

## Abstract

The objective of the presented work is the numerical investigation of experiments for the study of nanoparticle producing laminar flames. Popular, state of the art numerical tools for the investigation of the detailed structure of laminar flames are based on strong assumptions, leading to one-dimensional, steady state approximations of the transport and conservation equations. Unfortunately, these assumptions are often violated. The main focus of this thesis is on the quantification of uncertainties and model errors introduced by thermodynamic and gas dynamic effects, geometric constraints of the reactor and invasive measurement technique in real experiments by means of detailed multi-dimensional numerical simulations of the particle forming, reacting flow.

Five different experimental setups were investigated in close collaboration with the research groups conducting these experiments. First, the impact of a molecular beam sampling nozzle on the structure of an atmospheric, premixed hydrogen/oxygen flame. Second, the probing from a low-pressure flat flame of methane and oxygen, where additionally the impact of buoyancy at large heights above the burner was quantified. Third, iron pentacarbonyl doped, particle forming, low-pressure flames of hydrogen/oxygen and methane/oxygen, with and without probing nozzle. Fourth, an atmospheric, sooting, ethylene/oxygen stagnation flow flame with a probing orifice in the stagnation plane. And finally a silica producing low-pressure flame of hydrogen/oxygen doped with hexamethyldisiloxane, used for laser induced fluorescence measurements of SiO. All these investigations required two- and three-dimensional models of the burner and housing geometry in order to capture all deviations from the one-dimensional assumptions.

The results presented in this thesis demonstrated the need for such detailed investigations and also contributed to the improvement of experiments and of the kinetic models derived from the measurements. It could be shown that the one-dimensional assumptions are valid only for a very limited set of conditions and that empirical correction formulas are not of general validity. However, the deviations from the idealizing assumptions can be quantified by complementary fluid mechanical simulations of the individual experiment. Based on these findings, the multi-dimensional flow simulation became a permanent element of the experimental workflow at the Institute for Combustion and Gas Dynamics.

## Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit befasst sich mit der numerischen Untersuchung von Experimenten zur Herstellung von Nanopartikeln aus laminaren Flammen. Die gängigen Ansätze zur Untersuchung der Struktur laminarer Flammen basieren nach heutigem Stand der Technik, auf starken Vereinfachungen, welche zu eindimensionalen, stationären Näherungen der Transport- und Erhaltungsgleichungen führen. Diese Vereinfachungen sind jedoch oft nicht gültig. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt bei der Quantifizierung dieser Unsicherheiten und Modellfehler, die durch thermodynamische und gasdynamische Effekte, geometrische Einflüsse der Versuchsanordnung und Störungen durch invasive Messtechniken verursacht wurden. Zur Quantifizierung dieser Fehler wurden multidimensionale Simulationen der reagierenden Strömungen durchgeführt.

Insgesamt wurden fünf verschiedene Versuchsanordnungen in enger Kooperation mit den entsprechenden experimentell arbeitenden Gruppen untersucht. Als erstes wurde der Einfluss einer Düse zur Molekularstrahl Probennahme auf die Struktur einer atmosphärisch brennenden Wasserstoff/Sauerstoff Flamme untersucht. Zweitens wurde der Effekt einer Probennahme-Düse auf eine Niederdruck-Flamme, die mit Methan/Sauerstoff betrieben wurde untersucht. Hierbei wurde auch der Einfluss des Auftriebs auf Messungen weit oberhalb des Brenners untersucht. Als drittes wurde eine mit Eisenpentacarbonyl dotierte Niederdruck-Flamme, betrieben mit Wasserstoff/Sauerstoff und Methan/Sauerstoff mit oder ohne Probenahme-Düse untersucht. Als viertes wurde eine atmosphärisch brennende, rußende Staupunkt-Flamme, betrieben mit Ethen/Sauerstoff untersucht. In dieser Flamme wurde das Gas im Staupunkt der Platte entnommen. Schließlich wurde eine Niederdruck Wasserstoff/Sauerstoff Flame, dotiert mit Hexamethyldisiloxan und eingesetzt für Messungen von Siliziumoxid mittels laserinduzierter Fluoreszenz untersucht. Alle fünf Versuchsanordnungen mussten mit zwei- und dreidimensionalen Modellen der Brenner- und Gehäuse-Geometrie abgebildet werden, um die Abweichung zu der Annahme einer eindimensionalen Strömungssituation zu erfassen.

Die Simulationen demonstrierten die Notwendigkeit für detaillierte Untersuchungen des Strömungsfeldes und der thermodynamischen Einflüsse und trugen dazu bei die Experimente und die daraus abgeleiteten Modelle der Reaktionskinetik zu verbessern. Es wurde gezeigt, dass die Annahme der eindimensionalen Strömung nur für wenige Konfigurationen angenommen werden darf und schon kleine Änderungen der Versuchsgeometrie eine Neubewertung der Messergebnisse erfordern. Die Abweichungen von den stark idealisierten Annahmen konnten mittels Strömungssimulation zuverlässig quantifiziert werden. Basierend auf den in dieser Arbeit gewonnen Erfahrungen, ist die komplementär durchgeführte Strömungssimulation zu einem festen Bestandteil der experimentellen Praxis am Institut für Verbrennung und Gasdynamik geworden.