

# Large-Eddy Simulation von reaktiven Multiphasenströmungen

A. Rittler, M. Rabaçal, A. Kempf | Lehrstuhl Fluidodynamik  
Institut für Verbrennung und Gasdynamik, Universität Duisburg-Essen

## Motivation

Reaktive Multiphasenströmungen sind in verschiedensten Anwendungen von Bedeutung z.B.

- Gasturbinen
- Diesel-Motoren
- Kohlenstaubkraftwerke
- Nanopartikel Reaktoren

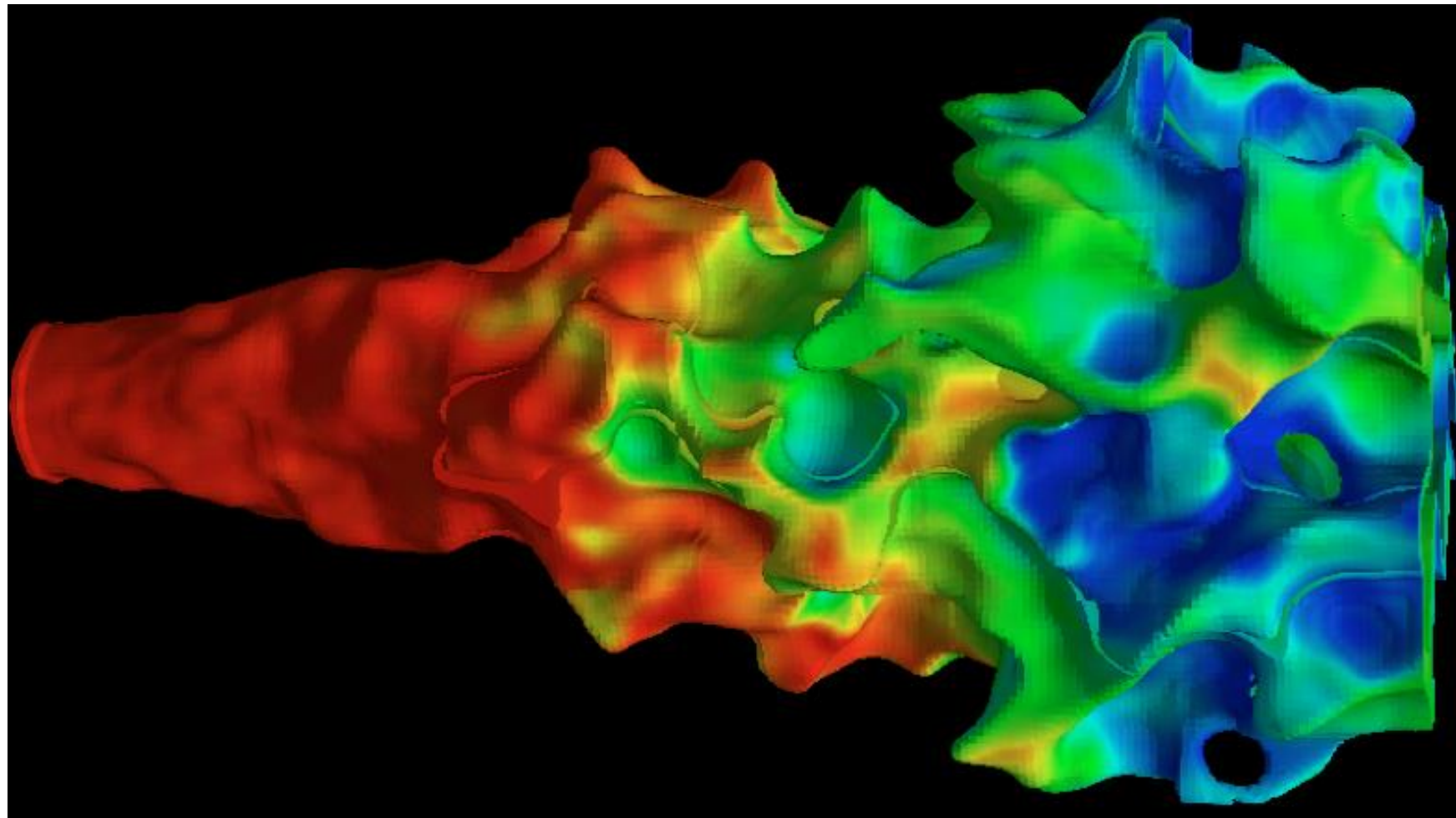


Abb. 1: Turbulente Flamme des Cambridge geschichteten Brenners, Darstellung des Iso-Volumens des Reaktionsquellterms, eingefärbt mit dem reziproken Verbrennungsluftverhältnisses (F. Proch)

## Problemstellung und Ziel

Das Projekt hat das Ziel einen Beitrag zum Verständnis reaktiver Mehrphasenströmungen zu liefern. Dafür werden Partikeltransport- und Chemie-Modelle entwickelt und diese in den in-house LES Code PsiPhi implementiert. Die entwickelten Modelle werden anhand verschiedener Experimente validiert.

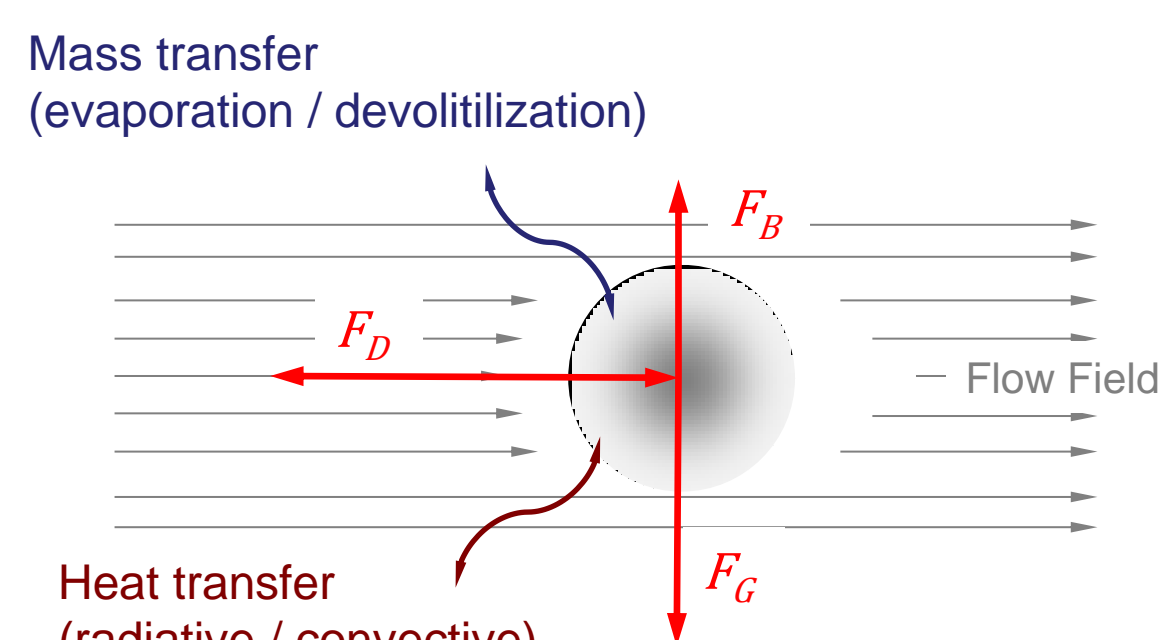


Abb. 2: Skizze einer Mehrphasenströmung, Darstellung des Massentransfers, Wärmetransfers und der Kräfte die auf den Partikel bzw. vom ausgeübt werden.

## Das Simulationsprogramm

- LES In-house Code
- Favre-gefilterte Erhaltungsgleichungen in 3D
- Finite Volumen Methode
- Strukturierte und äquidistante Zellen
- Räumliche Diskretisierung der Impuls Gleichungen mittels zweiter Ordnung Zentral Differenzen Verfahren (CDS)
- Und zweiter Ordnung TVD Verfahren für Dichte und Skalare
- Dritte Ordnung Runge-Kutta Verfahren für Zeitintegration



## Partikel-Transport Methode

- Euler-Lagrange Methode für Gas-Partikel Phasen
- Partikel Bewegung gemäß:

$$\frac{dx_{p,i}}{dt} = u_{p,i}, \quad \frac{du_{p,i}}{dt} = a_{p,i}, \quad a_{p,i} = \frac{1}{\tau_p} (\tilde{u}_i - u_{p,i}) + \left(1 - \frac{\tilde{\rho}}{\rho_p}\right) g_i$$

Mit der Partikel Relaxations-Zeit

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\mu \left(1 + \frac{3}{20} Re_p^{0.687}\right)}$$

Die Partikelverdampfung erfolgt nach dem  $d^2$ -Gesetz:

$$\frac{dd_p^2}{dt} = -4 \frac{\bar{p}}{\rho_p} D \ln(B_M + 1) N u_p$$

Particle devolatilization (Coal/Biomass)  
Complex kinetics using CPD, FLASHCHAIN.

Char combustion -  $C + O_2 \rightarrow CO_2$

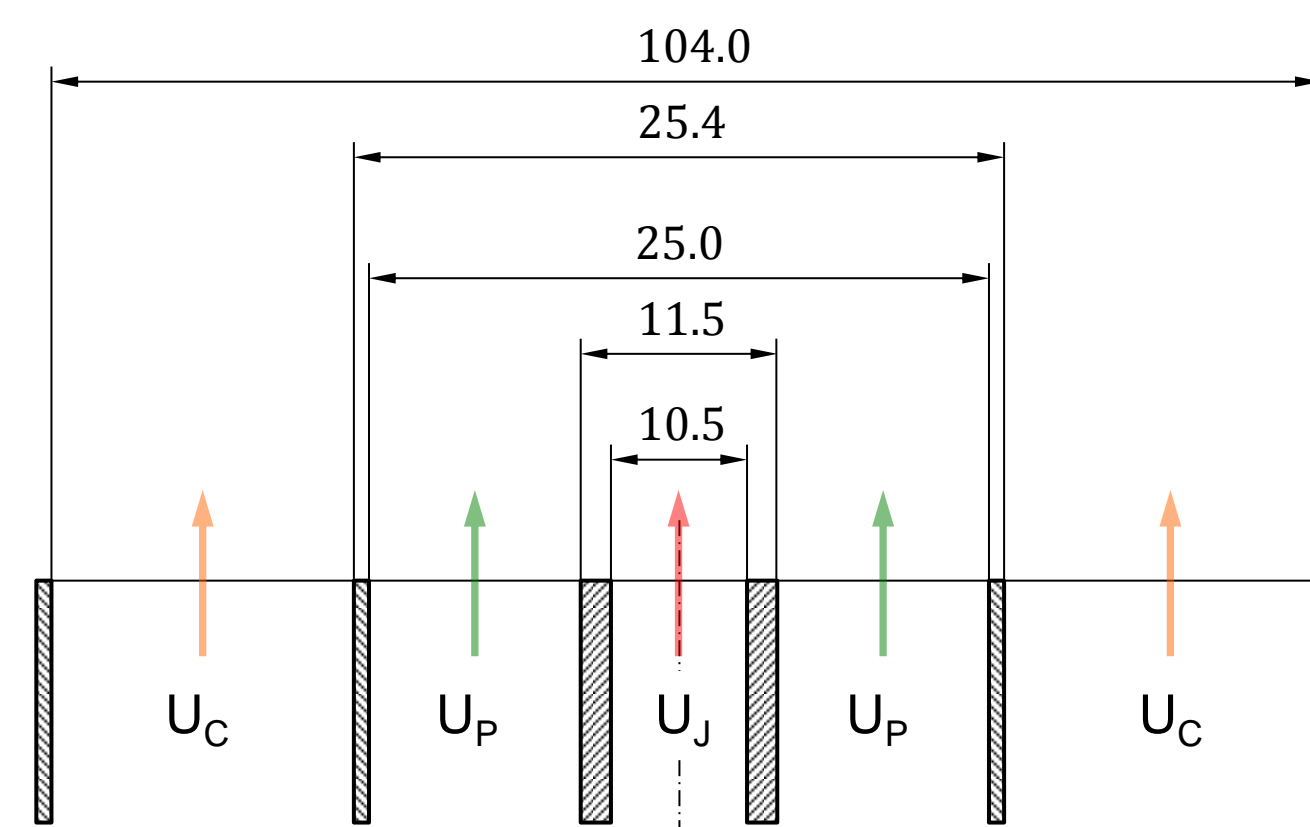
$$R_c = S_a \mu_e \gamma \rho_{p,A} k_i$$

$S_a$  specific internal surface area,  $\mu_e$  effectiveness factor,  
 $\gamma$  characteristic size,  $\rho_{p,A}$  apparent density  
 $k_i$  intrinsic chemical rate

## Literatur

- [1] Gouder, J. D., Kourmatzis, A., and A. R. Masri; Turbulent piloted dilute spray flames: Flow fields and droplet dynamics; Combustion and Flame, 159 (2012) 3372-3397.
- [2] Franchetti, B.M., Cavallo Maricola, F., Navarro-Martinez, S., Kempf, A.M. Large Eddy Simulation of a Pulverised Coal Jet Flame, Proc. Combust. Inst. 34 (2013) 2419-2426.
- [3] Kempf, A.M., Geurts, B.J., Oefelein, J., Error Analysis of Large-Eddy Simulation of the Turbulent Non-premixed Sydney Bluff-Body Flame, Combust. Flame 158 (2011) 2408-2419.
- [4] Pettit, M.W., Corlton, B., Gomez, A., Kempf, A.M., LES and Experiments on Non-Premixed Highly Turbulent 'Opposed Jet' Flames, Proc. Combust. Inst. 33 (2011) 1391-1399.

## Der Sydney Spray Brenner



- Turbulente Aceton /Ethanol Spray Flamme
- Vorgemischte Pilot Flamme zur Stabilisation der Spray-Flamme
- Experimente durchgeführt von Masri et al., Universität Sydney [1]

## Betriebsbedingungen

Gas Phase

- Mittlere Geschwindigkeit Jet  $U_J=24\text{m/s}$  ( $Re=17.000$ )
- Mittlere Geschwindigkeit Pilot  $U_P=1.5\text{m/s}$
- Mittler Geschwindigkeit Coflow  $U_C=4.5\text{m/s}$

Flüssige Phase

- Mittlere Geschwindigkeit  $U_J=24\text{m/s}$  ( $Re=18.000$ )
- Massenstrom  $m_L=23.4\text{g/min}$
- Spray-Jet Dichte  $\rho_J=1.33\text{kg/m}^3$
- Spray-Jet Viskosität  $\mu_J=1.86 \cdot 10^{-5}\text{Pas}$
- Luft-Brennstoff-Verhältnis  $\phi_J=0.8$

## Simulationsergebnisse

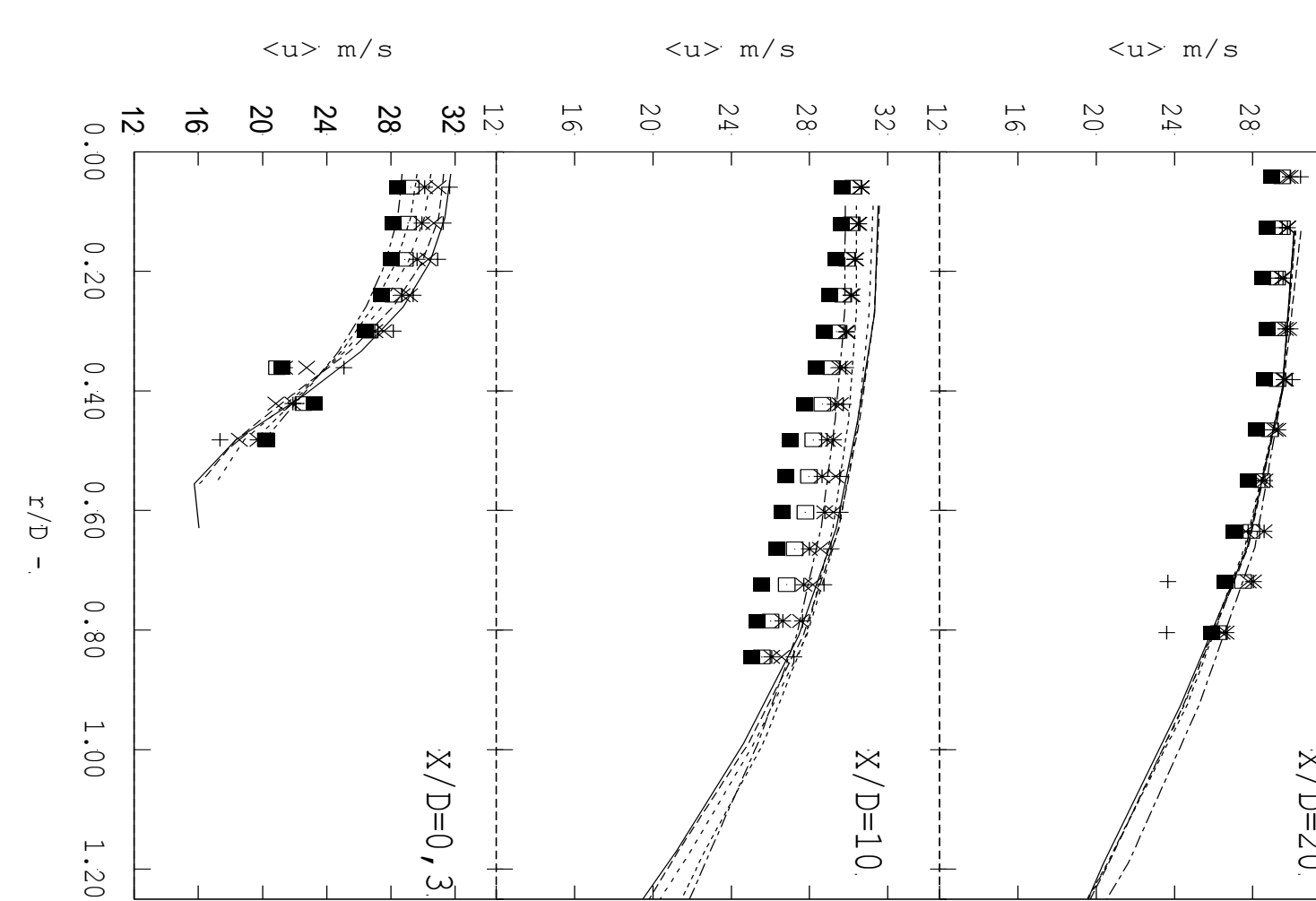


Abb. 5: Simulationsergebnisse gemittelte axiale Partikelgeschwindigkeiten, reaktiver Fall.

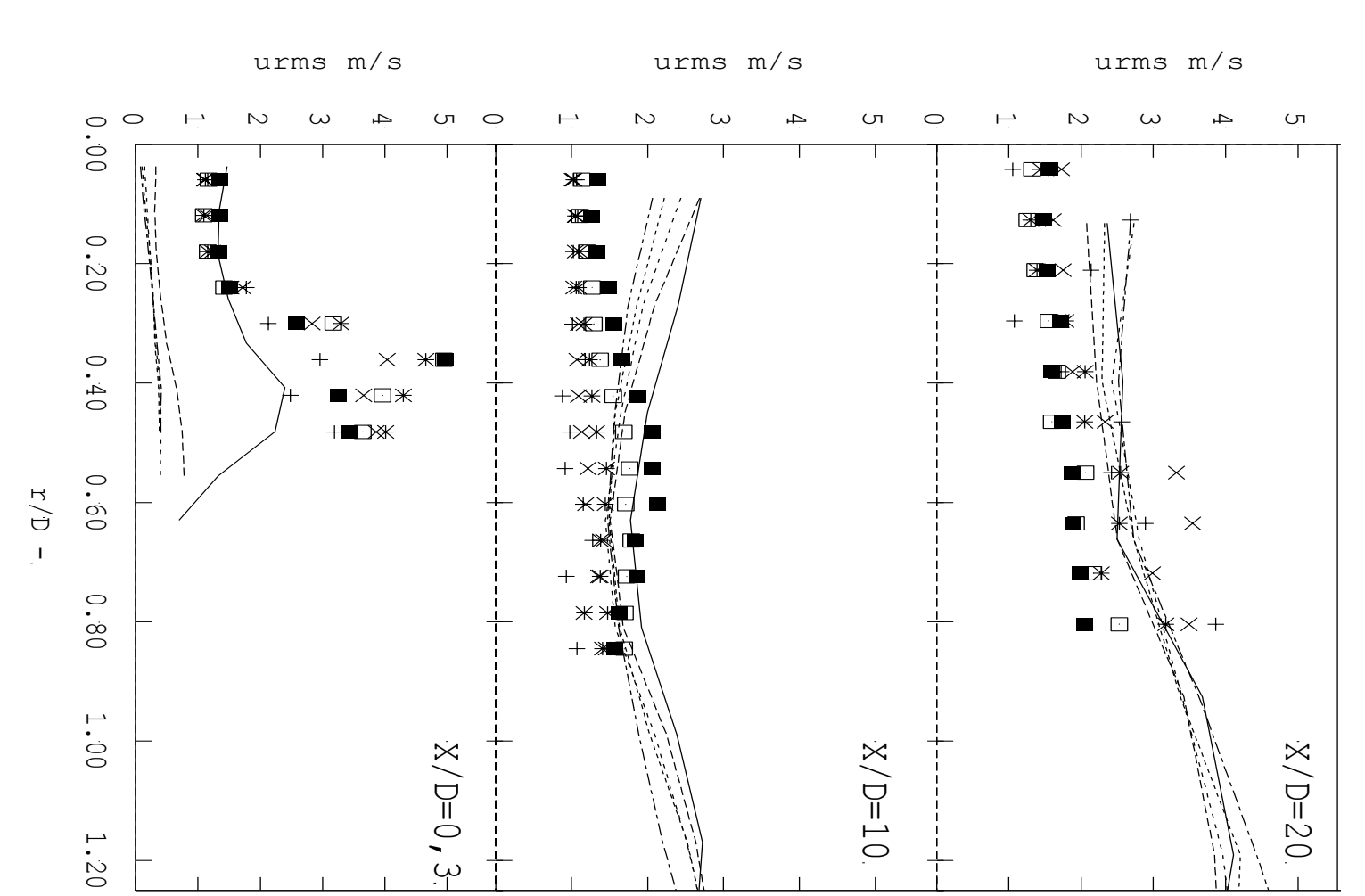


Abb. 6: Simulationsergebnisse Fluktuationen der axialen Partikelgeschwindigkeiten, reaktiver Fall.

## Darstellung der Mehrphasenströmung

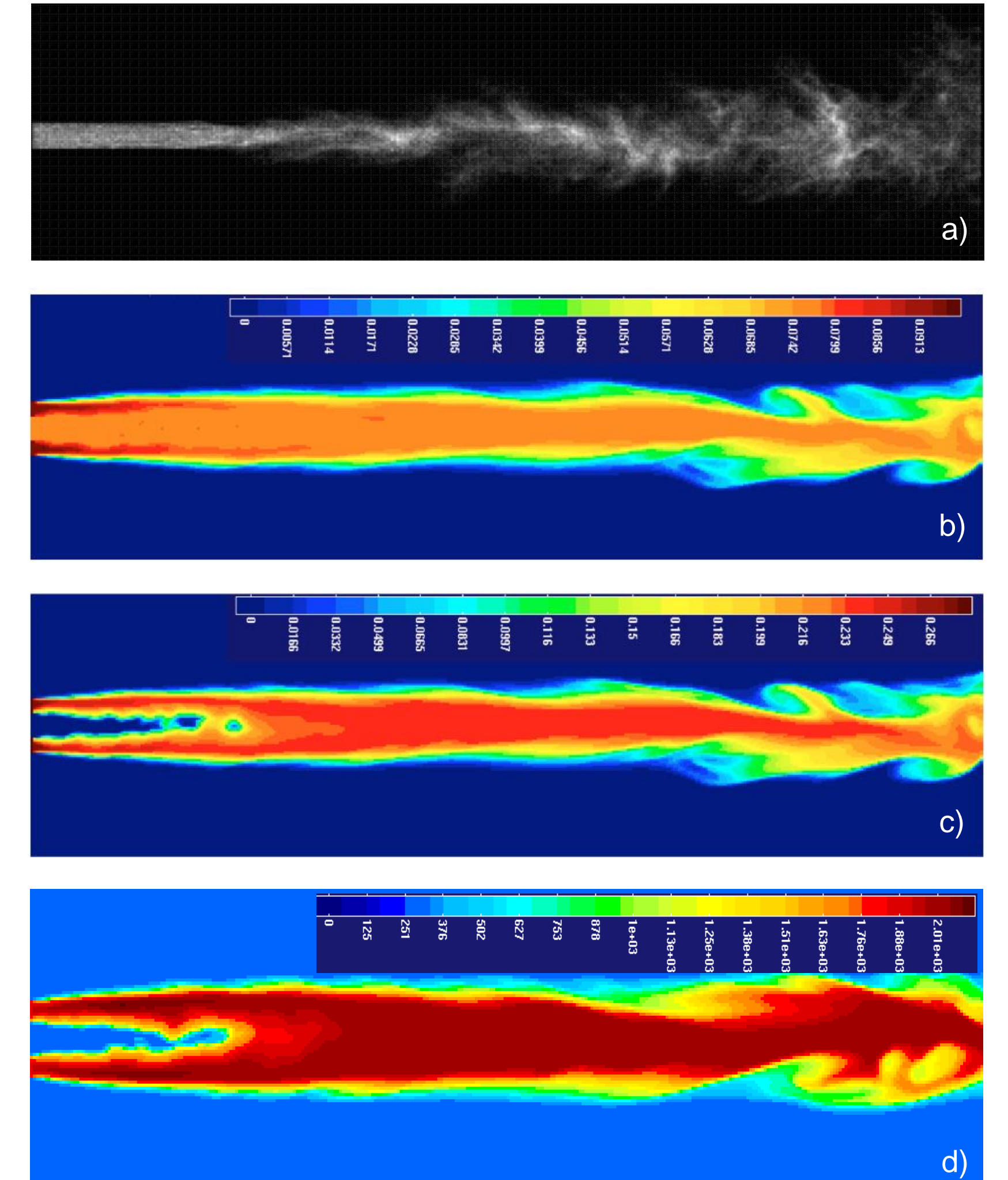


Abb. 4: Simulationsergebnisse, Momentaufnahme von a) Partikelverteilung nicht reaktiver Fall, b) Mischungsbruch c) normierte Fortschrittsvariable und d) Temperatur

## The IST Large-scale Laboratory Furnace

- Multi-fuel burner: gaseous, solid, liquid fuels
- Large enough to reproduce the essential physics in full scale boilers: Fully turbulent flow and significant thermal radiation transfer

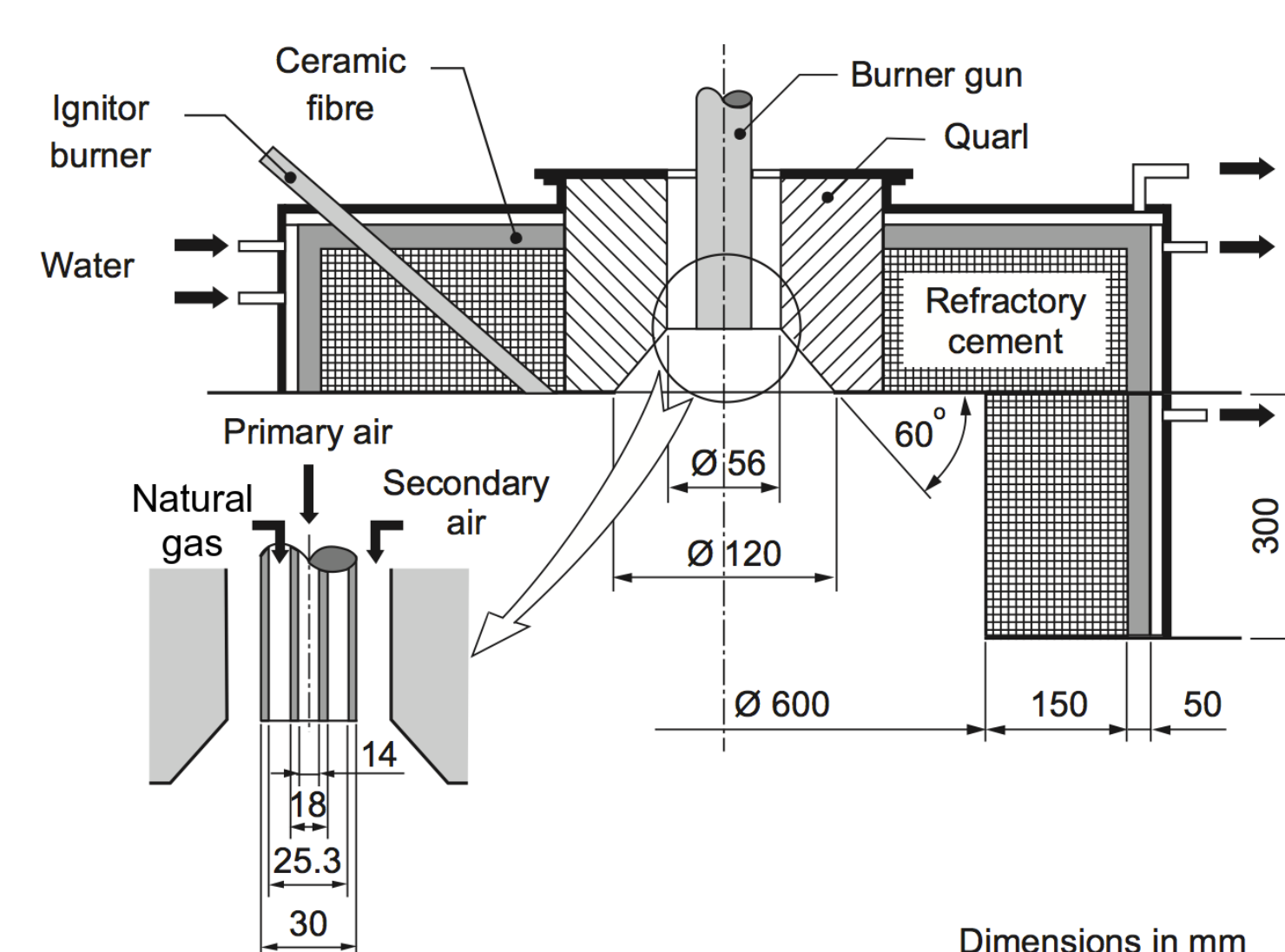


Abb. 7: Experimental setup for a natural gas test case.

## Operating conditions for preliminary flow studies

- Total thermal input 130 kW
- Excess air 10 %
- Natural gas mass flow rate 9.6 kg/h
- Primary air mass flow rate 4.9 kg/h
- Secondary air mass flow rate 150 kg/h
- Secondary air swirl number 1
- Natural gas Re 750
- Primary air Re 6500
- Secondary air Re 75600

## Preliminary Results

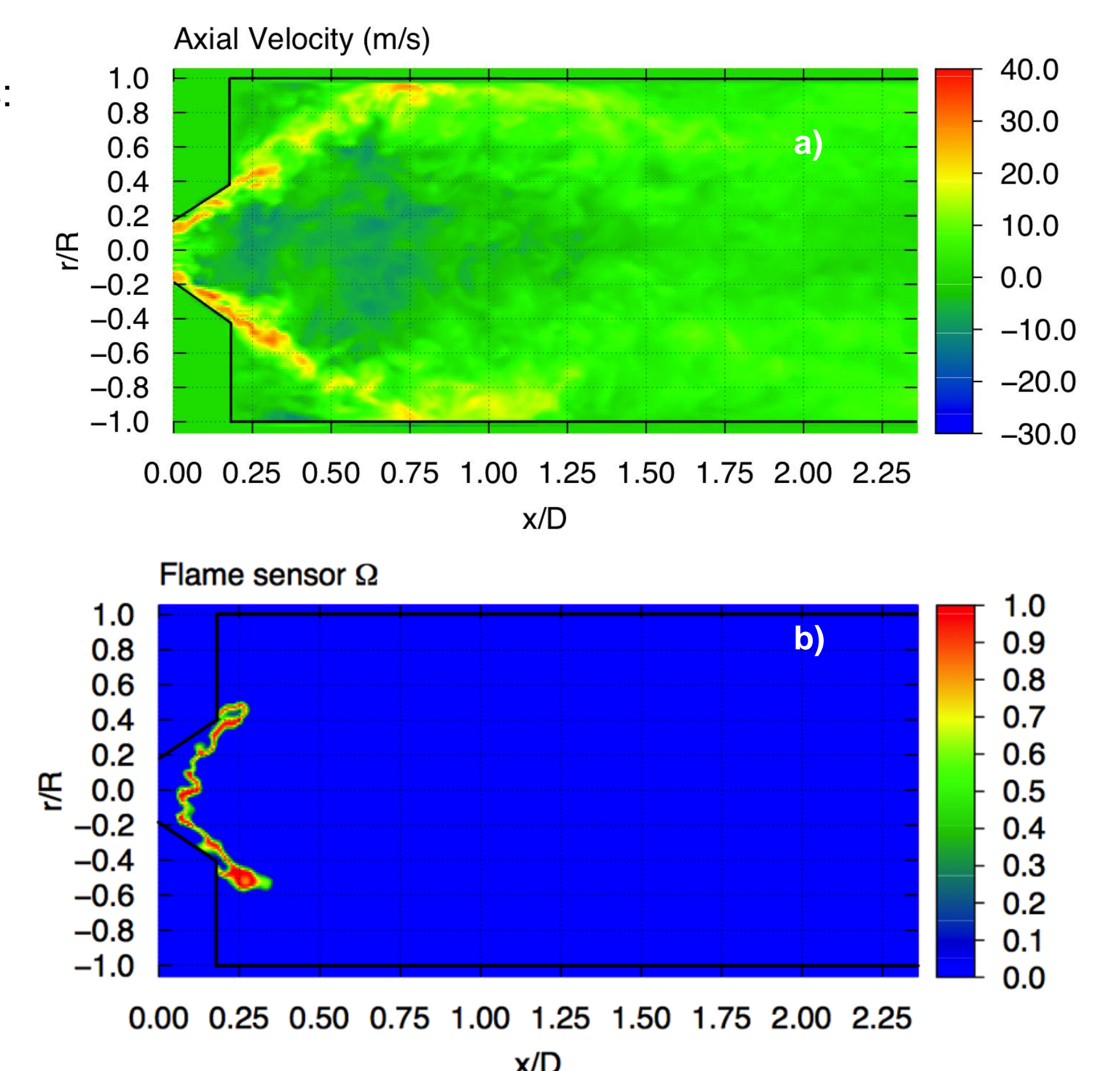


Abb. 8: Preliminary results for the natural gas test case a) Instantaneous axial velocity. Note the recirculation zone, in a bubble-like structure, due to swirl. Particles are entrained in this area, increasing combustion residence time within poor combustion conditions inhibiting fuel- $NO_x$  pollutant mechanism. b) Instantaneous flame sensor, based on the normalised progress variable  $C$ . Combustion takes place in the interface between inflow jets and the recirculation zone. Walls are depicted with a black line.

## Zukünftige Arbeiten

Folgende Themen sollen in der Fortsetzung untersucht werden:

- Untersuchung weiterer Fälle des Sydney Spray Burners
- Untersuchungen bei hohen Partikeldichten
- Implementierung eines Stochastischen Modelles zur Beschreibung der Partikeltransport-Prozesse
- Simulation von Nanopartikel Spray Reaktoren
- Implementation of devolatilization and char combustion models
- Construction of a chemistry table for volatile combustion
- Inclusion of convective and radiative heat transfer
- Investigation of interaction of biomass and coal particles during co-firing