



Raphael NEUBAUER BSc.

Numerische Simulation eines industriellen Kessels im Gas- und Flüssigbrennstoffbetrieb

MASTERARBEIT

zur Erlangung des akademischen Grades

Diplom-Ingenieur

Masterstudium Verfahrenstechnik

eingereicht an der

Technischen Universität Graz

Betreuer

Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn Christof HOCHENAUER

Institut für Wärmetechnik

Dipl.-Ing. Dr.techn Lorenz GRIENDL
Andritz AG

EIDESSTATTLICHE ERKLÄRUNG

AFFIDAVIT

Ich erkläre an Eides statt, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst, andere als die angegebenen Quellen/Hilfsmittel nicht benutzt, und die den benutzten Quellen wörtlich und inhaltlich entnommenen Stellen als solche kenntlich gemacht habe. Das in TUGRAZonline hochgeladene Textdokument ist mit der vorliegenden Masterarbeit identisch.

I declare that I have authored this thesis independently, that I have not used other than the declared sources/resources, and that I have explicitly indicated all material which has been quoted either literally or by content from the sources used. The text document uploaded to TUGRAZonline is identical to the present master's thesis.

Datum / Date

Unterschrift / Signature

Kurzfassung

Titel: Numerische Simulation eines industriellen Kessels im Gas- und Flüssigbrennstoffbetrieb

Autor: Raphael NEUBAUER

1. Stichwort: CFD Simulation
2. Stichwort: Verbrennung
3. Stichwort: Modellierung

Im Rahmen dieser Masterarbeit wurde ein mit Gas und flüssigem Brennstoff befeuerter Kessel modelliert und mit Hilfe der numerischen Strömungssimulation untersucht und analysiert. Der Schwerpunkt dieser Arbeit liegt in der Auswahl geeigneter Modelle, die eine Simulation eines gesamten Kessels mit vertretbarem Rechenaufwand ermöglichen.

Im ersten Schritt wurde dazu eine umfassende Literaturrecherche über die zur Verfügung stehenden Modelle erstellt. Ausgehend vom Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (RANS) Turbulenzansatz wurden folgende Bereiche berücksichtigt: Turbulenz, Verbrennung, Einfluss der Turbulenz auf die Verbrennung, Reaktionsmechanismus, Strahlung und Zerstäubung. Aus den einzelnen Bereichen wurden anschließend die Modelle aus der Literaturrecherche ausgewählt, die ein ausgewogenes Verhältnis von Genauigkeit zu geringem Rechenaufwand aufweisen.

Im nächsten Schritt wurde eine 2D-Simulation durchgeführt, um den Gasaustritt aus der Gaslanze zu untersuchen. Mit dem Ergebnis konnte gezeigt werden, dass die Ausströmung aus der Gaslanze vereinfacht modelliert werden kann und somit die Strömung in der Gaslanze nicht mehr berücksichtigt werden muss. Mit dieser Erkenntnis wurde für einen Brenner und eine Modellbrennkammer ein Berechnungsgitter erzeugt und anschließend die zuvor ausgewählten Modelle implementiert. Die Randbedingungen der Modellbrennkammerwände wurden so gewählt, dass bereits mit der Einzelbrennerstudie die Flamme im Kessel analysiert werden konnte. Der Einfluss der Wandtemperatur und des Emissionsgrades der Wand wurden dabei in einer separaten Parameterstudie untersucht. Weiters konnte gezeigt werden, dass sich das Strömungsprofil im Primär- und Sekundärluftkanal bei unterschiedlichen Betriebspunkten des Brenners kaum bis gar nicht ändert. Diese Tatsache wurde für weitere Simulationen benutzt, um Teile des Brenners im Berechnungsgebiet zu vernachlässigen und dafür auf definierten Übergabeflächen die zuvor berechneten Strömungs- und Parameter-Profile vorzugeben. Somit konnte die Rechenzeiten erneut optimiert werden.

Die Ergebnisse der Einzelbrennerstudien wurden mit Flammenbildern aus dem betrachteten Kessel verglichen und zeigten für beide Fälle sehr gute Übereinstimmungen. Im Anschluss an die Einzelbrenneruntersuchungen wurde eine Variantenrechnung mit verlängertem Zündschirmkragen untersucht, um die thermische Belastung des Kragens zu verringern. Die Ergebnisse zeigten, dass im Fall des Gasbetriebes durch eine Verlängerung des Zündschirmkragens um 70 mm die thermische Belastung des Zündschirmes deutlich reduziert werden konnte.

Anschließend wurde ein Berechnungsgitter des gesamten Kessels mit acht Brennern erzeugt, worin Teile des Brenners in der Simulation wieder vernachlässigt und durch Profile ersetzt wurden. Sowohl im Gas- als auch im Flüssigbrennstoffbetrieb wurde jeweils ein Teillastfall untersucht, bei dem zwei

der acht Brenner inaktiv waren. Die Auswertung der Simulation zeigte schlüssige Ergebnisse. In beiden Fällen zeigten die Simulationsergebnisse eine Schräglage der Wärmestromdichte an der Brennkammerwand, die durch die zwei inaktiven Brenner verursacht wurde. Abschließend wurden die Ergebnisse der Gesamtkesselsimulationen mit Messwerten verglichen.

Abstract

Title: Numerical simulation of a gas or liquid fired industrial boiler

Author: Raphael NEUBAUER

1st keyword: CFD Simulation
2nd keyword: Combustion
3rd keyword: Modelling

In this master thesis, a gas or liquid fired boiler was modeled and analyzed using computational fluid dynamics (CFD). The aim of this work was to find suitable CFD-models for industrial boiler applications. To allow the application of these models in industrial corporations, a moderate computational effort was necessary. Therefore computational effort was an eligibility criterion in the selection of the different models.

In the first part of the thesis a comprehensive literature research about the available models was conducted. According to the assumption of the Reynolds-Averaged-Navier-Stokes (RANS) turbulence approach the following phenomena were taken into account: turbulence, combustion, influence of turbulence on the combustion, reaction mechanism, radiation and atomization. For each phenomenon, the model with the most balanced ratio between accuracy and low computational effort was selected from the literature.

Following this, a 2D-simulation of the outflow from the gas lance was carried out. The results showed that the gas outflow from the gas lance can be modelled without considering the flow inside the gas lance. Taking this into account, a computational grid of the burner and a simplified modelled combustion chamber were created. The boundary conditions of the wall were set in a way that it imitates the surrounding of hot flue gas. This was done in order to analyze the flame in the boiler through a single burner simulation. In the course of this, the effects of temperature as well as the emissivity of the combustion chamber wall were studied in a separate parameter study. Furthermore, the results of the flow field in the primary and secondary air duct showed almost no dependency on different operating points. In further simulations, pre-calculated profiles of all parameters were set as boundary condition at a specified operation surface. In doing so, the computational time could be re-optimized.

The results of the single burner simulations were validated with pictures of a flame in the boiler. The visual comparison showed very good agreements in both, gas and liquid fuel fired cases. Finally, a simulation with an extended shroud of the swirl stabilizer was done. In the gas fired single burner study the thermal load of the shroud could be reduced. The extended shroud showed almost no effect in the liquid fired single burner.

In the final part of the thesis, a computational grid of the boiler was created, in which parts of each burner were replaced by profiles in the simulation. Thus, the computational effort could be reduced. A partial load case was investigated in both cases, in which burner 3 and 7 were not activated. The simulations showed coherent results. An imbalance of the thermal wall heat flux was detected in both cases, which was caused by the two inactive burners. Finally, the results from the boiler simulations were validated with measurement data.

Danksagung

An erster Stelle möchte ich mich bei meinen beiden Betreuern Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.-techn. Christoph Hochenauer und Dipl.-Ing. Dr.-techn. Lorenz Griendl für die hervorragende Zusammenarbeit und für die vielfältigen Hilfestellungen bedanken. Ihnen ist es zu verdanken, dass ich diese Arbeit in dem gesteckten Zeitraum erstellen konnte. Auch für die zahlreich geführten fachlichen Diskussionen bin ich ihnen sehr dankbar, denn durch sie konnte ich mein Wissen enorm erweitern. An zweiter Stelle, aber nicht weniger bedeutend, möchte ich mich bei Dipl.-Ing. Dr.-techn. Thomas Gurker für die exzellente Zusammenarbeit betreffend CFD-Simulationen bedanken. Seine Ratschläge und die Erkenntnisse aus unzähligen Diskussionen mit ihm sind maßgeblich für diese Arbeit. Darüber hinaus möchte ich mich bei Dipl.-Ing. Dr.-techn. Ulrich Hohenwarter und Dipl.-Ing. Dr.-techn. Günter Gronald bedanken. Sie sind einerseits dafür verantwortlich, dass diese Arbeit überhaupt erst entstehen konnte und andererseits stellten sie die dafür notwendigen Ressourcen, wie Rechenkapazitäten, Lizenzen etc. zur Verfügung. Weiters möchte ich Dipl.-Ing. Martin Koller, sowie Mag. Helga Fröhlich, Elisabeth Schönbacher, und Stefanie Schönbacher für ihren Beitrag an dieser Arbeit danken.

Darüber hinaus möchte ich mich bei meinen Eltern, Geschwistern, Freunden und KollegInnen bedanken. Um es im Kontext meiner Arbeit auszudrücken: Sie waren für die grandiosen Randbedingungen, die nötigen Störgrößen und die unverzichtbare Rechenpower verantwortlich, um mein Studium zur ausgezeichneten Konvergenz zu bringen.

Graz, Juli 2014

Raphael Neubauer

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Stand der Technik	2
2.1	Literaturstudie zu einer nicht-vorgemischten, turbulenten Gasflamme	2
2.2	Literaturstudie zu einem Kessel im Flüssigbrennstoffbetrieb	8
2.3	Folgerung aus der Literaturstudie	10
3	Theoretische Grundlagen	11
3.1	Grundlagen des Verbrennungsprozesses	11
3.1.1	Einteilung der Brennstoffe	12
3.1.2	Grundlegende Flammentypen	14
3.2	Grundlagen der chemischen Thermodynamik	16
3.2.1	Reaktionsgleichgewicht in der Gasphase	19
3.2.2	Reaktionskinetik	20
3.2.3	Reaktionsmechanismen	22
3.3	Grundlagen der numerischen Simulation	22
3.3.1	Diskretisierung und Diskretisierungsmethoden	23
3.3.2	Berechnungsgitter	23
3.3.2.1	Gittertypen	24
3.3.2.2	Form und Genauigkeit	25
3.3.2.3	Gitterskalierung	25
3.3.2.4	Netzgenerierung:	25
3.3.2.5	Netzqualität	26
3.4	Mathematische Modellierung einer turbulenten Strömung	27
3.4.1	Erhaltungsgleichungen	27
3.4.2	Weitere Gleichungen	28
3.4.3	Modellierung der Turbulenz mit Hilfe von DNS, LES und RANS	28
3.4.3.1	k- ϵ Modelle	30
3.4.3.2	Reynolds-Spannungs-Modelle (RSM)	31
4	Simulation des Verbrennungsprozesses	32
4.1	Mischungsbruch	32
4.2	Flamelet Modell	34
4.3	PDF-Ansatz (Probability Density Function)	35
4.4	Mehrphasenströmung	36
4.4.1	Disperse Systeme	37
4.4.2	Startbedingung der dispersen Phase	38
4.4.3	Startgeschwindigkeit und Richtung	38

4.4.4	<i>Tropfengrößenverteilung</i>	39
4.4.5	<i>Einfluss der kontinuierlichen Phase auf die disperse Phase und umgekehrt</i>	39
4.5	Berücksichtigung der Strahlung	40
4.5.1	<i>Optische Dicke</i>	40
4.5.2	<i>Absorptionskoeffizient</i>	40
4.5.3	<i>P1-Strahlungsmodell</i>	41
5	Einzelbrennersimulation	42
5.1	Simulierter Gas/Öl-Kombibrenner	43
5.2	Einzelbrenneruntersuchungen	45
5.2.1	<i>2D-Simulation des Gaslanzenaustrittes</i>	45
5.2.2	<i>Geometrie des Einzelbrenners und deren Randbedingung</i>	53
5.2.3	<i>Strömungsprofil im Primär- und Sekundärluftkanal</i>	56
5.2.4	<i>Einfluss der Wandtemperatur und des Emissionsgrades der Wand</i>	60
5.2.5	<i>Einzelbrenner im Gasbetrieb</i>	65
5.2.5.1	Analyse der Flamme	65
5.2.5.2	Einfluss der Kragenlänge des Zündschirmes	72
5.2.5.3	Zusammenfassung der Einzelbrennersimulation im Gasbetrieb	76
5.2.6	<i>Einzelbrenner im Flüssigbrennstoffbetrieb</i>	77
5.2.6.1	Analyse der Flamme	79
5.2.6.2	Einfluss der Kragenlänge des Zündschirmes	85
5.2.6.3	Zusammenfassung der Einzelbrennersimulation im Flüssigbrennstoffbetrieb	88
6	Gesamtkesselsimulation	89
6.1	Kessel im Gasbetrieb	90
6.2	Kessel im Flüssigbrennstoffbetrieb	96
6.3	Zusammenfassung der Kesselsimulationen	101
7	Zusammenfassung und Ausblick	105
8	Abbildungsverzeichnis	107
9	Tabellenverzeichnis	111
10	Literaturverzeichnis	112
11	Anhang	116

Abkürzungsverzeichnis

Lateinische Buchstaben

A	m^2	Fläche
A	-	Präexponentieller Faktor
A_i	-	Stoffkomponente i
a	$1/m$	Absorptionskoeffizient
b	-	Gewichtungsfaktor
C	-	Modellkonstante
c	mol/m^3	Konzentration
c	m/s	Schallgeschwindigkeit
c_p	$J/kg\ K$	Spezifische Wärmekapazität bei $p = konst.$
c_v	$J/kg\ K$	Spezifische Wärmekapazität bei $v = konst.$
D	m^2/s	Diffusionskoeffizient
d	m	Durchmesser
E	-	optische Dicke
e	J/m^3	Spezifische Volumenenergie
E_A	J/mol	Aktivierungsenergie
f	-	Mischungsbruch
f_k	-	Korrekturfaktor
$f(i)$	-	Funktion von i
G	J	Freie Enthalpie
g	m/s^2	Erdbeschleunigung
$\Delta_R g^0$	J/mol	molare Standardbildungsenthalpie
J	variabel	Molekularer Fluss
k	variabel	Reaktionsgeschwindigkeitskonstante
k	m^2/s^2	Turbulente kinetische Energie
K_c	-	Chemische Gleichgewichtskonstante
K_p	-	Chemische Gleichgewichtskonstante
L	m	Länge
\dot{m}	kg/s	Massenstrom
m	kg	Masse
Ma	-	Machzahl
N	mol	Stoffmenge
\dot{N}	mol/s	Stoffmengentransportstrom

\dot{n}	mol/m ² s	Stoffmengentransportstromdichte
n	-	Menge (Anzahl)
n	-	Rosin-Rammler Verteilungsparameter
p	Pa	Druck
p_i	Pa	Partial Druck
$p(f)$	-	Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des Mischungsbruchs
\dot{q}	W/m ²	Wärmestromdichte
Q_{EAS}	-	Equi Angle Skew
r	variabel	Reaktionsgeschwindigkeit
Re	-	Reynolds-Zahl
R_m	8,314472 J/mol K	Molare Gaskonstante
S	J/K	Entropie
S	variabel	allgemeiner Quellterm
s	m	Wegstrecke
s_{gl}	m	gleichwertige Schichtdicke
T	K	Temperatur
t	s	Zeit
U	J	Innere Energie
u	J/kg	Spezifische innere Energie
V	m ³	Volumen
v	m/s	Geschwindigkeit
w	kg/kg	Massenbruch
x	mol/mol	Molenbruch
x	variabel	Zufallsvariable
Z	kg/kg	Elementarmassenbruch

Griechische Buchstaben

α	-	Absorptionsgrad
$\alpha, \beta, \chi, \delta$	-	Reaktionsordnung der Komponente A,B,C,D
δ	-	Einheitstensor
ε	m ² /s ³	Energiedissipationsrate
ε	-	Emissionsgrad
ϕ	variabel	Allgemeine Variable
Γ	m ² /s	Molekularer Austauschkoefizient

η	Pa s	Dynamische Viskosität
κ	-	Isentropenexponent
λ	W/m K	Wärmeleitzahl
μ	kJ/kmol	Chemisches Potential
μ	-	Erwartungswert
ν	-	Stöchiometrischer Koeffizient
ν	m ² /s	Kinematische Viskosität
Θ	°	Öffnungswinkel
ρ	kg/m ³	Dichte
ρ	-	Reflektionsgrad
σ_s	1/m	Streukoeffizient
τ	N/m ²	Spannungstensor
τ	-	Transmissionsgrad

Tiefgestellte Indizes

1,2,3 ...	Bezogen auf die 1., 2., 3. ... Komponente
f	Bezogen auf die chemische Hinreaktion
fuel	Bezogen auf Brennstoff
g	Bezogen auf die Gasphase
i	Bezogen auf die Komponente i
j	Bezogen auf die Komponente j
Kragen	Bezogen auf den Kragen des Zündschirmes
<i>KV</i>	Bezogen auf Kontrollvolumen
l	Bezogen auf die flüssige Phase
Luft	Bezogen auf die Luft
mix	Bezogen auf die Mischung
n	Bezogen auf die letzte Komponente n der Gesamten Anzahl/Menge
oxid	Bezogen auf das Oxidationsmittel
prim	Bezogen auf die Primärluft
r	Bezogen auf die chemische Rückreaktion
sek	Bezogen auf die Sekundärluft
t	turbulent
total	Gesamte Anzahl/Menge
Wand	Bezogen auf die Brennkammerwand

ϕ	Bezogen auf die Variable ϕ
λ	Bezogen auf die Wellenlänge

Operatoren

∇	Nabla Operator
[A]	Konzentration der Spezies A
d	Totales Differenzial
∂	Partielles Differential
Π	Produkt
Σ	Summe
T	Transponiert

Abkürzungen

CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direkte Numerische Simulation
DO	Discrete Ordinates
DTR	Discrete Transfer Radiation
EDM	Eddy Dissipation Model
EDC	Eddy Dissipation Concept
FV	Finite Volumen
HFO	Heavy Fuel Oil
LES	Large Eddy Simulation
KV	Kontrollvolumen
PDF	Probability Density Function
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
RNG	Re-Normalisation Group
RSM	Reynolds Stress Model
WSGGM	Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model

1 Einleitung

Der nachhaltige Umgang mit den vorhandenen Energieressourcen ist bereits seit längerer Zeit in unserer Gesellschaft ein viel diskutiertes Thema. Neben dem Ausbau des erneuerbaren Energiesektors durch z. B. Wind-, Wasser- und Solarkraftanlagen ist auch die Effizienzsteigerung bestehender Technologien ein zentraler Punkt in dieser Diskussion. Hier beginnt der öffentliche Diskurs meist erst ab der Nutzung der Endenergie und dabei wird die Umwandlungskette von der Primärenergie über die Sekundärenergie zur Endenergie unterschlagen. Für die Steigerung der effektiven Energienutzung müssen jedoch alle Stationen in der Umwandlungskette zwischen Primär- und Endenergie berücksichtigt und optimiert werden, denn nur so kann eine optimale Nutzung der Energie gewährleistet werden.

Für die Optimierung und Erforschung diverser strömungstechnischer Problemen wird bereits seit einigen Jahrzehnten die numerische Strömungssimulation, auch CFD (Computational Fluid Dynamics) Simulation genannt, eingesetzt. Besonders durch die rapide steigende Rechnerleistung in den letzten Jahren und Jahrzehnten hat die CFD-Simulation einen immer höheren Stellenwert in der Forschung und Entwicklung erreicht. Die Vorteile liegen dabei mit geringem finanziellen Aufwand, Zeitersparnis und leicht realisierbaren Parameterstudien klar auf der Hand. Trotz alledem werden experimentelle Versuche jedoch auch in Zukunft noch eine wichtige Rolle spielen.

Auch für die Optimierung von Verbrennungsprozessen in Bezug auf Wirkungsgrad und auch CO₂-Emissionen sowie Schadstoffreduktion wird bereits seit einigen Jahren die numerische Strömungssimulation eingesetzt. Aufbauend auf Erhaltungsgleichungen werden über verschiedene mathematische Modelle das Verhaltensmuster und die Eigenschaften des betrachteten Systems so gut wie möglich bzw. wie nötig abgebildet. Die Anzahl an Modellen für die Modellierung von Strahlungswärmeaustausch, Turbulenz der Strömung, chemische Reaktionen und Stoffaustausch etc. ist in den letzten Jahrzehnten deutlich gestiegen. Mit den steigenden Kapazitäten der Rechner können immer umfangreichere Modelle für die Simulation eines Verbrennungsprozesses verwendet werden.

In dieser Masterarbeit wird die numerische Strömungssimulation als Werkzeug eingesetzt, um einen bestehenden Dampferzeuger im Gas- und Flüssigbrennstoffbetrieb zu untersuchen und zu optimieren. Ziel dieser Arbeit ist die Modellierung des Verbrennungskessels mit einfachen Modellen, die es ermöglichen den realen Zustand des Verbrennungskessels mit geringem Rechenaufwand abzubilden. Dies ist ein wichtiger Punkt für die Anwendung der CFD-Optimierung im industriellen Maßstab, denn nur so können Energieeffizienz und Schadstoffreduktion auch dort erreicht werden, wo sie entwickelt, geplant und gebaut werden. Weiters werden die Modelle und der Einfluss einiger physikalischer Parameter untersucht, um bereits aus den Ergebnissen einer Einzelbrenneruntersuchung Rückschlüsse auf den Verbrennungsprozess in einem Kessel zu ziehen. Dabei werden die Ergebnisse mittels Bildern validiert.

Die Arbeit ist in drei Bereiche unterteilt. Im ersten Teil wird der Stand der Technik für die Modellierung eines mit Gas bzw. flüssigem Brennstoff befeuerten Verbrennungsprozesses erhoben. Im zweiten Teil werden die theoretischen Grundlagen kurz erläutert. Im dritten Teil werden die Simulationsergebnisse gezeigt und analysiert, wobei sowohl ein Einzelbrenner als auch der gesamte Kessel im Gas- und Flüssigbrennstoff untersucht wird.

2 Stand der Technik

Die numerische Simulation des Verbrennungsprozesses wurde bereits eingehend untersucht. Durch die intensive Forschung in diesem Bereich konnte viel Wissen und Verständnis über den turbulenten Verbrennungsprozess erlangt, aber einige fundamentale Fragen erst zum Teil beantwortet werden (Bilger et al. 2005).

Um einen Verbrennungsprozess simulieren zu können, bedarf es der Modellierung der verschiedenen Vorgänge in diesem Prozess. In diesem Zusammenhang sind unter anderem folgende Vorgänge zu simulieren (Epple et al. 2009):

- Bilanzgleichungen für die Modellierung der Strömung mit Hilfe von
 - o Turbulenzmodellen
 - o Zerstäubungsmodellen
- Transportgleichungen für die Modellierung von
 - o Strahlung
 - o Stoff- und Phasenumwandlungen (Verbrennungsprozess)

In den letzten Jahren und Jahrzehnten sind viele unterschiedliche Modelle zu den oben erwähnten Phänomenen entwickelt und validiert worden. Ein nicht zu unterschätzender Schritt in der Simulation eines Verbrennungsprozesses ist die Modellierung des Reaktionsmechanismus. Hier stehen in der Literatur für die Verbrennung von gasförmigen kurzen Kohlenwasserstoffen viele Reaktionsmodelle zur Verfügung. Für die Verbrennung von flüssigen, langkettigen Kohlenwasserstoffen hingegen gibt es nur einige wenige Modelle. Ziel dieser Literaturrecherche ist die Auswahl geeigneter Modelle und Reaktionsmechanismen für die Simulation eines Verbrennungsprozesses von sowohl gasförmigem als auch flüssigem Brennstoff, wobei folgende Auswahlkriterien berücksichtigt wurden:

- für industrielle Zwecke akzeptabler Rechenaufwand
- Modell bereits in kommerziellen Simulationsprogrammen wie z. B. FLUENT implementiert
- Anwendbarkeit für große Berechnungsgebiete (Gesamtkesselsimulationen)

In der Kraftwerkstechnik kommt aus sicherheitstechnischen Gründen meist eine turbulente, nicht-vorgemischte Flamme zum Einsatz. Dies gilt auch für die in dieser Arbeit untersuchte Anlage.

Dieses Kapitel gibt im ersten Teil einen Überblick über aktuelle Arbeiten zur Simulation einer nicht-vorgemischten, turbulenten Gasflamme. Im zweiten Teil wird auf die Modellierung von Verbrennungsprozessen mit flüssigem Brennstoff und im Speziellen auf die Anwendung im Bereich industrieller Dampferzeuger eingegangen.

2.1 Literaturstudie zu einer nicht-vorgemischten, turbulenten Gasflamme

Die Verbrennung von gasförmigem Brennstoff, im Speziellen CH_4 und H_2 , ist bereits in vielen Arbeiten mit Hilfe von CFD-Simulationen untersucht worden. Das Hauptaugenmerk der Untersuchungen liegt dabei in der Anwendung verschiedener Turbulenz-, Strahlungs- und Verbrennungsmodelle und deren Validierung.

Aus der Literaturstudie ist zu erkennen, dass der Schwerpunkt der Simulationen im kleinen Maßstab liegt, da sich weniger als $\frac{1}{3}$ der Autoren der berücksichtigten Literatur mit der Untersuchung der Verbrennung im industriellen Maßstab beschäftigen. Diese Tatsache ist unter anderem ausschlaggebend für die CFD-Untersuchungen in dieser Arbeit.

BILGER zeigt die Entwicklung der Modellierung und Berechnung von turbulenten vorgemischten und nicht-vorgemischten Flammen. Er beschreibt einzelne Modelle und zeigt Vor- und Nachteile auf. Dabei geht er chronologisch vor und nennt auch Gründe für die Entwicklung neuer Modelle. In seiner Zusammenfassung weist er darauf hin, dass zwar das Verständnis für den turbulenten Verbrennungsprozess seit Beginn der Forschungen gestiegen ist, aber die fundamentalen Fragen erst zum Teil beantwortet sind (Bilger et al. 2005). Im Gegensatz zu BILGER gibt VEYNANTE einen mathematischen Überblick über die Simulation von turbulenten Flammen. Die gezeigten Modelle werden dabei mathematisch hergeleitet und erläutert. Er verweist darauf, dass die Einflüsse der Flamme auf die Strömung bis jetzt meist vernachlässigt wurden. Weiters hält er die Reynolds-Averaged-Navier-Stokes Modelle (RANS-Modell) in den nächsten Jahren zwar noch für bedeutend, sieht aber die LES (Large Eddy Simulation) als eine sehr zukunftssträchtige Methode (Veynante & Vervisch 2002).

Für die Modellierung der Turbulenz der Strömung ist neben den $k-\varepsilon$ Modellen auch das Reynolds-Stress-Modell (RSM) sehr verbreitet. Zum Beispiel untersuchte BROUKAL mit seiner Arbeitsgruppe den Wandwärmefluss einer wirbelstabilisierten, nicht-vorgemischten Flamme (Swirl-stabilised non-premixed flame) in einem Kessel. Es wurden zwei Lastfälle (Fall 1: 750kW; Fall 2: 1120kW) experimentell und numerisch untersucht und die Ergebnisse verglichen. Bei der Simulation wurde zur Beschreibung des Strömungsfeldes unsteady-RANS (U-RANS) verwendet. In ihrer Arbeit verglichen sie die 4 Turbulenzmodelle $k-\varepsilon$ Realizable, $k-\varepsilon$ Re-Normalisation Group (RNG), $k-\varepsilon$ shear stress transport (SST) und RSM. Die Interaktion zwischen Turbulenz und chemischer Reaktion wurde mit Hilfe des Eddy Dissipation Modell (EDM) mit einem Ein-Schrittmechanismus abgebildet. Der Vergleich zeigt, dass für den Fall 1 alle vier Turbulenzmodelle eine gute Übereinstimmung des lokalen Wandwärmeflusses mit den Experimenten liefern. Das RSM ergab dabei die beste und das $k-\varepsilon$ Realizable Modell die schlechteste Übereinstimmung. Im Fall 2 konnten nicht so gute Übereinstimmungen der Simulation mit den Experimenten erzielt werden. Dabei war kein Modell besser als die anderen. (Broukal et al. 2012)

Auch GERMAN und MAHMUD verwendeten das RSM und das Standard $k-\varepsilon$ Modell. Sie beschäftigten sich einerseits mit dem Einfluss der Verbrennung auf das Strömungsfeld und andererseits mit den Flammeneigenschaften. Dabei verglichen sie die Simulationsergebnisse mit Experimenten. Untersucht wurde ein Industrie-Wirbelbrenner mit zylindrischem Prallkörper bei 400kW und Koksofen-Gas als Brennstoff. Die Interaktion zwischen Turbulenz und chemischer Reaktion wurde mit einem adaptierten Eddy-Dissipation Combustion Modell abgebildet. Bei der Untersuchung des isothermen Strömungsfeldes (ohne Verbrennung) konnte nur das RSM gute Ergebnisse im Vergleich zu den Experimenten liefern. Bei der Simulation der Verbrennung unterschätzten beide Modelle die Breite der internen Rezirkulationszone. Für die Temperaturvorhersage ergaben beide Modelle eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten. (German & Mahmud 2005)

AMANI und NOBARI simulierten eine nicht-vorgemischte, turbulente Strahlflamme (Sandia Flame D) unter Verwendung des Standard $k-\varepsilon$ Modells für die Turbulenz der Strömung und ein Transport-PDF

Modell für die Abbildung der molekularen Mischung. Diese Ergebnisse verglichen sie sowohl mit einer RANS-Simulation, als auch mit experimentellen Daten. Die Vergleiche zeigten starke Unterschiede zwischen der PDF- und der RANS-Simulation, wobei die Abweichung der mit RANS simulierten Flammentemperatur zu den Experimenten deutlich größer war. (Amani & Nobari 2010)

MALLAUN untersuchte in seiner Masterarbeit die Verbrennung von Gichtgas in einem industriellen Kessel. In seinen CFD-Simulationen (FLUENT) modellierte er die Strömung mit Hilfe der RANS-Gleichungen. Für die Turbulenz verwendete er das Realizable $k-\varepsilon$ und das RSM, wobei die Ergebnisse mit dem RSM plausibler waren. Für die Strahlung verwendete er das Discrete Ordinates- (DO) bzw. das P1-Modell. In seiner Arbeit wurden einige Verbrennungsmodelle für den Abbrand von CH_4 untersucht. Die Ergebnisse seiner Parameter- und Modelluntersuchungen zeigen, dass das RSM und das DO-Modell bessere Ergebnisse liefern.

In den genannten Arbeiten sowie in der Literatur (ANSYS 2011) wird gezeigt, dass die Modellierung von turbulenten, meist stark verdrallten reaktiven Strömungen mit Hilfe des RSM bessere Ergebnisse liefert als die $k-\varepsilon$ Modelle.

Bei der Modellierung der Strahlung kommen hauptsächlich das DO- (keine Einschränkung bei der optischen Dichte (Martens 2013)) und das P1 Modell (für optische Dicke > 1 (Martens 2013)) zum Einsatz.

GUIHUA und seine Arbeitsgruppe verwendeten in ihrer Simulation das DO-Modell für die Strahlung. Sie beschäftigten sich in ihrer Arbeit mit einer 100 Kilotonnen/a SL-II Ethylen Crackanlage. Dabei wurden Strömung, Verbrennung, Strahlungswärmeaustausch und thermische Crackreaktionen untersucht. Die verwendeten Modelle sind: RANS und Standard $k-\varepsilon$ Modell für die turbulente Strömung und Finite-Rate/Eddy-Dissipation Modell (EDM) als Verbrennungsmodell (das thermische Crack-Modell wird in der Arbeit auch erläutert). Der Vergleich mit industriellen Daten zeigte eine gute Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen. (Guihua et al. 2011)

Auch MALLAUN verwendete in seiner Masterarbeit das DO-Modell und konnte bei der Simulation eines Gichtgasbrenners gute Ergebnisse erzielen. (Mallaun 2013)

HASSAN simulierte in FLUENT 6.3 eine Steam-Cracking-Anlage (turbulente, nicht-vorgemischte Methan-Wasserstoffflamme) und verwendete für die Modellierung der Strahlung das DO-Modell. Dabei verwendete er fünf verschiedene Verbrennungsmodelle: EDC-GRI 2.11, EDC-Skeletal, PDF-Equilibrium, SLF-GRI 2.11 (Steady Laminar FLAMELET-Modell) und USLF-GRI 2.11 (Unsteady Laminar FLAMELET-Modell). Für die Simulation der Strömung kamen das RANS und das Realizable $k-\varepsilon$ Modell zum Einsatz. Die Simulationen mit dem EDC-GRI 2.11, Realizable $k-\varepsilon$ Modell und DO-Modell lieferten gute Ergebnisse. (Hassan et al. 2013)

Arbeiten, in denen das P1-Modell verwendet wurde sind z. B. die bereits erwähnte Masterarbeit von MALLAUN, aber auch die Gruppe um YADAV verwendete das P1-Modell. Sie veröffentlichten in ihrer Arbeit die Simulationsergebnisse zweier nicht-vorgemischter, turbulenter, pilotstabilisierter Kohlenwasserstoff-Flammen (Sandia Flame D und Delft Flame III). Dabei verwendeten sie die Presumed Shape Multi-Environment Eulerian PDF Transport Method (MEPDF) für die Modellierung der Interaktion zwischen Turbulenz und Chemie. Der Strahlungswärmeaustausch wurde mit dem Weighted Sum of Gray Gases (WSGG) Modell und dem P1-Modell abgebildet. Für die Beschreibung

der Turbulenz in der Strömung kamen für die Sandia Flame D das Standard $k-\epsilon$ Modell und für die Delft Flame III das RSM zum Einsatz. Ihre MEPDF-Simulationsergebnisse zeigten durchwegs gute Übereinstimmung mit einer Lagrangian Solution Method (LPDF). Auch der Vergleich mit einem FLAMELET-Modell (Unsteady Laminar Flamelet Model (ULFM)) ergab eine gute Übereinstimmung. Lediglich in der NO-Vorhersage ergab ULFM einen deutlich höheren Wert. (Yadav et al. 2013)

ILBAS simulierte in seiner Arbeit eine turbulente, nicht-vorgemischte Wasserstoff- bzw. Kohlenwasserstoff-Flamme mit den zwei Strahlungsmodellen P1, und Discrete Transfer Radiation (DTR) Modell. Die Ergebnisse der einzelnen Modelle wurden untereinander, mit Ergebnissen ohne Strahlungsmodell, sowie mit Experimenten verglichen. Der Einfluss der Brennstoffzusammensetzung wurde ebenfalls untersucht (reines CH_4 , reines H_2 und deren Mischung). Die Turbulenz wurde mit Hilfe des Standard $k-\epsilon$ Modells simuliert. Die Verbrennungsreaktion wurde mit 7 Spezies und einem Dreischrittmechanismus abgebildet. Der Vergleich zeigte, dass beide Strahlungsmodelle etwa gleich gut mit den Experimenten übereinstimmten. Die Ergebnisse ohne Strahlungsmodell wichen deutlich von den experimentellen Daten ab, wobei der Unterschied bei der reinen H_2 -Flamme geringer war. (Ilbas 2005)

Im Vergleich zum DO-Modell zeigen Untersuchungen mit dem P1-Modell ebenfalls gute Ergebnisse. Der Unterschied zum DO-Modell liegt in einer leichten Überschätzung der Strahlung von dem P1-Modell. Dies zeigte unter anderem MALLAUN (Mallaun 2013) in seiner Arbeit und auch in der Literatur (ANSYS 2011) wird darauf hingewiesen.

Ein Vorteil des P1-Modells gegenüber dem DO- und DTR-Modell liegt im geringeren Rechenaufwand. MESSIG validierte in einer Arbeitsgruppe vier weitere Strahlungsmodelle, die nicht im Simulationsprogramm FLUENT implementiert sind. Dabei simulierten sie in OpenFOAM eine laminare, nicht-vorgemischte Methan-Flamme und verglichen die Ergebnisse der Simulation mit Simulations- und experimentellen Daten aus der Literatur. Für die molekulare Diffusion verwendeten sie vier verschiedene Modelle, unter anderem den Mixture-Averaged (MA) Diffusionsansatz. Ihre Ergebnisse und Schlussfolgerungen unterscheiden sich dabei in Abhängigkeit von den verwendeten Diffusionsansätzen. Für einheitliche Lewis-Zahlen ergaben dabei sowohl der Lagrange-Flamelet-, als auch der Unsteady Enthalpy Defect-Ansatz sehr gute Ergebnisse. (Messig et al. 2012)

Bei den Verbrennungsmodellen kann keine allgemeine Aussage getroffen werden, da jedes Modell in seinem Gültigkeitsbereich gute Ergebnisse liefern kann. Hier muss auf die gestellten Anforderungen genau eingegangen werden (z. B. ob die Bildung von NO_x von Interesse ist) und dementsprechend ein geeignetes Modell gewählt werden.

Ein Beispiel für ein weiterentwickeltes Verbrennungsmodell zeigt die Arbeit der Forschergruppe um MA. Sie verwendeten ein erweitertes FLAMELET-Modell (Erweiterung: Enthalpy Defect Konzept, um die Strahlungswärme-Übertragung abbilden zu können) für die Modellierung einer abgehobenen, freien, turbulenten, nicht-vorgemischten Erdgasflamme. Die Daten für die laminaren Flamelets wurden mit GRI 2.11 in CHEMKIN generiert. Die Ergebnisse aus der Simulation wurden mit Daten aus der Literatur verglichen. Sie konnten zeigen, dass die mit Hilfe des erweiterten FLAMELET-Modells berechneten Temperaturverteilungen für die Flamme im Bereich von 135-210 MW näher an den experimentellen Daten liegen, als mit dem Modell ohne Erweiterung. (Ma et al. 2002)

HASSAN verwendete, wie bereits erwähnt, fünf verschiedene Verbrennungsmodelle: EDC-GRI 2.11, EDC-Skeletal, PDF-Equilibrium, SLF-GRI 2.11 (Steady Laminar FLAMELET-Modell) und USLF-GRI 2.11 (Unsteady Laminar FLAMELET-Modell). Die Ergebnisse zeigen, dass die Übereinstimmung mit den Messdaten bei der Simulation mit EDC-GRI 2.11 die höchste ist. HASSANS Schlussfolgerung daraus ist, dass für Anlagen wie Steam-Cracking mit Rauchgasrezirkulation weder die Modelle mit „schneller Chemie“ noch die mit „langsamer Chemie“ die besten Ergebnisse liefern, sondern eine umfangreichere Modellierung wie z. B. mit dem EDC-GRI 2.11 vonnöten ist. (Hassan et al. 2013)

Um den Rechenaufwand zu minimieren, werden in vielen Arbeiten die Reaktionsmechanismen vereinfacht. FUKUMOTO und OGAMI präsentieren in ihrer Arbeit eine Dimensionsreduktions-Methode, basierend auf einer Methode für chemisches Gleichgewicht, kombiniert mit einer Reaktionsberechnung für turbulente, nicht-vorgemischte Flammen. Ziel dieser Technik ist die Rechenzeit für die Verbrennungssimulation zu reduzieren. Dabei werden die chemischen Spezies grob in zwei Gruppen unterteilt (Gruppe 1: Brennstoff und Zwischenprodukte; Gruppe 2: Rest der Spezies). Für Gruppe 2 werden die Massenbrüche über das chemische Gleichgewicht berechnet und in einer Datenbank gespeichert. Die Ergebnisse wurden mit Simulationsergebnissen von einer Eddy Dissipation Concept (EDC) Simulation und experimentellen Daten aus der Literatur verglichen. Sie zeigten, dass mit sinkender Anzahl an berücksichtigten Spezies zwar die Rechenzeit sank, die Übereinstimmung mit dem EDC-Modell und den Experimenten jedoch ebenfalls. (Fukumoto & Ogami 2012)

Auch REN und seine Arbeitsgruppe verwendeten einen vereinfachten Reaktionsmechanismus. Sie untersuchten in ihrer Arbeit eine durch einen Prallkörper stabilisierte, nicht-vorgemischte turbulente Kohlenwasserstoff-Flamme. Für die Verbrennungsmodellierung verwendeten sie das EDC- (Eddy Dissipation Concept) Modell und ein PDF-Modell. Für die Verbrennungschemie reduzierten sie den GRI 1.2 Mechanismus zu 13 Spezies und drei atomaren Elementen. Der In Situ Adaptive Tabulation (ISAT) Ansatz wurde verwendet, um die Berechnungszeit für die Reaktionsgleichungen durch Tabellieren von Information zu verkürzen. Ihre Simulationsergebnisse verglichen sie mit einem voll aufgelösten GRI 1.2 Mechanismus. Dabei zeigte sich eine gute Übereinstimmung mit der vereinfachten Abbildung der Reaktionsmechanismen. Weiters validierten sie die beiden Modelle PDF und EDC mit Experimenten, wobei das PDF-Modell bessere Vorhersagen lieferte. (Ren et al. 2013)

EMAMI und ESHGHINEJAD FARD verwendeten in ihrer Arbeit ein Steady Laminar-FLAMELET-Konzept für die Simulation einer turbulenten, nicht-vorgemischten $\text{CH}_4/\text{H}_2/\text{N}_2$ -Flamme. Die Datenbank für das laminare FLAMELET-Konzept wurde dabei aus den Ergebnissen einer Gegenstrom-Diffusionsflammen-Simulation entwickelt. Die Interaktion zwischen Turbulenz und chemischer Reaktion wurde mit einem Presumed-PDF-Modell berücksichtigt. Ein Artificial Neural Network (ANN) mit Mittelwert und Varianz des Mischungsbruchs und skalarer Dissipationsrate als Input-Parameter, und Mittelwert des Speziesmassenbruchs und Temperatur als Output-Parameter wurde für die Interpolation in der Datenbank eingesetzt. Sie konnten zeigen, dass die Simulation mit ANN und FLAMELET-Konzept um den Faktor 25 schneller war als die direkte Integration (DI) im Strömungs-Solver-Code. Es gab aber auch diverse Abweichungen bei der Übereinstimmung mit den experimentellen Daten, die sie auf z. B. das $k-\varepsilon$ Modell oder auf die Annahme Lewis-Zahl $Le \neq 1$ zurückführten. (Emami & Eshghinejad Fard 2012)

XUAN und BLANQUART untersuchten das Zusammenspiel verschiedener Spezies, wie polyzyklische, aromatische Kohlenwasserstoffe (poly cyclic aromatic hydrocarbons (PAH)) und der Turbulenz in einer nicht-vorgemischten Flamme. Dabei verwendeten sie ein Unsteady FLAMELET-Konzept. Für die PAH entwickelten sie ein Relaxations-Modell und validierten es mit einer Unsteady FLAMELET-Konzept Simulation. Die Ergebnisse verglichen sie mit einer voll aufgelösten Chemie. Ihre Untersuchungen zeigten unter anderem, dass die Zeitskalen von Radikalen wie OH, H und Spezies wie CO, CO₂ und C₂H₂ so klein sind, dass eine transiente Berücksichtigung nicht nötig ist (Steady State FLAMELET-Modell). Die Zeitskalen für PAH hingegen sind deutlich größer und somit ist eine transiente Modellierung der Relaxations-Zeit nötig. (Xuan & Blanquart 2013)

Im Gegensatz zu XUAN und BLANQUART (Xuan & Blanquart 2013) verwendeten WANG und sein Team ein Verbrennungsmodell, in dem Transportgleichungen für die einzelnen Spezies berücksichtigt wurden. Sie verwendeten in ihrer Studie eine Conditional Source Term Estimation (CSE) mit einer Trajectory Generated Low-Dimensional Manifold (TGLDM - für die Erstellung der Datenbank) als Schließungsterm für den Mittelwert des chemischen Reaktionsquellterms in einer gemittelten Transportgleichung. In einer Large Eddy Simulation (LES) wurden die zwei GRI-Mech. 3.0 und 2.11 verwendet, um die Temperatur und die Hauptspezies einer turbulenten, nicht-vorgemischten Flamme (Sandia D Flame) vorherzusagen. Die TGLDM-Datenbank wird dabei vor der Berechnung der reaktiven Strömung erstellt. In ihren Ergebnissen konnten sie zeigen, dass die Simulationsergebnisse mit CSE-TGLDM gute Übereinstimmungen mit Messdaten für alle Spezies liefern, für die die Transportgleichungen gelöst werden. Werden die Daten für Untergruppen aus der TGLDM-Tabelle direkt interpoliert, so kann damit die Rechenzeit deutlich reduziert werden. (Wang et al. 2007)

Auch AL-ABBAS und NASER beschäftigten sich mit der lokalen Konzentration von Reaktionsprodukten wie CO und CO₂ bei Anwendung von zwei verschiedenen Reaktionsmechanismen. Sie untersuchten dabei eine turbulente, nicht-vorgemischte Propan-Flamme in einem 100 kW-Kessel. Dabei wurde ein Mal Luft (Referenz-Flamme) und zwei Mal eine O₂/CO₂-Mischung (Oxyfuel) als Oxidator verwendet. In der Simulation (AVL-Fire, Version 2008.2) wurde die Turbulenz der Strömung mit Hilfe des Standard k-ε Modells abgebildet und für die Chemie wurde das Eddy-Breakup Modell (EBU) verwendet. Die Ergebnisse der Temperatur- und Speziesverteilung zeigten recht gute Übereinstimmungen mit den Experimenten, wobei die Abweichung des Ein-Schritt-Reaktionsmechanismus größer war als die des Vierschritt-Reaktionsmechanismus. (Al-Abbas & Naser 2012)

Die Forschergruppe um USMAN verglich ihre Simulationsergebnisse einer nicht-vorgemischten Methan-Flamme, bei der die Primärluft mit einem Wirbel aufgegeben wurde, mit experimentellen Daten. Die Turbulenz der Strömung wurde mit dem k-ε Realizable Modell und der Massentransport der chemischen Spezies mit dem Mischungsbruch (mean mixture fraction) Konzept abgebildet. Die Simulationsergebnisse für die axiale und tangential Geschwindigkeit zeigten nur geringfügige Abweichungen (im Bereich von 10%) gegenüber den experimentellen Daten. (Usman et al. 2012)

Den Mischungsvorgang einer nicht-vorgemischten, turbulenten Wasserstoff-Luft-Flamme untersuchte SENOUCI mit seiner Arbeitsgruppe. Dabei verglichen sie zwei Mikro-Mischungsmodelle (Interaction by Exchange with the Mean (IEM) Modell und Euclidean Minimum Spanning Tree (EMST) Modell). Die Interaktion zwischen Turbulenz und chemischer Reaktion wurde mit einem PDF-Transport-Ansatz beschrieben. In ihrem chemischen Modell berücksichtigten sie 11 Spezies und 23

Reaktionen. Beim Vergleich mit experimentellen Daten lieferte das rechenaufwendigere EMST-Modell eine bessere Übereinstimmung. (Senouci et al. 2013)

2.2 Literaturstudie zu einem Kessel im Flüssigbrennstoffbetrieb

Der Schwerpunkt der Verbrennungssimulation von flüssigen Brennstoffen mit Hilfe von CFD-Simulationen liegt vor allem in der Motorenentwicklung. Es gibt nur wenige Arbeiten im Bereich der CFD-Simulation von Verbrennungskesseln im industriellen Maßstab.

Eine inhaltliche Überschneidung mit der Verbrennung von flüssigen Brennstoffen in industriellen Dampferzeugern liefern die Untersuchungen bei der Simulation von schwerölgefeuerten Marinediesel-Motoren.

GARANIYA untersuchte in seiner Dissertation die Verbrennung von HFO (Heavy Fuel Oil) mit kontinuierlicher Thermodynamik. Die Verbrennung in der Gasphase für die leichter flüchtigen Komponenten wurde dabei mit einer Ein-Schrittreaktion abgebildet ($C_{12}H_{26} + 18.5 O_2 \rightarrow 12 CO_2 + 13 H_2O$). Weiters wurden zwei Modelle für den „liquid phase soot burnout“ und den „gas phase soot burnout“ verwendet. GARANIYA beschäftigte sich besonders mit den Vorgängen während der Verdampfung der Tropfen wie Pyrolyse, da in der Literatur keine Modelle verfügbar waren, die den Verbrennungsprozess akkurat beschreiben. Die Simulation wurde in StarCD durchgeführt und zeigt gute Ergebnisse beim Vergleich mit experimentellen Daten. (Garaniya 2009)

Auch CHRYSSAKIS beschäftigte sich mit diesem Thema und simulierte in seiner Arbeit die Verbrennung von Heavy Fuel Oil (HFO). Dabei verwendete er das Verbrennungsmodell von Kong et al. (Characteristic Time Combustion Model). Dieses Modell basiert auf der Annahme, dass sich der Brennstoff aus einer leichter flüchtigen Komponente („cutter“) und einer schwerer flüchtigen Komponente („residual“) zusammensetzt und dementsprechend der präexponentielle Faktor und die Aktivierungsenergie variiert werden. In seiner Arbeit definierte er den untersuchten Brennstoff mit 20% „cutter“ und 80% „residual“. Die Zerstäubung des HFOs wurde mit dem Enhanced -Taylor Analogy Breakup (E-TAB) Modell von TANNER und WEISSER (Tanner & Weisser 1998) modelliert. Er testete im ersten Teil seiner Arbeit ein physikalisches Modell für HFO in einer Verbrennungssimulation und verglich die Ergebnisse einerseits mit experimentellen Messungen im Fuel Ignition Analyzer (FIA) und andererseits mit Flammenbildern von einer Verbrennung bei konstantem Volumen. Die Übereinstimmung mit den Experimenten war in beiden Fällen zufriedenstellend. Im zweiten Teil seiner Arbeit simulierte er mit den gleichen Modellen die Verbrennung in einem großen Zweitackt-Schiffsdieselmotor (RT-flex58T-B Sulzer) bei Vollast. Die Simulationsergebnisse zeigten eine zu hohe Verbrennungsgeschwindigkeit. (Chryssakis et al. 2010)

Ein großes Forschungsgebiet liegt derzeit in der Modellierung der Zerstäubung von Flüssigkeiten. Für die industrielle Anwendung ist ein geringer Rechenaufwand der einzelnen Modelle von großer Bedeutung. Bei der Modellierung der Zerstäubung (vorwiegend eine zweiphasige kompressible Strömung) mit einfachen Modellen können derzeit meist keine adäquaten Tropfengrößenverteilungen berechnet werden. Dies zeigt die Arbeit von BROUKAL und HÁJEK. Sie simulierten in FLUENT die Verbrennung von Flüssigbrennstoff in einem 1 MW Industrie-Brenner mit einer „effervescent spray nozzle“. Der Schwerpunkt Ihrer Arbeit liegt in der Modellierung der Zerstäubung des untersuchten Flüssigbrennstoffes und deren Validierung mit experimentellen Daten.

Die primäre Zerstäubung wurde mit einem weiterentwickelten Modell von LUND (Lund et al. 1993) abgebildet, welches über die Vorgabe einer Initialgeschwindigkeit einen Sauterdurchmesser für die Tropfen berechnet. Dieser Sauterdurchmesser wurde mit einem vordefinierten Spraywinkel als Randbedingung für die sekundäre Zerstäubung mit dem Modell von REITZ (Reitz 1987) aufgegeben. Die Tropfenkollision wurde mit dem Algorithmus von O'ROURKE (O'Rourke 1981) modelliert. Die turbulente Strömung wurde mit Hilfe der RANS-Gleichungen und dem Realizable $k-\varepsilon$ Modell modelliert. Die Strahlung wurde mit dem DO-Modell und dem WSGGM abgebildet. Die disperse Phase (Brennstofftropfen) wurde über den Lagrange-Ansatz beschrieben, wobei eine Zeitschrittweite von 0.0001 s verwendet wurde. Ihre Ergebnisse zeigen, dass die Modellierung der Zerstäubung von flüssigem Brennstoff für industrielle Anwendungen keine guten Ergebnisse liefert. Ein Schwachpunkt zeigt sich dadurch, dass mit den verwendeten Modellen keine kleineren Tropfen als ca. 31 μm abgebildet werden können. Dies könnte unter anderem ein Grund dafür sein, dass nur eine schlechte Übereinstimmung zwischen Simulationsergebnissen und Experimenten bezüglich des örtlichen Wärmestroms vorliegt. (Broukal & Hájek 2011)

Ein Ausweg aus diesem Problem ist die Vorgabe einer definierten Tropfengrößenverteilung. Dieses Vorgehen verwendete unter anderem die Arbeitsgruppe um SAARIO. Sie simulierte in FLUENT die Verbrennung von HFO in einem Instituto Superior Técnico (IST) Großlaborofen mit Wirbelbrenner. Die Turbulenz der Strömung wurde mit Hilfe des Standard $k-\varepsilon$ Modells und des RSM modelliert. Das Verbrennungsmodell basierte auf dem Mischungsbruchansatz, sowie einer angenommenen PDF. Es wurden dabei 16 Spezies berücksichtigt. Die disperse Phase wurde mit dem Lagrange-Ansatz beschrieben, wobei die aus Experimenten gewonnene Tropfengrößenverteilung (Rosin-Rammler-Fit) vorgegeben wurde. In ihren Ergebnissen zeigten sie, dass das RSM die turbulente Strömung deutlich besser abbildet als das Standard $k-\varepsilon$ Modell. Lediglich im Brennernahbereich zeigten die berechneten Molenbrüche ebenfalls Abweichungen zu den Messergebnissen. (Saario et al. 2005)

HOCHENAUER widmete sich in seiner Dissertation der Entwicklung, Optimierung und Bewertung eines schwerölgefeuerten Dampferzeugers (130 MW Brennstoffleistung) mit gestufter Verbrennung. Die Strömung wurde dabei mit den RANS-Gleichungen und dem RSM für die Turbulenz abgebildet. Die disperse Phase der Öltröpfchen wurde über den Lagrange-Ansatz beschrieben, wobei die Tropfen über eine vordefinierte Tropfengrößenverteilung aufgegeben wurde. Die Startgeschwindigkeit der Tropfen wurde mit der in der Arbeit von CHAWLA (Chawla 1985) gezeigten Berechnungsmethode ermittelt und als Randbedingung aufgegeben. Die Verbrennung wurde über ein Flamlet-Modell mit PDF-Ansatz abgebildet und für den Abbrandmechanismus wurde der von BUI-PHAM und SESHADRI (Bui-Pham & Seshadri 1991) erläuterte Reaktionspfad für n-Heptan mit 18 Spezies herangezogen. Die Strahlung wurde mit dem P1 Modell berücksichtigt. In dieser Arbeit wurde eine Vielzahl an Variantenrechnungen durchgeführt, unter anderem bei Gitterauflösung, Turbulenzmodellen ($k-\varepsilon$ Modelle, RSM) und Strahlungsmodellen (DO-Modell, P1-Modell), wobei die Validierung zeigte, dass die Modelle RSM und P1 zu bevorzugen sind. Die Ergebnisse aus den Simulationen mit FLUENT wurden mit Messwerten und Berechnungen aus einem Auslegungsprogramm der Andritz AG validiert und zeigten eine sehr gute Übereinstimmung. (Hochenauer 2005)

Wie die beiden zuvor besprochenen Arbeiten bereits gezeigt haben, wird in der Kesselsimulation im Flüssigbrennstoffbetrieb sehr oft der Mischungsbruch-Ansatz für die Modellierung der Verbrennung gekoppelt mit einem PDF-Modell verwendet.

SCHNEIDER und BOGDAN verwendeten ebenfalls diesen Ansatz, allerdings mit der Erweiterung für einen dritten Stoffstrom. Sie untersuchten in Ihrer Arbeit den Einfluss der Co-Feuerung von HFO und Erdgas auf die Schadstoffbildung in einem Kraftwerk (420MW). Für die Turbulenz verwendeten Sie das Realizable $k-\epsilon$ Modell. Die Tropfen wurden über das „Particle-In-Cell-Model“ als diskrete Phase mit dem Lagrange-Ansatz beschrieben. Für die Strahlung wurde das DO-Modell mit dem WSGGM verwendet. Es wurden fünf verschiedene Brennerkonfigurationen untersucht bei denen einzelne Brenner nur mit Erdgas oder nur mit Schweröl befeuert wurden. Der Schwerpunkt der Arbeit liegt in der Untersuchung und Simulation der Schadstoffbildung. Die Simulationsergebnisse wurden nicht mit Messdaten verglichen. (Schneider & Bogdan 2007)

2.3 Folgerung aus der Literaturstudie

Die Literaturstudie zeigt, dass im Bereich der Modellierung einer nicht-vorgemischten turbulenten Gasflamme bereits zahlreiche Modelle zur Verfügung stehen. Bei der Auswahl der Modelle ist besonders auf den Gültigkeitsbereich zu achten, um die Vorteile der Modelle auch richtig einzusetzen. Für die Simulation einer nicht-vorgemischten, turbulenten Flamme eines flüssigen Brennstoffes im industriellen Maßstab ist die Modellauswahl deutlich kleiner. Besonders im Bereich der Reaktionsmechanismen und Modellierung der Zerstäubung mit einfachen Modellen ist die Anzahl an geeigneten Modellen sehr klein.

Aus den Erkenntnissen der betrachteten Forschungsarbeiten aus Kapitel 2.1 und 2.2 wurden Modelle für die im Zuge dieser Arbeit erfolgten Untersuchungen ausgewählt. Bei der Wahl der Modelle wurden die in Kapitel 1 genannten Auswahlkriterien berücksichtigt. Die gewählten Modelle für die Simulation eines Verbrennungsprozesses mit gasförmigem und flüssigem Brennstoff sind in Tabelle 1 aufgelistet.

Tabelle 1: Gewählte Modelle zur Simulation der Turbulenz, Strahlung und Verbrennung für flüssigen und gasförmigen Brennstoff.

Brennstoff	Gas	Flüssigbrennstoff
Turbulenzmodell	RSM	RSM
Strahlungsmodell	P1 bzw. DO	P1 bzw. DO
Verbrennungsmodell	Mischungsbruch mit PDF-Ansatz	Mischungsbruch mit PDF-Ansatz
Reaktionsmodell	CH ₄ -Skeletal (Yang & Pope 1998)	n-Heptan (Bui-Pham & Seshadri 1991)
Zerstäubungsmodell	-	Aufgabe einer Tropfengrößenverteilung

Die Wahl des P1-Modelles ist auf den geringeren Rechenaufwand und die guten Ergebnisse in den Arbeiten (Hochenauer 2005), (Mallaun 2013) und (Ilbas 2005) für diese Anwendungen (optische Dicke > 1) zurückzuführen. Im Fall der Simulation eines gesamten Kessel, wurde auf das DO-Modell zurückgegriffen, da es etwas bessere Ergebnisse liefert als das P1-Modell.

3 Theoretische Grundlagen

3.1 Grundlagen des Verbrennungsprozesses

Verbrennung ist die schnelle, selbsterhaltende Oxidation von Brennstoffen unter Abgabe von Licht und Wärme. Der Bereich, in dem hauptsächlich die chemische Umsetzung (Oxidation) erfolgt, wird im Allgemeinen als Flamme bezeichnet. (Joos 2006)

Die technische Nutzung der Verbrennung dient meist der Bereitstellung von Wärme. Es existiert dabei eine große Anzahl an technischen Umsetzungen, wie Verbrennungsmotoren, Gasturbinen oder Großfeuerungsanlagen.

Die theoretische Beschreibung des Verbrennungsprozesses ist durch die große Anzahl an oft gleichzeitig stattfindenden Vorgängen sehr komplex (Joos 2006). Dies soll anhand von Abbildung 1 veranschaulicht werden.

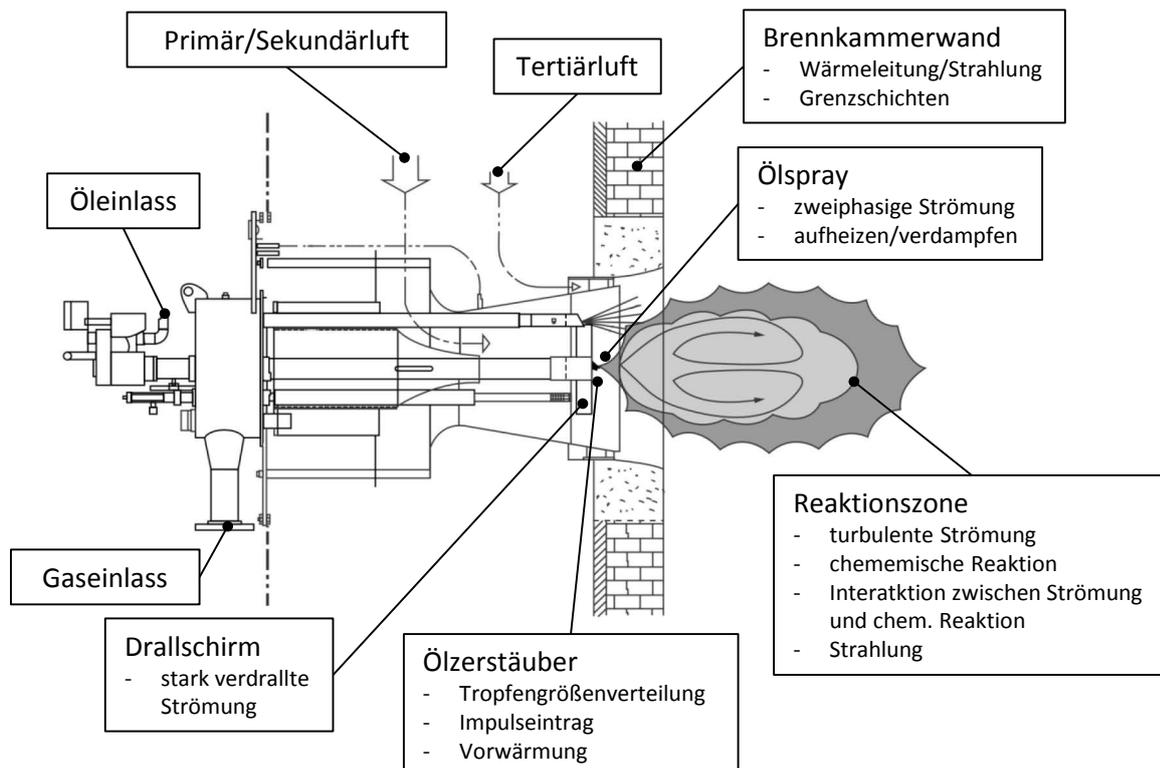


Abbildung 1: Physikalische Vorgänge in einem Low-NO_x Brenner mit Luftstufung. (Baukal et al. 2003)

Die Luftzufuhr in den Brenner erfolgt meist radial. Der gasförmige oder flüssige Brennstoff wird über sogenannte Lanzen eingebracht. Der flüssige Brennstoff wird dabei zerstäubt und es entsteht eine zweiphasige Strömung. Die Brennstofftropfen mit unterschiedlicher Tropfengröße verdampfen und es entsteht ein Stoffübergang von der flüssigen, dispersen Phase in die kontinuierliche Gasphase. Bildet sich ein zündfähiges Gemisch, so kann durch Bereitstellen von Zündenergie der Verbrennungsprozess gestartet werden. Neben den bereits beschriebenen Phänomenen treten noch

turbulente Strömungen und Wärmestrahlung auf, die ebenfalls Einfluss auf den Gesamtprozess haben.

Für die Beschreibung und Berechnung von Temperatur- und Konzentrationsverläufen von Edukten, Zwischen- und Endprodukten in der Flamme, wie sie in *Abbildung 2* dargestellt sind, sind Kenntnisse in der chemischen Reaktionstechnik nötig (Joos 2006). Die Reaktionstechnik, sowie die mehrdimensionale numerische Berechnung von Flammen werden in den nächsten Kapiteln beschrieben.

Die Verbrennung, sprich die Oxidation des Brennstoffes, findet ausschließlich in der Gasphase statt (Warnatz et al. 2001). Somit treten bei der Verbrennung von nicht gasförmigen Brennstoffen zusätzliche Phänomene (Pyrolyse, Verdampfen etc.) auf (Garaniya 2009).

3.1.1 Einteilung der Brennstoffe

Die Brennstoffe werden im Allgemeinen entweder nach ihrem Aggregatzustand oder nach ihrem Ausgangsstoff wie in Tabelle 2 eingeteilt.

Tabelle 2: Einteilung der Brennstoffe nach dem Aggregatzustand (links) oder nach dem Ausgangsstoff (rechts). (Joos 2006)

Aggregatzustand	Ausgangsstoff
- fest	- fossil
- flüssig	- erneuerbar
- gasförmig	- chemisch

Die chemischen Brennstoffe bilden hier im Vergleich zu den fossilen und erneuerbaren Brennstoffen eine Ausnahme, da sie das für die Verbrennung benötigten Oxidationsmittel bereits enthalten und deswegen hauptsächlich für Raketentreibstoffe oder Sprengstoffe verwendet werden (Joos 2006).

Da in dieser Arbeit nur Brennstoffe im gasförmigen und flüssigen Aggregatzustand behandelt werden, wird hier auch nur auf diese zwei Arten eingegangen.

Gasförmige Brennstoffe

Die größten Vertreter der gasförmigen Brennstoffe sind Erdgas in Bezug auf fossile Energiequellen und Gärgase in Bezug auf erneuerbare Energiequellen (Joos 2006). Sie bestehen meist aus kurzkettigen Kohlenwasserstoffen wie Methan (CH_4) oder Ethan (C_2H_6).

Bei der Verbrennung von gasförmigen Brennstoffen findet keine Veränderung des Aggregatzustandes statt, wodurch die theoretische und mathematische Beschreibung vereinfacht wird.

Abbildung 2 zeigt schematisch die Verläufe der Konzentration von Edukten, Zwischenprodukten und Endprodukten, sowie den Temperaturverlauf bei einer Verbrennung in einem Stromrohr.

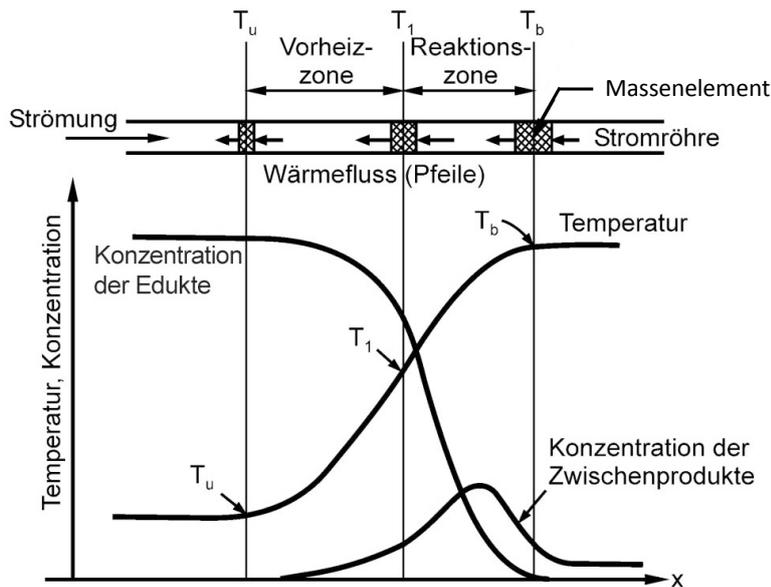


Abbildung 2: Schnitt durch eine ebene Flammenfront. (Joos 2006)

Der gasförmige Brennstoff wird durch die in der Reaktionszone frei werdende Energie (Wärmefluss mit Pfeilen dargestellt) vorgewärmt. In der Reaktionszone werden die Edukte über Zwischenprodukte zu Produkten oxidiert, wobei weniger stabile Verbindungen bereits in der Vorheizzone zu Zwischenprodukten reagieren. Durch die frei werdende Energie erhöht sich die Temperatur und somit erlischt der Verbrennungsprozess nicht.

Flüssige Brennstoffe

Bei den flüssigen Brennstoffen haben im Bereich der fossilen Energiequellen Produkte aus der Mineralöldestillation mit Abstand den größten Anteil. Bei den erneuerbaren Energiequellen sind es die aus Biomasse gewonnenen Kraftstoffe wie Etherverbindungen (z. B. MTBE - Methyl-Tertiär-Butyl-Ester) oder Alkohole wie z. B. Methanol (CH_3OH) oder Ethanol ($\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$). (Joos 2006).

Im Gegensatz zu den gasförmigen müssen flüssige Brennstoffe erst in den gasförmigen Zustand gebracht werden. Die dazu nötige Energie liefert die Wärme, die bei der Verbrennung freigesetzt wird. In der Vorheizzone (siehe *Abbildung 2*) wird der flüssige Brennstoff vorgewärmt und verdampft (Joos 2006). Da viele länger-kettige Kohlenwasserstoffe bei diesen Temperaturen nicht mehr stabil sind, findet oft zusätzlich neben der Verdampfung auch noch eine Pyrolyse (thermo-chemische Spaltung) des Brennstoffes statt (Garaniya 2009). Um die Verdampfung zu beschleunigen, werden flüssige Brennstoffe fast immer fein zerstäubt.

Diese Umstände machen sowohl die theoretische als auch mathematische Beschreibung der Verbrennungsprozesse von flüssigen Brennstoffen deutlich schwieriger.

3.1.2 Grundlegende Flammentypen

Die bei einer Verbrennung auftretenden Flammen können dabei in Form, Temperatur, Größe und Farbe sehr unterschiedlich sein und hängen sehr stark vom Brennstoff, der Bereitstellung vom Oxidator (meist Luft) und dem vorherrschenden physikalischen Zustand ab. Abbildung 3 gibt einen Überblick über die Einteilung der verschiedenen Flammen, wobei auch Zwischenbereiche wie die teilweise vorgemischte Flamme (Warnatz et al. 2001) auftreten.

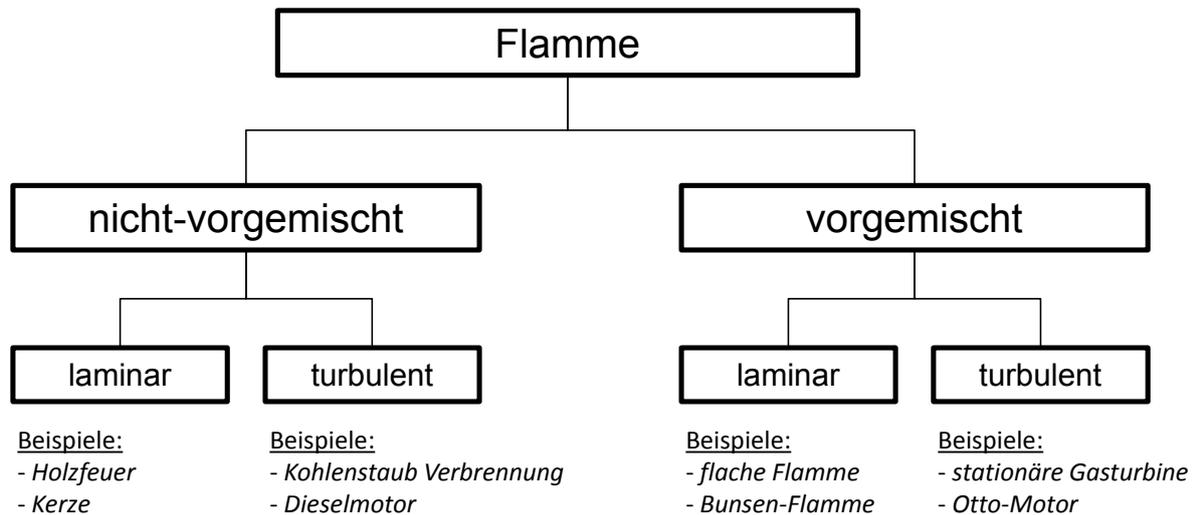


Abbildung 3: Einteilung der Flammen nach Vormischung und Strömungstyp. (Warnatz et al. 2001)

In großtechnischen Anlagen kommt aus sicherheitstechnischen Gründen meist nur die nicht-vorgemischte Flamme zum Einsatz.

Laminare Vormischflamme

Die laminare Vormischflamme stellt die Grundlage der Verbrennung dar und ist daher sowohl für das theoretische Verständnis, als auch für die numerische Simulation von Bedeutung. Ebenso bauen einige Modelle für turbulente Flammen auf die elementaren Vorgänge der laminaren Vormischflamme auf (sogenannte FLAMELET-Konzepte). Aus diesem Grund wird hier zuerst die laminare Vormischflamme kurz erläutert.

Bei einer laminar vorgemischten Flamme sind Oxidator und Brennstoff bereits vor der chemischen Umwandlung (Verbrennung) vollständig durchmischt und die Strömung des Gemisches ist laminar.

In Abbildung 4 ist die Position der Flamme eines Bunsenbrenners (laminare vorgemischte Flamme) in Abhängigkeit der Flammen- und Strömungsgeschwindigkeit, sowie die Flammenfront als Beispiel dargestellt.

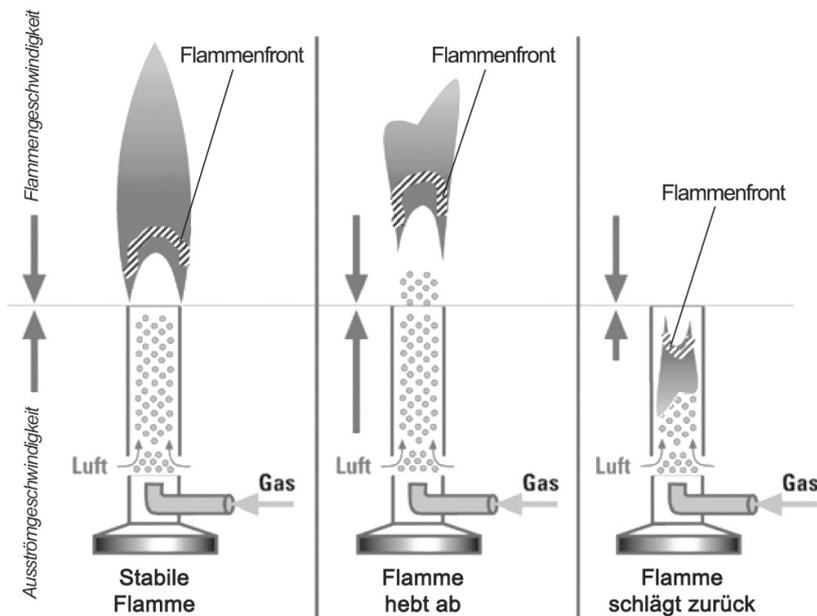


Abbildung 4: Flammenfront und Position der Flamme in Abhängigkeit der Flammen- und Strömungsgeschwindigkeit (Joos 2006)

Im ersten Fall in Abbildung 4 ist die Ausströmungsgeschwindigkeit des Brennstoff-Luftgemisches auf die Flammengeschwindigkeit abgestimmt. Im zweiten Fall ist die Ausströmungsgeschwindigkeit des Gemisches größer als die Flammengeschwindigkeit und die Flamme hebt vom Brenner ab (Warnatz et al. 2001). Der dritte Fall zeigt das andere Extrem. Hier ist die Geschwindigkeit des Brennstoff-Luftgemisches zu niedrig, wodurch die Flammenfront in den Brenner wandert.

Turbulente Vormischflamme

Wird die Strömungsgeschwindigkeit des Brennstoff/Oxidationsmittel-Gemisches erhöht, schlägt die Strömung in eine turbulente Strömung, charakterisiert durch die (kritische) REYNOLDS-Zahl, um. Nun befindet sich die Flammenfront in einem turbulenten Geschwindigkeitsfeld. Damit können hohe Verbrennungstemperaturen auf kleinem Raum erzeugt werden (Warnatz et al. 2001). Die turbulente Vormischflamme kann unter gewissen Umständen auch als ein Ensemble von vielen kleinen laminaren Vormischflammen betrachtet werden. Diese Betrachtung wird als FLAMELET-Konzept bezeichnet.

Laminare nicht-vorgemischte Flamme (Diffusionsflamme)

Um die Bildung von großen reaktionsfähigen Volumen aus sicherheitstechnischen Gründen zu vermeiden, wird oft der Brennstoff erst direkt im Verbrennungsraum mit dem Oxidationsmittel vermischt (Warnatz et al. 2001). Die Verbrennung wird dabei stark vom Mischungsvorgang beeinflusst (Poinot & Veynante 2005).

Ist die Strömung dabei laminar, spricht man von einer laminaren, nicht-vorgemischten Flamme (alte Bezeichnung: Diffusionsflamme (Warnatz et al. 2001)). Die Flammenfront ist dabei deutlich

komplexer im Vergleich zur laminaren Vormischflamme, da es Bereiche mit Oxidationsmittel­mangel und -überschuss gibt (Warnatz et al. 2001).

Turbulente nicht-vorgemischte Flamme

Die turbulente nicht-vorgemischte Flamme kommt in den meisten technischen Verbrennungsprozessen zur Anwendung. Dabei findet die Verbrennung in einem turbulenten Geschwindigkeitsfeld statt. Dies erhöht die Durchmischung von Brennstoff und Oxidationsmittel erheblich, was unter anderem zu einer geräuschvollen Verbrennung führt. Auch hier kann das oben erwähnte FLAMELET-Konzept verwendet werden (Warnatz et al. 2001).

Bei der turbulenten nicht-vorgemischten Flamme treten viele Effekte auf, die auch bei der turbulenten vorgemischten Flamme vorkommen. Allerdings kommen hier eben die Mischungsvorgänge hinzu, was sowohl die theoretische als auch die mathematische Beschreibung erschwert. Entscheidend für den Mischungsvorgang ist die Diffusion der Moleküle, die wiederum durch hohe Scherraten und große örtliche Konzentrationsgradienten beeinflusst wird. Der Diffusionsvorgang zur Flammenfront ist meist der geschwindigkeitslimitierende Schritt im Vergleich zur Reaktionsgeschwindigkeit, daher wird bei vielen Modellen die Reaktionsgeschwindigkeit als unendlich schnell angenommen (Poinsot & Veynante 2005).

3.2 Grundlagen der chemischen Thermodynamik

In chemisch reaktiven Systemen können Ausgleichs-, Umwandlungs- und Mischungsvorgänge stattfinden. Um diese Vorgänge beschreiben zu können, muss die Stoffmenge N_i eingeführt werden. Die Einführung der Stoffmenge wurde hier kurz zusammengefasst, wobei hier wie bei HUEMER (Huemer 2010) vorgegangen worden ist.

Tabelle 3 zeigt die Stoffmenge und die daraus resultierenden Größen mit ihrer dazugehörigen Einheit.

Tabelle 3: Stoffmenge, Stoffmengentransport und Stoffmengentransportdichte: Bezeichnung und ihre Einheiten.

Größe	Bezeichnung	SI-Einheit
Stoffmenge	N_i	[mol]
Stoffmengentransportstrom	\dot{N}_i	[mol/s]
Stoffmengentransportstromdichte	\dot{n}_i	[mol/m ² s]
Molenbruch	x_i	[mol/mol]

Die Zusammenhänge zwischen den in Tabelle 3 gezeigten Größen geben die nachstehenden Gleichungen an, wobei Δt ein Zeitintervall und A eine Fläche darstellen.

$$\dot{N}_i = \frac{\Delta N_i}{\Delta t} \quad (3.1)$$

$$\dot{n}_i = \frac{\Delta \dot{N}_i}{A \cdot \Delta t} \quad (3.2)$$

$$x_i = \frac{N_i}{N_{total}} \quad (3.3)$$

mit

$$N_{total} = \sum_{i=1}^m N_i \quad (3.4)$$

Fundamentalgleichung

Wird der 2. Hauptsatz aus der technischen Thermodynamik mit dem Term

$$\sum_{i=1}^m \mu_i dN_i$$

erweitert, so können damit Änderungen der Stoffmenge im System berücksichtigt werden und es folgt die GIBBSSche Fundamentalgleichung (Huemer 2010):

$$dU = TdS - pdV + \sum_{i=1}^m \mu_i dN_i \quad (3.5)$$

Damit ist

$$U = U(S, V, N_i)$$

Erst durch diese Erweiterung lassen sich Vorgänge wie Ausgleich, Umwandlung, chemische Reaktion oder Diffusion beschreiben (Huemer 2010).

Damit stellt die Fundamentalgleichung (3.5) den Zusammenhang zwischen den extensiven Größen U , S , V und N_i dar.

Die Größe μ_i wird als chemisches Potential bezeichnet. Sie ist definiert als die partielle Ableitung der inneren Energie U nach der Stoffmenge N_i , also eine *intensive Größe*, und kann als treibende Kraft für die Stoffmengenänderung betrachtet werden.

$$\mu_i \equiv \left(\frac{\partial U}{\partial N_i} \right)_{S, V, N_{i \neq j}} \quad (3.6)$$

Mit partiellen Ableitungen der Fundamentalgleichung (3.5) können somit die *intensiven Größen* T , p und μ_i beschrieben werden (Huemer 2010).

Da die *extensiven Größen* in der Fundamentalgleichung (3.5) nur schwer zugänglich sind, können diese mit Hilfe einer LEGENDRE-Transformation durch die *intensiven Größen* T , p und μ_i ersetzt werden (Huemer 2010).

Werden z. B. die beiden *extensiven Größen* S und V durch die *intensiven Größen* T und p ersetzt, so kann die Fundamentalgleichung mit der freien Energie nach GIBBS (oder auch freien Enthalpie genannt) angeschrieben werden:

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^m \mu_i dN_i \quad (3.7)$$

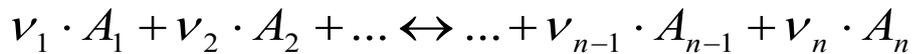
Daraus folgt:

$$U = U(S, V, N_i) \rightarrow G = G(T, p, N_i) \quad (3.8)$$

Diese, aus der Fundamentalgleichung (3.5) abgeleitete Funktion erlaubt eine Gleichgewichtsberechnung eines Systems bei Phasen- und Reaktionsgleichgewichten (Huemer 2010).

3.2.1 Reaktionsgleichgewicht in der Gasphase

Die Darstellung chemischer Reaktionen wird im Allgemeinen wie folgt angegeben:



Dabei steht A_i für eine Stoffkomponente; ν_i gibt die Anzahl der Mole der jeweiligen Stoffkomponente an und wird als stöchiometrischer Koeffizient bezeichnet. Die linke Seite der Gleichung gibt die Ausgangsstoffe, auch Edukte genannt, und die rechte Seite die Produkte an.

Dabei muss gelten:

$$\sum_{i=1}^n \nu_i \cdot A_i = 0 \quad (3.9)$$

wobei die Konvention der Vorzeichen für ν_i gilt:

- Edukt: $\nu_i > 0$
- Produkt: $\nu_i < 0$

Als einfaches Beispiel sei hier die Verbrennung von Wasserstoff (H_2) mit reinem Sauerstoff (O_2) zu Wasser (H_2O) angeführt.



Bei chemischen Reaktionen stellt sich nach einer bestimmten Zeit ein Gleichgewicht ein. Dies symbolisiert der doppelte Pfeil (\leftrightarrow). Im obigen Beispiel liegt das Gleichgewicht sehr weit auf der rechten Seite, d. h. nach Zündung des Gemisches und Ablauf der chemischen Reaktion (also Verbrennung) bis zum Gleichgewicht liegt fast ausschließlich Wasser (im gasförmigen Zustand) vor. Es gibt aber auch Systeme, bei denen sich der Gleichgewichtszustand weder ganz links noch ganz rechts befindet.

Um die genaue Zusammensetzung des Reaktionsgemisches nach Erreichen des Gleichgewichtes zu beschreiben, muss die Lage des Gleichgewichtes bekannt sein.

Im Gleichgewicht gilt (Huemer 2010):

$$G = G(T, p, N_i) \Leftrightarrow G \stackrel{!}{=} \min \quad \wedge \quad T, p, N_i = const. \quad (3.11)$$

Mit dieser Bedingung für den Gleichgewichtszustand kann die Gleichgewichtskonstante K_p hergeleitet werden.

$$K_p = \prod_i \left(\frac{p_i}{p^0} \right)^{x_i} = \exp \left(\frac{-\Delta_R g^0}{R_m \cdot T} \right) \quad (3.12)$$

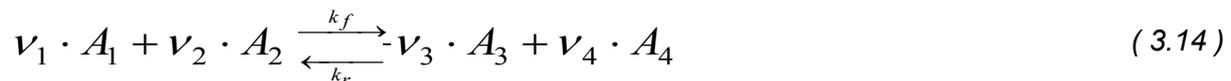
In (3.12) ist $\Delta_R g^0$ die molare Standardbildungsenthalpie und R_m die allgemeine Gaskonstante. Mit Hilfe des idealen Gasgesetzes und dem Gesetz von DALTON lässt sich eine Gleichgewichtskonstante auch mit Konzentrationen ausdrücken (Huemer 2010). Dabei gilt $K_p = K_c$ nur bei $p = 1 \text{ bar}$ (Joos 2006).

$$K_c = \prod_i \left(\frac{c_i}{c_0} \right)^{x_i} \quad (3.13)$$

Unter Berücksichtigung von (3.9) lässt sich somit die Zusammensetzung des Reaktionsgemisches ermitteln. Über die Zeit, die benötigt wird, um den Gleichgewichtszustand zu erreichen, kann so noch keine Aussage gemacht werden. Diese wird mit Hilfe der Reaktionskinetik beschrieben.

3.2.2 Reaktionskinetik

Hier wird wieder von einer allgemeinen chemischen Reaktion ausgegangen wie sie in (3.14) dargestellt ist, worin ν der stöchiometrische Koeffizient und A_i die teilnehmenden Komponenten sind.



Die Reaktionsgeschwindigkeit r ist allgemein definiert, als die Veränderung der Stoffmenge pro Zeit und Volumen (Joos 2006). Sie lässt sich für volumenerhaltende Reaktionen folgendermaßen formulieren:

$$r_j = \frac{dc_j}{dt} \quad (3.15)$$

Für den allgemeinen Fall und bei Betrachtung von vielen Reaktionsgleichungen lässt sich die Reaktionsgeschwindigkeit nicht mehr theoretisch herleiten (Joos 2006). Hier wird ein empirischer Ansatz gewählt:

$$r_{A_f} = \frac{dc_A}{dt} = -k_f \cdot c_A^\alpha \cdot c_B^\beta \quad (3.16)$$

In (3.16) sind α und β Exponenten der Konzentration und bestimmen die Ordnung in Bezug auf die betreffende Komponente. Diese entsprechen im Allgemeinen nicht den stöchiometrischen

Koeffizienten ν . Die Summe von $\alpha + \beta = n$ gibt die Ordnung n der Reaktion an. Die Reaktionsordnungen können experimentell bestimmt werden.

k_f ist die Reaktionsgeschwindigkeitskonstante. Der Index f bedeutet, dass die Reaktion auf die rechte Seite, also die Hinreaktion von (3.14) betrachtet wird. Sie ist stark von der Temperatur abhängig. Diese Abhängigkeit kann durch die ARRHENIUS-Gleichung beschrieben werden.

$$k = A \cdot \exp\left(\frac{-E_A}{R_m \cdot T}\right) \quad (3.17)$$

Darin ist A der präexponentielle Faktor und E_A die Aktivierungsenergie, die überwunden werden muss, um die Reaktion in Gang zu setzen. Bei der Verbrennung ist E_A gleich der Zündenergie, wie es in Abbildung 5 dargestellt.

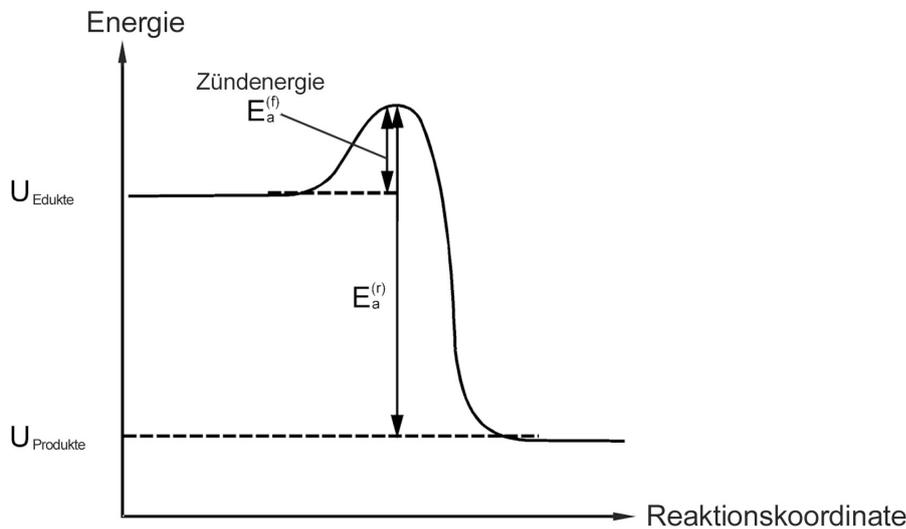


Abbildung 5: Energiediagramm einer chemischen Elementarreaktion. (Joos 2006)

Bei der Betrachtung der Rückreaktion ergibt sich analog wie bei (3.16)

$$r_{Ar} = \frac{dc_A}{dt} = k_r \cdot c_C^\chi \cdot c_D^\delta \quad (3.18)$$

Im chemischen Gleichgewicht gilt die Gleichung (3.11), was aus makroskopischer Sicht in Worten ausgedrückt mit keiner Veränderung bzw. mit dem Ruhezustand gleichzusetzen ist. Mikroskopisch betrachtet laufen jedoch die chemischen Reaktionen weiter, nur dass die Reaktionsgeschwindigkeit der Hin- und Rückreaktion gleich schnell verlaufen.

Somit lässt sich die Netto-Reaktionsgeschwindigkeit durch Addition von (3.16) und (3.18) bilden.

$$r_A = \frac{dc_A}{dt} = -k_f \cdot c_A^{\nu_A} \cdot c_B^{\nu_B} + k_r \cdot c_C^{\nu_C} \cdot c_D^{\nu_D} \quad (3.19)$$

Im Gleichgewicht ist $r_A = 0$ und durch Umformen von (3.19) erhält man:

$$\frac{c_C^\chi \cdot c_D^\delta}{c_A^\alpha \cdot c_B^\beta} = \frac{k_f}{k_r} = K_c \quad (3.20)$$

Mit (3.20) ist auch der Zusammenhang zwischen der Gleichgewichtskonstante K_c aus Kapitel 3.2.1 und den Reaktionsgeschwindigkeitskonstanten k_f und k_r hergestellt.

3.2.3 Reaktionsmechanismen

Um chemische Reaktionen beschreiben zu können bedarf es der Kenntnisse der Reaktionsprozesse in all ihren Einzelheiten. Die Elementarreaktionen, mit deren Hilfe sich eine chemische Reaktion beschreiben lässt, werden auch als Reaktionsmechanismus bezeichnet. Dabei sind selbst bei einfachen Reaktionen wie bei der Verbrennung von Wasserstoff nach (3.10) schon annähernd 40 Elementarreaktionen nötig, um den Reaktionsprozess detailliert zu beschreiben (Warnatz et al. 2001). Bei der Verbrennung von einfachen Kohlenwasserstoffen sind bereits tausende Elementarreaktionen für eine vollständige Beschreibung nötig (Hochenauer 2005).

Die große Anzahl an Elementarreaktionen kann in technischen Anwendungen wie der 3D Simulation einer reaktiven Strömung nicht mit vertretbarem Aufwand berücksichtigt werden. Allerdings ist es oft auch gar nicht nötig, alle Elementarreaktionen für z. B. die Betrachtung von Wärmefreisetzung und Flammgeschwindigkeit für bestimmte Betriebszustände zu berücksichtigen (Joos 2006).

Diese Vereinfachungen erlauben es, 3D Simulationen von reaktiven Strömungen mit akzeptablem Rechenaufwand durchzuführen.

3.3 Grundlagen der numerischen Simulation

Für das Beschreiben und Lösen technischer Probleme werden mathematische Modelle entwickelt, die das Verhaltensmuster und die Eigenschaften des betrachteten Systems so gut wie möglich abbilden. Dabei sind viele Systeme derart komplex, dass ihre exakte Modellierung nicht möglich ist. Aufgrund dessen werden sehr oft Vereinfachungen und Annahmen getroffen, die es erlauben, das betrachtete System durch ein Modell so abzubilden, sodass dieses nur die wichtigsten Eigenschaften und Verhaltensmuster beschreibt.

Durch die enorme Steigerung der Rechenleistung von Computern und die Entwicklung von geeigneten Simulationsprogrammen ist es heute möglich, eine Vielzahl von numerischen Experimenten mit diesen Modellen durchzuführen. Dadurch kann die Anzahl an oft langwierigen und oft auch teuren realen Experimenten verringert werden bzw. können diese sogar ganz ersetzt werden.

Strömungen und verwandte Phänomene können mit Hilfe von partiellen Differenzialgleichungen beschrieben bzw. modelliert werden. Für diese Gleichungen existieren bis heute, mit Ausnahme einer weniger Spezialfälle, keine analytischen Lösungen, weshalb die Lösung über die numerische Simulation angenähert wird. (Ferziger & Perić 2008)

3.3.1 Diskretisierung und Diskretisierungsmethoden

Der Vorgang des Annäherns für die numerische Näherungslösung durch eine Anzahl an diskreten Werten wird als Diskretisierung bezeichnet. Bei der Diskretisierung von Differenzialgleichungen wird der Differenzialquotient durch einen Differenzenquotienten angenähert (Khinast 2010). Daraus folgt

$$\frac{d\phi}{dt} \approx \frac{\Delta\phi}{\Delta t} \quad (3.21)$$

wobei ϕ die gesuchte Lösung darstellt. Die Diskretisierung erfolgt in Raum und/oder Zeit.

Damit ist auch eindeutig klar, dass die Genauigkeit der numerischen Lösung nur so gut sein kann, wie ihre Diskretisierung (Ferziger & Perić 2008).

Es gibt drei verschiedene Diskretisierungsmethoden:

- Finite-Differenzen-Methode (FD-Methode)
- Finite-Volumen-Methode (FV-Methode)
- Finite-Elemente-Methode (FE-Methode)

Die FV-Methode ist dabei die am häufigsten eingesetzte Methode (Schwarze 2013), weswegen sie hier kurz erläutert wird.

Bei der Finite-Volumen-Methode wird das Lösungsgebiet in eine finite Anzahl, sich nicht überlappenden Kontrollvolumen (KVs) aufgeteilt auf die die integrale Form der Erhaltungsgleichung angewendet wird (Ferziger & Perić 2008). Dabei ist die Form der KVs beliebig, wodurch sich eine breite Anwendungsmöglichkeit ergibt.

Für ausführlichere Erläuterungen sei hier auf die Fachliteratur wie FERZIGER und PERIĆ (Ferziger & Perić 2008), SCHWARZE (Schwarze 2013) und PASCHEDAG (Paschedag 2004) verwiesen.

3.3.2 Berechnungsgitter

Für die Durchführung von Simulationen und damit für die Berechnungen der diskretisierten Gleichungen muss das Berechnungsgebiet in kleine Kontrollvolumen zerlegt werden. Dieser Vorgang wird meist als Gittererzeugung oder Netzgenerierung bezeichnet.

Die Anforderungen an ein Berechnungsgitter können von Problem zu Problem sehr verschieden sein. Nicht nur das mathematische Lösungsmodell ist von Bedeutung, auch Geometrie und Aufgabenstellung spielen eine wichtige Rolle bei der Wahl des Berechnungsgitters.

3.3.2.1 Gittertypen

Bei der Erstellung des Berechnungsgitters müssen bereits Problemstellung und Aufgabenstellung konkret definiert sein, da für unterschiedliche Interessen auch unterschiedliche Gitter erstellt werden müssen. Um dabei die Lösung so gut wie möglich vom Gitter unabhängig zu gestalten, müssen die Vor- und Nachteile der einzelnen Gittertypen bekannt sein. Abbildung 6 gibt einen Überblick über die verschiedenen Gittertypen.

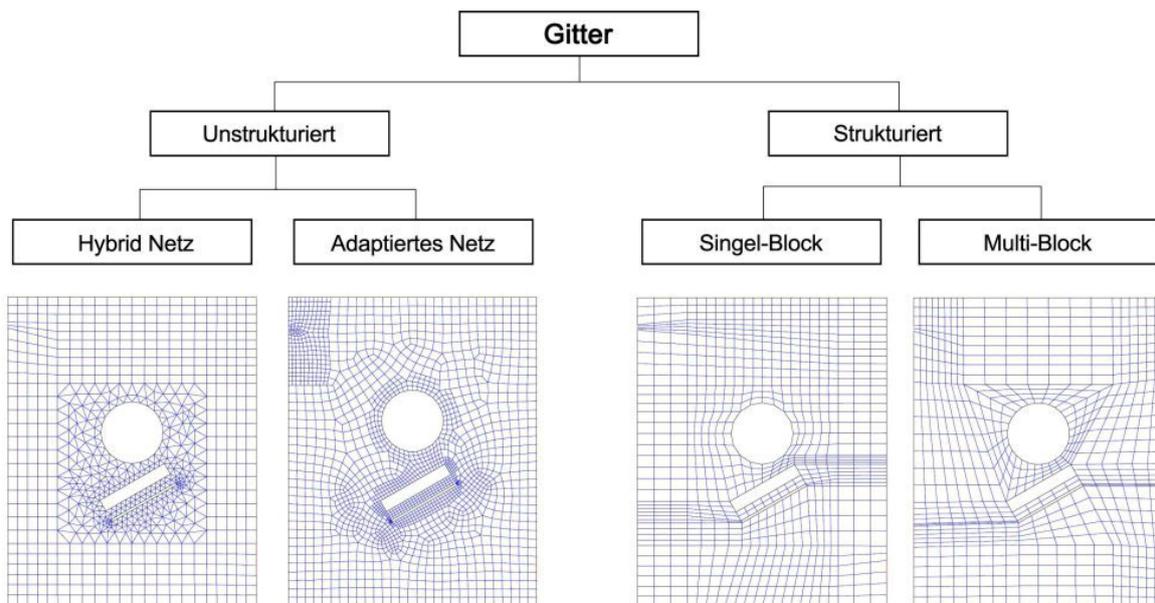


Abbildung 6: Überblick und Einteilung verschiedener Berechnungsgittertypen. (vgl. Martens 2013)

Die Berechnungsgitter lassen sich zunächst in strukturierte und unstrukturierte Gitter einteilen.

Strukturierte Gitter sind durch ihre Regularität charakterisiert und bestehen meist aus Vierecken (2D) oder Hexaedern (3D) (Schwarze 2013). Sie haben den Vorteil, dass die Zuordnung der einzelnen Zellen sehr einfach ist, was sich zugunsten der Rechenzeit und Stabilität auswirkt (Cvetkovic & Pfennig 2012). Um die strukturierten Gitter etwas flexibler zu gestalten, kann das Rechengebiet in einen oder mehrere Blöcke zerlegt werden. Allerdings ist es schwierig bzw. manchmal auch unmöglich komplizierte Geometrien zu erstellen. Ein weiterer Nachteil der strukturierten Gitter liegt darin, dass bei anspruchsvolleren Geometrien Bereiche entstehen, in denen die Gitterauflösung unnötig hoch ist, was zwangsweise durch Bereiche mit hoher geforderter Auflösung hervorgerufen wird.

Unstrukturierte Gitter hingegen lassen sich sehr flexibel an jede Geometrie anpassen, da sie aus verschiedenen Elementen wie Dreiecken und Vierecken (2D), oder Tetraedern, Hexaedern, Pyramiden, Prismen und Polyedern (3D) zusammengesetzt werden können. Darüber hinaus ist die Auflösung des Gitters in definierten Gebieten möglich, ohne dabei andere Bereiche zu beeinflussen. Diese werden dann als adaptierte (verfeinerte) Netze bezeichnet (Martens 2013). Es können auch Kontrollvolumen mit verschiedenen Geometrien kombiniert werden, die dann als hybride Netze bezeichnet werden (Martens 2013). Durch die flexible Geometrie lassen sich diese Gitter sehr gut automatisiert erzeugen (Schwarze 2013).

Bei gleicher Auflösung des Rechengebietes benötigen unstrukturierte Gitter im Vergleich zu strukturierten Gittern mehr Speicherplatz und der Rechenaufwand ist meist auch spürbar größer (Schwarze 2013).

3.3.2.2 Form und Genauigkeit

Beim Einsatz diverser mathematischer Operationen wie Zentrale-Differenzen oder linearer Interpolation zur Diskretisierung von Gleichungen in einer FV-Methode ist unter Verwendung von viereckigen bzw. Hexaeder förmigen Gittern die Genauigkeit höher als mit dreieckigen bzw. Tetraeder förmigen Gittern (Ferziger & Perić 2008; Paschedag 2004). Der Grund liegt darin, dass bei gleich großen, parallel gegenüberliegenden Flächen des Kontrollvolumens sich der Diskretisierungsfehler teilweise (manche Fehlerkomponenten vollständig) aufhebt (Ferziger & Perić 2008). Um dieselbe Genauigkeit zu erreichen, müssten Dreiecks- bzw. Tetraeder-Gitter deutlich feinmaschiger sein.

In Wandnähe sind die Änderungen diverser Variablen wie Geschwindigkeit und Temperatur etc. in viskosen Strömungen besonders groß. Aufgrund dessen sind bei der Berechnung viskoser Strömungen in Wandnähe Gitter mit Vierecken bzw. Prismen unerlässlich (Ferziger & Perić 2008).

3.3.2.3 Gitterskalierung

Für Simulationen gilt im Allgemeinen, dass die Ergebnisse nicht von den Simulationsparametern (z. B. Gitterauflösung) abhängig sein dürfen. Um dies zu gewährleisten bedarf es eines iterativen Prozesses, der im Fall der Gitterskalierung durch Verfeinern des Gitters erfolgt, bis sich die Ergebnisse durch weiteres verfeinern des Gitters nicht mehr ändern. Dieser Vorgang wird auch als Gitterstudie bezeichnet.

Es ist zu beachten, dass das Verhältnis der Größe benachbarter Zellen nicht zu sprunghaft geändert werden sollte. Hier empfehlen FERZIGER und PERIĆ einen Wert von zwei (Ferziger & Perić 2008) nicht zu überschreiten.

3.3.2.4 Netzgenerierung:

Alle Gitter, die in dieser Arbeit für die einzelnen Simulationen verwendet wurden, sind mit Hilfe des Programms ANSYS GAMBIT 2.4.6 erzeugt worden. Die Brennergeometrie wurde dabei von der Andritz AG zur Verfügung gestellt.

In dieser Arbeit wurde die maximale Gitterauflösung verwendet, die mit den zur Verfügung stehenden Rechnern noch in einem angemessenen Verhältnis zum Rechenaufwand standen. Aus diesem Grund wurde in dieser Arbeit auf eine Gitterstudie verzichtet (vgl. dazu Kapitel 3.3.2.3).

3.3.2.5 Netzqualität

Für die Beurteilung der Netzqualität wurden folgende Kriterien herangezogen:

Netzdichte:

Die Netzdichte ist das Verhältnis der Kontrollvolumen-Anzahl im gesamten Berechnungsgebiet zum Gesamtvolumen/Gesamtfläche des Berechnungsgebietes. Sie ist ein Maß für die mittlere Gitterauflösung und berechnet sich nach Gleichung (3.22).

$$\text{Netzdichte} = \frac{n_{KV}}{A} \quad \text{bzw.} \quad \text{Netzdichte} = \frac{n_{KV}}{V} \quad (3.22)$$

Equi Angle Skew:

Equi Angle Skew ist ein Maß für die Verzerrung eines KVs und berechnet sich über

$$Q_{EAS} = \max \left[\frac{\Theta_{\max} - \Theta_e}{180 - \Theta_e}, \frac{\Theta_e - \Theta_{\min}}{\Theta_e} \right], \quad (3.23)$$

wobei Θ_{\min} und Θ_{\max} der kleinste bzw. der größte Öffnungswinkel zweier Flächen eines KVs sind. Θ_e ist hier ein charakteristischer Winkel für die geringste Verzerrung eines flächen- und volumengleichen KVs. Für einen Hexaeder gilt $\Theta_e = 90^\circ$. Der Richtwert liegt hier bei Equi Angle Skew < 0,9 (Martens 2013). (Leiter 2011)

Aspect Ratio:

Das Aspect Ratio ist ein Maß für die Streckung eines KVs. Hier werden die Abstände zwischen KV-Schwerpunkt und allen Flächenschwerpunkten des KVs, sowie die Abstände zwischen KV-Schwerpunkt und allen Knotenpunkten des KVs berechnet und davon der maximale Wert durch den minimalen Wert dividiert. Dies ergibt das Aspect Ratio. Der Richtwert liegt hier bei $0,1 < \text{Aspect Ratio} < 10$ (Leiter 2011). (ANSYS 2011)

3.4 Mathematische Modellierung einer turbulenten Strömung

3.4.1 Erhaltungsgleichungen

Die Grundlage zur Modellierung von Transportprozessen bilden die Erhaltungsgleichungen (werden auch als Bilanzgleichungen bezeichnet). Dabei werden die konvektiven und molekularen Flüsse über ein Kontrollvolumen (KV) betrachtet. Die integrale Bilanz über ein endliches KV kann durch Überführung des KVs in ein Volumen, welches gegen null geht, in einer differenziellen Gleichung angeschrieben werden (Paschedag 2004):

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\underbrace{\nabla(\vec{v}\phi)}_{(a)} - \underbrace{\nabla\vec{J}_\phi}_{(c)} + \underbrace{S_\phi}_{(d)} \quad (3.24)$$

In Gleichung (3.24) bezeichnet ϕ eine allgemeine Transportgröße, \vec{v} ist der Geschwindigkeitsvektor und \vec{J}_ϕ der molekulare Flussvektor von ϕ .

(a) Speicherterm

Dieser Term beschreibt die lokale zeitlich Änderung von ϕ , wobei in manchen Fällen hier noch ein Term für die Speicherkapazität hinzugefügt wird. (Paschedag 2004)

(b) Konvektiver Transportterm

Dieser Term beschreibt den Transport aufgrund einer Relativgeschwindigkeit zwischen betrachtetem Fluidelement und ortsfestem Kontrollvolumen (Paschedag 2004). (Es wird hier nicht näher auf die zwei Betrachtungsweisen von EULER und LANGRANGE eingegangen).

(c) Molekularer Transportterm

Dieser Term beschreibt je nach Bilanzgleichung molekulare Transportvorgänge wie Diffusion oder Wärmeleitung. Es werden auch andere ungerichtete Austauschvorgänge wie die auf REYNOLDS-Mittelung basierenden Turbulenzmodelle mit derselben Struktur beschrieben. Der molekulare Flussvektor lässt sich folgendermaßen ausdrücken:

$$\vec{J}_\phi = \Gamma_\phi \nabla \phi \quad (3.25)$$

In (3.25) ist Γ_ϕ der Transportkoeffizient (Diffusionskoeffizient) der Größe ϕ , der meist eine Stoffgröße ist, die aber durchaus von Systemgrößen (z. B. Temperatur und Druck) abhängig sein kann. Ausnahme ist hier die Impulsbilanz, die eine andere Formulierung der Schubspannung aufweist. (Paschedag 2004)

(d) Quellterm

Der Quellterm kann zusätzlich auftreten. Größe und Vorzeichen können dabei zwischen den bilanzierten Größen sehr stark variieren. (Paschedag 2004)

Wird die Masse als Transportgröße betrachtet so lässt sich aus Gleichung (3.24) die Kontinuitätsgleichung herleiten.

Bei der Analyse der Strömung ist die Berechnung des Geschwindigkeitsfeldes über die Impulserhaltung ein wichtiger Schritt. Die Impulserhaltungsgleichung lässt sich ebenfalls aus Gleichung (3.24) herleiten. Dabei tritt ein Term auf, der die Normal- und Schubspannungen beschreibt, die im Spannungstensor $\vec{\tau}$ zusammengefasst sind. Fluide, deren Viskosität nicht von den Scherspannungen abhängt, werden als NEWTON'sche-Fluide bezeichnet. Einen Sonderfall der Impulsgleichung stellt die NAVIER-STOKES-Gleichung dar. Dabei wird das Fluid als inkompressibel ($\rho = \text{konst.}$) und die Viskosität als konstant angenommen. (Paschedag 2004)

Die Energiegleichung besitzt ebenfalls den gleichen Aufbau wie Gleichung (3.24). Der molekulare Transportterm ist in diesem Fall die Wärmeleitung und lässt sich mit dem FOURIER-Gesetz ausdrücken.

3.4.2 Weitere Gleichungen

In den drei oben beschriebenen Gleichungen sind einige Größen noch unbekannt. Um das Gleichungssystem zu lösen, werden weitere Gleichungen benötigt. Diese Gleichungen sind thermodynamische Zustandsgleichungen und Materialgesetze (Schwarze 2013).

3.4.3 Modellierung der Turbulenz mit Hilfe von DNS, LES und RANS

Die Strömung eines Fluids kann allgemein in die zwei Strömungsregime laminare und turbulente Strömung unterteilt werden, wobei zwischen diesen beiden Regimen ein Übergangsbereich existiert. Dabei wird die Strömung durch die dimensionslose REYNOLDS-Zahl (3.26) charakterisiert:

$$\text{Re} = \frac{v \cdot d \cdot \rho}{\eta} \quad (3.26)$$

Die REYNOLDS-Zahl wird aus der charakteristischen Strömungsgeschwindigkeit v , einer charakteristischen Länge d (z. B. Durchmesser) und den Stoffwerten Dichte ρ und dynamischer Viskosität η des strömenden Fluides berechnet. Damit beschreibt sie das Verhältnis von Trägheitskräften zu viskosen Kräften.

Die laminare Strömung stabilisiert sich nach einer Störung wieder und ist durch parallele Stromlinien und eine kleine REYNOLDS-Zahl gekennzeichnet (Paschedag 2004).

Die turbulente Strömung ist durch stark fluktuierende Strömungsgrößen und eine große REYNOLDS-Zahl charakterisiert. Bei ihr überwiegen die Trägheitskräfte gegenüber den viskosen Kräften, was weiter zu einem erhöhten Queraustausch aller Transportgrößen führt. (Paschedag 2004)

In der numerischen Simulation von turbulenten Strömungen wird zwischen den folgenden drei Ansätzen unterschieden:

(a) Direkte numerische Simulation (DNS)

Bei der direkten numerischen Simulation wird die turbulente Strömung durch direktes Lösen der Kontinuitäts- und Impulserhaltungsgleichung ohne ein weiteres Turbulenzmodell beschrieben (Schwarze 2013). Somit wird bei der DNS die Strömung in allen Einzelheiten berechnet. Dies erfordert allerdings eine sehr hohe Gitterauflösung und einen dementsprechenden hohen Rechenaufwand, sodass sie zurzeit meist nur für akademische Untersuchungen von sehr kleinen Lösungsgebieten verwendet wird.

(b) Large-Eddy-Simulation (LES)

Bei der Large-Eddy-Simulation können Berechnungsgitter mit einer geringeren Auflösung im Vergleich zur DNS verwendet werden. Somit werden nur grobe Wirbelstrukturen aufgelöst. Dabei wird die Wirkung der kleineren, nicht erfassten Wirbelelemente durch Turbulenzmodelle approximiert.

(c) Reynolds-gemittelte Ansätze (RANS)

Bei der RANS-Simulation (RANS steht für Reynolds-Averaged-Navier-Stokes) werden stochastisch fluktuierenden Bilanzgrößen ϕ statistisch betrachtet und in einen Mittelwert $\bar{\phi}$ und eine Schwankungsgröße ϕ' in den Erhaltungsgleichungen zerlegt.

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.27)$$

Abbildung 7 zeigt die Aufteilung der tatsächlichen Größe in Mittelwert und Schwankungsgröße.

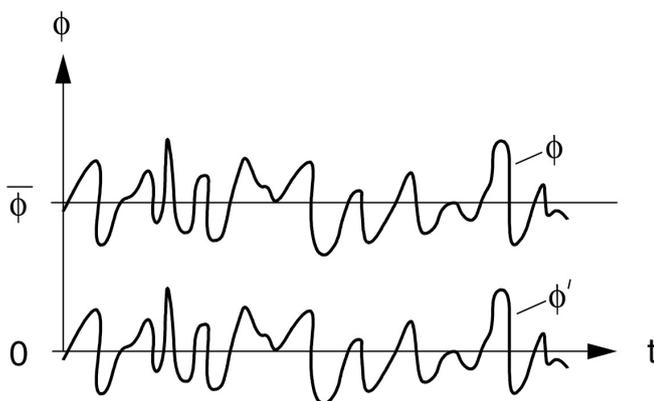


Abbildung 7: Zerlegung einer Größe ϕ in Mittelwert und Schwankungsanteil. (Paschedag 2004)

Somit werden alle Bilanzgrößen ϕ durch Mittelwert und Schwankungsgröße, wie in (3.27) ersetzt und anschließend gemittelt. Dabei treten Produkte von Schwankungsgrößen auf, die

bei der Mittelung nicht verschwinden. Um das Gleichungssystem zu schließen werden zusätzliche Modelle verwendet.

Damit beschreibt die RANS-Simulation die charakteristischen Mittelwerte der Hauptströmung unter Berücksichtigung der Einflüsse der Schwankungen auf die Mittelwerte (Paschedag 2004).

In den weiteren Erläuterungen wird hier von der statistischen Betrachtung der turbulenten Strömung (RANS) ausgegangen, da nur diese Art der Simulation es erlaubt mit akzeptablem Rechenaufwand größere Berechnungsgebiete, wie bei einem gesamten Verbrennungskessel, zu verwenden.

Ausgehend von der statistischen Betrachtung der turbulenten Größen (siehe dazu Gleichung (3.27)) erhält man die gemittelte Kontinuitäts- bzw. NAVIER-STOKES-Gleichung.

Bei der Mittelung der NAVIER-STOKES-Gleichung ergibt sich ein neuer konvektiver Term $\bar{\tau}_i$, der als Reynolds-Spannungs-Tensor bezeichnet wird. Um nun wieder das Gleichungssystem schließen zu können, müssen diese Spannungen in geeigneter Weise modelliert werden.

Die Turbulenzmodelle bringen die Reynolds-Spannungen mit den bekannten, gemittelten Strömungsgrößen in Verbindung und schließen somit das Gleichungssystem. Es gibt eine große Anzahl an verschiedenen Turbulenzmodellen. Allerdings gibt es noch kein Turbulenzmodell, das in allen Fällen den anderen Modellen überlegen ist. Dies ist der Grund, weshalb noch immer an der Modellierung der Turbulenz geforscht wird. (Schwarze 2013)

3.4.3.1 k-ε Modelle

Der Grundgedanke der Wirbelviskositätsmodelle ist, dass die Wirkung des Reynolds-Spannungstensors auf die Strömung mit der des NEWTON'schen Spannungstensors vergleichbar ist. Die k-ε Modelle gehören zu den *Zwei-Gleichungs-Modellen*.

Beim Standard k-ε Modell wird von einer isotropen, voll ausgebildeten (d. h. die molare Viskosität ist gegenüber der turbulenten Viskosität vernachlässigbar klein) Turbulenz ausgegangen. Für drallbehaftete Strömungen, wie sie bei Brennern für nicht-vorgemischte turbulente Flammen auftreten, liefert das Standard k-ε Modelle keine guten Ergebnisse (Martens 2013; Schwarze 2013).

Bessere Ergebnisse für drallbehaftete Strömungen gegenüber dem Standard k-ε Modell liefern die beiden Modelle RNG- und Realizable k-ε. (Martens 2013; ANSYS 2011)

3.4.3.2 Reynolds-Spannungs-Modelle (RSM)

Die Reynolds-Spannungs-Modelle (RSM) liefern für den Reynolds-Spannungstensor $\vec{\tau}_t$ im dreidimensionalen Fall (3D) sechs Bilanzgleichungen für die Komponenten von $\vec{\tau}_t$. Somit kann die Anisotropie der Turbulenz berücksichtigt werden. Die sechs Bilanzgleichungen werden dabei aus der nicht-gemittelten Kontinuitäts- und NAVIER-STOKES-Gleichung abgeleitet. Die dabei auftretenden Korrelationsterme höherer Ordnung müssen wiederum mit Hilfe von Schließungsansätzen geschlossen werden. Mit einer weiteren Gleichung für die Dissipationsrate ε ergeben sich sieben Gleichungen.

Es ist somit leicht zu erkennen, dass die RSM-Modelle gegenüber den k- ε Modellen rechenaufwendiger sind. Durch die Berücksichtigung der Anisotropie der Turbulenz sind die RSM-Modelle für drallbehaftete Strömungen gut geeignet (ANSYS 2011; Hochenauer 2005). Allerdings können in gewissen Strömungen selbst die RSM-Modelle keine deutlich besseren Ergebnisse gegenüber den k- ε Modellen liefern, da ähnliche Modellierungsprobleme für die Dissipationsrate ε vorliegen (Schwarze 2013).

4 Simulation des Verbrennungsprozesses

Um Verbrennungsprozesse mit vertretbarem Rechenaufwand zu simulieren, muss der detaillierte Reaktionsmechanismus, der die Verbrennung beschreibt, vereinfacht werden. Je nach Flammenart und Komplexität des bereits vereinfachten Reaktionsmechanismus kommen unterschiedliche Modelle für die Simulation zum Einsatz. Da die meisten technischen Verbrennungsprozesse turbulent sind und in dieser Arbeit die nicht-vorgemischte turbulente Flamme untersucht wurde, wird hier ausschließlich auf die Simulation von nicht-vorgemischten, turbulenten Flammen eingegangen.

Im Vergleich zu nicht-reaktiven Strömungen müssen bei der Simulation eines Verbrennungsprozesses (reaktive Strömung) auch die gleichzeitig ablaufenden chemischen Reaktionen berücksichtigt werden.

Die Herausforderung besteht nun darin, den Einfluss der turbulenten Strömung auf die Reaktionen und den chemischen Umsatz mit Hilfe von geeigneten Modellen zu berücksichtigen.

Es gibt bereits umfangreiche Literatur zu den verschiedenen Modellen, die alle ihre Vor- und Nachteile haben. In dieser Arbeit wurde das sogenannte Flamelet-Modell verwendet, da bereits einige Arbeiten (Hochenauer 2005; Mallaun 2013) gezeigt haben, dass es für den in dieser Arbeit untersuchten Fall gute Ergebnisse liefert.

4.1 Mischungsbruch

Für die Modellierung eines nicht vorgemischten Verbrennungsprozesses, unter Annahme von unendlich schnell ablaufenden chemischen Reaktionen, kann die Verbrennung auf das Mischen von Brennstoff und Oxidationsmittel reduziert werden (Zweistoffproblem). Aus dieser Betrachtung heraus ergibt sich der „mixed is burned“ Ansatz.

Die Mischung kann dabei über den sogenannten Mischungsbruch nach Gleichung (4.3) beschrieben werden. Analog zur Definition des Massenbruches w_i nach Gleichung (4.1) lässt sich der Elementarmassenbruch Z_i definieren (Gleichung (4.2)), der den Massenanteil eines Elements an der Gesamtmasse wie folgt angibt

$$w_i = \frac{m_i}{\sum_i m_i} \quad (4.1)$$

$$Z_i = \sum_{j=1}^S \mu_{ij} w_j \quad i = 1, \dots, M \quad (4.2)$$

In Gleichung (4.2) ist S die Anzahl der Stoffe und M die Anzahl der Elemente im Gemisch. Der Koeffizient μ_{ij} bezeichnet den Massenanteil des Elements i im Stoff j .

Mit der Annahme gleicher Diffusionskoeffizienten für alle Stoffe wird der Mischungsbruch unabhängig von dem betrachteten Element i (Warnatz et al. 2001). Diese Annahme ist abgesehen von einigen Ausnahmen näherungsweise erfüllt (Warnatz et al. 2001) bzw. für turbulente Strömungen akzeptabel, da die turbulente Konvektion von größerer Bedeutung ist, als die molekulare Diffusion (ANSYS 2011).

$$f_i = \frac{Z_i - Z_{i,ox}}{Z_{i,fuel} - Z_{i,ox}} \quad (4.3)$$

Die Indizes ox (Oxidator) und fuel (Brennstoff) in Gleichung (4.3) stehen für die beiden Stoffströme vor der Reaktion. Somit kann für jedes Element ein Mischungsbruch f_i aufgestellt werden.

Damit können die skalaren Variablen Speziesmassenbruch, Temperatur und Dichte als eindeutige Funktion des Mischungsbruches betrachtet werden (Hochenauer 2005).

Daraus folgt die Transportgleichung für den Massenbruch

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f}) + \nabla(\rho \vec{v} \bar{f}) = \nabla \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{f} \right) + S_m \quad (4.4)$$

worin S_m einen Quellterm darstellt. Dieser Term wird nur aktiv, wenn z. B. aus einer Flüssigphase ein Massenstrom in die Gasphase übertritt – also verdampft. Damit die turbulente Schwankungsbewegung ebenfalls berücksichtigt werden kann, wird die Transportgleichung der Varianz des Mischungsbruches f'^2 ebenfalls berücksichtigt

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \overline{f'^2}) + \nabla(\rho \vec{v} \overline{f'^2}) = \nabla \left(\frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \overline{f'^2} \right) + C_g \mu_t (\nabla^2 \bar{f}) - C_d \rho \frac{\varepsilon}{k} \overline{f'^2} \quad (4.5)$$

wobei gilt:

$$f = f' + \bar{f} \quad (4.6)$$

Die Parameter C_g , C_d und σ_t in Gleichung (4.6) sind dabei Modellparameter die in FLUENT Standardmäßig auf 0,85, 2,86 und 2,0 gesetzt sind.

4.2 Flamelet Modell

Betrachtet man eine nicht-vorgemischte turbulente Flamme bei sehr großer Damköhler-Zahl, so sind die Zeitskalen der turbulenten Mischung sehr viel größer als jene der chemischen Reaktion (Joos 2006). Auf dieser Betrachtung wird das Flamelet-Modell aufgebaut, in dem eine Trennung von der chemischen Dynamik und dem turbulenten Strömungsfeld vorgenommen (Joos 2006) wird. Somit beschreibt das Flamelet-Modell eine nicht-vorgemischte turbulente Flamme mit Hilfe einer Vielzahl an kleinen, dünnen, laminaren und lokal eindimensionalen Flämmchen (Hochenauer 2005).

Die laminare Flamme, die im FLAMELET-Modell zur Beschreibung eines Flamelets verwendet wird, ist in Abbildung 8 dargestellt.

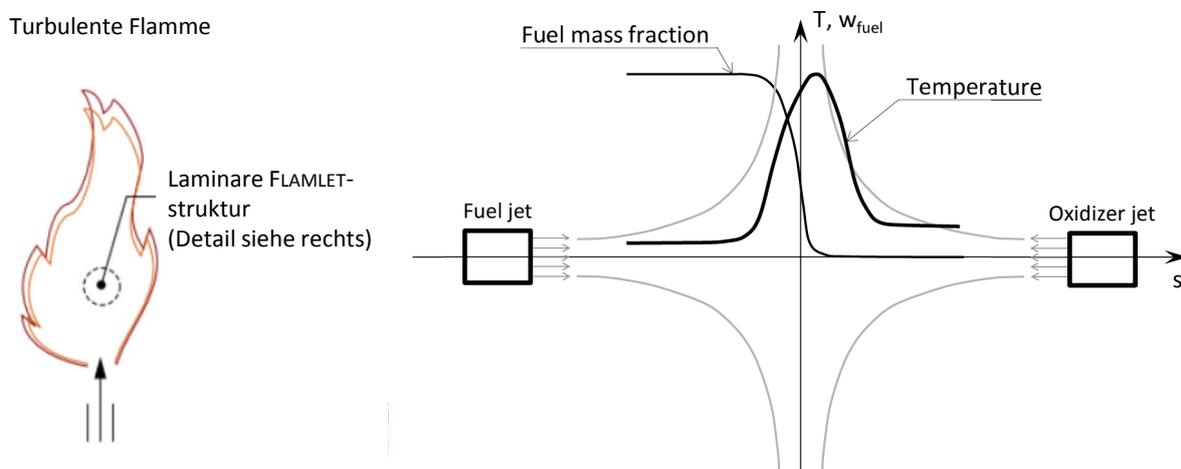


Abbildung 8: Laminare Gegenstromflamme. (ANSYS 2011; Poinso & Veynante 2005)

Hier sind Brennstoff und Oxidationsmittel achssymmetrisch im Gegenstrom angeordnet. In dieser Anordnung nimmt der Mischungsbruch f von links (eins an der Brennstoffdüse) nach rechts (null an der Oxidationsmitteldüse) ab. Die Temperatur steigt ausgehend von der Brennstofftemperatur in der Reaktionszone an und besitzt den maximalen Wert, wo annähernd der gesamte Brennstoff oxidiert ist. In Richtung Oxidationsmittel nimmt die Temperatur wieder bis zur Oxidationsmitteltemperatur ab. Bei konstanten Randbedingungen, wie Austrittsgeschwindigkeiten, Brennstoff- und Oxidationsmitteltemperatur etc. kann die Flamme sich kaum relativ zum Strömungsfeld bewegen, da in Richtung Brennstoff bzw. Oxidationsmittel jeweils ein Mangel des Reaktionspartners vorherrscht. Im Gegensatz dazu haben Austrittsgeschwindigkeiten und besonders die Turbulenz großen Einfluss auf die Form und Position der Flamme. (Poinso & Veynante 2005)

Eine Geschwindigkeitserhöhung hat damit auch auf das Erreichen des chemischen Gleichgewichtes einen Einfluss. Um in diesem Modell die Abweichung vom chemischen Gleichgewicht beschreiben zu können, wird die skalare Dissipation verwendet, welche die lokale Mischungsrate charakterisiert (Joos 2006). Somit kann die komplexe Chemie über die zwei Parameter f (Mischungsbruch) und skalare Dissipation beschrieben werden.

Um die Rechenzeit zu verkürzen, können über ein Preprocessing die Größen Temperatur, Spezieskonzentration und Dichte in Nachschlage-Tabellen berechnet und abgespeichert werden, auf die dann in der eigentlichen CFD-Strömungssimulation zurückgegriffen wird.

4.3 PDF-Ansatz (Probability Density Function)

Die Verbindung zwischen Strömungssimulation und Verbrennungssimulation ist durch den Einfluss der Turbulenz auf den Mischungsvorgang und damit auf die Verbrennung gegeben. Um diesen Einfluss zu berücksichtigen, wurde in dieser Arbeit auf das sogenannte Presumed PDF-Modell (Probability Density Function) zurückgegriffen, da dieses Modell bereits in vielen Arbeiten (Ren et al. 2013; Emami & Eshghinejad Fard 2012; Saario et al. 2005; Hochenauer 2005) zu guten Ergebnissen geführt hat.

Bei diesem Modell wird der Einfluss der Turbulenz auf den chemischen Umsatz über Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (Probability Density Function) beschrieben. Mathematisch ausgedrückt ergibt sich der Erwartungswert μ einer Zufallsvariable x aus dem Integral über das Produkt von Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $f(x)$ und Zufallsvariable x .

$$\mu = \int_{-\infty}^{\infty} x \cdot f(x) \cdot dx \quad \text{bzw.} \quad \mu = \sum_i x_i \cdot f(x_i) \quad (4.7)$$

Angewandt auf den Mischungsbruch (x ist gleich der Mischungsbruch f) und die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion des Mischungsbruchs geschrieben als $p(f)$ ergibt sich die Gleichung (4.7) zu

$$\mu = \int_{-\infty}^{\infty} f \cdot p(f) \cdot df \quad \text{bzw.} \quad \mu = \sum_i f_i \cdot p(f_i) \quad (4.8)$$

Die Bestimmung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion aus (4.8) kann grundsätzlich über drei Wege erfolgen:

(a) Experimentelle Ermittlung

Bei der experimentellen Ermittlung muss eine statistisch aussagekräftige Anzahl von Experimenten über den Lösungsraum ausgewertet werden. (Hochenauer 2005)

(b) PDF als Transportgröße

Bei diesem Ansatz wird die PDF als Transportgröße im Strömungsfeld aufgefasst. Durch entsprechende Transportgleichungen kann somit die PDF lokal ermittelt werden ist aber mit enormem Rechenaufwand verbunden (Hochenauer 2005).

(c) Annahme der PDF (Presumed-PDF)

In diesem Fall wird die PDF über vordefinierte Verteilungsfunktionen wie z. B. Gauß oder β -Funktion in Abhängigkeit der Turbulenz angenähert.

In Abbildung 9 ist auf der rechten Seite der zeitliche Verlauf des Mischungsbruchs f von einem Punkt im Strömungsfeld dargestellt.

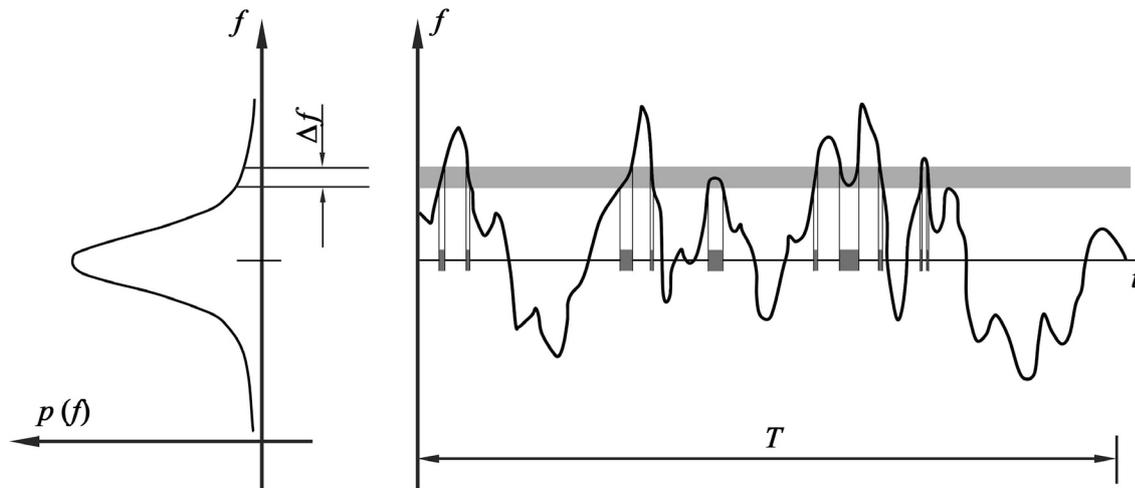


Abbildung 9: Grafische Beschreibung der Probability Density Function $p(f)$ (PDF). (ANSYS 2011)

Auf der linken Seite in Abbildung 9 ist die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $p(f)$ abgebildet. Dabei ist f für Bruchteile im Bereich von Δf . Der Wert unter der Funktion $p(f)$ entspricht dabei genau dem Zeitanteil den f im Bereich von Δf liegt. (ANSYS 2011). Damit kann die Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion $p(f)$ als Zeit aufgefasst werden, die das Fluid im Zustand f verbleibt. (ANSYS 2011)

Somit können über die PDF die vom Mischungsbruch abhängigen Mittelwerte der Temperatur, der Dichte und der Massenanteile berechnet werden.

4.4 Mehrphasenströmung

Mehrphasensysteme setzen sich aus mindestens zwei oder mehreren, nicht mischbaren Fluiden oder Fluiden und Feststoffen zusammen. Die Kontaktfläche zwischen den Fluiden bzw. Fluid und Feststoff wird als Phasengrenze bezeichnet und ist der Ort, an dem sich die Stoffwerte sprunghaft ändern.

4.4.1 Disperse Systeme

Disperse Systeme sind dadurch gekennzeichnet, dass eine zusammenhängende, kontinuierliche Phase vorliegt und eine nicht materiell verbundene, disperse Phase vorhanden ist. Beispiele dafür sind: Blasensäule, Spray, Wirbelschicht, etc.

Die Beschreibung disperser Systeme kann auf zwei unterschiedliche Arten erfolgen:

Euler'sche Betrachtung:

Bei diesem Ansatz wird die Phase als Ganzes betrachtet und über die Erhaltungsgleichungen beschrieben.

Lagrange'sche Betrachtung:

Hier wird das diskrete Einzelpartikel betrachtet und seine Bewegung mit Hilfe von Lagrange'schen Bewegungsgleichungen beschrieben.

Die Lagrange'sche Betrachtung hat Grenzen in ihrer Anwendbarkeit. So ist z. B. die Beladungsdichte auf $< 10\%$ beschränkt (ANSYS 2011). Liegt der Volumenanteil der dispersen Phase unter $1 \cdot 10^{-3}$, so kann nach GOUSBET (Gousbet & Berlemont 1999) der Einfluss der Tropfenkollision vernachlässigt werden. Diese beiden Kriterien sind bei einer Sprayverbrennung mit einem Partikelvolumenanteil von etwa $1 \cdot 10^{-4}$ bis $1 \cdot 10^{-5}$ (Hochenauer 2005) erfüllt, da der Nahbereich des Brenneraustrittes nicht von Interesse ist.

Bei der Simulation eines Kessels im Flüssigbrennstoffbetrieb ist die Beschreibung der dispersen Phase mit Hilfe der Lagrange'schen Betrachtung der Euler'schen Betrachtung aufgrund der einfacheren mathematischen Beschreibung vorzuziehen. Somit wird in dieser Arbeit die zweiphasige, polydisperse, reaktive und turbulente Strömung mit dem Euler/Lagrange-Ansatz beschrieben.

Euler/Lagrange'sche Betrachtung:

Bei dieser Betrachtungsweise wird die kontinuierliche Phase mit Hilfe der Kontinuums-Bilanzgleichungen beschrieben, die mit Phasenwechselwirkungstermen erweitert sind. Die disperse Phase hingegen wird über einen statistischen Ansatz beschrieben. Dabei werden die Bahnen einer statistisch aussagekräftigen Anzahl von Partikel berechnet, aus denen sich die Wechselwirkungsterme mit der kontinuierlichen Phase ableiten lassen.

Der Vorteil dieser Methode liegt darin, dass die Partikelbahnen durch gewöhnliche Differenzialgleichungen beschrieben werden.

Der Nachteil dieser Betrachtungsweise ist jedoch, dass nur ein geringer Beladungsanteil der dispersen Phase berücksichtigt werden kann.

4.4.2 Startbedingung der dispersen Phase

Bei der Verbrennung von flüssigem Brennstoff wird dieser beim Eintritt in die Brennkammer fein zerstäubt. Dies geschieht meist mit Hilfe von Dampf in einem innenmischenden „Twin Fluid Atomiser“ (Hochenauer 2005).

Eine schematische Schnittdarstellung durch solch einen „Twin Fluid Atomiser“ zeigt Abbildung 10.

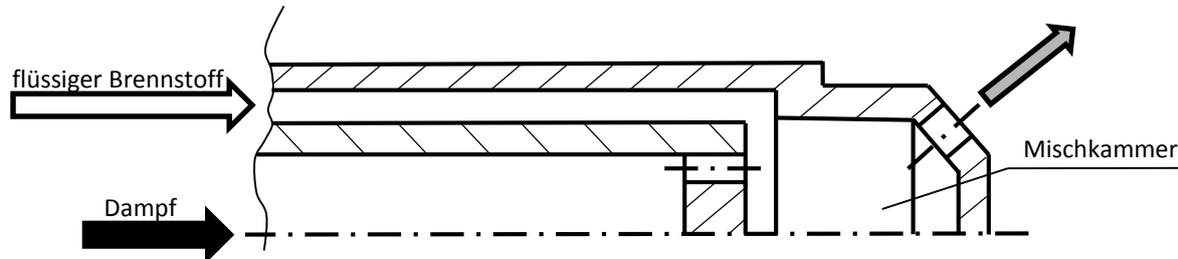


Abbildung 10: Schematischer Schnitt durch einen "Twin Fluid Atomiser".

Der Dampf für die Zerstäubung wird meist mit hohem Druck (Auskopplung aus dem Dampfkreislauf des Dampferzeugers) in die Mischkammer eingebracht. Beim Austritt aus den Düsenlöchern baut sich der Druck in Geschwindigkeitsenergie ab und der Dampf expandiert und unterstützt dabei die Zerstäubung des flüssigen Brennstoffes. Die detaillierte Beschreibung einer solchen Zerstäubung ist z. B. in (Khavkin 2004) beschrieben.

Die Simulation einer solchen Zerstäubung steht erst am Anfang. In der Literatur gibt es bereits einige Modelle, die zum Teil bereits auch in CFD-Programme wie Fluent implementiert sind. Die Literaturrecherche zeigte aber, dass die Vorhersage der Tropfengrößenverteilung mit Hilfe von einfachen Modellen noch keine guten Ergebnisse liefert (Broukal & Hájek 2011). Die Anwendung von komplexeren Modellen ist aufgrund der großen Berechnungsgebiete wie bei Gesamtkesselsimulationen und bei begrenztem Rechenaufwand noch nicht möglich.

Abhilfe kann dadurch geschaffen werden, indem die Tropfen bereits mit einer vorgegebenen Tropfengrößenverteilung aufgegeben werden (Hochenauer 2005; Saario et al. 2005). Um das Gleichungssystem der Lagrange'schen Bewegungsgleichungen zu schließen, müssen auch die Anfangsbedingungen bekannt sein. Hierfür gibt es entsprechende mathematische Modelle, die ein Abschätzen der entsprechenden Anfangsbedingungen ermöglichen.

4.4.3 Startgeschwindigkeit und Richtung

Für die Abschätzung der Startgeschwindigkeit der Tropfen sind die Bedingungen im Zerstäuber und in der Brennkammer von Bedeutung. Ergibt sich ein überkritisches Druckverhältnis, so kann angenommen werden, dass die Durchströmung der Düse kritisch erfolgt.

Ausgehend von dieser Annahme lässt sich die Schallgeschwindigkeit eines zweiphasigen Fluids mit Hilfe der Gleichung (4.9) nach (Chawla 1985) abschätzen.

$$\frac{1}{c_m^2} = \frac{1}{c_g^2} \cdot \left[1 + (1 - \alpha) \cdot \left(\frac{\rho_l}{\rho_g} - 1 \right) \right] + \frac{1 - \alpha}{c_l^2} \cdot \left[1 + \alpha \cdot \left(\frac{\rho_g}{\rho_l} - 1 \right) \right] \quad (4.9)$$

$$\alpha = \frac{\dot{V}_{gas}}{\dot{V}_{mix}} \quad (4.10)$$

Dabei ist c_m die Schallgeschwindigkeit des Zweiphasengemisches, c_g die Schallgeschwindigkeit der gasförmigen und c_l die der flüssigen Phase, ρ_g und ρ_l die Dichte der gasförmigen- bzw. flüssigen Phase, \dot{V}_{gas} der Volumenstrom der Gasphase und \dot{V}_{mix} der gesamte Volumenstrom beider Phasen.

Der Austritt der dispersen Phase wurde in dieser Arbeit normal zur Austrittsöffnung vorgegeben.

4.4.4 Tropfengrößenverteilung

Ergebnisse experimenteller Untersuchungen von Tropfengrößenverteilungen sind z. B. in (Khavkin 2004) zu finden. Die experimentellen Werte werden dann über Verteilungsfunktionen angenähert und in der Simulation als Randbedingungen festgelegt. In dieser Arbeit wurde die Tropfengrößenverteilung aus der Arbeit von HOCHENAUER (Hochenauer 2005) übernommen, da die Ausgangsbedingungen dieser Arbeit und der von HOCHENAUER große Parallelen aufweisen. Die Parameter der Rosin Rammler Verteilungsfunktion aus (Hochenauer 2005), die in dieser Arbeit verwendet wurden, sind in Tabelle 4 angegeben.

Tabelle 4: Parameter der Rosin Rammler Verteilungsfunktion für die Tropfengrößenverteilung.

Mittlerer Durchmesser \bar{d}	Verteilungsparameter n	min. Durchmesser d_{min}	max. Durchmesser d_{max}
52 μm	2,881	10 μm	100 μm

4.4.5 Einfluss der kontinuierlichen Phase auf die disperse Phase und umgekehrt

Bei den meisten technischen Mehrphasenströmungen stehen die Phasen in ständiger Wechselwirkung. Im Fall der Sprayverbrennung sind die beiden Phasen durch Stoffübergang von der dispersen in die kontinuierliche Phase, Energieübertragung (Wärmeleitung und Strahlung), sowie Impulsaustausch gekoppelt. Werden solche Phänomene berücksichtigt so spricht man von „coupling“.

Konkret wurden in dieser Arbeit folgende Einflüsse berücksichtigt:

- Discret Random Walk (DRW) Modell (ANSYS 2011) für den Einfluss der Turbulenz der kontinuierlichen Phase auf die disperse Phase
- Partikel – Strahlungsinteraktion
- Impulsaustausch (two way coupling)

4.5 Berücksichtigung der Strahlung

Die durch Strahlung übertragene Energie (Wärmestrahlung) setzt sich aus elektromagnetischen Wellen im Infrarotbereich zusammen (Joos 2006). Der Anteil der Strahlung am gesamten Wärmestrom hängt stark von der Temperatur ab. Für die Berücksichtigung der Strahlung in einer Simulation gibt es viele Modelle. Allerdings ist die Anwendbarkeit oft nur für gewisse Bereiche der optischen Dicke geeignet.

4.5.1 Optische Dicke

Die optische Dicke ist ein Maß für die Abnahme der Strahlungsintensität bei dem Durchtreten eines Mediums mit der Dicke L .

Sie setzt sich wie folgt zusammen:

$$E_{\lambda} = (a_{\lambda} + \sigma_s) \cdot L \quad (4.11)$$

wobei gilt:

$E_{\lambda} \ll 1$ optisch dünn bzw. $E_{\lambda} \gg 1$ optisch dick

In Gleichung (4.11) ist σ_s der Streukoeffizient und a_{λ} der Absorptionskoeffizient.

Optisch dünn bedeutet daher, dass das Gas im entsprechenden Frequenzbereich diatherm ist und somit die Strahlung primär mit den Wänden interagiert. Bei optisch dicken Gasen hingegen wird Strahlung von den Gasen im entsprechenden Frequenzbereich absorbiert und emittiert.

4.5.2 Absorptionskoeffizient

Für die Berechnung des Absorptionskoeffizienten wird in der Verbrennungssimulation häufig auf das Weighted-Sum-of-Gray-Gases Model (WSGGM) zurückgegriffen (Broukal & Hájek 2011; Schneider & Bogdan 2007; Mallaun 2013), da es einen guten Kompromiss zwischen Rechenaufwand und Genauigkeit darstellt (ANSYS 2011). Die Annahme des WSGGM besteht darin, dass ein globaler Emissionsgrad über die Länge s wie in Gleichung (4.12) berechnet werden kann.

$$\varepsilon = \sum_{i=0}^I b_i(T) \cdot (1 - e^{-a_i \cdot p \cdot s}) \quad (4.12)$$

Darin ist b ein temperaturabhängiger Gewichtungsfaktor des i -ten fiktiven Graugases mit dem der Einfluss des jeweiligen grauen Gases berücksichtigt wird. Der Klammerausdruck auf der rechten Seite ist der Emissionsgrad des i -ten fiktiven Graugases, worin α_i der Absorptionskoeffizient des i -ten Graugases, p die Summe der Partialdrücke aller absorptionsfähigen Gase und s die Weglänge ist, die im Fall des „WSGGM domainbased“ Modells über die gleichwertige Schichtdicke berechnet wird (ANSYS 2011). Die gleichwertige Schichtdicke s_{gl} berechnet sich aus

$$s_{gl} = f \cdot \frac{4 \cdot V}{A} \quad \text{mit} \quad f \approx 0,9, \quad (4.13)$$

wobei V und A das Volumen bzw. die Oberfläche des Gasraumes sind. Mit dem Korrekturfaktor f in Gleichung (4.13) wird die Geometrie und der Druck berücksichtigt. Dieser kann bei üblichen Brennkammern mit $f = 0,9$ angenommen werden (Hochenauer 2013).

Der Absorptionskoeffizient a kann in weiterer Folge über

$$a = -\frac{\ln(1 - \varepsilon)}{s} \quad (4.14)$$

berechnet werden, wobei wiederum im Fall des „WSGGM domainbased“ Modells s für die gleichwertige Schichtdicke s_{gl} steht. (ANSYS 2011)

In dieser Arbeit wurde für die Berechnung des Absorptionskoeffizienten des Gases das „WSGGM domainbased“ verwendet.

4.5.3 P1-Strahlungsmodell

In FLUENT steht eine Vielzahl an Strahlungsmodellen zur Auswahl. Jedes einzelne hat dabei seine Vor- und Nachteile bzw. auch seine Gültigkeitsbereiche. Ein entscheidendes Kriterium für die Gültigkeit ist die optische Dicke, da einige Modelle nur für optisch dünne oder dicke Gase gute Ergebnisse liefern.

Wie bereits in Kapitel 1 erläutert, wurde in dieser Arbeit das P1-Strahlungsmodell verwendet, weshalb es hier kurz erläutert werden soll.

Das P1-Modell basiert auf dem PN-Modell, bei dem die Ausbreitung der Strahlungsintensität durch orthogonale Funktionsreihen auf der Einheitskugel bilanziert wird (Epple et al. 2009). Es ist für Gase mit einer optischen Dichte > 1 geeignet (Martens 2013) und es kann damit anisotrope Streuung berücksichtigt werden, wobei durch die Standardeinstellung in FLUENT eine isotrope Streuung berücksichtigt wird (ANSYS 2011). Bei der mehrphasigen Simulation einer partikelbeladenen Strömung kann mit dem P1-Modell der Strahlungsaustausch zwischen Gas und Partikel berücksichtigt werden (ANSYS 2011). Dabei ist zu beachten, dass in FLUENT bei Anwesenheit von Partikeln die Streuung in der Gasphase ignoriert wird (ANSYS 2011).

5 Einzelbrennersimulation

Der Brenner dient der Freisetzung der im Brennstoff gebundenen chemischen Energie zur Bereitstellung von Wärme. Die Anforderungen an den Brenner können dabei je nach Anwendung, sehr unterschiedlich sein. Nachstehend wird auf Brenner für den industriellen Einsatz in Kraftwerksanlagen eingegangen.

In der Industrie kommen unterschiedliche Bauarten von Brennern zum Einsatz. Einfluss auf die Bauart und Geometrie haben dabei unter anderem die Brennstoffeigenschaften (gasförmig, flüssig, fest, Heizwert etc.), die Luftzufuhr (vorgemischt, nicht-vorgemischt, gestufte Luftzufuhr etc.), der Leistungsbereich sowie die Regelbarkeit des Brenners.

Eine wichtige Aufgabe des Brenners bei einer nicht-vorgemischten Flamme, ist die Bildung eines zündfähigen Gemisches. Dies ist besonders bei flüssigen und festen Brennstoffen eine Herausforderung. Die Bereitstellung der Luft und die eventuelle Aufteilung in Primär- und Sekundärluft gehört ebenfalls zu den wichtigen Aufgaben eines Brenners. Die Luft wird dabei meist über Gebläse dem Brenner zugeführt und über ein so genanntes Luftregister mit Drall beaufschlagt. Eine weitere wichtiger Punkt ist die Stabilisierung der Flamme. Dies kann z. B. über Staukörper oder verdrallte Strömungen erfolgen. In Abbildung 11 ist ein sogenannter Low-NO_x Brenner mit Luftstufung dargestellt.

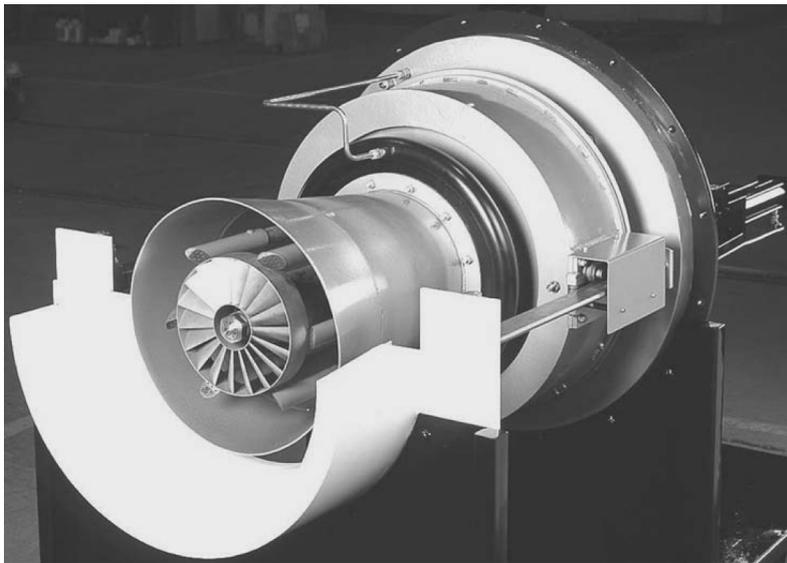


Abbildung 11: Low-NO_x Brenner mit Luftstufung. (Baukal et al. 2003)

5.1 Simulierter Gas/Öl-Kombibrenner

Der in dieser Arbeit simulierte Brenner ist ein Gas/Öl-Kombibrenner. Die Gesamtlänge des Brenners beträgt 1780 mm und der Muffelaustrittsdurchmesser beträgt 815 mm. Die Betriebsdaten des Brenners für die zwei verschiedenen Brennstoffe sind in Tabelle 5 aufgelistet.

Tabelle 5: Betriebsdaten des Brenners.

Brennstoff	flüssig	gasförmig
max. Brennstoffmenge	2769 kg/h	4880 Nm ³ /h
min. Brennstoffmenge	923 kg/h	973 Nm ³ /h
Regelbereich	1:3	1:5
Zerstäubung	Dampf	-

Der Brennstoff, sowohl flüssig als auch gasförmig, ist ein Nebenprodukt aus der Verarbeitung von Rohöl. Der gasförmige Brennstoff zeichnet sich durch einen hohen H₂O-Anteil aus und ist nicht mit herkömmlichem Erdgas zu vergleichen. Der flüssige Brennstoff setzt sich zum größten Teil aus langkettigen Kohlenwasserstoffverbindungen und noch nennenswerten Anteilen von 1 bis 6 Gew.-% an Schwefel und Stickstoff zusammen.

Die Zusammensetzungen des in der Simulation verwendeten Oxidationsmittels und des gasförmigen Brennstoffes sind in Tabelle 6 angegeben.

Tabelle 6: Gas- und Oxidationsmittel- (Luft) Zusammensetzung in der Simulation.

Spezies	CH ₄ [Vol.-%]	H ₂ O [Vol.-%]	O ₂ [Vol.-%]	N ₂ [Vol.-%]
Gas	0,649	0,284	-	0,067
Oxidationsmittel (Luft)	-	0,01	0,21	0,78

Der flüssige Brennstoff wird bei der Modellierung über die Eigenschaften von flüssigem Schweröl in der flüssigen Phase und in der Gasphase über n-Heptan (C₇H₁₆) angenähert. Die genaue Modellierung und auch die physikalischen Eigenschaften des flüssigen Brennstoffes werden im Kapitel (5.2.6) näher erläutert.

Die Luftführung, sowie die Anordnung des Luftregisters ist in Abbildung 12 dargestellt.

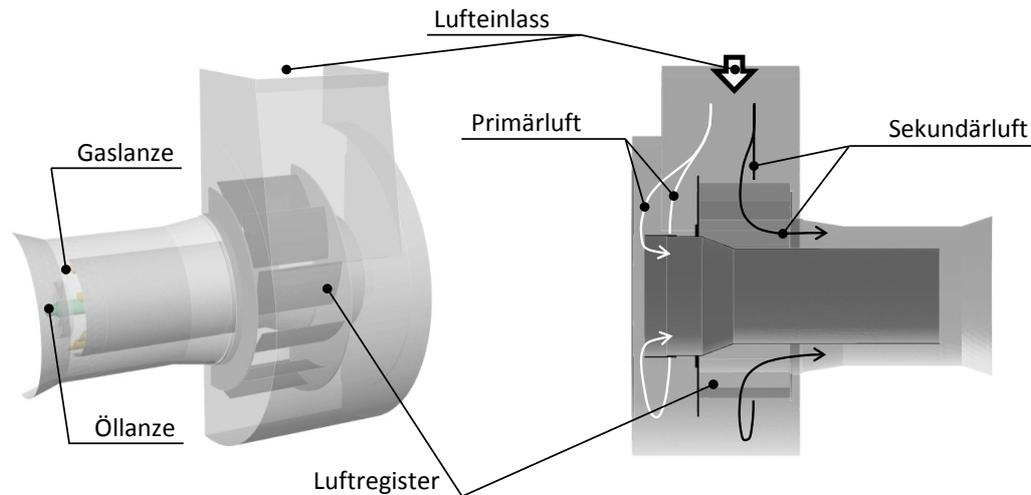


Abbildung 12: Luftführung und Anordnung des Luftregisters.

Der Lufteinlass in den Brenner erfolgt einseitig radial, wobei die Aufteilung in Primär- und Sekundärluft über einen Schieber beim Primärlufteintritt geregelt wird. In allen Untersuchungen in dieser Arbeit wurde die Position des Schiebers nie verändert. Der Sekundärluft wird über radial angeordnete Schaufeln ein Drall aufgeprägt. Zwei fiktive Stromlinien der Primär- und Sekundärluft sind in Abbildung 12 auf der rechten Seite dargestellt. Auf der linken Seite in Abbildung 12 ist für das bessere Verständnis das Luftregister räumlich dargestellt.

In Abbildung 13 ist eine Schnittdarstellung des modellierten Brenners dargestellt.

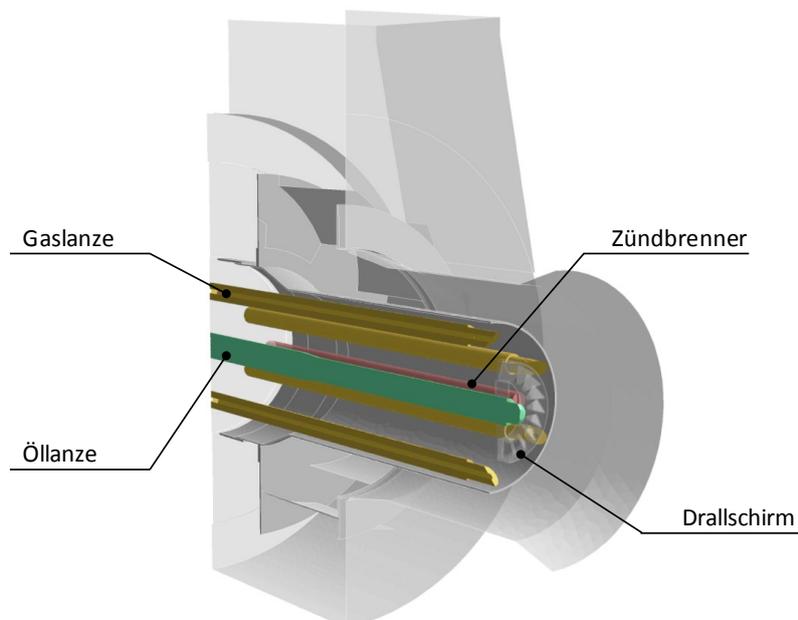


Abbildung 13: Schnittdarstellung des Brenners mit farblich hervorgehobener Öllanze (grün), Gaslanzen (gelb) und Zündbrenner (rot).

Der Brennstoff wird über Lanzen eingebracht. Im Fall des flüssigen Brennstoffes erfolgt dies über eine konzentrisch angeordnete Lanze, die in Abbildung 13 in grün dargestellt ist. Im Fall des gasförmigen

Brennstoffes erfolgt dies über sechs gleichmäßig, am Umfang radial aufgeteilte Gaslanzen, die in Abbildung 13 in gelb dargestellt sind. Der auf der Öllanze angebrachte Drallschirm dient der Drallaufprägung auf die Primärluft.

Beim Anfahren des Brenners erfolgt die Zündung über einen Zündbrenner, der zwischen zwei Gaslanzen und etwas in die Mitte versetzt angebracht ist und in Abbildung 13 in rot dargestellt ist.

5.2 Einzelbrenneruntersuchungen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Einzelbrenneruntersuchungen präsentiert. Im ersten Teil werden die Ergebnisse einer 2D-Simulation des Gaslanzenaustrittes gezeigt. Anhand der 2D-Untersuchungen wurde überprüft, ob der Gasaustritt aus den 21 Löchern mit einer flächenäquivalenten Austrittsöffnung angenähert werden kann und ob der Gasaustritt normal zur Austrittsöffnung erfolgt.

Um die Ergebnisse zu vergleichen und Schieflagen der Flamme beurteilen zu können, ist die Kenntnis des Strömungsprofils von großer Bedeutung. Im zweiten Teil werden aus diesem Grund die Luftaufteilung im Brenner und der Zusammenhang zwischen aufgegebenem Luftmassenstrom und Strömungsprofil untersucht. Im dritten Teil wird der Einfluss der Wandtemperatur und des Emissionsgrades der Modellbrennkammerwand auf den Verbrennungsprozess untersucht.

Aufbauend auf die vorangegangenen Untersuchungen werden im vierten Teil die Ergebnisse der Einzelbrenneruntersuchungen im Gasbetrieb gezeigt und analysiert. Im fünften Teil werden die Simulationsergebnisse der Einzelbrenneruntersuchung im Flüssigbrennstoffbetrieb gezeigt.

5.2.1 2D-Simulation des Gaslanzenaustrittes

Um die 3D-Brennersimulation zu vereinfachen, wird im gasgefeuerten Betrieb das aus den Gaslanzen austretende Gas durch Quellterme auf der Austrittsfläche der Gaslanze abgebildet. Dabei werden die Bohrungen durch eine flächenäquivalente zentrierte Aufgabenzone angenähert.

Um in der Simulation den Eintritt des Gases als Quellterm korrekt abzubilden, wurde der Einfluss des „Düseneinsatzes“ auf das Strömungsprofil und dessen Ausrichtung in einer separaten 2D-Simulation untersucht, um die oben genannten Annahmen zu validieren.

Die Geometrie der Austrittsöffnung der Gaslanze beeinflusst das Strömungsprofil des Gases und dessen Ausrichtung.

Für die 2D-Simulation wurde ein Schnitt, entsprechend Abbildung 14, durch den Austrittsbereich der Gaslanze gelegt und die erhaltene Schnittebene als Simulationsebene verwendet.

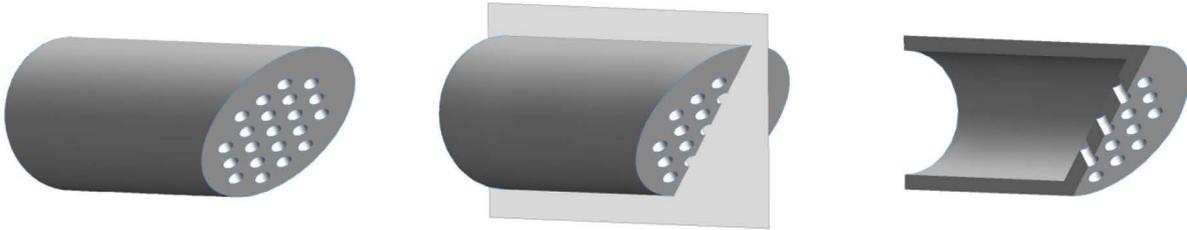


Abbildung 14: Herleitung der 2D-Simulationsebene des Gaslanzenaustrittes.

Die Gasaustrittsöffnungen am Gaslanzenaustritt sind in einer 45° Schräge zu Hauptströmungsrichtung angeordnet. Sie setzt sich aus 21 Löchern, mit je 5 mm Durchmesser, normal zur 45° Schräge gebohrt, zusammen. Dieser „Düseneinsatz“ hat eine Wandstärke von 8 mm. Die Gaslanze hat einen Innendurchmesser von 38,89 mm und eine Wandstärke von 4,5 mm.

Da die so gewonnene Fläche nur 3 der 21 Löcher abbildet, wurde aus dem vorgegebenen Volumenstrom in der Gaslanze die Strömungsgeschwindigkeit im freien Querschnitt des „Düseneinsatzes“ bei 21 Löchern berechnet. Um dieselben Austrittsbedingungen bei 3 Löchern zu modellieren, wurde die Strömungsgeschwindigkeit im freien Querschnitt des „Düseneinsatzes“ bei 3 Löchern mit der bei 21 Löchern gleichgesetzt. Der sich daraus ergebende Massenstrom wurde als Randbedingung bei der Simulation verwendet. Über dieselbe Vorgehensweise wurde die Randbedingung für die Primärluft, welche die Gaslanze umströmt, ermittelt.

Da die Gasgeschwindigkeiten in den Düsen bereits in der Größenordnung von 0,3 x Ma sind, wurde in der Simulation die Kompressibilität des idealen Gases berücksichtigt. Dabei steht Ma für die Machzahl und berechnet sich aus Gleichung (3.1) mit

$$M = \frac{u}{c} \quad (5.1)$$

wobei u die Strömungsgeschwindigkeit und c_s die Schallgeschwindigkeit ist, die sich für ein ideales Gas folgendermaßen berechnen lässt:

$$c = \sqrt{\kappa RT} \quad \text{mit} \quad \kappa = \frac{c_p}{c_v}. \quad (5.2)$$

In Gleichung (5.2) ist κ der Isentropenexponent, der sich aus dem Verhältnis von c_p und c_v , den spezifischen Wärmekapazitäten bei konstantem Druck und konstantem Volumen, berechnet.

Die bei der Simulation verwendeten Modelle sind in Tabelle 7 aufgelistet.

Tabelle 7: Verwendete Modelle für die 2D-Simulation des Gaslanzenaustritts.

Turbulenzmodell	Wall-function	Reaktion	Strahlungs-Model	Adiabate Wände	Inlet	Outlet	in/kompressibel
standard k- ϵ	Enhanced wall function	nein	nein	ja	Massflow inlet	Pressure outlet	kompressibel

Da bei der Simulation lediglich das Strömungsverhalten des Gases im Nahbereich des Austritts untersucht werden soll, wurden keine Reaktion und dementsprechend auch keine Strahlung berücksichtigt. Die umgebenden Wände wurden als adiabate Wände simuliert. Die Turbulenz wurde mit dem Standard k- ϵ Modell abgebildet und die Wandeinflüsse über die Enhanced Wall Function berücksichtigt.

Bei der Netzgenerierung für die 2D-Gaslanzen-Simulation wurde besonderes Augenmerk auf den Nahbereich des Gasaustritts gelegt. Für die vollständige Entwicklung des Strömungsprofils wurde eine Einlaufänge berücksichtigt. Ebenso wurde eine entsprechende Auslaufänge bedacht, um den Einfluss der Simulationsgrenze auf das Ergebnis zu minimieren. Abbildung 15 gibt einen Überblick über das erstellte Netz und den lokal feiner aufgelösten Gasaustrittsbereich.

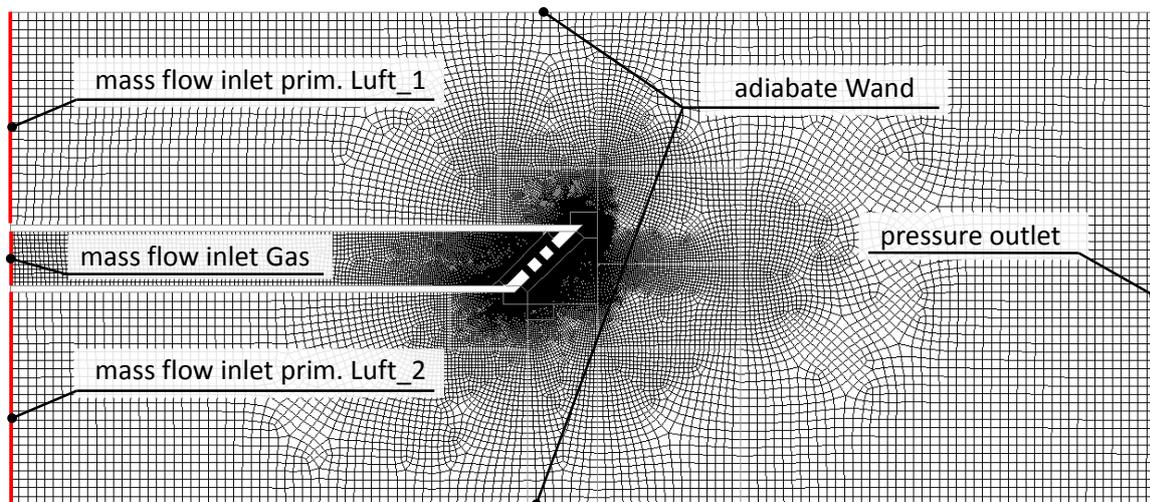


Abbildung 15: Überblick über die Position der Randbedingungen, sowie deutlich feinere Gitterauflösung im Nahbereich des Gaslanzenaustritts.

Bei der Vernetzung wurde ein quad-pave Gitter verwendet, das ausgehend vom Gaslanzenaustritt mit Wachstumsfunktionen belegt wurde. So ist es möglich lokal ein sehr feines Gitter zu erzeugen, ohne dabei unnötig viele Rechenzellen für die gesamte Simulation zu verwenden.

Tabelle 8 beinhaltet Geometrie- und Gitterinformationen für die 2D-Gaslanzen-Simulation.

Tabelle 8: Geometrie- und Gitterinformationen für das Gitter der 2D-Gaslanze.

Bezeichnung	Breite [mm]	Höhe [mm]	Fläche [m ²]	Zellenanzahl [#]	Netzdichte [#/m ²]
2D-Gaslanze	800	347,9	0,28	73066	2,61E+05

Der schlechteste Equi Angle Skewness-Wert für ein KV liegt hier bei 0,85, der schlechteste Aspect Ratio-Wert liegt bei 7,98. Die Lage der zwei Elemente ist oben, in der inneren Ecke der Gaslanze und hat damit einen vernachlässigbaren Einfluss auf die Genauigkeit der Simulationsergebnisse.

Der Lasteinfluss wurde durch zwei separate Simulationen mit einmal 1400 Nm³/h und einmal 2400 Nm³/h Gas berücksichtigt. Die zwei Werte von 1400 Nm³/h und 2400 Nm³/h Gas sind dabei repräsentative Lastfälle für den Gesamtkessel. Die dabei eingestellten Randbedingungen sind in Tabelle 9 zusammengefasst.

Tabelle 9: Die in- und outlet Randbedingungen für die 2D-Simulation des Gaslanzenaustrittes.

Gasmenge [Nm ³ /h]	mass flow inlet Gas [kg/s]	Temperatur Gas [K]	mass flow inlet prim. Luft_1 [kg/s]	mass flow inlet prim. Luft_2 [kg/s]	Temperatur Luft_1 und Luft_2 [K]
1400	1,13	503	1,24	1,24	323
2400	2	503	2,3	2,3	323

Die nachstehenden Abbildungen zeigen die Simulationsergebnisse der beiden Betriebszustände des Brenners bei 1400 Nm³/h bzw. 2400 Nm³/h Gas.

Abbildung 16 zeigt den Betrag der Geschwindigkeit im gesamten Simulationsgebiet in beiden Betriebszuständen. Da nur die Simulationsergebnisse des Gasaustritts direkt an der Gaslanze von Interesse sind, kann das Anliegen des Gasstrahls am unteren Rand des Simulationsgebietes vernachlässigt werden.

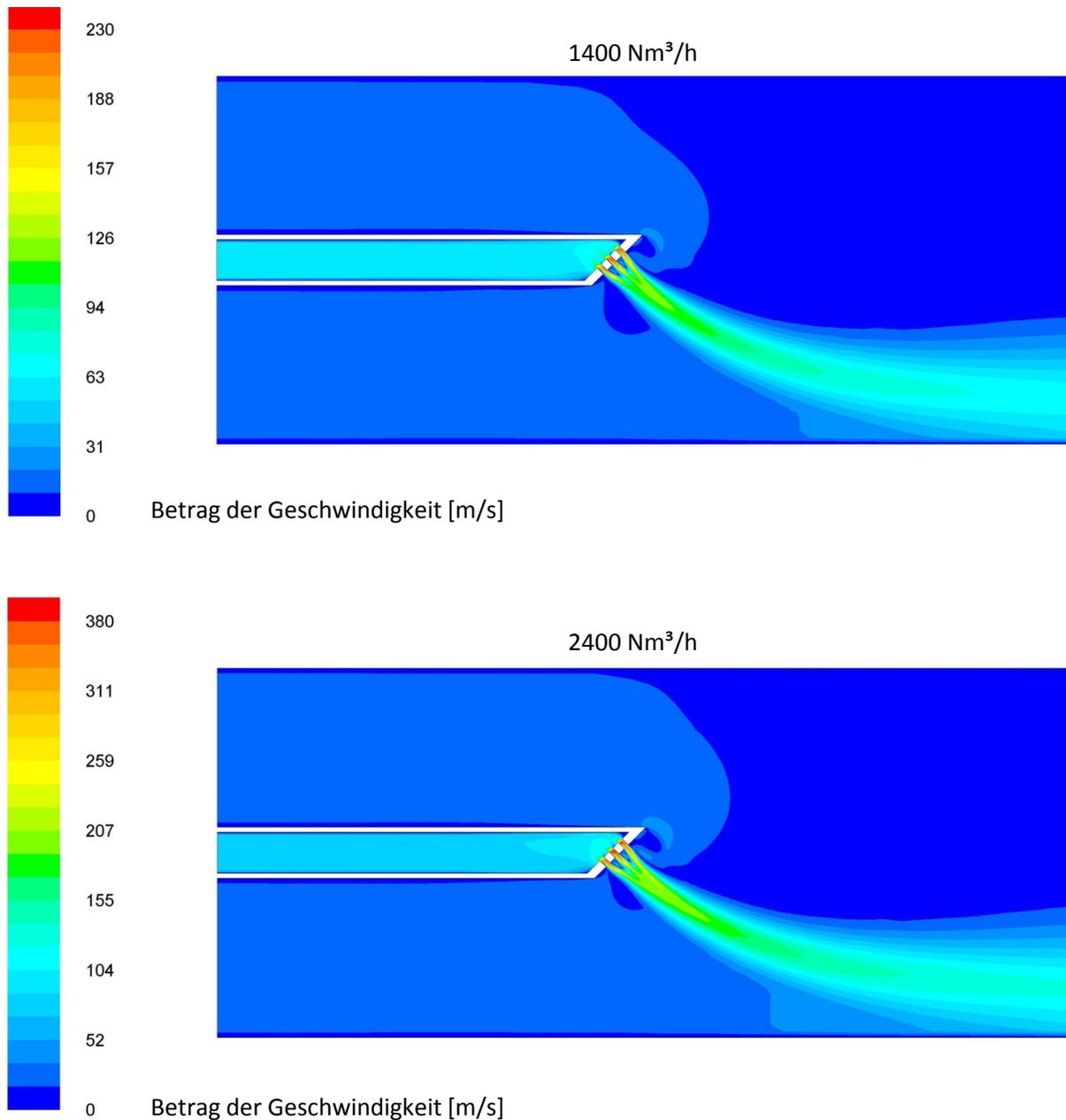


Abbildung 16: Vergleich der Geschwindigkeiten bei 1400 Nm³/h und 2400 Nm³/h Gas im gesamten Berechnungsgebiet.

Der Geschwindigkeitsplot zeigt keine großen Unterschiede zwischen den zwei Betriebszuständen in den Strömungsprofilen. Lediglich die Geschwindigkeiten sind bei 2400 Nm³/h höher als bei 1400 Nm³/h im selben betrachteten Gebiet.

Durch den deutlich höheren Impuls gegenüber der umgebenden Strömung, resultiert ein sehr kompakter, sich langsam aufweitender Strahl.

In Abbildung 17 sind die Beträge der Geschwindigkeiten im Austrittsbereich vergrößert dargestellt, wobei hier für beide Ausschnitte dieselbe Geschwindigkeitsskalierung verwendet wurde.

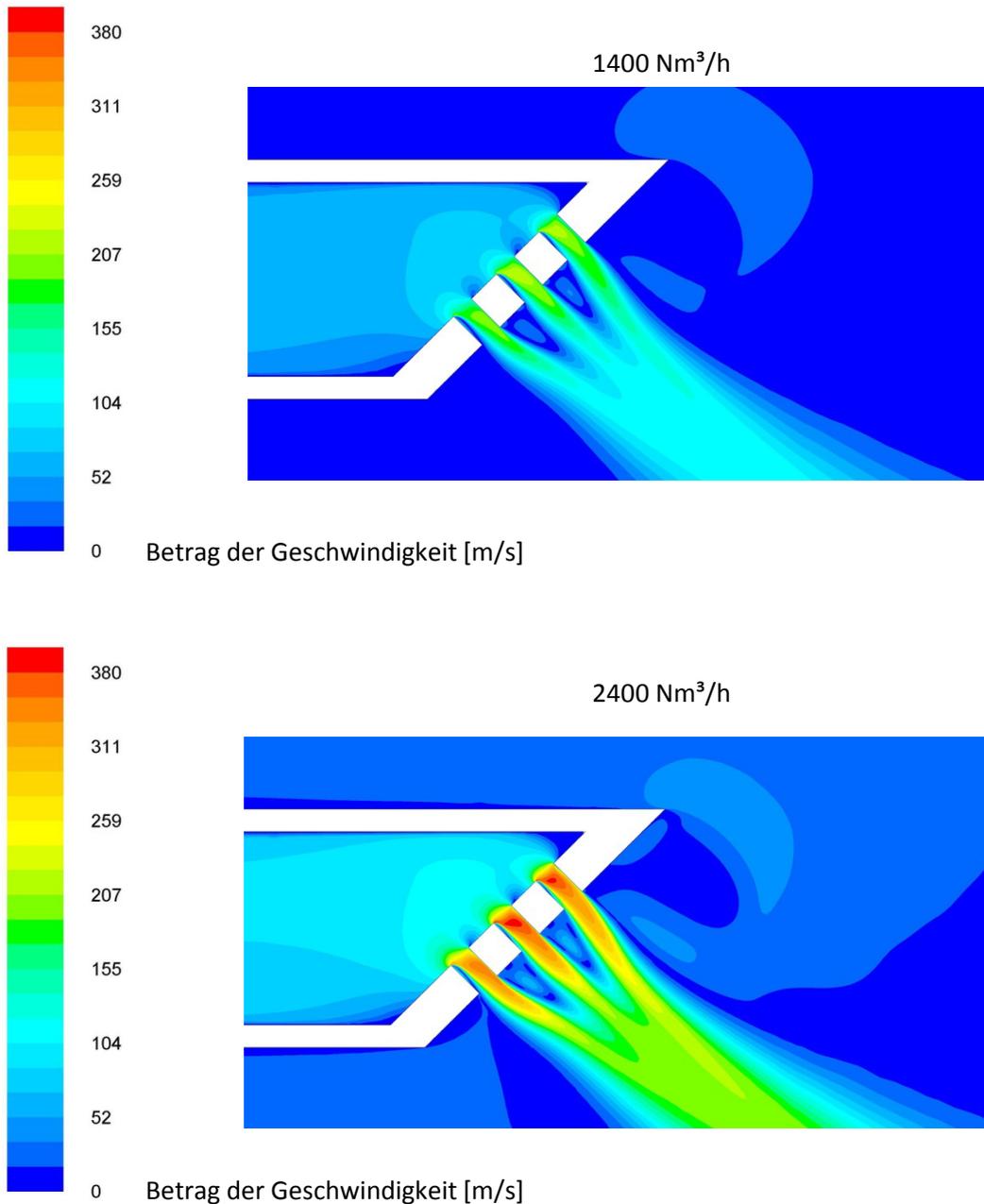


Abbildung 17: Vergleich der Geschwindigkeiten bei 1400 Nm³/h und 2400 Nm³/h Gas im Austrittsbereich bei gleicher Skalierung der Geschwindigkeit.

Es ist deutlich zu erkennen, dass sich die Strahlen in beiden Fällen kurz nach dem Austritt aus den 3 Öffnungen zu einem Strahl vereinigen. Im Betriebszustand bei 2400 Nm³/h Gas sind im Bereich der oberen Kante der Gaslanze größere Geschwindigkeitsgradienten zu sehen.

Die Vektordarstellung in Abbildung 18 zeigt, dass die Strömung zum größten Teil normal zur Austrittsfläche austritt. Die Unterschiede zwischen den zwei Betriebszuständen sind eine größere Austrittsgeschwindigkeit und eine etwas schmaler ausgeprägte Rückströmungszone im Düsenloch bei $2400 \text{ Nm}^3/\text{h}$.

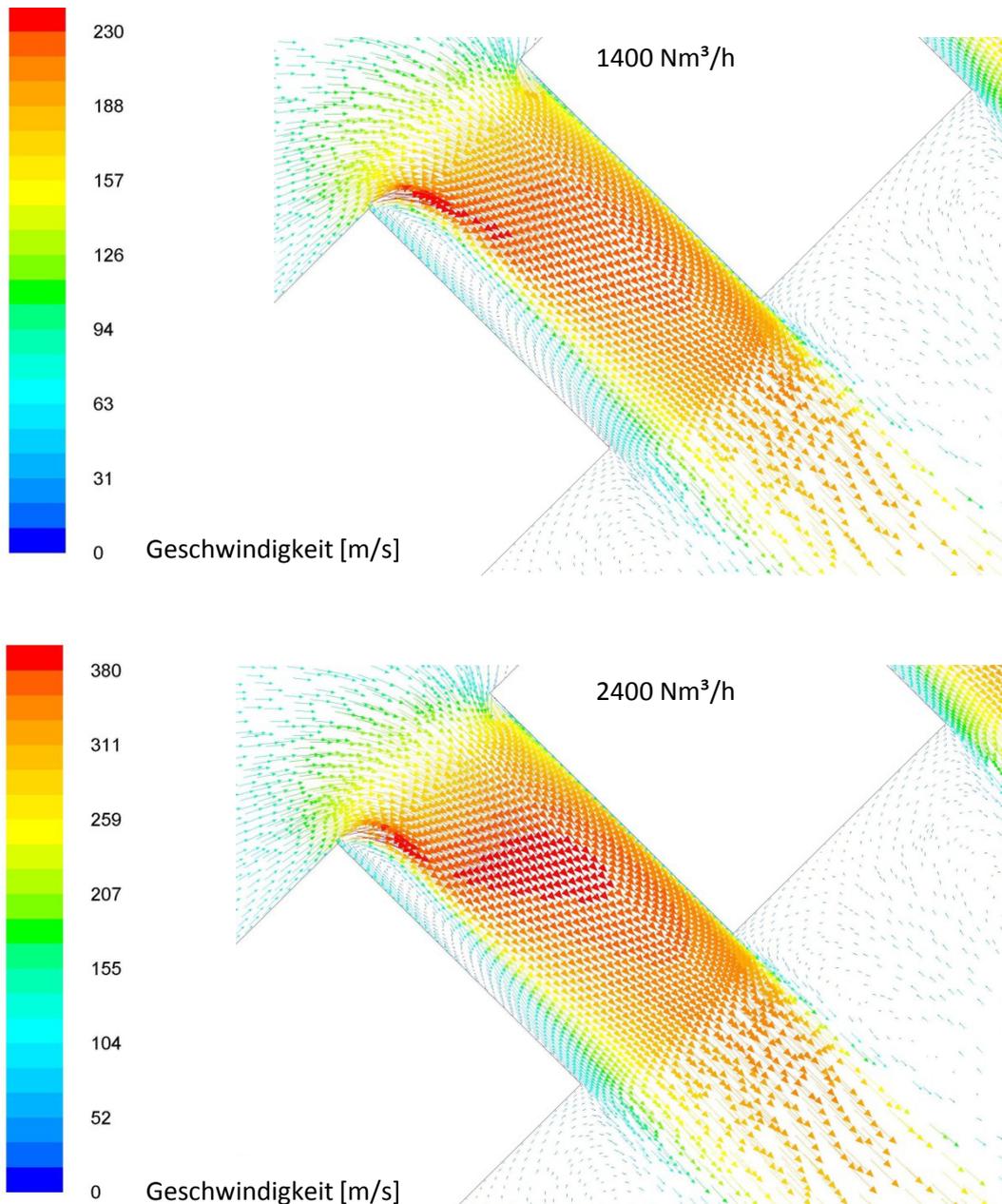


Abbildung 18: Geschwindigkeitsvektoren im Austrittsbereich bei $1400 \text{ Nm}^3/\text{h}$ und $2400 \text{ Nm}^3/\text{h}$ Gas.

Um den Einfluss der 21 Löcher auf die Vermischung des Gases mit der umströmenden Primärluft zu untersuchen, wurde der Molenbruch von CH_4 als anteilmäßig größte Komponente des Gases herangezogen.

Der Kontourplot des Molenbruchs von CH_4 in Abbildung 19 zeigt, dass nur eine langsame radiale Vermischung vorliegt. Es sei hier noch einmal erwähnt, dass bei dieser Simulation keine Reaktion und damit keine Verbrennung berücksichtigt wurden. Der CH_4 -Molenbruch von 0,65 in Abbildung 19 entspricht reinem gasförmigen Brennstoff (vergl. Tabelle 6).

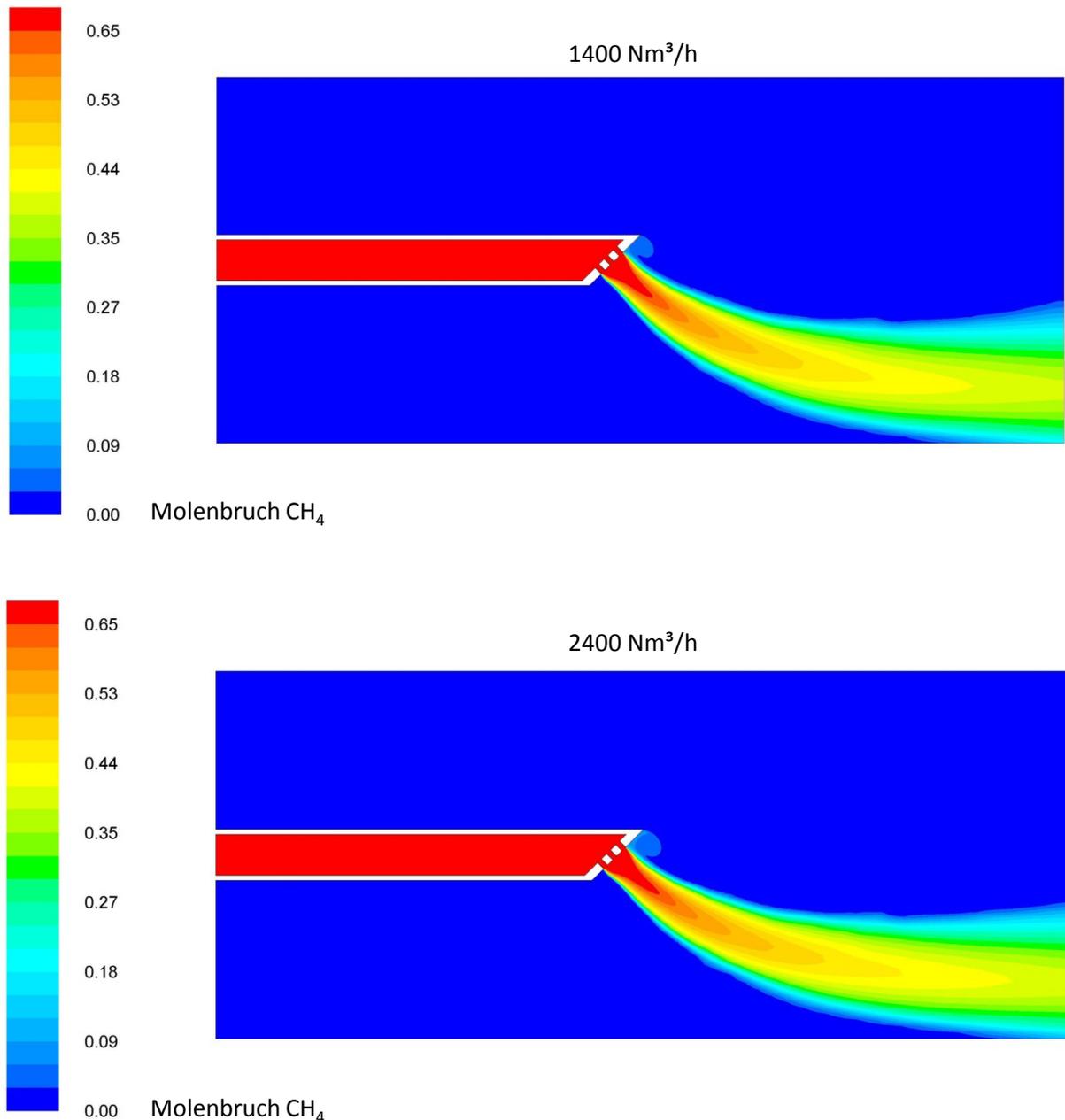


Abbildung 19: CH_4 -Molenbruch bei 1400 Nm³/h und 2400 Nm³/h Gas im gesamten Berechnungsgebiet.

Die Ergebnisse aus der 2D-Simulation zeigen, dass die Annäherung der 21 Lochdüse für den Gasaustritt aus der Gaslanze durch eine flächenäquivalente, zentrierte Austrittsfläche, mit Geschwindigkeitsvektoren normal zur Austrittsebene gerechtfertigt ist.

5.2.2 Geometrie des Einzelbrenners und deren Randbedingung

Um die Aufteilung der Luft im Brenner zu simulieren, wurde der gesamte Brenner vernetzt. Das erstellte Gitter besteht dabei vollständig aus Hexaedern. Bei der Gittererzeugung wurde besonderes Augenmerk auf die feine Auflösung im Bereich des Drallschirms gelegt, um den Einfluss auf die Flamme möglichst genau abzubilden. Der Brenner ist in einen Eintrittsbereich und einen Austrittsbereich unterteilt, wobei die Schnittstelle noch vor der Vermischung von Primär- und Sekundärluft liegt. In Abbildung 20 sind die einzelnen Berechnungsgebiete dargestellt.

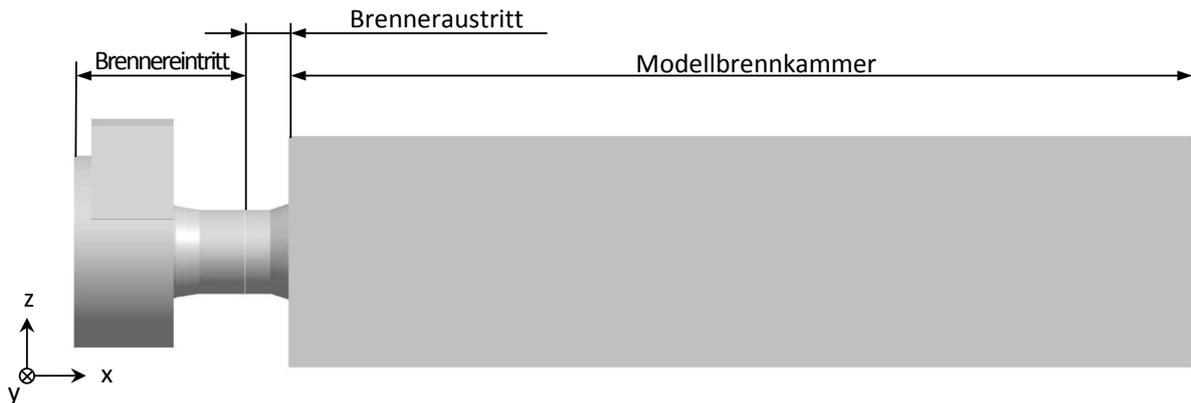


Abbildung 20: Einteilung der Zonen des Brenners in: Brennereintritt, Brenneraustritt und Modellbrennkammer.

Um die einzelnen Modelle bei unterschiedlichen Randbedingungen zu testen und zu vergleichen wurde an den Brenner eine Modellbrennkammer angeschlossen. Das Gitter der Modellbrennkammer wurde ausschließlich aus Hexaedern aufgebaut.

Um die Rechenzeiten zu optimieren, wurde nach einer konvergenten Lösung das Strömungsprofil im Brenner zwischen den Bereichen Brennereintritt und Brenneraustritt aus dem Simulationsprogramm exportiert. In Abbildung 21 ist die Lage der Übergabefläche für Primär- und Sekundärluft dargestellt.

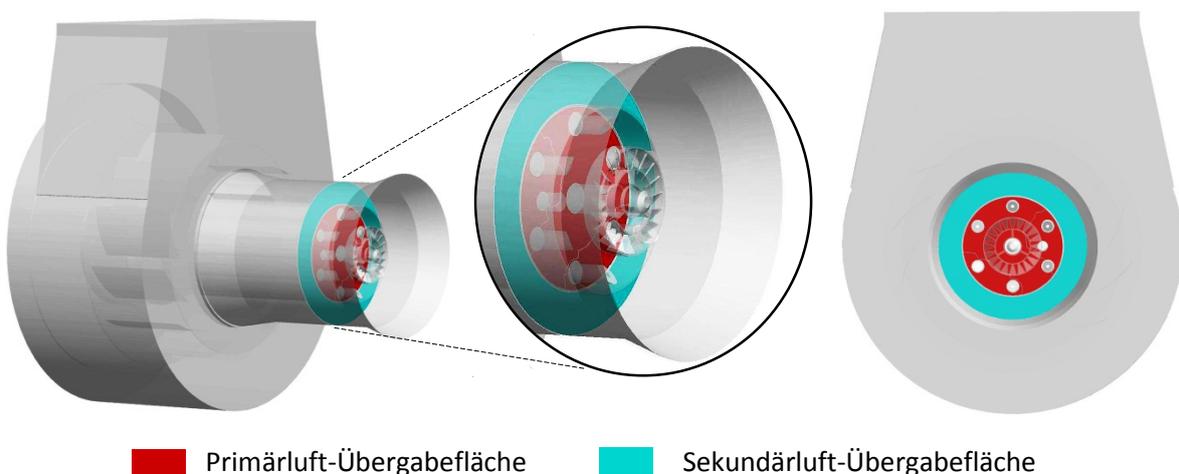


Abbildung 21: Lage der Strömungsprofil-Übergabeflächen für Primär- und Sekundärluft.

In einer anschließenden Variantenrechnung (z. B. Änderung der Kragenlänge des Zündschirmes) konnte somit das Berechnungsgebiet um den Brenner-Eintrittsbereich verkleinert und das Strömungsprofil als Randbedingung aufgegeben werden. In Abbildung 21 ist deutlich zu erkennen, dass die Übergabefläche noch vor den Austrittsöffnungen der Brennstofflanzen und vor dem Drallschirm liegt.

Die Randbedingungen bei der Einzelbrenner-Simulation sind in Abbildung 22 dargestellt. Der Luftstrom wird als Massenstrom \dot{m}_{air} mit der entsprechenden Temperatur T_{Luft} einseitig radial dem Brenner zugeführt. Der Mantel und die dem Brenner zugewandte Stirnfläche der Modellbrennkammer besitzen eine konstante Wandtemperatur von T_{Wand} (1573 K oder 1273 K) und einen Emissionsgrad von ϵ_{Wand} (0,6 oder 0,9).

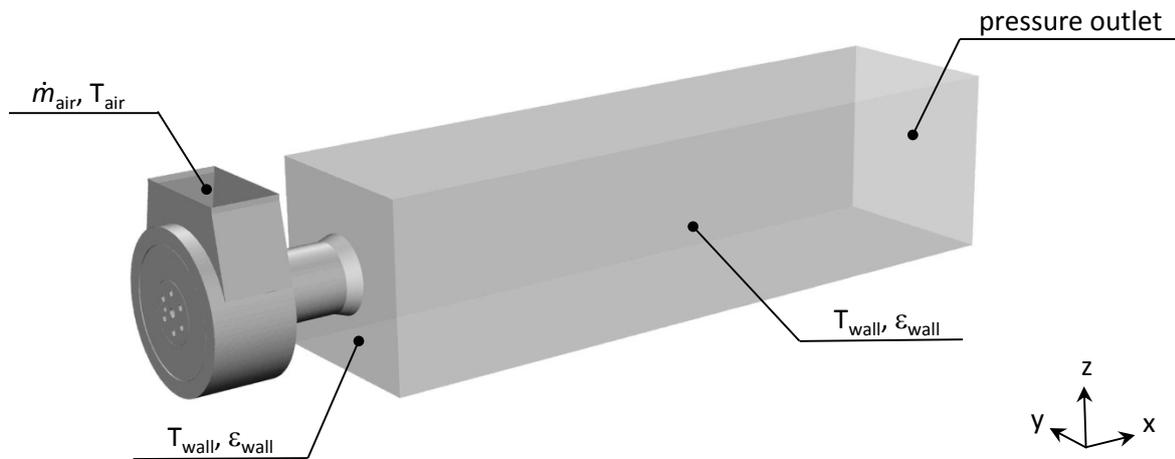


Abbildung 22: Randbedingungen für die Einzelbrenner-Simulation.

Der Drallschirm im Brenner-Austrittsbereich hat einen Emissionsgrad von $\epsilon = 0,3$ (Kleiber-Infrared 2014) und ist adiabat. Die Wände des Brenners und alle innenliegenden Flächen im Brenner-Eintritts- und Brenner-Austrittsbereich sind adiabat und haben einen Emissionsgrad von $\epsilon = 0$. Die Austrittsfläche der Modellbrennkammer ist als pressure outlet definiert.

Wird der Brennereintrittsbereich nicht in der Simulation berücksichtigt so wird, wie bereits oben erläutert, ein mass flow inlet an den Übergabeflächen als Randbedingung festgelegt und ein zuvor berechnetes Profil der Geschwindigkeit, Turbulenzgrößen des RSM, Temperatur, Mischungsbruch und Mischungsbruchvarianz aufgegeben.

Tabelle 10 gibt einen Überblick über die Abmessungen, sowie die Zellenanzahl und die Netzdichte des jeweiligen Berechnungsgebietes.

Tabelle 10: Geometrie- und Gitterinformationen für das Gitter der Einzelbrenner-Simulationen.

Bezeichnung	Breite [m]	Höhe [m]	Länge [m]	Volumen [m ³]	Zellenanzahl [#]	Netzdichte [# / m ³]
Brennereintritt	1,62	1,92	1,28	2,21	2872767	1,30E+06
Brenneraustritt	0,82	0,82	0,41	0,14	1170078	8,36E+06
Modellbrennkammer	1,93	1,93	7,5	27,94	4992372	1,79E+05

Für den komplexen Bereich im und rund um den Drallschirm überschritten Equi Angle Skew und Aspect Ratio die Werte 0,94 und 10 nicht.

Abbildung 23 zeigt das Berechnungsgitter der Modellbrennkammer mit Brenneraustritt. Die Vergrößerung bildet die Draufsicht auf die Stirnfläche der Modellbrennkammer ab.

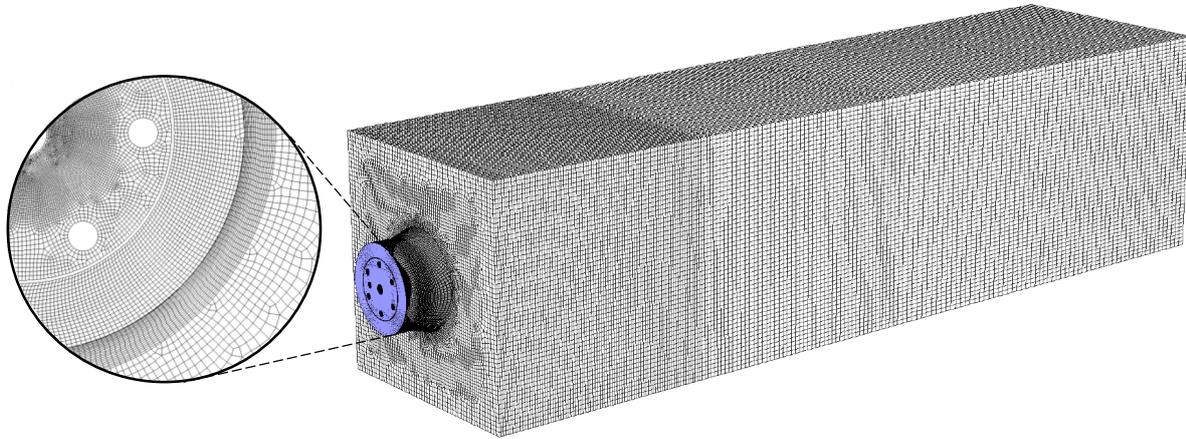


Abbildung 23: Berechnungsgitter der Modellbrennkammer mit Brenneraustritt.

In Abbildung 23 ist die Zunahme der Zellgröße in x-Richtung gut zu erkennen. Hier wurde eine Wachstumsfunktion angewendet, um im hinteren Bereich der Modellbrennkammer das Berechnungsgitter etwas gröber aufzulösen.

Abbildung 24 zeigt das Berechnungsgitter des Brenneintrittsbereiches, wobei wie in Abbildung 23, nur das Gitter an den äußeren Flächen dargestellt ist.

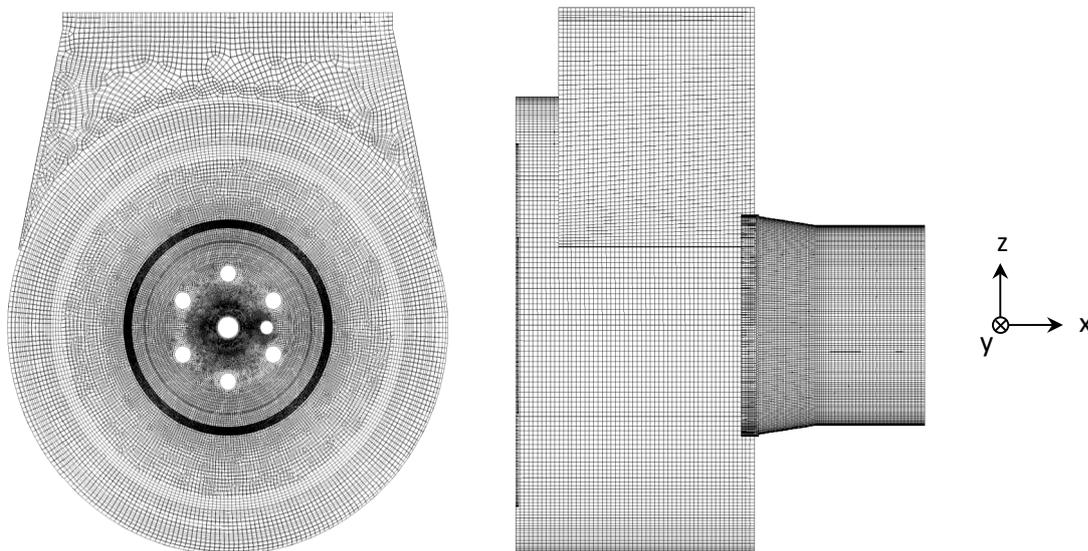


Abbildung 24: Berechnungsgitter des Brenneintrittsbereiches.

In Abbildung 24 ist die feine Gitterauflösung im Primär- und Sekundärluftkanal in alle drei Koordinatenrichtungen gut zu erkennen.

Der gasförmige Brennstoff wird als mass flow inlet an der Spitze jeder Gaslanze aufgegeben. Die Aufgabefläche ist in Abbildung 25 in gelb dargestellt und ist flächenäquivalent zu den 21 Austrittslöchern, die sich in Realität an dieser Stelle befinden. Diese Annäherung der Austrittsfläche wurde bereits in Kapitel 5.2.1 untersucht. Ebenfalls in Kapitel 5.2.1 ist der 21 Loch-Austritt der Gaslanze in Abbildung 14 dargestellt.

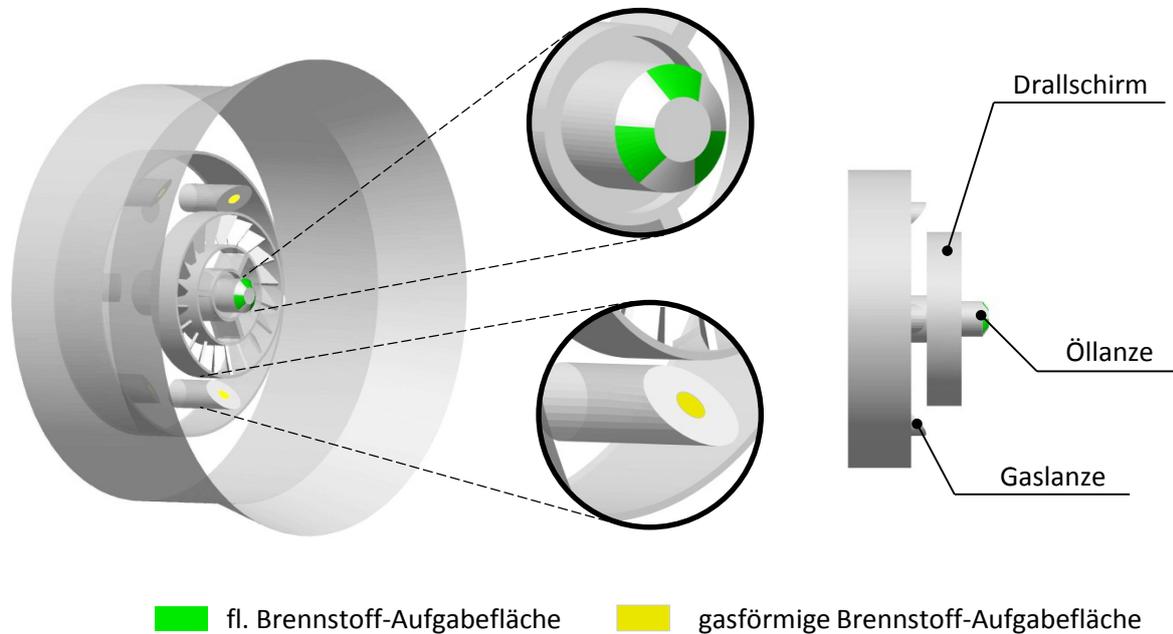


Abbildung 25: Position der Aufgabeflächen für flüssigen und gasförmigen Brennstoff.

Der flüssige Brennstoff wird über drei gleich große Flächen am Ende der Öllanze aufgegeben. Diese Aufgabeflächen des flüssigen Brennstoffs sind in Abbildung 25 in grün dargestellt. Die genauen Angaben zu den Brennstoffaufgabeflächen sind in dem jeweiligen Kapitel angegeben.

5.2.3 Strömungsprofil im Primär- und Sekundärluftkanal

Der Lufteinlass in den Brenner erfolgt einseitig radial. Die Aufteilung der Verbrennungsluft in Primär- und Sekundärluft erfolgt über einen Schieber am radialen Eintritt in den Primärluftkanal im Brenner selbst (siehe dazu Kapitel 5.1). Um die Flamme zu stabilisieren, wird einerseits der Primärluft über den Zündschirm ein Drall aufgeprägt und andererseits der Sekundärluft über das Luftregister. Diese Untersuchung soll die Zusammenhänge zwischen Luftmassenstrom und Strömungsprofil im Brenner aufzeigen. Dazu wurde das Strömungsprofil im Brenner zwischen Brennereintrittsbereich und Brenneraustrittsbereich analysiert. Diese Kenntnis ist als Grundlage für alle weiteren Untersuchungen und der Beurteilung dieser Ergebnisse von großer Bedeutung.

Dieses Kapitel zeigt die Ergebnisse dieser Untersuchung, wobei drei Lastfälle im Gasbetrieb untersucht wurden. Ausgehend von $1500 \text{ Nm}^3/\text{h}$ Gas wurde im ersten Fall ein Luftmassenstrom von $5,406 \text{ kg/s}$ ($14950 \text{ Nm}^3/\text{h}$), im zweiten Fall ein Luftmassenstrom von $7,539 \text{ kg/s}$ ($21000 \text{ Nm}^3/\text{h}$) und im dritten Fall ein Luftmassenstrom von $7,871 \text{ kg/s}$ ($21770 \text{ Nm}^3/\text{h}$) als Randbedingung festgelegt. Die Wahl der Betriebspunkte lässt sich folgendermaßen begründen: Der Fall 1 spiegelt einen häufigen Betriebszustand wieder, der Fall 3 ist ein konkreter Zustand der später in der Gesamtkesselsimulation

verwendet wird und der Fall 2 ist ein Betriebspunkt, der sehr nahe an weiteren Betriebspunkten für einzelne Brenner in der Gesamtkesselsimulation liegt.

Die entsprechenden Randbedingungen sind in Tabelle 11 aufgelistet.

Tabelle 11: Randbedingungen für die Einzelbrenner-Simulation mit gasförmigem Brennstoff.

Randbedingung	Formelzeichen	Fall 1	Fall 2	Fall3
Massenstrom Luft	\dot{m}_{Luft}	5,406 kg/s	7,539 kg/s	7,871kg/s
Massenstrom Gas pro Lanze	\dot{m}_{gas}	0,047 kg/s	0,047 kg/s	0,047 kg/s
Temperatur Primärluft	T_{Luft_prim}	503 K	503 K	503 K
Temperatur Sekundärluft	T_{Luft_sec}	503 K	503 K	503 K
Temperatur Gas	T_{gas}	323 K	323 K	323 K
Wandtemperatur	T_{Wand}	1573 K	1573 K	1573 K
Emissionsgrad der Wand	ϵ_{Wand}	0,6	0,6	0,6
Luftverhältnis	λ	1,25	1,74	1,82

Die Zuordnung der Randbedingungen, sowie das gesamte Berechnungsgebiet, bestehend aus Modellbrennkammer, Brenneintritts und Austrittsbereich, sind in Abbildung 20 und Abbildung 22 dargestellt.

Die in Tabelle 12 angeführten Modelle wurden bei allen Simulationen verwendet, in denen der Brenner im Gasbetrieb untersucht wurde.

Tabelle 12: Modelle für die Einzelbrennersimulation mit gasförmigem Brennstoff.

Modellierung von	Model
Verbrennung	Steady Diffusion FLAMLET (Ansys 2013)
Reaktionsmechanismus	CH ₄ -Skeletal (Yang & Pope 1998)
Turbulenz der Strömung	RSM
Chemie-Turbulenzinteraktion	PDF-Ansatz
Strahlung	P1
Absorptionskoeffizient	WSGGM domain based (Ansys 2013)

Für den Reaktionsmechanismus bei der Gasverbrennung wurde der CH₄-Skeletal (Yang & Pope 1998) Mechanismus verwendet. Beim CH₄-Skeletal Mechanismus werden 16 Spezies und 41 Reaktionen berücksichtigt.

Abbildung 26 zeigt die einseitige radiale Einströmung der Verbrennungsluft und die Lage der Analyseebenen in rot (Primärluftkanal) und blau (Sekundärluftkanal), auf denen die Auswertung des Strömungsprofils vorgenommen wurde.

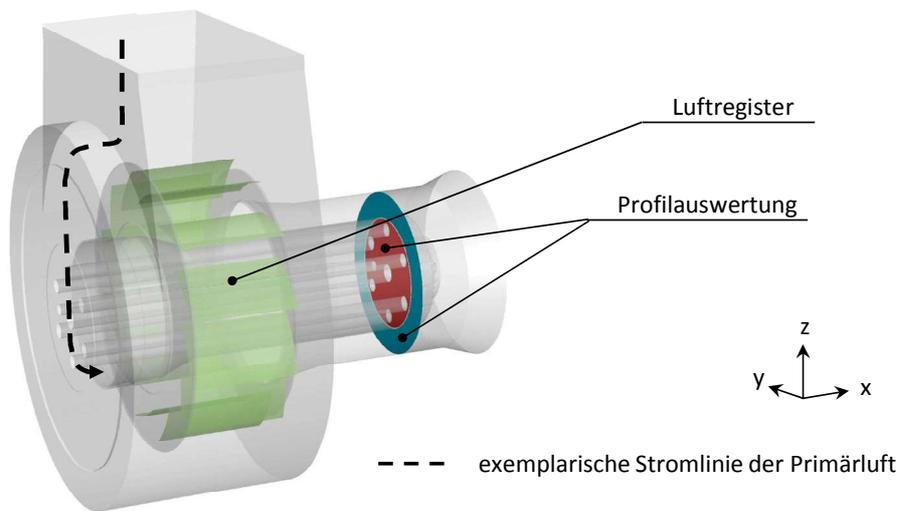


Abbildung 26: Einseitig radiale Einströmung der Verbrennungsluft und Lage der Analyseebene des Profils.

Abbildung 27 zeigt das Geschwindigkeitsprofil auf der in Abbildung 26 in rot dargestellten Ebene im Primärluftkanal der beiden Fälle 1 und 2.

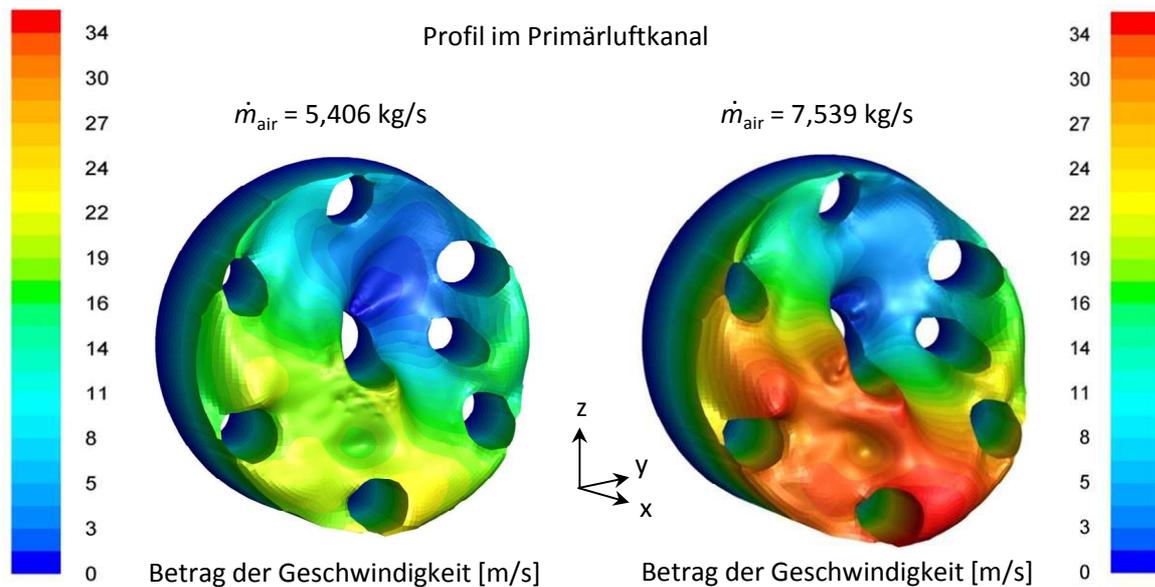


Abbildung 27: Geschwindigkeitsprofil im Primärluftkanal zwischen Brenneintrittsbereich und Brenneraustrittsbereich bei einem Luftmassenstrom von 5,406 kg/s und 7,539 kg/s.

Die zwei Geschwindigkeitsprofile in Abbildung 27 zeigen bei gleicher Skalierung kaum topologische Unterschiede. Im 1. Fall (5,406 kg/s) ist der Bereich kleiner Geschwindigkeiten ober der Öllanze etwas größer und besitzt kleinere Geschwindigkeitsgradienten. Der Weg der fiktiven Stromlinie der Primärluft in Abbildung 26 zeigt, dass beim Eintritt in den Primärluftkanal keine Einbauten die Strömung umlenken. Dies ist der Hauptgrund für das Anliegen der Strömung am unteren Rand des Primärluftkanals. In x-Richtung im Primärkanal vergleichmäßig sich die Geschwindigkeit, wobei die Öl- und Gaslanzen diesen Vorgang behindern.

In Abbildung 28 ist das Geschwindigkeitsprofil auf der in Abbildung 26 in rot dargestellten Ebene in der Frontalansicht bei unterschiedlicher Skalierung der Fälle 1 und 2 dargestellt.

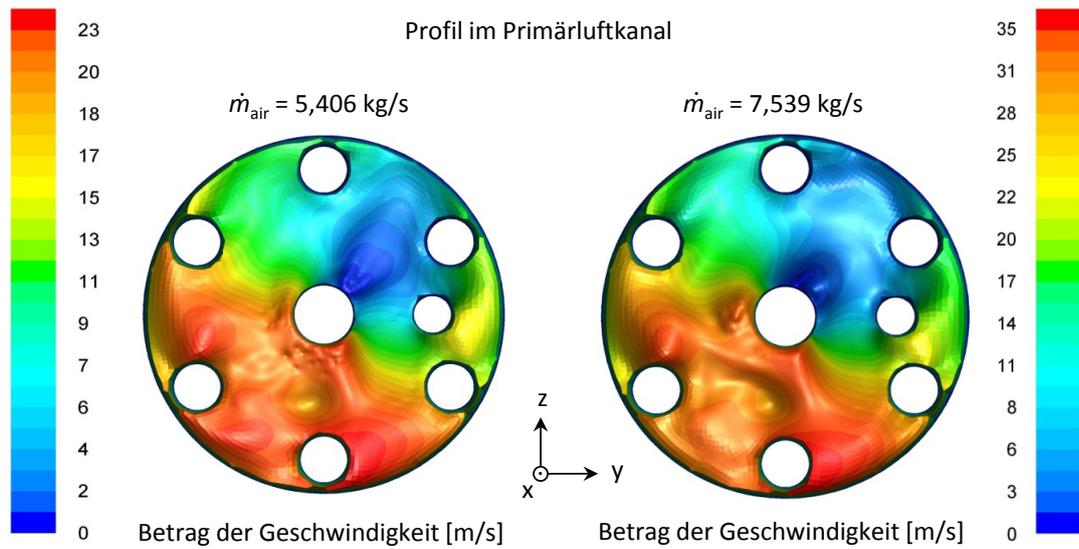


Abbildung 28: Frontalansicht des Geschwindigkeitsprofils im Primärluftkanal zwischen Brenneintrittsbereich und Brenneraustrittsbereich bei einem Luftmassenstrom von 5,406 kg/s und 7,539 kg/s bei ungleicher Skalierung.

Abbildung 28 verdeutlicht, dass die Bereiche minimaler und maximaler Geschwindigkeiten an denselben Stellen liegen. Auch die Spitzengeschwindigkeiten sind in beiden Fällen an denselben Positionen zu finden.

Abbildung 29 zeigt die Geschwindigkeitsprofile auf der in Abbildung 26 in rot dargestellten Ebene im Primärluftkanal des Falles 2 (7,539 kg/s) und 3 (7,871 kg/s) bei gleicher Skalierung.

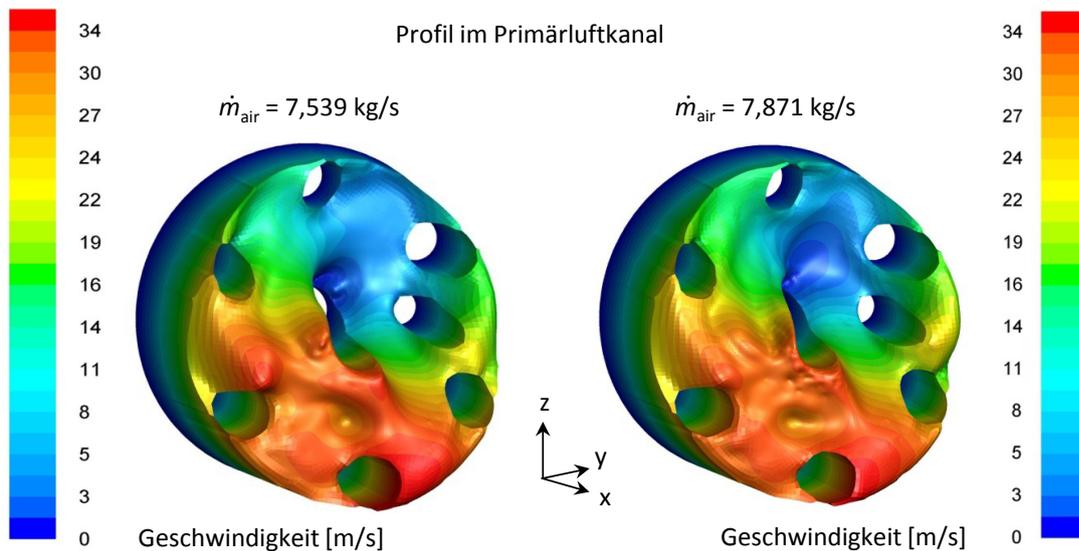


Abbildung 29: Geschwindigkeitsprofil im Primärluftkanal zwischen Brenneintrittsbereich und Brenneraustrittsbereich bei einem Luftmassenstrom von 7,539 kg/s und 7,871 kg/s.

In Abbildung 29 sind nur kleine topologische Abweichungen zwischen den Geschwindigkeitsprofilen von Fall 2 (7,539 kg/s) und 3 (7,871 kg/s) zu erkennen. Die Bereiche maximaler und minimaler

Strömungsgeschwindigkeit liegen in beiden Fällen an derselben Position. Im 3. Fall (7,871 kg/s) ist der Bereich minimaler Geschwindigkeit etwas größer und weist etwas geringere Gradienten auf.

Abbildung 30 zeigt die Geschwindigkeitsprofile auf der in Abbildung 26 in blau dargestellten Ebene im Sekundärluftkanal des Falles 1 und 2 bei gleicher Skalierung. Abgesehen von einer höheren mittleren Geschwindigkeit im 2. Fall (7,539 kg/s) sind hier keine topologischen Unterschiede zu erkennen.

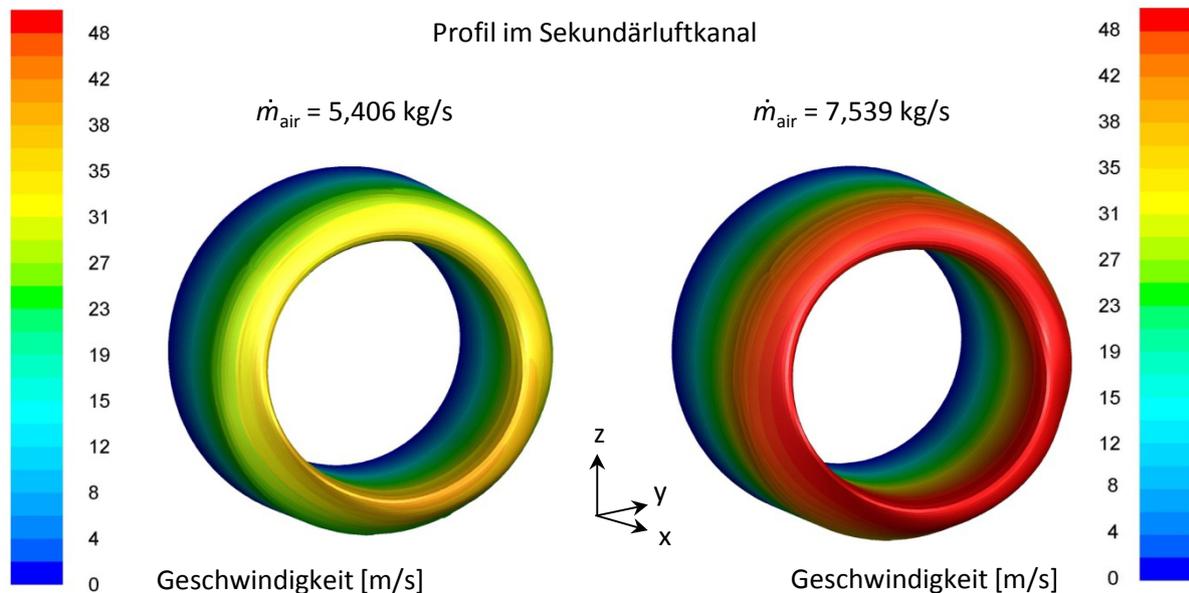


Abbildung 30: Geschwindigkeitsprofil im Sekundärluftkanal zwischen Brenneintrittsbereich und Brenneraustrittsbereich bei einem Luftmassenstrom von 5,406 kg/s und 7,539 kg/s.

Der Grund dafür, dass keine topologische Veränderung zwischen Fall 1 und Fall 2 auftritt, liegt im Luftregister, welches in Abbildung 26 in einem transparenten grün dargestellt ist. Durch das Luftregister liegt am Eingang in den Sekundärluftkanal ein Strömungswiderstand vor, der zu einem Druckverlust und damit zu einem gleichmäßigen radialen Eintritt in den Sekundärluftkanal führt.

Aus den Ergebnissen lassen sich folgende Schlüsse ziehen: Für den Primärluftkanal (rote Fläche in Abbildung 26) treten zwischen den Fällen 1, 2 und 3 keine großen topologischen Unterschiede auf. Auch die Lage der Bereiche maximaler und minimaler Geschwindigkeiten ist in allen drei Fällen gleich. Die Schiefelage der Strömung im Primärluftkanal kommt durch die einseitig radiale Einströmung zustande. Im Sekundärluftkanal (blaue Fläche in Abbildung 26) treten ebenfalls keine Zusammenhänge zwischen Topologie des Geschwindigkeitsprofils und des Luftmassenstroms auf. Im Sekundärluftkanal tritt keine Schiefelage der Strömung auf, da durch das Luftregister ein Strömungswiderstand und damit ein Druckverlust entsteht, der eine rundum gleichmäßig radiale Einströmung der Luft ermöglicht.

5.2.4 Einfluss der Wandtemperatur und des Emissionsgrades der Wand

Für die Untersuchung des Einzelbrenners unter Berücksichtigung des gesamten Kessels wurde an den Brenner eine Modellbrennkammer angehängt, in der die Verbrennung stattfinden kann. Um den Rechenaufwand so gering wie möglich zu halten, wurde die Modellbrennkammer so klein wie

möglich gehalten. Der Kessel wird mit mehreren Brennern beheizt. Somit ist die Flamme eines Brenners von heißen Rauchgasen umgeben. Um den Einzelbrenner im Sinne einer Kesselsimulation zu betrachten, müssen den Wänden der Modellbrennkammer die Eigenschaften des umgebenden Rauchgases über Randbedingungen zugewiesen werden.

Aus diesem Grund wurde den Wänden eine Temperatur und ein Emissionsgrad aufgeprägt, die der eines Verbrennungsgases sehr ähnlich sind. Da die dort vorherrschenden Temperaturen und Emissionsgrade nicht im Detail bekannt sind, wurde eine Sensitivitätsanalyse durchgeführt.

Ausgehend von 1500 Nm³/h Gas wurde ein Luftmassenstrom von 5,406 kg/s als Randbedingung festgelegt. Die entsprechenden Randbedingungen sind in Tabelle 13 aufgelistet.

Tabelle 13: Randbedingungen für die Einzelbrenner-Simulation mit gasförmigem Brennstoff.

Randbedingung	Formelzeichen	Wert	Einheit
Massenstrom Luft	\dot{m}_{Luft}	5,406	kg/s
Massenstrom Gas pro Lanze	\dot{m}_{gas}	0,047	kg/s
Temperatur Primärluft	$T_{\text{Luft_prim}}$	503	K
Temperatur Sekundärluft	$T_{\text{Luft_sec}}$	503	K
Temperatur Gas	T_{gas}	323	K
Wandtemperatur	T_{Wand}	variabel	K
Emissionsgrad der Wand	ϵ_{Wand}	variabel	
Luftverhältnis	λ	1,25	

Die Zuordnung der Randbedingungen, sowie das gesamte Berechnungsgebiet, bestehend aus Brenneraustrittsbereich und Modellbrennkammer sind in Abbildung 20 und Abbildung 22 dargestellt. In dieser Sensitivitätsanalyse wurde in allen vier Simulationen das Strömungsprofil auf der Übergabefläche vorgegeben (siehe dazu Kapitel 5.2.2).

Die verwendeten Modelle sind in Tabelle 14 aufgelistet.

Tabelle 14: Modelle für die Einzelbrennersimulation mit gasförmigem Brennstoff.

Modellierung von	Model
Verbrennung	Steady Diffusion FLAMLET (Ansys 2013)
Reaktionsmechanismus	CH ₄ -Skeletal (Yang & Pope 1998)
Turbulenz der Strömung	RSM
Chemie-Turbulenzinteraktion	PDF-Ansatz
Strahlung	P1
Absorptionskoeffizient	WSGGM domain based (Ansys 2013)

Die Zusammensetzung des Gases und des Oxidationsmittels (Luft) in der Simulation sind dieselben wie bei den bereits vorgestellten Simulationen. Die genaue Zusammensetzung ist in Tabelle 6 angegeben.

In Abbildung 31 sind die untersuchten Fälle dargestellt, wobei die Auswertung anhand des Temperaturprofils und des Verlaufs des CH₂O- und CO-Molenbruchs erfolgte. Die gezeigten Plots sind vertikale Schnitte durch die Brennerachse.

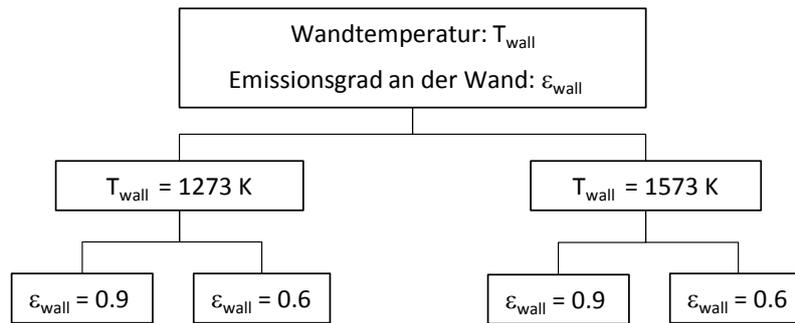


Abbildung 31: Untersuchte Fälle in der Sensitivitätsanalyse für die Wandtemperatur und den Emissionsgrad der Wand.

In den 3 nachstehenden Abbildungen sind jeweils die 4 Fälle abgebildet. Die dargestellte Skalierung am unteren Ende jeder Abbildung gilt für alle vier Plots in der jeweiligen Abbildung.

In Abbildung 32 ist das OH-Radikal in der Modellbrennkammer für die 4 Fälle dargestellt.

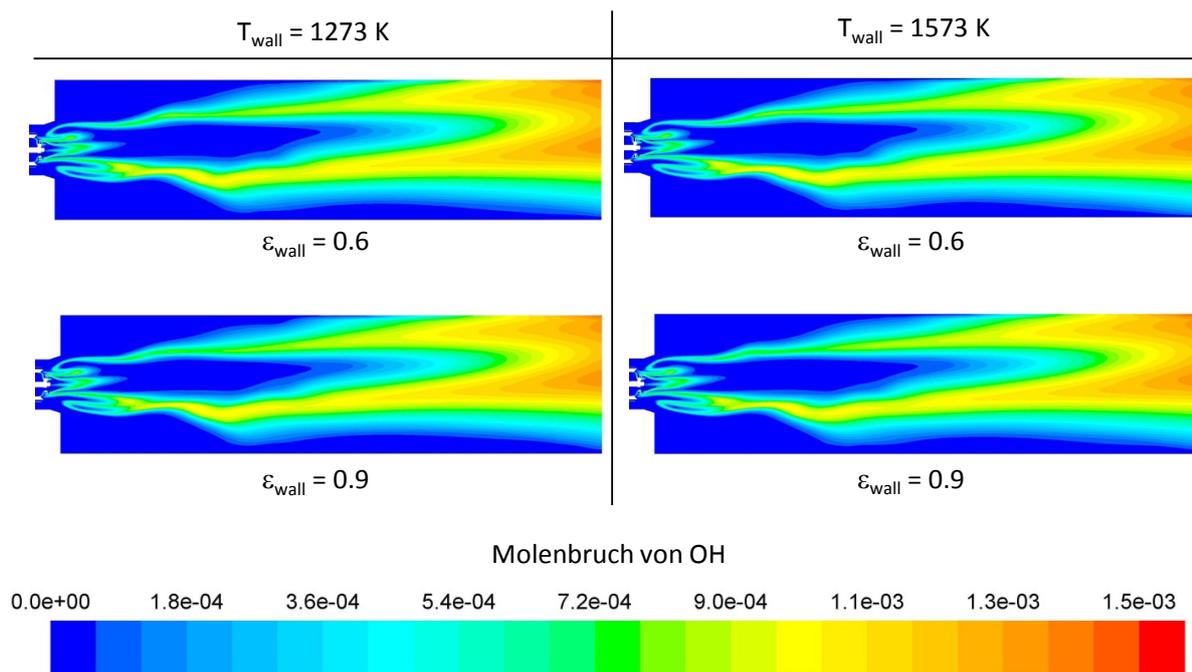


Abbildung 32: Molenbruch von OH bei Variation der Wandtemperatur und des Emissionsgrades der Wand.

Die 4 Fälle in Abbildung 32 zeigen grundsätzlich einen sehr ähnlichen Verlauf des Molenbruchs des OH-Radikals. Bei dem Verlauf des OH-Molenbruchs in der Modellbrennkammer ist weder ein Zusammenhang mit der Wandtemperatur T_{Wand} noch mit dem Emissionsgrad der Wand ϵ_{Wand} zu erkennen.

In Abbildung 33 ist der Molenbruch von CO in der Modellbrennkammer dargestellt.

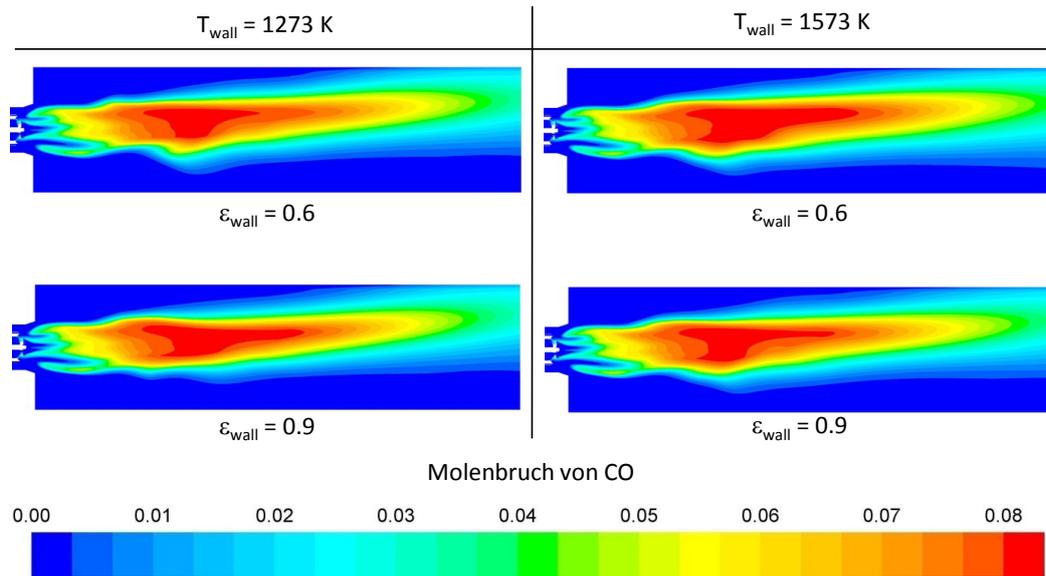


Abbildung 33: Molenbruch von CO bei Variation der Wandtemperatur und des Emissionsgrades der Wand.

Wie bereits in Abbildung 32, sind auch hier in Abbildung 33 keine großen Unterschiede zwischen den vier Fällen zu erkennen. Lediglich die Form und Größe des maximalen Molenbruchs von 0,08 mol/mol weichen etwas von einander ab.

Abbildung 34 zeigt die Temperatur in der Modellbrennkammer für die vier betrachteten Fälle.

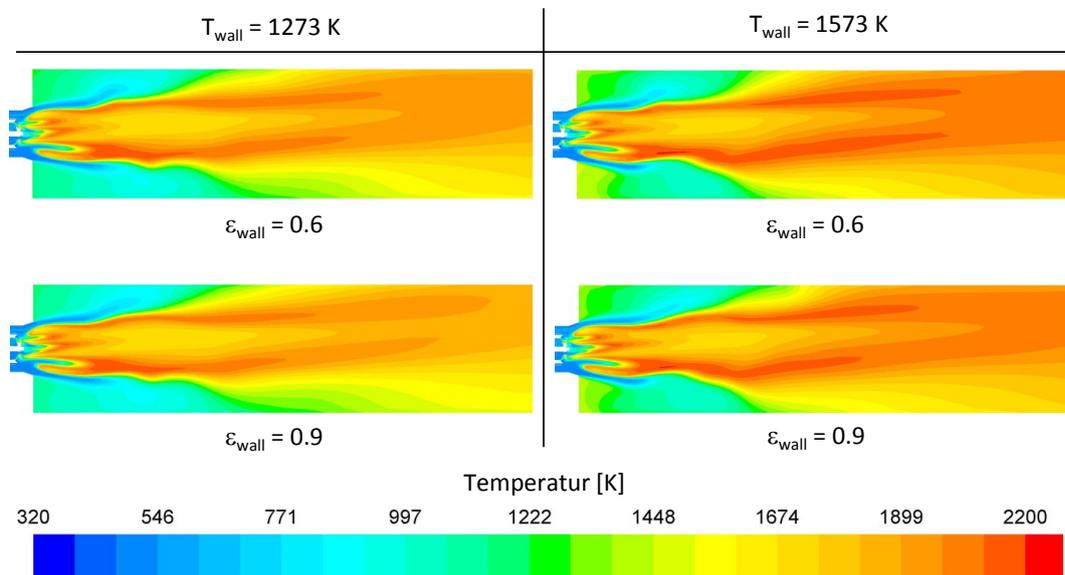


Abbildung 34: Temperatur in der fiktiven Brennkammer bei Variation der Wandtemperatur und des Emissionsgrades der Wand.

Der in Abbildung 34 dargestellte Vergleich der Temperaturen zeigt, dass sowohl Wandtemperatur T_{Wand} , als auch Emissionsgrad der Wand ϵ_{Wand} einen Einfluss auf die Höhe der Flammentemperatur haben. Die Simulationsergebnisse zeigen, dass mit abnehmendem Emissionsgrad der Wand ϵ_{Wand} und steigender Wandtemperatur T_{Wand} die Flammentemperatur steigt. Somit ergibt sich im Fall $T_{Wand} = 1573 \text{ K}$ und $\epsilon_{Wand} = 0,6$ die höchste Flammentemperatur.

Abbildung 35 zeigt den Strahlungsanteil der Wärmestromdichte über die Modellbrennkammerwände und Abbildung 36 zeigt die gesamte Wärmestromdichte über die Modellbrennkammerwände.

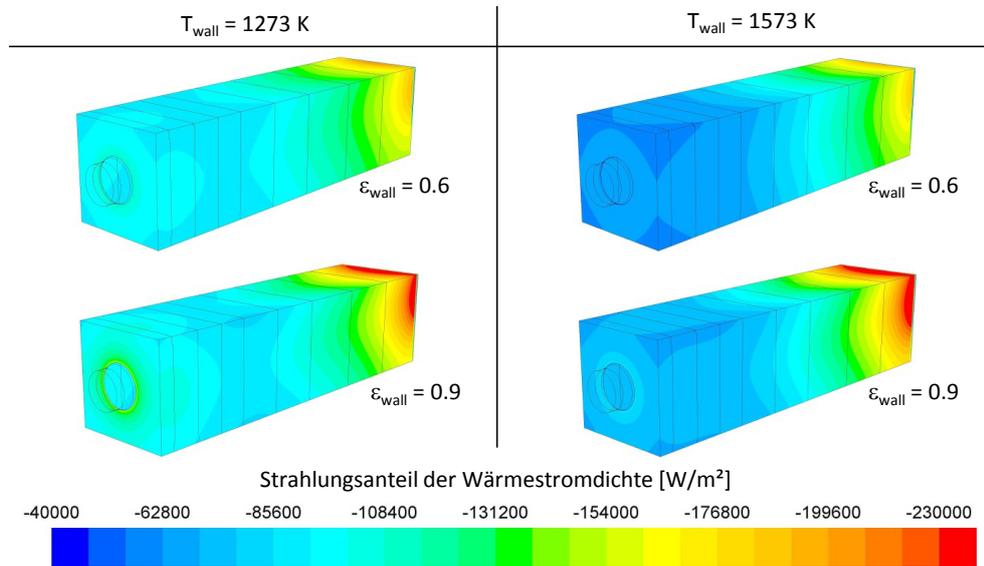


Abbildung 35: Strahlungsanteil der Wärmestromdichte über die Modellbrennkammerwände in Abhängigkeit von Wandtemperatur und Emissionsgrad der Wand.

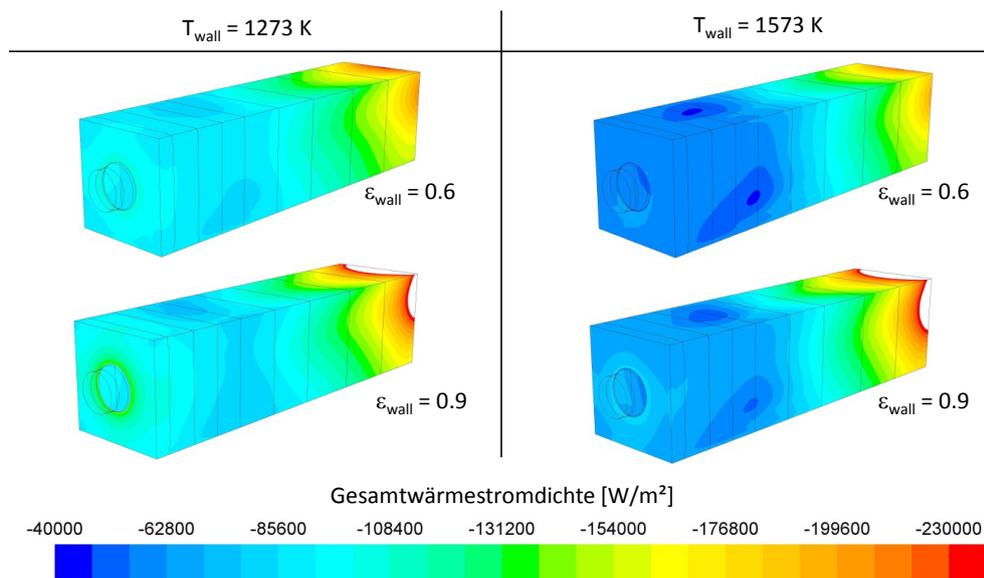


Abbildung 36: Wärmestromdichte über die Modellbrennkammerwände in Abhängigkeit von Wandtemperatur und Emissionsgrad der Wand.

Der Vergleich zwischen Abbildung 35 und Abbildung 36 zeigt sehr deutlich, dass in der Modellbrennkammer die an die Wand abgegebene Wärme zum größten Teil über die Strahlung erfolgt. Im vorderen Bereich der Modellbrennkammer ist die Wärmestromdichte noch deutlich geringer, da hier erst der Verbrennungsprozess beginnt. Die Wärmestromdichte sinkt mit steigender Wandtemperatur T_{Wand} und kleinerem Emissionsgrad der Wand ϵ_{Wand} . Dies spiegelt sehr gut das reale Verhalten wider.

In allen weiteren Simulationen des Einzelbrenners wurde eine Wandtemperatur von $T_{\text{Wand}} = 1573 \text{ K}$ und ein Emissionsgrad von $\epsilon_{\text{Wand}} = 0,6$ für die Modellbrennkammerwände gewählt.

5.2.5 Einzelbrenner im Gasbetrieb

In diesem Kapitel wird der Brenner im Gasbetrieb untersucht. Im ersten Teil wird der Verbrennungsprozess im Allgemeinen analysiert und umfasst dabei die Untersuchung des Strömungsprofils in der Modellbrennkammer, die Zündung und die Flammenfront bis hin zur Temperaturentwicklung. Im zweiten Teil wird der Einfluss der Zündschirmkragenlänge auf die Flamme untersucht.

Die verwendeten Modelle der Einzelbrenneruntersuchung im Gasbetrieb sind in Tabelle 15 aufgelistet und die Zusammensetzung des Gases und des Oxidationsmittels (Luft) sind in Tabelle 6 angegeben.

Tabelle 15: Modelle für die Einzelbrennersimulation mit gasförmigem Brennstoff.

Modellierung von	Model
Verbrennung	Steady Diffusion FLAMLET (Ansys 2013)
Reaktionsmechanismus	CH ₄ -Skeletal (Yang & Pope 1998)
Turbulenz der Strömung	RSM
Chemie-Turbulenzinteraktion	PDF-Ansatz
Strahlung	P1
Absorptionskoeffizient	WSGGM domain based (Ansys 2013)

5.2.5.1 Analyse der Flamme

Bei der Untersuchung der Flamme des Einzelbrenners im Gasbetrieb wurden der Brennereintrittsbereich, der Brenneraustrittsbereich und die Modellbrennkammer, wie in Abbildung 20 dargestellt, als Berechnungsgebiet herangezogen.

Ausgehend von 1500 Nm³/h Gas wurde ein Luftmassenstrom von 7,871 kg/s als Randbedingung festgelegt. Die entsprechenden Randbedingungen sind in Tabelle 16 aufgelistet.

Tabelle 16: Randbedingungen für die Einzelbrenner-Simulation mit gasförmigem Brennstoff.

Randbedingung	Formelzeichen	Wert	Einheit
Massenstrom Luft	\dot{m}_{Luft}	7,871	kg/s
Massenstrom Gas pro Lanze	\dot{m}_{gas}	0,047	kg/s
Temperatur Primärluft	$T_{\text{Luft_prim}}$	503	K
Temperatur Sekundärluft	$T_{\text{Luft_sec}}$	503	K
Temperatur Gas	T_{gas}	323	K
Wandtemperatur	T_{Wand}	1573	K
Emissionsgrad der Wand	ϵ_{Wand}	0,6	
Emissionsgrad des Zündschirms	$\epsilon_{\text{Zündschirm}}$	0,3	
Luftverhältnis	λ	1,82	

Die Zuordnung der Randbedingungen aus Tabelle 16 sind in Abbildung 22 und Abbildung 25 dargestellt.

Für die Analyse der Lage und Form der Flamme sind die vorherrschenden Strömungsgeschwindigkeiten von großer Bedeutung. In Abbildung 37 sind die x-Komponenten der Geschwindigkeitsvektoren in der Modellbrennkammer dargestellt, wobei jede Ebene einen Schnitt in der y-z Ebene abbildet. Dies zeigen die etwas gedrehten und vergrößerten Darstellungen der Ebene 1 und 2 im unteren Bildabschnitt von Abbildung 37.

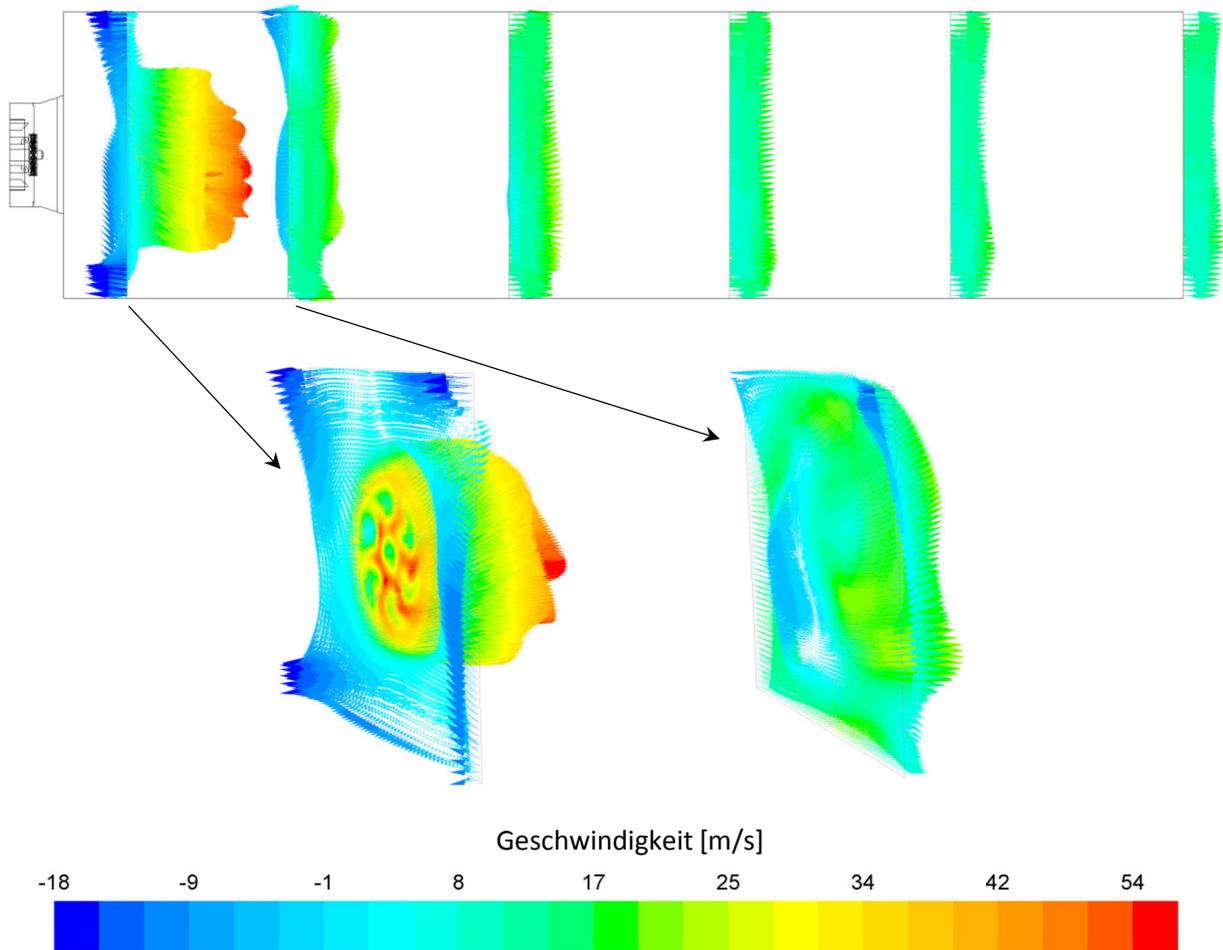


Abbildung 37: X-Komponente der Geschwindigkeitsvektoren in der der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.

Unter Berücksichtigung der Schiefelage des Geschwindigkeitsprofils im Primärluftkanal (siehe Kapitel 5.2.3) zeigt sich in Abbildung 37 ein gleichmäßiges Geschwindigkeitsprofil. Im Eintrittsbereich (erste Ebene auf der linken Seite in Abbildung 37) der Modellbrennkammer ist in der Brennerachse noch der hohe Impulseintrag über die Gaslanzen zu sehen. Dieser verursacht Rückströmungen im Randbereich der Modellbrennkammer und ist in der 1. und 2. Ebene gut zu erkennen. In der zweiten Ebene vergleichmäßigte sich die Strömungsgeschwindigkeit über die Querschnittsfläche der Modellbrennkammer bereits stark. Im Kern der Strömung (Brennerachse) ist ein kleiner, etwas schräg unterhalb der Brennerachse liegender Bereich in dem ebenfalls eine Rückströmung auftritt. Ab der dritten Ebene treten keine Rückströmungen mehr auf.

Für die Untersuchung der Zündung und Flammenfront werden sogenannte Indikator-Radikale herangezogen (Joos 2006). Aus deren Konzentration verbunden mit einer anwachsenden Wärmefreisetzung kann die Lage der Zündung und Flammenfront abgeleitet werden. Für die

Zündung empfiehlt (Joos 2006) das CH_2O -Radikal und für die Flammenfront wird im Allgemeinen das OH-Radikal (Poinsoot & Veynante 2005) herangezogen.

Abbildung 38 zeigt den Plot der Iso-Surface des Molenbruchs von CH_2O bei $5 \cdot 10^{-6}$ mol/mol eingefärbt mit der Temperatur in K.

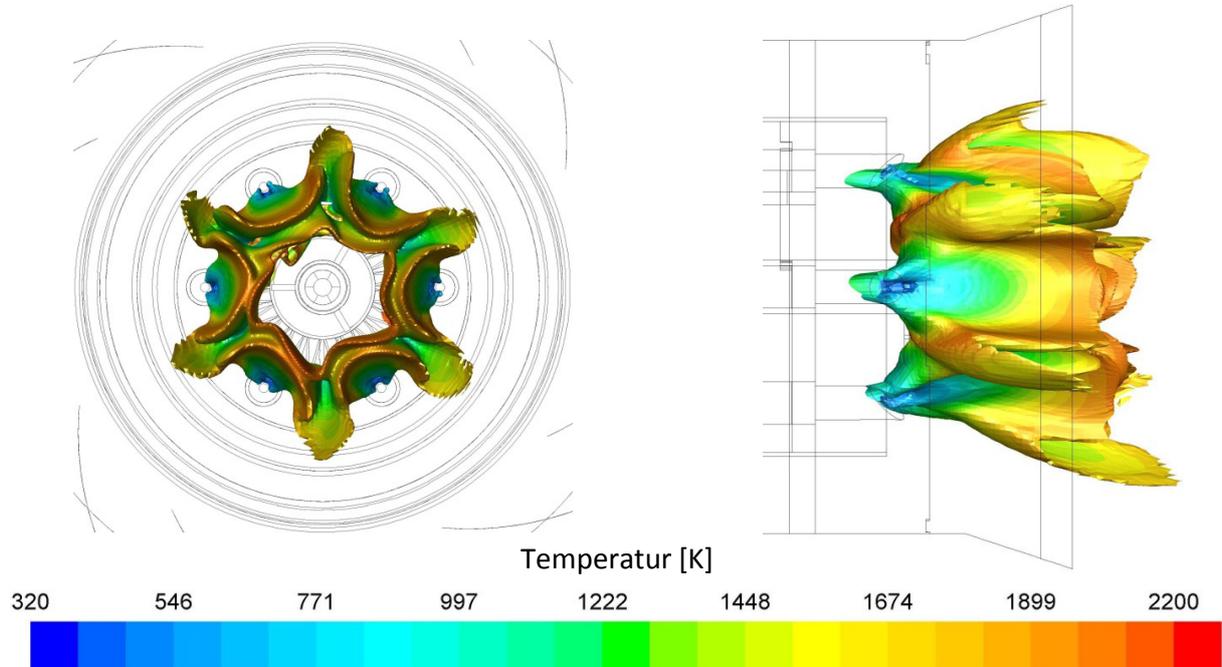


Abbildung 38: Iso-Surface des Molenbruchs von CH_2O bei $5 \cdot 10^{-6}$ mol/mol eingefärbt mit der Temperatur zwischen 320 und 2200 K.

In Abbildung 38 ist die starke Temperaturzunahme von 323 K (Gaseintrittstemperatur) auf etwa 1800 K klar zu erkennen. Ausgehend von jeder Gaslanze zündet das Gas bereits in der Brennermuffel, wobei die Zündung zwischen den Gaslanzen näher am Gaseintritt liegt als direkt vor den Gaslanzen. Dies ist einerseits durch die hohe Gasaustrittsgeschwindigkeit und andererseits durch die höhere Temperatur der Luft (503 K) zu erklären.

Abbildung 39 zeigt den Molenbruch des OH-Radikals in der Modellbrennkammer. Der Konturplot des OH-Radikals am Anfang der Modellbrennkammer zeigt dabei annähernd dieselbe Form, wie sie in Abbildung 38 auf der linken Seite zu sehen ist.

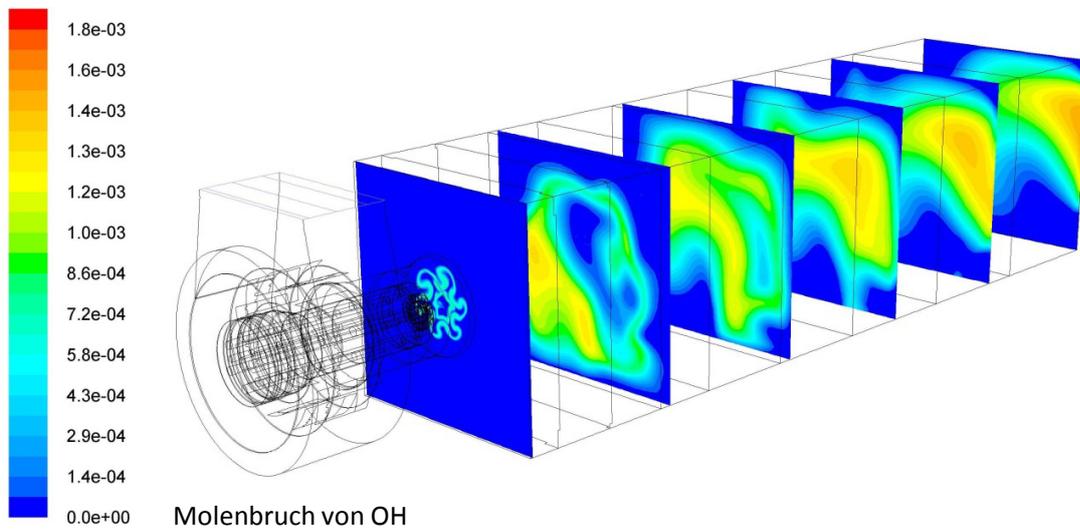


Abbildung 39: Molenbruch von OH in der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.

Aus der Betrachtung der ersten, zweiten und dritten Ebene in der Modellbrennkammer zeigt sich, dass die Flammenfront auf der Höhe der dritten Ebene zu einer Fläche zusammen wächst und mit zunehmendem Abstand vom Brenner wieder kleiner wird. Betrachtet man die letzten beiden Ebenen, so lässt sich daraus ein Anliegen der Flamme auf der rechten Seite der Modellbrennkammer vermuten.

In nachstehender Abbildung 40 ist der Betrag der Geschwindigkeit und die Flammenfront (mit Hilfe des Molenbruchs des OH-Radikals) aus der Simulation eines Einzelbrenners, als auch die tatsächliche Flamme eines Brenners im Kessel (Gesamtkessel) abgebildet.

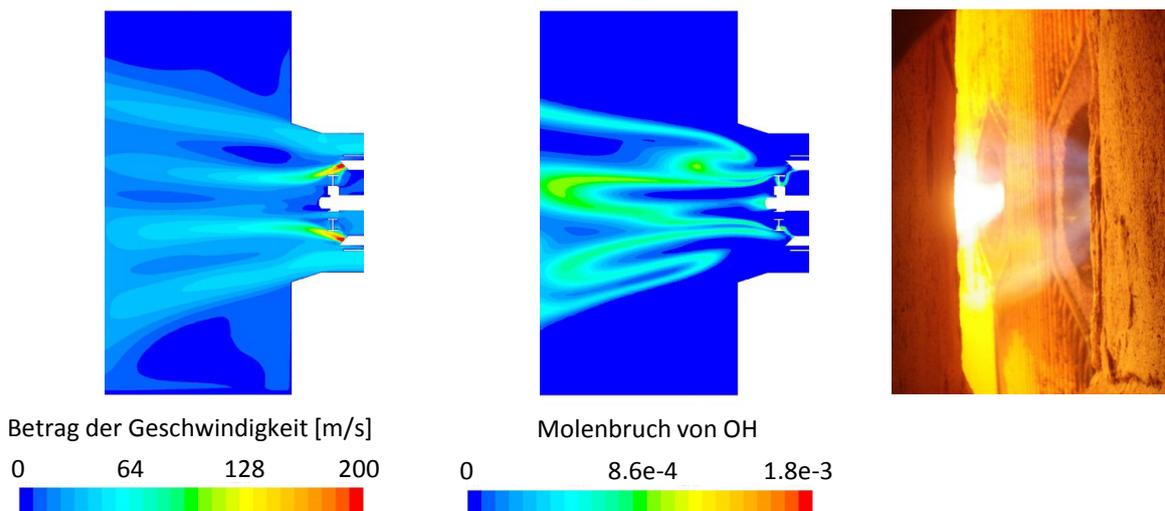


Abbildung 40: Visueller Vergleich der Flammenfront zwischen Simulation und realer Flamme im Gasbetrieb.

Der große Impulseintrag über die Gaslanzen ist im Geschwindigkeitsplot auf der linken Seite in Abbildung 40 zu erkennen. Der Grund für die Asymmetrie der Strömungsgeschwindigkeiten zwischen

Ober- und Unterseite liegt in der Schräglage des Geschwindigkeitsprofils im Primärluftkanal (vergl. Kapitel 5.2.3). Die gleiche Asymmetrie ist in der Darstellung des OH-Molenbruchs in der Mitte in Abbildung 40 zu erkennen. Hier ist der Einfluss der Strömungsgeschwindigkeit auf die Form und Position der nicht-vorgemischten, turbulenten Flamme zu erkennen. Aus der Darstellung der OH-Molenbruchs ist zu erkennen, dass die Zündung bereits in der Brennermuffel erfolgt. Dies ist ebenfalls in der Darstellung der tatsächlichen Flamme rechts in Abbildung 40 deutlich zu erkennen. Der Vergleich des Austrittswinkels zwischen den drei Darstellungen in Abbildung 40 zeigt sehr gute Übereinstimmung.

Der Fortschritt der Verbrennung lässt sich durch den Molenbruch von CO und CO₂ unter Berücksichtigung des Sauerstoffgehaltes (O₂) beurteilen. In Abbildung 41 ist der Molenbruch von O₂ in der Modellbrennkammer dargestellt.

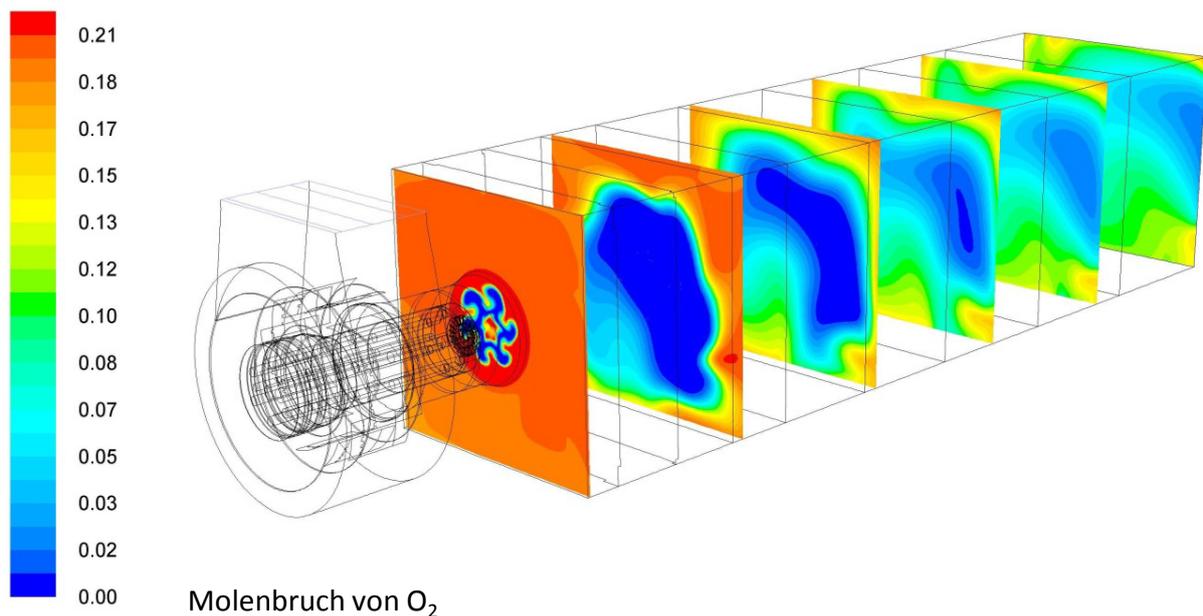


Abbildung 41: Molenbruch von O₂ in der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.

Abbildung 41 zeigt, dass im Kern der Strömung zu Beginn kaum O₂ vorhanden ist. Dieser sauerstoffarme Kern zieht sich bis in die vierte Ebene.

Das CO zeigt dabei Reaktionszonen in der Flamme, in denen das Gas noch nicht vollständig verbrannt ist. In Abbildung 42 ist der Molenbruch von CO in der Modellbrennkammer dargestellt.

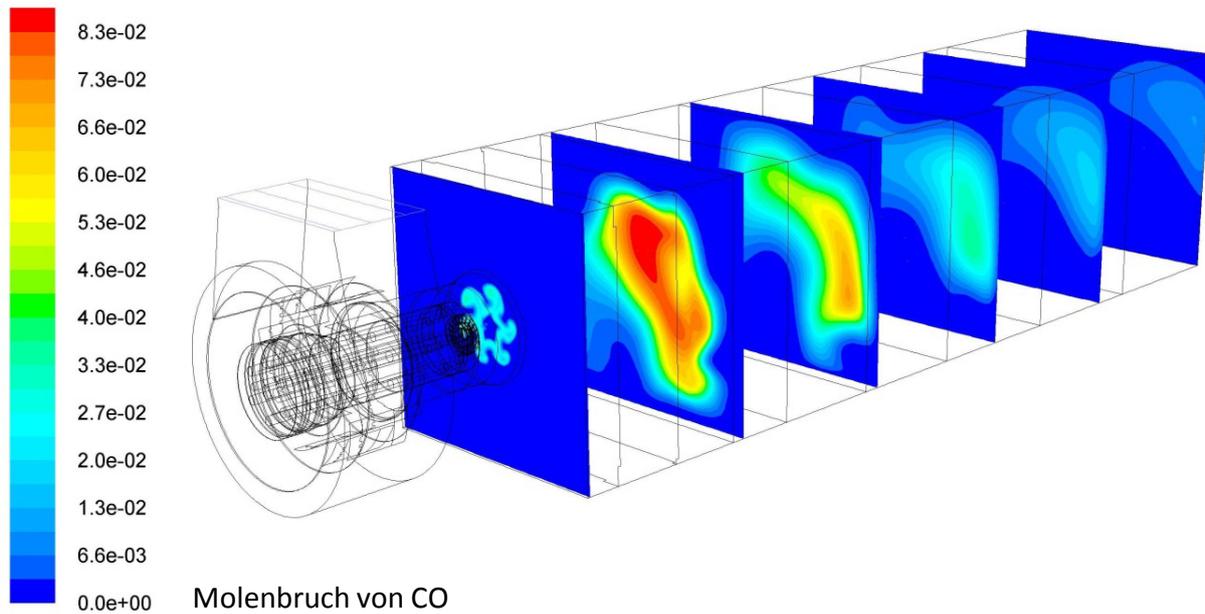


Abbildung 42: Molenbruch von CO in der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.

Abbildung 42 zeigt sehr gut, dass die verwendeten Modelle in der Lage sind einen langsamen Abbrand abzubilden. Die Bildung von CO im vorderen Kernbereich der Strömung stimmt mit der Flammenfront in Abbildung 39 sehr gut überein. Der Grund für die Ausbildung von CO im vorderen Bereich der Brennerachse lässt sich anhand der Darstellung des O₂-Molenbruchs in Abbildung 41 erklären. In diesem Bereich herrschen stark unterstöchiometrische Verhältnisse. Dies führt zu einer unvollständigen Verbrennung und damit zur Bildung von CO. In der letzten Ebene in Abbildung 42 ist zu erkennen, dass der Brennstoff nicht vollständig in der Modellbrennkammer verbrennt. Dies zeigt auch der OH-Molenbruch in Abbildung 39 in der letzten Ebene. Diese Übereinstimmung zeigt, dass die gewählten Modelle schlüssige Ergebnisse liefern.

Das CO_2 kommt in den Bereichen vor wo bereits der Verbrennungsprozess zum Teil bzw. vollständig abgeschlossen ist. Der Molenbruch von CO_2 ist in Abbildung 43 dargestellt.

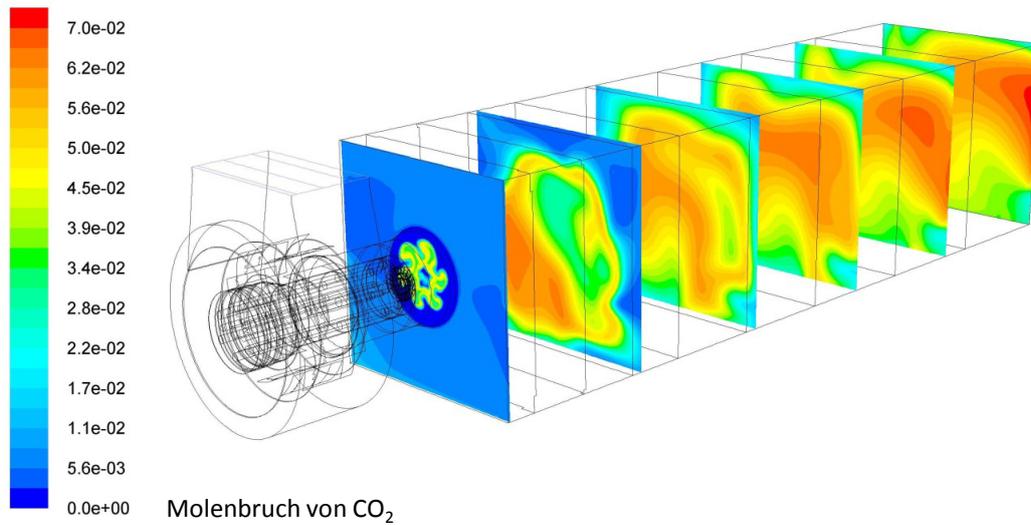


Abbildung 43: Molenbruch von CO_2 in der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.

Abbildung 43 zeigt eine gute Übereinstimmung mit den vorangegangenen Darstellungen der CH_2O -, OH -, O_2 - und CO -Molenbrüche. In Abbildung 43 ist gut der Ausbrand des CO 's zu CO_2 zu erkennen, da im hinteren Bereich bereits genügend O_2 auch im Kern der Strömung vorhanden ist (siehe dazu Abbildung 41).

Ist das Gas vollständig zu H_2O und CO_2 abgebrannt, so ist damit die gesamte chemisch gebundene Energie freigesetzt worden. Somit ist in den Bereichen hoher CO_2 -Konzentrationen auch eine hohe Temperatur zu erwarten.

Abbildung 44 zeigt die Temperatur in der Modellbrennkammer.

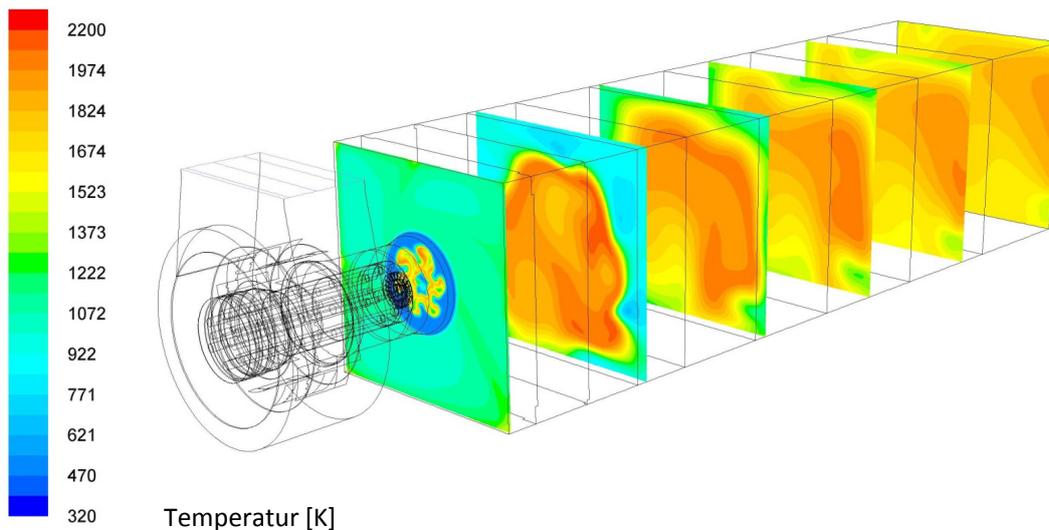


Abbildung 44: Temperatur in der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.

In Abbildung 44 ist zu erkennen, dass die Bereiche hoher Temperatur sich mit den Bereichen hoher CO_2 -Konzentrationen aus Abbildung 43 decken. Auch lässt sich in Abbildung 44 wieder das Anliegen

der Flamme an der rechten Modellbrennkammerseite vermuten. Die Bereiche maximaler Temperatur liegen deutlich unter der adiabaten Flammentemperatur des verwendeten Gases. Der Grund dafür liegt an den nicht-adiabaten Modellbrennkammerwänden.

Die Abbildungen zeigen schlüssige Ergebnisse. Die Zündung in der Brennermuffel, welche in die Flammenfront übergeht und zu CO und anschließend CO₂ verbrennt, passt sehr gut mit der jeweiligen Temperaturentwicklung und dem zur Verfügung stehenden O₂ zusammen. Auch der visuelle Vergleich der tatsächlichen Flamme zeigt eine gute Übereinstimmung mit den Simulationsergebnissen.

5.2.5.2 Einfluss der Kragenlänge des Zündschirmes

Im Zuge dieser Arbeit wurde der Einfluss der Kragenlänge des Zündschirms des untersuchten Brenners analysiert, da die Lebensdauer des Zündschirms in gewissen Betriebszuständen geringer ausfällt als erwartet. Diese Untersuchung erfolgte sowohl im Gas- als auch im Flüssigbrennstoffbetrieb des Brenners. Ausgehend von der originalen Länge des Kragens von $L_{\text{Kragen}} = 55 \text{ mm}$ wurde eine Variante mit einem um 70 mm verlängerten Kragen berechnet und analysiert.

Der Brenner-Austrittsbereich mit originalem Zündschirm (blau) und die lange Variante (rot) sind in Abbildung 45 dargestellt.

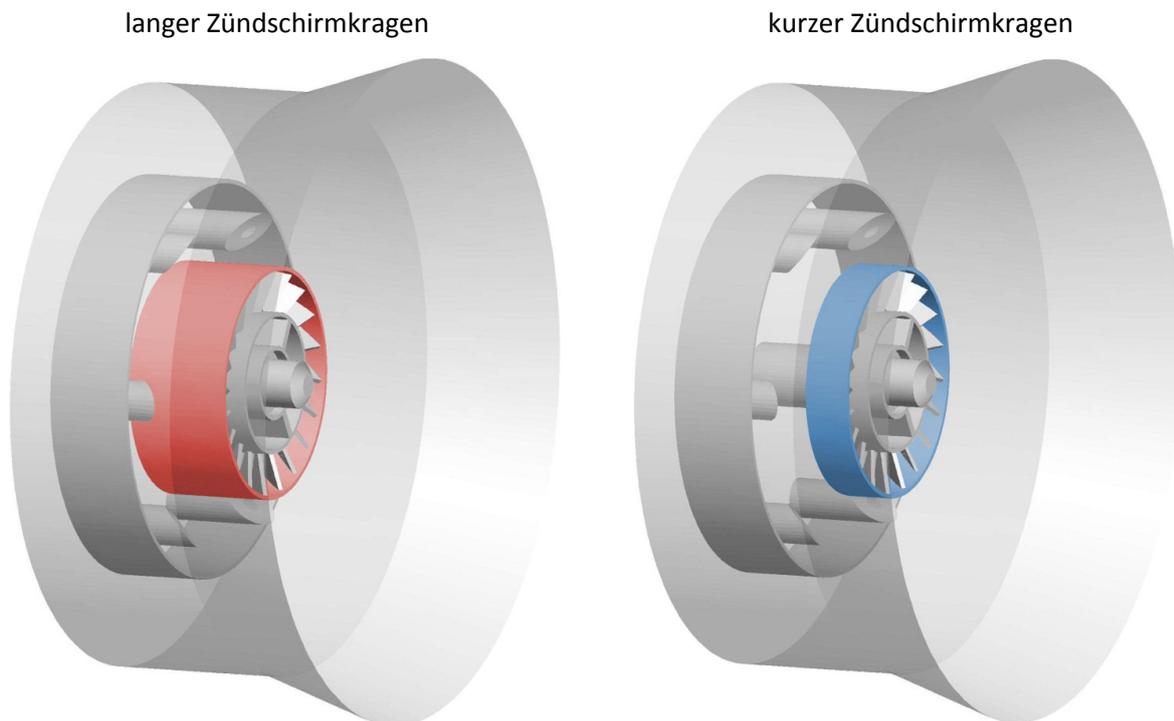


Abbildung 45: Zündschirm mit langem Kragen (links, in rot) und Zündschirm mit kurzem Kragen (rechts, in blau).

Ausgehend von 1500 Nm³/h Gas wurde ein Luftmassenstrom von 7,871 kg/s als Randbedingung festgelegt.

Die entsprechenden Randbedingungen sind in Tabelle 17 aufgelistet.

Tabelle 17: Randbedingungen für die Einzelbrenner-Simulation mit gasförmigem Brennstoff.

Randbedingung	Formelzeichen	Wert	Einheit
Massenstrom Luft	\dot{m}_{Luft}	7,871	kg/s
Massenstrom Gas pro Lanze	\dot{m}_{gas}	0,047	kg/s
Temperatur Primärluft	$T_{\text{Luft_prim}}$	503	K
Temperatur Sekundärluft	$T_{\text{Luft_sec}}$	503	K
Temperatur Gas	T_{gas}	323	K
Wandtemperatur	T_{Wand}	1573	K
Emissionsgrad der Wand	ϵ_{Wand}	0,6	
Emissionsgrad des Zündschirms	$\epsilon_{\text{Zündschirm}}$	0,3	
Luftverhältnis	λ	1,82	

Die Zuordnung der Randbedingungen, sowie das gesamte Berechnungsgebiet, bestehend aus Brenneraustrittsbereich und Modellbrennkammer sind Abbildung 20 und Abbildung 22 dargestellt.

Abbildung 46 zeigt die x-Komponenten der Geschwindigkeitsvektoren in der Modellbrennkammer bei kurzem und langem Zündschirmkragen, wobei jede Ebene einen Schnitt in der y-z Ebene darstellt.

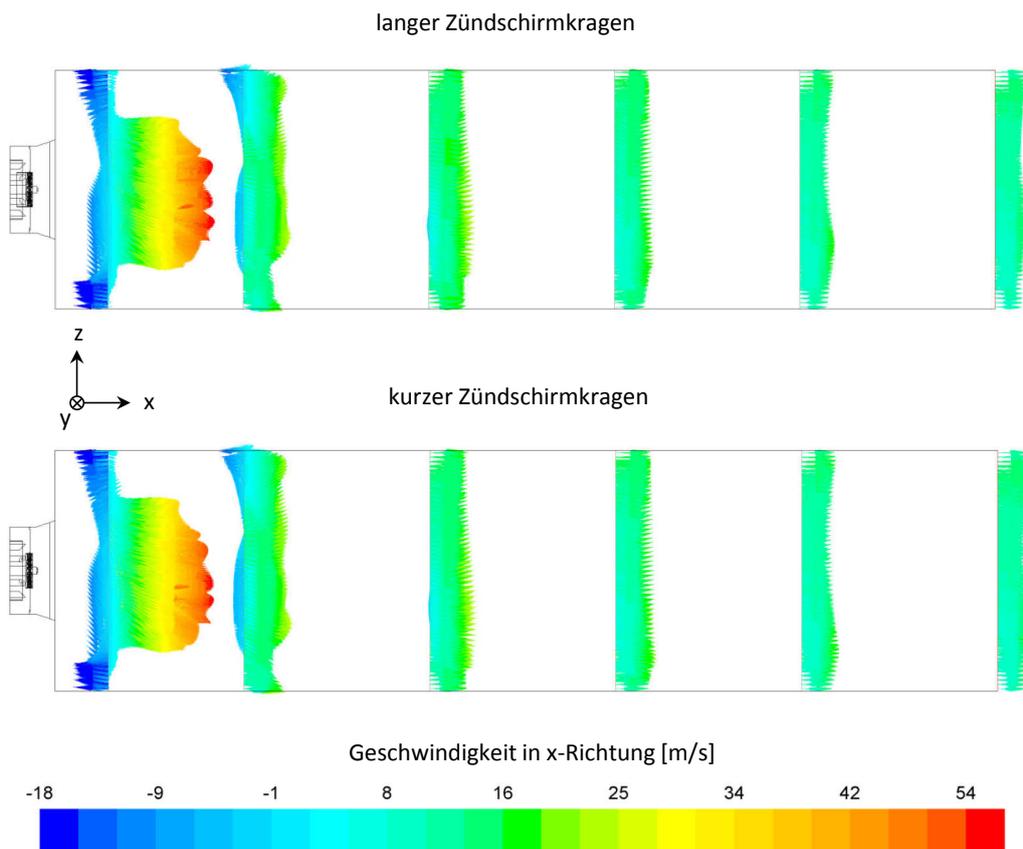


Abbildung 46: X-Komponente der Geschwindigkeitsvektoren in der Modellbrennkammer bei langem (oben) und kurzem Zündschirmkragen (unten) im Gasbetrieb.

Im Fall des langen Zündschirmkragens ist in Abbildung 46 in der ersten Ebene von links die Geschwindigkeit im Kern der Strömung etwas größer und die Strömung hat eine etwas geringere

Schiefelage. In der zweiten Ebene ist die Rückströmung in der Brennerachse im Fall des langen Zündschirmkragens kleiner. Ab der dritten Ebene sind keine Unterschiede mehr im Strömungsprofil zuerkennen. Der Grund für die erhöhte Geschwindigkeit und die geringere Schiefelage der Strömung im Fall des langen Zündschirmkragens liegt im kleineren, freien Querschnitt zwischen Gaslanzen und Zündschirmkragen, was einerseits die Strömung vergleichmäßigt und andererseits mehr Luft durch den Drallschirm strömen lässt.

In Abbildung 47 ist der Verlauf des OH-Molenbruchs im Bereich des Brenneraustrittes bei langem und kurzem Kragen dargestellt.

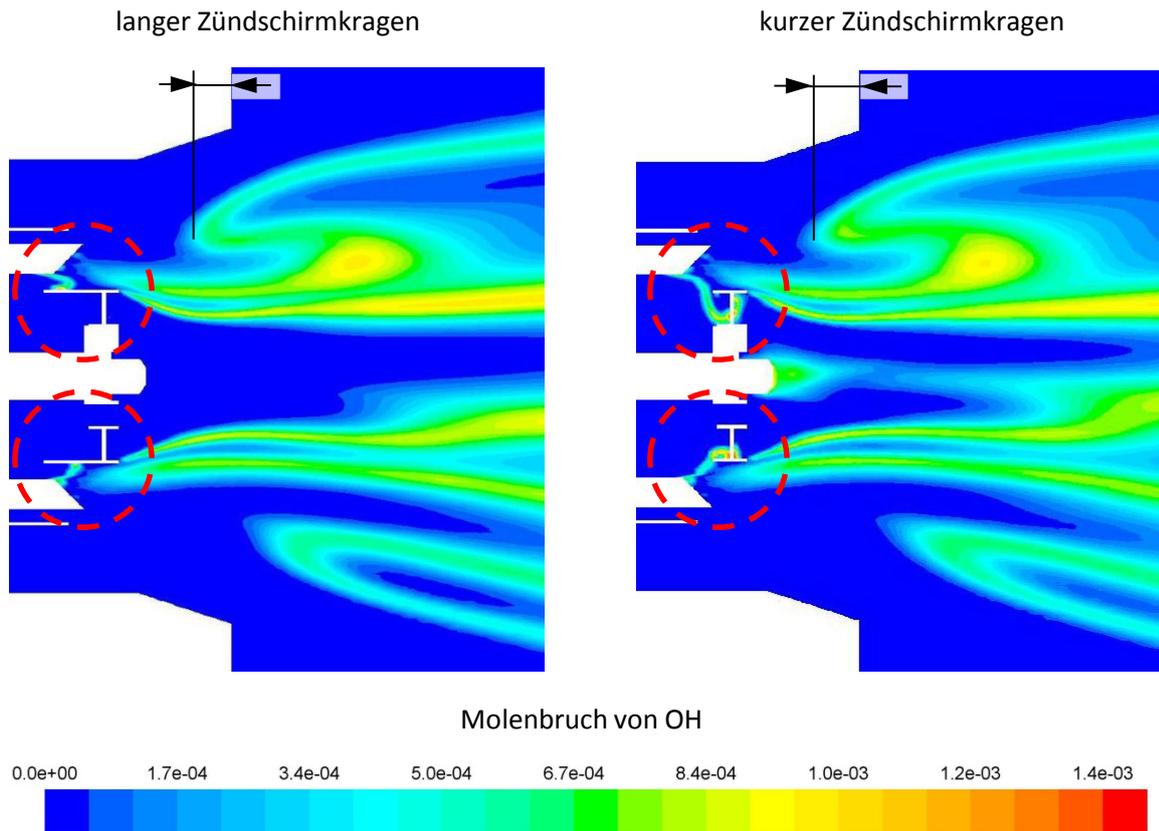


Abbildung 47: Molenbruch von OH im Bereich des Brenneraustrittes bei langem (links) und kurzem Zündschirmkragen (rechts) im Gasbetrieb.

Das Profil des OH-Molenbruchs ist in Abbildung 47 bei dem kurzen Kragen etwas mehr in die Brennermuffel hineingezogen (durch die Pfeile dargestellt) als beim langen Kragen. Beim Vergleich der rot eingekreisten Bereiche zeigt sich, dass im Fall des kurzen Kragens Strahlen des OH-Radikals durch den Zündschirm strömen, was auf eine Flammenfront im Zündschirm hindeutet. Dieses Phänomen tritt beim langen Kragen nicht auf, da der Kragen bereits vor den Austrittsöffnungen der Gaslanzen beginnt. Weiters gibt es im Fall des kurzen Kragens in der Brennerachse einen Bereich an OH-Radikalen, der bis an die Öllanze reicht. Dieser Bereich an OH-Radikalen ist im Fall des langen Kragens fast nicht vorhanden.

In Abbildung 48 ist der Temperaturverlauf im Bereich des Brenneraustrittes bei langem und kurzem Kragen dargestellt.

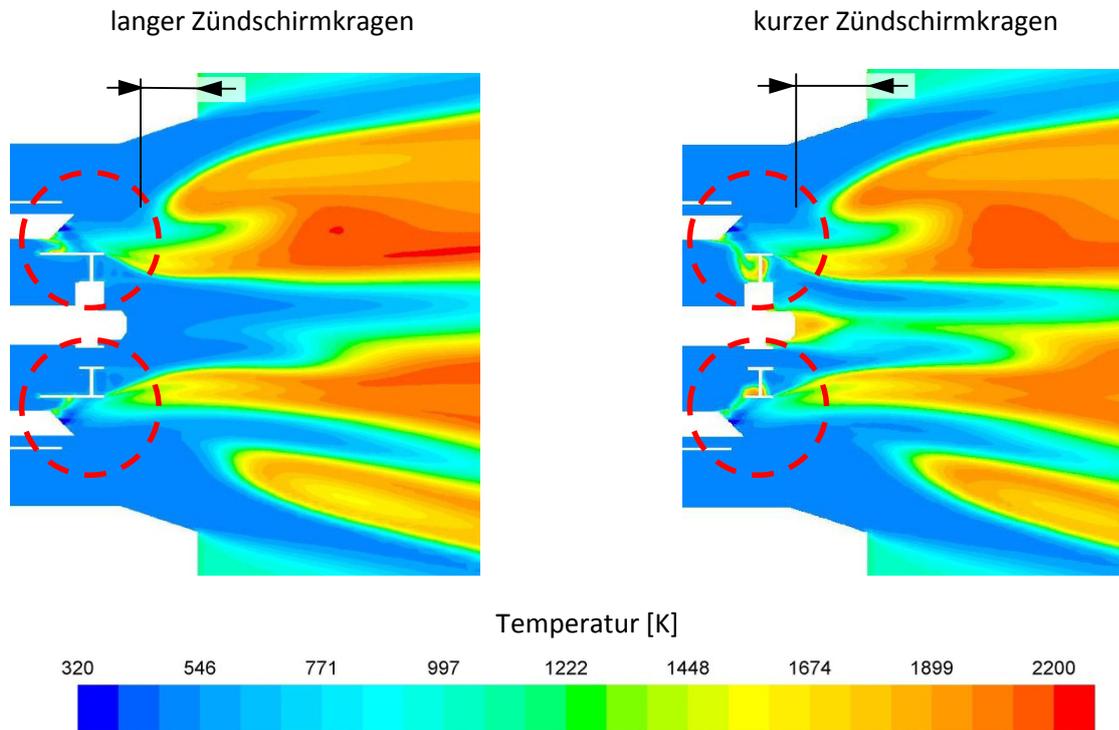


Abbildung 48: Temperaturverlauf im Bereich des Brenneraustrittes bei langem (links) und kurzem Zündschirmkragen (rechts) im Gasbetrieb.

Abbildung 48 zeigt die selben Merkmale wie Abbildung 47. Auch hier beginnt die Temperaturerhöhung im Fall des kurzen Kragens bereits etwas früher in der Brennermuffel (durch die Pfeile dargestellt), als im Fall des langen Kragens. In der Brennerachse zieht sich bei kurzem Kragen der Bereich erhöhter Temperatur (900-1200 K) bis an die Öllanze zurück und bildet dort einen heißen Zone von etwa 1500-1800 K. Dieser Bereich tritt bei langem Kragen deutlich kürzer auf und zieht sich nicht bis zur Öllanze zurück. Im Fall des kurzen Kragens ist die höhere Temperaturbelastung des Zündschirms im Inneren gut zu sehen (siehe rote Kreise rechts). Bei langem Kragen kommt es zu keiner Temperaturerhöhung im Inneren des Zündschirms, da der Eintritt von gasförmigem Brennstoff durch die Verlängerung des Kragens verhindert wird (siehe rote Kreise links).

Die Auswirkung der Zündschirmkragenlänge auf die Temperaturverteilung in der Modellbrennkammer ist in Abbildung 49 dargestellt.

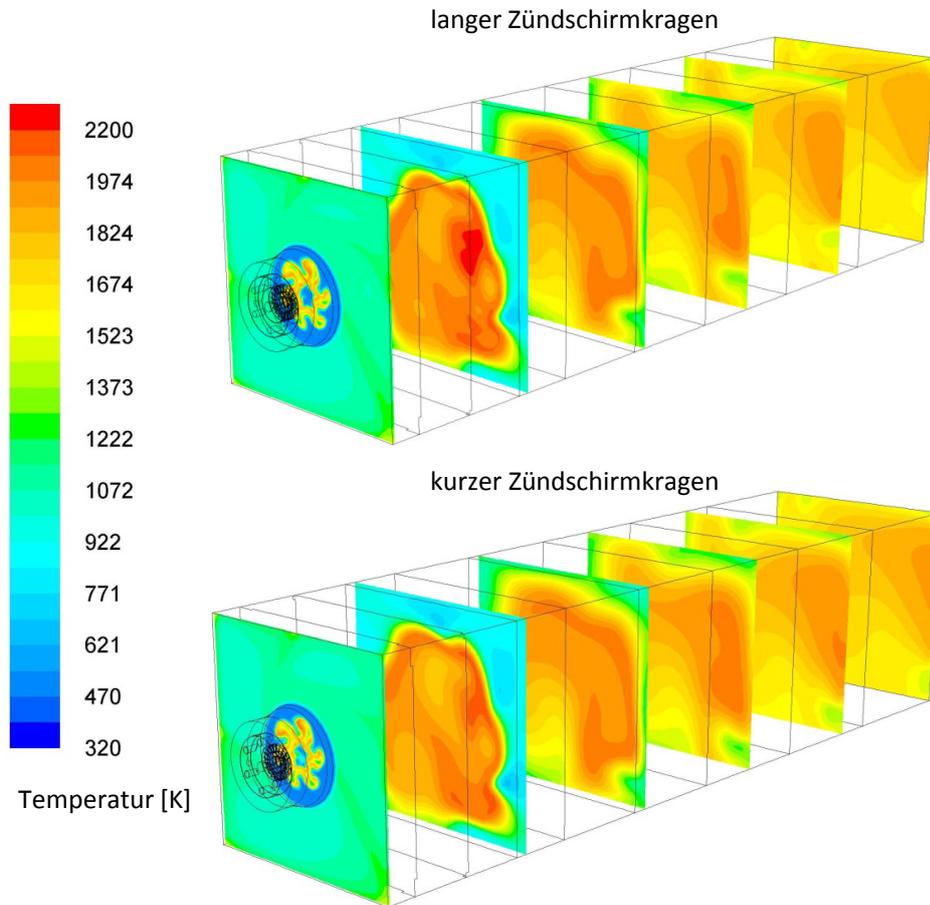


Abbildung 49: Temperaturverlauf in der Modellbrennkammer bei langem Zündschirmkragen (oben) und kurzem Zündschirmkragen (unten) im Gasbetrieb.

Die Simulationsergebnisse in Abbildung 49 zeigen, dass bei langem Kragen die Bereiche maximaler Temperatur auf allen Ebenen in der Modellbrennkammer etwas größer sind als bei kurzem Kragen. Die lokale Temperaturverteilung ist bei Betrachtung der gesamten Modellbrennkammer in beiden Fällen aber annähernd gleich. Somit ist im Vergleich der beiden Fälle bei langem Kragen die Temperaturentwicklung in der Brennernähe etwas höher. Wird der Zündschirmkragen gegen die Strömung der Primärluft um 70 mm verlängert, so strömt das Gas aus den Gaslanzen außen am Zündschirm vorbei. Somit findet innerhalb des Zündschirms keine Zündung bzw. Verbrennung statt. Dies verringert die thermische Belastung im Inneren des Zündschirms. Das Flammenbild in der Modellbrennkammer weist dabei keine starke Veränderung auf. Lediglich die Bereiche maximaler Temperatur werden etwas größer.

5.2.5.3 Zusammenfassung der Einzelbrennersimulation im Gasbetrieb

Der visuelle Vergleich der Flamme mit den Simulationsergebnissen zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Auch die einzelnen Verläufe des Molenbruchs der unterschiedlichen Spezies ergeben ein schlüssiges Ergebnis. Der Versuch mit Hilfe einer Einzelbrennersimulation die Flamme in einem Kessel zu untersuchen und zu analysieren zeigt ebenfalls sehr gute Ergebnisse.

Die Simulationsergebnisse mit verlängertem Zündschirmkragen belegen, dass die thermische Belastung des Drallschirms deutlich verringert werden kann. Hier sei erwähnt, dass die Wärmeleitung im Drallschirm selber nicht berücksichtigt wurde. Die Flammenform verändert sich dabei nur kaum und auch der Temperaturverlauf in der Modellbrennkammer blieb dabei nahe zu unverändert.

5.2.6 Einzelbrenner im Flüssigbrennstoffbetrieb

Dieses Kapitel zeigt die Simulationsergebnisse der Einzelbrenneruntersuchung im Flüssigbrennstoffbetrieb. Die Geometrie ist dabei dieselbe wie in den vorangegangenen Einzelbrenneruntersuchungen im Gasbetrieb. Die Randbedingungen des Berechnungsgebietes sind in Abbildung 22 dargestellt und unterscheiden sich ebenfalls nicht von den Untersuchungen im Gasbetrieb. Die für die Einzelbrennersimulationen im Flüssigbrennstoffbetrieb verwendeten Modelle sind in Tabelle 18 angegeben.

Tabelle 18: Modelle für die Einzelbrennersimulation mit flüssigem Brennstoff.

Modellierung von	Model
Verbrennung	Steady Diffusion FLAMLET (Ansys 2013)
Reaktionsmechanismus	n-Heptan (Bui-Pham & Seshadri 1991)
Turbulenz der Strömung	RSM
Chemie-Turbulenzinteraktion	PDF-Ansatz
Strahlung	P1
Absorptionskoeffizient	WSGGM domain based (Ansys 2013)
Turbulenzeinfluss auf disp. Phase	Discret Random Walk (DRW) Modell

Im Flüssigbrennstoffbetrieb wird der flüssige Brennstoff über Injektionszonen am Ende der Öllanze aufgegeben. Die Position und Lage der Injektionszonen ist in Abbildung 25 dargestellt. Die Randbedingungen für die Injektionszonen sind in Tabelle 19 dargestellt.

Tabelle 19: Randbedingungen der Injektionszonen des flüssigen Brennstoffes.

Randbedingung	Wert/Typ	Einheit
Partikel Typ	Droplet	
Temperatur	543	K
Geschwindigkeit	210	m/s
Menge	0,125	kg/s
min. Durchmesser	10	μm
max. Durchmesser	100	μm
Anzahl der diskreten Durchmesser	10	
n	2,881	
\bar{d}	52	μm

Bei den Untersuchungen wurde ein Luftmassenstrom von $\dot{m}_{\text{Luft}} = 7,418 \text{ kg/s}$ gewählt. Dies entspricht mit der Brennstoffmenge aus Tabelle 19 einem typischen Betriebszustand eines Brenners in der untersten Ebene im Kessel. Daraus ergibt sich ein Luftverhältnis für den Brenner von $\lambda = 1,49$.

Die Parameter n und \bar{d} aus Tabelle 19 sind dabei die Rosin-Ramler-Verteilungsparameter, welche die Tropfengrößenverteilung der aufgegebenen Tropfen festlegt. Die Werte für den minimalen und maximalen Durchmesser, sowie die Rosin-Ramler-Verteilungsparameter wurden aus der Arbeit von HOCHENAUER (Hochenauer 2005) übernommen.

Der flüssige Brennstoff wird mit Hilfe von Wasserdampf zerstäubt. Die Startgeschwindigkeit der Tropfen wurde mit der in Kapitel 4.4.3 gezeigten Methode abgeschätzt, wobei die für die Berechnung benötigten Werte in Tabelle 20 angegeben sind.

Tabelle 20: Berechnungsgrößen für die Abschätzung der Schallgeschwindigkeit eines zweiphasigen Gemisches.

Berechnungsgrößen	Abkürzung	Wert	Einheit	Bez.temp.	Bez.druck	Quelle
Dichte flüssiger Brennstoff	ρ_l	877	kg/m ³	523 K	-	API-ASTM-IP
Dichte Wasserdampf	ρ_g	0,4	kg/m ³	543 K	1 bar	IAPWS IF-97
Schallgeschw. fl. Brennstoff	c_l	980	m/s	359 K	1 bar	(Åseng 2006)
Schallgeschw. Wasserdampf	c_g	563	m/s	543 K	8,5 bar	IAPWS IF-97
Volumenanteil Wasserdampf	α	99,39	%			laut Betreiber

Der Bezugsdruck bezieht sich auf den Druck in der Brennkammer und wurde mit 1 bar angenähert. Die Bezugstemperatur entspricht unter Vernachlässigung des Dampfmassenstromes und der Reibung beim Zerstäubungsvorgang der Temperatur des flüssigen Brennstoffes vor der Zerstäubung. Im Fall der Schallgeschwindigkeit von Schweröl konnten keine besseren Werte in der Literatur gefunden werden als die angegebenen.

Die physikalischen Eigenschaften der flüssigen Tropfen werden in FLUENT mit denen von „liquid fuel oil“ gleichgesetzt und sind in Tabelle 21 angegeben.

Tabelle 21: Physikalische Eigenschaften der flüssigen Brennstofftropfen aus FLUENT.

Eigenschaft	Wert	Einheit
Dichte	960	kg/m ³
spezif. Wärmekapazität	1880	J/kg K
Wärmeleitfähigkeit	0.12	W/m K
dynam. Viskosität	0.048	kg/m s
Molekulargewicht	258,19	kg/kmol
Verdampfungswärme	12400	J/kg
Verdampfungstemperatur	400	K
Siedepunkt	589	K
Flüchtige Bestandteile	100	%
Binärer Diffusionskoeffizient	$3,79 \cdot 10^{-6}$	m ² /s

In FLUENT lässt sich die verdampfende Komponente der flüssigen Brennstofftropfen separat definieren. Hier wurde C₇H₁₆ (n-Heptan) als verdampfende Komponente festgelegt. Der Anteil, der in der dispersen Phase verdampft ist somit reines C₇H₁₆. In der Simulation tritt dieser durch einen örtlichen Quellterm in die kontinuierliche Gasphase über.

Der Verbrennungsprozess in der Gasphase wird durch einen vereinfachten Reaktionsmechanismus für n-Heptan abgebildet. Dieser Reaktionsmechanismus von BUI-PHAM und SESHADRI (Bui-Pham & Seshadri 1991) wurde bereits von HOCHENAUER in seiner Dissertation (Hochenauer 2005) erfolgreich eingesetzt.

5.2.6.1 Analyse der Flamme

In Abbildung 50 sind die x-Komponenten der Geschwindigkeitsvektoren in der Modellbrennkammer dargestellt, wobei jede Ebene einen Schnitt in der y-z Ebene abbildet. Dies zeigen die etwas gedrehten und vergrößerten Darstellungen der Ebene 1 und 2 im unteren Bildabschnitt von Abbildung 50.

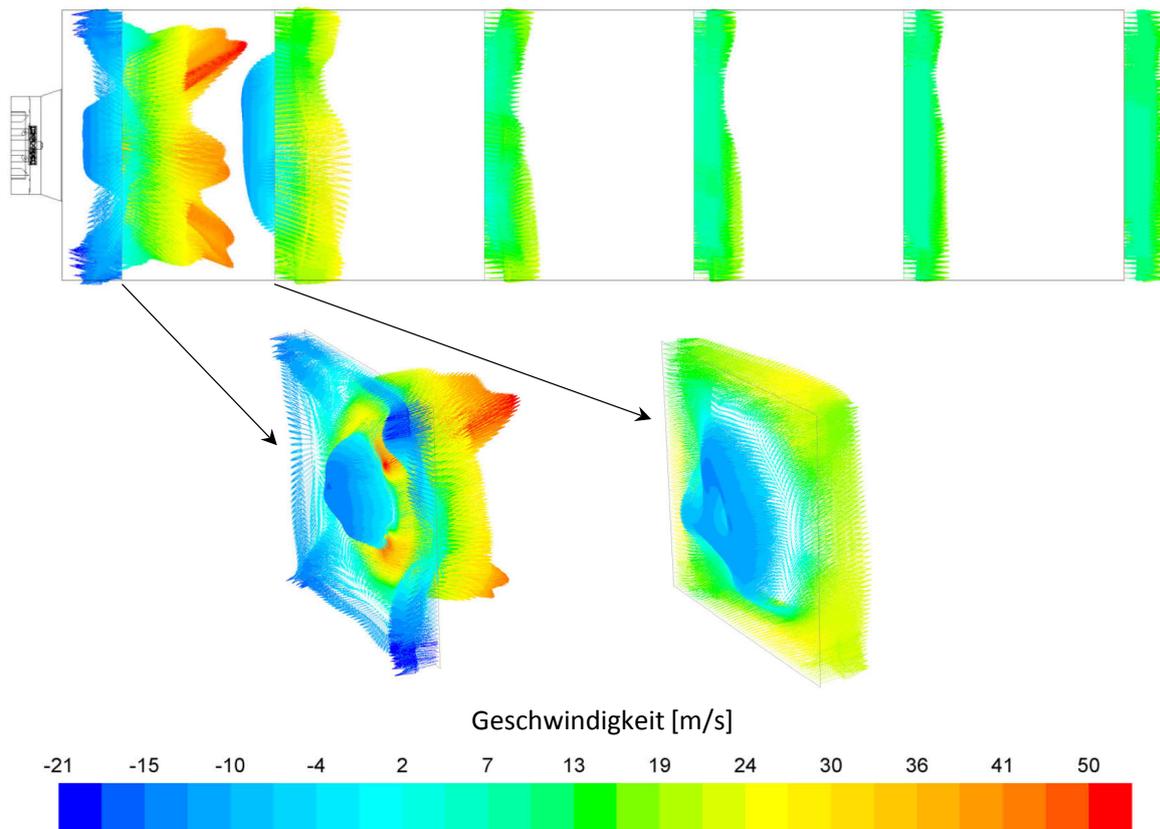


Abbildung 50: X-Komponente der Geschwindigkeitsvektoren in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Im Eintrittsbereich (erste Ebene auf der linken Seite in Abbildung 50) der Modellbrennkammer ist der hohe Impulseintrag über die drei Strahlen des flüssigen Brennstoffs zu sehen. Dieser verursacht Rückströmungen im Randbereich der Modellbrennkammer und ist in der ersten und zweiten Ebene gut zu erkennen. In der zweiten Ebene hat sich die Strömungsgeschwindigkeit über die Querschnittsfläche der Modellbrennkammer bereits stark vergleichmäßigt. Im Kern der Strömung (Brennerachse) ist ein Bereich, in dem ebenfalls eine Rückströmung auftritt. Ab der dritten Ebene treten keine Rückströmungen mehr auf und am Austritt der Modellbrennkammer liegt ein gleichmäßiges Strömungsprofil vor.

Abbildung 51 zeigt den Plot der Iso-Surface des Molenbruchs von CH_2O bei $1 \cdot 10^{-4}$ mol/mol eingefärbt mit der Temperatur in K.

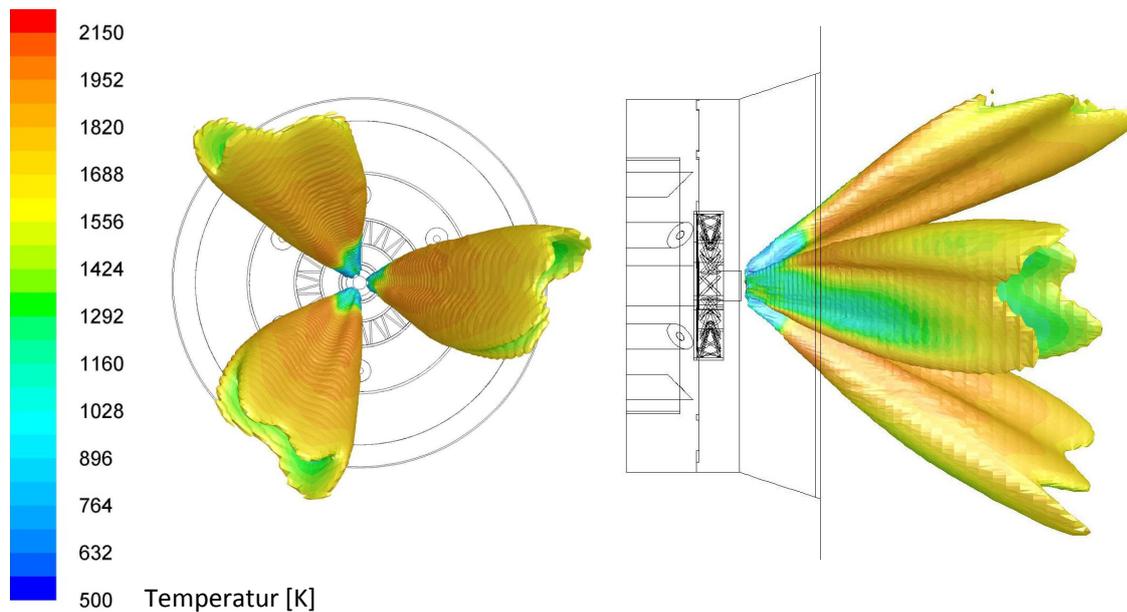


Abbildung 51: Iso-Surface des Molenbruchs von CH_2O bei $1 \cdot 10^{-4}$ mol/mol eingefärbt mit der Temperatur zwischen 500 und 2150 K.

In Abbildung 51 ist die Zündung des Öldampfes bereits beim Austritt aus der Brennermuffel durch den fast sprunghaften Temperaturanstieg von etwa 1100 auf ca. 2000 K zu erkennen, wobei auf der Innenseite der drei Strahlen der Temperatursprung größer und schärfer auftritt als auf der Außenseite.

Abbildung 52 zeigt den Vergleich der Zündung Anhand des CH_2O -Molenbruchs zwischen Gas- und Flüssigbrennstoffbetrieb.

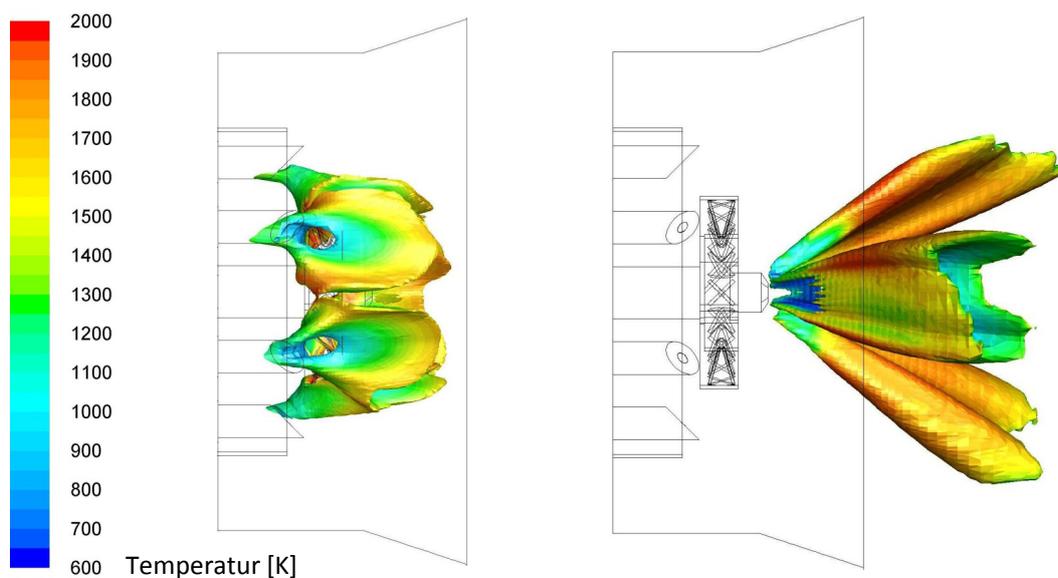


Abbildung 52: Iso-Surface des Molenbruchs von CH_2O im Gasbetrieb bei $1 \cdot 10^{-5}$ mol/mol (links) und Iso-Surface des Molenbruchs von CH_2O im Flüssigbrennstoffbetrieb bei $5 \cdot 10^{-4}$ mol/mol (rechts) eingefärbt mit der Temperatur zwischen 0 und 2000 K.

Der Vergleich der beiden Iso-Surfaces der CH_2O -Molenbrüche in Abbildung 52 zeigt in beiden Fällen, dass der Brennstoffstrahl an der Außenseite des Strahls gezündet wird. Dabei erfolgt die Zündung des gasförmigen Brennstoffes früher als die des flüssigen Brennstoffes, der aufgrund seines Aggregatzustandes erst verdampft werden muss bevor er gezündet werden kann. Im Fall des flüssigen Brennstoffes erfolgt die Zündung weiter von der Brennstofflanze entfernt. Auch die Eindringtiefe des CH_2O -Radikals in die Modellbrennkammer ist bei dem flüssigen Brennstoff deutlich größer, da ständig neuer Brennstoff verdampft (vergl. dazu die mittlere Verweilzeit in Abbildung 53). Durch den größeren Impulseintrag bzw. durch die Anordnung der Austrittsöffnungen im Fall des Flüssigbrennstoffbetriebes bildet sich eine im radialen Querschnitt viel größere Flamme aus.

Abbildung 53 zeigt die Flugbahn der Tropfen eingefärbt mit der mittlere Verweilzeit, einen Iso-Surface Plot des CH_2O -Radikals bei $1 \cdot 10^{-4}$ mol/mol eingefärbt mit der Temperatur, sowie eine Aufnahme der realen Flamme im mit Flüssigbrennstoff betriebenen Gesamtkessel, fotografiert durch einen Schweißschirm (daher die blaue Färbung).

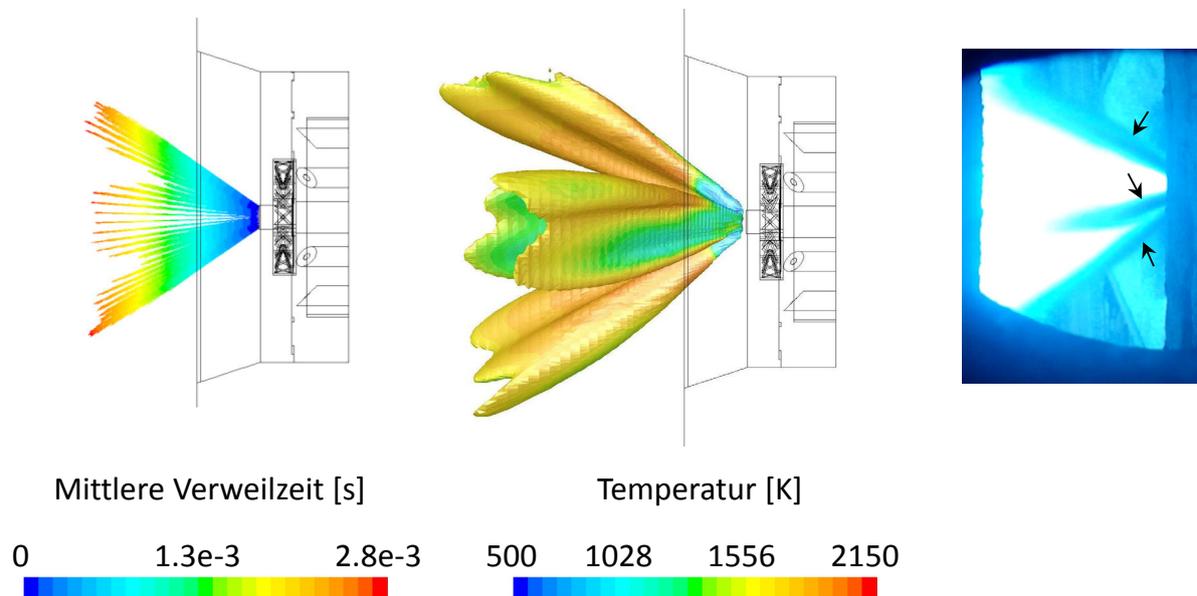


Abbildung 53: Visueller Vergleich zwischen Simulationsergebnis und realer Flamme des flüssigen Brennstoffes.

In Abbildung 53 sind bei der realen Flamme (rechts) die drei Strahlen des flüssigen Brennstoffes gut an den dunklen Bereichen am Rand und in der Mitte des Flammenkegels zu erkennen (siehe Pfeile). Der Vergleich der Eindringtiefe der Tropfen zwischen Simulation (links) und realer Flamme (rechts) zeigt eine sehr gute Übereinstimmung. Auch die Lage der drei Brennstoffstrahlen in der Simulation (Mitte) ist übereinstimmend mit der realen Flamme. Der Vergleich zwischen Eindringtiefe (links) und starker Temperaturanstieg infolge von Zündung (Mitte) mit der realen Flamme (rechts) zeigt ebenfalls eine ausgesprochen gute Übereinstimmung.

Abbildung 54 zeigt den Verlauf des OH-Molenbruchs in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

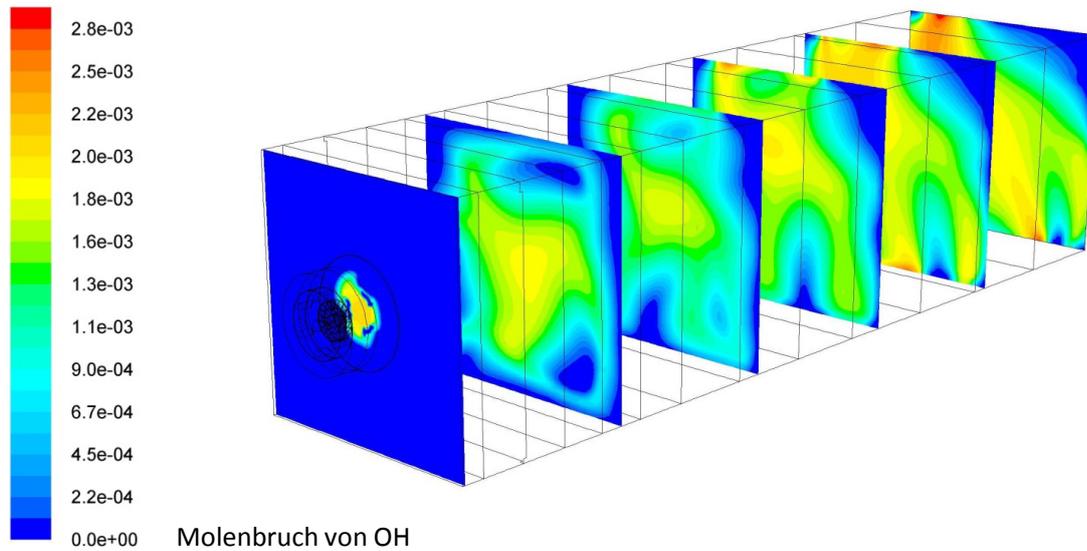


Abbildung 54: Molenbruch von OH in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

In der zweiten und dritten Ebene in Abbildung 54 sind noch die Strahlen des flüssigen Brennstoffs an den kleinen blauen Inseln zu erkennen. Hier zeigt sich gut der Zusammenhang mit Abbildung 51, denn die Flammenfront (hier mit dem OH-Molenbruch dargestellt) wird hier quasi von den drei Brennstoffstrahlen aufgespannt, was auch die höheren Temperaturen im Kern der Strömung erklärt.

Abbildung 55 zeigt den Verlauf des O₂-Molenbruchs in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

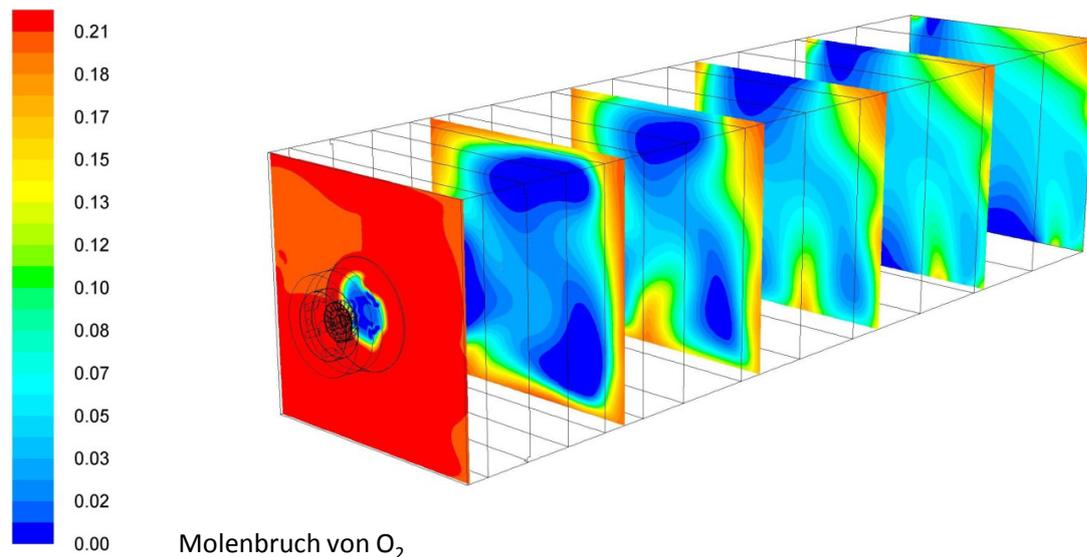


Abbildung 55: Molenbruch von O₂ in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

In Abbildung 55 sind die drei Strahlen des flüssigen Brennstoffs auf der zweiten, dritten und vierten Ebene zu sehen. In diesen drei Bereichen ist kaum O₂ vorhanden. Diese drei Zonen verkleinern sich bis zum Austritt der Modellbrennkammer, wobei eine Zone dabei ganz verschwindet. Beim Vergleich

der Positionen der O_2 -armen Bereiche, zeigt sich die Drallrichtung in der Brennkammer, die durch die Primär- und Sekundärluft induziert wird. In der Brennerachse ist bereits ab der ersten Ebene O_2 vorhanden. Dies kommt dadurch zustande, dass die Aufgabe des flüssigen Brennstoffes zwar mittig ist, aber nur in drei Strahlen erfolgt. Somit kann zwischen den Brennstoffstrahlen die Luft auch in den Kern der Strömung gelangen. Dieser Vorgang ist in Ebene zwei gut zu sehen.

Abbildung 56 zeigt den Verlauf des CO-Molenbruchs in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

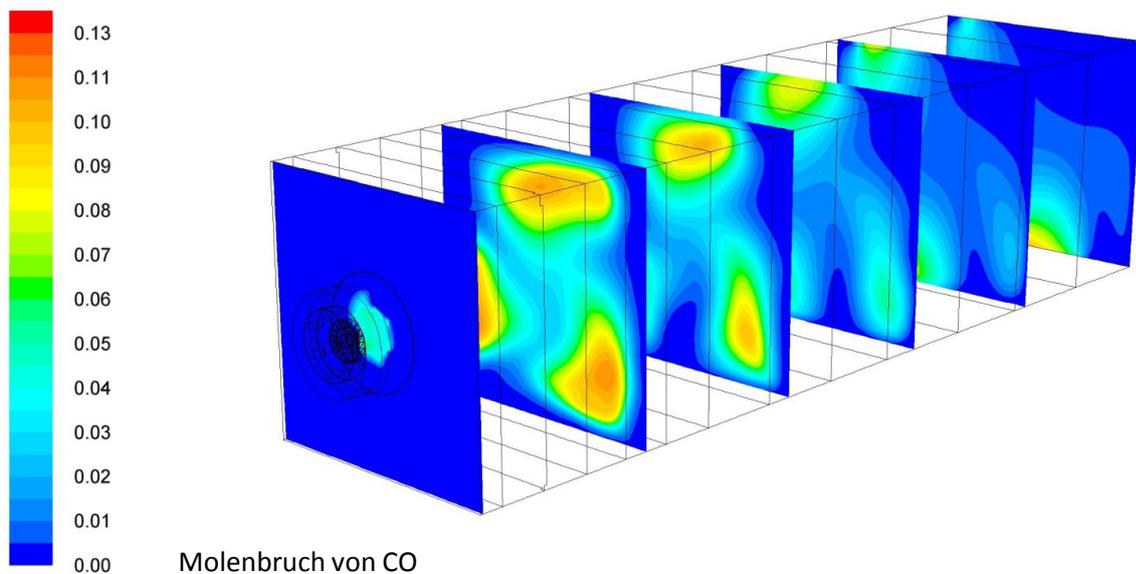


Abbildung 56: Molenbruch von CO in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Vergleicht man den O_2 -Molenbruch in Abbildung 55 mit dem CO-Molenbruch in Abbildung 56, so zeigt sich, dass in den O_2 -armen Bereichen der Brennstoff unterstöchiometrisch verbrennt und damit nur zu CO oxidiert wird. Erst mit zunehmendem O_2 -Gehalt Richtung Austritt der Modellbrennkammer verschwinden die Bereiche mit hohem CO-Anteil. In der letzten Ebene ist klar zu erkennen, dass kein vollständiger CO-Ausbrand vorliegt.

Abbildung 57 zeigt den Verlauf des CO_2 -Molenbruchs in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

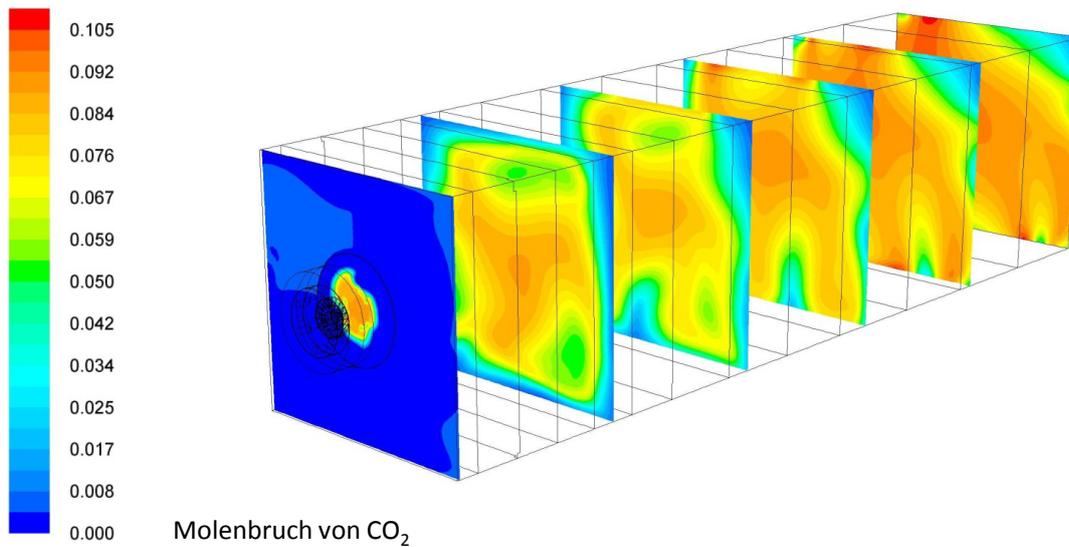


Abbildung 57: Molenbruch von CO_2 in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Die Darstellung des CO_2 -Molenbruchs in Abbildung 57 zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit den zuvor gezeigten OH-, O_2 -, und CO-Molenbrüchen. Im Kern der Strömung ist genügend O_2 vorhanden (vgl. Abbildung 55), sodass hier der Brennstoff zum größten Teil vollständig zu CO_2 oxidiert werden kann. Dies ist in Abbildung 57 ab der ersten Ebene zu sehen.

Abbildung 58 zeigt den Verlauf der Temperatur in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

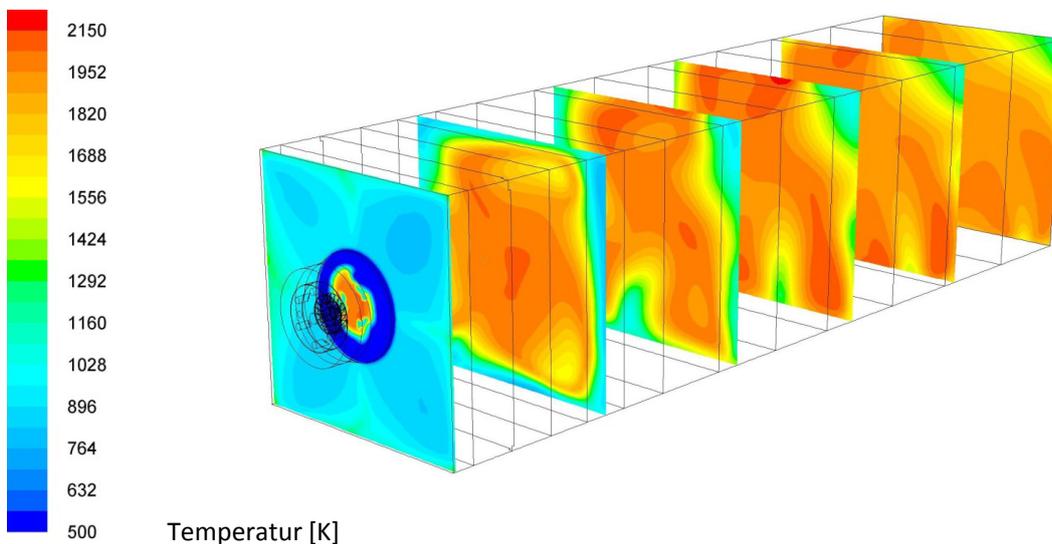


Abbildung 58: Temperaturverteilung in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Die Darstellung des Temperaturverlaufes in Abbildung 58 zeigt große Übereinstimmungen mit den zuvor gezeigten Molenbrüchen. Die Bereiche hoher CO_2 -Molenbrüche aus Abbildung 57 decken sich wieder mit den Bereichen hoher Temperaturen in Abbildung 58, die durch die zum Teil vollständige

Umsetzung der chemisch gebundenen Energie in Wärme entstehen. Die Temperaturen liegen deutlich unter der adiabaten Verbrennungstemperatur. Der Grund dafür liegt im Wärmefluss über die Wand ($T_{\text{Wand}} = 1573 \text{ K}$ und $\epsilon_{\text{Wand}} = 0,6$).

Die Abbildungen zeigen schlüssige Ergebnisse. Die Eindringtiefe der Brennstofftropfen, das Verdampfen und Zünden des Brennstoffes, sowie die lokalen Verläufe von OH-, CO-, CO₂-Molenbruch und Temperatur passen untereinander und mit der realen Flamme zusammen. Die Ergebnisse zeigen, dass die gewählten Modelle geeignet sind, die Verbrennung von flüssigem Brennstoff abzubilden.

5.2.6.2 Einfluss der Kragenlänge des Zündschirmes

Wie bereits im Gasbetrieb, wurde der Einfluss der Zündschirmkragenverlängerung auch im Flüssigbrennstoffbetrieb untersucht. Ausgehend von der originalen Länge des Kragens von $L_{\text{Kragen}} = 55 \text{ mm}$ wurde wieder eine Verlängerung um 70 mm entgegen der Strömungsrichtung untersucht. Die genauere Beschreibung ist dem Kapitel 5.2.5.2 und der Abbildung 45 zu entnehmen.

Abbildung 59 zeigt die x-Komponenten der Geschwindigkeitsvektoren in der Modellbrennkammer bei kurzem und langem Zündschirmkragen, wobei jede Ebene einen Schnitt in der y-z Ebene darstellt.

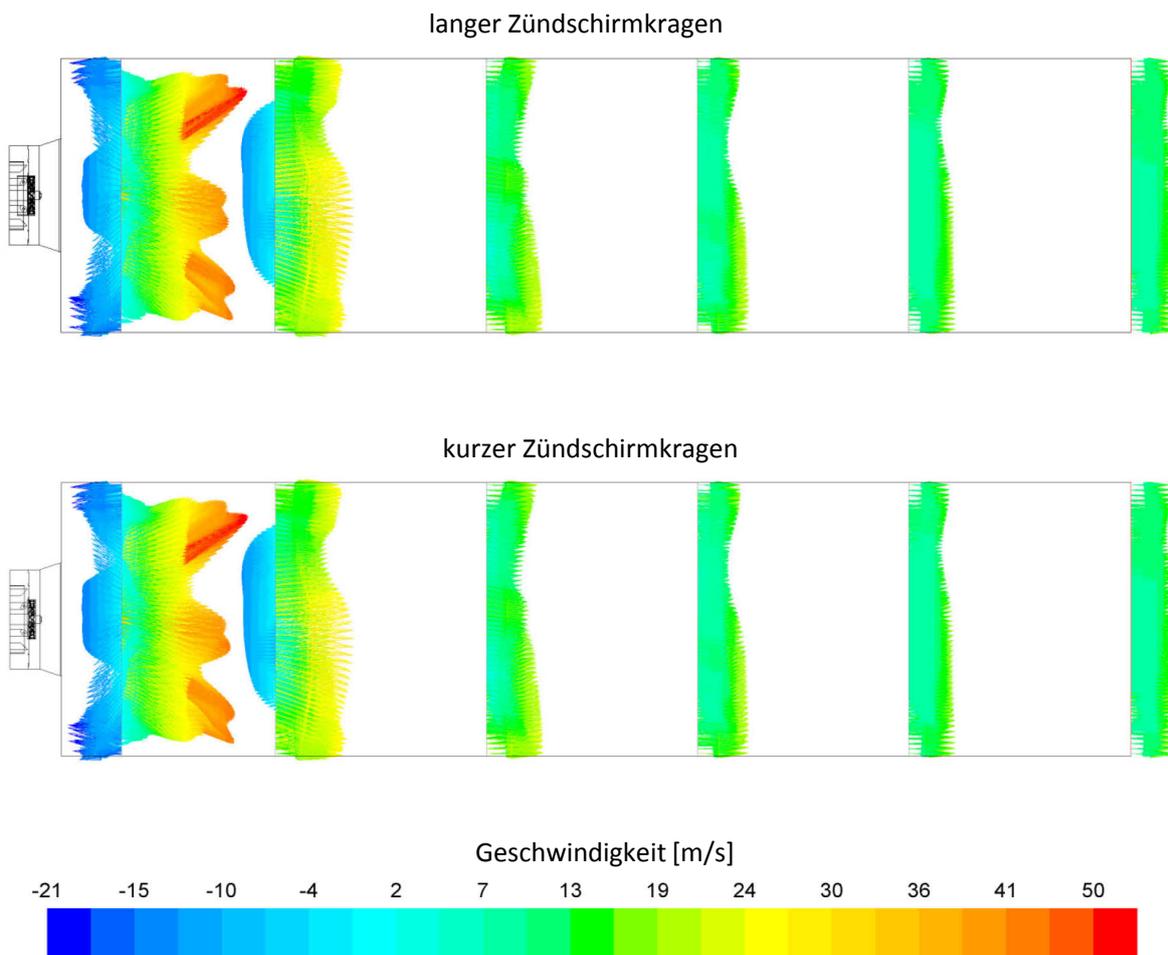


Abbildung 59: X-Komponente der Geschwindigkeitsvektoren in der Modellbrennkammer bei langem (oben) und kurzem Zündschirmkragen (unten) im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Beim Vergleich von langem (oben) und kurzem Zündschirmkragen (unten) in Abbildung 59 sind keine großen Abweichungen zu erkennen. In beiden Fällen sind die drei Strahlen zu erkennen und die Größe der Rückströmungszonen ist ebenfalls gleich.

Abbildung 60 zeigt den OH-Molenbruch als Indikator für die Flammenfront im Bereich des Brenneraustrittes bei langem und kurzem Kragen im Flüssigbrennstoffbetrieb.

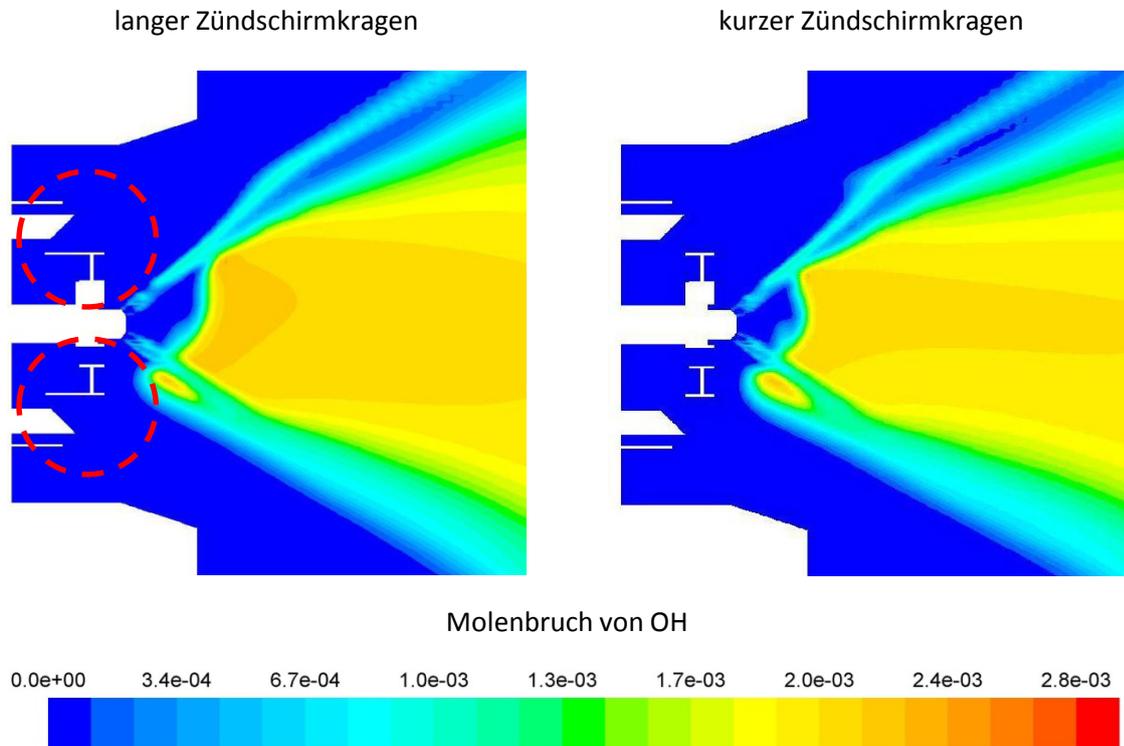


Abbildung 60: Molenbruch von OH im Bereich des Brenneraustrittes bei langem (links) und kurzem Zündschirmkragen (rechts) im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Der Unterschied des OH-Molenbruchverlaufes bei langem und kurzem Zündschirmkragen ist sehr gering. Im Fall des langen Kragens (rote Kreise) befindet sich die Flammenfront in der Brennerachse etwas weiter von der mittig angeordneten Öllanze entfernt. Der Molenbruchverlauf der beiden Fälle in Richtung Modellbrennkammeraustritt weicht nur geringfügig voneinander ab.

Abbildung 61 zeigt den Temperaturverlauf im Bereich des Brenneraustrittes bei langem und kurzem Kragen im Flüssigbrennstoffbetrieb.

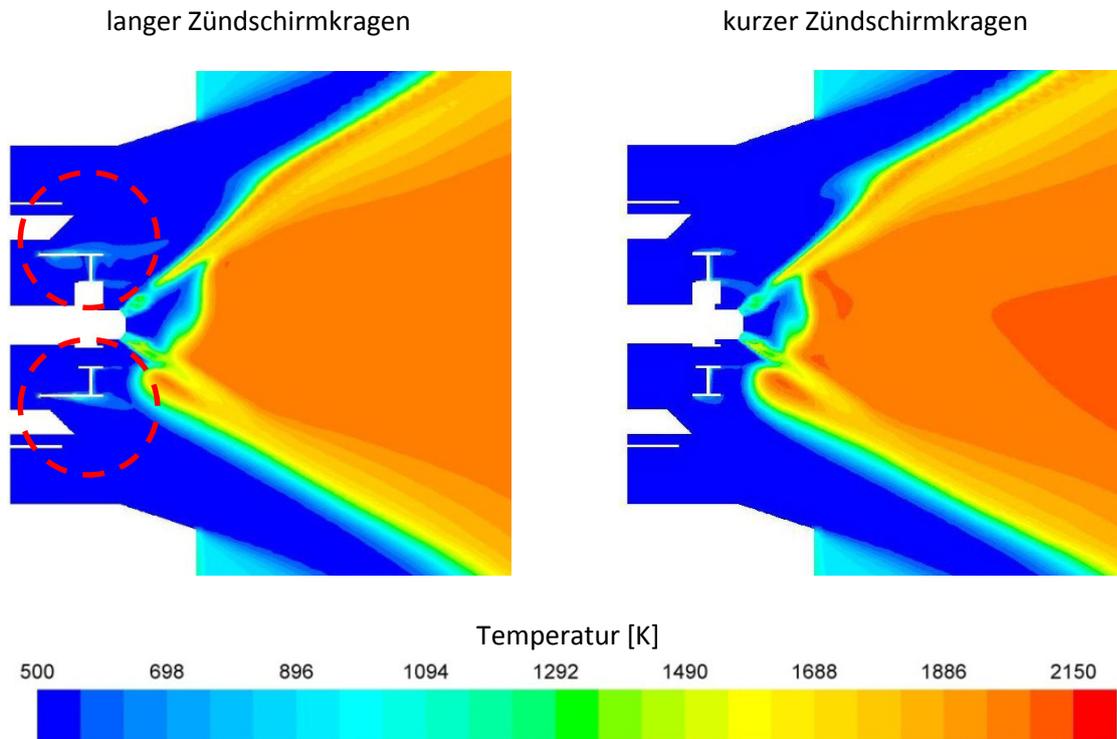


Abbildung 61: Temperaturverlauf im Bereich des Brenneraustrittes bei langem (links) und kurzem Zündschirmkragen (rechts) im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Abbildung 61 zeigt nur geringe Unterschiede im Temperaturverlauf bei langem und kurzem Zündschirmkragen. Auch hier liegt die Temperaturerhöhung im Fall des langen Zündschirmkragens (rote Kreise) etwas weiter von der Öllanze entfernt, als im Fall des kurzen Kragens. Im Fall des kurzen Kragens treten kleine Bereiche höherer Temperatur auf, die bei langem Kragen nicht auftreten.

Abbildung 62 zeigt den Temperaturverlauf in der Modellbrennkammer bei langem und kurzem Zündschirmkragen im Flüssigbrennstoffbetrieb.

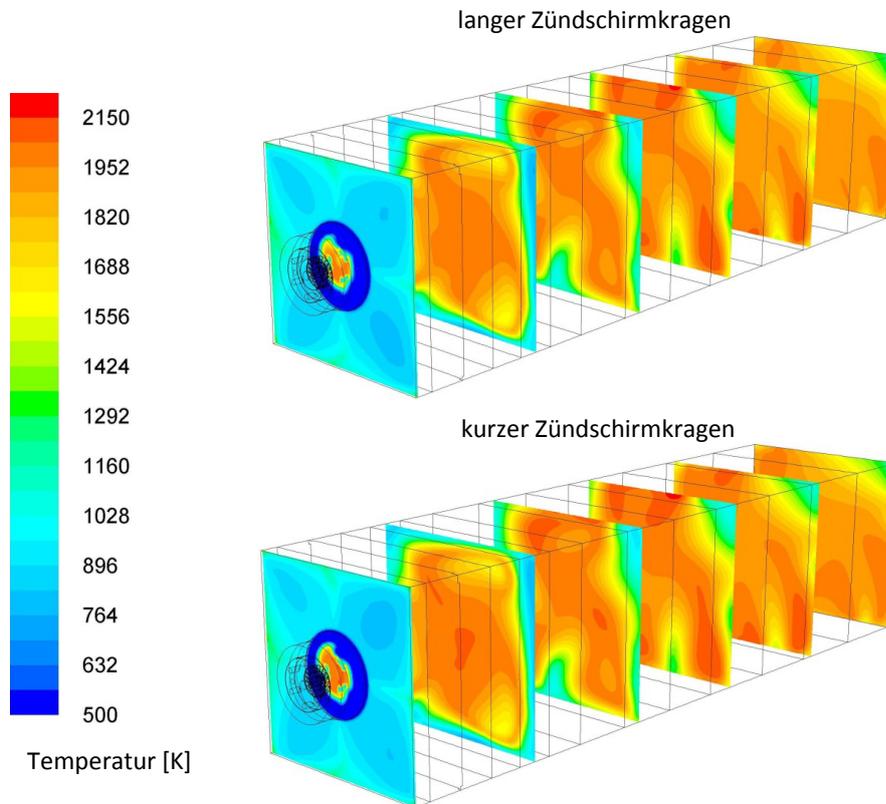


Abbildung 62: Temperaturverlauf in der Modellbrennkammer bei langem Zündschirmkragen (oben) und kurzem Zündschirmkragen (unten) im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Die Simulationsergebnisse in Abbildung 62 zeigen, dass bei langem Kragen die Bereiche maximaler Temperatur auf allen Ebenen in der Modellbrennkammer etwas kleiner sind als bei kurzem Kragen. Die lokale Temperaturverteilung ist bei Betrachtung der gesamten Modellbrennkammer in beiden Fällen aber annäherungsweise gleich.

Wird der Zündschirmkragen gegen die Strömung der Primärluft um 70 mm verlängert, so ergeben sich weder im Flammenbild, noch beim Temperaturverlauf in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb keine großen Veränderungen.

5.2.6.3 Zusammenfassung der Einzelbrennersimulation im Flüssigbrennstoffbetrieb

Die Simulationsergebnisse zeigen ein sehr schlüssiges Abbild der realen Flamme. Sowohl die einzelnen Verläufe der Molenbrüche von OH, O₂, CO und CO₂ als auch der Temperaturverlauf zeigen ein stimmiges Ergebnis. Der visuelle Vergleich der Simulationsergebnisse mit der realen Flamme unterstreicht die Gültigkeit der gewählten Modelle für diesen Anwendungsbereich und die gewählten Randbedingungen. Er zeigt auch, dass die Analyse der Flamme im vorderen Bereich der Brennkammer in einem Kessel durch eine Einzelbrennersimulation mit entsprechend gewählten Randbedingungen möglich ist.

Die Variantenrechnung mit verlängertem Zündschirmkragen zeigte keinen großen Einfluss auf die Strömung bzw. das Flammenbild im Flüssigbrennstoffbetrieb.

6 Gesamtkesselsimulation

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Gesamtkessel-Simulationen gezeigt. Im ersten Teil wird der Kessel mit Gas und im zweiten Teil mit flüssigem Brennstoff simuliert. Die Zusammensetzung des Brennstoffes, sowie die Definition der einzelnen Aufgabebereiche sind dabei mit den jeweiligen Einzelbrennersimulationen ident.

Für die Simulation des gesamten Kessels mit acht Brennern wurde eine neue Geometrie vernetzt. Zur Verkürzung der Rechenzeit, wurden wiederum wie bereits bei den Einzelbrennersimulationen, nur die Brenneraustrittsbereiche verwendet, um die Brenner abzubilden. Auf den mass flow inlets der einzelnen Brenneraustrittsbereiche wurden wieder die zuvor berechneten Profile als Randbedingungen vorgegeben. Der vernetzte Gesamtkessel ist in Abbildung 63 dargestellt.

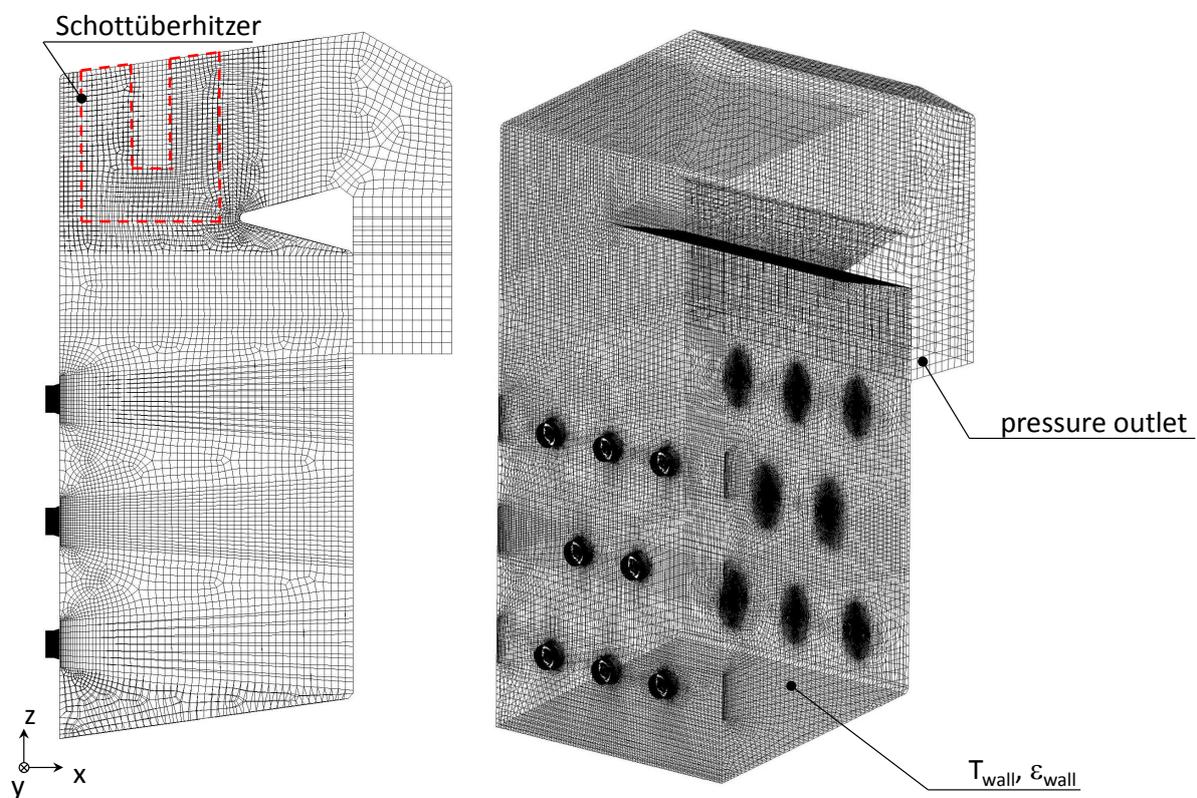


Abbildung 63: Berechnungsgitter des Gesamtkessels.

Bei der Geometrie wurde der zweite Zug (nach der Umlenkung) zum Teil mit vernetzt, um die Umlenkung korrekt abzubilden. Hier wurde aber auf eine feine Gitterauflösung verzichtet. Im Brenneintritts- und Übergangsbereich wurde das Gitter deutlich feiner aufgelöst. Am oberen Ende der Brennkammer sind beim realen Kessel Strahlungswärmetauscherbündel (sogenannte Schottüberhitzer) über die gesamte Breite des Kessels angebracht. Sie werden in der Simulation über lokale Wärmesenken abgebildet. Die Wände des Kessels werden als isotherm angenähert, da die Brennkammerwände als Verdampfer-Membranwände ausgeführt sind. Der Druck in den Membranwänden liegt bei 71 bar, was eine Siedetemperatur des Wassers von 560 K ergibt. Für die Auslegung von Strahlungsheizflächen schreibt die DIN EN 12952-3 einen Temperaturzuschlag von

50 K vor. Dies führt zu der gewählten Wandtemperatur von $T_{\text{Wand}} = 610$ K. Der Wandemissionsgrad wurde mit $\varepsilon_{\text{Wand}} = 0,85$ (Effenberger 2000) festgelegt. Die Geometrie- und Gitterinformationen sind in Tabelle 22 angegeben.

Tabelle 22: Geometrie- und Gitterinformationen für das Gitter der Gesamtkessel-Simulationen

Breite [m]	Höhe [m]	Länge [m]	Volumen [m ³]	Zellenanzahl [#]	Netzdichte [#/m ³]
8,3	18,4	7,6	1273,2	7145595	5,61E+03

In beiden Fällen wurde jeweils ein Teillastfall untersucht in dem jeweils die Brenner 3 und 7 inaktiv sind. Diese zwei untersuchten Fälle entsprechen dabei realen Betriebszuständen. Der untersuchte Lastfall wird im entsprechenden Kapitel genauer beschrieben.

6.1 Kessel im Gasbetrieb

Im Gasbetrieb werden die acht Gas/Öl-Kombibrenner nur mit Gas betrieben. Die Gaszusammensetzung ist dabei die gleiche, wie in den Einzelbrenneruntersuchungen im Gasbetrieb, und ist in Tabelle 6 angegeben.

Die Anordnung und Bezeichnung der Brenner ist in Abbildung 64 und die Randbedingungen für die einzelnen Brenner sind in Tabelle 23 angegeben. Die beiden Brenner 3 und 7 sind nicht in Betrieb, da dies einen realen Betriebszustand des Kessels darstellt.

Tabelle 23: Randbedingungen der einzelnen Brenner (Brenner 3 und 7 sind nicht aktiviert).

Brenner	\dot{m}_{Luft} [kg/s]	\dot{m}_{Gas} [kg/s]	λ
1	7,9	0,367	1,42
2	7,86	0,281	1,82
3	-	-	-
4	6,62	0,248	1,76
5	6,69	0,303	1,44
6	5,56	0,256	1,41
7	-	-	-
8	5,56	0,256	1,42

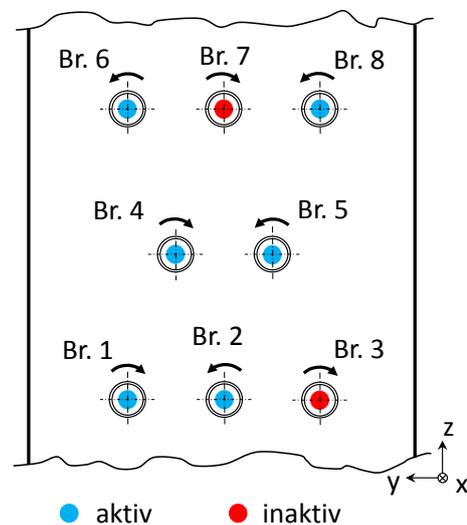


Abbildung 64: Brenneranordnung.

Die übertragene Wärme im Schottüberhitzer wurde für den untersuchten Lastfall des Kessels (Tabelle 24) mit Hilfe einer Energiebilanz über den Schottüberhitzer aus Betriebsdaten mit den Werten von Dampfmassenstrom, Ein- und Ausganstemperatur, sowie zugehörigen spezifischen Wärmekapazitäten berechnet. Dabei wird eine Wärme von 1,317 MW übertragen.

Die für die Gesamtkesselsimulation mit gasförmigem Brennstoff verwendeten Modelle sind in Tabelle 24 angegeben.

Tabelle 24: Modelle für die Gesamtkesselsimulation mit gasförmigem Brennstoff.

Modellierung von	Model
Verbrennung	Steady Diffusion FLAMLET (Ansys 2013)
Reaktionsmechanismus	CH ₄ -Skeletal (Yang & Pope 1998)
Turbulenz der Strömung	RSM
Chemie-Turbulenzinteraktion	PDF-Ansatz
Strahlung	DO
Absorptionskoeffizient	WSGGM domain based (Ansys 2013)

In Abbildung 65 ist die Iso-Surface des OH-Molenbruchs bei $7 \cdot 10^{-4}$ mol/mol eingefärbt mit der Temperatur dargestellt.

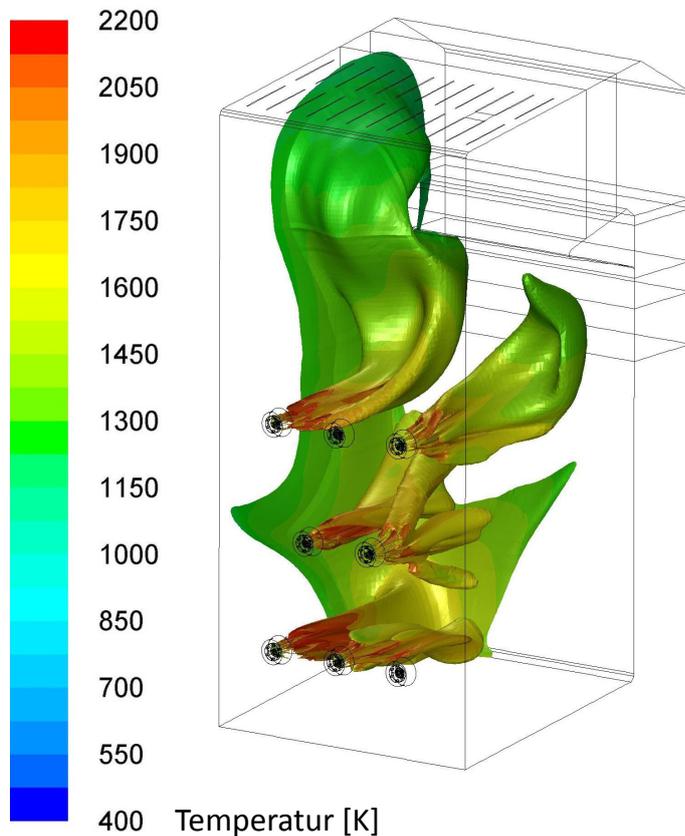


Abbildung 65: Iso-Surface des OH-Molenbruchs bei $7 \cdot 10^{-4}$ mol/mol eingefärbt mit der Temperatur.

Die Darstellung des OH-Molenbruchs (Indikator für die Flammenfront) in Abbildung 65 auf der linken Seite zeigt, dass sich in der hinteren linken Ecke eine große OH-Molenbruch-Strähne ausbildet. Die Werte in Tabelle 23 zeigen, dass der Brenner 1 in der linken unteren Ecke auch der Brenner mit der größten Einzelbrennerleistung ist. Es sei hier noch einmal erwähnt, dass die Brenner 3 und 7 nicht in Betrieb sind. Die Flammenfronten der einzelnen Brenner sind sehr unterschiedlich. Speziell bei Brenner 5 ist eine sehr gestreckte Flammenfront in z-Richtung ersichtlich. Dies könnte durch die zwei

inaktiven Brenner 3 und 7 verursacht werden, da sie schräg unterhalb bzw. schräg darüber angeordnet sind.

Abbildung 66 zeigt auf der linken Seite die Lage der Auswerteebene im Kessel und auf der rechten Seite die Geschwindigkeitsvektoren (Länge der Vektorpfeile ist unabhängig der Geschwindigkeit) auf der Auswerteebenen.

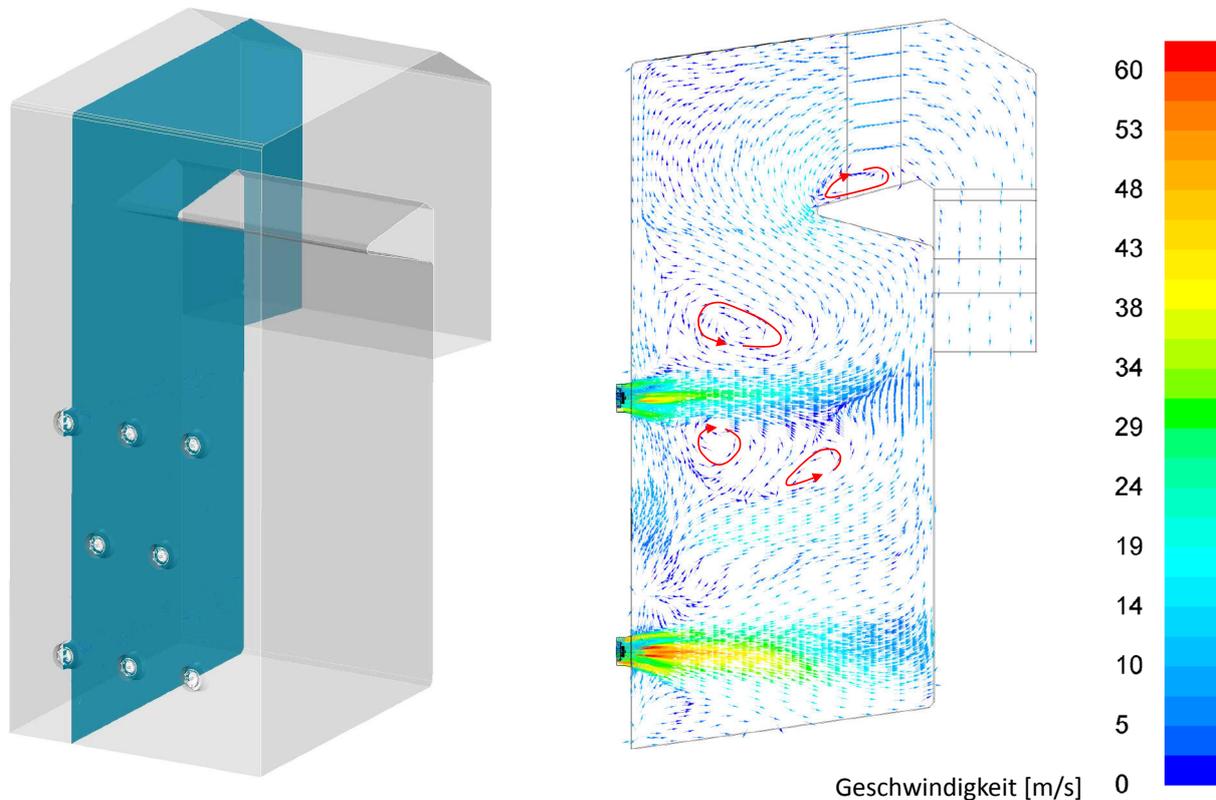


Abbildung 66: Lage der Auswerteebenen in der Brennerachse von Brenner 1 und 7 auf der x-z-Ebene (links) und Geschwindigkeitsvektoren auf der Auswerteebene eingefärbt mit dem Betrag der Geschwindigkeit im Gasbetrieb.

Die Auswerteebene auf der linken Seite in Abbildung 66 liegt auf den Achsen der Brenner 1 und 6 in der x-z-Ebene. Alle weiteren Schnittdarstellungen des Kessels liegen auf dieser Ebene.

Auf der rechten Seite in Abbildung 66 sind die Rückströmungszonen in der x-z-Ebene dargestellt (rote Pfeile). In der Brennkammer bilden sich im Gasbetrieb zwei kleinere Rückströmungszonen unter dem Brenner 6 und eine über dem Brenner 6 aus. Die Strömung im Bereich des unteren Brenners (Brenner 1) biegt erst an der Brennkammerrückwand nach oben hin ab. Im Gegenzug dazu zweigt die Strömung im oberen Bereich bereits früher nach oben hin ab. Im Durchtritt, über der sogenannten „Nase“, bildet sich ebenfalls eine Rückströmungszone aus.

Abbildung 67 zeigt den Temperaturverlauf und den CO₂-Molenbruch in der x-z-Ebene.

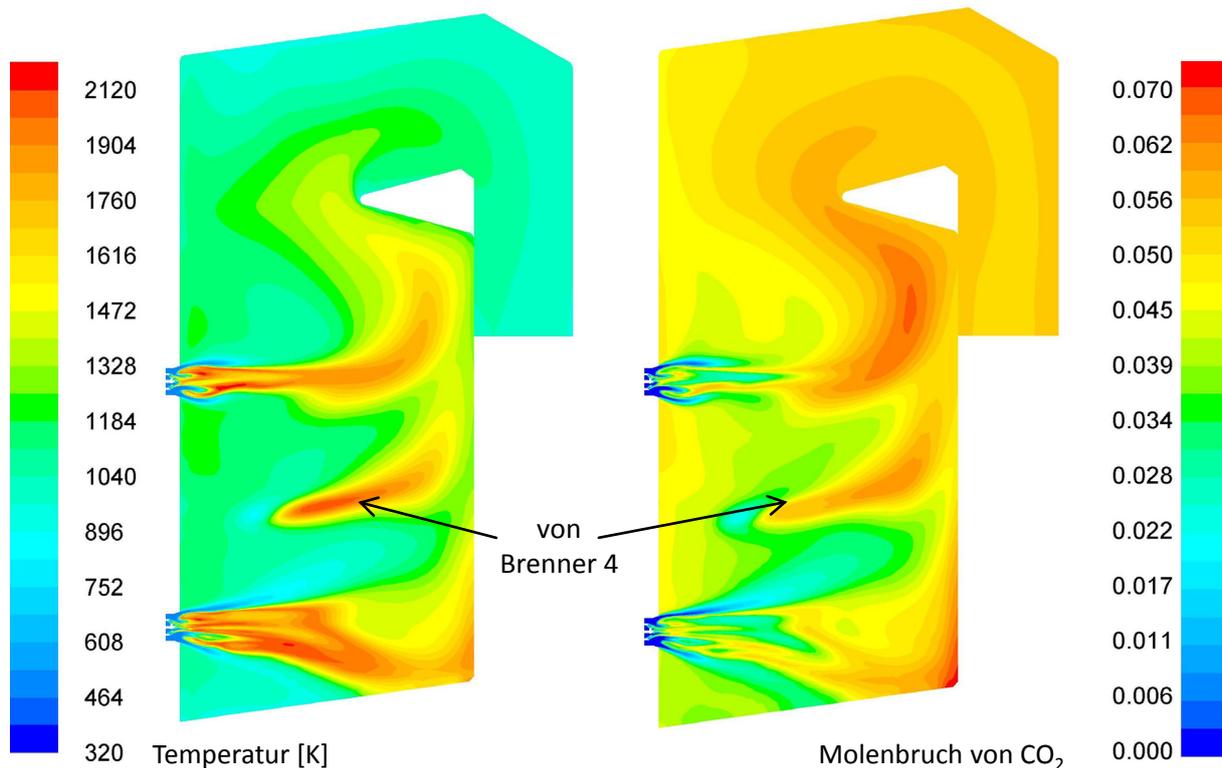


Abbildung 67: Verlauf der Temperatur und des CO₂-Molenbruch in der x-z-Ebene des Kessels im Gasbetrieb.

Der Temperaturverlauf auf der linken Seite in Abbildung 67 lässt vermuten, dass die Flamme des Brenners 1 etwas auf der Unterseite und Rückseite der Brennkammer anliegt. Die heiße Strömung zwischen den zwei dargestellten Brennermuffeln kommt von Brenner 4, dessen Flammenfront sich in der Brennkammer ausbreitet und somit auch in dieser Schnittebene (Brenner 1 und 6) sichtbar wird. Der Vergleich zwischen dem Temperaturverlauf in Abbildung 67 und dem Strömungsfeld in Abbildung 66 zeigt, dass aufgrund des aufsteigenden Volumenstromes von Brenner 1 die Flamme des Brenners 6 bereits früher nach oben hin abbiegt. Ein weiterer Grund dafür liegt in der geringeren Einzelbrennerleistung des Brenners 6. Der Temperaturverlauf zeigt, dass die Flamme kaum über die Nase (Verjüngung an der Oberseite der Brennkammer) reicht. Dies ist im Teillastfall äußerst wichtig, da die Flamme durch den geringeren Energieeintrag kürzer ist und durch die aufsteigende Strömung die Flamme bereits vor der Nase umgelenkt werden kann, wodurch es zu einer lokalen thermischen Überlastung am Schottüberhitzer kommen kann.

Die Zonen erhöhter Temperaturen auf der linken Seite decken sich sehr gut mit den Zonen hoher CO₂-Molenbrüche auf der rechten Seite in Abbildung 67 (vergl. dazu die Einzelbrenneranalyse im Gasbetrieb in Kapitel 5.2.5.1). Hier wird der zuvor unterstöchiometrisch verbrannte Brennstoff weiter zu CO₂ oxidiert. Die Umwandlung von Rest-CO zu CO₂ findet bei genügendem Rest-O₂ aber auch nach der Brennkammer in der Umlenkung und im Konvektionszug statt solange die Temperatur nicht zu gering wird (etwa 700 °C (Effenberger 2000)).

Abbildung 68 zeigt auf der linken Seite den Strahlungsanteil der Wärmestromdichte und rechts die gesamte Wärmestromdichte an den Brennkammerwänden.

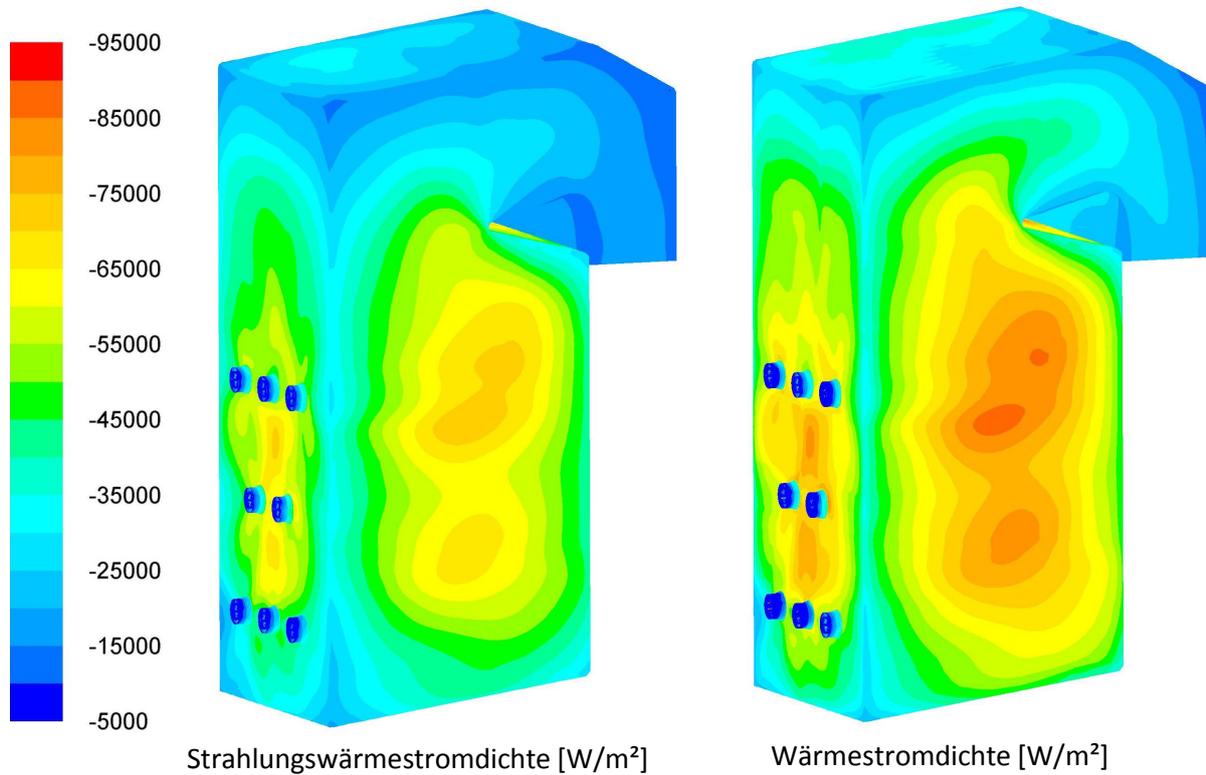


Abbildung 68: Strahlungsanteil der Wärmestromdichte an den Brennkammerwänden (links) und gesamte Wärmestromdichte an den Brennkammerwänden (rechts) im Gasbetrieb.

Der Vergleich zwischen der Strahlungswärmestromdichte und der gesamten Wärmestromdichte in Abbildung 68 zeigt, dass die Wärmestromdichte an den Brennkammerwänden zum größten Teil durch die Strahlung verursacht wird. Ab der Umlenkung wird die Wärmestromdichte deutlich kleiner, was wiederum durch die Wärmeabfuhr des Schottüberhitzers herbeigeführt wird.

In Abbildung 69 ist die Wärmestromdichte in der hinteren linken Ecke der Brennkammer dargestellt.

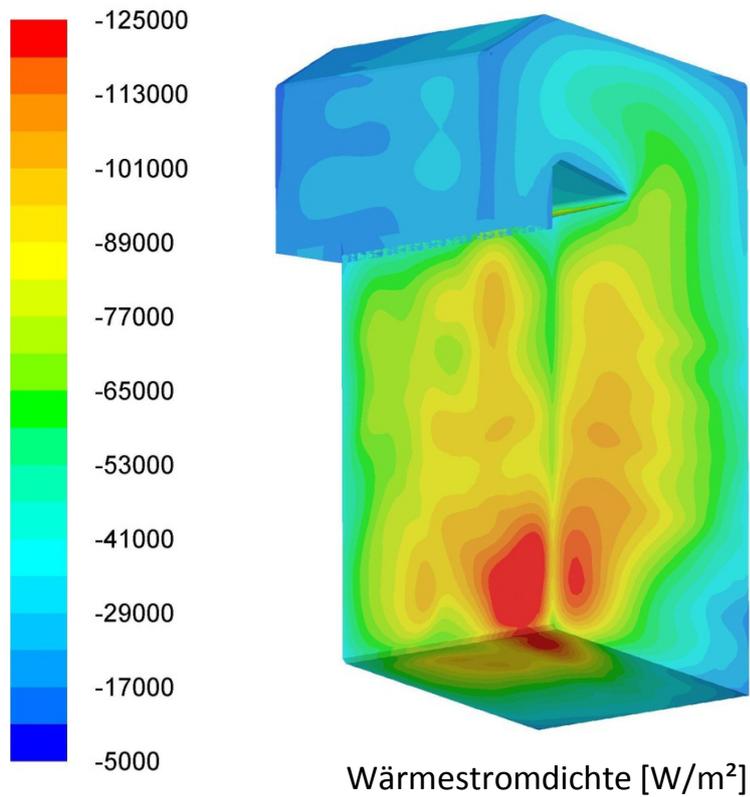


Abbildung 69: Wärmestromdichte auf der Brennkammerrückwand im Gasbetrieb

Wie bereits in Abbildung 67 so zeigt sich auch hier in Abbildung 69, dass die Flamme des Brenners 1 vermutlich an der Rückseite bzw. auch etwas an der Unterseite der Brennkammerwand anliegt. Die lokale Wärmestromdichte von 130 kW liegt allerdings in keinem kritischen Bereich. In Abbildung 69 ist auch eine Schiefelage der Wärmestromdichte im gesamten Kessel zu sehen. Der Grund dafür, liegt in der unterschiedlichen Einzelbrennerleistung, sowie an den zwei inaktiven Brennern 3 und 7.

6.2 Kessel im Flüssigbrennstoffbetrieb

Im Flüssigbrennstoffbetrieb werden die acht Gas/Öl-Kombibrenner nur mit flüssigem Brennstoff betrieben. Die Modellierung des flüssigen Brennstoffes ist dabei die gleiche, wie in den Einzelbrenneruntersuchungen im Flüssigbrennstoffbetrieb und ist in Kapitel 5.2.6 erläutert.

Die Anordnung und Bezeichnung der Brenner ist in Abbildung 70 dargestellt und die Randbedingungen für die einzelnen Brenner sind in Tabelle 25 angegeben. Dabei sind die einzelnen Injektionsparameter des flüssigen Brennstoffes abgesehen vom Massenstrom dieselben, wie in der Einzelbrenneruntersuchung im Flüssigbrennstoffbetrieb. Sie sind in Tabelle 19 angegeben. Die Brenner 3 und Brenner 7 sind nicht in Betrieb, da dies einen realen Betriebszustand des Kessels darstellt.

Tabelle 25: Randbedingungen der einzelnen Brenner (Brenner 3 und 7 sind nicht aktiviert).

Brenner	\dot{m}_{Luft} [kg/s]	$\dot{m}_{\text{fl.Brennstoff}}$ [kg/s]	λ
1	7,82	0,45	1,31
2	7,71	0,42	1,39
3	-	-	-
4	7,06	0,41	1,30
5	7,1	0,41	1,31
6	6,59	0,39	1,28
7	-	-	-
8	6,59	0,39	1,28

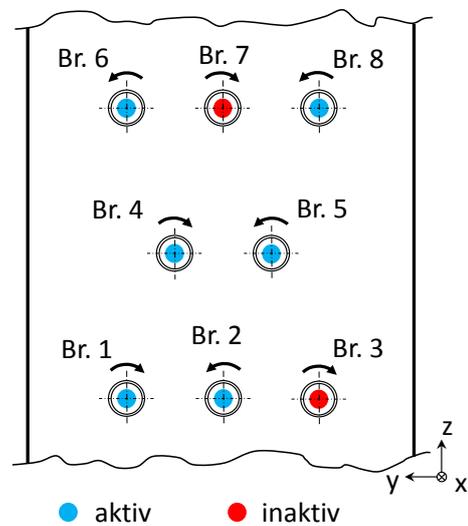


Abbildung 70: Brenneranordnung.

Bei dem in Tabelle 25 angegebenen Lastfall des Kessels im Flüssigbrennstoffbetrieb errechnet sich die im Schottüberhitzer übertragene Wärme aus den Betriebsdaten zu 1,392 MW, wobei hier dieselbe Berechnungsmethode herangezogen wurde, wie sie bereits im Gasbetrieb erläutert wurde.

Die für die Gesamtkesselsimulation mit gasförmigem Brennstoff verwendeten Modelle sind in Tabelle 26 angegeben.

Tabelle 26: Modelle für die Einzelbrennersimulation mit flüssigem Brennstoff.

Modellierung von	Model
Verbrennung	Steady Diffusion FLAMLET (Ansys 2013)
Reaktionsmechanismus	n-Heptan (Bui-Pham & Seshadri 1991)
Turbulenz der Strömung	RSM
Chemie-Turbulenzinteraktion	PDF-Ansatz
Strahlung	DO
Absorptionskoeffizient	WSGGM domain based (Ansys 2013)
Turbulenzeinfluss auf disp. Phase	Discret Random Walk (DRW) Modell

Abbildung 71 zeigt die Iso-Surface des OH-Molenbruchs bei $7 \cdot 10^{-4}$ mol/mol eingefärbt mit dem CO-Molenbruch.

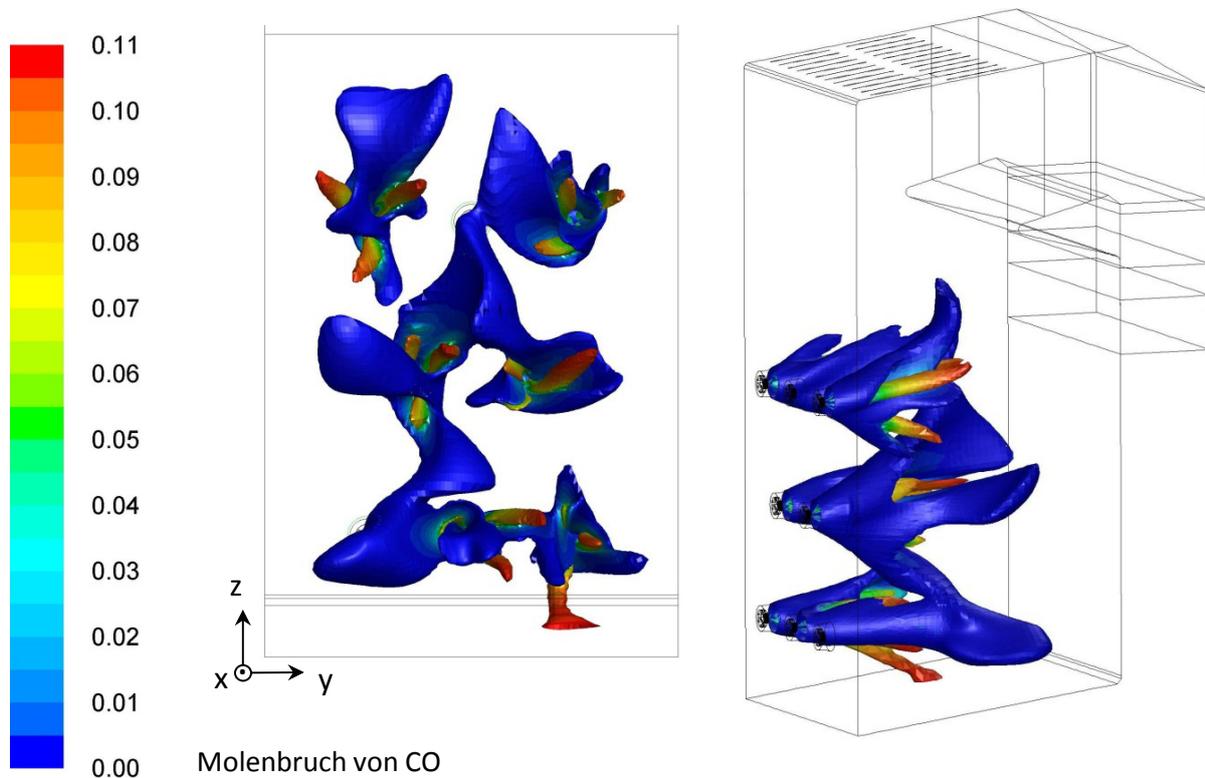


Abbildung 71: Iso-Surface des OH-Molenbruchs bei $7 \cdot 10^{-4}$ mol/mol eingefärbt mit dem CO-Molenbruch zwischen 0 und 0,11 mol/mol in der Brennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Auf der rechten Seite der Abbildung 71 ist der Kessel von schräg vorne und auf der linken Seite die Draufsicht auf die Kesselvorderseite dargestellt. Ausgehend von jedem Brenner sind drei Strahlen sichtbar, die an der Oberfläche einen erhöhten CO-Molenbruch aufweisen (gelb bis rötliche Färbung). Diese resultieren aus der Flammenfront von den drei Strahlen des flüssigen Brennstoffes. Der Grund für den erhöhten CO-Molenbruch liegt am O_2 -Mangel direkt an der Oberfläche des Sprays des flüssigen Brennstoffes (vergl. dazu Abbildung 55 und Abbildung 56 bei der Einzelbrennerstudie).

Die drei Strahlen des Brennstoffsprays der einzelnen Brenner weichen unter den jeweiligen Brennern voneinander ab. Sie zeigen meist waagrecht in die Brennkammer. Die Ausnahme ist hier der untere Strahl des Brenners 1. Dieser zieht Richtung Brennkammerboden. Eine weitere Abweichung ist beim Brenner 5 zu sehen, bei dem die Strahlen stark in die z-Richtung gedehnt sind (vergl. dazu Brenner 5 der Kesselsimulation mit gasförmigem Brennstoff). Der Grund liegt vermutlich wieder an den inaktiven Brennern 3 und 7, sowie an den unterschiedlichen Einzelbrennerleistungen (siehe Tabelle 25).

Abbildung 72 zeigt die Geschwindigkeitsvektoren (Länge der Vektorpfeile ist unabhängig vom Betrag der Geschwindigkeit) eingefärbt mit dem Betrag der Geschwindigkeit.

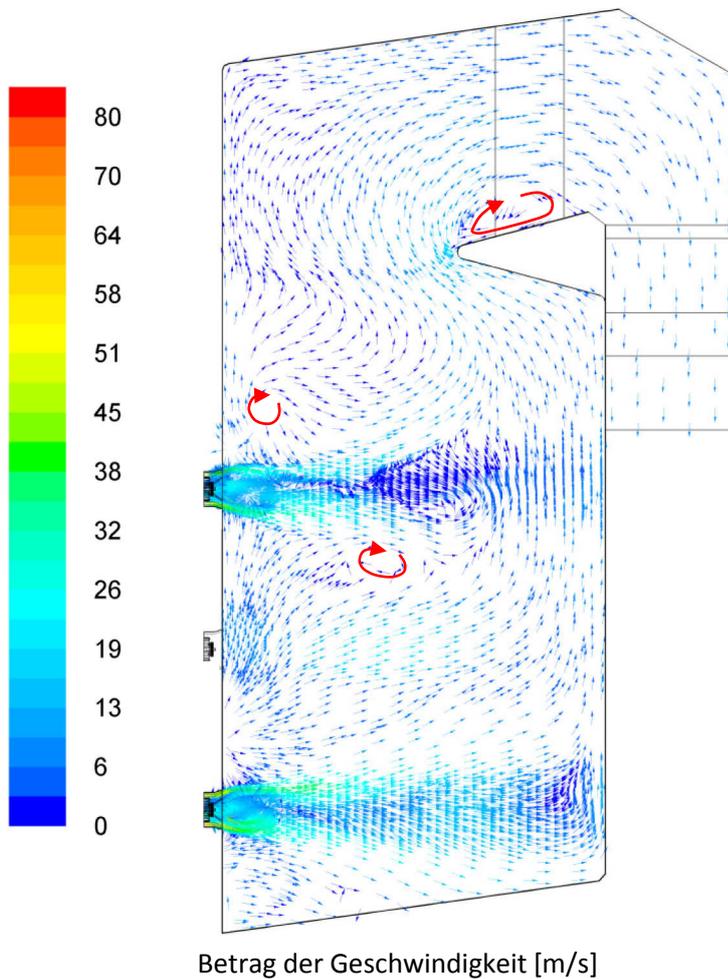


Abbildung 72: Geschwindigkeitsvektoren in der x - z -Ebene in der Brennkammer auf der Höhe der Brenner 1 und 6 eingefärbt mit dem Betrag der Geschwindigkeit.

Die in der x - z -Ebene auftretenden Rückströmungszonen sind durch rote Pfeile hervorgehoben. Die Strömung auf der Höhe des Brenners 1 zieht an der Brennkammerrückwand nach oben. Die Strömung beim Brenner 6 zieht an der Brennkammerrückwand ebenfalls nach oben, jedoch bildet sich hier in der Brennerachse eine Rückströmung Richtung Vorderseite aus. Auch über dem Brenner 6, sowie über der Nase der Brennkammer (Verjüngung am oberen Ende der Brennkammer) bildet sich ein Wirbel aus.

Abbildung 73 zeigt auf der linken Seite den Temperaturverlauf und auf der rechten Seite den Verlauf des CO₂-Molenbruchs in der Brennkammer.

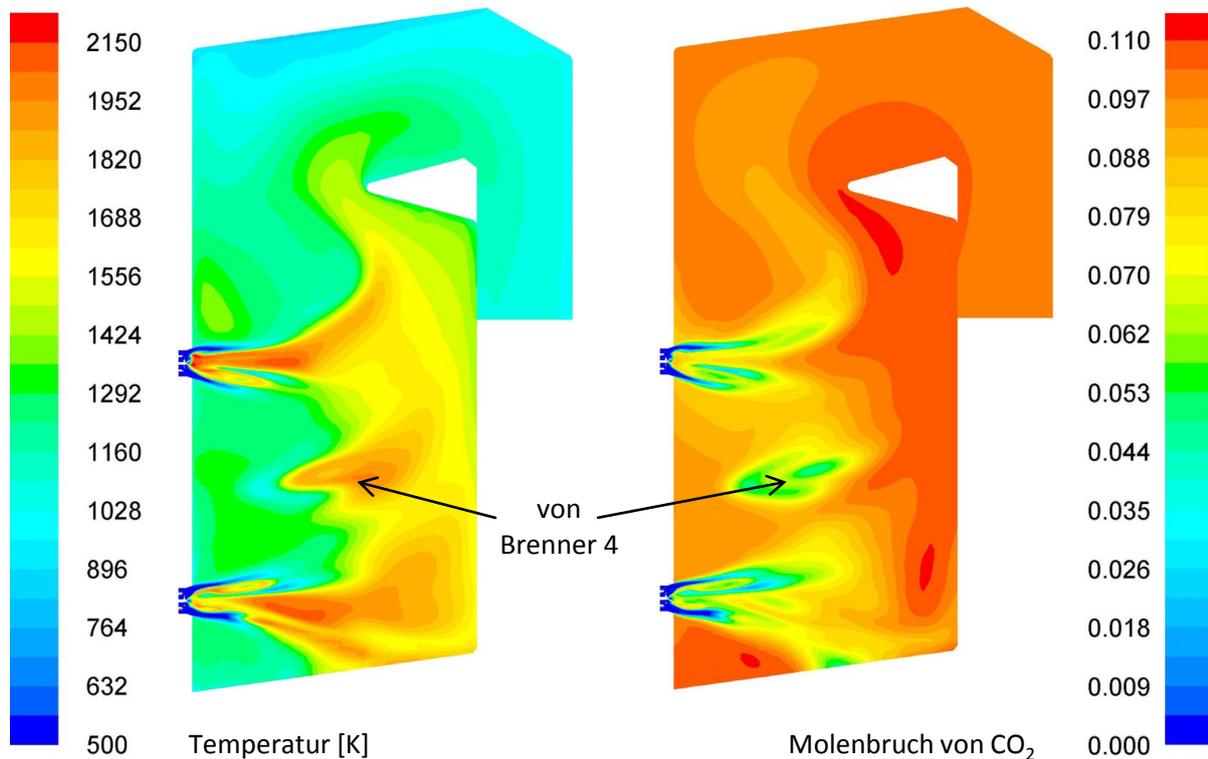


Abbildung 73: Temperaturverlauf (links) und Verlauf des CO₂-Molenbruchs (rechts) in der x-z-Ebene in der Brennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Der Temperaturverlauf auf der linken Seite in Abbildung 73 veranschaulicht die Temperaturentwicklung im hinteren Bereich der Brennkammer. Wie im gasbetriebenen Kessel, so ist auch hier der Einfluss des Brenners 4 wieder im Temperatur- und CO₂-Molenbruch-Verlauf ersichtlich. Die Simulationsergebnisse zeigen, wie bereits im gasbetriebenen Kessel, eine große Temperaturentwicklung im hinteren Bereich des Brenners 1. Auch hier ist der Brenner 1 der mit der höchsten Einzelbrennerleistung (siehe Tabelle 25). Der Einfluss des Schottüberhitzers ist gut durch die Temperaturabnahme in der Umlenkung zu sehen.

Der Verlauf des CO₂-Molenbruchs in Abbildung 73 passt sehr gut mit dem Temperaturverlauf überein. Im Vergleich mit dem Verlauf des CO₂-Molenbruchs im Gasbetrieb in Abbildung 67 zeigt sich der deutlich höhere spezifische CO₂-Ausstoß des flüssigen Brennstoffs, der durch den wesentlich geringeren spezifischen Wasserstoffanteil (H) bzw. höheren Kohlenstoffanteil (C) entsteht.

Abbildung 74 zeigt auf der linken Seite die Strahlungswärmestromdichte und auf der rechten Seite die gesamte Wärmestromdichte an der Brennkammerwand.

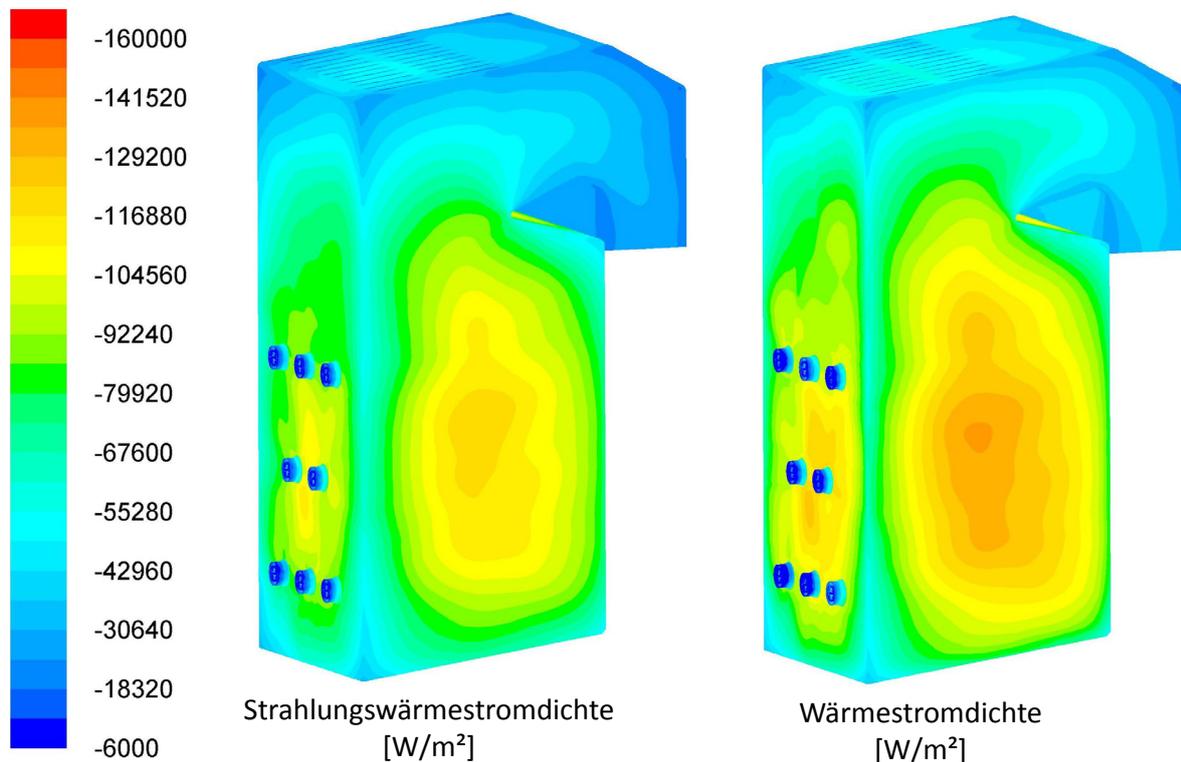


Abbildung 74: Strahlungswärmestromdichte (links) und gesamte Wärmestromdichte an den Brennkammerwänden (rechts) im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Der Vergleich der beiden Darstellungen in Abbildung 74 zeigt, dass in der Brennkammer der größte Anteil der Wärmestromdichte an der Brennkammerwand durch die Strahlung verursacht wird. Im Flüssigbrennstoffbetrieb ist der Strahlungsanteil an der gesamten Wärmestromdichte noch einmal größer als im Gasbetrieb (vergl. Abbildung 68 und Abbildung 74). Der Grund dafür liegt in dem höheren Energieeintrag durch die Brenner im Fall des Flüssigbrennstoffbetriebes, was eine höhere Verbrennungstemperatur zu Folge hat (siehe Abbildung 67 und Abbildung 73). Die Höhe der Verbrennungstemperatur geht zur vierten Potenz in die Strahlung ein und erhöht damit die Strahlungswärmestromdichte an der Brennkammerwand. Ein weiterer Grund sind die flüssigen Brennstofftropfen, die ebenfalls an der Strahlung teilnehmen. Dieser Anteil ist allerdings durch die kurze mittlere Verweilzeit gering (vergl. Abbildung 53).

Abbildung 75 zeigt die Wärmestromdichte an der Rückwand und der linken Seitenwand der Brennkammer.

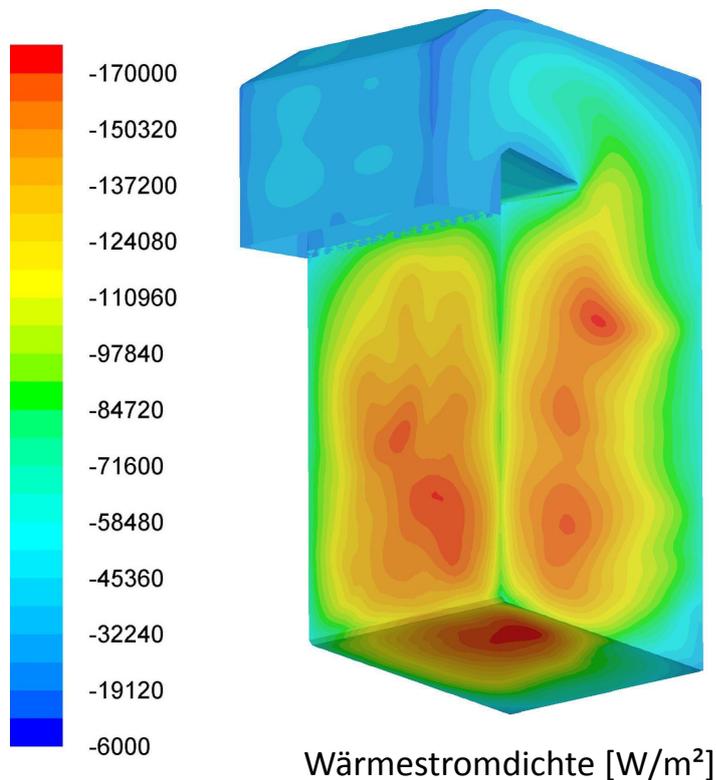


Abbildung 75: Wärmestromdichte auf der Brennkammerrückwand im Flüssigbrennstoffbetrieb.

Wie bereits der Temperaturverlauf in Abbildung 73, so ist auch hier in Abbildung 75 zu sehen, dass die Flamme des Brenners 1 fast bis an die Rückwand der Brennkammer reicht. Auch der Bereich der hohen Wärmestromdichte am Boden der Brennkammer passt mit dem Temperaturverlauf in Abbildung 73 bzw. auch mit der Flammenfront in Abbildung 71 zusammen. Es ist wieder dieselbe Schräglage der Wärmestromdichte in der Brennkammer zu sehen wie bereits im gasbetriebenen Kessel, wobei im Flüssigbrennstoffbetrieb die Schräglage nach der Umlenkung wieder verschwindet.

6.3 Zusammenfassung der Kesselsimulationen

Die Auswertungen der Simulation des Kessels im Gas- und Flüssigbrennstoffbetrieb zeigen schlüssige Ergebnisse. Der Einfluss durch die zwei inaktiven Brenner 3 und 7 zeigt sich in beiden Fällen durch die Streckung der Flamme des Brenners 5 in z-Richtung (Abbildung 65 und Abbildung 71). Die dazugehörigen Temperaturverläufe zeigen, dass die Flammen im Brennraum bleiben und nicht über die Nase reichen, wobei die Enden der heißen Zonen bereits den Schottüberhitzer berühren. Dies ist eine wichtige Erkenntnis, denn für noch geringere Teillastfälle könnte die Flamme eventuell bereits über die Nase treten und damit Schaden an den Schottüberhitzerheizflächen verursachen.

Die Wärmestromdichten an den Brennkammerwänden in Abbildung 69 und Abbildung 75 zeigen ebenfalls gute Ergebnisse. Hier zeigen die Simulationsergebnisse eine Schräglage auf die linke Seite

der Brennkammerwand. Die lokalen Wärmestromdichten sind dabei noch in keinem kritischen Bereich. Auch hier passen die Ergebnisse mit den Darstellungen der Flammenfronten überein.

Für die Validierung der Ergebnisse wurden Messwerte aus dem Kessel herangezogen, die einerseits Werte aus der Warte sind (Temperatur) und andererseits durch ein geprüftes Unternehmen durchgeführt wurden (CO und O₂).

Abbildung 76 zeigt die Messpunkte bzw. die Flächen an denen die Simulationsergebnisse ausgewertet wurden.

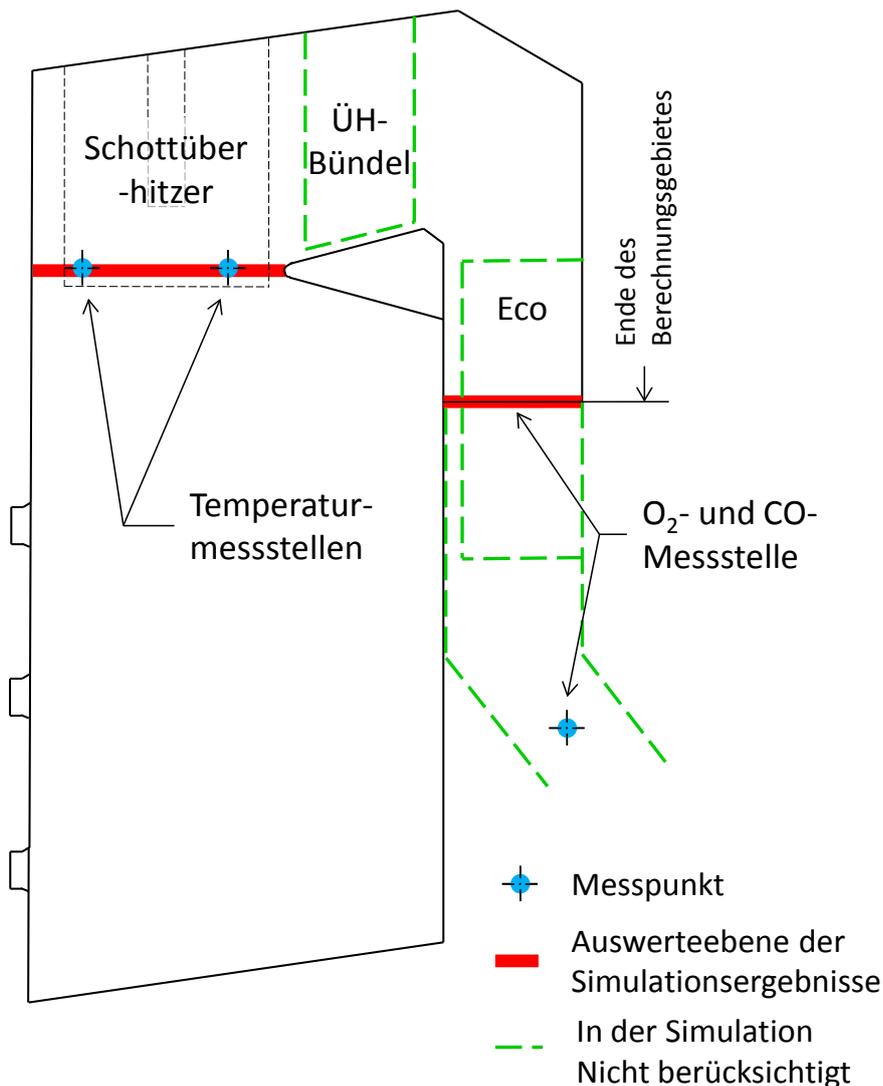


Abbildung 76: Auswerteebenen von der Simulation im Berechnungsgebiet und Messpunkte im Kessel.

Wie in Abbildung 76 dargestellt, wurde die Temperaturmessung an zwei Stellen auf der Höhe der Nase durchgeführt. Die in Tabelle 27 und Tabelle 28 angegebenen Werte sind die Mittelwerte der zwei gemessenen Temperaturen. Die Messung der CO- und O₂-Konzentration wurde am Ende des Konvektionszuges vorgenommen. Das Berechnungsgebiet für die Simulation endet bereits nach der Umlenkung (siehe Abbildung 76), weshalb die Ergebnisse der Simulation für den Vergleich an dieser Stelle herangezogen wurden. Die in Tabelle 27 und Tabelle 28 angegebenen Simulationsergebnisse sind flächen-gemittelte Werte, weshalb die Messstellen in Abbildung 76 als Balken dargestellt sind.

Tabelle 27 zeigt den Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Messwerten im Gasbetrieb.

Tabelle 27: Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Messwerten im Gasbetrieb.

	Temperatur vor Schottüberhitzer	O ₂ im zweiten Zug bezogen auf 3% O ₂	CO im zweiten Zug bezogen auf 3% O ₂
Simulationsergebnis	1222 K	8,9 Vol.-%	677 mg/Nm ³
Messwert	1170 K	6,5 Vol.-%	< 4 mg/Nm ³

Im Fall des Gasbetriebes wird durch die Simulation die Temperatur vor dem Schottüberhitzer um etwa 55 K überschätzt. Der O₂-Volumenanteil im zweiten Zug liegt mit 8,9 Vol.-% um 2,4 Vol.-% über dem Messwert. Der Vergleich der CO-Konzentrationen zeigt, dass durch die Simulation die CO-Konzentration um mindestens 673 mg/Nm³ überschätzt wird, was eine markante Abweichung vom Messwert darstellt.

Die Wärmeabfuhr durch das Überhitzerbündel im Durchtritt und den Economizer-Bündeln im zweiten Zug wurden in der Simulation nicht berücksichtigt. Die Auswertung der Simulationsergebnisse erfolgte am Austritt des Berechnungsgebietes. Somit liegt die Messstelle einige Meter nach der Auswerteebene der Simulation. Dies sollte die Umwandlung von CO zu CO₂ fördern, da diese Reaktion Temperaturen über 700 °C benötigt (Effenberger 2000).

Der Vergleich der CO-Konzentrationen zeigt die Grenzen der Anwendbarkeit des Steady Diffusion FLAMLET Modells (ANSYS 2011) in Kombination mit dem modellierten Reaktionsmechanismus CH₄-Skeletal von YANG und POPE für den untersuchten Fall.

Tabelle 28 zeigt den Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Messwerten im Flüssigbrennstoffbetrieb des Kessels.

Tabelle 28: Vergleich der Simulationsergebnissen mit den Messwerten im Flüssigbrennstoffbetrieb.

	Temperatur vor Schottüberhitzer	O ₂ im zweiten Zug bezogen auf 3% O ₂	CO im zweiten Zug bezogen auf 3% O ₂
Simulationsergebnis	1352 K	4,2 Vol.-%	3422 mg/Nm ³
Messwert	1183 K	5,9 Vol.-%	< 4 mg/Nm ³

Die Validierung der Simulationsergebnisse im Flüssigbrennstoffbetrieb durch die Messwerte zeigt ein sehr ähnliches Bild wie im Gasbetrieb. Im Flüssigbrennstoffbetrieb wird die Temperatur vor dem Schottüberhitzer um etwa 169 K überschätzt und der O₂-Volumenanteil im zweiten Zug um 1,7 Vol.-% unterschätzt. Der Vergleich der CO-Konzentrationen zeigt keine gute Übereinstimmung. Hier liegt der Wert der Simulation um mehr als 3418 mg/Nm³ über dem Messwert. Auch hier befindet sich die Auswerteebene der Simulation wieder einige Meter vor dem Messpunkt und das Überhitzerbündel, sowie die Economizer-Bündel wurden in der Simulation nicht berücksichtigt.

Wie im Gasbetrieb, so zeigen sich auch im Fall des Flüssigbrennstoffbetriebes die Grenzen der Anwendbarkeit bei der Kombination aus dem verwendeten Steady Diffusion FLAMLET Modell (ANSYS 2011) und dem modellierten Reaktionsmechanismus für n-Heptan von BUI-PHAM und SESHADRI für den untersuchten Fall.

Zusammenfassend kann gesagt werden, dass die verwendeten Modelle in beiden Fällen für die CO-Vorhersage keine guten Ergebnisse liefern. Besonders im Fall des Flüssigbrennstoffbetriebes liegt die berechnete CO-Konzentration aus der Simulation um drei Zehnerpotenzen über den Messwerten. Im Gegenzug dazu, sind die Vorhersagen der Temperatur und des O₂-Volumenanteiles in guter Übereinstimmung mit den zur Verfügung gestandenen Messwerten. Die dazu benötigte Rechenzeit bei einem 16 Kerne Cluster lag im Fall des gasbetriebenen Kessels bei etwa 1,2 Tagen und im Fall des mit flüssigem Brennstoff simulierten Kessels bei ca. 1,8 Tagen, wobei hier etwaige Anrechnungen mit Hilfe anderer Modelle nicht berücksichtigt wurden.

7 Zusammenfassung und Ausblick

Die CFD-Simulation hat in den letzten Jahren und Jahrzehnten immer mehr an Bedeutung gewonnen. Auch im Bereich der Kesselloptimierung ist sie kaum mehr wegzudenken. Für detaillierte Gesamtkesselsimulation ist noch immer der Rechenaufwand ein limitierender Faktor. Dies zeigt sich in der geringen Anzahl an Kesselsimulationen in der Literatur.

Aus diesem Grund wurde für diese Masterarbeit das Ziel gesetzt, Modelle aus der Literatur auszuwählen, die es ermöglichen, eine Gesamtkesselsimulation mit einem akzeptablen Rechenaufwand zu simulieren. Somit kann die CFD-unterstützte Auslegung bzw. Optimierung auch in industriellen Unternehmen angewendet werden.

Die Auswahl der Modelle erfolgte nach einer umfangreichen Literaturrecherche, wobei ein Satz an Modellen für die Anwendung eines gasförmigen Brennstoffes und ein zweiter Satz für einen flüssigen Brennstoff ausgewählt wurden.

Zuerst wurden Einzelbrennersimulationen durchgeführt, um die Modelle überhaupt auf ihre Eignung zu überprüfen. Die Simulationsergebnisse wurden dabei mit Flammenbildern verglichen und zeigten sehr gute Übereinstimmung. Der Einfluss auf die Strömung im Primär- und Sekundärluftkanal durch verschiedene Betriebspunkte des Brenners wurde an definierten Ebenen im Brenner analysiert. Dabei zeigte sich kein Zusammenhang zwischen Luftmassenstrom und Strömungsprofil, weder im Primär- noch im Sekundärluftkanal. Die Ergebnisse zeigten allerdings eine deutliche Schräglage der Strömung im Primärluftkanal. Weiters wurden Untersuchungen mit verlängertem Zündschirmkragen angestellt. Sie zeigten nur im Fall des Gasbetriebes eine Veränderung. Hier konnte die thermische Belastung des Zündschirmkragens deutlich verringert werden. Die Simulationsergebnisse des verlängerten Zündschirmkragens im Flüssigbrennstoffbetrieb zeigten keinen nennenswerten Einfluss durch den langen Kragen.

Zuletzt wurde der gesamte Kessel zuerst mit einem gasförmigen, und anschließend mit einem flüssigen Brennstoff simuliert. Die Gesamtkesselsimulationen zeigten im Fall der CO-Konzentrationen im zweiten Zug Abweichungen im Vergleich zu den Messwerten. Die Temperatur über der Brennkammer und die O₂-Konzentration im zweiten Zug konnten mit den verwendeten Modellen jedoch abgebildet werden. In dieser Arbeit wurden bewusst zwei Teillastfälle untersucht. Durch die zwei inaktiven Brenner 3 und 7 weicht der Betriebszustand des Kessels noch einmal von einem idealen Betriebszustand ab. Auch weil der Brenner 3 nicht mittig, sondern am Rand des Kessel positioniert ist. Somit konnte die Gültigkeit der Modelle auch bei absolut ungünstigen Randbedingungen getestet und validiert werden.

Für weiterführende Untersuchungen wäre es interessant auch die Überhitzerbündel im Durchtritt und die Eco-Bündel im Konvektionszug in der Simulation mit zu berücksichtigen. Auch der Vergleich mit Messwerten aus einer Netzmessung würde Auskunft darüber geben, ob die Schräglage sowohl in der Brennkammer, als auch im Rauchgaskanal von den Modellen korrekt abgebildet werden kann.

Die in dieser Arbeit durchgeführten Einzelbrennersimulationen zeigen sehr gute visuelle Übereinstimmungen mit den verglichenen Flammenbildern im Kessel. Hier könnte eine weitere Validierung mit Messwerten der Temperatur, sowie der Molenbrüche von O₂, CO und CO₂ wichtige

Erkenntnisse liefern. Darüber hinaus könnten die Unterschiede der Strahlungsmodellierung zwischen P1 und DO-Modell untersucht werden.

Im Fall des verlängerten Kragens, wäre auf jeden Fall interessant den Kühlungseffekt der Primärluft auf den Zündschirm zu untersuchen. Hierzu müsste der Zündschirm mit einem Berechnungsgitter belegt werden. Der Vergleich mit Messwerten wäre hier unerlässlich und würde zeigen, ob die gewählten Modelle in der Lage sind, den tatsächlichen Zustand abbilden zu können.

Die numerische Simulation eines mit Gas und flüssigem Brennstoff befeuerten Kessels im industriellen Maßstab ist bei weitem noch nicht in der Lage alle Bereiche der Modellierung korrekt abzubilden. Insbesondere, wenn aufgrund der Rechenzeit vereinfachte Modelle zum Einsatz kommen, können die Ergebnisse der Simulation zum Teil deutlich von den experimentellen Daten abweichen. Ein wichtiger Punkt ist dabei, dass die einzelnen Modelle zwar in der einen oder anderen Konfiguration sehr gute Ergebnisse liefern können, die Gültigkeit kann dabei aber nicht ohne weitere Validierung auf andere Anwendungen einfach übertragen werden. Als Beispiel sei hier die Anwendung bei einer Einzelbrennersimulation und einer Gesamtkesselsimulation genannt. Um weitere Verbesserungen für die einfache Modellierung eines gesamten Kessels zu erreichen, wären Simulationen besonders im Fall des Flüssigbrennstoffbetriebes, mit einfacheren Reaktionsmodellen denkbar. Hier ist allerdings die Auswahl an unterschiedlichen Reaktionsmodellen begrenzt, wie aus der Literaturrecherche zu schließen ist.

Abschließend kann gesagt werden, dass im Bereich der Kesselsimulation noch einiges an Forschungspotential liegt, es aber bereits heute schon möglich ist, selbst mit einfacheren Modellen das grundlegende Verhalten des Kessels abzubilden.

8 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	Physikalische Vorgänge in einem Low-NO _x Brenner mit Luftstufung. (Baukal et al. 2003)	11
Abbildung 2:	Schnitt durch eine ebene Flammenfront. (Joos 2006)	13
Abbildung 3:	Einteilung der Flammen nach Vormischung und Strömungstyp. (Warnatz et al. 2001)	14
Abbildung 4:	Flammenfront und Position der Flamme in Abhängigkeit der Flammen- und Strömungsgeschwindigkeit (Joos 2006)	15
Abbildung 5:	Energiediagramm einer chemischen Elementarreaktion. (Joos 2006)	21
Abbildung 6:	Überblick und Einteilung verschiedener Berechnungsgittertypen. (vgl. Martens 2013)	24
Abbildung 7:	Zerlegung einer Größe ϕ in Mittelwert und Schwankungsanteil. (Paschedag 2004)	29
Abbildung 8:	Laminare Gegenstromflamme. (ANSYS 2011; Poinso & Veynante 2005)	34
Abbildung 9:	Grafische Beschreibung der Probability Density Function p(f) (PDF). (ANSYS 2011)	36
Abbildung 10:	Schematischer Schnitt durch einen "Twin Fluid Atomiser"	38
Abbildung 11:	Low-NO _x Brenner mit Luftstufung. (Baukal et al. 2003)	42
Abbildung 12:	Luftführung und Anordnung des Luftregisters	44
Abbildung 13:	Schnittdarstellung des Brenners mit farblich hervorgehobener Öllanze (grün), Gaslanzen (gelb) und Zündbrenner (rot).	44
Abbildung 14:	Herleitung der 2D-Simulationsebene des Gaslanzenaustrittes	46
Abbildung 15:	Überblick über die Position der Randbedingungen, sowie deutlich feinere Gitterauflösung im Nahbereich des Gaslanzenaustrittes.	47
Abbildung 16:	Vergleich der Geschwindigkeiten bei 1400 Nm ³ /h und 2400 Nm ³ /h Gas im gesamten Berechnungsgebiet.	49
Abbildung 17:	Vergleich der Geschwindigkeiten bei 1400 Nm ³ /h und 2400 Nm ³ /h Gas im Austrittsbereich bei gleicher Skalierung der Geschwindigkeit.	50
Abbildung 18:	Geschwindigkeitsvektoren im Austrittsbereich bei 1400 Nm ³ /h und 2400 Nm ³ /h Gas	51
Abbildung 19:	CH ₄ -Molenbruch bei 1400 Nm ³ /h und 2400 Nm ³ /h Gas im gesamten Berechnungsgebiet.	52
Abbildung 20:	Einteilung der Zonen des Brenners in: Brennereintritt, Brenneraustritt und Modellbrennkammer.	53
Abbildung 21:	Lage der Strömungsprofil-Übergabeflächen für Primär- und Sekundärluft	53

Abbildung 22:	Randbedingungen für die Einzelbrenner-Simulation.	54
Abbildung 23:	Berechnungsgitter der Modellbrennkammer mit Brenneraustritt.	55
Abbildung 24:	Berechnungsgitter des Brennereintrittes.	55
Abbildung 25:	Position der Aufgabeflächen für flüssigen und gasförmigen Brennstoff.	56
Abbildung 26:	Einseitig radiale Einströmung der Verbrennungsluft und Lage der Analyseebene des Profils.	58
Abbildung 27:	Geschwindigkeitsprofil im Primärluftkanal zwischen Brennereintrittsbereich und Brenneraustrittsbereich bei einem Luftmassenstrom von 5,406 kg/s und 7,539 kg/s.	58
Abbildung 28:	Frontalansicht des Geschwindigkeitsprofils im Primärluftkanal zwischen Brennereintrittsbereich und Brenneraustrittsbereich bei einem Luftmassenstrom von 5,406 kg/s und 7,539 kg/s bei ungleicher Skalierung.	59
Abbildung 29:	Geschwindigkeitsprofil im Primärluftkanal zwischen Brennereintrittsbereich und Brenneraustrittsbereich bei einem Luftmassenstrom von 7,539 kg/s und 7,871 kg/s.	59
Abbildung 30:	Geschwindigkeitsprofil im Sekundärluftkanal zwischen Brennereintrittsbereich und Brenneraustrittsbereich bei einem Luftmassenstrom von 5,406 kg/s und 7,539 kg/s.	60
Abbildung 31:	Untersuchte Fälle in der Sensitivitätsanalyse für die Wandtemperatur und den Emissionsgrad der Wand.	62
Abbildung 32:	Molenbruch von OH bei Variation der Wandtemperatur und des Emissionsgrades der Wand.	62
Abbildung 33:	Molenbruch von CO bei Variation der Wandtemperatur und des Emissionsgrades der Wand.	63
Abbildung 34:	Temperatur in der fiktiven Brennkammer bei Variation der Wandtemperatur und des Emissionsgrades der Wand.	63
Abbildung 35:	Strahlungsanteil der Wärmestromdichte über die Modellbrennkammerwände in Abhängigkeit von Wandtemperatur und Emissionsgrad der Wand.	64
Abbildung 36:	Wärmestromdichte über die Modellbrennkammerwände in Abhängigkeit von Wandtemperatur und Emissionsgrad der Wand.	64
Abbildung 37:	X-Komponente der Geschwindigkeitsvektoren in der der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.	66
Abbildung 38:	Iso-Surface des Molenbruchs von CH ₂ O bei 5*10 ⁻⁶ mol/mol eingefärbt mit der Temperatur zwischen 320 und 2200 K.	67
Abbildung 39:	Molenbruch von OH in der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.	68
Abbildung 40:	Visueller Vergleich der Flammenfront zwischen Simulation und realer Flamme im Gasbetrieb.	68

Abbildung 41:	Molenbruch von O_2 in der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.	69
Abbildung 42:	Molenbruch von CO in der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.	70
Abbildung 43:	Molenbruch von CO_2 in der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.	71
Abbildung 44:	Temperatur in der Modellbrennkammer im Gasbetrieb.	71
Abbildung 45:	Zündschirm mit langem Kragen (links, in rot) und Zündschirm mit kurzem Kragen (rechts, in blau).	72
Abbildung 46:	X-Komponente der Geschwindigkeitsvektoren in der Modellbrennkammer bei langem (oben) und kurzem Zündschirmkragen (unten) im Gasbetrieb.	73
Abbildung 47:	Molenbruch von OH im Bereich des Brenneraustrittes bei langem (links) und kurzem Zündschirmkragen (rechts) im Gasbetrieb.	74
Abbildung 48:	Temperaturverlauf im Bereich des Brenneraustrittes bei langem (links) und kurzem Zündschirmkragen (rechts) im Gasbetrieb.	75
Abbildung 49:	Temperaturverlauf in der Modellbrennkammer bei langem Zündschirmkragen (oben) und kurzem Zündschirmkragen (unten) im Gasbetrieb.	76
Abbildung 50:	X-Komponente der Geschwindigkeitsvektoren in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.	79
Abbildung 51:	Iso-Surface des Molenbruchs von CH_2O bei $1 \cdot 10^{-4}$ mol/mol eingefärbt mit der Temperatur zwischen 500 und 2150 K.	80
Abbildung 52:	Iso-Surface des Molenbruchs von CH_2O im Gasbetrieb bei $1 \cdot 10^{-5}$ mol/mol (links) und Iso-Surface des Molenbruchs von CH_2O im Flüssigbrennstoffbetrieb bei $5 \cdot 10^{-4}$ mol/mol (rechts) eingefärbt mit der Temperatur zwischen 0 und 2000 K.	80
Abbildung 53:	Visueller Vergleich zwischen Simulationsergebnis und realer Flamme des flüssigen Brennstoffes.	81
Abbildung 54:	Molenbruch von OH in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.	82
Abbildung 55:	Molenbruch von O_2 in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.	82
Abbildung 56:	Molenbruch von CO in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.	83
Abbildung 57:	Molenbruch von CO_2 in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.	84
Abbildung 58:	Temperaturverteilung in der Modellbrennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb. ...	84
Abbildung 59:	X-Komponente der Geschwindigkeitsvektoren in der Modellbrennkammer bei langem (oben) und kurzem Zündschirmkragen (unten) im Flüssigbrennstoffbetrieb.	85
Abbildung 60:	Molenbruch von OH im Bereich des Brenneraustrittes bei langem (links) und kurzem Zündschirmkragen (rechts) im Flüssigbrennstoffbetrieb.	86
Abbildung 61:	Temperaturverlauf im Bereich des Brenneraustrittes bei langem (links) und kurzem Zündschirmkragen (rechts) im Flüssigbrennstoffbetrieb.	87
Abbildung 62:	Temperaturverlauf in der Modellbrennkammer bei langem Zündschirmkragen (oben) und kurzem Zündschirmkragen (unten) im Flüssigbrennstoffbetrieb.	88

Abbildung 63:	Berechnungsgitter des Gesamtkessels.....	89
Abbildung 64:	Brenneranordnung.....	90
Abbildung 65:	Iso-Surface des OH-Molenbruchs bei $7 \cdot 10^{-4}$ mol/mol eingefärbt mit der Temperatur.....	91
Abbildung 66:	Lage der Auswerteeben in der Brennerachse von Brenner 1 und 7 auf der x-z-Ebene (links) und Geschwindigkeitsvektoren auf der Auswerteebene eingefärbt mit dem Betrag der Geschwindigkeit im Gasbetrieb.....	92
Abbildung 67:	Verlauf der Temperatur und des CO ₂ -Molenbruch in der x-z-Ebene des Kessels im Gasbetrieb.....	93
Abbildung 68:	Strahlungsanteil der Wärmestromdichte an den Brennkammerwänden (links) und gesamte Wärmestromdichte an den Brennkammerwänden (rechts) im Gasbetrieb.....	94
Abbildung 69:	Wärmestromdichte auf der Brennkammerrückwand im Gasbetrieb.....	95
Abbildung 70:	Brenneranordnung.....	96
Abbildung 71:	Iso-Surface des OH-Molenbruchs bei $7 \cdot 10^{-4}$ mol/mol eingefärbt mit dem CO-Molenbruch zwischen 0 und 0,11 mol/mol in der Brennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.....	97
Abbildung 72:	Geschwindigkeitsvektoren in der x-z-Ebene in der Brennkammer auf der Höhe der Brenner 1 und 6 eingefärbt mit dem Betrag der Geschwindigkeit.....	98
Abbildung 73:	Temperaturverlauf (links) und Verlauf des CO ₂ -Molenbruchs (rechts) in der x-z-Ebene in der Brennkammer im Flüssigbrennstoffbetrieb.....	99
Abbildung 74:	Strahlungswärmestromdichte (links) und gesamte Wärmestromdichte an den Brennkammerwänden (rechts) im Flüssigbrennstoffbetrieb.....	100
Abbildung 75:	Wärmestromdichte auf der Brennkammerrückwand im Flüssigbrennstoffbetrieb.....	101
Abbildung 76:	Auswerteebenen von der Simulation im Berechnungsgebiet und Messpunkte im Kessel.....	102

9 Tabellenverzeichnis

Tabelle 1:	Gewählte Modelle zur Simulation der Turbulenz, Strahlung und Verbrennung für flüssigen und gasförmigen Brennstoff.	10
Tabelle 2:	Einteilung der Brennstoffe nach dem Aggregatzustand (links) oder nach dem Ausgangsstoff (rechts). (Joos 2006)	12
Tabelle 3:	Stoffmenge, Stoffmengentransport und Stoffmengentransportdichte: Bezeichnung und ihre Einheiten.	16
Tabelle 4:	Parameter der Rosin Rammler Verteilungsfunktion für die Tropfengrößenverteilung.	39
Tabelle 5:	Betriebsdaten des Brenners.....	43
Tabelle 6:	Gas- und Oxidationsmittel- (Luft) Zusammensetzung in der Simulation.....	43
Tabelle 7:	Verwendete Modelle für die 2D-Simulation des Gaslanzenaustritts.....	47
Tabelle 8:	Geometrie- und Gitterinformationen für das Gitter der 2D-Gaslanze.	48
Tabelle 9:	Die in- und outlet Randbedingungen für die 2D-Simulation des Gaslanzenaustrittes. .	48
Tabelle 10:	Geometrie- und Gitterinformationen für das Gitter der Einzelbrenner-Simulationen.	54
Tabelle 11:	Randbedingungen für die Einzelbrenner-Simulation mit gasförmigem Brennstoff.	57
Tabelle 12:	Modelle für die Einzelbrennersimulation mit gasförmigem Brennstoff.....	57
Tabelle 13:	Randbedingungen für die Einzelbrenner-Simulation mit gasförmigem Brennstoff.	61
Tabelle 14:	Modelle für die Einzelbrennersimulation mit gasförmigem Brennstoff.....	61
Tabelle 15:	Modelle für die Einzelbrennersimulation mit gasförmigem Brennstoff.....	65
Tabelle 16:	Randbedingungen für die Einzelbrenner-Simulation mit gasförmigem Brennstoff.	65
Tabelle 17:	Randbedingungen für die Einzelbrenner-Simulation mit gasförmigem Brennstoff.	73
Tabelle 18:	Modelle für die Einzelbrennersimulation mit flüssigem Brennstoff.....	77
Tabelle 19:	Randbedingungen der Injektionszonen des flüssigen Brennstoffes.	77
Tabelle 20:	Berechnungsgrößen für die Abschätzung der Schallgeschwindigkeit eines zweiphasigen Gemisches.	78
Tabelle 21:	Physikalische Eigenschaften der flüssigen Brennstofftropfen aus FLUENT.	78
Tabelle 22:	Geometrie- und Gitterinformationen für das Gitter der Gesamtkessel-Simulationen..	90
Tabelle 23:	Randbedingungen der einzelnen Brenner (Brenner 3 und 7 sind nicht aktiviert).....	90
Tabelle 24:	Modelle für die Gesamtkesselsimulation mit gasförmigem Brennstoff.....	91
Tabelle 25:	Randbedingungen der einzelnen Brenner (Brenner 3 und 7 sind nicht aktiviert).....	96
Tabelle 26:	Modelle für die Einzelbrennersimulation mit flüssigem Brennstoff.....	96
Tabelle 27:	Vergleich der Simulationsergebnisse mit den Messwerten im Gasbetrieb.	103
Tabelle 28:	Vergleich der Simulationsergebnissen mit den Messwerten im Flüssigbrennstoffbetrieb.	103

10 Literaturverzeichnis

- Al-Abbas, A.H. & Naser, J., 2012. Numerical Study of One Air-Fired and Two Oxy-Fuel Combustion Cases of Propane in a 100 kW Furnace. *Energy and Fuels*, 26(2), pp.952–967.
- Amani, E. & Nobari, M.R.H., 2010. An efficient PDF calculation of flame temperature and major species in turbulent non-premixed flames. *Applied Mathematical Modelling*, 34(8), pp.2223–2241.
- ANSYS, 2011. *ANSYS FLUENT Theory Guide*, Canonsburg.
- Ansys, 2013. Fluent 14.5. Available at: <http://www.ansys.com>.
- Åseng, V., 2006. *Compressibility and Sound Speed*. Diploma Thesis. Norwegian University of Science and Technology.
- Baukal, C.E.J., Gershtein, V.Y. & Li, X., 2003. *Industrial Burners*, Boca Raton: CRC Press LLC.
- Bilger, R.W. et al., 2005. Paradigms in turbulent combustion research. In *Proceedings of the Combustion Institute*. Langford Lane: Elsevier Ltd, pp. 21–42.
- Broukal, J. & Hájek, J., 2011. Validation of an effervescent spray model with secondary atomization and its application to modeling of a large-scale furnace. *Applied Thermal Engineering*, 31, pp.2153–2164.
- Broukal, J., Vondál, J. & Hájek, J., 2012. Experimental and numerical investigation of wall heat fluxes in a gas fired furnace: Practicable models for swirling non-premixed combustion. *Chemical Engineering Transactions*, 29, pp.1399–1404.
- Bui-Pham, M. & Seshadri, K., 1991. Comparison between Experimental Measurements and Numerical Calculations of the Structure of Heptane-Air Diffusion Flames. *Combustion Science and Technology*, 79(4-6), pp.293–310.
- Chawla, J.M., 1985. Atomisation of liquids employing the low sonic velocity in liquid/gas-mixture. In *ICLASS 85 (International Conference of Liquid Atomization and Spray Systems)*. pp. 1–7.
- Chryssakis, C., Pantazis, K. & Kaiktsis, L., 2010. Combustion Modeling with Heavy Fuel Oil for Large Marine Diesel Engine Applications. In *CIMAC Congress*. Bergen, p. Paper No.: 236.
- Cvetkovic, E. & Pfennig, A., 2012. *Modellbildung und Simulation*. Technische Universität Graz.
- Effenberger, H., 2000. *Dampferzeugung*, Berlin: Springer-Verlag.
- Emami, M.D. & Eshghinejad Fard, A., 2012. Laminar flamelet modeling of a turbulent CH₄/H₂/N₂ jet diffusion flame using artificial neural networks. *Applied Mathematical Modelling*, 36(5), pp.2082–2093.
- Epple, B. et al., 2009. *Simulation von Kraftwerken und wärmetechnischen Anlagen*, Wien: Springer-Verlag.

- Ferziger, J.H. & Perić, M., 2008. *Numerische Strömungsmechanik*, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- Fukumoto, K. & Ogami, Y., 2012. Combustion simulation technique for reducing chemical mechanisms using look-up table of chemical equilibrium calculations : Application to CO – H₂ – air turbulent non-premixed flame. *Computers and Fluids*, 66, pp.98–106.
- Garaniya, V.B., 2009. *Modelling of Heavy Fuel Oil Spray Combustion using Continuous Thermodynamics*. Dissertation. University of Tasmania.
- German, A.E. & Mahmud, T., 2005. Modelling of non-premixed swirl burner flows using a Reynolds-stress turbulence closure. *Fuel*, 84(5), pp.583–594.
- Gousbet, G. & Berlemont, A., 1999. Eulerian and Lagrangian Approaches for Predicting the Behaviour of Discrete Particles in Turbulent Flows. *Progress in Energy and Combustion Science*, 25, pp.133–159.
- Guihua, H., Honggang, W. & Feng, Q., 2011. Numerical simulation on flow , combustion and heat transfer of ethylene cracking furnaces. *Chemical Engineering Science*, 66(8), pp.1600–1611.
- Hassan, G. et al., 2013. Predictions of CO and NO_x emissions from steam cracking furnaces using GRI2.11 detailed reaction mechanism – A CFD investigation. *Computers and Chemical Engineering*, 58, pp.68–83.
- Hochenauer, C., 2005. *Entwicklung, Optimierung und Bewertung eines schwerölgefeuerten Dampferzeugers mit gestufter Verbrennung*. Dissertatation. Technische Universität Graz.
- Hochenauer, C., 2013. *Wärmetechnik II*. Technische Universität Graz.
- Huemer, H., 2010. *Chemische Thermodynamik I*. Technische Universität Graz.
- Ilbas, M., 2005. The effect of thermal radiation and radiation models on hydrogen-hydrocarbon combustion modelling. *International Journal of Hydrogen Energy*, 30(10), pp.1113–1126.
- Joos, F., 2006. *Technische Verbrennung - Verbrennungstechnik, Verbrennungsmodellierung, Emissionen*, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- Khavkin, Y.I., 2004. *Theory and Practice of Swirl Atomizers*, New York, London: Taylor & Francis.
- Khinast, J., 2010. *Systemdynamik - Numerische Simulation*. Technische Universität Graz.
- Kleiber-Infrared, 2014. Emissionsgradtabelle. Available at:
<http://www.kleiberinfrared.de/index.php/de/amanwendungen/emissionsgrade.html>.
- Leiter, A., 2011. *Numerische Berechnung eines Gichtgasbrenners*. Diplomarbeit. Technische Universität Graz.
- Lund, M.T., Soika, P.E. & Lefebvre, A.H., 1993. Effervescent atomization at low mass flow rates. Part I: the influence of surface tension. *Atomization and Spray*, 3, pp.77–89.

- Ma, C.Y. et al., 2002. Prediction of Lifted , Non-Premixed Turbulent Flames Using a Mixedness-Reactedness Flamelet Model With Radiation Heat Loss. *Combustion and Flame*, 128(1-2), pp.60–73.
- Mallaun, E., 2013. *CFD Simulation eines Gichtgasbrenners*. Masterarbeit. Technische Universität Graz.
- Martens, S., 2013. *Strömungsmechanik und Stoffaustausch*. Technische Universität Graz.
- Messig, D. et al., 2012. Evaluation of radiation modeling approaches for non-premixed flamelets considering a laminar methane air flame. *Combustion and Flame*, 160(2), pp.251–264.
- O'Rourke, P.J., 1981. *Collective Drop Effects on Vaporizing Liquid Sprays*. Princeton University.
- Paschedag, A.R., 2004. *CFD in der Verfahrenstechnik - Allgemeine Grundlagen und mehrphasige Anwendungen*, Wiley-VCH.
- Poinsot, T. & Veynante, D., 2005. *Theoretical and Numerical Combustion* 2nd ed., Philadelphia: Edwards.
- Reitz, R.D., 1987. Mechanisms of atomization processes in high-Pressure VAporizing sprays. *Atomization and Spray Technology*, 3, pp.309–337.
- Ren, Z. et al., 2013. Simulations of a turbulent non-premixed flame using combined dimension reduction and tabulation for combustion chemistry. *Fuel*, 105, pp.636–644.
- Saario, A. et al., 2005. Heavy fuel oil combustion in a cylindrical laboratory furnace: measurements and modeling. *Fuel*, 84, pp.359–369.
- Schneider, D.R. & Bogdan, Z., 2007. Effect of heavy fuel oil/natural gas co-combustion on pollutant generation in retrofitted power plant. *Applied Thermal Engineering*, 27(2007), pp.1944–1950.
- Schwarze, R., 2013. *CFD-Modellierung - Grundlagen und Anwendungen bei Strömungsprozessen*, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- Senouci, M. et al., 2013. Transported-PDF (IEM , EMST) micromixing models in a hydrogen-air nonpremixed turbulent flame. *Acta Mechanica*, 224(12), pp.3111–3124.
- Tanner, F.X. & Weisser, G., 1998. Simulation of Liquid Jet Atomization for Fuel Sprays by Means of a Cascade Drop Breakup Model. *SAE Technical Paper Series*, (980808).
- Usman, M., Malik, S. & Rafique, M., 2012. Probability Density Function Computations of a Strongly Swirling Flame. In *Proc. Int. Bhurban Conf. Appl. Sci. Technol., IBCAST*. Islamabad, pp. 283–290.
- Veynante, D. & Vervisch, L., 2002. Turbulent combustion modeling. *Progress in Energy and Combustion Science*, 28(3), pp.193–266.
- Wang, M., Huang, J. & Bushe, W.K., 2007. Simulation of a turbulent non-premixed flame using conditional source-term estimation with trajectory generated low-dimensional manifold. *Proceedings of the Combustion Institute*, 31 II, pp.1701–1709.

- Warnatz, J., Maas, U. & Dibble, R.W., 2001. *Verbrennung - Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*, Berlin Heidelberg: Springer-Verlag.
- Xuan, Y. & Blanquart, G., 2013. A flamelet-based a priori analysis on the chemistry tabulation of polycyclic aromatic hydrocarbons in non-premixed flames. *COMBUSTION AND FLAME*.
- Yadav, R. et al., 2013. A numerical investigation of the Eulerian PDF transport approach for modeling of turbulent non-premixed pilot stabilized flames. *Combustion and Flame*, 160(3), pp.618–634.
- Yang, B. & Pope, S.B., 1998. An investigation of the Accuracy of Manifold Methods and Splitting Schemes in the Computational Implementation of Combustion Chemistry. *Combustion and Flame*, 112(1-2), pp.16–32.

11 Anhang

CH4-Skeletal (Yang & Pope 1998)

```

ELEMENTS
C H O N
END
SPECIES
H2O CO2 O2 CH4 CO H H2      OH O CH3  HCO HO2  H2O2 CH2O  CH3O  N2
END
THERMO
END
REACTIONS
H+O2=OH+O      1.59E+17  -0.927  16874.  ! 1
O+H2=OH+H      3.87E+04   Feb.70  6262.   ! 2
OH+H2=H2O+H    2.16E+08   Jän.51  3430.   ! 3
OH+OH=O+H2O    2.10E+08   Jän.40  -397.   ! 4
H+H+M=H2+M     6.40E+17  -1.0    0.       ! 5
H+OH+M=H2O+M  8.40E+21  -2.00   0.       ! 6
H+O2+M=HO2+M  7.00E+17  -0.80   0.       ! 7
HO2+H=OH+OH    1.50E+14   0.0    1004.   ! 8
HO2+H=H2+O2    2.50E+13   0.0    693.    ! 9
HO2+O=O2+OH    2.00E+13   0.0    0.       ! 10
HO2+OH=H2O+O2  6.02E+13   0.0    0.       ! 11
H2O2+M=OH+OH+M 1.00E+17   0.0    45411.  ! 12
CO+OH=CO2+H    1.51E7     01.Mär  -758.   ! 13
CO+O+M=CO2+M   3.01E+14   0.0    3011.   ! 14
HCO+H=H2+CO    7.23E+13   0.0    0.       ! 15
HCO+O=OH+CO    3.00E+13   0.0    0.       ! 16
HCO+OH=H2O+CO  1.00E+14   0.0    0.       ! 17
HCO+O2=HO2+CO  4.20E+12   0.0    0.       ! 18
HCO+M=H+CO+M   1.86E+17  -1.0    16993.  ! 19
CH2O+H=HCO+H2  1.26E+08   Jän.62  2175.   ! 20
CH2O+O=HCO+OH  3.50E+13   0.0    3513.   ! 21
CH2O+OH=HCO+H2O 7.23E+05   Feb.46  -970.   ! 22
CH2O+O2=HCO+HO2 1.00E+14   0.0    39914.  ! 23
CH2O+CH3=HCO+CH4 8.91E-13   Jul.40  -956.   ! 24
CH2O+M=HCO+H+M 5.00E+16   0.0    76482.  ! 25
CH3+O=CH2O+H   8.43E+13   0.0    0.       ! 26
CH3+OH=CH2O+H2 8.00E+12   0.0    0.       ! 27
CH3+O2=CH3O+O  4.30E+13   0.0    30808.  ! 28
CH3+O2=CH2O+OH 5.20E+13   0.0    34895.  ! 29
CH3+HO2=CH3O+OH 2.28E+13   0.0    0.       ! 30
CH3+HCO=CH4+CO 3.20E+11   0.50    0.       ! 31
CH4(+M)=CH3+H(+M) 6.3E14     0.0    104000. ! 32
LOW/6.3E-3  0.0  18000./
CH4+H=CH3+H2   7.80E+06   02.Nov  7744.   ! 33
CH4+O=CH3+OH   1.90E+09   Jän.44  8676.   ! 34
CH4+O2=CH3+HO2 5.60E+12   0.0    55999.  ! 35
CH4+OH=CH3+H2O 1.50E+06   Feb.13  2438.   ! 36
CH4+HO2=CH3+H2O2 4.60E+12   0.0    17997.  ! 37
CH3O+H=CH2O+H2 2.00E+13   0.0    0.       ! 38
CH3O+OH=CH2O+H2O 5.00E+12   0.0    0.       ! 39
CH3O+O2=CH2O+HO2 4.28E-13   Jul.60  -3528.  ! 40
CH3O+M=CH2O+H+M 1. 0,00E+00 0.0    25096.  ! 41
END

```

n-Heptan (Bui-Pham & Seshadri 1991)

ELEMENTS

H O C N

END

SPECIES

H O₂ OH O H₂ H₂O HO₂ CO CO₂ CH₃ CH₂OHCO CH₃O CH₃HCO C₃H₆ C₇H₁₆ C₇H₁₅ N₂

END

THERMO

END

REACTIONS

CAL/MOLE

!Units are moles, cubic centimeters, seconds, Kelvins, cal/mole.

H+O ₂ =OH+O	2.2E+14	0.00	16800.
H ₂ +O=OH+H	1.8E+10	1.00	8826.
OH+H ₂ =H ₂ O+H	1.17E+09	1.30	3626.
OH+OH=H ₂ O+O	6.E+08	1.30	0.
H ₂ +M=H+H+M	2.23E+12	0.50	92600.
H+OH+M=H ₂ O+M	7.5E+23	-2.60	0.
H+O ₂ +M=HO ₂ +M	2.1E+18	-1.00	0.
H+O ₂ +N ₂ =HO ₂ +N ₂	6.7E+19	-1.42	0.
H+HO ₂ =OH+OH	2.5E+14	0.00	1900.
H+HO ₂ =H ₂ +O ₂	2.5E+13	0.00	700.
O+HO ₂ =OH+O ₂	4.8E+13	0.00	1000.
OH+HO ₂ =H ₂ O+O ₂	5.E+13	0.00	1000.
H ₂ +O ₂ =OH+OH	1.7E+13	0.00	47780.
H+O ₂ +O ₂ =HO ₂ +O ₂	6.7E+19	-1.42	0.
CO+OH=CO ₂ +H	1.51E+07	1.30	-758.
CH ₃ +O=CH ₂ O+H	6.8E+13	0.00	0.
CH ₂ O+H=HCO+H ₂	3.31E+14	0.00	10500.
CH ₂ O+M=HCO+H+M	3.31E+16	0.00	81000.
CH ₂ O+O=HCO+OH	1.81E+13	0.00	3082.
OH+CH ₂ O=HCO+H ₂ O	7.53E+12	0.00	167.
H+HCO=CO+H ₂	4.E+13	0.00	0.
HCO+O=CO+OH	1.E+12	0.00	0.
OH+HCO=CO+H ₂ O	5.E+12	0.00	0.
O ₂ +HCO=CO+HO ₂	3.E+12	0.00	0.
HCO+M=CO+H+M	1.6E+14	0.00	14700.
CH ₃ +O ₂ =CH ₃ O+O	7.E+12	0.00	25652.
CH ₃ +OH=CH ₂ O+H ₂	7.5E+12	0.00	0.
CH ₃ O+M=CH ₂ O+H+M	2.4E+13	0.00	28812.
CH ₃ O+H=CH ₂ O+H ₂	2.E+13	0.00	0.
CH ₃ O+OH=CH ₂ O+H ₂ O	1.E+13	0.00	0.
CH ₃ O+O=CH ₂ O+OH	1.E+13	0.00	0.
CH ₃ O+O ₂ =CH ₂ O+HO ₂	6.3E+10	0.00	2600.
CH ₃ +O ₂ =CH ₂ O+OH	5.2E+13	0.00	34574.
CH ₃ HCO+O=CH ₃ +CO+OH	5.E+12	0.00	1900.
CH ₃ HCO+OH=CH ₃ +CO+H ₂ O	1.E+13	0.00	0.
C ₃ H ₆ +O=CH ₃ +CH ₃ +CO	5.E+12	0.00	454.
C ₃ H ₆ +OH=CH ₃ HCO+CH ₃	1.E+13	0.00	0.
C ₇ H ₁₆ +H=C ₇ H ₁₅ +H ₂	6.1E+14	0.00	8469.
C ₇ H ₁₆ +O=C ₇ H ₁₅ +OH	1.6E+14	0.00	4569.
C ₇ H ₁₆ +OH=C ₇ H ₁₅ +H ₂ O	1.7E+13	0.00	957.
C ₇ H ₁₅ =CH ₃ +C ₃ H ₆ +C ₃ H ₆	3.7E+13	0.00	28708.

END