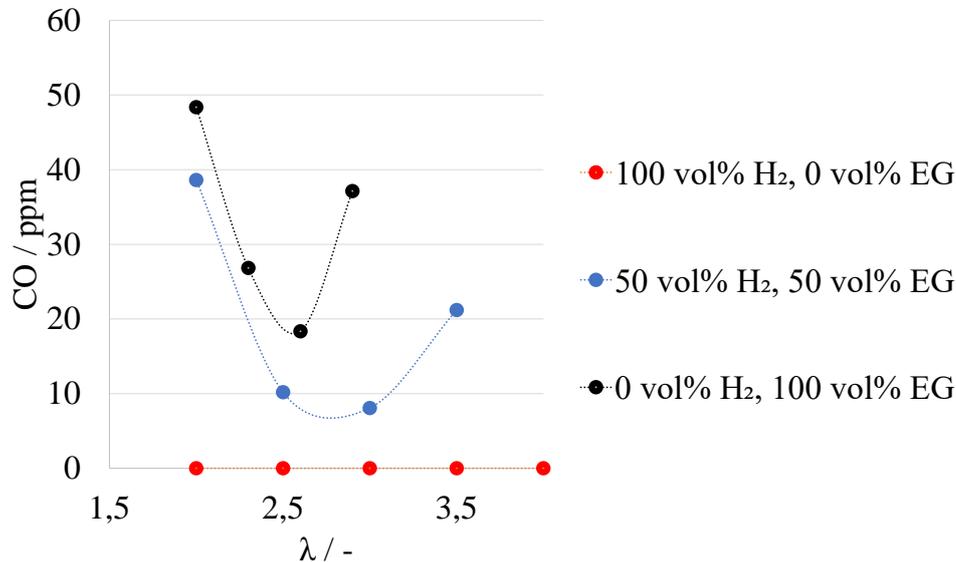


Abbildung 5.19: CO-Messungen des F400s.3-Brenners auf einem atmosphärischen Prüfstand mit unterschiedlichen Brennstoffzusammensetzungen (Hohloch et al., 2023)

Es sollen die Modelle aus dem Definitive Screening Design und die experimentellen Messungen von Hohloch et al. (2023) miteinander verglichen werden. Um die Vergleichbarkeit der experimentellen Messungen und der DSD-Modelle zu erhöhen, werden die von Hohloch et al. (2023) angesetzten Randbedingungen konstant gehalten. Abbildung 5.20 stellt die CO-Emissionen, die sich aus den Modellen ergeben, für verschiedene Luftzahlen dar.

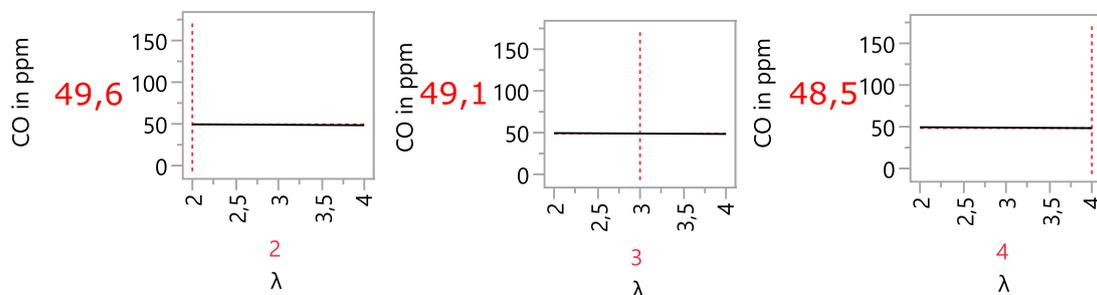


Abbildung 5.20: CO-Emissionen für verschiedenen Luftzahlen und Randbedingungen des F4003.s-Brenner äquivalent nach Hohloch et al. (2023)

Die Emissionen der DSD-Modelle aus Abbildung 5.20 kann mit den experimentellen Messungen von Hohloch et al. (2023) verglichen werden, wie in Abbildung 5.21 dargestellt. Der Verlauf der CO-Messungen mit der verwendeten Brennstoffzusammensetzung sollte am ähnlichsten zu der von reinem Wasserstoff sein. Es zeigt sich, dass die Modelle zwar den experimentellen Trend abbilden können, jedoch weichen die CO-Emissionswerte trotz des geringen Methananteils deutlich von den experimentellen Daten ab. Die CO-Konzentration wird überschätzt und liegt über den Messwerten für reines Erdgas.

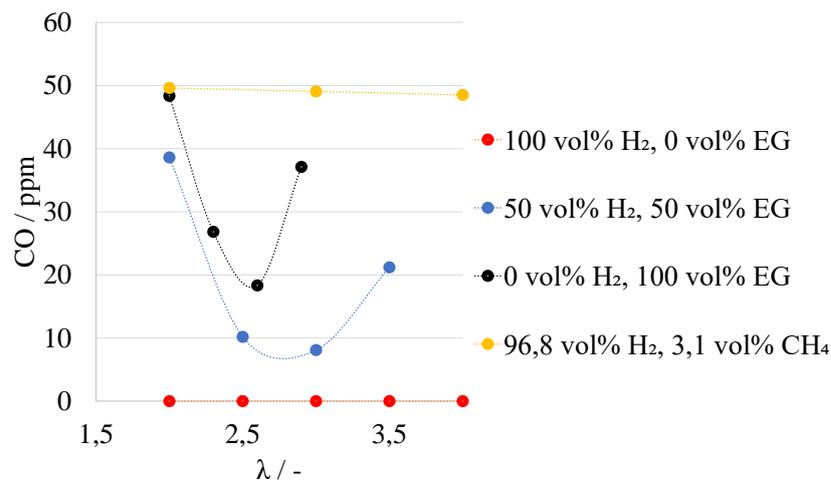


Abbildung 5.21: Vergleich des DSD-Modells (gelb) mit experimentellen CO-Messungen von Hohloch et al. (2023)

Der Vergleich der Validierungspunkte mit den DSD-Modellen liefert ein Maß für die Güte der berechneten Modelle. In Abbildung 5.22 und in Abbildung 5.23 sind die CO-Emissionen, die sich aus den Modellen mit den Parametereinstellungen der Validierungspunkte ergeben, dargestellt.

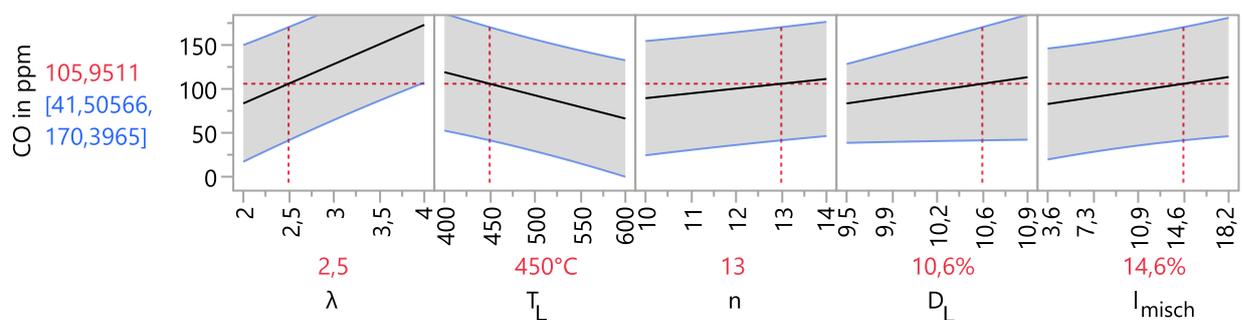


Abbildung 5.22: CO-Emissionen von Validierungspunkt 1 aus dem DSD-Modell

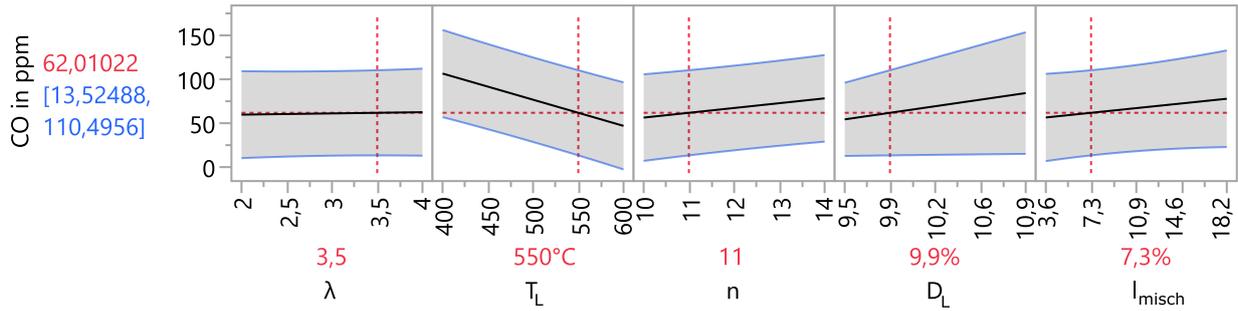


Abbildung 5.23: CO-Emissionen von Validierungspunkt 2 aus dem DSD-Modell

In den Simulationen ergeben sich für den Validierungspunkt 1 CO-Emissionen von 18,14 ppm und 6,18 ppm für den Validierungspunkt 2. Der durchschnittliche prozentuale Fehler der Modelle zu den Validierungspunkten beträgt hier 70 %. Auch hier zeigt sich, dass die Modelle die simulierten Werte deutlich überschätzen, was dem beobachteten Trend beim Vergleich der Simulation mit den Experimenten entspricht.

### 5.3.3 Brenntotaldruckverlust

Die Minimierung des relativen Brenntotaldruckverlusts ist ein wesentliches Ziel in der Entwicklung von Brennkammern, da dies die Effizienz der gesamten Maschine erhöht. In Abbildung 5.24 sind die Haupteffekte auf den relativen Brenntotaldruckverlust dargestellt. Die Luftzahl und die Düsenanzahl haben einen signifikanten Einfluss auf den relativen Brenntotaldruckverlust. Der erwartete signifikante Einfluss des Düsenummers konnte bei einem Signifikanzniveau von 5 % nicht nachgewiesen werden.

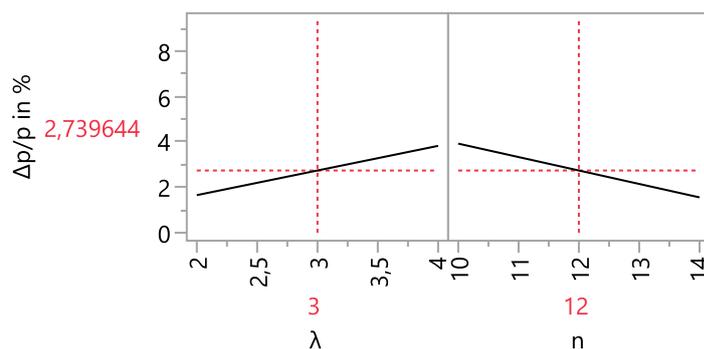


Abbildung 5.24: Haupteffekte auf den Brenntotaldruckverlust

Eine steigende Luftzahl führt zu einem höheren relativen Totaldruckverlust, da eine Erhöhung der Luftzahl in der Steigerung des Luftmassenstroms resultiert. Ein höherer Massenstrom muss bei konstantem Düsenummer und konstanter Dichte zwingend in einer höheren Geschwindigkeit in der Düse resultieren. Auch hier zeigt sich ein linearer Zusammenhang zwischen den

Variationsparametern. Eine erhöhte Luftzahl führt zu einer erhöhten Geschwindigkeit. Der Totaldruck ist die Summe aus statischem Druck und dynamischem Druck. In den dynamischen Druck geht die Geschwindigkeit quadratisch ein. Aus diesem Grund müsste, basierend auf der Literatur eigentlich ein quadratischer Zusammenhang zu sehen sein. Eine Erhöhung der Luftzahl führt zu einer Erhöhung des Massenstroms und damit auch zur Anhebung der Geschwindigkeit, ebenso wie eine geringere Anzahl an Düsen. Eine erhöhte Geschwindigkeit führt bei konstanter Dichte zu einer Erhöhung des dynamischen Druckanteils. Eine erhöhte Geschwindigkeit korreliert ebenfalls mit einem höheren Grad der Turbulenz und einer höheren Reynoldszahl. Duan et al. (2012) konnten diesen Zusammenhang in ihren entworfenen Modellen feststellen. Mit einem höheren Grad der Turbulenz steigt der Druckverlustbeiwert an und damit auch der relative Brennkammertotaldruckverlust.

Somit führt ein erhöhter Massenstrom zu einer Steigerung des relativen Totaldruckverlusts. Die Modelle zeigen, dass der Druckverlust bei kleinerem Düsendurchmesser basierend auf dieser Analyse nicht signifikant ist. Dies lässt sich darauf zurückführen, dass die Erhöhung der Luftzahl und die Verringerung der Düsenanzahl einen wesentlich stärkeren Effekt auf die Düsenaustrittsgeschwindigkeit haben, als die Variation der Düsendurchmesser in den festgelegten Grenzen verursacht. Es muss berücksichtigt werden, dass die Signifikanz der Parameter auch mit der Größe des Variationsbereichs korreliert. Wenn nur die Düsenanzahl und der Durchmesser der Luftdüse variiert werden, ergibt sich der Druckverlust wie folgt:

$$\Delta p = K \cdot \frac{1}{n^2 * D^4} \quad (5.1)$$

Die Konstante  $K$  beinhaltet hierbei die Größen  $\pi, \rho$  und den Druckverlustbeiwert  $\zeta$ , welche konstant gehalten werden. Es lässt sich feststellen, dass der Düsendurchmesser biquadratisch in den Druckverlust eingeht, während die Düsenanzahl nur einen quadratischen Einfluss hat. Bei einem größeren Variationsbereich für den Düsendurchmesser oder bei einem höheren Signifikanzniveau als 5% würde die Variation des Düsendurchmessers durchaus einen signifikanten Effekt auf die Zielgrößen zeigen. Kompressibilitätseffekte spielen hier keine Rolle, da die hier betrachtete Strömung inkompressibel ist. Die hier betrachtete Strömung weist eine Machzahl von  $Ma < 0,3$ . Würde der Austritt der Luftdüse in den Brennraum zum Beispiel durch ein Lochblech versperrt, würde dies zu der Ausbildung einer kompressiblen Strömungen führen. Durch die auftretenden Kompressibilitätseffekte würde der Totaldruckverlust stark ansteigen.

### 5.3.4 Verteiltheit der Flamme

Die Verteiltheit der Flamme ist als Verhältnis des Flammenvolumens zum Volumen des Brennraums definiert. Ein hoher Wert für die Verteiltheit bedeutet also ein größeres Flammenvolumen und eine volumetrischere Reaktionszone. Prinzipiell lässt sich ein kleineres Flammenvolumen als vorteilhaft ansehen, da dies mit einer höheren Leistungsdichte korreliert. Die Brennkammer kann darüber hinaus geometrisch kleiner dimensioniert werden. In Abbildung 5.25 sind die Haupteffekte auf die Verteiltheit dargestellt. Die Ergebnisse des DSD zeigen einen quadrati-

schen Effekt der Variation der Luftzahl, des Referenzdrucks und des Durchmessers der Luftdüse auf die Verteiltheit.

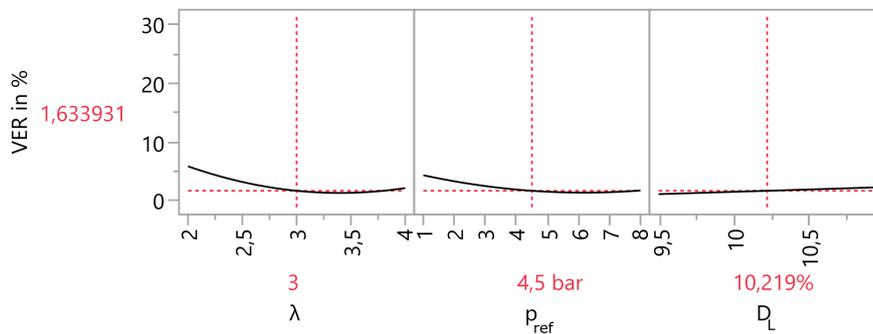


Abbildung 5.25: Haupteffekte auf die Verteiltheit der Flamme

Mit steigender Luftzahl sinkt die Verteiltheit in den DSD-Modellen, während sie unter stark mageren Bedingungen wieder leicht ansteigt. Ein ähnliches Verhalten lässt sich mit steigendem Referenzdruck beobachten. Mit steigendem Durchmesser der Luftdüse nimmt die Verteiltheit leicht zu und damit auch das Flammenvolumen. Die Beobachtung der Abnahme der Verteiltheit im Rahmen dieser Studie ist konträr zu den von Zanger (2016) beobachteten Effekten, die bei der Erhöhung der Luftzahl auftreten. Im Rahmen seiner Untersuchungen des F400n-Brenner konnte er eine Steigerung der Verteiltheit mit zunehmender Luftzahl beobachten. Auch die Vermutung, dass der Anstieg der Verteiltheit mit dem hohen Wasserstoffanteil korreliert, lässt sich nicht bestätigen. Petry et al. (2023) zeigten in ihren Untersuchungen mit unterschiedlichen Brennstoffzusammensetzungen und Luftverhältnissen einer einzelnen FLOX<sup>®</sup>-Düse, dass das Flammenvolumen mit zunehmender Luftzahl ebenfalls bei reinem Wasserstoff steigt. Es muss berücksichtigt werden, dass die experimentellen Ergebnisse zum einen die Überlagerung aller Flammebenen und zum anderen ein über die Zeit gemittelt Bild darstellen. Die Reaktionszone ist also über die Zeit hinweg räumlich unterschiedlich verteilt. Veränderungen der Flammenposition und -form, die aufgrund instationärer Phänomene auftreten, können mit RANS-Simulationen nicht direkt abgebildet werden. RANS-Simulationen können Hinweise auf instationäre Phänomene im Verlauf der Iterationen liefern, indem sie zwischen physikalisch korrekten Lösungen hin- und herschwingen. Sie sind jedoch nicht in der Lage, diese Phänomene präzise darzustellen. Das größere Flammenvolumen aus den Experimenten könnte also auch durch die zeitliche Mittelung des Bildes im experimentellen Bereich verursacht werden.

Des Weiteren liegt der hier verwendeten Flammendefinition nicht eine Line-of-sight Integration zugrunde, sondern die OH-Konzentration im Mittelschnitt. Die Line-of-Sight-Integration könnte daher abweichende Ergebnisse bezüglich der Veränderung des Flammenvolumens liefern, die eine bessere Vergleichbarkeit mit den experimentellen Daten ermöglichen. Zuletzt besteht auch die Möglichkeit, dass die den Modellen zugrundeliegende Menge der Daten zu klein ist um den Effekt des steigenden Flammenvolumens bei der Erhöhung der Luftzahl abbilden zu können. Die Erhöhung des Referenzdrucks führt zu einer erhöhten Dichte der Reaktanten. Eine höhere Dichte bedeutet, dass mehr Moleküle pro Volumeneinheit vorhanden sind, was zu einer erhöhten Reaktionsrate führt. Diese erhöhte Reaktionsrate kann die Flamme kompakter

machen, da die chemischen Reaktionen schneller ablaufen und die sich Reaktionszonen verkleinern. Der Durchmesser der Luftpüse beeinflusst die Geschwindigkeit und das Strömungsmuster der zugeführten Luft, was die Flammenausbreitung und -form direkt beeinflusst. Laut den DSD-Modellen führt ein leicht erhöhter Düsendurchmesser zu einem höheren Flammenvolumen. Auch dieses Ergebnis ist konträr zu den Erfahrungen aus experimentellen Versuchen. Eine höhere Düsenaustrittsgeschwindigkeit bei kleinerem Düsendurchmesser führt zu einer größeren Rezirkulationszone und damit auch zu einem erhöhtem Flammenvolumen. Der Effekt der Variation des Durchmessers der Luftpüse ist allerdings gering, wie die Steigung des funktionalen Zusammenhangs zeigt. Der unerwartete Einfluss des Düsendurchmessers auf das Flammenvolumen im Vergleich zu den experimentellen Erfahrungen könnte ebenfalls auf die bereits erläuterten Gründe im Zusammenhang mit der Luftzahl zurückzuführen sein.

Zur Veranschaulichung unterschiedlicher Flammenformen und unterschiedlicher Werte für die Verteiltheit sind in Abbildung 5.26 verschiedene Simulationen mit zunehmender Verteiltheit von links nach rechts dargestellt. Es muss berücksichtigt werden, dass in jeder Simulation, aufgrund der Methodik eines Definitive Screening Designs alle Parameter variiert werden. Die Vergleichbarkeit einzelner Simulationen untereinander ist daher eingeschränkt. Es lässt sich jedoch klar die Veränderung der Flammenform und der Verteiltheit mit sinkender Luftzahl feststellen.

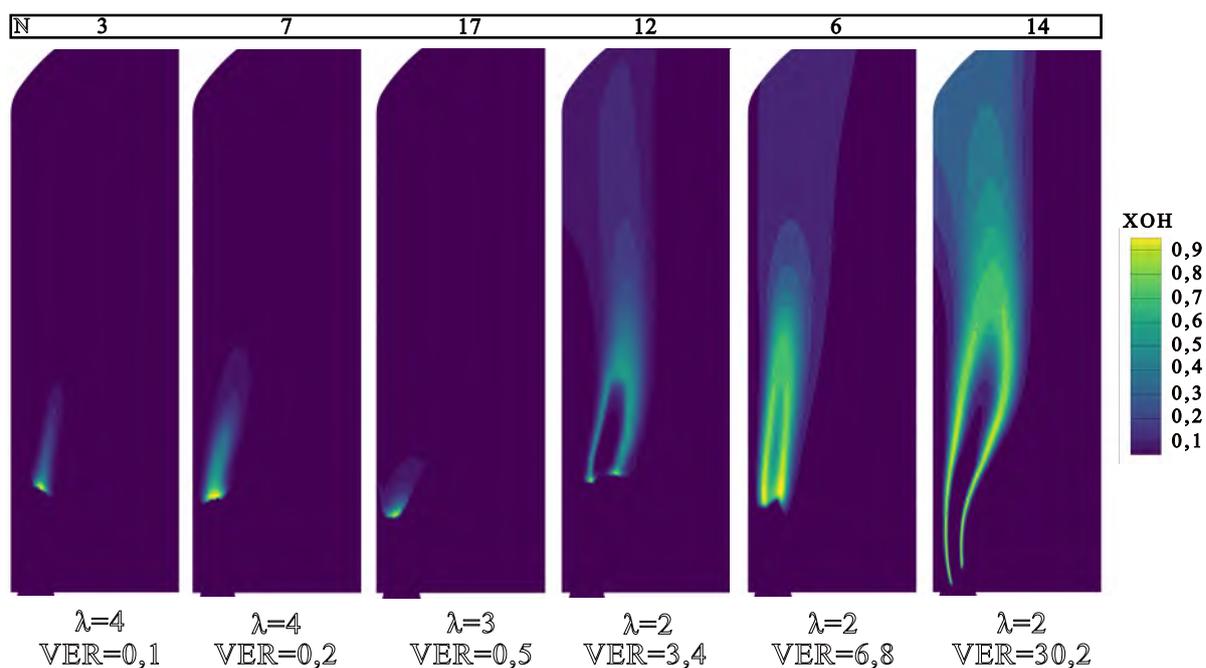


Abbildung 5.26: Flammenform und Verteiltheit für verschiedenen Luftzahlen

### 5.3.5 Abhebehöhe der Flamme

Die Abhebehöhe beeinflusst die Geometrie der Brennkammer und auch die Emissionen der Verbrennung, da bei erhöhter Abhebehöhe weniger Aufenthaltszeit in der Brennkammer zur Reaktion der Spezies bleibt. In Abbildung 5.27 sind die Haupteffekte der Parametervariationen auf

die Abhebehöhe dargestellt. Die Luftzahl, die Vorwärmtemperatur der Luft sowie die Mischlänge haben einen signifikanten Einfluss auf die Abhebehöhe. Eine Erhöhung der Luftzahl führt zu einer erhöhten Düsenaustrittsgeschwindigkeit und damit auch zu einer vergrößerten Abhebehöhe der Flamme, da diese an dem Punkt ankert, an welchem die Strömungsgeschwindigkeit gleich der Flammengeschwindigkeit ist. Das Ergebnis der DSD-Modelle zeigt eine etwas erhöhte Abhebehöhe im stöchiometrienahen Bereich. Dieser Effekt lässt sich so nicht experimentell belegen und ist wohl auf die Ungenauigkeit der Simulation sowie die begrenzte Datenbasis zurückzuführen.

Auch die Vorwärmtemperatur hat einen signifikanten Einfluss auf die Abhebehöhe der Flamme. Die Modelle zeigen eine Abnahme der Abhebehöhe bei steigender Vorwärmtemperatur. Eine höhere Vorwärmtemperatur resultiert in einer erhöhten Reaktivität des Gemischs und damit auch in einer örtlich früheren Zündung der Flamme. Die DSD-Modelle zeigen, dass die Abhebehöhe mit zunehmender Mischlänge leicht abnimmt. Dieser Effekt ist auf eine homogenere Vermischung von Brennstoff und Luft zurückzuführen, was eine frühere Zündung der Flamme und somit eine geringere Abhebehöhe bewirkt.

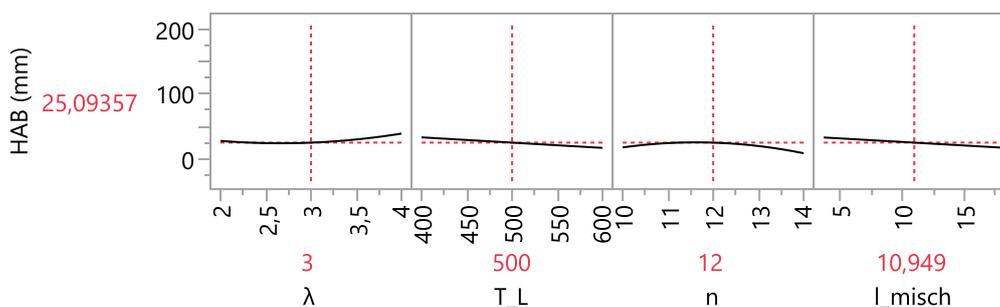


Abbildung 5.27: Haupteffekte auf die Abhebehöhe der Flamme

In dem in Abschnitt 5.2 diskutierten Fall eines Flammenrückschlags ankert die Flamme in der Mischzone. Abbildung 5.28 zeigt die Abhebehöhe verschiedener Simulationen mit unterschiedlichen Parametereinstellungen. Die Abhebehöhe nimmt von links nach rechts zu. Die diskutierten Phänomene und Effekte auf die Abhebehöhe verschiedener Variationen lassen sich hier gut erkennen. Simulation 1 zeigt einen Flammenrückschlag, bei dem die Flamme in der Mischzone ankert. In allen anderen Simulationen wird eine stabile Flamme erreicht.

Eine erhöhte Düsenaustrittsgeschwindigkeit durch eine höhere Luftzahl oder eine geringere Anzahl an Düsen führt zu einer größeren Abhebehöhe, wie die Flammenbilder in Abbildung 5.28 verdeutlichen.

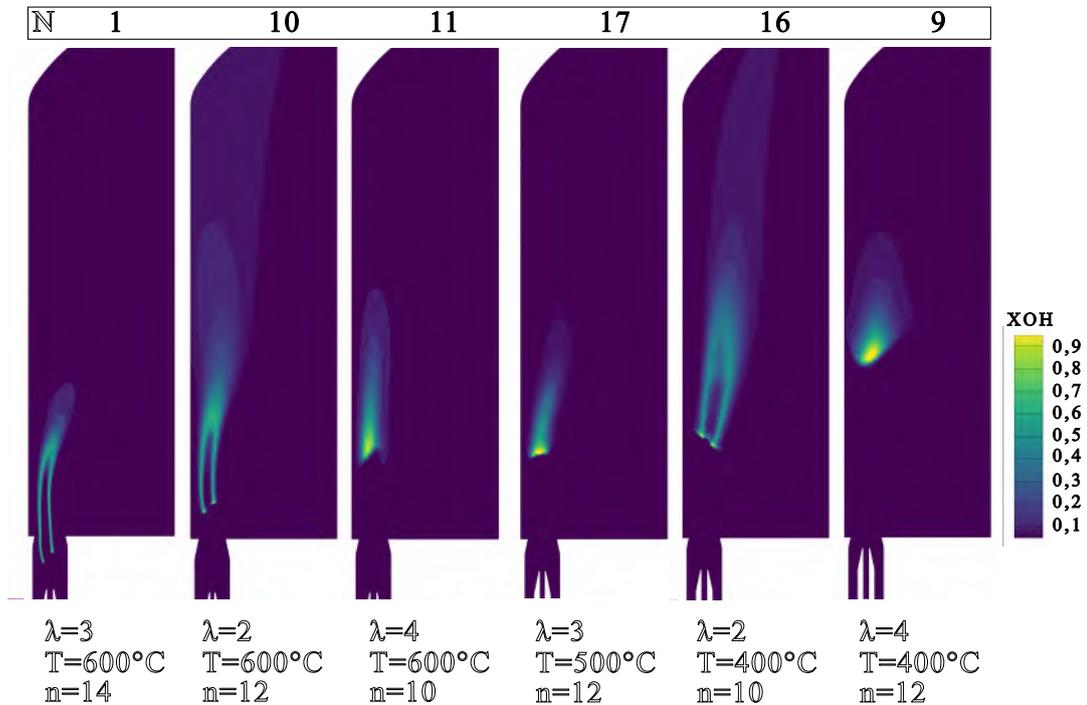


Abbildung 5.28: Abhebehöhe für verschiedene Parametereinstellungen

### 5.3.6 Flammenlänge

Die Flammenlänge hat zusammen mit der Abhebehöhe einen direkten Einfluss auf die Länge der Brennkammer. Aus den DSD-Modellen ergibt sich nur ein signifikanter Einfluss der Luftzahl auf die Flammenlänge. Der Effekt der Variation der Luftzahl ist dabei ein Effekt zweiter Ordnung. Die DSD-Modelle zeigen eine starke Abnahme der Flammenlänge mit der Erhöhung der Luftzahl und unter stark mageren Bedingungen einen leichten Anstieg dieser. Dieser Verlauf ist konträr zu den experimentellen Erfahrungen und lässt sich äquivalent zu der in Abschnitt 5.3.4 geführten Argumentation, bezüglich des Verlaufs der Verteiltheit erklären.

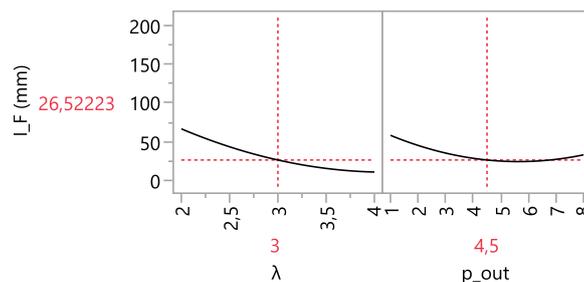


Abbildung 5.29: Haupteffekt auf die Flammenlänge

Die sich ergebenden Flammenlängen unterschiedlicher Simulationen sind in Abbildung 5.30 zu sehen. Die Flammenlänge ist die axiale Differenz zwischen dem höchsten Punkt der Flamme und dem niedrigsten. Die Flammenlänge nimmt mit der Abnahme der Luftzahl zu. Es ist auch klar zu erkennen wie unterschiedlich die Flammenform und damit auch die Flammenlänge bei verschiedenen Luftzahlen ist.

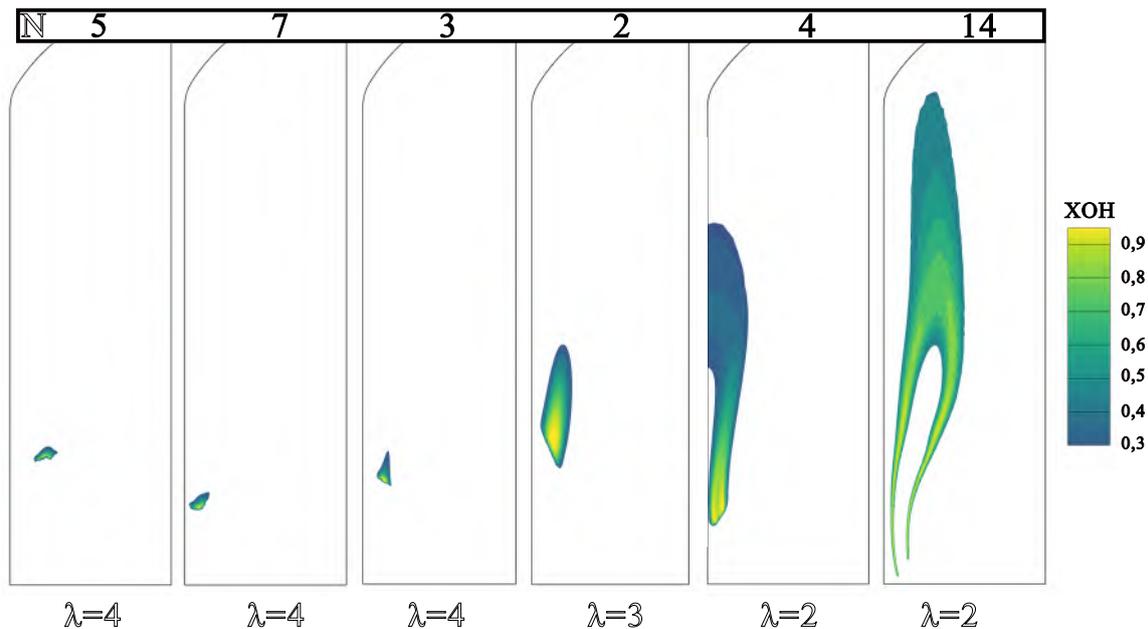


Abbildung 5.30: Flammenlänge für verschiedene Luftzahlen

### 5.3.7 Fehler der DSD-Modelle

In diesem Abschnitt wird der prozentuale Abweichung der Modelle aus dem Definitive Screening Design im Vergleich zu den simulierten Validierungspunkten und die Standardabweichung der Modelle diskutiert. Die Tabelle 5.3 zeigt den durchschnittlichen prozentualen, den durchschnittlichen absoluten Fehler und die Standardabweichung der Modelle bezüglich der einzelnen Zielgrößen im Vergleich zu den Validierungspunkten. Die Spalte „Mittelwert PA“ gibt den Durchschnitt der prozentualen Abweichung und die Spalte „Mittelwert AA“ gibt den Mittelwert der absoluten Abweichung der DSD-Modelle zu den Validierungspunkten für die einzelnen Zielgrößen an. Die rechte Spalte enthält den „Root Mean Squared Error“ (RMSE) der Modelle, also die Standardabweichung.

Zielgröße	Mittelwert AA	Mittelwert PA in %	RMSE
NO <sub>x</sub>	11,2 ppm	564,4	7,4 ppm
CO	11,3 ppm	70,3	17,8 ppm
$\Delta p$	5,3 %	66,9	1,7 %
HAB	23 mm	44,9	3,2
$l_F$	15,8 mm	21,2	12,8 mm
VER	2,3 %	56,2	0,9 %

Tabelle 5.3: Prozentualer Fehler der mit den DSD-Modellen vorhergesagten Zielgrößen zu den Validierungspunkten

Die Berechnung der prozentualen Abweichung zeigt eine deutliche Diskrepanz in der Vorhersage der NO<sub>x</sub>-Emissionen mit einer durchschnittlichen Abweichung von 564,4 %. Der in Abschnitt 5.3.1 gezogene Vergleich zu experimentellen Daten zeigt, dass die DSD-Modelle durchaus in der Lage sind den Trend, der sich in Experimenten abzeichnet, als auch die absoluten Größen der NO<sub>x</sub>-Emissionen, vorherzusagen. Ein prozentualer Fehler mag zunächst hoch erscheinen, doch ist es wichtig, auch die Größenordnung der Absolutwerte und deren Schwankungen zu berücksichtigen. Hierfür eignet sich die Betrachtung der Standardabweichung, die angibt, wie stark die Werte eines Modells um ihren Mittelwert variieren. Die Standardabweichung des NO<sub>x</sub>-Modells zeigt, dass die Abweichung der simulierten Parametereinstellungen nicht so hoch ist, wie der prozentuale Fehler zunächst suggeriert. Der durchschnittliche prozentuale Fehler bei den CO-Emissionen beträgt 70,32 %. Hier werden zwar die CO-Emissionen, also die Absolutwerte, stark überschätzt, aber im Vergleich mit den experimentellen Daten zeigt sich, dass der Trend der CO-Emissionen aus den Experimenten abgebildet werden kann. Der RMSE zeigt ebenfalls einer höheren Streuung um den Mittelwert der simulierten Punkte, was zu der starken Überschätzung der Absolutwerte passt. Die prozentuale Abweichung des Totaldruckverlusts ist 66,9 %. Die Ergebnisse aus den Modellen für den Totaldruckverlust lassen sich darüber hinaus sehr gut begründen und decken sich mit den Erfahrungen aus Experimenten. Die prozentualen Fehler der Abhebehöhe, der Mischlänge und der Verteiltheit der DSD-Modelle zu den Validierungspunkten sind die geringsten. Im Vergleich mit den experimentellen Erfahrungen und Messungen zeigt sich jedoch, wie in Abschnitt 5.3.5 - 5.3.7 diskutiert, die größte Abweichung zur Realität und zum erwarteten Verhalten.



## 6 Zusammenfassung und Ausblick

Die zukünftige Elektrizitätsversorgung muss nachhaltig, dezentral, effizient, kostengünstig und emissionsarm sein. Mikrogasturbinen bieten durch ihre Brennstoffflexibilität, geringen Wartungskosten und niedrigen Emissionen eine vielversprechende Möglichkeit, die Schwankungen erneuerbarer Energien auszugleichen. Zur Nutzung CO<sub>2</sub>-neutraler Brennstoffe, wie Wasserstoff, sind aufgrund abweichender Verbrennungseigenschaften neue Konzepte wie das FLOX®-Verfahren erforderlich, das eine verbesserte Verbrennungsstabilität und geringere Emissionen aufweist. Die Brennkammerentwicklung am Institut für Verbrennungstechnik basiert derzeit hauptsächlich auf Erfahrungswerten und qualitativen Analysen. Es fehlt jedoch die Quantifizierung des Einflusses verschiedener Parameter und die Prognose der Zielgrößen bei entsprechenden Parametervariationen.

Das Ziel dieser Arbeit war die Quantifizierung des Effekts der Variation unterschiedlicher Geometrie- und Betriebsparameter der Brennkammer zur Identifikation von Parametern mit signifikantem Einfluss auf die festgelegten Zielgrößen. Die Zielgrößen sind die NO<sub>x</sub>-Emissionen, die CO-Emissionen, der relative Brennkammertotaldruckverlust, die Verteiltheit der Flamme, die Flammenlänge und die Abhebehöhe der Flamme. Dazu sollte die statistische Versuchsplanung verwendet werden. Darüber hinaus wurde die Fähigkeit eines Definitive Screening Designs, allgemeine Trends abzubilden und Optimierungen trotz der begrenzten Anzahl an Versuchen abzuleiten, analysiert und die Anwendung der Methode in der CFD untersucht. Diese Arbeit soll eine erste Grundlage für weitere detailliertere Untersuchungen schaffen, um die Brennkammerentwicklung am Institut für Verbrennungstechnik des DLR noch zielgerichteter gestalten zu können. Die variierten Geometrieparameter waren die Anzahl der Düsen, der Durchmesser der Luftdüse, der Durchmesser der Brennstoffdüse sowie die Mischlänge. Die variierten Betriebsparameter waren die Luftzahl, die relative Brennstoffleistung, die Vorwärmtemperatur der Luft und der Brennkammeraustrittsdruck. Die Untersuchungen basieren auf einem generischen, vereinfachten, einstufigen Geometriemodell des DLR in Stuttgart entwickelten F400h-Brennkammersystems. Die Betrachtung der drallstabilisierten Pilotstufe wurde im Rahmen dieser Studie vernachlässigt. Die Randbedingungen der RANS-Simulationen wurden mit Blick auf vergleichbare Verbrennungs- und Stabilisierungsbedingungen zum Referenzfall abgeschätzt. Um diese zu erreichen, wurde eine Massenstromskalierung, basierend auf der Machzahlähnlichkeit vorgenommen. Das Versuchsdesign wurde mit der Methodik des Definitive Screening Designs entworfen, einer Methode aus der statistischen Versuchsplanung. Hierbei werden in jedem Versuch alle Parameter variiert, um so die Effekte der einzelnen Parametervariationen trotz einer vergleichbar geringen Anzahl von Versuchen quantifizieren zu können. Die Ergebnisse aus dem Definitive Screening Design zeigten, dass diese Methode trotz der begrenzten Anzahl an Versuchen die Trends der Emissionen, des Brennkammertotaldruckverlusts und der Abhebehöhe der Flamme gut abbilden konnte. Die Zielgrößen Verteiltheit und Flammenlänge wurden jedoch konträr zu experimentellen Ergebnissen vorhergesagt. Dies muss allerdings nicht zwingend mit der Methodik zusammenhängen, sondern kann auch durch die verwendete Flammdefinition oder den Fehler der Simulationen im Vergleich zur Realität verursacht werden. Zur Validierung der Modelle wurden die aus den Modellen resultierenden Emissionen mit experimentellen Messungen eines vergleichbaren Brennkammersystems bei gleichen Randbe-

dingungen verglichen. Zudem wurden zwei Validierungspunkte simuliert und der prozentuale Fehler der Modelle im Vergleich zu diesen Validierungspunkten berechnet und diskutiert. Die Modelle des Definitive Screening Designs zeigen wichtige Trends und Verbrennungsphänomene auf, eignen sich jedoch nicht für Optimierungszwecke. Um eine Optimierung durchführen zu können, ist eine höhere Genauigkeit der Modelle und ein kleinerer Fehler zu den Experimenten zwingend notwendig. Dies kann nur durch eine breitere Datengrundlage erreicht werden.

Die Analyse der einzelnen Zielgrößen zeigte, dass dieselbe Parameterkonfiguration positive und negative Effekte auf verschiedene Zielgrößen haben kann. Diese Erfahrung zeigte sich so auch schon in Experimenten und verschiedenen CFD-Studien am Institut. Höhere Luftzahlen verbessern Flammenlänge, Verteiltheit, Abhebehöhe und Emissionen von CO und NO<sub>x</sub>, erhöhen jedoch den Druckverlust. Die relative Brennstoffleistung zeigt keinen signifikanten Einfluss. Eine höhere Vorwärmtemperatur der Luft reduziert CO-Emissionen und Abhebehöhe, erhöht jedoch die NO<sub>x</sub>-Emissionen. Ein hoher Referenzdruck senkt CO-Emissionen und erhöht die Abhebehöhe, führt aber zu hohen NO<sub>x</sub>-Emissionen. Weniger Düsen reduzieren CO-Emissionen, erhöhen aber den Druckverlust. Ein kleiner Düsendurchmesser verbessert die Verteiltheit und die CO-Emissionen. Die Variation der Durchmesser der Brennstoffdüse zeigen keinen signifikanten Effekt, während eine größere Mischlänge die Abhebehöhe der Flamme erhöht, aber die CO-Emissionen verschlechtert. Daher ist in der Brennkammerentwicklung eine sorgfältige Abwägung der Parameter erforderlich, um die optimale Parameterkonfiguration zu finden. Um eine höhere Genauigkeit der Modelle und eine bessere Vorhersage des Effekts verschiedener Parametervariationen zu ermöglichen, bieten sich verschiedene Möglichkeiten. Zum einen kann das vorhandene Design um weitere Versuche erweitert werden, um eine bessere Schätzung von Effekten 2. Ordnung und Wechselwirkungen zu ermöglichen. Zum anderen hat die Analyse der Zielgrößen gezeigt, dass die relative Brennstoffleistung und der Durchmesser der Brennstoffdüse keinen signifikanten Effekt auf die Zielgrößen haben. Es muss also entweder der Variationsbereich dieser Parameter erhöht werden oder diese sollten aus zukünftigen Untersuchungen ausgeschlossen werden. Des Weiteren bietet es sich an, weitere Variationsparameter in das Screening Design aufzunehmen, wie zum Beispiel den Brennkammerdurchmesser oder die Brennstoffzusammensetzung. Zusätzlich sollte analysiert werden, ob nicht die Erweiterung der Variationsgrenzen von Düsendurchmesser, Vormischstrecke und Luftzahl sinnvoll wäre. Dies würde eine breitere Analyse unterschiedlicher Effekte zulassen. Nach dem Abschluss der Screening Designs sollte eine detailliertere Methodik aus der statistischen Versuchsplanung folgen, welche eine höhere Anzahl an Versuchsdurchläufen benötigt. Hierbei empfiehlt sich eine Methodik der Auflösung V, da bei dieser nur Vierfachwechselwirkungen und Dreifachwechselwirkungen mit Zweifachwechselwirkungen vermengt sind. Haupteffekte und Effekte zweiter Ordnung können mit einer solchen Methodik sicher abgeschätzt werden. Eine solche Methodik würde auch eine Optimierung ermöglichen, um die optimale Parametereinstellung zur Erreichung der definierten Ziele zu finden.

Definitive Screening Designs und statistische Versuchsplanung ermöglichen eine erhebliche Effizienzsteigerung in der Brennkammerentwicklung. Diese Methoden beschleunigen den Entwicklungsprozess und fördern dadurch die schnellere Umsetzung nachhaltiger Technologien zur Energieerzeugung. Dies leistet einen wichtigen Beitrag zur Erreichung der Klimaziele.

## Literaturverzeichnis

- Banihabib, R. und Assadi, M. (2022): *The Role of Micro Gas Turbines in Energy Transition*. Energies, Bd. 15. Nr.8084.
- Banihabib, R., Lingstädt, T., Wersland, M., Kutne, P. und Assadi, M. (2023): *Development and testing of a 100 kW fuel-flexible micro gas turbine running on 100% hydrogen*. International Journal of Hydrogen Energy, Bd. 49, S. 92–111.
- Böswirth, L. und Bschorer, S. (2014): *Technische Strömungslehre*. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden. ISBN 978-3-658-05667-4.
- Bower, H. E., Schwärzle, A., Grimm, F., Zornek, T. und Kutne, P. (2020): *Experimental Analysis of a Micro Gas Turbine Combustor Optimized for Flexible Operation with Various Gaseous Fuel Compositions*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, Bd. 142. Nr. GTP-19-1427.
- Bund (2021): *Bundesministerium für Umwelt, Naturschutz und nukleare Sicherheit: Neufassung der Ersten Allgemeinen Verwaltungsvorschrift zum Bundes-Immissionsschutzgesetz (Technische Anleitung zur Reinhaltung der Luft – TA Luft)*. <https://umweltmessung.com/wp-content/uploads/TA-Luft-2021-1.pdf>, Zugriff: 25 Jan. 2022.
- Cecere, D., Giacomazzi, E., Di Nardo, A. und Calchetti, G. (2023): *Gas Turbine Combustion Technologies for Hydrogen Blends*. Energies, Bd. 16.
- Chen, X., Wang, Y., Zirwes, T., Zhang, F., Bockhorn, H. und Chen, Z. (2021): *Heat Release Rate Markers for Highly Stretched Premixed CH<sub>4</sub>/Air and CH<sub>4</sub>/H<sub>2</sub>/Air Flames*. Energy & Fuels, Bd. 35, S. 13349–13359.
- Duan, Z., Yovanovich, M. M. und Muzychka, Y. S. (2012): *Pressure Drop for Fully Developed Turbulent Flow in Circular and Noncircular Ducts*. Journal of Fluids Engineering, Bd. 134.
- EU-Kommission (2023): *Umsetzung des europäischen Grünen Deals: Auf dem Weg zu einem klimaneutralen Europa bis 2050*. Url: <https://commission.europa.eu/strategy-and-policy/priorities-2019-2024/european-green-deal/delivering-european-green-deal>, Zugriff am 01.05.2024.
- Ferziger, J. H. und Perić, M. (2008): *Numerische Strömungsmechanik*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, Berlin und Heidelberg. ISBN 978-3-540-68228-8.
- Gerlinger, P. (2005): *Numerische Verbrennungssimulation: Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin und Heidelberg. ISBN 3-540-23337-7.
- Gersen, S., Anikin, N., Mokhov, A. und Levinsky, H. (2008): *Ignition properties of methane/hydrogen mixtures in a rapid compression machine*. International Journal of Hydrogen Energy, Bd. 33, S. 1957–1964.

- Glarborg, P., Miller, J. A., Ruscic, B. und Klippenstein, S. J. (2018): *Modeling nitrogen chemistry in combustion*. Progress in Energy and Combustion Science, Bd. 67.
- Hasemann-Seeger, S. (2020): *Entwicklung eines Brennkammersystems mit Abgasrückführung für den Einsatz in Mikrogasturbinen*. Dissertation, Universität Stuttgart.
- Hohloch, M., Lingstädt, T. und Kutne, P. (2023): *Experimental Analysis of the Hydrogen Capability of a Fuel Flexible Jet Stabilized Syngas Micro Gas Turbine Combustor Under Atmospheric Conditions*. In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2023, Turbomachinery Technical Conference and Exposition*. American Society of Mechanical Engineers.
- Jones, B. und Nachtsheim, C. J. (2011): *A Class of Three-Level Designs for Definitive Screening in the Presence of Second-Order Effects*. Journal of Quality Technology, Bd. 43.
- Jones, B. und Nachtsheim, C. J. (2016): *Blocking Schemes for Definitive Screening Designs*. Technometrics, Bd. 58, S. 74–83.
- Joos, F. (2006): *Technische Verbrennung: Verbrennungstechnik, Verbrennungsmodellierung, Emissionen ; mit 65 Tabellen*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg New York, Berlin und Heidelberg. ISBN 3-540-34333-4.
- Kathrotia, T., Fikri, M., Bozkurt, M., Hartmann, M., Riedel, U. und Schulz, C. (2010): *Study of the H+O+M reaction forming OH\*: Kinetics of OH\* chemiluminescence in hydrogen combustion systems*. Combustion and Flame, Bd. 157, S. 1261–1273.
- Krebs, W., Schulz, A., Witzel, B., Johnson, C., Laster, W., Pent, J., Schilp, R., Wasif, S. und Weaver, A. (2022): *Advanced Combustion System for High Efficiency (ACE) of the New SGT5/6- 9000HL Gas Turbine*. In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2022: Turbomachinery Technical Conference and Exposition*. The American Society of Mechanical Engineers.
- Laurien, E. und Oertel, H. (2018): *Numerische Strömungsmechanik*. Springer Fachmedien Wiesbaden, Wiesbaden. ISBN 978-3-658-21059-5.
- Lecheler, S. (2023): *Numerische Strömungsberechnung: Schneller Einstieg in ANSYS-CFX durch einfache Beispiele*. Springer Vieweg, Wiesbaden und Heidelberg, 5. Aufl. ISBN 978-3-658-42406-0.
- Li, P., Mi, J., Dally, B. B., Wang, F., Wang, L., Liu, Z., Chen, S. und Zheng, C. (2011): *Progress and recent trend in MILD combustion*. Science China Technological Sciences, Bd. 54, S. 255–269.
- Liu, Z., Xiong, Y., Zhu, Z., Zhang, Z. und Liu, Y. (2022): *Effects of hydrogen addition on combustion characteristics of a methane fueled MILD model combustor*. International Journal of Hydrogen Energy, Bd. 47, S. 16309–16320.
- Lückerath, R., Meier, W. und Aigner, M. (2007): *FLOX® Combustion at High Pressure With Different Fuel Compositions*. In: *Proceedings in ASME Turbo Expo 2007: Power for Land, Sea and Air*, S. 241–249.

- Montgomery, D., Rigdon, S., Pan, R. und Freeman, L. (2022): *Design of Experiments for Reliability Achievement*. John Wiley and Sons, Inc. ISBN 9781119237693.
- Mosca, G., Lupant, D., Gambale, A. und Lybaert, P. (2013): *Effect of air preheating temperature on flameless combustion of low calorific, alternative fuels*. Proceedings of the European Combustion Meeting 2013.
- Petry, N., Mannazhi, M., Yin, Z., Lammel, O., Geigle, K. P. und Huber, A. (2023): *Investigation of Fuel and Load Flexibility of an Atmospheric Single Nozzle Jet-Stabilized FLOX® Combustor With Hydrogen/Methane-Air Mixtures*. In: *Volume 3A: Combustion, Fuels, and Emissions*. American Society of Mechanical Engineers.
- Sadanandan, R., Lückcrath, R., Meier, W. und Wahl, C. (2011): *Flame Characteristics and Pollutant Emissions in Flameless Combustion Under Gas Turbine Relevant Conditions*. Journal of Propulsion and Power, Bd. 27, S. 970–980.
- Schneider, S. (2017): *Auswirkungen der Wasserstoff-Zumischung auf die Flammenstruktur turbulenter stratifizierter Methan-Luft-Flammen*. Dissertation, Darmstadt.
- Schwarze, R. (2012): *CFD-Modellierung: Grundlagen und Anwendungen bei Strömungsprozessen*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, Berlin. ISBN 978-3-642-24377-6.
- Schwärzle, A., Monz, T. O. und Aigner, M. (2016): *Detailed Examination of Two-Stage Micro Gas Turbine Combustor*. In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2016: Turbine Technical Conference and Exposition*. The American Society of Mechanical Engineers.
- Schwärzle, A., Monz, T. O., Huber, A. und A., M. (2017): *Detailed Examination of a Modified Two-Stage Micro Gas Turbine Combustor*. In: *Proceedings of the ASME Turbo Expo 2017: Turbine Technical Conference and Exposition*. The American Society of Mechanical Engineers.
- Siebertz, K., van Bebber, D. und Hochkirchen, T. (2010): *Statistische Versuchsplanung: Design of Experiments (DoE)*. Springer-Verlag Heidelberg Dordrecht London New York, Berlin und Heidelberg. ISBN 978-3-642-05493-8.
- Spurk, J. H. und Aksel, . (2010): *Strömungslehre: Einführung in die Theorie der Strömungen : mit Aufgaben und Übungsbeispielen auf CD-ROM*. Springer-Verlag Heidelberg Dordrecht London New York, Berlin. ISBN 978-3-642-13142-4.
- Toof, J. L. (1986): *A Model for the Prediction of Thermal, Prompt, and Fuel NOx Emissions From Combustion Turbines*. Journal of Engineering for Gas Turbines and Power, Bd. 108, S. 340–347.
- Tsuji, H., Gupta, A. K., Hasegawa, T., Katsuki, M., Kishimoto, K. und Morita, M. (2003): *High Temperature Air Combustion - From Energy Conservation to Pollution Reduction*. CRC Press. ISBN 0-8493-1036-9.

- Wünning, J. A. und Wünning, J. G. (2007): *Regeneratorbrenner für Strahlheizrohre*. VDI, 23. Deutscher Flammentag, – Combustion and Furnaces, Bd. 1988, S. 429–434.
- Wünning, J.A. und Wünning, J.G. (1997): *Flameless oxidation to reduce thermal no-formation*. Progress in Energy and Combustion Science, Bd. 23, S. 81–94.
- Zanger, J. (2016): *Experimentelle Charakterisierung eines atmosphärisch betriebenen, FLOX-basierten Mikrogasturbinenbrenners für Erdgas*. Dissertation, Universität Stuttgart.
- Zanger, J., Monz, T. und Aigner, M. (2015): *Experimental Investigation of the Combustion Characteristics of a Double-Staged FLOX®-Based Combustor on an Atmospheric and a Micro Gas Turbine Test Rig*. In: *Proceedings of ASME Turbo Expo 2015: Turbine Technical Conference and Exposition*. The American Society of Mechanical Engineers.
- Zierep, J. und Bühler, K. (2018): *Grundzüge der Strömungslehre: Grundlagen, Statik und Dynamik der Fluide*. Lehrbuch. Springer Vieweg, Wiesbaden. ISBN 978-3-658-20472-3.
- Zornek, T. (2019): *Entwicklung eines Holzgas-Brennkammersystems für die Mikrogasturbine Turbec T100*. Dissertation, Universität Stuttgart.

# Anhang

## A.1 Zielgrößen

N	NO <sub>x</sub> in ppm	CO in ppm	VER in %	HAB in mm	l <sub>F</sub> in mm	Δp in %
1	26,07	0,35	1,10	-12,84	70,24	2,09
2	2,07	0,54	1,14	49,25	52,73	2,65
3	4,54	0,06	0,14	41,46	15,48	3,71
4	8,67	13,98	4,21	16,79	141,17	0,86
5	1,59	19,66	0,08	49,32	9,62	2,02
6	8,07	13,76	6,77	28,22	112,15	1,40
7	0,85	165,95	0,18	29,14	10,94	1,40
8	27,35	10,78	2,81	27,44	93,04	2,10
9	0,51	57,95	1,10	69,48	35,87	4,36
10	41,81	5,45	1,98	11,65	77,54	0,66
11	1,56	0,70	2,03	25,26	54,63	3,20
12	24,68	12,41	3,40	43,39	81,36	0,89
13	0,05	96,53	0,89	32,39	88,50	8,97
14	40,91	62,45	30,15	2,69	215,65	0,37
15	2,30	3,10	1,42	29,12	48,39	3,91
16	25,02	2,27	2,41	39,09	76,63	6,10
17	6,35	0,51	0,50	34,32	38,74	1,87

Tabelle A.1: Werte der Zielgrößen in den Simulationen