# Einfluss variierender Luftzahlen und Einströmgeschwindigkeiten auf die Wasserstoffflammenstruktur unter Berücksichtigung komponentenspezifischer Diffusion

# Influence of varying air numbers and inflow velocities on the flame structure under consideration of differential diffusion

## J.Barabás<sup>1\*</sup>, V. Jovicic<sup>2\*\*</sup>, A. Delgado<sup>12</sup>

<sup>1</sup> German Engineering Development and Research Center LSTME Busan/South Korea <sup>2</sup> Institute of Fluid Mechanics (LSTM) at Friedrich-Alexander University (FAU), Germany

\* jana.barabas@fau.de, \*\* vojislav.jovicic@fau.de

Komponentenspezifische Diffusion, Flammenstruktur, Diffusionsflamme, Wasserstoff

#### Zusammenfassung

Untersucht wird die Struktur einer laminaren Wasserstoff-Luft-Diffusionsflamme in Open-FOAM. Bisherige Modelle basieren auf der Annahme gleicher Diffusivitäten für unterschiedliche Moleküle im Gasgemisch. Zur Bestimmung von Hochtemperaturzonen und Komponentenverteilung speziell bei der Verbrennung von Wasserstoff ist die Berücksichtigung komponentenspezifischer Diffusivitäten essenziell.

Ziel dieser Arbeit ist es den Einfluss variierender Luftzahlen und Kraftstoffstrahlgeschwindigkeiten unter Beachtung molekülspezifischer Diffusivitäten auf eine Wasserstoff-Diffusionsflamme zu betrachten. Analysiert werden die Auswirkungen auf die Flammenstruktur sowie auf die Verteilung von Temperatur und Massenanteilen. Die Berechnung findet anhand eines dreidimensionalen Modells der Brennkammer statt. Die Einströmung von Wasserstoff und Luft erfolgt durch zwei separierte Microdüsen. Ermittelt wird die Verteilung der Komponenten und die Wärmeentwicklung durch Berücksichtigung der unterschiedlichen Diffusionsgeschwindigkeit mittels der Hirschfelder-Curtiss-Approximation und einer unendlichen schnellen Chemie mit einem Ein-Schritt-Reaktionsmechanismus.

Es zeigt sich, dass eine erhöhte Luftzufuhr die Flammenstruktur um bis zu 50 % verschmälert und die Hochtemperaturzonen zur Zentralachse hin miteinander verschmelzen. Die maximal erreichten Temperaturen weichen um bis zu 1,5 % von der einer stöchiometrischen Verbrennung ab. Eine verringerte Einströmgeschwindigkeit des Wasserstoffs führt dazu, dass sich die Hochtemperaturzonen näher am Düseneinlass der Brennkammer bilden. Bei zunehmender Geschwindigkeit vergrößert sich die Länge des kalten Wasserstoffstrahls um 22 %. Darüber hinaus zeigen die Ergebnisse, dass die axialen Profile der Temperatur und der Massenanteile quantitativ mit der Geschwindigkeit des Wasserstoffstrahls skalieren.

#### Einleitung

Wasserstoff und die Energiegewinnung aufgrund seiner Verbrennung ist eine der vielversprechendsten Lösungen für eine nachhaltige Zukunft im Energiesektor. In diesem Zusammenhang geht es vor allem um die Unterbindung der Bildung von  $CO_2$  Molekülen und die Vermeidung von Stickoxyden. Zur NOx Reduktion finden bei der Wasserstoffverbrennung in Gasturbinen vor allem Microdüsen Anwendung (1–3). Zur Optimierung der Flammenstabilität und Verbrennungsverhalten von H<sub>2</sub> ist ein häufiger Ansatz die Modifikation der Brenner- beziehungsweise Düsengeometrie (2, 4–6). Dabei beschäftigen sich bisherige Studien mit dem Vergleich verschiedener Verbrennungsmodelle unter Verwendung detaillierter Chemie (3, 7).

Die Studie von Toro et al. (8) ist eine der ersten zur numerischen und experimentellen Untersuchung einer laminare Wasserstoffdiffusionsflamme. Sie betrachteten eine Variation der Geschwindigkeiten und stellten fest, dass die Konzentration der Gaskomponenten und die Temperatur sich quantitativ von der Eingangsgeschwindigkeit veränderte. Weitere Untersuchungen zur Leistungsvariation und unterschiedlichen Äquivalenzverhältnisse unter Verwendung eines detaillierten Reaktionsmechanismus wurde in der Studie von Li und Kobayashi (9) durchgeführt. Es zeigte sich eine verschmälerte Flammenbreite für höhere Äquivalenzverhältnis und eine verlängerte Wasserstoffflammenlänge für höhere Leistungen.

Zur Berechnung von reaktiven Strömungen mit und ohne der Berücksichtigung unterschiedlicher Diffusivität der einzelnen Komponenten wurde von Maragkos et al. (10, 11) unter Verwendung der Burke-Schumann-Lösungsmethode und eines unendlichen schnellen Reaktionsmechanismus, eine sogenannte Projektionsmatrix eingeführt. Die Beachtung der hohen Diffusivität führte dazu, dass sich die Hochtemperaturzone näher zum Düsenausgang verschoben. In der Veröffentlichung von Bruno et al. (12) wurde die Auswirkung von molekularer Diffusion in turbulenten Strömungen untersucht und verschiedene Modelle zur Berechnung der Diffusionsgeschwindigkeit miteinander verglichen. Aus den Ergebnissen war ein Einfluss der Mehrkomponentendiffusion auf den Wirbeltransport und die Verteilung der Gaskomponenten in der Reaktionszone erkennbar.

Ziel dieser Arbeit ist es die Auswirkung variierender Verbrennungsverhältnisse zwischen H<sub>2</sub> und Luft sowie den Einfluss unterschiedlicher Strömungsgeschwindigkeiten numerisch zu untersuchen. Dabei wird mittels der Hirschfelder-Curtiss-Approximation unter Verwendung der unendlichen schnellen Chemie, die unterschiedliche Diffusivitäten der einzelnen Komponenten mitbeachtet.

#### Physikalisches & chemisches Modell

Zur mathematischen Beschreibung einer laminaren Diffusionsflamme werden vier Erhaltungsgleichungen benötigt. Dazu zählen zum einen die Massen- und Impulserhaltungsgleichung sowie die Energieerhaltungsgleichung. Zum anderen bestimmt die Komponentenmassengleichung den Erhalt der einzelnen Gaskomponenten. Zur Berechnung dieser Erhaltungsgleichung wird, unter Berücksichtigung der komponentenspezifischen Diffusivität, die Hirschfelder-Curtiss-Approximation angewandt. Der Massendiffusionskoeffizient  $D_k$  wird zwar nicht für eine binäre Diffusion der einzelnen Moleküle untereinander berechnet, aber durch einen äquivalenten Diffusionskoeffizienten approximiert. Dieser beschreibt die Vermischung der Komponente k in das restliche Gasgemisch. Der Diffusionskoeffizient kann über die Beziehung in Gleichung (1) bestimmt werden.

$$D_k = \mu \rho S c_k \tag{1}$$

Hierbei ist  $Sc_k$  die komponentenspezifische Schmidt-Zahl. Für diesen Kennwert gelten die folgenden Werte H<sub>2</sub> = 0,21, H<sub>2</sub>O = 0,63, O<sub>2</sub> = 0,76 und N<sub>2</sub> = 0,81 (*11, 13*). Damit die Massenerhaltung gewährleistet ist, wird nach der Hirschfelder-Curtiss-Approximation innerhalb der Komponentenmassenerhaltungsgleichung eine Korrekturgeschwindigkeit eingeführt und zum Geschwindigkeitsfeld addiert. Die komponentenspezifische Diffusionsgeschwindigkeit wird zur Ermittlung der Energieerhaltung verwendet.

Zur Beschreibung des thermodynamischen Modells werden folgende Annahmen getroffen. Die dynamische Viskosität berechnet sich anhand des Sutherland'schen Gesetztes mit den Koeffizienten  $As = 1,358519 \cdot 10 - 6 \ kgmsK$  und  $Ts = 110,04 \ K \ (11)$ . Die thermische Diffusivität ist abhängig von dem Verhältnis aus Wärmeleitfähigkeit zur spezifischen Wärmekapazität. Die Wärmleitfähigkeit wird nach der modifizierten Euchen-Formel bestimmt und die spezifische Wärmekapizität ergibt sich aus einem temperaturabhängigem Polynom basierend auf der Burcat-Datenbasis (14). Für die thermische Zustandsgleichung im OpenFOAM Modell wird die ideale Gasgleichung gewählt.

Das Verbrennungsmodell beruht auf der Annahme einer irreversiblen unendlichen schnellen Chemie mit einem ein-Schritt Reaktionsmechanismus. Die Reaktionsrate berücksichtigt darüber hinaus den diffusiven Mischungsprozess der laminaren Strömung. Zur Verknüpfung des chemischen und physikalischen Bereichs wird die Komponentenmassenerhaltungsgleichung anhand der Normierungsbedingung gelöst.

## Numerischer Aufbau

Wie in der Abb. 1 dargestellt umfasst die Wasserstoffdüse einen Durchmesser von 0,8 mm und wird von einer 3,4 mm großen Luftdüse umschlossen. Getrennt werden beide Strömungen von einer 0,6 mm breiten Wandschicht. Die Brennkammer bemisst sich auf eine Länge von 50 mm und einem Durchmesser von 20 mm. Der Abstand der Brennkammeroberfläche ist so gewählt, dass die Randbedingungen der Oberfläche keinen signifikanten Einfluss auf das Strömungsverhalten der Gase ausüben. Insgesamt wurde die Geometrie mit über 41.000 Knotenpunkten vernetzt. Zur effizienteren Berechnung ist der Bereich mit hoher geforderter Genauigkeit nahe am Einlass und entlang der Symmetrieachse feiner vernetzt als der Bereich vor dem Auslass und an der Brennkammeroberfläche.

Die Einströmgeschwindigkeit der Gase wird anhand eines vorgegebenen Massenflusses bestimmt. Der damit einhergehende Massenanteil der einzelnen Komponenten wird über das Verhältnis des Massenflusses der jeweiligen Komponente zum Gesamtmassenfluss des Gasgemisches bestimmt. Die Ränder der Brennkammer werden, bis auf die Unterseite des Zylinders als offen angenommen. Für die Randbedingung der Massenanteile sowie für die Geschwindigkeit gilt, die Neumann-Randbeindung für ausströmende und die Dirichlet-Bedingung mit einer Geschwindigkeit gleich null, für einfließende Strömungen. Für den Druck gelten an den Rändern die Neumann-Randbedingung.



Abb. 1: Zweidimensionale Skizze der zylindrischen Brennkammer

Die Temperatur ist an den Rändern konstant. Alle Größen werden den Zellmitten zugewiesen, wobei die Geschwindigkeiten linear zu den Zellflächen interpoliert werden. Zur Lösung der diffusiven und konvektiven Terme wird ein zentrales Differenzschema zweiter Ordnung angewendet.

## **Ergebnisse & Diskussion**

Die Abb. 2 und die Abb. 3 zeigen die Temperaturverteilung in der Brennkammer für unterschiedliche Luftzahlen. Die Abb. 2a stellt die Temperaturverteilung unter der Annahme einer stöchiometrischen Verbrennung dar. Darauf folgt in der Abb. 2b eine Erhöhung der Luftmassen auf  $\lambda$ = 1,5 und die letzte Abb. 2c zeigt die Verteilung für  $\lambda$  = 2.



Abb. 2: Temperaturverteilung für unterschiedliche λ-Werte

Wie in Abb. 2 hat die Erhöhung der Luftzufuhr zur Folge, dass die Flammenbreite abnimmt und sich die Flammenstruktur verschmälert. Desweiteren läuft die Hochtemperaturzone zur Mitte hin zusammen.

Der Effekt der verengten Reaktionszone wird in der Abb. 3a bestätigt. Der Graph zeigt die radiale Temperaturverteilung bei einer Höhe von z = 2,5 mm. Es wird erkennbar, dass für größere  $\lambda$ -Werte die Hochtemperaturzone schmaler wird, da für höhere Luftzahlen ein größerer Massenstrom an kalter Luft für die Verbrennung in die Brennkammer eingedüst wird. Das führt dazu, dass für  $\lambda = 2$  die Hochtemperaturzone halb so breit ist wir bei einer stöchiometrischen Verbrennung.



Abb. 3: Axiale und radiale Temperaturverteilung für variierende Luftzahlen

Die geringe Abweichung von 1,5 % für  $\lambda$  = 1,5 bzw. 0,4 % für  $\lambda$  = 2 der maximalen Flammentemperatur kann dadurch begründet werden, dass unabhängig davon, wie viel Luft einströmt ein stöchiometrisches Verhältnis der Mischung während der Verbrennung vorliegt. Die Abb. 3b zeigt die Auswirkung von einem höherem  $\lambda$ -Wert auf die Temperaturentwicklung entlang der Mittelachse. Je höher der  $\lambda$ -Wert wird, desto weiter verschiebt sich die Spitzentemperatur entlang der Mittellinie stromaufwärts zur Düse.



Abb. a) Axiale Sauerstoffverteilung

Abb. b) Axiale Wasserverteilung

Abb. 4: Axiale und radiale Sauerstoffverteilung für variierende Luftzahlen

Im axialen Verlauf der Sauerstoffverteilung in Abb. 4a ist ein lokaler Anstieg der Sauerstoffkonzentration am H<sub>2</sub>-Düseneinlass zu erkennen. Aufgrund der Berücksichtigung der hohen Diffusivität von Wasserstoff verdrängt die einströmende Luft den vorhandenen Wasserstoff an dieser Stelle. Weiter entlang der Zentralachse wird der Sauerstoff bei der Verbrennung verbraucht und steigt hinter der Reaktionszone wieder an. Dieser Effekt ist auch in den Messungen von Toro et al. (8) und Maragkos et al. (11) erkennbar und wird mit den Simulationen mit abgebildet. Abb. 4b zeigt die Verteilung der Wassermassenanteile entlang der Zentralachse bei r = 0 mm. Es ist zu sehen, dass für stöchiometrische Verbrennung der Masseranteil an H<sub>2</sub>O schneller abnimmt als für höhere  $\lambda$ -Werte. Auffällig ist auch, dass der Wasseranteil bei  $\lambda$  = 1 am Brennkammerausgang unterhalb der Massenanteile für magere Verbrennungen liegt. Da in Abb. 4 zu sehen ist, dass bei einer stöchiometrischen Verbrennung die Sauerstoffanteile langsamer und die Wasseranteile schneller ansteigen als für magere Verbrennungen lässt sich daraus schließen, dass bei einer Luftzahl von  $\lambda$  = 1 die Verbrennung früher abläuft als bei einer mageren Verbrennung.



Abb. 5: Temperaturverteilung für unterschiedliche Geschwindigkeiten

In dem nachfolgenden Abschnitt werden verschiedene Eingangsgeschwindigkeiten und ihr Einfluss auf die Temperaturentwicklung verglichen. Dabei handelt es sich immer um eine stöchiometrische Verbrennung. In dem bisherigen Modell wurde Wasserstoff mit einer Geschwindigkeit von 10  $\frac{m}{s}$  eingedüst (Abb. 5b). Zur Variation wurde die Geschwindigkeit um 50 % verringert (Abb. 5a) beziehungsweise um 50 % gesteigert (Abb. 5c). Da die Brennkammer als Anfangsbedingung mit Luft gefüllt ist und das System mehr Zeit benötigt, um sich aufzuheizen sind die Temperaturen bei geringerer Geschwindigkeiten im Verhältnis zur Einströmgeschwindigkeit schneller in radialer Richtung als bei höheren Geschwindigkeiten. Infolge dessen ergibt sich eine rundlichere Flammenstruktur nahe der Düse. Bei höherer Geschwindigkeit, wie in der Abb. 5c zu sehen, bilden sich deutlich voneinander getrennte, vom kalten Wasserstoffstrahl separiert Hochtemperaturzonen aus. Mittels des Vergleichs der drei Abbildungen in Abb. 5 lässt sich außerdem feststellen, dass sich der unreagierte Wasserstoffkern mit steigender Geschwindigkeit verlängert. Dies wurde auch in den Messungen von Toro et al. (*8*), Maragkos et al. (*11*) und Li und Kobayashi (*9*) beobachtet.



Abb. 7 Radiale und axiale Temperaturverteilung für variierende Geschwindigkeiten

Die Abb. 6 verdeutlicht die Auswirkung der Geschwindigkeitsvariation auf die Temperaturverteilung in axialer (Abb. 6a) und radialer (Abb. 6b) Richtung. Wie im Graphen in Abb. 6 zu erkennen ist, haben die Hochtemperaturzonen bei z = 2,5 mm für eine Geschwindigkeit von  $10 \frac{m}{s}$  und  $5 \frac{m}{s}$  dieselbe Breite, während sich für die höhere Geschwindigkeit eine schmälere Zone ergibt. Insgesamt fällt die Variation der Breite der Hochtemperaturzone geringer aus als für runterschiedliche  $\lambda$ -Werte. Anders verhält es sich entlang der Zentralsachse. Hier führt eine Geschwindigkeitssteigerung zu einer Verschiebung der lokalen maximalen Temperatur.



Abb. a) Axiale Sauerstoffverteilung

Abb. b) Axiale Wasserverteilung

Abb. 6 Axiale und radiale Sauerstoffverteilung für variierende Geschwindigkeiten

Unter Betrachtung des axialen Verlaufs der Sauerstoff- und Wasserkonzentration in Abb. 7 wird die quantitative Skalierung der Massenanteile mit Geschwindigkeit deutlich. In Abb. 7a wird auch hier das Phänomen des minimalen Anstiegs der Sauerstoffkonzentration am Wasserstoffdüseneingang beobachtet. Aus beiden Graphen in Abb. 7a und Abb. 7b ist zu sehen, dass eine geringere Geschwindigkeit zu einem früheren Anstieg an Sauerstoff und eine schnellere Abnahme von Wasser in der Brennkammer führt. Somit führt eine geringere Geschwindigkeit zu einer Reaktion.

## Fazit

Der Vergleich variierender λ-Werte und Geschwindigkeiten zeigt, dass die Luftzahl größere Auswirkungen auf die Flammenstruktur und die Verteilung der Hochtemperaturzone hat. Mit steigender Luftzahl verkleinert sich die Flammenbreite. Eine Veränderung der Einströmgeschwindigkeit führt zu unterschiedlichen Aufheizverhalten in der gesamten Brennkammer und variierender Länger des Wasserstoffstrahls. Beide Parameter bewirken eine Veränderung des Reaktionsverhaltens während der Verbrennung.

#### Literatur

- 1. **P. F. Ghali, B. Khandelwal,** in *AIAA Scitech 2021 Forum* (American Institute of Aeronautics and Astronautics, Reston, Virginia, 01112021).
- 2. P. Agarwal, X. Sun, P. Q. Gauthier, V. Sethi, in (American Society of Mechanical Engineers Digital Collection, 2019).
- A. Haj Ayed K.Kusterer, H.H.-W. Funke, J. Keinz, C. Striegan, D. Bohn. Experimental and numerical investigations of the dry-low-NOx hydrogen micromix combustion chamber of an industrial gas turbine. *Propulsion and Power Research*. 4, 123–131 (2015), doi:10.1016/j.jppr.2015.07.005.
- J. R. Stewart, CFD modelling of underexpanded hydrogen jets exiting rectangular shaped openings. *Process Safety and Environmental Protection*. **139**, 283–296 (2020), doi:10.1016/j.psep.2020.04.043.
- M.N. Soloklou, A.A. Golneshan, Numerical investigation on effects of fuel tube diameter and coflow velocity in a methane/air non-premixed flame. *Heat Mass Transfer.* 56, 1697–1711 (2020), doi:10.1007/s00231-019-02805-9.
- A. H. Ayed, K. Kusterer, H.H.-W. Funke, J. Keinz, D. Bohn, CFD based exploration of the drylow-NOx hydrogen micromix combustion technology at increased energy densities. *Propulsion and Power Research.* 6, 15–24 (2017), doi:10.1016/j.jppr.2017.01.005.
- S. Emami, H. Jafari, Y. Mahmoudi, Effects of Combustion Model and Chemical Kinetics in Numerical Modeling of Hydrogen-Fueled Dual-Stage HVOF System. *J Therm Spray Tech.* 28, 333–345 (2019), doi:10.1007/s11666-019-00826-8.
- 8. V. V. Toro, A. V. Mokhov, H. B. Levinsky, M. D. Smooke, Combined experimental and computational study of laminar, axisymmetric hydrogen–air diffusion flames. *Proceedings of the Combustion Institute*. **30**, 485–492 (2005), doi:10.1016/j.proci.2004.08.221.
- 9. J. Li, H. Huang, N. Kobayashi, Hydrogen combustion as a thermal source. *Energy Procedia*. 142, 1083–1088 (2017), doi:10.1016/j.egypro.2017.12.360.
- G. Maragkos, P. Rauwoens, B. Merci, A new methodology to incorporate differential diffusion in CFD simulations of reactive flows. *Combustion and Flame*. 160, 1903–1905 (2013), doi:10.1016/j.combustflame.2013.04.001.
- G. Maragkos, P. Rauwoens, B. Merci, Differential diffusion effects in numerical simulations of laminar, axi-symmetric H2/N2–air diffusion flames. *International Journal of Hydrogen Energy*. 39, 13285–13291 (2014), doi:10.1016/j.ijhydene.2014.06.086.
- C. Bruno, V. Sankaran, H. Kolla, J. H. Chen, Impact of multi-component diffusion in turbulent combustion using direct numerical simulations. *Combustion and Flame*. 162, 4313–4330 (2015), doi:10.1016/j.combustflame.2015.07.013.
- E. Giacomazzi, F. R. Picchia, N. Arcidiacono, A review of chemical diffusion: Criticism and limits of simplified methods for diffusion coefficient calculation. *Combustion Theory and Modelling*. 12, 135–158 (2008), doi:10.1080/13647830701550370.
- 14. **A. Burca**t, in *Combustion chemistry*, W. C. Gardiner, Ed. (Springer International Publishing, Cham, 20), pp. 455–473.