

# **CFD Simulation eines Gichtgasbrenners**

von

Eugen MALLAUN

als Masterarbeit der Kommission zur Abhaltung der Masterprüfung der  
Studienrichtung Maschinenbau an der Technischen Universität Graz über  
das Institut für Wärmetechnik vorgelegt.

Betreuer:

Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Christoph Hochenauer

Graz, August 2013

## Eidesstattliche Erklärung

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.

Graz, .....

.....  
(Unterschrift)

## Statutory Declaration

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 marked all material which has been quoted either literally or by content from the used sources.

Graz, .....  
.....  
(Signature)

# Kurzfassung

Titel: CFD Simulation eines Gichtgasbrenners

Autor: Eugen Mallaun

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

In dieser Masterarbeit wird die Simulation einer reaktiven Strömung mit verschiedenen Modellen (Verbrennung, Turbulenz, Strahlung) behandelt. Es wird eine numerische Strömungs- und Verbrennungssimulation an einem einzelnen Gichtgasbrenner sowie an einem Gesamtkessel durchgeführt. Zu Beginn wird näher auf die theoretischen Grundlagen der Verbrennung eingegangen. Anschließend werden die Ergebnisse der Literaturstudie diskutiert. Diese beinhalten Reaktionsmechanismen für die Gichtgasverbrennung sowie verbrennungsspezifische Parameter.

Die Einarbeitung in die CFD-Software sowie eine erste Einschränkung der Reaktionsmechanismen erfolgt mit der 2D-Simulation. Hierzu wird eine turbulente Diffusionsflamme in einem begrenzten Rechengebiet mit geeigneten Randbedingungen simuliert. Somit können die Verbrennungsmodelle mit den Reaktionsmechanismen auf ihre Eignung zur Simulation der Gichtgasverbrennung analysiert werden.

Nach erfolgter Einschränkung der Reaktionsmechanismen im Rahmen der 2D-Simulation wird die 3D-Simulation des Einzelbrenners durchgeführt. In einem ersten Arbeitsschritt werden hierbei die Verbrennungsmodelle mit den Reaktionsmechanismen detailliert untersucht und die Ergebnisse miteinander verglichen. Darauf aufbauend wird der Einfluss der Strahlung auf die Verbrennung mit zwei verschiedenen Strahlungsmodellen untersucht. Das Turbulenzmodell beeinflusst das Strömungsprofil und die Hauptreaktionszone erheblich. Diese Auswirkungen werden deshalb in einem eigenen Abschnitt ausführlicher betrachtet. Um den Einfluss des Wärmeeintrags auf die Reaktion zu untersuchen, wird die Brennkammerwandtemperatur variiert. Die Untersuchung des Einflusses des Brennkammerquerschnitts und die Netzgitterstudie schließen die Einzelbrennersimulation ab. Im letzten Teil der Arbeit wird die Gesamtkesselsimulation, basierend auf den gewonnen Erkenntnissen der Einzelbrennersimulation, durchgeführt.

## Abstract

Title: CFD simulation of a blast furnace gas burner

Author: Eugen Mallaun

1<sup>st</sup> keyword: CFD simulation

2<sup>nd</sup> keyword: Combustion

3<sup>rd</sup> keyword: Blast furnace gas burner

The topic of this Master thesis is the simulation of a reactive flow based on different models (combustion, turbulence, radiation). The numerical simulation of the flow and the combustion is carried out with the help of a single blast furnace gas burner and a boiler. First of all, a theoretical introduction of the fundamentals of combustion is given and the results of the conducted literature study are presented. These results contain reaction mechanisms for the combustion of blast furnace gas and specific parameters related to combustion.

A 2D-simulation is performed to acquire a better understanding of the CFD-Software and to restrict the number of possible reaction mechanisms. Therefore, a turbulent diffusion flame is simulated. Consequently, the combustion models are tested for their suitability to simulate the combustion of the blast furnace gas.

After restricting the reaction mechanisms in the 2D-simulation, a 3D-simulation of the single burner is carried out. The combustion models with the reaction mechanisms were analysed in great detail and the results obtained were compared. Subsequently, an analysis of the effects of the radiation on the combustion is conducted. This is done with the help of two different radiation models. The turbulence model has a huge impact on the flow profile and the main reaction zone. Modifications of the wall temperature of the combustion chamber were simulated to study possible influences of the heat input on the reaction. An analysis how the combustion chamber is influenced by the cross-section completes the simulation of the single burner. Moreover, a study of the mesh is performed. In the last part of the thesis, the simulation of the boiler is illustrated. It is based on the findings of the single burner simulation.

## Danksagung

Bei Institutsvorstand Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Christoph Hochenauer bedanke ich mich für die Betreuung der Masterarbeit. Er brachte sein Fachwissen gezielt ein und unterstützte mich bei Fragestellungen, um ein rasches und gezieltes Vorankommen zu gewährleisten.

Herrn Dipl.-Ing. René Prieler danke ich für die fachliche Unterstützung im Bereich der CFD Simulation. Das Thema für die Masterarbeit wurde von der Firma ANDRITZ Energy & Environment GmbH zur Verfügung gestellt. Daher möchte ich ebenfalls einen Dank an Herrn Dipl.-Ing Dr. Günter Gronald und Herrn Dipl.-Ing. Dr. Lorenz Griendl für die gute Zusammenarbeit mit dem Firmenpartner aussprechen. Herr Dipl.-Ing. Dr. Thomas Gurker erstellte das Netzgitter für die Simulation und bei Problemen konnte ich mich stets an Ihn wenden. Seine Hilfe trug maßgeblich zur Erstellung der Masterarbeit bei.

Außerdem danke ich meinen Studienkollegen, welche sich zwar nicht an dieser Arbeit beteiligten, aber für die notwendige Ablenkung während der Erstellung sorgten. Zu guter Letzt sei noch meinen Eltern gedankt, welche mich während des Studiums stets unterstützten.

Graz, August 2013

Eugen Mallaun

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1: Einteilung der Brennstoffe (Joos, 2006) .....	1
Abbildung 1-2: Hochofen (Taube, 1998) .....	4
Abbildung 1-3: Stoffaustausch mit mehreren Stoffen (Klell, 2012) .....	5
Abbildung 1-4: Änderung der inneren Energie innerhalb einer Systemgrenze (Klell, 2012) .....	6
Abbildung 1-5: Energieänderung einer Elementarreaktion (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001) .....	8
Abbildung 1-6: Molenbrüche des Sauerstoffs O in einer vorgemischten C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> -Luft-Flamme ( $\lambda=1$ ) (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001) .....	10
Abbildung 1-7: Reaktionsflussanalyse einer vorgemischten CH <sub>4</sub> -Luft-Flamme ( $\lambda=1$ ) (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001) .....	12
Abbildung 1-8: Zeitskalen chemisch reagierender Strömungen (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001) .....	13
Abbildung 1-9: Laminare Vormischflamme eines Bunsenbrenners (Joos, 2006) .....	14
Abbildung 1-10: Eigenschaften und Charakteristiken in der Flammenfront (Joos, 2006) .....	14
Abbildung 1-11: Reaktionsverlauf in einer laminaren Wasserstoff-Diffusionsflamme (Joos, 2006) .....	16
Abbildung 3-1: Stauscheibenstabilisierung (Wünning, 2011) .....	23
Abbildung 3-2: Hochgeschwindigkeitsbrenner (Wünning, 2011) .....	23
Abbildung 3-3: Dampfkessel (Leiter, 2011) .....	24
Abbildung 3-4: Brennerquerschnitt und Detail des Austrittsbereichs (Leiter, 2011) .....	25
Abbildung 4-1: Problemlösungszyklus (Offner, 2012) .....	26
Abbildung 4-2: Vergleich laminare und turbulente Strömung (Sigloch, 2007) .....	29
Abbildung 4-3: Wolkenwirbelstraße (Nasa, 2001) .....	30
Abbildung 4-4: fluktuierende Strömungsgröße (Sanz, 2011) .....	31
Abbildung 4-5: Möglichkeiten der Turbulenzmodellierung (Sanz, 2011) .....	32
Abbildung 4-6: PDF des Mischungsbruchs p(f) (Ansys, 2010) .....	38
Abbildung 4-7: laminare Gegenstromflamme (Ansys, 2010) .....	39
Abbildung 5-1: kartesisches und rechtwinkliges Gitter (Schwarze, 2013) .....	40
Abbildung 5-2: Gittertypen für einfache Modellgeometrien (Schwarze, 2013) .....	41
Abbildung 5-3: unstrukturiertes Gitter mit orthogonalen Zellen (Ferziger & Peric, 2002) .....	42
Abbildung 6-1: Diffusionsbrenner zur 2D Untersuchung .....	44
Abbildung 6-2: Netzgitter zur 2D Untersuchung .....	45
Abbildung 6-3: Temperaturprofil der Methanverbrennung bei Anwendung des EDM .....	46
Abbildung 6-4: Temperaturprofil der Methanverbrennung .....	47
Abbildung 6-5: Geschwindigkeitsprofil der Methanverbrennung .....	48
Abbildung 6-6: CO-Massenanteil der Methanverbrennung .....	48

Abbildung 6-7: Vergleiche mit unterschiedlichen Reaktionsmechanismen.....	50
Abbildung 6-8: Temperaturprofil des 3- und 5-Schritt Mechanismus.....	50
Abbildung 6-9: Vergleiche mit dem nicht vormischenden Modell .....	51
Abbildung 6-10: Temperaturprofile der Flameletmodelle und des chemischen Gleichgewichts	52
Abbildung 7-1: Netzgitter für die Simulation des Gichtgasbrenners .....	53
Abbildung 7-2: Verbrennungsmodelle ohne Strahlung.....	55
Abbildung 7-3: Temperaturprofile in XY-Schnittebenen .....	56
Abbildung 7-4: CH <sub>3</sub> OH- und CH <sub>2</sub> OH Massenanteile .....	57
Abbildung 7-5: Geschwindigkeitsprofile im Horizontal (XZ)- und Vertikalschnitt (YZ).....	58
Abbildung 7-6: OH-Massenanteile in XY-Ebenen und YZ-Ebene .....	58
Abbildung 7-7: CH <sub>2</sub> O-Massenanteile in XY-Ebenen und YZ-Ebene.....	59
Abbildung 7-8: CO- und OH-Massenanteile in XY-Ebenen und YZ-Ebene .....	60
Abbildung 7-9: Temperaturprofile und OH-Massenanteile in XY-Ebenen und YZ-Ebene.....	60
Abbildung 7-10: Verbrennungsmodelle mit Strahlung (DO) .....	61
Abbildung 7-11: Wärmestromdichte auf der Brennkammerwand .....	62
Abbildung 7-12: Skeletal-Temperaturprofile im Horizontal- und Vertikalschnitt .....	63
Abbildung 7-13: Vergleich der Temperaturprofile des GRI 3.0 und des Gleichgewichts.....	63
Abbildung 7-14: Vergleich der OH-Massenanteile des GRI 3.0 und des Gleichgewichts .....	64
Abbildung 7-15: Vergleich der Temperaturprofile des Gleichgewichts des 3-Schritt EDM.....	64
Abbildung 7-16: Verbrennungsmodelle mit Strahlung (P1) .....	65
Abbildung 7-17: Vergleich der Strahlungsmodelle .....	66
Abbildung 7-18: Vergleich der Temperaturprofile bei unterschiedlichen Strahlungsmodellen ...	66
Abbildung 7-19: OH- und CH <sub>2</sub> O-Massenanteile bei unterschiedlichen Strahlungsmodellen.....	67
Abbildung 7-20: Wärmestromdichten bei unterschiedlicher Strahlungsmodellierung .....	68
Abbildung 7-21: Vergleich der Turbulenzmodelle .....	69
Abbildung 7-22: Vergleich der Temperaturprofile bei unterschiedlichen Turbulenzmodellen ...	70
Abbildung 7-23: CH <sub>2</sub> O-Massenanteile bei unterschiedlichen Turbulenzmodellen .....	70
Abbildung 7-24: Vergleich der Geschwindigkeitsprofile bei unterschiedlichen Turbulenzmodellen .....	70
Abbildung 7-25: Vergleich der Brennkammerwandtemperatur.....	71
Abbildung 7-26: Vergleich der Temperaturprofile bei unterschiedlichen Wandtemperaturen ....	72
Abbildung 7-27: Wärmestromdichten bei unterschiedlichen Brennkammerwandtemperaturen .....	73
Abbildung 7-28: CH <sub>2</sub> O-Massenanteile bei unterschiedlichen Brennkammerwandtemperaturen .....	73
Abbildung 7-29: Vergleich unterschiedlicher Brennkammerquerschnitte .....	74
Abbildung 7-30: Temperaturprofile bei unterschiedlichen Domainquerschnitten.....	74



Abbildung 7-31: CO-Massenanteile bei unterschiedlichen Domainquerschnitten.....	75
Abbildung 7-32: Geschwindigkeitsprofile bei unterschiedlichen Domainquerschnitten.....	76
Abbildung 7-33: Rückströmungen am Austritt (6x6 m).....	76
Abbildung 7-34: Wärmestromdichten bei unterschiedlichen Domainquerschnitten .....	77
Abbildung 7-35: Netzgittervergleich .....	78
Abbildung 7-36: Temperaturprofile bei unterschiedlichen Netzgittern .....	79
Abbildung 7-37: CH <sub>2</sub> O-Massenanteile bei unterschiedlichen Netzgittern .....	80
Abbildung 8-1: Netzgitter für die Simulation des Gesamtkessels .....	81
Abbildung 8-2: Temperaturprofil des Gesamtkessels .....	83
Abbildung 8-3: Geschwindigkeitsprofil des Gesamtkessels in der YZ-Ebene.....	83
Abbildung 8-4: CH <sub>2</sub> O-Massenanteile des Gesamtkessels .....	84
Abbildung 8-5: Wärmestromdichte an der Kesselwand des Gesamtkessels .....	85

## Tabellenverzeichnis

Tabelle 1-1: Gasförmige Brennstoffe (Joos, 2006) .....	2
Tabelle 1-2: Herstellungsverfahren für Gase (Joos, 2006).....	2
Tabelle 2-1: Übersicht über die ausgewählte Literatur .....	18
Tabelle 2-2: Zusammensetzung von Gichtgas.....	19
Tabelle 3-1: Klassifizierung von Industriebrennern (Wünning, 2011) .....	22
Tabelle 3-2: Betriebsdaten des Brenners (Leiter, 2011).....	24
Tabelle 4-1: Gegenüberstellung von technischen Problemlösungsansätzen (Sanz, 2011) .....	27
Tabelle 5-1: Diskretisierungsmethoden für die 2D- und 3D-Simulation.....	43
Tabelle 7-1: Randbedingungen .....	54
Tabelle 7-2: Flächengemittelte Austrittswerte .....	61
Tabelle 7-3: Flächengemittelte Austrittswerte bei Strahlungsberücksichtigung .....	65
Tabelle 7-4: Flächengemittelte Austrittswerte bei unterschiedlichen Domainquerschnitten.....	78
Tabelle 7-5: Netzqualität.....	78
Tabelle 8-1: Randbedingungen für die Gesamtkesselsimulation (Leiter, 2011) .....	82

## Formelzeichen, Indizes und Abkürzungen

*Lateinische Buchstaben:*

<u>Symbol</u>	<u>Bedeutung</u>	<u>Dimension</u>
$a$	Absorptionskonstante eines Mediums	1/m
$b$	Gewichtungsfaktor	-
$C_d$	Konstante (Non-Premixed Combustion Modell)	2,86
$C_g$	Konstante (Non-Premixed Combustion Modell)	2,0
$C_\mu$	Turbulenzmodellkonstante	0,09
$c_v$	Spezifische Wärmekapazität bei $v = \text{konst.}$	J/kg K
$e$	Spezifische Volumsenergie	J/m <sup>3</sup>
$E_a$	Aktivierungsenergie	J/mol
$f$	Volumenkraft	m/s <sup>2</sup>
$G$	Freie Enthalpie	J
$H_u$	Spezifischer Heizwert bzw. unterer Heizwert	kJ/kg; kJ/Nm <sup>3</sup>
$i_\lambda$	Wellenlängenabhängige Strahlungsintensität	W/m <sup>2</sup>
$k$	Turbulente kinetische Energie	m <sup>2</sup> /s <sup>2</sup>
$k$	Wärmeleitfähigkeit	W/m K
$k$	Boltzmannkonstante	$1,380641 \cdot 10^{-23}$ J/K
$k$	Geschwindigkeitskoeffizient	diverse
$K$	Gleichgewichtskonstante	-
$\dot{m}$	Massenstrom	kg/s
$n$	Stoffmenge, Molzahl	mol
$N$	Atomzahl	-
$p$	Druck, Partialdruck	bar
$\dot{q}$	Wärmestromdichte, spezifischer Wärmestrom	W/m <sup>2</sup>
$Q$	Wärme	J
$R$	Spezifische Gaskonstante	J/kg K
$R_m$	Molare Gaskonstante	8,314472 J/mol K
$S$	Entropie	J/K
$s$	Weg	m
$t$	Zeit	s
$T$	Temperatur	K (°C)
$u$	Spezifische innere Energie	J/kg
$U$	Innere Energie	J
$v$	Spezifisches Volumen	m <sup>3</sup> /kg

$v$	Geschwindigkeit	m/s
$V$	Volumen	$m^3$
$W$	Arbeit	J
$x$	Koordinate	m
$y$	Koordinate	m
$z$	Koordinate	m

*Griechische Buchstaben:*

<u>Symbol</u>	<u>Bedeutung</u>	<u>Dimension</u>
$\alpha$	Absorptionsgrad	-
$\delta_{ij}$	Kronecker Delta	-
$\varepsilon$	Emissionsverhältnis	-
$\lambda$	Luftverhältnis	-
$\lambda$	Wellenlänge	m
$\mu$	Chemisches Potenzial	kJ/kmol
$\mu_i$	Massenanteil der Komponente i	-
$\mu$	Dynamische Viskosität	kg/m s
$\nu$	Kinematische Viskosität	$m^2/s$
$\nu_i$	Molanteil der Komponente i	-
$\nu_{st_i}$	Stöchiometrischer Koeffizient der Komponente i	-
$\rho$	Dichte	$kg/m^3$
$\rho$	Reflexionsgrad	-
$\sigma_t$	Konstante (Non-Premixed Combustion Model)	0,85
$\tau$	Transmissionsgrad	-
$\tau_{ij}$	Schubspannung	$kg/m s^2$

*Operatoren:*

<u>Symbol</u>	<u>Bedeutung</u>	<u>Dimension</u>
$[A]$	Konzentration der Spezies A	$kmol/m^3$
$d$	Vollständiges Differential	-
$\delta$	Unvollständiges Differential	-
$\partial$	Partielles Differential	-
$\Pi$	Produkt	-
$\Sigma$	Summe	-
$\Delta$	Differenz	-
$\nabla$	Nabla	-

$u'$	Schwankungswert von $u$	-
$\bar{u}$	Mittelwert von $u$	-

*Indizes:*

<u>Symbol</u>	<u>Bedeutung</u>
$a$	aus
$Br$	Brennstoff
$adb$	adiabat
$i$	Laufvariable
$k$	Laufvariable
$PL$	Primärluft
$Rg$	Rauchgas
$SL$	Sekundärluft
$t$	turbulent

*Sonstige Abkürzungen:*

<u>Symbol</u>	<u>Bedeutung</u>
BFG	Blast Furnace Gas
CFD	Computational Fluid Dynamics
COG	Coke Oven Gas
DNS	Direct Numerical Simulation
EL	Extra Leicht
FO	First Order
LES	Large Eddy Simulation
PDF	Probability Density Function
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
SO	Second Order
WSGGM	Weighted Sum of Gray Gas Model

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Theoretische Grundlagen der Verbrennung.....</b>	<b>1</b>
1.1	Brennstoffübersicht .....	1
1.2	Gasförmige Brennstoffe .....	2
1.3	Entstehung, Zusammensetzung und Verwertung von Gichtgas .....	3
1.4	Chemisches Gleichgewicht .....	5
1.5	Reaktionskinetik .....	7
1.6	Reaktionsmechanismen .....	8
1.6.1	Partielles Gleichgewicht .....	9
1.6.2	Quasistationarität .....	10
1.6.3	Analyse von Reaktionsmechanismen .....	11
1.7	Flammenformen .....	13
1.7.1	Laminare Vormischflammen .....	13
1.7.2	Laminare nicht vorgemischte Flammen .....	15
1.7.3	Turbulente Vormischflammen .....	16
1.7.4	Turbulente nicht vorgemischte Flammen .....	17
<b>2</b>	<b>Literaturstudie zu Gichtgasen .....</b>	<b>18</b>
<b>3</b>	<b>Aufbau des Brenners .....</b>	<b>22</b>
3.1	Industriebrenner .....	22
3.2	Gichtgasbrenner .....	24
<b>4</b>	<b>Grundlagen zur Numerischen Simulation .....</b>	<b>26</b>
4.1	Allgemeines .....	26
4.2	Grundgleichungen der Strömungsmechanik .....	27
4.3	Turbulenzmodellierung .....	29
4.3.1	Allgemeines zu turbulenten Strömungen .....	29
4.3.2	k- $\epsilon$ Modelle .....	32
4.3.3	Reynolds-Spannungs-Modelle (RSM) .....	33
4.4	Strahlungsmodellierung .....	33
4.4.1	Allgemeines .....	33
4.4.2	Weighted-Sum-of-Gray-Gases Modell .....	35
4.4.3	P1-Strahlungsmodell .....	35

4.4.4	DO (Discrete Ordinates)-Strahlungsmodell .....	35
4.5	Verbrennungssimulation.....	36
4.5.1	Eddy Dissipation Modell (EDM).....	36
4.5.2	Eddy Dissipation Concept (EDC)-Modell.....	36
4.5.3	Modelle für nicht vorgemischte Verbrennung .....	36
<b>5</b>	<b>Numerische Strömungssimulation .....</b>	<b>40</b>
5.1	Gitterformen .....	40
5.2	Ansys Fluent .....	42
5.2.1	Problem Setup .....	42
5.2.2	Solution.....	43
5.2.3	Results.....	43
<b>6</b>	<b>2D-Simulation zur Einschränkung der Reaktionsmechanismen.....</b>	<b>44</b>
6.1	Verbrennungsuntersuchung mit Methan (NG) .....	45
6.2	Verbrennungsuntersuchung mit Gichtgas (BFG).....	49
6.2.1	Vergleich der Reaktionsmechanismen mit EDM.....	49
6.2.2	Vergleich der Reaktionsmechanismen mit dem nicht vormischenden Verbrennungsmodell.....	51
<b>7</b>	<b>Ergebnisse der CFD Simulation des Gichtgasbrenners.....</b>	<b>53</b>
7.1	Verbrennungsmodelluntersuchung.....	54
7.1.1	Verbrennungsmodelluntersuchung ohne Strahlung.....	54
7.1.2	Verbrennungsmodelluntersuchung mit Strahlung (DO-Modell).....	61
7.1.3	Verbrennungsmodelluntersuchung mit Strahlung (P1-Modell).....	65
7.2	Strahlungsmodelluntersuchung .....	65
7.3	Turbulenzmodelluntersuchung .....	68
7.4	Variation der Brennkammerwandtemperatur .....	71
7.5	Domainvergleich .....	74
7.6	Netzgitterstudie .....	78
<b>8</b>	<b>Ergebnisse der Gesamtkesselsimulation.....</b>	<b>81</b>
<b>9</b>	<b>Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick.....</b>	<b>86</b>
<b>10</b>	<b>Literaturverzeichnis .....</b>	<b>88</b>

# 1 Theoretische Grundlagen der Verbrennung

Die technische Nutzung von Brennstoffen erfolgt durch Verbrennung. Dabei wird die chemisch gebundene Energie der Brennstoffe in Wärmeenergie umgewandelt. Im folgenden Kapitel werden die entsprechenden Grundlagen zur Verbrennung beschrieben. Zu Beginn wird kurz eine Übersicht über alle Brennstoffe gegeben und dann wird näher auf gasförmige Brennstoffe, insbesondere auf Gichtgas, eingegangen.

## 1.1 Brennstoffübersicht

Im Allgemeinen werden Brennstoffe nach ihrem Aggregatzustand klassifiziert. In der nachstehenden Abbildung 1-1 sind die Brennstoffe noch zusätzlich nach ihrer Quelle eingeteilt. Die Luftsauerstoff-unabhängigen Brennstoffe werden chemisch hergestellt und kommen vor allem als Raketentreibstoff und Sprengstoff zum Einsatz (Joos, 2006). Diese Arbeit beschäftigt sich mit der Simulation der Verbrennung eines gasförmigen Brennstoffes. Deshalb liegt der Fokus im Folgenden auf der Verbrennung gasförmiger Brennstoffe.

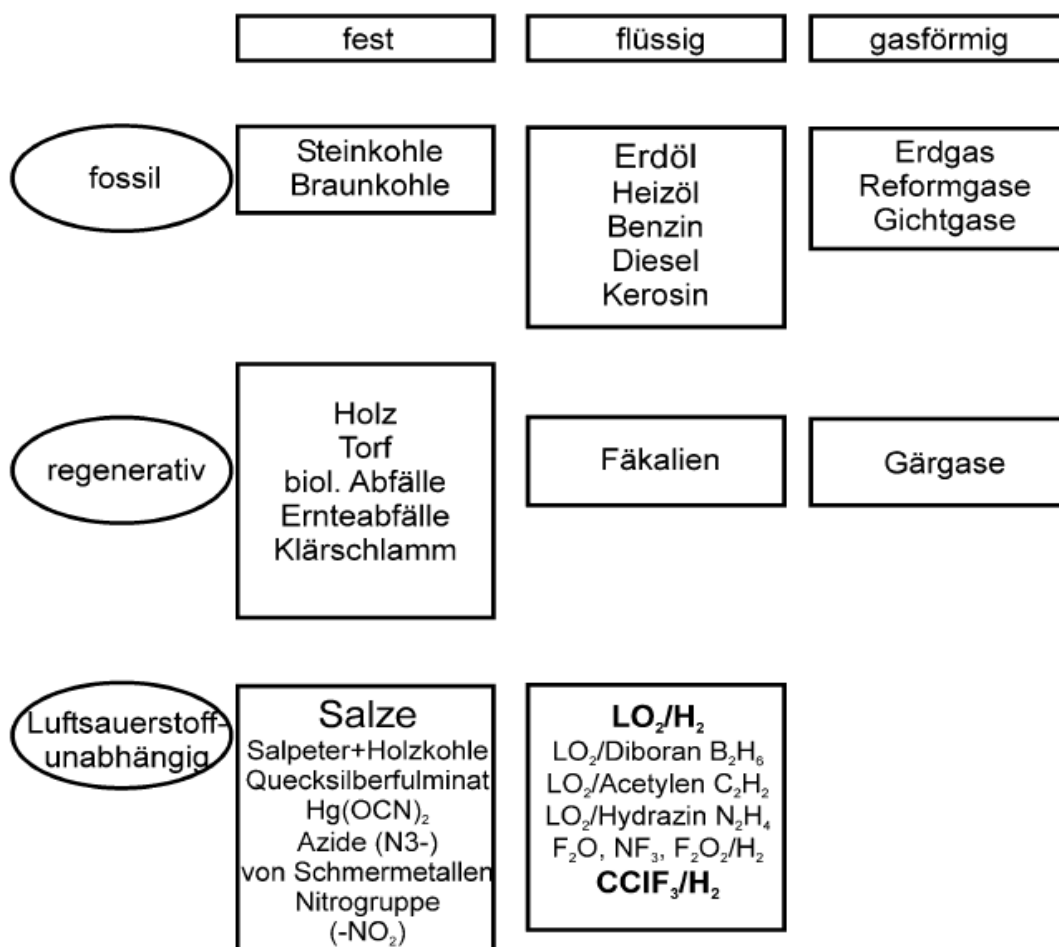


Abbildung 1-1: Einteilung der Brennstoffe (Joos, 2006)



## 1.2 Gasförmige Brennstoffe

Nutzbare Gase für technische Anwendungen sind in nachstehender Tabelle 1-1 angeführt.

Tabelle 1-1: Gasförmige Brennstoffe (Joos, 2006)

Vorkommen	Gas
Natur	Erdgas
fester Brennstoff (vorwiegend Steinkohle, Koks)	Gichtgas, Generatorgas, Wassergas, Druckvergasungsgas, Koksofengas (Stadtgas = Gemisch aus Koksofengas und Generator-/Wassergas)
flüssiger Brennstoff (Mineralöl)	Flüssiggas, Spaltgas (meist Stadtgasqualität)
gasförmiger Brennstoff	Spaltgas (meist Stadtgasqualität)

Das aus Naturvorkommen gewonnene Erdgas besteht zu einem sehr hohen Anteil aus Methan  $\text{CH}_4$ , welches ein großes Verhältnis zwischen Wasserstoff H und Kohlenstoff C besitzt. Dadurch ist der  $\text{CO}_2$ -Ausstoß im Vergleich zu festen Brennstoffen wie Kohle und Öl wesentlich geringer. Erdgas hat je nach Förderquelle eine unterschiedliche Zusammensetzung und Reinheit. Dabei hat Gas sehr guter Qualität einen Methananteil von 99%.

Gase aus festen Brennstoffen werden vorwiegend durch Vergasung gewonnen. Tabelle 1-2 gibt einen Überblick über nicht natürlich vorkommende Brenngase und deren Herstellungsverfahren.

Tabelle 1-2: Herstellungsverfahren für Gase (Joos, 2006)

Bezeichnung	Ausgangsbrennstoff	gasförmiger Reaktionspartner	Bezeichnung des Vorgangs
Gichtgas	Koks	Luft	Vergasung
Wassergas	Koks	Wasserdampf	Wassergasprozess
Generatorgas	Braun- und Steinkohle	befeuchtete Luft (Taupunkt: 40 bis 60 °C)	Vergasung (mit Wassergasprozess)
Koksofengas	Steinkohle	-	Entgasung
Druckvergasungsgas	Steinkohle	$\text{O}_2$ -reiche Luft	Vergasung
Spaltgas	Rückstandsöl, Heizöl, Benzin, Restgase, Flüssiggas, Erdgas	Wasserdampf und Luft (evtl. $\text{O}_2$ -reich)	Spaltung (thermisch o. katalytisch)

Hochofengas (blast furnace gas), auch als Gichtgas bezeichnet, entsteht bei der Stahlerzeugung im Hochofen. Im nächsten Kapitel wird darauf näher eingegangen. Bei der Verkokung fällt Koksofengas, auch Kokereigas genannt, an. Wassergas und Spaltgas sind Synthesegase wel-

che für Synthesereaktionen in der chemischen Industrie, zum Beispiel für die Methanolsynthese, benötigt werden.

### **1.3 Entstehung, Zusammensetzung und Verwertung von Gichtgas**

Wie bereits in der Übersicht der gasförmigen Brennstoffe erwähnt, ist Gichtgas ein Produkt der Stahlerzeugung. Im Hochofen (Abbildung 1-2) wird zunächst durch Verbrennen des Koks das Reduktionsgas (CO) gebildet. Der Wasserdampf im Heißgas wird bei hohen Temperaturen (1800-2000°C) in Wasserstoff H<sub>2</sub> und Kohlenmonoxid CO aufgespalten (Taube, 1998). Diese Gase steigen gegen den Strom von Erz bzw. Koks auf und Kohlenmonoxid reduziert das Eisenoxid zu Roheisen. Das aufsteigende Gas entweicht dem Hochofen und man bezeichnet es als Gichtgas. Aus den vorher beschriebenen Vorgängen erklärt sich auch dessen Zusammensetzung.

Somit besteht Gichtgas aus den inerten Gasen Stickstoff N<sub>2</sub> (ca. 55%) und Kohlendioxid CO<sub>2</sub> (ca. 20%) sowie den brennbaren Komponenten Kohlenmonoxid CO (ca. 20%) und Wasserstoff H<sub>2</sub> (ca. 5%).

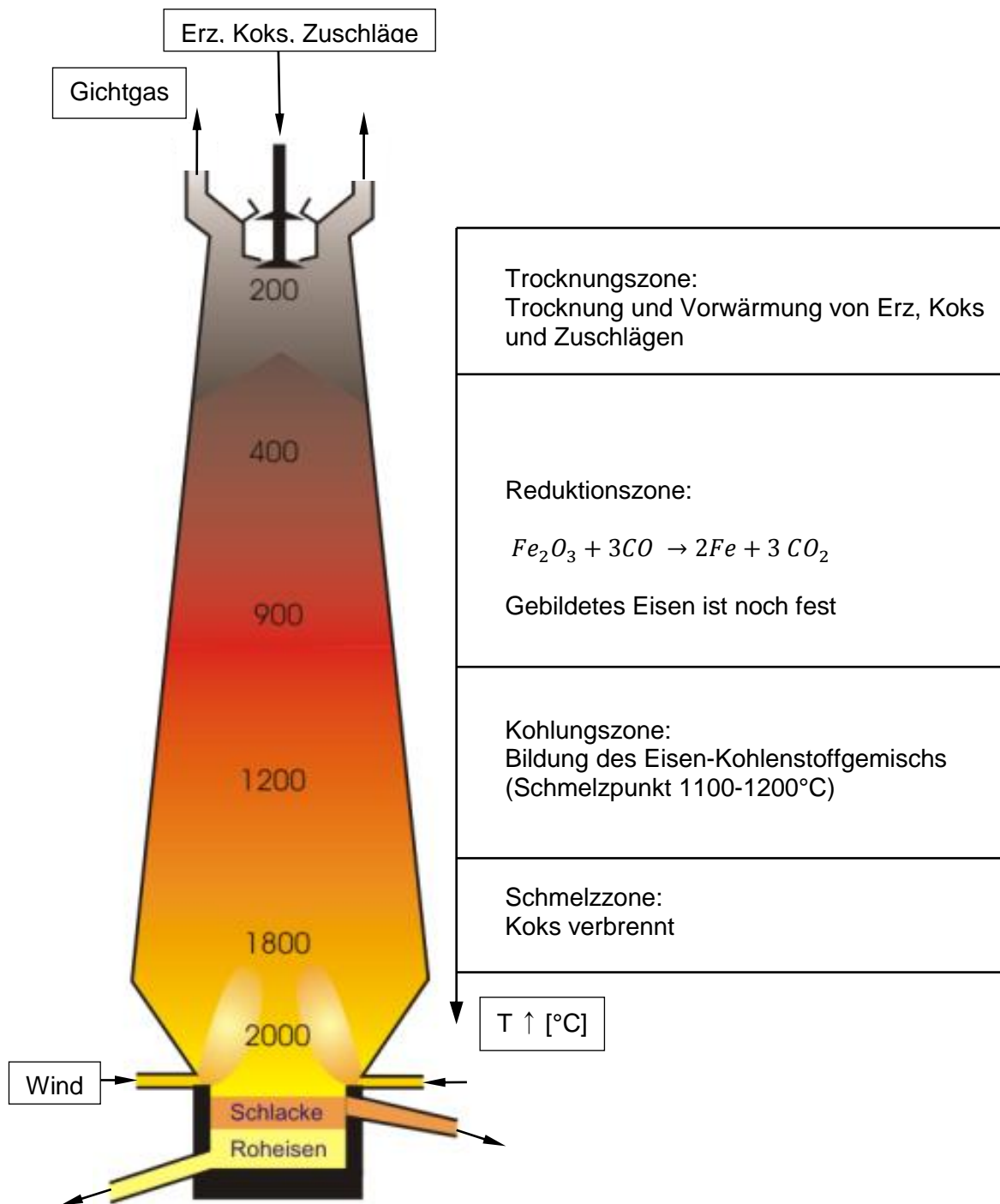


Abbildung 1-2: Hochofen (Taube, 1998)

Nach einer aufwendigen Reinigung des Gichtgases dient es als Brennstoff um Energie für den Betrieb des Stahlwerkes bereitzustellen. Eine weit verbreitete Anwendung ist der Betrieb eines Dampferzeugers. Alternativ kann das Gichtgas auch in Gasmotoren verbrannt werden (GE Jenbacher, 2013).

## 1.4 Chemisches Gleichgewicht

Die Hauptsätze der Thermodynamik und die Zustandsgleichungen sind die Grundlage für die Berechnung chemisch reaktiver Systeme. In solchen Systemen ändert sich die molekulare Zusammensetzung der Komponenten durch chemische Reaktionen. Dabei findet ein Stoffaustausch (Abbildung 1-3) zwischen den Ausgangsstoffen (Edukten) und den Endstoffen (Produkten) statt (Klell, 2012).

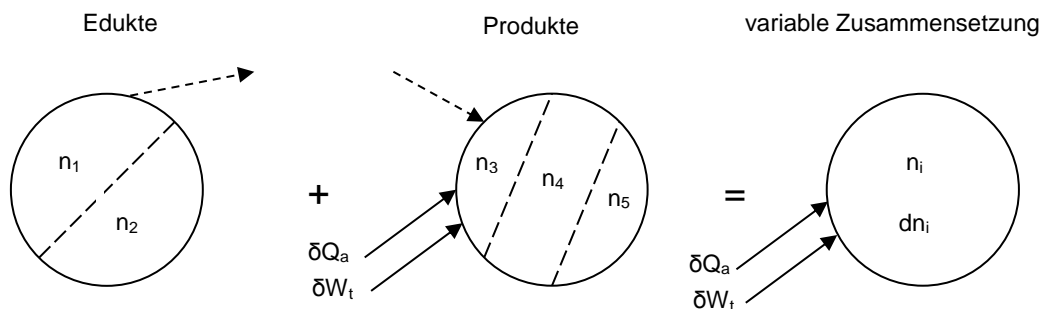


Abbildung 1-3: Stoffaustausch mit mehreren Stoffen (Klell, 2012)

Die Stoffmenge  $n_i$  wird bei gasförmigen Brennstoffen mit mol oder  $\text{Nm}^3$  angegeben. Sie wird neben den thermischen ( $U, H, S$ ) und kalorischen ( $p, v, T$ ) Zustandsgrößen zu einer weiteren Zustandsgröße. So wird die innere Energie  $U$  eines Systems zusätzlich zu einer Funktion der ausgetauschten Stoffmenge (Klell, 2012).

$$U = U(S, V, n) \quad 1-1$$

Das chemische Potenzial  $\mu$  ist definiert als die partielle Ableitung der inneren Energie  $U$  nach der Stoffmenge  $n$  und ausschlaggebend für den Stofftransport (Klell, 2012).

$$\mu_i := \left( \frac{\partial U}{\partial n_i} \right)_{S, V, n_{j \neq i}} \quad 1-2$$

Die weitere Abhängigkeit der inneren Energie von Entropie  $S$  und Volumen  $V$  führt mit den Gleichungen von Wärme ( $\delta Q = T dS$ ) und Volumenänderungsarbeit ( $\delta W_t = -p dV$ ) zur Fundamentalgleichung (Gl. 1-3, Abbildung 1-4) (Klell, 2012).

$$dU = T dS - p dV + \sum_{i=1}^k \mu_i dn_i \quad 1-3$$

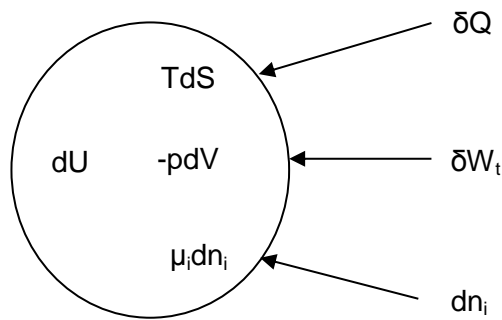


Abbildung 1-4: Änderung der inneren Energie innerhalb einer Systemgrenze (Klell, 2012)

Durch Einführung der freien Enthalpie  $G$  kann die Fundamentalgleichung in der freien Enthalpieform angeschrieben werden.

$$dG = -SdT + Vdp + \sum_{i=1}^k \mu_i dn_i \quad 1-4$$

Bei chemischen Bruttoreaktionen werden die Edukte vollständig in die Produkte umgewandelt. Dies trifft etwa bei der Knallgasreaktion zu. Jedoch sind bei den meisten Reaktionen die Produkte vielmehr ein Reaktionsgemisch aus den Bestandteilen der Edukte und Produkte. Zusätzlich können bei der Verbrennung weitere Bestandteile im Reaktionsgemisch enthalten sein. Dafür ausschlaggebend sind unter anderem die Verbrennungstemperatur und das Luftverhältnis. Ab Temperaturen von ca. 1800°C tritt Dissoziation auf, was zu einer Vielzahl von Bestandteilen im Reaktionsgemisch führen kann (Joos, 2006). Um die Zusammensetzung des Reaktionsgemisches zu bestimmen wird das chemische Gleichgewicht betrachtet. Im chemischen Gleichgewicht gilt:

$$dS = 0 \text{ und } d^2S < 0$$

1-5

$$dG = 0 \text{ und } d^2G > 0$$

Im Gleichgewichtszustand besitzt die Entropie  $S$  ein Maximum und die freie Enthalpie  $G$  ein Minimum. Bei Ablaufen einer Reaktion stellt sich dieses Gleichgewicht nach einer bestimmten Zeit ein und im Reaktionsgemisch sind alle Bestandteile der Edukte sowie Produkte enthalten. Mit der Bedingung für den Gleichgewichtszustand kann die Gleichgewichtskonstante  $K_p$  eingeführt werden (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).

$$K_p(T) = e^{-\frac{\Delta_R G_m^0(T, p^0)}{R_m T}} = \prod_{i=1}^k \left(\frac{p_i}{p^0}\right)^{\nu_{st i}} \quad 1-6$$

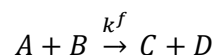
Mit der Gleichgewichtskonstante und den Atombilanzen ( $A_b^a$ ) kann die Zusammensetzung des Reaktionsgemisches bestimmt werden. Die Atombilanzen beruhen auf der Erkenntnis, dass die Anzahl der Atome ( $N_a, N_b$ ) der einzelnen Elemente erhalten bleibt. Durch Bezug einer Atomart  $a$  auf eine Bezugsatomart  $b$  können die relativen Atombilanzen gebildet werden (Klell, 2012).

$$A_b^a = \left(\frac{N_a}{N_b}\right)_{\text{Edukte}} = \left(\frac{N_a}{N_b}\right)_{\text{Reaktionsgemisch}} \quad 1-7$$

Sind mehrere Komponenten im Reaktionsgemisch zu bestimmen, kann es notwendig werden weitere Gleichungen zur Bestimmung des Reaktionsgemisches aufzustellen. Dazu werden Gleichgewichtsbedingungen gezielt gewählter Bildungsreaktionen herangezogen.

## 1.5 Reaktionskinetik

Mit dem chemischen Gleichgewicht können keine Aussagen über die Geschwindigkeit einer Reaktion gemacht werden. In der Reaktionskinetik hingegen werden die zeitlichen Abläufe der Reaktionen abgebildet. Die meisten technisch relevanten Reaktionen laufen sehr schnell ab und somit kann sich, aufgrund der begrenzten Zeit, kein chemisches Gleichgewicht einstellen. Mit der Reaktionskinetik können solche Reaktionen näherungsweise berechnet werden (Klell, 2012). Grundlage für die Beschreibung der Reaktionsgeschwindigkeit bildet das Zeitgesetz. Dieses Gesetz gibt an wie schnell ein Bestandteil einer Reaktion verbraucht oder gebildet wird. Eine chemische Reaktion mit den Edukten ( $A, B$ ) läuft mit einer bestimmten Geschwindigkeit ab, beschrieben durch den Geschwindigkeitskoeffizienten  $k$ , und bildet die Produkte ( $C, D$ ). Verschiedene Konzentrationen ( $[A], [B]$ ) können unterschiedliche Reaktionsordnungen ( $a, b$ ) aufweisen und somit die Reaktionsgeschwindigkeit beeinflussen. Die Reaktionsordnungen werden experimentell bestimmt (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).



1-8

$$\frac{d[A]}{dt} = -k^f [A]^a [B]^b$$

Dabei ist  $k$  der Geschwindigkeitskoeffizient der Reaktion. Er ist sehr stark von der Temperatur  $T$  abhängig und wird mit dem Arrhenius-Ansatz beschrieben. Der präexponentielle Faktor  $A$  und die Aktivierungsenergie  $E_a$  werden durch Experimente und Messungen bestimmt.

$$k = A * e^{\frac{-E_a}{R_m * T}} \quad 1-9$$

Die Aktivierungsenergie ist aufzubringen um die chemische Reaktion in Gang zu setzen (Abbildung 1-5). Der maximale Wert der Aktivierungsenergie ist die chemische Bindungsenergie (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001). Abbildung 1-5 zeigt die Energieänderung einer Elementarreaktion mit den unterschiedlichen Energieschwellen, welche von der Reaktionsrichtung abhängen.

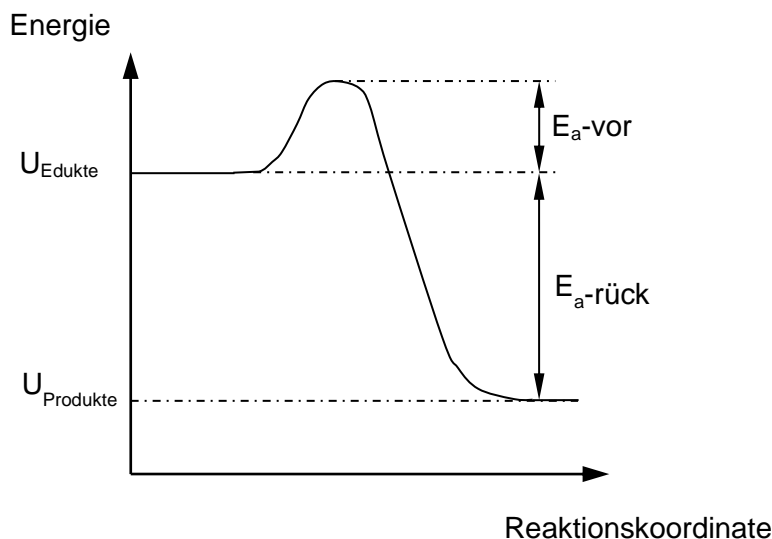


Abbildung 1-5: Energieänderung einer Elementarreaktion (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001)

Oftmals ist bereits die Umgebungstemperatur ausreichend, um bestimmte Reaktionen auszulösen. Beispielhaft kann hier die Oxidation von Eisen genannt werden. Hingegen braucht das Gemisch im Ottomotor im Normalfall (Ausnahme Klopfen) elektrische Zündenergie, um die Aktivierungsenergie für die Verbrennungsreaktion aufbringen zu können.

## 1.6 Reaktionsmechanismen

Damit die Verbrennung von Brennstoffen beschrieben werden kann, ist es notwendig die Reaktionsprozesse möglichst wirklichkeitstreu zu beschreiben. Hierzu ist eine bestimmte Anzahl von Elementarreaktionen notwendig. Die Summe der gesamten Elementarreaktionen wird als Reaktionsmechanismus bezeichnet. Bei der relativ einfachen Oxidation von Wasserstoff sind

mindestens 20 Elementarreaktionen nötig, um den Reaktionsablauf mit annehmbarer Genauigkeit zu bestimmen. Für die Verbrennung von Kohlenwasserstoffen sind Reaktionsmechanismen mit einer größeren Anzahl an Elementarreaktionen notwendig. So kann es durchaus vorkommen, beispielsweise bei der Selbstzündung von Diesel ( $C_{16}H_{34}$ ), dass mehrere tausend Elementarreaktionen den Verbrennungsablauf beeinflussen (Gerlinger, 2004).

Diese hohe Zahl an Reaktionen kann bei der Simulation technischer Prozesse (3D aufgelöste reaktive turbulente Strömungen) nicht berücksichtigt werden, da der Rechenaufwand zu groß wäre. Tatsächlich werden für bestimmte Betrachtungen (zB Wärmefreisetzung, Emissionsbestimmung) nur wenige Elementarreaktionen benötigt. Dadurch ist es möglich Simulationen komplexer dreidimensionaler reaktiver Strömungen mit annehmbarem Rechenaufwand durchzuführen (Joos, 2006). Jedoch liegt hierin gleichzeitig auch die Schwierigkeit der Simulation. Es müssen die notwendigen vereinfachten Reaktionsmechanismen für einen bestimmten Brennstoff gefunden werden, um beispielsweise Aussagen über die Wärmefreisetzung zu treffen.

Da sich diese Arbeit nicht mit der Erstellung von Reaktionsmechanismen beschäftigt, wird hier nur kurz darauf eingegangen, wie sie vereinfacht werden können. Zwei charakteristische Eigenschaften dazu werden im Folgenden kurz erläutert.

### **1.6.1 Partielles Gleichgewicht**

Bei bestimmten Bedingungen sind die Reaktionsgeschwindigkeiten der Hin- und Rückreaktion bestimmter Teilreaktionen so groß, dass die an der Teilreaktion beteiligten Komponenten nach dem chemischen Gleichgewicht berechnet werden können. Somit vereinfachen sich Teile des Gesamtmechanismus. Abbildung 1-6 zeigt die Unterschiede in der Sauerstoff (O)-Vorhersage einer stöchiometrisch vorgemischten Propanflamme bei Verwendung des partiellen Gleichgewichts, eines detaillierten Mechanismus und vollständigen Gleichgewichts. In der Reaktionszone (Düsenabstand  $< 0,5\text{mm}$ ) kann mit Hilfe des partiellen Gleichgewichts keine richtige Aussage über den Sauerstoffgehalt gemacht werden. Jedoch bei hohen Temperaturen (Düsenabstand  $> 0,5\text{mm}$ ) nähern sich die Linien zwischen partiellem Gleichgewicht und detailliertem Mechanismus an. Mit dem vollständigen Gleichgewicht ist keine befriedigende Lösung zu erzielen. Somit ist die Verwendung partieller Gleichgewichte sehr beschränkt, da sie oftmals nur einen begrenzten gültigen Bereich besitzen (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).



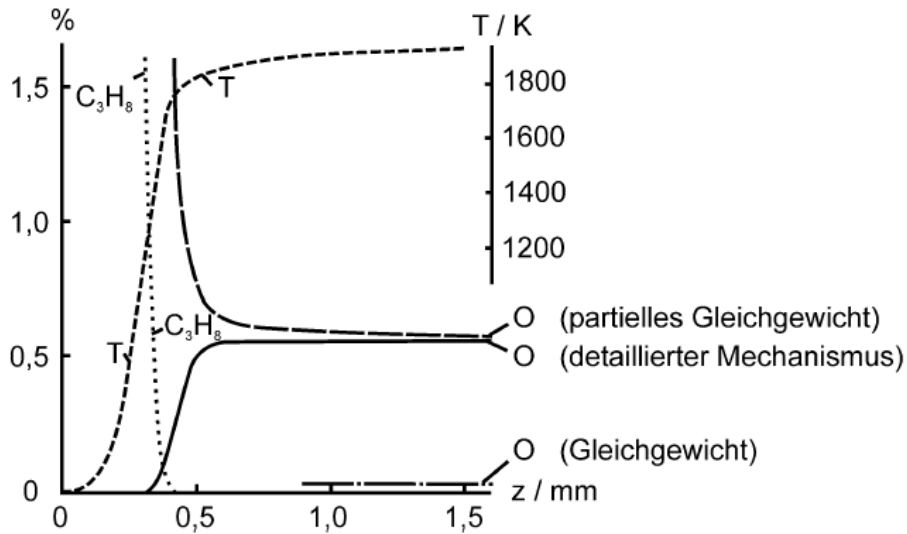
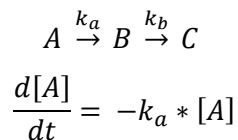


Abbildung 1-6: Molenbrüche des Sauerstoffs O in einer vorgemischten C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>-Luft-Flamme ( $\lambda=1$ )  
(Warnatz, Maas, & Dibble, 2001)

### 1.6.2 Quasistationarität

Es wird eine einfache Zweischrittreaktion beobachtet. Aus einem Edukt A, wird zunächst das Zwischenprodukt B und anschließend das Produkt C gebildet. Mit der Geschwindigkeit mit der die Konzentration A abnimmt nimmt die Konzentration B zu. Zusätzlich wird die Konzentration B durch die Bildung der Komponente C verringert (Klell, 2012).



1-10

$$\frac{d[B]}{dt} = k_a * [A] - k_b * [B]$$

$$\frac{d[C]}{dt} = k_b * [B]$$

Ist die Komponente B sehr reaktiv und daher kurzlebig, kann man annehmen, dass nur sehr geringe Konzentrationen davon auftreten und die Konzentration konstant bleibt.

$$\frac{d[B]}{dt} = 0$$

1-11

Nun vereinfacht sich das Gleichungssystem zu:

$$\frac{d[C]}{dt} = k_a * [A] = -\frac{d[A]}{dt} \quad 1-12$$

Der Vorteil der Annahme quasistationärer Bedingungen liegt darin, dass aus einem analytisch nicht lösbaeren gekoppelten Differentialgleichungssystem (Gl. 1-11) eine Differentialgleichung (Gl. 1-12) gebildet werden kann (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).

### 1.6.3 Analyse von Reaktionsmechanismen

Um aus der Vielzahl der Reaktionen, wie zum Beispiel einer Kohlenwasserstoffverbrennung, die entscheidenden Elementarreaktionen für bestimmte Verbrennungscharakteristiken (zB Flammgeschwindigkeit) herauszufinden, gibt es grundsätzlich drei unterschiedliche Verfahren:

- Empfindlichkeitsanalyse (Sensitivitätsanalyse):  
Bei dieser Analyse werden geschwindigkeitsbestimmende Reaktionsschritte festgestellt. Da bei Verbrennungen meistens nur wenige Elementarreaktionen die Reaktionsgeschwindigkeit vorgeben, liegt es nahe diese zu bestimmen und den Reaktionsmechanismus entsprechend zu vereinfachen (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).
- Reaktionsflussanalyse:  
Die Reaktions- und Bildungswege veranschaulichen die Bildung und den Verbrauch von Spezies in einer Matrix oder einem Flussdiagramm. In Abbildung 1-7 ist der Reaktionsfluss einer vorgemischten Verbrennung von Methan dargestellt. Darin sind die vielen Zwischenspezies (fett) und die Radikale (zB OH) dargestellt (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).

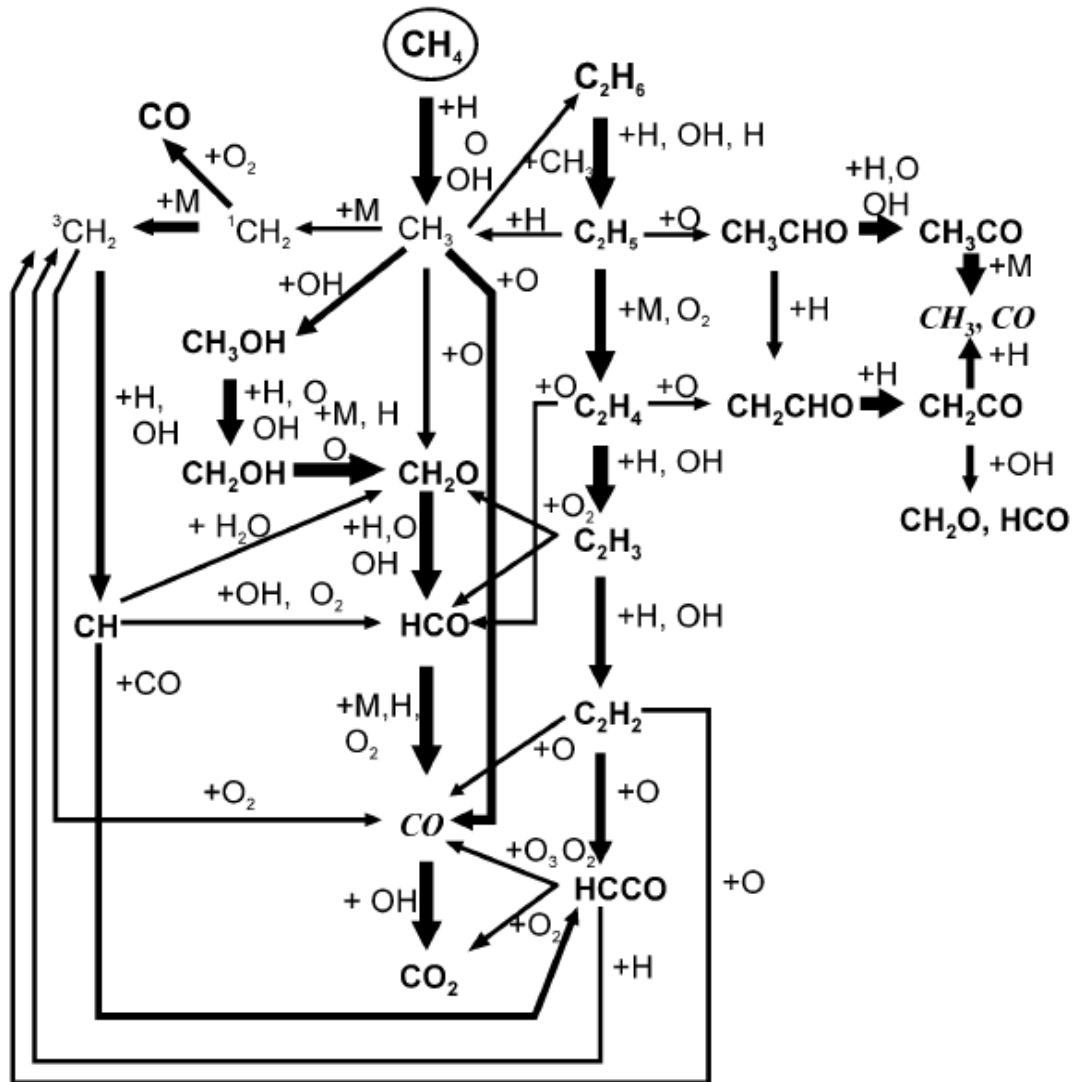


Abbildung 1-7: Reaktionsflussanalyse einer vorgemischten  $\text{CH}_4$ -Luft-Flamme ( $\lambda=1$ ) (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001)

- Eigenwertanalyse:

Durch Ermittlung der Eigenwerte und Eigenvektoren der reaktionskinetischen Gleichungen können Aussagen über die Zeitskalen der Reaktion gemacht werden. Außerdem ist es möglich festzustellen, welche Spezies im quasistationären Zustand und welche Reaktion im partiellen Gleichgewicht ist (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).

In Abbildung 1-8 sind die Zeitskalen chemisch reaktiver Strömungen angeführt. Chemische Reaktionen liegen dabei im Bereich von  $10^{-10}$  s bis zu mehr als 1 s. So ist etwa die NO-Bildung eine sehr langsame Reaktion, welche mit der Gleichgewichtsannahme nicht vorausgesagt werden könnte (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).

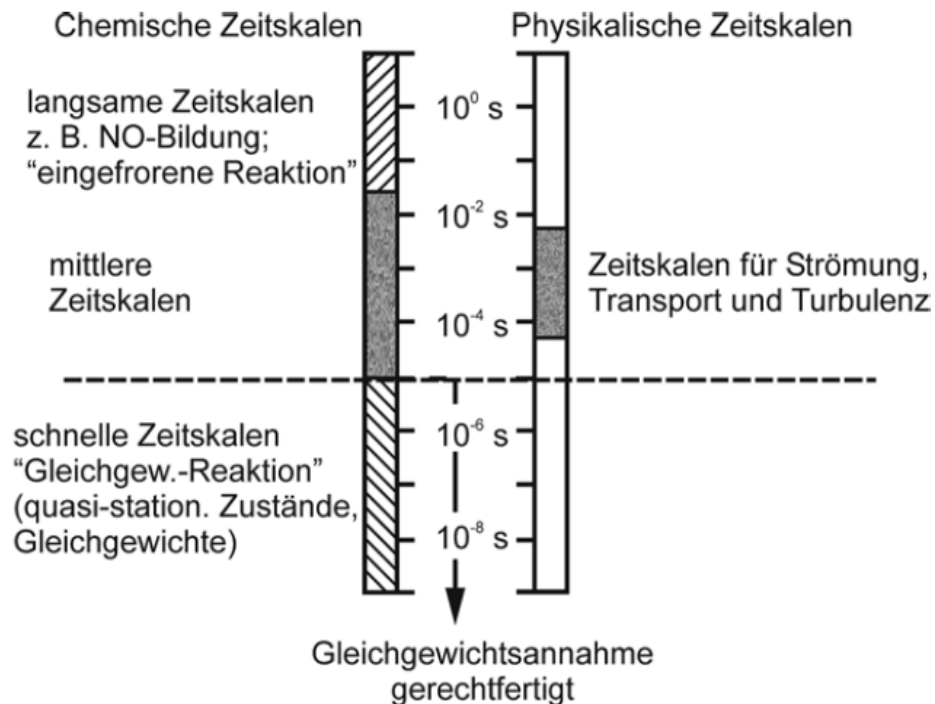


Abbildung 1-8: Zeitskalen chemisch reagierender Strömungen (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001)

## 1.7 Flammenformen

Verbrennungen bzw. Flammen können einerseits nach der Bereitstellung des Brennstoffes und des Oxidationsmittels und andererseits nach dem Strömungsverhalten eingeteilt werden. So wird zwischen vorgemischter und nicht vorgemischter sowie zwischen laminarer und turbulenter Verbrennung unterschieden.

### 1.7.1 Laminare Vormischflammen

Eine eindimensionale laminare vorgemischte Flamme stellt den grundlegendsten Fall einer Verbrennung dar. Dabei sind Brennstoff und Oxidator vor der Verbrennung schon homogen vermischt. Diese Konfiguration ermöglicht es genaue Vergleiche zwischen Experiment, Theorie und numerischen Berechnungen durchzuführen. Dadurch können verschiedene Reaktionsmodelle validiert werden. Außerdem werden laminare Flammen in turbulenten Verbrennungsmodellen herangezogen, um die turbulente Flamme aus einer bestimmten Anzahl laminarer Einzelflammen aufzubauen (Poinsot & Veynant, 2005).

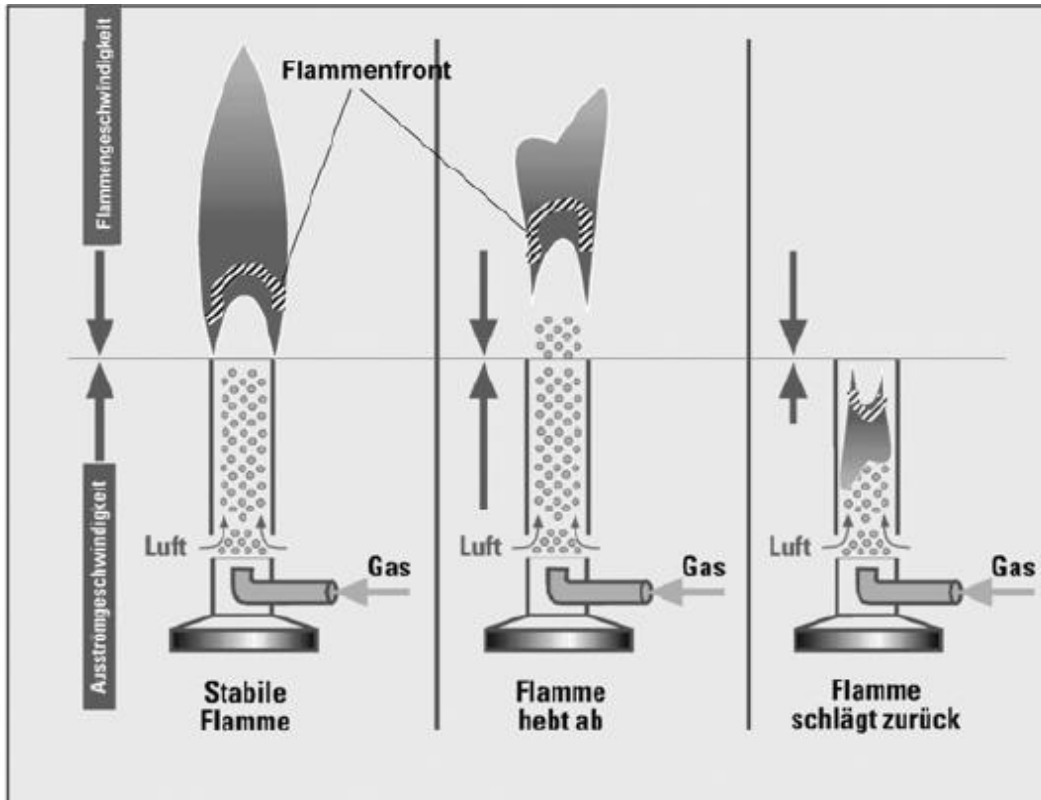


Abbildung 1-9: Laminare Vormischflamme eines Bunsenbrenners (Joos, 2006)

In Abbildung 1-9 erkennt man die stationäre Flammenfront, welche sich je nach Verhältnis zwischen Flammen- und Austrittsgeschwindigkeit des homogenen Gemisches an einer bestimmten Position befindet.

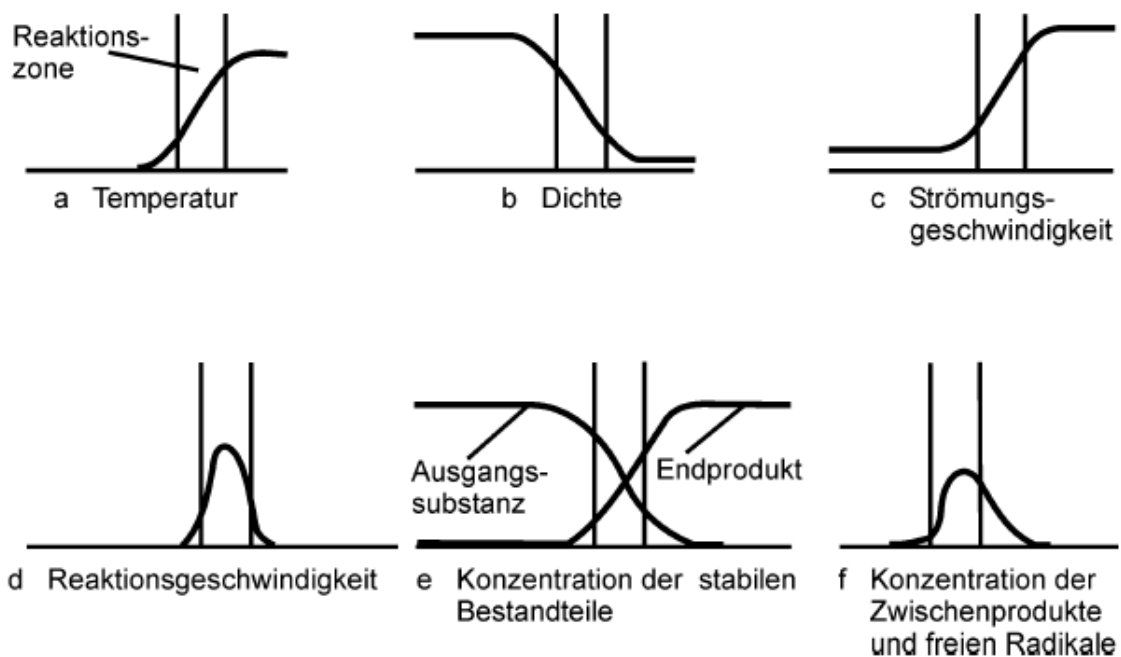


Abbildung 1-10: Eigenschaften und Charakteristiken in der Flammenfront (Joos, 2006)

Abbildung 1-10 veranschaulicht das Verhalten verschiedenster Größen in der Reaktionszone. Gut ersichtlich ist der hohe Temperaturanstieg in der Flammenfront bei gleichzeitiger Zunahme der Strömungsgeschwindigkeit. In der Reaktionszone treten Zwischenprodukte und freie Radikale auf. Diese werden bei numerischen Simulationen herangezogen, um die Flammenfront abzubilden.

### **1.7.2 Laminare nicht vorgemischte Flammen**

Bei dieser Art von Flammen wird der Brennstoff während des Verbrennungsvorgangs mit dem Oxidationsmittel durchmischt. Bei unzureichender Durchmischung kann nicht der ganze Brennstoff umgesetzt werden. Es kommt zu einer unvollständigen Verbrennung. In Abbildung 1-11 ist der Reaktionsverlauf einer Wasserstoffverbrennung dargestellt. Der Wasserstoff (Brennstoff) strömt aus der Düse mit dem Durchmesser von 30 mm und reagiert mit der umgebenden Luft. In vier Querschnitten wird die Zusammensetzung der Flamme betrachtet. Im Querschnitt am Düsenaustritt (Abstand = 0 mm) ist der Wasserstoff komplett unvermischt mit Luft. Mit zunehmendem Abstand von der Düse beginnt Luft von außen in die Reaktionszone zu diffundieren. Dies ist in den Querschnitten (Abstände = 150, 220, 300 mm) gut zu erkennen, da dort der  $H_2$ -Gehalt zur Reaktionszone hin abnimmt. In der Brennfläche ist kaum  $O_2$  vorhanden. Das inerte  $N_2$  weist dort die maximale Konzentration auf. Vom Zentrum der Strömung dringt der Wasserstoff in die Flammenfront ein und reagiert mit dem Sauerstoff. Somit erklärt sich auch, dass die  $H_2O$ -Konzentration in der Brennfläche am größten ist. Die Zone der Wärmefreisetzung ist sehr dünn und weist mit fortschreitendem Abstand vom Brennstoffaustritt ( $> 0$  mm) die gleiche Zusammensetzung auf.

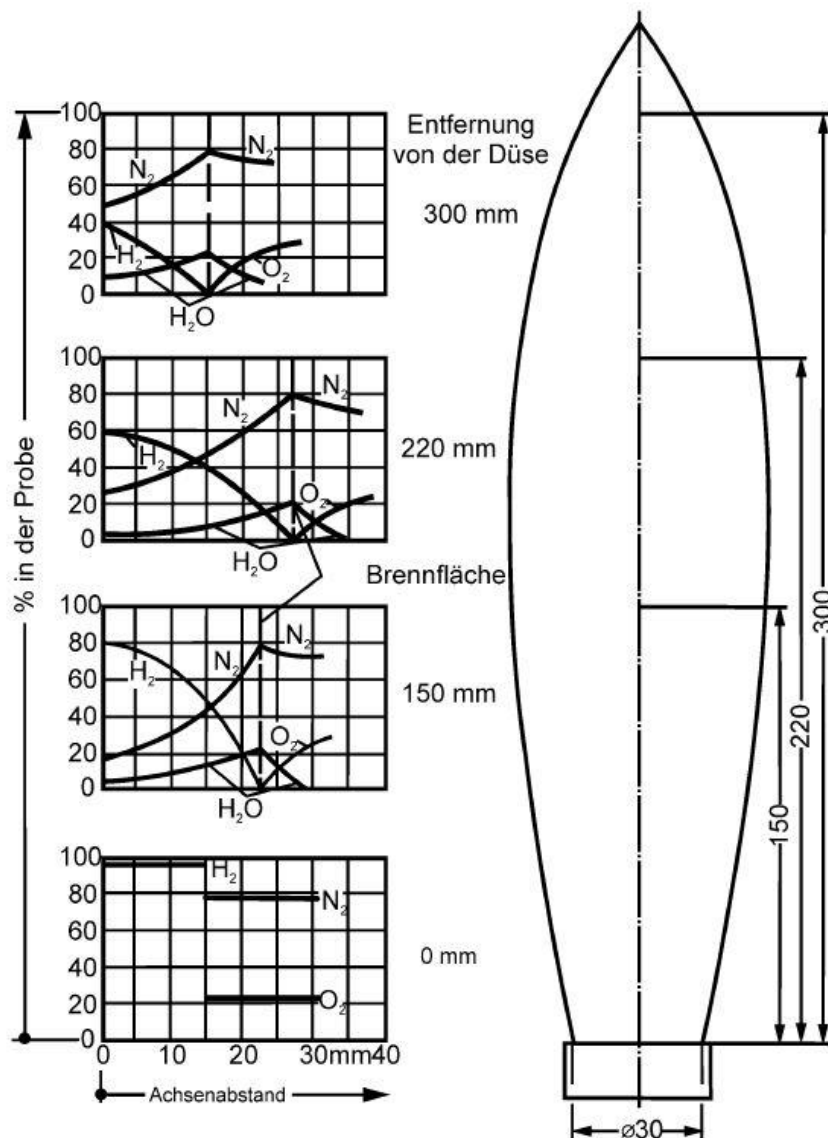


Abbildung 1-11: Reaktionsverlauf in einer laminaren Wasserstoff-Diffusionsflamme (Joos, 2006)

Hinsichtlich der technischen Nutzung sind Diffusionsflammen leichter zu realisieren, da kein Vormischen notwendig ist. Außerdem kann sich die Verbrennung nicht ungewollt ausbreiten. Der Nachteil ist, dass der Brennstoff weniger effizient umgesetzt werden kann, da die notwendige Zeit für das Mischen von Brennstoff und Oxidator die Reaktionsgeschwindigkeit herabsetzt (Poinsot & Veynant, 2005).

### 1.7.3 Turbulente Vormischflammen

Ab einer bestimmten Geschwindigkeit schlägt eine laminare Strömung in eine turbulente Strömung um. Charakteristisch dafür ist die Reynoldszahl. So macht sich zum Beispiel die turbulente Verbrennung bei einem Schweißbrenner durch ein entsprechend lautes Geräusch bemerkbar. In technischen Anwendungen (Brenner, Gasturbinen, u.a.) herrschen vorwiegend turbulente Bedingungen. Die Flammenfront verändert mit der Zeit ihre Position. Man kann sagen, dass

Geschwindigkeit, Temperatur, Dichte und Zusammensetzung um einen Mittelwert fluktuieren (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).

#### **1.7.4 Turbulente nicht vorgemischte Flammen**

Dieser Flammentyp tritt in beinahe allen technischen Anwendungen auf. Da sich Brennstoff und Oxidationsmittel erst im Brennraum mischen sind diese Flammen sicherheitstechnisch einfacher handzuhaben. Entscheidend für die Verbrennung sind die Diffusionsvorgänge, welche durch die Konzentrationsunterschiede zwischen Brenn- und Oxidationssubstanz getrieben werden. Die Charakterisierung der Verbrennung hängt im Wesentlichen davon ab, wie die Chemie der Reaktion betrachtet wird. Man kann grundsätzlich annehmen, dass der Brennstoff und der Oxidator nach Mischung unendlich schnell reagieren. Dieser Ansatz stammt von Rummel und ist als „mixed = burnt – Ansatz“ bekannt. Damit können Aussagen über das Strömungs- und Temperaturfeld sowie über die Hauptverbrennungskomponenten gemacht werden. Jedoch können keine Aussagen über die Ruß- und NO<sub>x</sub>-Bildung gemacht werden, da für die Bildung dieser Spezies nicht genügend Zeit zur Verfügung steht (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).

Alternativ können nicht vorgemischte Flammen mit endlich schneller Chemie betrachtet werden. Dies bedeutet aber einen Mehraufwand bei der numerischen Berechnung. Auf die Theorie zur Modellierung nicht vorgemischter Flammen wird im Kapitel 4.5.3 näher eingegangen.



## 2 Literaturstudie zu Gichtgasen

Im folgenden Abschnitt wird ein Überblick über die in der Literaturstudie ausgewählten Veröffentlichungen gegeben. Vordergründiges Ziel war es gezielte Reaktionsmechanismen für die Verbrennung von Gichtgas zu finden. In der Literatur sind dazu nur wenige Reaktionsmechanismen zu finden, welche gezielt versuchen die Gichtgasverbrennung abzubilden. Im Zuge der Recherche wurden interessante Veröffentlichungen gefunden, welche die verschiedenen Gichtgaszusammensetzungen angeben und sich beispielsweise mit der experimentellen Bestimmung der Flammentemperatur beschäftigen. Dieser Teil der Literatur kann verwendet werden, um Ergebnisse der numerischen Verbrennungs- und Strömungssimulation zu validieren. Nachstehend in Tabelle 2-1 ist ein Überblick über die ausgewählte Literatur aufgelistet. Die Veröffentlichungen werden in weiterer Folge mit A, B, usw. bezeichnet.

Tabelle 2-1: Übersicht über die ausgewählte Literatur

Bez.	Titel	Autor/Jahr	Reaktionsmechanismus	Gichtgas Zusammensetzung	Numerische Simulation	Experiment
A	A 5-step reduced mechanism for combustion of CO/H <sub>2</sub> /H <sub>2</sub> O/CH <sub>4</sub> /CO <sub>2</sub> mixtures with low hydrogen/methane and high H <sub>2</sub> O content	Nikolaou, Z. M./2012				
B	Numerical Simulation of a Multifuel Combustion in a 200 MW Tangentially Fired Utility Boiler	Fang, Q./2011				
C	Global Combustion Mechanisms for Use in CFD Modeling under Oxy-Fuel Conditions	Andersen, J./2008				
D	CFD Simulations of steam cracking furnaces using detailed combustion mechanisms	Stefanidis, G. D./2005				
E	Firing blast furnace gas BFG without support fuel in steel mill boilers	Hou, S. S./2009				
F	Experimental Investigations on Combustion Characteristics of the Blast Furnace Gas	Liu, Y./2009				

Die Veröffentlichung A untersucht die Eigenschaften eines reduzierten Reaktionsmechanismus und vergleicht diese mit dem GRI 3.0. Fang (B) untersucht die Auswirkungen unterschiedlicher Gichtgaszusammensetzungen und verwendet einen 4-Schritt Mechanismus zur numerischen

Simulation. Der wissenschaftliche Beitrag von Andersen (C) stellt Reaktionsmechanismen für die Verbrennung unter Oxyfuel-Bedingungen vor. Verschiedene Modelle der numerischen Strömungs- und Verbrennungssimulation werden von Stefanidis (D) behandelt. Hou (E) untersucht die Verbrennungseigenschaften von Gichtgas und Kokereigas experimentell. Die Veröffentlichung F untersucht die laminare Flammgeschwindigkeit bei verschiedenen Gichtgaszusammensetzungen.

In Tabelle 2-2 sind die Gichtgaszusammensetzungen der Veröffentlichungen B, E und F angeführt. Zum Vergleich ist in der orange markierten Spalte die Zusammensetzung der Firma Andritz angegeben. Je nach Zusammensetzung variiert der untere Heizwert  $H_u$  beträchtlich. Dies ist auf die unterschiedlichen Anteile an brennbaren Komponenten zurückzuführen. Der niedere Heizwert der Zusammensetzung E ergibt sich aus dem Nichtvorhandensein von Methan und dem sehr niedrigen Wasserstoffanteil. Die in der Arbeit verwendete Zusammensetzung der Firma Andritz hat den höchsten Heizwert und somit die größte adiabate Flammentemperatur.

Tabelle 2-2: Zusammensetzung von Gichtgas

Komponenten	unterschiedliche Zusammensetzungen [vol %]					
	Firma Andritz	B (Nikolaou, 2012)	E (Hou, 2009)	F <sub>1</sub> (Liu, 2009)	F <sub>2</sub> (Liu, 2009)	F <sub>3</sub> (Liu, 2009)
N <sub>2</sub>	49,4	49	55,19	62	57	55
CO	24,5	26,6	20,78	20	25	25
CO <sub>2</sub>	20,2	20,6	21,27	18	18	18
H <sub>2</sub>	5,2	3,5	2,76	0	0	2
CH <sub>4</sub>	0,7	0	0	0	0	0
O <sub>2</sub>	-	0,4	-	-	-	-
$H_u$ [kJ/Nm <sup>3</sup> ]	3907	3730	2925	-	-	-
$T_{adb}$ [K]	1651	-	1100	-	-	-

Im Folgenden jeweils eine kurze Zusammenfassung der in den Veröffentlichungen behandelten Thematiken. Die Bezeichnung richtet sich dabei nach Tabelle 2-1.

Ad A (Nikolaou, 2012):

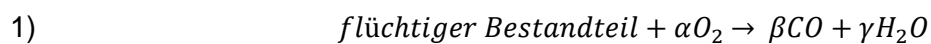
Die untersuchten Bedingungen in dieser Veröffentlichung sind relevant für den Einsatz bei stationären Gasturbinen. Der 5-Schritt-Mechanismus (5-SM) basiert auf einem reduzierten Grundmechanismus (GM) mit 49 Reaktionen, welcher wiederum aus dem GRI 3.0 (53 Spezies, 325 Reaktionen) Mechanismus mittels einer Sensitivitätsanalyse abgeleitet wurde. Der 5-SM und der GM werden hinsichtlich Flammgeschwindigkeit, Flammenstruktur und Zündverzug untersucht. Dabei werden die Parameter Druck, Temperatur und die Brennstoffzusammensetzung variiert.

Bei Vergleich der numerischen Ergebnisse des 5-SM mit den numerischen Ergebnissen des GRI 3.0 zeigt sich, dass der 5-SM gut funktioniert. In der Literatur sind keine experimentellen Daten von BFG-Verbrennungen zu finden, was eine Validierung schwer macht. Der 5-SM reduziert im Vergleich zum GRI 3.0 den Rechenaufwand erheblich und liefert Ergebnisse mit ansprechender Genauigkeit.

Ad B (Fang, 2011):

In dieser Veröffentlichung wird eine CFD Simulation eines 200 MW Kessels mit Fluent 6.3.26 durchgeführt. Im Kessel werden Kohle, BFG und COG verbrannt. Wesentlicher Bestandteil dieser Arbeit ist die Auswirkung von unterschiedlichen Volumenströmen des BFG und COG auf die Leistung des Kessels.

Laut Literatur wird in der Simulation das P1-Strahlungsmodell und das Standard k-ε Turbulenzmodell verwendet. Für turbulente Gasverbrennungen kann das Non-premixed Combustion Model und das Species Transport Model verwendet werden. Zu beachten ist, dass beim Non-premixed Combustion Model derzeit lediglich zwei Mixture-fractions gelöst werden können. Das bedeutet auch, dass maximal zwei unterschiedliche Brennstoffe eingebracht werden. Werden mehr als zwei Brennstoffe verwendet, ist das Species Transport Model anzuwenden. Dabei kommt das Eddy Dissipation Model zum Einsatz. Nachstehend ist der Reaktionsmechanismus für die Verbrennung von Kohlestaub, Kokereigas und Gichtgas angeführt.



2-1



Die Kohlestaubverbrennung wird mit den Reaktionsgleichungen 1 und 2 und die Gichtgasverbrennung mit den Reaktionsgleichungen 2 und 3 abgebildet. Mit den Reaktionsgleichungen 2, 3 und 4 wird die Verbrennung des Kokereigases berücksichtigt.

Ad C (Andersen, 2008):

In diesem wissenschaftlichen Beitrag wird geschildert, wie der 2-Schritt Mechanismus von Westbrook and Dryer und der 4-Schritt Mechanismus von Jones und Lindstedt für Oxy-Fuel Bedingungen verändert wird. Zur Überprüfung werden Referenzberechnungen mit einem detaillierten Mechanismus (Glarborg & Bentzen, 2008) durchgeführt. Das Hauptaugenmerk liegt auf

der richtigen Vorhersage der CO-Konzentration. Beide vereinfachten Mechanismen werden anhand einer Simulation mit dem detaillierten Mechanismus verglichen.

Ad D (Stefanidis, 2005):

Diese Veröffentlichung gibt einen Überblick über die verschiedenen Möglichkeiten der turbulenten Verbrennungssimulation. Es beschreibt die Entwicklung eines mathematischen 3D-Modells zur Simulation von Strömungs-, Temperatur- und Konzentrationsfeldern im Strahlungsteil von Steam cracking units. Dabei wird ein Eddy Dissipation Concept Modell mit einem detaillierten Reaktionsmechanismus verwendet. Dadurch kann die Flammenstruktur abgebildet werden. Dieses genauere EDC-Modell wird mit einem Eddy Break Up/Finite Rate Modell mit vereinfachter Reaktionskinetik verglichen.

Ad E (Hou, 2009):

Hier werden die Verbrennungseigenschaften (adiabate Flammentemperatur, Rauchgaszusammensetzung, unterer Heizwert) von Gichtgas und Kokereigas theoretisch und experimentell untersucht. Des Weiteren wird die Kombination der beiden Brennstoffe näher betrachtet. Außerdem sind die exakten Zusammensetzungen der beiden Gase angegeben. Im Vergleich zur BFG-Zusammensetzung des Firmenpartners, besitzt die beschriebene BFG-Zusammensetzung keinen Methan-Anteil und einen ca. 4% niedrigeren CO-Anteil. Dies senkt den unteren Heizwert erheblich.

In der experimentellen Untersuchung kommt es zur Durchführung unterschiedlicher Versuche (100% BFG; BFG-COG kombiniert; jeweils bei verschiedenen Lasten). Der Schwerpunkt liegt hierbei auf der Untersuchung der Auswirkungen auf die Abgaskomponenten CO, CO<sub>2</sub> und NO<sub>x</sub>.

Ad F (Liu, 2009):

Die Veröffentlichung konzentriert sich auf experimentelle Untersuchungen zur laminaren Flammengeschwindigkeit. Diese Untersuchungen basieren auf einer vorgemischten BFG-Verbrennung. Es ergibt sich, dass die laminare Flammengeschwindigkeit stark vom Luftverhältnis abhängig ist. Außerdem wird geschildert, dass die laminare Flammengeschwindigkeit bei Erhöhung der Eintrittstemperatur und bei Beimischung von Kohlenwasserstoffen ins BFG ansteigt.

### 3 Aufbau des Brenners

#### 3.1 Industriebrenner

Um die chemisch gebundene Energie im Brennstoff in Wärme umzusetzen, werden Brenner eingesetzt. Diese sind je nach geforderter Verbrennungscharakteristik (Flammenform, Flammengeschwindigkeit, Flammentemperatur) und zugeführtem Brennstoff unterschiedlich konstruiert. Somit kann eine Einteilung nach mehreren Gesichtspunkten erfolgen (Tabelle 3-1).

Tabelle 3-1: Klassifizierung von Industriebrennern (Wünning, 2011)

Klassifizierung				
Brennstoff	Ölbrenner	Gasbrenner	Staubbrenner	Mehrstoffbrenner
Luftzufuhr	atmosphärische Brenner	Gebälsebrenner	Zwangsluftbrenner	
Flammenform	Freistrahlbrenner	Flachflammenbrenner	Flächenbrenner	
Stabilisierungsart	Stauscheibe	Brennerstein	Drallbrenner	Stützflamme
Strömungsgeschwindigkeit	niedrig	mittel	hoch	
Mischung	vorgemischt	nicht vorgemischt	teilweise vorgemischt	

Grundsätzlich sind Brenner für einen bestimmten Brennstoff ausgelegt. Es ist jedoch möglich zwei oder mehrere unterschiedliche Brennstoffe in einem Brenner zu verwerten. Dabei spielt die Zufuhr der Luft eine entscheidende Rolle für den Verbrennungsvorgang. Meistens wird Luft mit Hilfe von Gebläsen auf 10 bis 100 mbar verdichtet, um sie dann dem Brenner zuzuführen. Atmosphärische Brenner versorgen sich selbst mit Luft aus der Umgebung (Gasflamme beim Herd) und spielen in der industriellen Brennertechnik eine untergeordnete Rolle. Bei einem Freistrahlbrenner tritt der Brennstoff durch eine Düse aus. In diesem Fall ist die Verbrennungszone sehr gestreckt. Bei einem Flachflammenbrenner wird mittels einer drallbehafteten, und somit sich tangential ausbreitenden Strömung, die Flamme an die Brennraumwand angelegt. Dadurch erhitzt sich die Brennraumwand, welche dann Wärme abstrahlt. Flächenbrenner besitzen zusätzlich eine Katalysatorschicht an der Oberfläche, um die Verbrennungsreaktion zu verbessern (Wünning, 2011).

Eine wichtige Aufgabe des Brenners besteht darin eine Flamme zu stabilisieren. Um diese Stabilität zu erreichen, wird ein Flammenhalter in die Strömung platziert. Hierbei handelt es sich um nichts anderes als eine Stauscheibe (Abbildung 3-1).

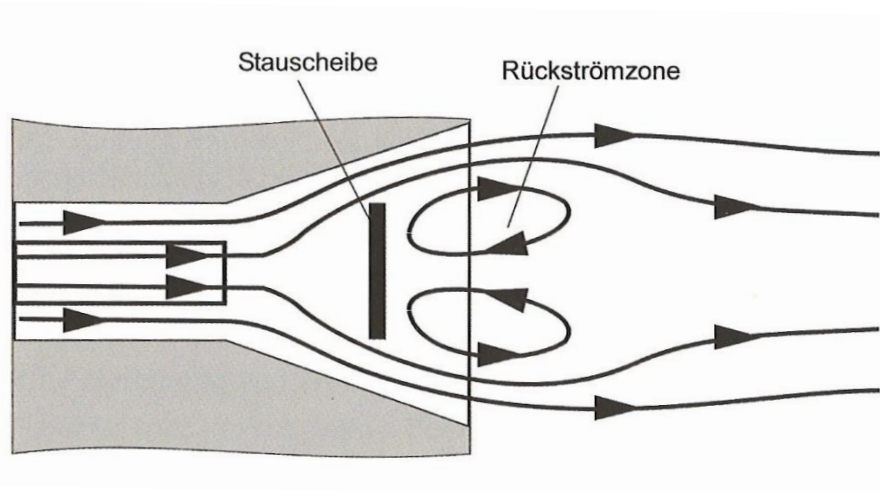


Abbildung 3-1: Stauscheibenstabilisierung (Wünning, 2011)

Hinter der Stauscheibe reduziert sich die Strömungsgeschwindigkeit. Dadurch bilden sich Rückströmungen. Erreichen Flammengeschwindigkeit und Strömungsgeschwindigkeit dieselbe Größe stabilisiert sich die Flamme (Wünning, 2011).

Eine weitere Möglichkeit die Geschwindigkeitsverhältnisse in der Strömung zu ändern, ist sie mit Drall zu beaufschlagen. Ein Brennerstein wirkt wie ein Diffusor und verzögert die Strömung durch Ausweiten des Querschnitts. Abbildung 3-2 stellt drei Hochgeschwindigkeitsbrenner dar. Brenner dieses Typs haben Austrittsgeschwindigkeiten von über 100 m/s. Diese hohen Geschwindigkeiten erzeugen eine hochturbulente, relativ kurze Flamme, was bezüglich der Stickoxidemissionen ein Vorteil ist. Längere Flammen treten hingegen bei Nieder- und Mittelgeschwindigkeitsbrennern auf (Wünning, 2011).

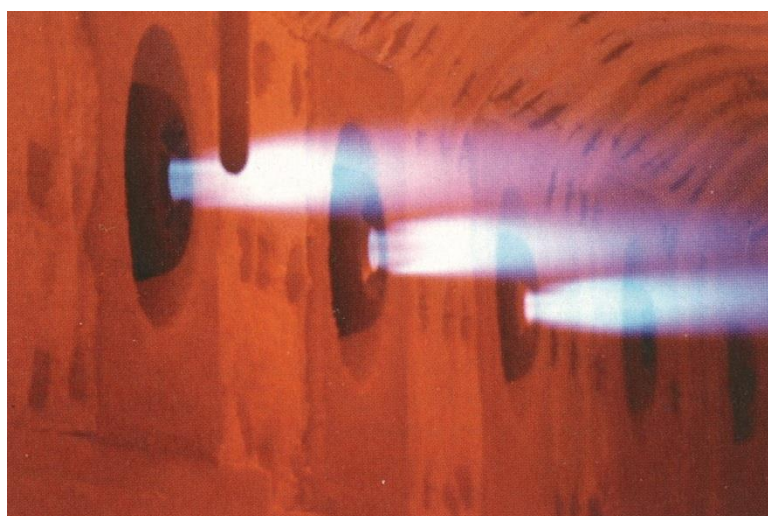


Abbildung 3-2: Hochgeschwindigkeitsbrenner (Wünning, 2011)

### 3.2 Gichtgasbrenner

In dieser Arbeit wird ein Mehrstoffbrenner, welcher mit Gichtgas, Erdgas, Koksofengas und Heizöl-EL betrieben werden kann, simuliert. Die Primär- und Sekundärluft wird über Gebläse zugeführt. Die Freistrahflamme wird mittels Drall stabilisiert. Sechs Brenner, aufgeteilt auf drei Ebenen, verwerten das Gichtgas des Hochofens in einem Dampfkessel (Abbildung 3-3). Pro Ebene sind ein Brenner mit Rechtsdrall und ein Brenner mit Linksdrall ausgeführt.

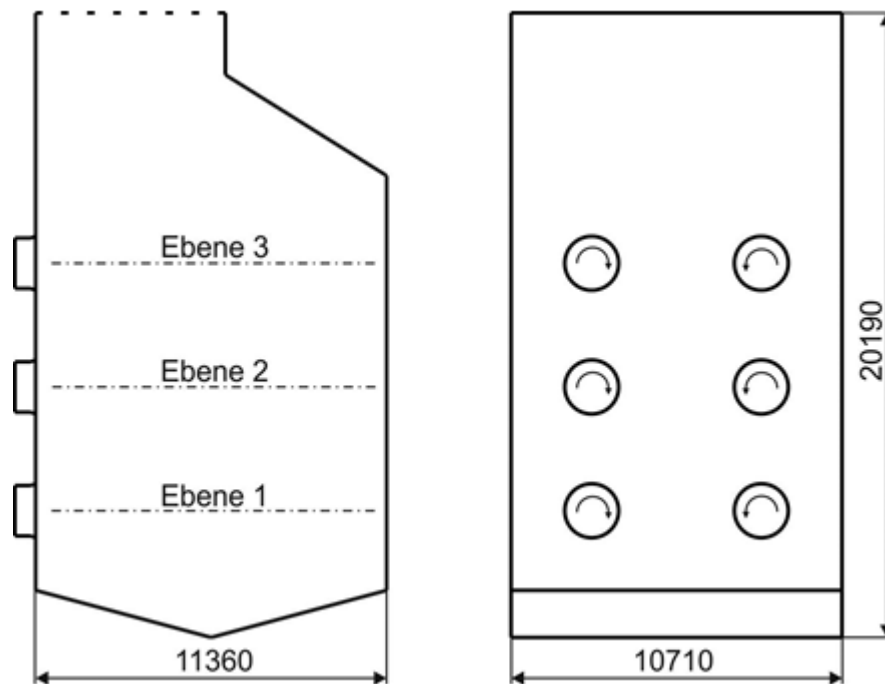


Abbildung 3-3: Dampfkessel (Leiter, 2011)

Der Brenner hat eine Gesamtlänge von 5300 mm und der größte Durchmesser ist 2700 mm. Das Gewicht beträgt 5300 kg. In Tabelle 3-2 sind die Betriebsdaten des Brenners für die unterschiedlichen Brennstoffe angeführt.

Tabelle 3-2: Betriebsdaten des Brenners (Leiter, 2011)

Brennstoff	Gichtgas	Koksofengas	Erdgas	Heizöl EL
Brennstoffmenge max. [Nm <sup>3</sup> /h]	53000	5535	5000	5100 kg/h
Brennstoffmenge min. [Nm <sup>3</sup> /h]	10600	1107	500	510 kg/h
Brennstoffdruck max. [bar]	20 bis 30 * 10 <sup>-3</sup>	20 bis 30 * 10 <sup>-3</sup>	1,8	10
Leistung [MW]	64,2	26,9	49,5	58

Der Brenner kann in einen Ein- und Austrittsbereich eingeteilt werden. Im Eintrittsbereich werden die unterschiedlichen Brennstoffe sowie die Primär- und Sekundärluft eingebracht und dann zum Austrittsbereich geleitet. Dort findet bereits eine teilweise Vormischung statt. Außerdem wird dort der Drall zur Flammenstabilisierung erzeugt (Abbildung 3-4). Im unteren Teil der Abbildung 3-4 ist der Austrittsbereich detailliert dargestellt. Gut zu erkennen sind die Drallkörper am Gichtgas- und Primärluftaustritt.

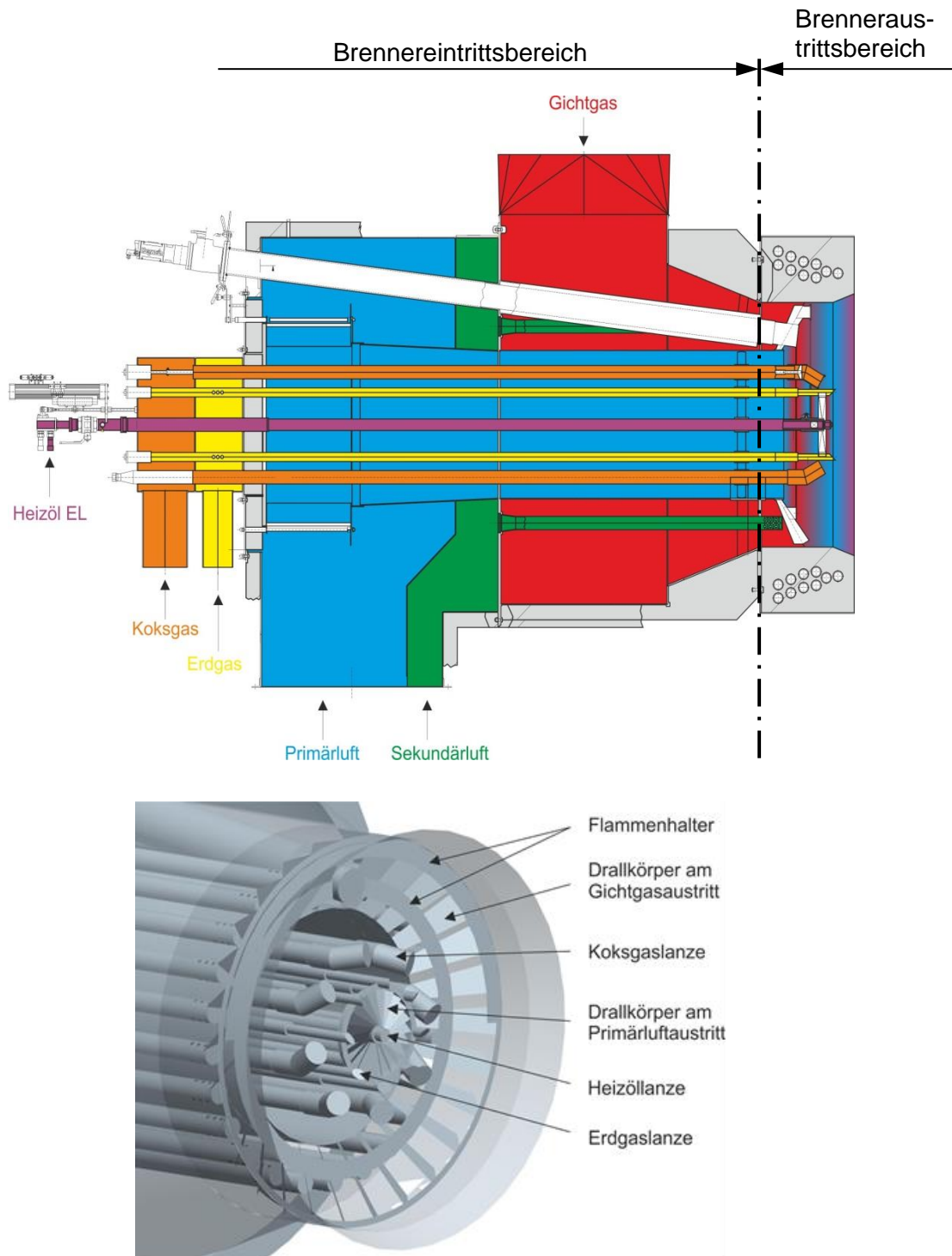


Abbildung 3-4: Brennerquerschnitt und Detail des Austrittsbereichs (Leiter, 2011)



## 4 Grundlagen zur Numerischen Simulation

### 4.1 Allgemeines

Grundsätzlich werden Problemstellungen in der Technik durch mathematische Modelle beschrieben. Dies führt jedoch oft zu Systemen von Differentialgleichungen, welche analytisch nicht gelöst werden können. Aufgrund der Entwicklung numerischer Simulationsprogramme und einer verbesserten Rechnerleistung von Computern ist die Simulation von numerischen Problemen in der Technik unentbehrlich geworden.

Aufwändige oder bisher oft nicht durchführbare Experimente sind dadurch umsetzbar. Des Weiteren können durch die Modifizierung von Parametern unterschiedliche Szenarien untersucht werden (Offner, 2012). Abbildung 4-1 gibt einen Überblick der einzelnen Schritte, welche notwendig sind, um zur Problemlösung einer technischen Fragestellung zu kommen.

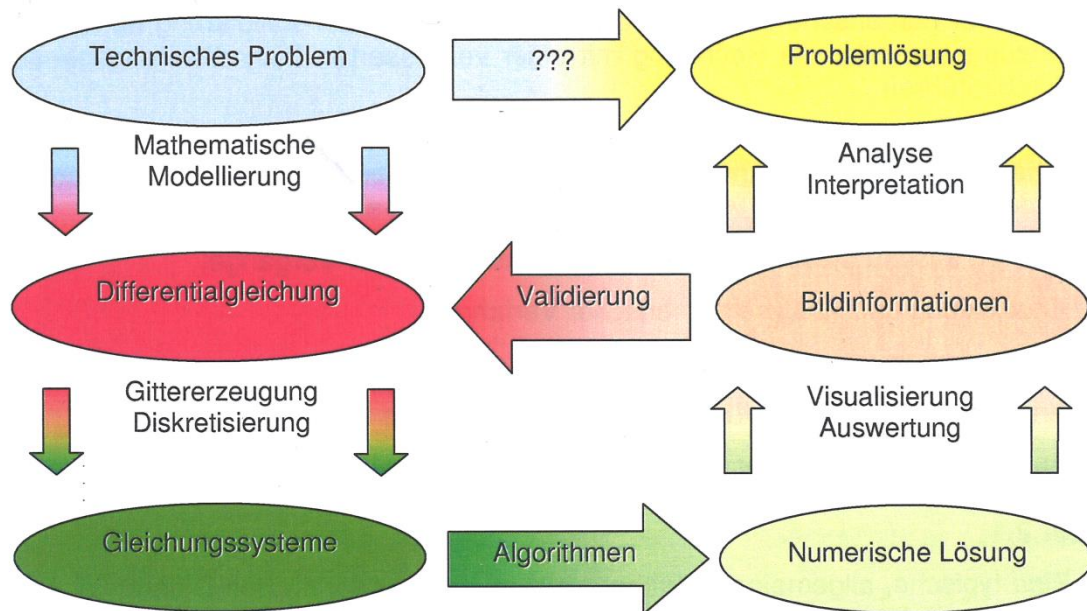


Abbildung 4-1: Problemlösungszyklus (Offner, 2012)

Je nach Komplexität der Problemstellung macht es Sinn einen experimentellen, analytischen oder numerischen Ansatz zu verwenden. Häufig wird auch eine Kombination dieser Ansätze zur Lösungsfindung gewählt. Tabelle 4-1 stellt die Vor- und Nachteile der jeweiligen Ansätze gegenüber. Experimentelle Ansätze sind oft die einzige Möglichkeit zur Lösungsfindung für ein technisches Problem, sind jedoch mit beträchtlichen Kosten verbunden. Mathematische, insbesondere numerische Lösungsansätze versuchen die Experimente zu ersetzen. Ihr Einsatz ist jedoch oft durch die Rechnerleistung begrenzt (Sanz, 2011).

Tabelle 4-1: Gegenüberstellung von technischen Problemlösungsansätzen (Sanz, 2011)

Ansatz	Vorteile	Nachteile
experimentell	realitätsnah	Aufbau erforderlich
		Größenordnung der Problemstellung anders
		Messprobleme
		Kosten der Durchführung
analytisch	genaue Beschreibung mit Hilfe von Formeln	auf einfache Geometrie und Physik beschränkt
		auf lineare Probleme beschränkt
numerisch	keine Beschränkung auf lineare Probleme	Abbruchfehler
	komplizierte Physik und Chemie kann behandelt werden	Grenzwertprobleme
	zeitliche Änderung der Strömung kann betrachtet werden	hohe Rechnerleistung

## 4.2 Grundgleichungen der Strömungsmechanik

Durch Aufstellung der Bilanzgleichungen für Masse, Impuls und Energie erhält man die Kontinuitätsgleichung, die Impulsgleichung und die Energiegleichung. In der numerischen Strömungsmechanik wird das Problemgebiet durch eine Vielzahl von finiten Volumenelementen charakterisiert. Für jedes dieser Volumenelemente müssen die Bilanzgleichungen gelten. Daher sind alle Größen in den folgenden Gleichungen auf das Volumen bezogen (Sanz, 2011).

Die Kontinuitätsgleichung (Gl. 4-1) beschreibt im ersten Term die zeitliche Änderung der Dichte. Im zweiten Term beschreibt sie die Dichteänderung infolge des ein- und ausströmenden Massenstromes.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla(\rho \vec{v}) = 0 \quad 4-1$$

Die linke Seite der Impulsgleichung (Gl. 4-2) setzt sich aus der zeitlichen Impulsänderung und der Änderung des Impulses bedingt durch die ein- und ausfließenden Impulsströme zusammen. Der rechte Teil umfasst die Summe der Kräfte, welche auf ein betrachtetes Volumenelement wirken. Die sogenannten Volumenkräfte werden durch Druck, Normal- und Schubspannungen, Gravitation und äußere Einflüsse hervorgerufen.

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} (\rho \vec{v}) + \nabla(\rho \vec{v} \vec{v}) = -\nabla p + \nabla * \tau + \rho \vec{f} \quad 4-2$$

Nach dem Prinzip der Energieerhaltung lässt sich Gl. 4-3 aufstellen. Die linke Seite der Gleichung setzt sich aus der zeitlichen Energieänderung sowie aus den Energieströmen und den

Oberflächenkräften, welche auf das Kontrollelement wirken, zusammen. Auf der rechten Seite beschreibt der erste Term die inneren Wärmequellen und der zweite das Einwirken von Volumenkräften. Die Wärmeleitung wird im dritten Term, basierend auf dem Fourier'schen Gesetz (Gl. 4-4), berücksichtigt. Der Energieaufwand zur Verformung eines Fluid durch die Reibung wird im äußersten rechten Term durch die Dissipationsfunktion beschrieben (Sanz, 2011).

$$\frac{\partial e}{\partial t} + \nabla[\vec{v}(e + p)] = \frac{\partial Q}{\partial t} + \rho \vec{f} * \vec{v} - \nabla * \vec{q} + \nabla * (\tau * \vec{v}) \quad 4-3$$

$$e = \rho \left( u + \frac{\vec{v}^2}{2} \right)$$

$$\vec{q} = -k \nabla T \quad 4-4$$

In den drei partiellen Differentialgleichungen (Kontinuität, Impuls, Energie) kommen noch die Unbekannten Dichte  $\rho$ , Geschwindigkeit  $v$ , Druck  $p$ , Energie  $e$  und Temperatur  $T$  vor. Zum Schließen des Gleichungssystems sind weitere Zusammenhänge notwendig. Ein Zusammenhang kann mit den thermodynamischen Zustandsgleichungen (Gl. 4-5) gewonnen werden (Sanz, 2011). Zu prüfen ist, ob die Betrachtung idealen Gases für die Problemstellung zulässig ist. Andernfalls müssen erweiterte Zustandsgleichungen verwendet werden (Schwarze, 2013).

$$p * \frac{1}{\rho} = R * T$$

4-5

$$du = c_v dT$$

Das Newton'sche Fließgesetz bildet den letzten notwendigen Zusammenhang, um das System der partiellen Differentialgleichungen zu schließen. Bei einem Newton'schen Fluid stehen die Schubspannungen in linearem Zusammenhang mit den Scherspannungen, also den Verformungen (Gl. 4-6) (Sanz, 2011).

$$\tau_{ij} = \mu \left( \frac{\partial v_i}{\partial x_j} + \frac{\partial v_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \delta_{ij} \right) \quad 4-6$$

Treten komplexere Zusammenhänge zwischen Schubspannungen und Geschwindigkeitsgradienten auf, so können andere Fließgesetze, wie beispielsweise das Modell von Ostwald und Waele, angewendet werden (Schwarze, 2013).

## 4.3 Turbulenzmodellierung

### 4.3.1 Allgemeines zu turbulenten Strömungen

Eine Charakterisierung der Strömung erfolgt, wie bereits im ersten Teil "Grundlagen der Verbrennung" kurz erwähnt, durch die Reynoldszahl. Diese beschreibt das Verhältnis zwischen Trägheits- und Reibungskräften. Bei einer Strömung tritt ab einer bestimmten, der sogenannten kritischen Reynoldszahl, eine turbulente Strömung auf. Die Strömung schlägt dann langsam von laminar auf turbulent um. Unter turbulent versteht man hierbei, dass sich ein chaotischer, nichtperiodischer Strömungszustand einstellt (Sanz, 2011). Dieser Strömungszustand kann nur durch statistische Kennzahlen beschrieben werden. Abbildung 4-2 zeigt einen Vergleich zwischen einer laminaren und turbulenten Strömung. Es sind deutlich die Verwirbelungen zu erkennen.

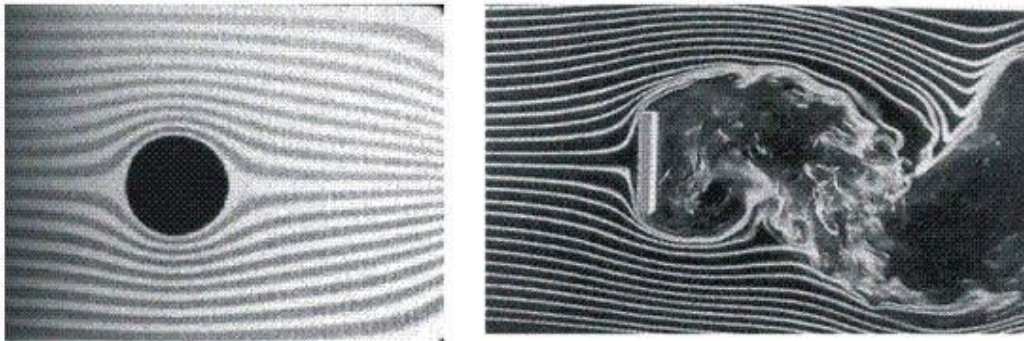


Abbildung 4-2: Vergleich laminare und turbulente Strömung (Sigloch, 2007)

Auch in der Natur sind turbulente Strömungsvorgänge oftmals zu beobachten. Abbildung 4-3 zeigt Turbulenzstrukturen in der Atmosphäre. Ein Hindernis, in diesem Fall eine Inselerhebung, erzeugt eine kármánsche Wirbelstraße.

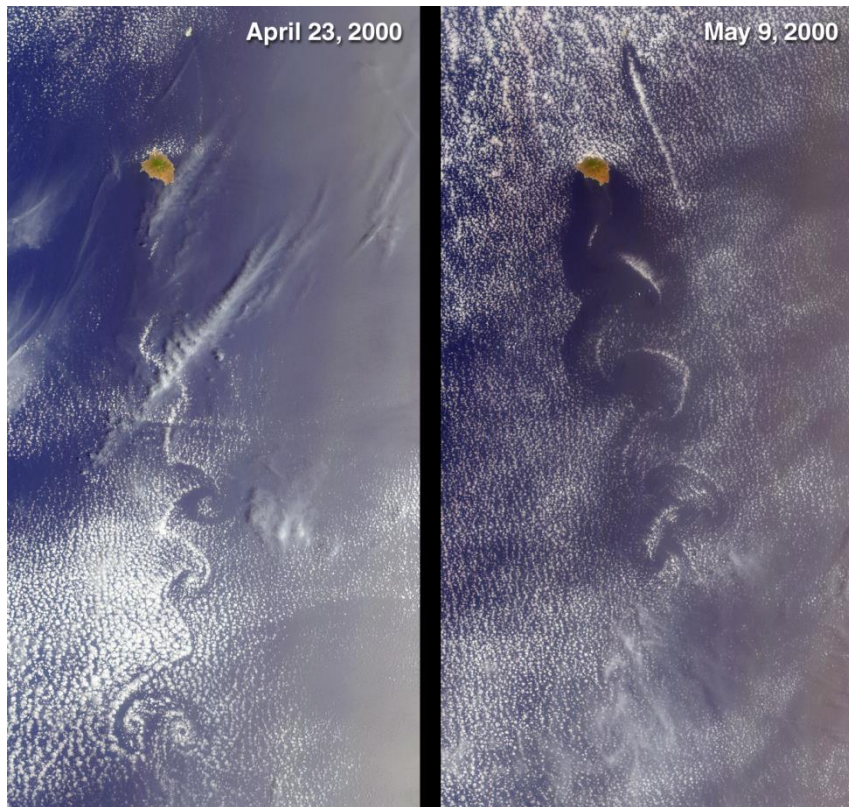


Abbildung 4-3: Wolkenwirbelstraße (Nasa, 2001)

Alle Strömungsgrößen schwanken mit der Zeit. Theoretisch könnten sie an jedem Ort und zu jedem Zeitpunkt berechnet werden. Jedoch ist diese Direkte Numerische Simulation (DNS) für technisch relevante hohe Re-Zahlen nicht durchführbar. Daher werden nur die Mittelwerte der gesuchten Strömungsgrößen berechnet. Mit Hilfe eines Ansatzes von Reynolds kann man die momentanen Strömungsgrößen zerlegen. Dabei erfolgt die Aufteilung des momentanen Wertes in einen zeitlich mittleren Wert (bei stationärer Strömung) und in einen Schwankungswert (Gl. 4-7, Abbildung 4-4) (Steiner, 2010).

$$u = \bar{u} + u'$$

4-7

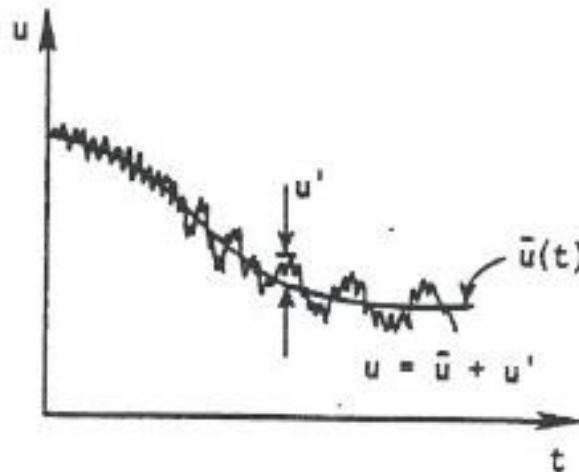


Abbildung 4-4: fluktuierende Strömungsgröße (Sanz, 2011)

Mit der Mittelung der Strömungsgrößen können die gemittelten Navier-Stokes Gleichungen, auch als Reynolds Averaged Navier Stokes (RANS) bezeichnet, aufgestellt werden. Gl. 4-8 zeigt die gemittelte Impulsgleichung bei stationärer Strömung in kartesischer Form ( $i = 1, 2, 3$ ).

$$\bar{u}_j \frac{\partial}{\partial x_j} (\rho \bar{u}_i) = -\frac{\partial \bar{p}}{\partial x_i} + \mu \frac{\partial^2 \bar{u}_i}{\partial x_j \partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} (-\rho \overline{u'_i u'_j}) \quad 4-8$$

Durch die Mittelung tritt ein zusätzlicher Term in der Impulsgleichung auf. Dieser repräsentiert die Turbulenz und wird als Reynolds'scher Spannungsterm bezeichnet. Um wiederum das Gleichungssystem zu schließen, müssen diese turbulenten Spannungen mit einem geeigneten Ansatz modelliert werden (Ansys, 2010). Abbildung 4-5 gibt einen Überblick der möglichen Ansätze zur Turbulenzmodellierung. Da, wie schon erwähnt, die DNS für technisch relevante Strömungen nicht eingesetzt werden kann, müssen geeignete Turbulenzmodelle für die Simulation gewählt werden. Large Eddy Simulationen unterscheiden den Größenbereich der vorliegenden Turbulenz. Es werden bestimmte Bereiche, welche durch zu grobe Gitterauflösung nicht direkt gelöst werden können, mit einem Turbulenzmodell gelöst (Schwarze, 2013). Die zwei großen Gruppen der statistischen Modelle sind die Wirbelviskositätsmodelle und die Reynolds-Spannungs-Modelle, welche im Folgenden genauer behandelt werden.



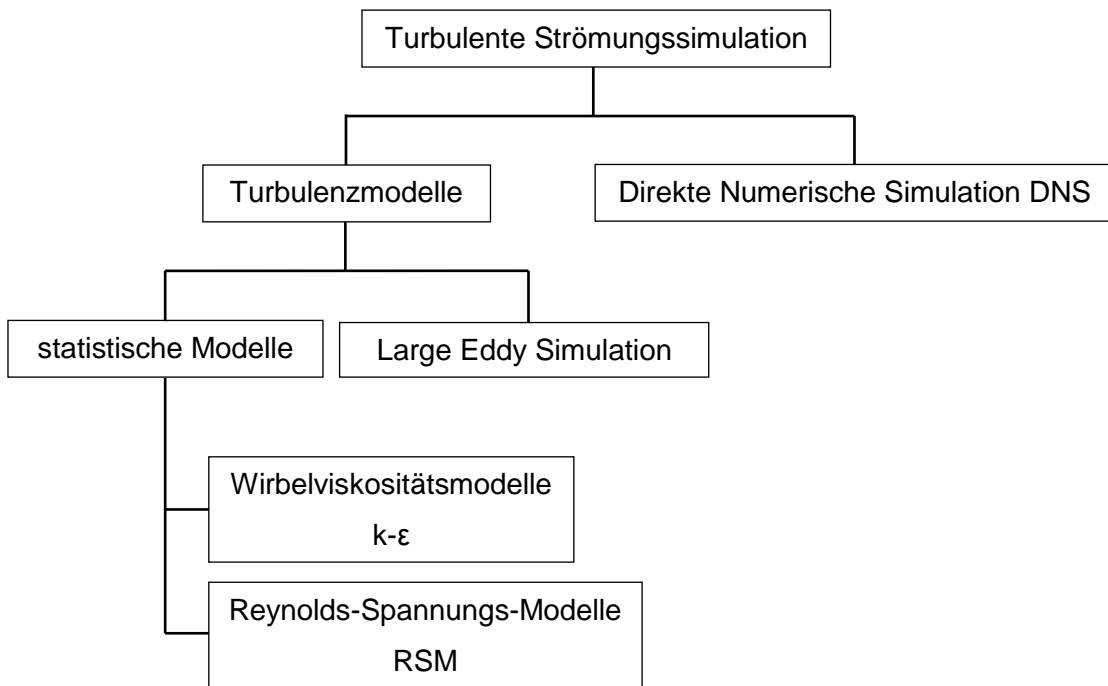


Abbildung 4-5: Möglichkeiten der Turbulenzmodellierung (Sanz, 2011)

### 4.3.2 k-ε Modelle

Der Ansatz von Boussinesq bringt mit Einführung der Wirbelviskosität  $\nu_t$  die scheinbaren turbulenten Spannungen mit den tatsächlichen Spannungen in Verbindung (Gl. 4-9) (Steiner, 2010). Die turbulente kinetische Energie  $k$  wird mit Hilfe der Geschwindigkeitskomponenten berechnet.

$$-\overline{u'_i u'_j} = \nu_t * \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} - \frac{2}{3} \delta_{ij} \frac{\partial u_l}{\partial x_l} \right) - \frac{2}{3} \delta_{ij} k$$

4-9

$$k = \frac{\overline{u_1 u_1} + \overline{u_2 u_2} + \overline{u_3 u_3}}{2}$$

Beim k-ε Modell ist die Wirbelviskosität eine Funktion der turbulenten kinetischen Energie  $k$  und der Dissipation  $\varepsilon$  (Gl. 4-10).  $C_\mu$  ist eine dimensionslose Turbulenzmodellkonstante. Die Dissipation beschreibt den Anteil der kinetischen Energie welcher in Wärme dissipiert, das heißt umgewandelt wird. Für beide Variablen muss eine Transportgleichung berechnet werden (Schwarze, 2013).

$$\nu_t = C_\mu * \frac{k^2}{\varepsilon}$$

4-10

$$\varepsilon = \frac{\overline{\partial u'_i}{\partial x_j} \frac{\partial u'_i}{\partial x_j}}$$

Bei Anwendung des Standard k-ε Modells muss eine voll turbulente Strömung vorliegen und die molare Viskosität vernachlässigbar sein. Drallbehaftete Strömungen können mit diesem Modell nicht betrachtet werden. In der Brenntechnik stößt dieses Modell somit rasch an seine Grenzen. Durch entsprechende Weiterentwicklungen kann jedoch beispielsweise mit dem Realizable k-ε Modell der Drall berücksichtigt werden (Ansys, 2010).

Im Unterschied zum Standard k-ε Modell werden beim Realizable k-ε Modell Konstanten durch Funktionen beschrieben. So wird etwa die Turbulenzmodellkonstante  $C_\mu$  durch eine Funktion der Scherrate und der mittleren Rotation des Strömungsfeldes charakterisiert und somit der Drall besser beschrieben (Schwarze, 2013).

### 4.3.3 Reynolds-Spannungs-Modelle (RSM)

Unter bestimmten Voraussetzungen kann im Gegensatz zu den k-ε Modellen mit diesem Modell die Turbulenz wesentlich besser aufgelöst werden. RSM-Modelle berücksichtigen nämlich die Anisotropie, d.h. die Richtungsabhängigkeit des Spannungstensors. Dadurch ergeben sich bei dreidimensionalen Problemstellungen sieben Transportgleichungen um die RANS-Gleichungen zu schließen. Verglichen mit dem k-ε Modell bedeutet dies jedoch einen erheblich größeren Rechenaufwand (Ansys, 2010).

## 4.4 Strahlungsmodellierung

### 4.4.1 Allgemeines

Hat die Wärmestrahlung einen großen Anteil an der gesamten übertragenen Wärmemenge, dann ist sie bei der Verbrennungssimulation zu berücksichtigen. Die Strahlung wird über elektromagnetische Wellen in einem bestimmten Spektrum ( $\lambda = 0,1$  bis  $10 \mu m$ ) übertragen (Steiner, 2010). Ein der Wärmestrahlung ausgesetzter Körper kann die elektromagnetischen Wellen absorbieren, reflektieren und transmittieren. Da die Energie der Strahlung erhalten bleibt, ist die Summe von Absorptions- ( $\alpha$ ), Reflexions- ( $\rho$ ) und Transmissionsgrad ( $\tau$ ) gleich 1 (Gl. 4-11).

$$\alpha + \rho + \tau = 1 \quad 4-11$$

Diese drei Parameter sind je nach Stoffeigenschaften unterschiedlich. Man unterscheidet folgende Idealfälle (Joos, 2006):

- schwarzer Strahler ( $\alpha = 1, \rho = 0, \tau = 0$ )
- diathermer Strahler ( $\alpha = 0, \rho = 0, \tau = 1$ )
- idealer Spiegelstrahler ( $\alpha = 0, \rho = 1, \tau = 0$ )



Elementare Gase wie beispielsweise O<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, zweiatomige Gase und Edelgase sind diatherm, also strahlungsdurchlässig. Gase mit mehr als zwei Atomen sind strahlungsfähig, wenn sie auch oft nur in engen Frequenzbändern Energie abstrahlen. In diesen Frequenzbändern sind die Atome schwingungsfähig und die Breite des Bandes wird durch Druck, Temperatur und Gaszusammensetzung bestimmt. Da strahlungsfähige Gase nur in bestimmten Wellenlängenbereichen strahlen, werden sie auch als selektive Strahler bezeichnet (Joos, 2006).

Ein Beispiel für ein strahlendes Gas ist Kohlendioxid CO<sub>2</sub>. Ein Teil der von der Erde abgegebenen Strahlung wird durch das CO<sub>2</sub> absorbiert und wieder reflektiert. Dadurch wird die mittlere Temperatur der Erdatmosphäre erhöht.

Die einen Feuerraum umgebenden festen Wände und die Feststoffe in einer Flamme werden als graue Strahler angenommen. Graue Strahler emittieren im Gegensatz zu schwarzen Strahlern nicht die gesamte Strahlung und haben somit ein Emissionsverhältnis kleiner als eins (Hochenauer, 2013).

Das Beer-Lambert'sche Gesetz beschreibt die wellenlängenabhängige Abnahme der Strahlungsintensität  $i_\lambda$  über den Weg durch eine Gasschicht mit der Dicke  $s$  (Gl. 4-12) (Steiner, 2010). Die Ausgangsstrahlenintensität ist  $i_{\lambda_0}$  und der Absorptionskoeffizient  $a_\lambda$ .

$$i_\lambda = i_{\lambda_0} e^{-a_\lambda s} \quad 4-12$$

Die Absorption hängt stark vom Partialdruck  $p_g$  des absorbierenden Gases ab:

$$a_\lambda = k_\lambda p_g \quad 4-13$$

Somit ergibt sich für die vom Gas absorbierte Intensität:

$$i_{\lambda_0} - i_\lambda(s) = i_{\lambda_0} (1 - e^{-k_\lambda p_g s}) \quad 4-14$$

Daraus folgt das Absorptionsverhältnis:

$$\alpha_\lambda = \frac{i_{\lambda_0} - i_\lambda(s)}{i_{\lambda_0}} = 1 - e^{-k_\lambda p_g s} \quad 4-15$$

Ist die Hochzahl ( $k_\lambda * p_g * s$ ) in Gl. 4-15 erheblich größer als eins, wird das Gas als optisch dick und umgekehrt ( $k_\lambda * p_g * s \ll 1$ ) als optisch dünn bezeichnet (Steiner, 2010). Daher absorbieren optisch dicke Gase entsprechend Gl. 4-15 mehr als optisch dünne Gase. Bei der analyti-

schen Auslegung in der Wärmetechnik wird die Abhängigkeit der Strahlungsintensität und somit der Absorption von der Wellenlänge weitgehend vernachlässigt (Hochenauer, 2013).

#### 4.4.2 Weighted-Sum-of-Gray-Gases Modell

Das Weighted-Sum-of-Gray-Gases Modell (WSGGM) berücksichtigt im Gegensatz zum herkömmlichen Graugas-Modell für feste Wände die Absorption und Emission strahlungsfähiger Gase in unterschiedlichen Wellenlängenbereichen. Dies ist notwendig da Gase abhängig von der Temperatur oft nur in engen Frequenzbereichen strahlungsfähig sind. Der wellenlängenabhängige Verlauf des Emissionsverhältnisses wird mit Hilfe von Gewichtungsfaktoren ( $b_i$ ) durch Stufenfunktionen angenähert (Gl. 4-16). Die Gewichtungsfaktoren berücksichtigen auch die Temperaturabhängigkeit des Emissionsverhältnisses. Der Klammerausdruck entspricht dem Absorptionsverhältnis. (Ansys, 2010).

$$\varepsilon = \sum_i^n b_i(T) * (1 - e^{-a_i*s}) \quad 4-16$$

#### 4.4.3 P1-Strahlungsmodell

Grundsätzlich versucht dieses Modell die Strahlungsintensität im dreidimensionalen Raum durch Kugelfunktionen zu beschreiben. Dies geschieht durch Reihenentwicklungen und wird als  $P_N$ -Approximation bezeichnet. Wird die Reihenentwicklung nach dem ersten Glied abgebrochen bezeichnet man es als P1-Approximation (Lüders, 2005).

Für Anwendungen in der Verbrennungssimulation mit optisch dicken Gasen funktioniert das P1-Modell gut. Die in die Berechnung einfließenden Oberflächen müssen als diffuse Strahler betrachtet werden, was für technische Oberflächen meist ausreicht. Außerdem wird mit diesem Modell die Festkörperstrahlung von Partikeln berücksichtigt. Dabei gilt es zu beachten, dass die durchgehende Strahlung nur in den Partikeln und nicht im Gas berücksichtigt wird. Mit diesem Modell können einerseits graue Strahler und nicht graue Strahler abgebildet werden. Nicht graue Strahler verwenden ein Bandmodell. Der wesentliche Vorteil des P1-Modells liegt im geringen Rechenaufwand. Als nachteilig anzusehen ist, dass die Strahlungsflüsse bei lokalen Wärmequellen und -senken überhöht angegeben werden. Bei geringen optischen Dicken liefert das P1-Modell keine guten Ergebnisse (Ansys, 2010).

#### 4.4.4 DO (Discrete Ordinates)-Strahlungsmodell

Beim DO-Modell wird der für die Strahlung relevante Raum mit diskreten Raumwinkeln unterteilt. Dabei wird die Strahlungstransportgleichung nicht entlang des Richtungsvektors der Strahlungsintensität gelöst, sondern in allen drei Raumrichtungen (Ansys, 2010). Die Auflösung der

Winkeldiskretisierung kann dabei in Fluent selbst vorgenommen werden. Sie entscheidet erheblich über den notwendigen Rechenaufwand.

Mit dem DO-Modell können optisch dicke und dünne Gase berücksichtigt werden. Bei nicht zu fein aufgelöster Winkeldiskretisierung ist eine annehmbare Rechenzeit zu erzielen. Ebenso wie beim P1-Modell können graue und nicht graue Strahler betrachtet werden (Ansys, 2010).

## **4.5 Verbrennungssimulation**

In diesem Kapitel werden verschiedene Modelle vorgestellt, welche versuchen die realen Verbrennungsreaktionen nachzubilden. Da bei einer Verbrennung oft tausende Reaktionen auftreten, aber nur ein Bruchteil für die Simulation herangezogen werden kann, ist es wichtig mit einem geeigneten Modell zu arbeiten. Außerdem ist die Beschreibung der Interaktion zwischen Turbulenz und der chemischen Reaktionskinetik sehr schwierig nachzubilden. Nachstehend sind die für die Simulation des Gichtgasbrenners relevanten Ansätze zur Verbrennungsmodellierung angeführt.

### **4.5.1 Eddy Dissipation Modell (EDM)**

Das Eddy Dissipation Modell basiert auf dem Eddy Break Up Modell und somit auf dem „mixed=burnt“ Ansatz. Dies bedeutet, dass die Reaktionsrate über die turbulente Vermischung zwischen Brennstoff und Oxidator bestimmt wird. Das Modell kann mehr als zwei Reaktionsgleichungen zur Beschreibung der Reaktion verwenden. Jedoch kann dies zu falschen Ergebnissen führen, da bei mehreren Reaktionen ( $>2$ ) verschiedene Arrhenius-Koeffizienten auftreten. Da das EDM für jede Reaktion die gleiche Turbulenzrate, welche die Reaktionsgeschwindigkeit bestimmt, verwendet, sollten nur Einschrittreaktionen simuliert werden. Eventuell können auch Zweischrittreaktionen, bei welchen ein Zwischenprodukt auftritt, verarbeitet werden (Ansys, 2010).

### **4.5.2 Eddy Dissipation Concept (EDC)-Modell**

Das EDC-Modell ist eine Weiterentwicklung des EDM. Es werden detaillierte chemische Mechanismen in der turbulenten Strömung berücksichtigt und man nimmt an, dass die Reaktionen in kleinen turbulenten Skalen ablaufen. Detaillierte chemische Reaktionen können einbezogen werden. Die Berechnung mit diesem Modell ist mit großem numerischem Aufwand verbunden und somit ergeben sich entsprechend lange Rechenzeiten (Ansys, 2010).

### **4.5.3 Modelle für nicht vorgemischte Verbrennung**

Bei der nicht vorgemischten Verbrennung werden der Brennstoff und der Oxidator getrennt in die Reaktionszone eingebracht. Je nach Annahme wie schnell die chemischen Reaktionen ablaufen, ergeben sich unterschiedliche Möglichkeiten zur Verbrennungssimulation:

- unendlich schnelle Chemie – chemisches Gleichgewichtsmodell
- endlich schnelle Chemie – laminare Flameletmodelle

#### Chemisches Gleichgewichtsmodell:

Wird chemisches Gleichgewicht angenommen, reagiert der Brennstoff mit dem Oxidator umgehend nach abgeschlossener Mischung. Daher vereinfacht sich das Verbrennungsproblem zu einem Mischungsproblem, welches mit dem Mischungsbruch  $f_i$  beschrieben wird (Gl. 4-17).

$$f_i = \frac{Z_i - Z_{i-Ox}}{Z_{i-Fuel} - Z_{i-Ox}} \quad 4-17$$

Dabei ist  $Z_i$  der Element-Massenbruch (Massenanteil an der Gesamtmasse) des jeweiligen Elements  $i$ . Die Indizes „Fuel“ und „Ox“ bezeichnen die Element-Massenbrüche am Anfang der Reaktionszone. Das bedeutet, dass für jedes Element ein eigener Mischungsbruch aufgestellt werden müsste. Da jedoch die Diffusionskoeffizienten in etwa für alle Elemente gleich angenommen werden können, wird der Mischungsbruch unabhängig vom Element (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001). Dies kann allerdings nur für turbulente Strömungen angenommen werden, da die Konvektion gegenüber der molekularen Diffusion überwiegt (Ansys, 2010).

Dadurch reduziert sich die zu modellierende Chemie der Verbrennung auf zwei Erhaltungsgleichungen (Gl. 4-18), da der Mischungsbruch  $f$  nach Favre ( $f = \bar{f} + f'$ ) massengewichtet gemittelt wird (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).  $\sigma_t$ ,  $C_g$  und  $C_t$  sind modellspezifische Konstanten.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \bar{f}) + \nabla * (\rho \vec{v} \bar{f}) = \nabla * \left( \frac{\mu_t}{\sigma_t} \nabla \bar{f} \right) \quad 4-18$$

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

Um nun die Chemie mit der Turbulenz in Verbindung zu verbringen, das heißt die Beschreibung des turbulenten Mischungsprozesses durch den Mischungsbruch, verwendet Fluent Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen (Probability Density Function PDF, Abbildung 4-6). Die PDF für den Mischungsbruch ergibt sich aus dem Zeitanteil den der Wert des Mischungsbruchs im Intervall  $\Delta f$  hat. Dabei hängt der Kurvenverlauf  $p(f)$  von der Turbulenz ab und wird mit Hilfe verschiedener Verteilungsfunktionen (zB Gauß) angenähert (Ansys, 2010).

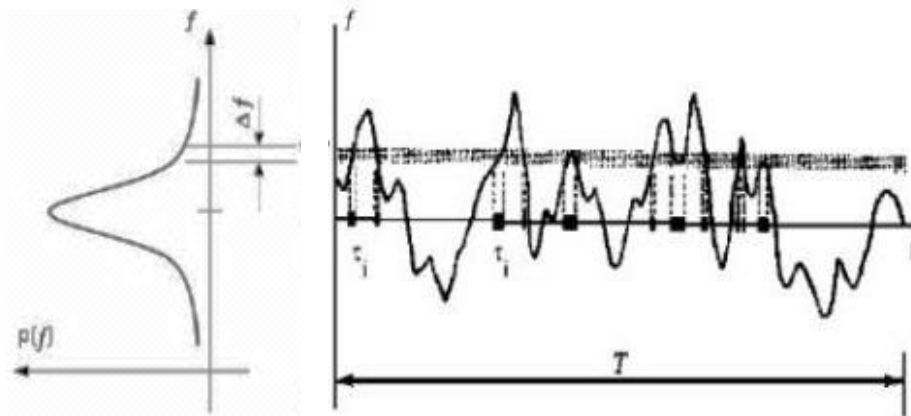


Abbildung 4-6: PDF des Mischungsbruchs  $p(f)$  (Ansys, 2010)

Somit können über die PDF die vom Mischungsbruch  $f$  abhängigen Mittelwerte der Temperatur, der Dichte und der Massenanteile berechnet werden. Da durch Annahme chemischen Gleichgewichts nur unendliche schnelle Chemie berücksichtigt wird, kann beispielsweise die Stickoxidbildung mit diesem Modell nicht abgebildet werden (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).

#### Flameletmodell:

Beim Flameletmodell mit endlich schneller Chemie müssen alle Erhaltungsgleichungen berücksichtigt werden. Es genügt nicht, wie beim Gleichgewichtsmodell, nur die Kontinuitäts-, Impuls- und Energiegleichung zu berücksichtigen. Es müssen hier auch alle Erhaltungsgleichungen der beteiligten Elemente  $i$  betrachtet werden (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001). Da dies aber einen zu hohen Rechenaufwand bedeuten würde, wird die turbulente Flamme aus laminaren Einzel-flamelets einer Gegenstromflamme aufgebaut (Abbildung 4-7).

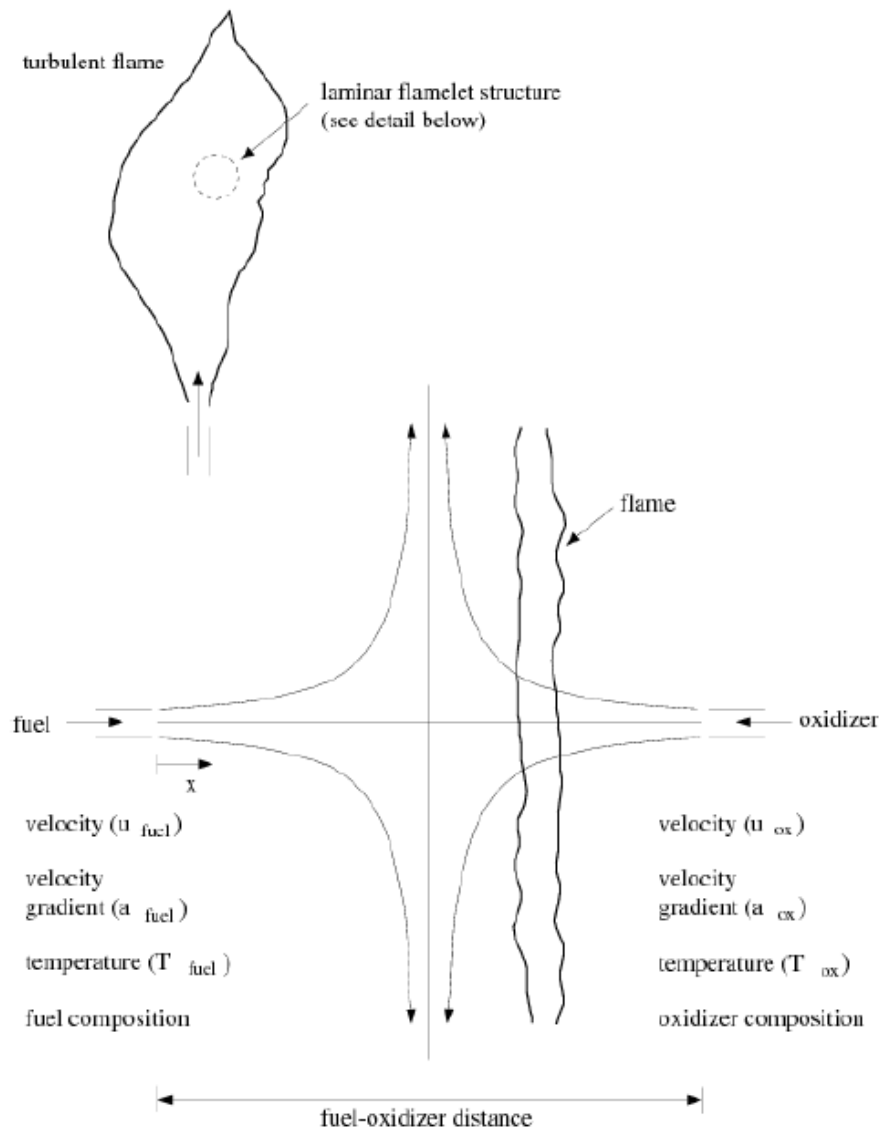


Abbildung 4-7: laminare Gegenstromflamme (Ansys, 2010)

Der Brennstoff und der Oxidator treffen achssymmetrisch im Gegenstrom aufeinander. Die Flamme wird abhängig vom Abstand zueinander bzw. abhängig von den Geschwindigkeiten, unterschiedlich zur Seite abgelenkt. Außerdem hat eine hohe Geschwindigkeit auch einen Einfluss darauf, dass die Verbrennung der Gegenstromflamme erheblich vom chemischen Gleichgewicht abweicht. Durch die Einfachheit dieser Problemstellung, es kann Eindimensionalität angenommen werden, können die Zusammensetzung und die Temperatur einer solchen Gegenstromflamme relativ leicht berechnet werden (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001).

Dies geschieht wiederum durch den Mischungsbruch  $f$  und nun, im Vergleich zum chemischen Gleichgewicht, zusätzlich durch die skalare Dissipationsgeschwindigkeit. Diese steht im Zusammenhang mit der Flammenstreckung der Gegenstromdiffusionsflamme und ist der entscheidende Parameter zur Beschreibung der Abweichung vom chemischen Gleichgewicht.

## 5 Numerische Strömungssimulation

Die numerische Strömungssimulation, im Englischen Computational Fluid Dynamics (CFD), versucht das System der Erhaltungsgleichungen, welche partiellen Differentialgleichungen entsprechen, näherungsweise numerisch zu lösen. Dazu werden verschiedene Methoden zur Diskretisierung der Differentialgleichungen verwendet. Dadurch ist es möglich die Differentialgleichungen in analytische Gleichungen zu überführen. Das Rechengebiet wird in ein Gitter aufgeteilt und somit ergeben sich finite Kontrollvolumina. Dabei hängt es wesentlich davon ab, wie fein das Rechnetz das betrachtete Rechengebiet unterteilt. Zur Erstellung dieser Arbeit wurden die Rechnetze vom Firmenpartner zur Verfügung gestellt. Grundsätzlich kann zwischen strukturierten und unstrukturierten Netzen unterschieden werden.

### 5.1 Gitterformen

Bei einem strukturierten Gitter sind die Gitterpunkte in regelmäßigen Abständen angeordnet. Dadurch ist die Lage von einem Gitterpunkt eindeutig bestimmt. Es ergibt sich ein Anordnungsmuster, welches einfach in ein Programm implementiert werden kann (Ferziger & Peric, 2002).

Durch unterschiedlichen Aufbau des strukturierten Netzes kann es an die jeweilige Geometrie angepasst werden. Abbildung 5-1 zeigt ein kartesisches und ein rechtwinkliges Gitter. Bei der rechtwinkligen Anordnung der Gitterpunkte können durch Verteilungsfunktionen bestimmte Bereiche der zu simulierenden Geometrie feiner aufgelöst werden (Schwarze, 2013). Allerdings sind diese beiden Varianten auf einfache geometrische Rechengebiete beschränkt.

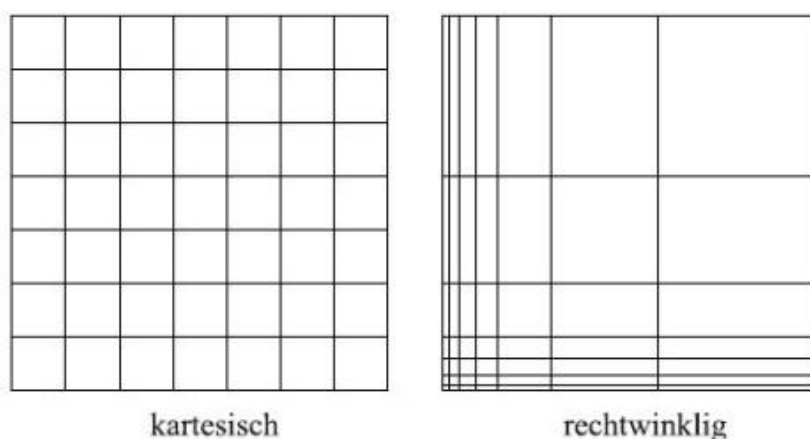


Abbildung 5-1: kartesisches und rechtwinkliges Gitter (Schwarze, 2013)

Für geometrisch anspruchsvollere Modelle, also bei Auftreten gekrümmter Konturen, werden Gitter, welche sich der Modellgeometrie anpassen, verwendet. Man unterscheidet dabei zwischen O-, H- und C-Gittern (Abbildung 5-2). Dabei bezeichnet der Buchstabe die Form des Li-

nienzuges zwischen den Gitterpunkten. So eignet sich beispielsweise ein strukturiertes H-Gitter, demnach mit offenem Linienzug, sehr gut für die Abbildung einer Düse. Das C-Gitter, mit halb-offenem Linienzug, kann gut den Bereich um ein Tragflügelprofil abbilden. Das aus einem geschlossenen Linienzug aufgebaute O-Gitter wird für die Strömungssimulation einfacher stumpfer Körper herangezogen (Schwarze, 2013)

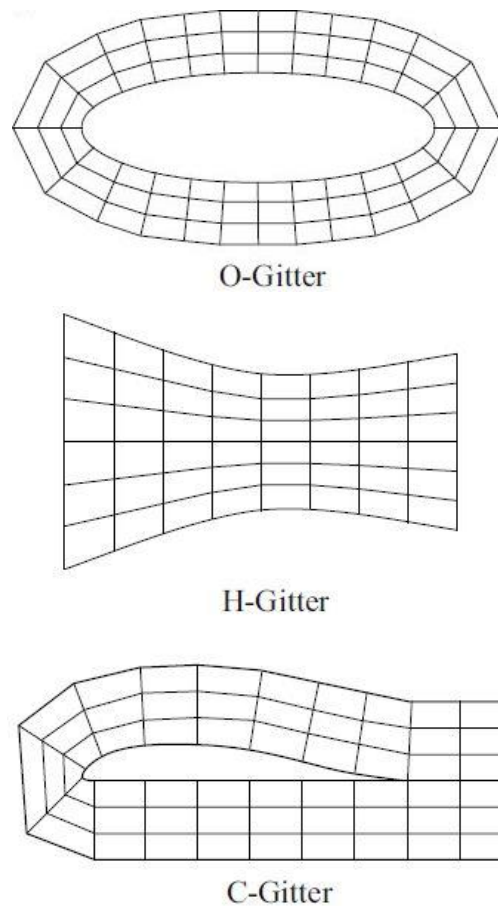


Abbildung 5-2: Gittertypen für einfache Modellgeometrien (Schwarze, 2013)

Mit den bisher vorgestellten Gitterformen sind nur einfache geometrische Verhältnisse abbildbar. Sobald die Körperkonturen etwas komplexer werden zumeist unstrukturierte Gitter verwendet. Natürlich werden auch Mischformen zwischen strukturierten und unstrukturierten Gittern erzeugt.

Unstrukturierte Gitter werden unregelmäßig aufgebaut und somit ergibt sich eine sehr gute Anpassungsfähigkeit an aufwändige Geometrien. Für zweidimensionale Probleme werden die unstrukturierten Gitter aus Drei- und Vierecken aufgebaut. Bei dreidimensionalen Problemen ergeben sich Tetraeder-, Hexaeder- und Polyederelemente. Abbildung 5-3 zeigt ein unstrukturiertes zweidimensionales Gitter. Entlang der gekrümmten Wand sind orthogonale Zellen angeord-



net. Grund dafür ist, dass strukturierte Gitter in Bereichen nahe zur Wand bessere Ergebnisse liefern (Ferziger & Peric, 2002).

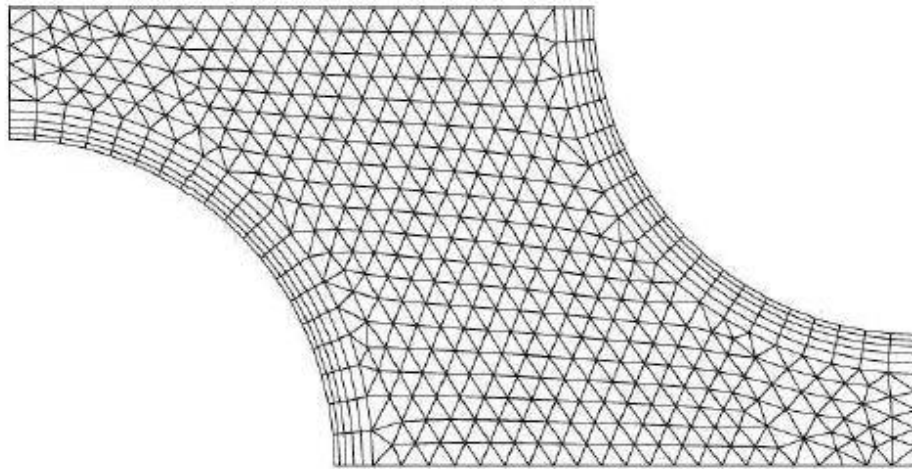


Abbildung 5-3: unstrukturiertes Gitter mit orthogonalen Zellen (Ferziger & Peric, 2002)

Da für diese Arbeit ein Rechennetz zur Verfügung stand, wird hier nicht näher auf die Erstellung von Rechennetzen eingegangen.

## 5.2 Ansys Fluent

Für die Erstellung dieser Arbeit wurde die in der Wärmetechnik weitverbreitete CFD Software Fluent (Version 14.0) verwendet. Das Programm besitzt eine grafische Benutzeroberfläche. Nach dem Laden der vernetzten Geometrie in das Programm, werden die Einstellungen für die Simulation systematisch in den nachstehenden Bereichen festgelegt:

- Problem Setup
- Solution
- Results

### 5.2.1 Problem Setup

Im Problem Setup werden die Grundeinstellungen festgelegt. Dabei muss das Netzgitter auf die entsprechende Größe skaliert werden. Zusätzlich kann die Qualität überprüft werden. Der betrachtete Strömungszustand ist stationär. Die Gravitation wird bei den hohen Strömungsgeschwindigkeiten nicht berücksichtigt. Anschließend erfolgt die Festlegung des Turbulenz- und Strahlungsmodells sowie des Verbrennungsmodells.

## 5.2.2 Solution

Die Einstellungen zu den numerischen Lösungsverfahren werden in diesem Bereich getroffen. Die Diskretisierungsverfahren beeinflussen die Lösungsfindung entscheidend. Tabelle 5-1 zeigt die verwendeten Diskretisierungsmethoden für die 2D- und 3D-Simulation. Zunächst wurde für alle betrachteten Gleichungen das First-Order Upwind Verfahren (FO) gewählt. Um zu einer ansprechend genauen Lösung zu kommen wurde dann versucht möglichst viele Gleichungen nach dem Second-Order Upwind Verfahren (SO) zu diskretisieren.

Tabelle 5-1: Diskretisierungsmethoden für die 2D- und 3D-Simulation

	Diskretisierung 2D	Diskretisierung 3D
Pressure	Standard	Standard
Momentum	SO	FO
Turbulent Kinetic Energy	SO	FO
Turbulent Dissipation Rate	SO	FO
Energy	SO	SO
Temperature	SO	SO
Mean Mixture Fraction	SO	SO
Mean Mixture Variance	SO	SO

Die Solution Initialization ist von entscheidender Bedeutung um das Strömungsfeld mit Werten zu initialisieren, welche rasch zu einer Lösung führen. Somit kann die Simulationszeit durch entsprechende Auswahl der Initialisierungsmethode reduziert werden. Für die Initialisierung der zu bearbeitenden Problemstellungen wurde die Standard Methode, bei welcher jede Zelle mit vorgegebenen Werten belegt wird, sowie die Hybrid Methode angewandt. Bei der Hybridmethode werden die Randwerte auf die restlichen Zellen interpoliert und vom Anwender sind keine Werte vorzugeben (Ansys, 2010). Für gleiche Problemstellungen, welche mit unterschiedlichen Modellen berechnet werden sollen, kann sofern bereits eine Lösung eines anderen Problems vorliegt, diese Lösung auf das neu zu berechnende Problem initialisiert werden. Dadurch kann viel Rechenaufwand eingespart werden.

## 5.2.3 Results

Im diesem Menüpunkt werden die Ergebnisse der Simulation aufgerufen. Es können Plots, Diagramme und Zahlenwerte ausgelesen werden. Durch die gezielte Erstellung von Schnittflächen an geeigneten Stellen können beispielsweise das Temperaturprofil oder die Massenanteile verschiedener Spezies grafisch ausgegeben werden.

## 6 2D-Simulation zur Einschränkung der Reaktionsmechanismen

In diesem Kapitel wird die Problemstellung, welche zur Einarbeitung in die CFD Software Fluent und zu einer ersten Untersuchung der verschiedenen Verbrennungsmodelle diente, erläutert und diskutiert. Anhand einer einfachen zweidimensionalen Geometrie werden die zur Gasverbrennung relevanten Verbrennungsmodelle untersucht und ihre Ergebnisse miteinander verglichen. Beim zu untersuchenden Gichtgasbrenner erfolgt die Vermischung von Brennstoff und Oxidator am Brenneraustritt. Deshalb wird für die 2D-Validierung eine turbulente Diffusionsflamme untersucht (Abbildung 6-1). Bei zweidimensionaler Betrachtung der Geometrie wird eine fiktive Tiefe von einem Meter angenommen. Aus Symmetriegründen wird nur die Hälfte des Querschnitts simuliert und somit der Rechenaufwand auf ein Minimum reduziert.

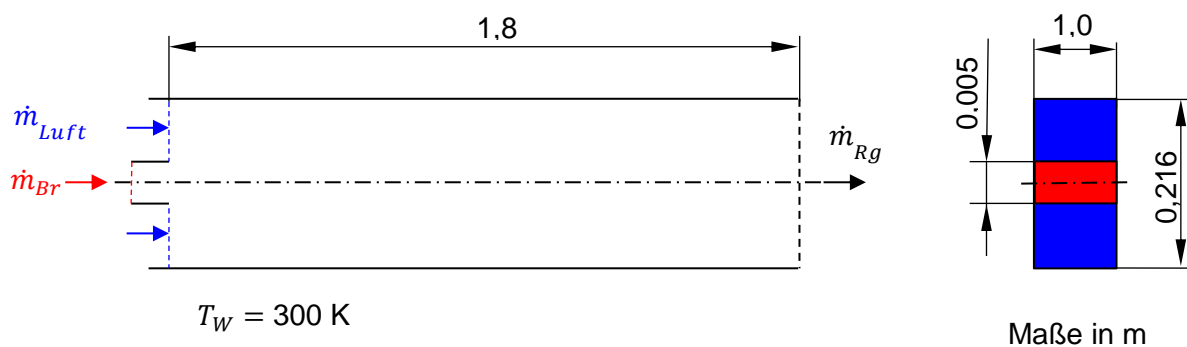


Abbildung 6-1: Diffusionsbrenner zur 2D Untersuchung

Um zunächst die Eignung der verschiedenen Reaktionsmodelle zu überprüfen und miteinander zu vergleichen, wird der Brennstoff Methan  $\text{CH}_4$  mit dem Massenstrom  $\dot{m}_{Br}$  in die Brennkammer eingebracht. Als Oxidator wird Luftsauerstoff verwendet. Anschließend wird anstatt Methan die vom Firmenpartner vorgegebene Gichtgaszusammensetzung simuliert.

Um die zu untersuchenden Verbrennungsmodelle auf ihre Eignung zu untersuchen, wurde eine hohe Eintrittsgeschwindigkeit ( $v_{Br} = 80\text{ m/s}$ ) gewählt, damit erschwerende Bedingungen für die Verbrennung gegeben sind. Darunter ist zu verstehen, dass die Reaktion aufgrund der hohen Gasgeschwindigkeit nicht genügend Zeit hat um im betrachteten Rechengebiet auszureagieren. Die adiabate Flammentemperatur wird nicht erreicht und Teile des Brennstoffs verlassen das Rechengebiet unverbrannt. Die Randbedingung der hohen Brennstoffeintrittsgeschwindigkeit stellt große Anforderungen an die Reaktionsmechanismen und durch diese Brennerkonfiguration können sie gut auf ihre Eignung getestet werden.

Abbildung 6-2 zeigt das für die 2D-Untersuchung verwendete rechteckige Netzgitter (1615 Zellen). Beim Brennstoff- und Lufteintritt sowie im Bereiche entlang der horizontalen Symmetrielinie ist das Gitter feiner aufgelöst. Der Brennstoffeintritt ist aufgrund seiner geringen Abmes-

sungen nicht zu erkennen. Er ist in Abbildung 6-1 unter Missachtung der wirklichen Größenverhältnisse vergrößert dargestellt.

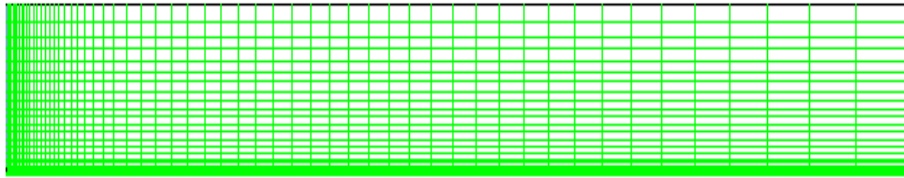


Abbildung 6-2: Netzgitter zur 2D Untersuchung

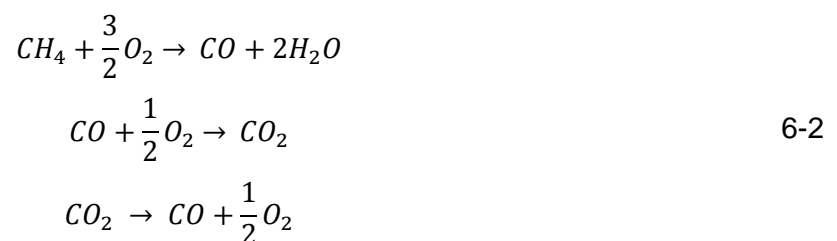
## 6.1 Verbrennungsuntersuchung mit Methan (NG)

Für die Verbrennungsuntersuchung wurde der oben angeführte Brenner verwendet. Das Luftverhältnis  $\lambda$  ist mit 1,1 festgelegt. Somit ergibt sich die Lufteintrittsgeschwindigkeit ( $v_{Luft} = 19,4$  m/s) unter der Annahme, dass der Brennstoff mit 80 m/s eintritt. Die Wand, welche den Brenner umschließt hat eine konstante Wandtemperatur  $T_W$  von 300 K. Zu Beginn wurde eine 2D-Simulation mit dem Eddy-Dissipation-Model unter Verwendung verschiedener Reaktionsmechanismen durchgeführt:

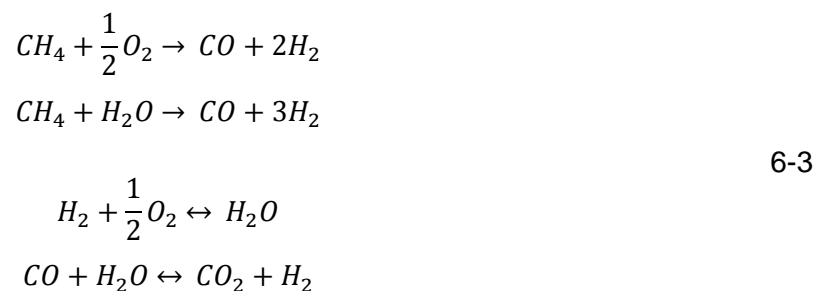
- Methan (1-Schritt)



- Westbrook and Dryer (3-Schritt) (Andersen, 2008)



- Jones Lindstedt (4-Schritt) (Andersen, 2008)



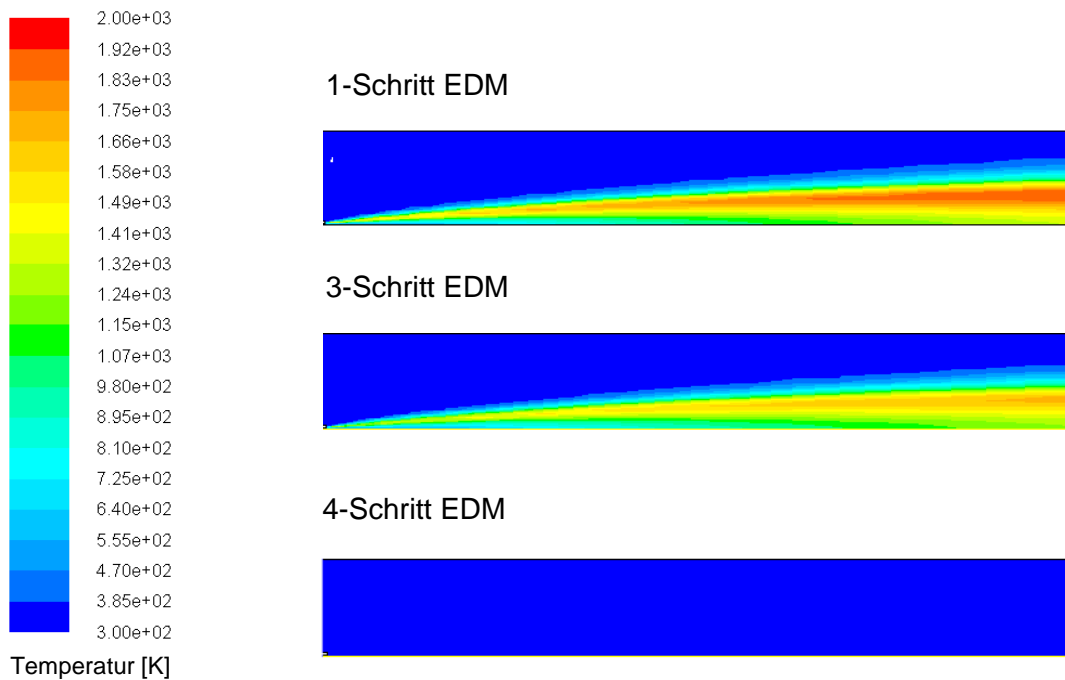


Abbildung 6-3: Temperaturprofil der Methanverbrennung bei Anwendung des EDM

Abbildung 6-3 zeigt die Temperaturprofile unterschiedlicher Reaktionsmechanismen bei Anwendung des EDM. Der Jones Lindstedt Mechanismus (4-Schritt) führt zu keinem Ergebnis für diese Brennerkonfiguration. Es tritt keine Temperaturerhöhung auf und es kann daraus geschlossen werden, dass die Verbrennungsreaktion nicht abläuft. Mit der 1-Schritt Methanreaktion und dem 3-Schritt Mechanismus läuft die Reaktion in der Brennkammer ab. Der 1-Schritt Mechanismus liefert im Vergleich zum 3-Schritt Mechanismus ein Temperaturprofil mit einem höherem Temperaturniveau. Dafür ausschlaggebend sind die unterschiedlichen Reaktionsmechanismen. Der 3-Schritt Mechanismus betrachtet das Kohlenmonoxid, während der 1-Schritt Mechanismus keine Zwischenspezies berücksichtigt.

Alternativ zum Eddy-Dissipation-Modell wurde die Verbrennung mit dem Flameletmodell simuliert. Abbildung 6-4 zeigt die Temperaturprofile des 3-Schritt Mechanismus und eines Flameletmodells. Das Flameletmodell verwendet den Skeletal Reaktionsmechanismus. Dieser Mechanismus basiert auf dem GRI 3.0 Reaktionsmechanismus und er berücksichtigt 16 Spezies in 41 Reaktionen. Dabei ergeben sich beim 3-Schritt EDM etwas höhere Verbrennungstemperaturen, als beim Flameletmodell. In diesem Fall überschätzt das EDM die Temperaturen aufgrund des "mixed=burnt"-Ansatzes. Dieser Ansatz geht davon aus, dass die Verbrennung nach der Vermischung von Brennstoff und Oxidator abgeschlossen ist. Das Flameletmodell hingegen beschreibt die Verbrennung im Unterschied zum EDM durch eine aufwändige Reaktionskinetik, welche die Temperaturabhängigkeit der Reaktionsgeschwindigkeit beinhaltet. Aus der hohen Eintrittsgeschwindigkeit des Brennstoffs resultieren niedrigere Temperaturen. Dies hat einen entscheidenden Einfluss auf die Reaktionsgeschwindigkeit. Beim EDM wird dies nicht berücksichtigt, da nur die Vermischung den Reaktionsablauf bestimmt.

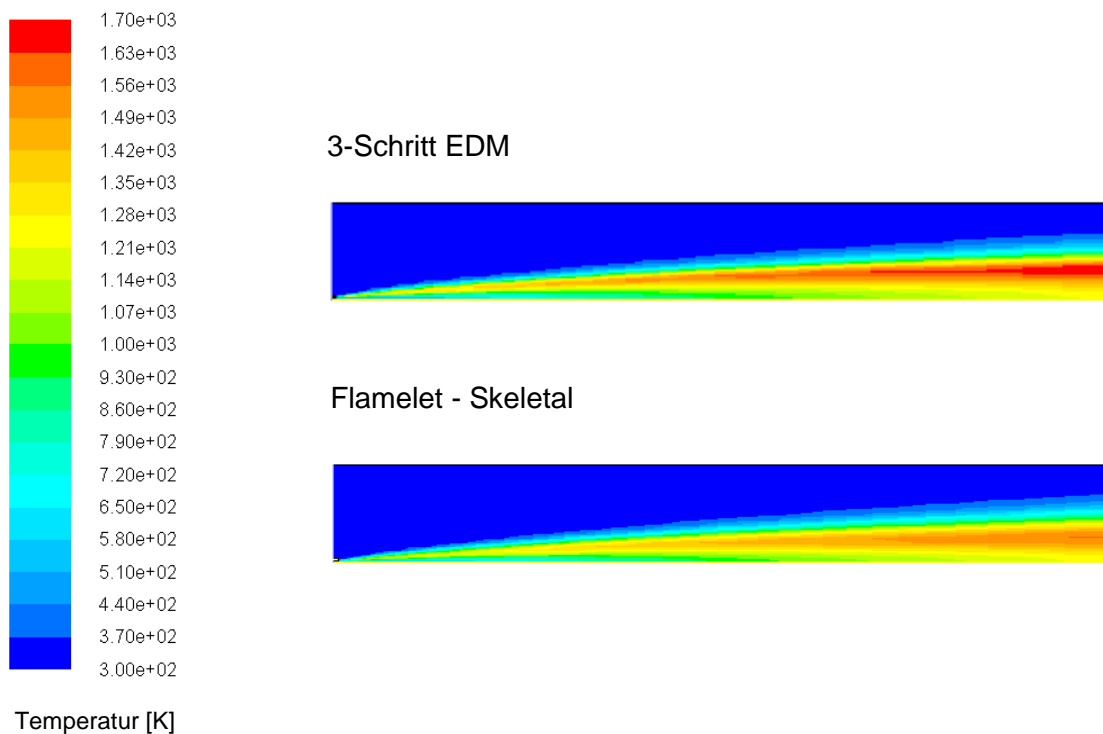


Abbildung 6-4: Temperaturprofil der Methanverbrennung

In Abbildung 6-5 ist das Geschwindigkeitsprofil der Verbrennung dargestellt. Gut zu erkennen ist, dass im Bereich der horizontalen Symmetrielinie die Geschwindigkeit sehr hoch ist. Durch die hohe Geschwindigkeit weitet sich die Flamme nur sehr beschränkt aus. Es ergibt sich eine starke Flammenstreckung. Die Flamme hat nicht genug Zeit auszubrennen und daher treten brennbare Stoffe aus der Brennkammer.

Abbildung 6-6 zeigt die CO-Massenanteile des 3-Schritt EDM und des Flamelet-Skeletal. Der Unterschied in der CO-Konzentration ergibt sich durch die unterschiedlichen Verbrennungsmodelle. Trotz der höheren Temperaturen des 3-Schritt EDM ist dort die CO-Konzentration im Vergleich zum Flameletmodell höher. Dies stellt einen Widerspruch dar, da bei höheren Temperaturen mehr Wärme freigesetzt werden muss und somit mehr CO umgesetzt werden müsste.

Fazit:

Zur Simulation der Methanverbrennung für die gegebene Brennerkonfiguration eignet sich der 4-Schritt Mechanismus nicht. Der 1- und 3-Schritt Mechanismus liefern in Verbindung mit dem EDM brauchbare Ergebnisse. Vergleicht man das EDM mit dem Flameletmodell zeigt sich, dass der "mixed=burnt"-Ansatz rasch an seine Grenzen stößt. Dies zeigt sich besonders gut bei Betrachtung der CO-Massenanteile.

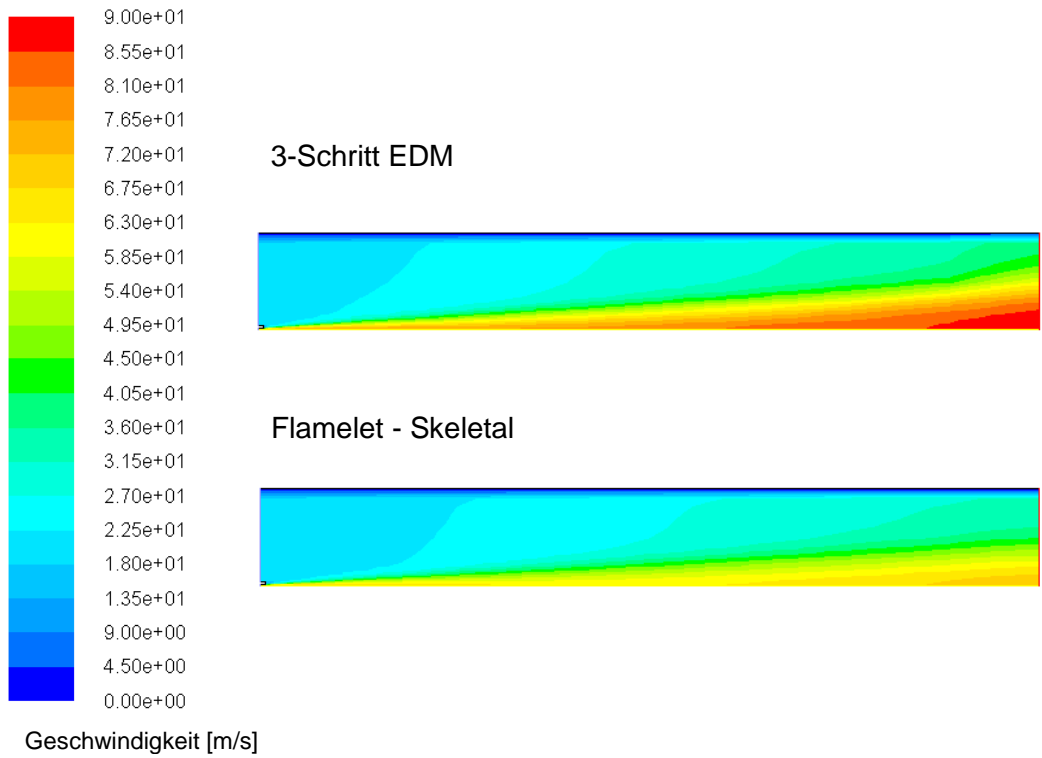


Abbildung 6-5: Geschwindigkeitsprofil der Methanverbrennung

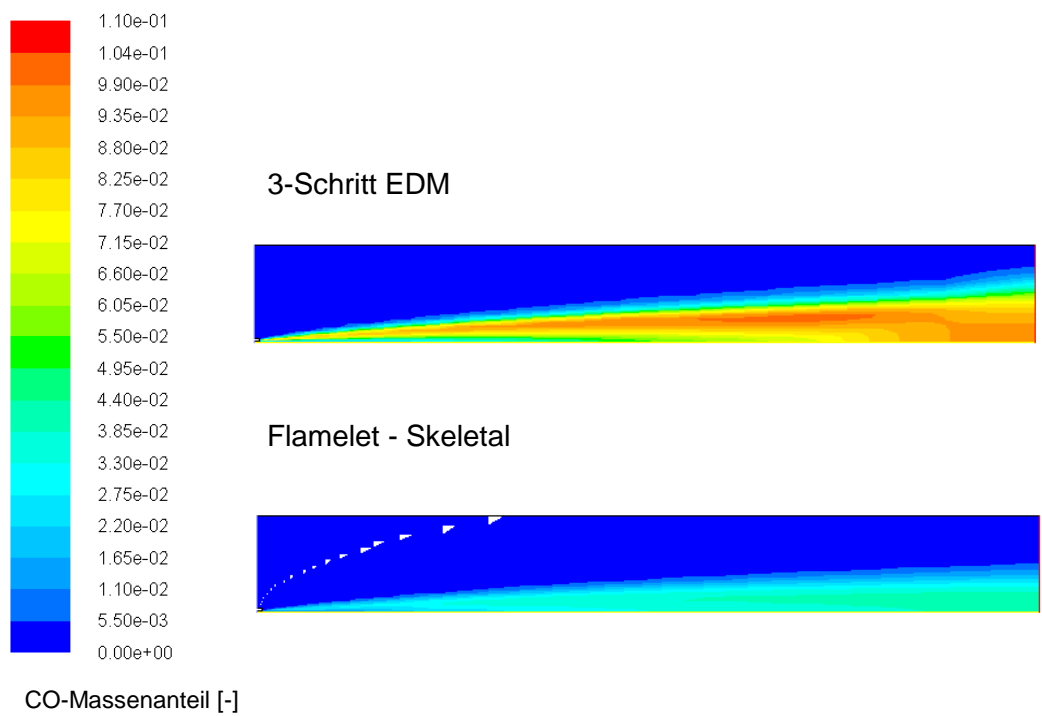


Abbildung 6-6: CO-Massenanteil der Methanverbrennung

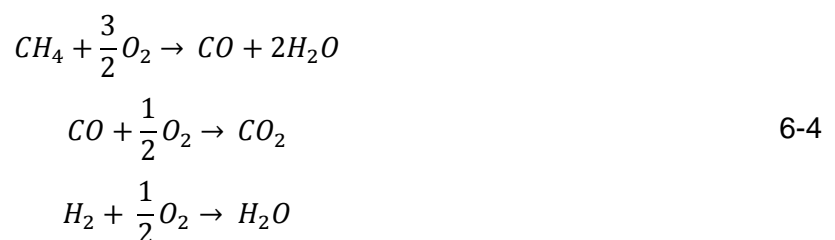
## 6.2 Verbrennungsuntersuchung mit Gichtgas (BFG)

Nachdem die Einarbeitung in die CFD-Software mit den unterschiedlichen Verbrennungsmodellen mit einem konventionellen Brennstoff abgeschlossen wurde, konnte mit der Gichtgas-Verbrennungssimulation begonnen werden. Dazu wurde ebenfalls der eingangs im Kapitel beschriebene Diffusionsbrenner verwendet. Ziel war es die in der Literatur vorhandenen Reaktionsmechanismen auf ihre Tauglichkeit zur Gichtgasverbrennung zu untersuchen.

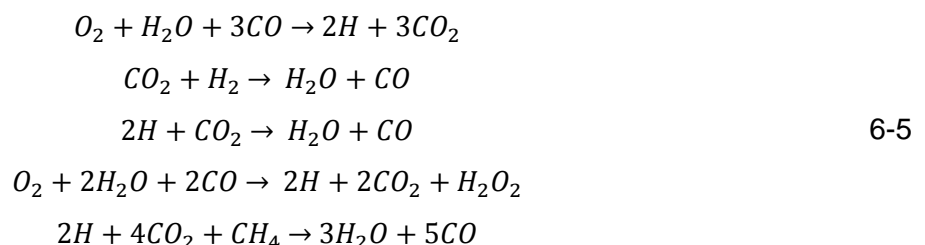
### 6.2.1 Vergleich der Reaktionsmechanismen mit EDM

In einer ersten Untersuchung wurden der Literatur entnommene Reaktionsmechanismen in das EDM implementiert und mit der vom Firmenpartner vorgegebenen Gichtgaszusammensetzung zweidimensional simuliert. Die Randbedingungen sind ident mit den bei der Methan-Verbrennungsuntersuchung verwendeten Bedingungen. Da hier eine andere Zusammensetzung des Brennstoffs vorliegt, ergibt sich bei gleicher Brennstoffeintrittsgeschwindigkeit und bei gleichem Luftverhältnis ( $\lambda = 1,1$ ) eine neue Lufteintrittsgeschwindigkeit  $v_{Luft}$  von 1,659 m/s. Neben den bereits beschriebenen Mechanismen von Jones/Lindstedt und Westbrook/Dryer wurden zwei weitere verwendet:

- Mechanismus der Holzgas Ausbrandreaktion (3-Schritt)



- Nikolaou (5-Schritt) (Nikolaou, 2012)



Die zwei für Kohlenwasserstoff entwickelten Reaktionsmechanismen von Jones/Lindstedt (JL) und Westbrook/Dryer (WD) sind nicht für die Modellierung der Gichtgasverbrennung geeignet. Bei Anwendung dieser beiden Mechanismen tritt keine Temperaturerhöhung in der Brennkam-



mer auf. Abbildung 6-7 zeigt einen Überblick über die Reaktionsmechanismen, welche für die Gichtgasverbrennungssimulation mit dem EDM verwendet wurden.

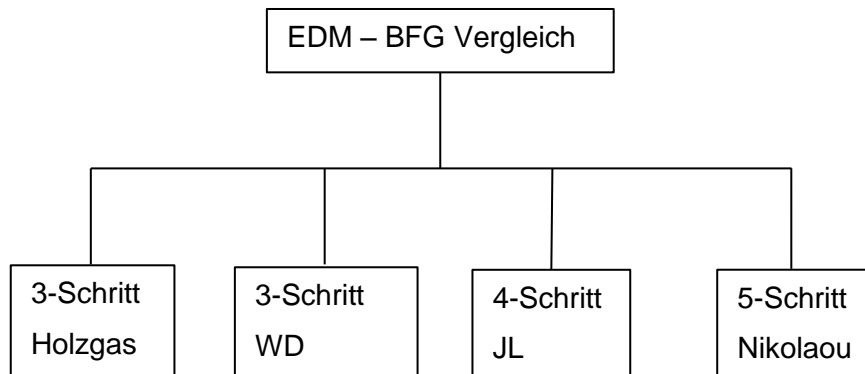


Abbildung 6-7: Vergleiche mit unterschiedlichen Reaktionsmechanismen

In der folgenden Abbildung 6-8 werden die unterschiedlichen Temperaturprofile der zwei Reaktionsmechanismen, bei welchen eine Verbrennungsreaktion mit dem EDM auftritt, dargestellt. Es ist zu erkennen, dass mit dem 5-Schritt Mechanismus von Nikolaou maximal eine Temperatur von ca. 1250 K auftritt.

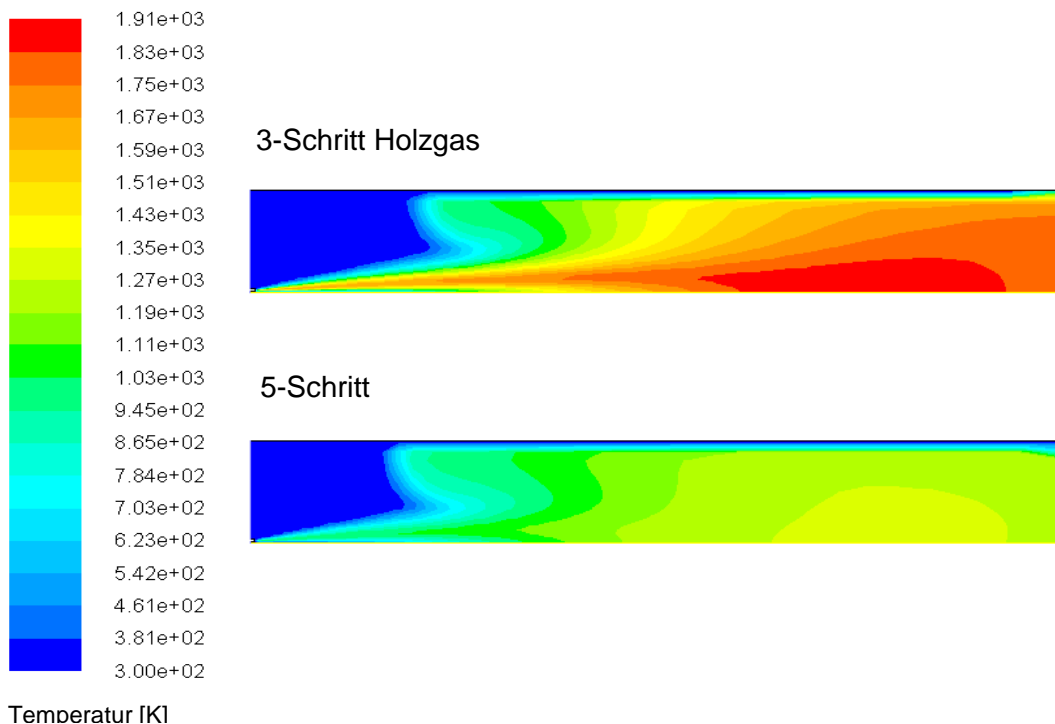


Abbildung 6-8: Temperaturprofil des 3- und 5-Schritt Mechanismus

### Fazit:

Das EDM funktioniert nur mit maximal zwei Reaktionsschritten. Bei Verwendung mehrerer Reaktionsschritte können fehlerhafte Ergebnisse auftreten. Durch die „Mixed=Burnt“ Annahme ist für den Mechanismus mit mehr als zwei Reaktionsschritten unklar, welche Reaktion verwendet werden soll. Brauchbare Ergebnisse liefert lediglich der 3-Schritt Holzgasmechanismus.

## **6.2.2 Vergleich der Reaktionsmechanismen mit dem nicht vormischenden Verbrennungsmodell**

Die Gichtgasverbrennung wurde mit dem chemischen Gleichgewicht sowie mit dem Flameletmodell simuliert (Abbildung 6-9). Für das Flameletmodell wurde der GRI 3.0 Reaktionsmechanismus und ein Skeletal-Mechanismus, d.h. ein reduzierter GRI 3.0, verwendet.

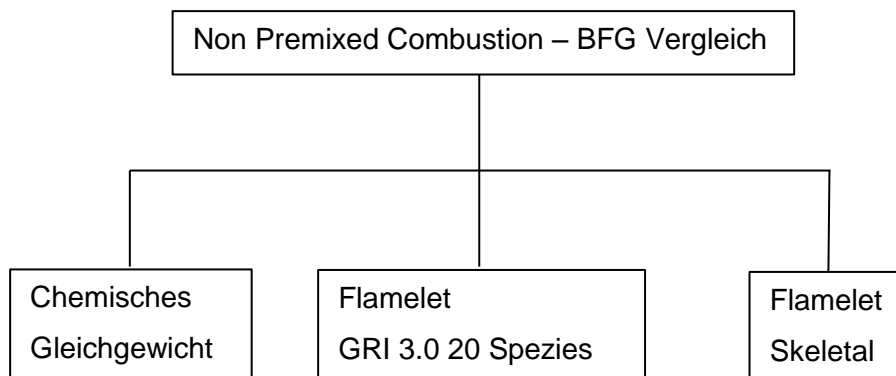


Abbildung 6-9: Vergleiche mit dem nicht vormischenden Modell

Der GRI 3.0 Reaktionsmechanismus enthält 325 verschiedene chemische Reaktionen. Dabei sind 53 Spezies beteiligt. Die Version 3.0 ist die aktuellste Version des auf Gasverbrennungen, vor allem Methan und Erdgas, optimierten Mechanismus (Frenklach, Bowmann, Smith, & Gardiner, 2013). In diesem Fall wurde der Mechanismus auf 20 Spezies limitiert, um den Rechenaufwand zu begrenzen. Bei Limitierung der Spezies werden die Spezies mit den größten Molanteilen berücksichtigt (Ansys, 2010). Der Skeletal Mechanismus ist ein vom GRI 3.0 abgeleiteter Mechanismus mit einer Anzahl von 41 Reaktionen und 16 Spezies. Bei Vergleich der Temperaturprofile (Abbildung 6-10) der zwei Mechanismen und bei Annahme chemischen Gleichgewichts zeigt sich kaum ein Unterschied. Alle drei Modelle liefern eine in etwa gleiche Flammenform. Durch die hohe Eintrittsgeschwindigkeit des Gichtgases weitet sich die Flamme nicht sofort auf. Gut zu erkennen ist, dass in Nähe der Wand die Temperatur rasch auf 300 K absinkt.

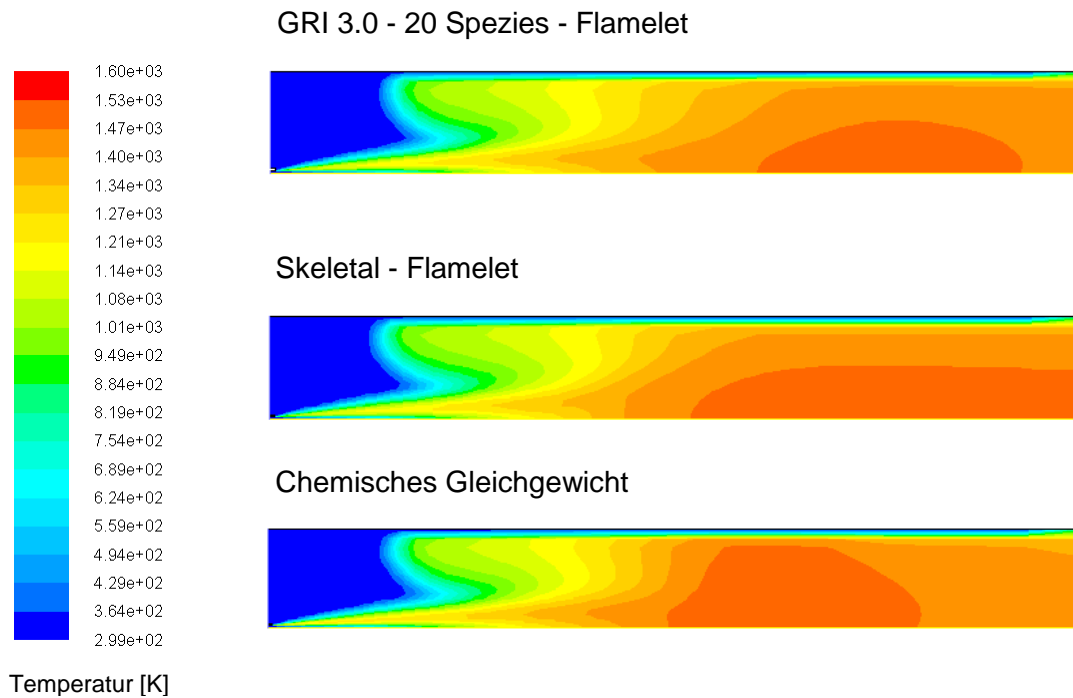


Abbildung 6-10: Temperaturprofile der Flameletmodelle und des chemischen Gleichgewichts

Nach Auswertung der Ergebnisse der Gichtgasverbrennungsuntersuchung zeigte sich, dass mit dem EDM nur mit dem 3-Schritt Holzgasmechanismus sinnvolle Ergebnisse zu erzielen sind. Daher wird in den weiteren Simulationen am eigentlichen Gichtgasbrenner nur mehr dieser Mechanismus für das EDM sowie das EDC-Modell verwendet. Die Ergebnisse der Flameletmodelle sind plausibel, da sie im Bereich der adiabaten Flammentemperatur liegen. Deshalb werden sie neben dem chemischen Gleichgewicht auch für die weiteren Simulationen herangezogen.

## 7 Ergebnisse der CFD Simulation des Gichtgasbrenners

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der unterschiedlichen Simulationen angeführt und erläutert. Die Geometrie bzw. das Netzgitter wurden vom Firmenpartner zur Verfügung gestellt. Der Brenner besteht, wie in Kapitel 3.2 bereits beschrieben, aus einem Eintritts- und Austrittsbereich. Für diese Arbeit wird nur der Austrittsbereich des Brenners betrachtet. An den Austrittsbereich ist eine fiktive Brennkammer angeschlossen, welche geeignete Randbedingungen besitzt (Abbildung 7-1, Tabelle 7-1). Das Netzgitter ist im vorderen Bereich der Brennkammer feiner aufgelöst, da dort das Gichtgas entzündet wird. Es ist aus 2683354 Zellen aufgebaut und der Wert der minimalen orthogonalen Qualität beträgt  $4,08496e-02$ .

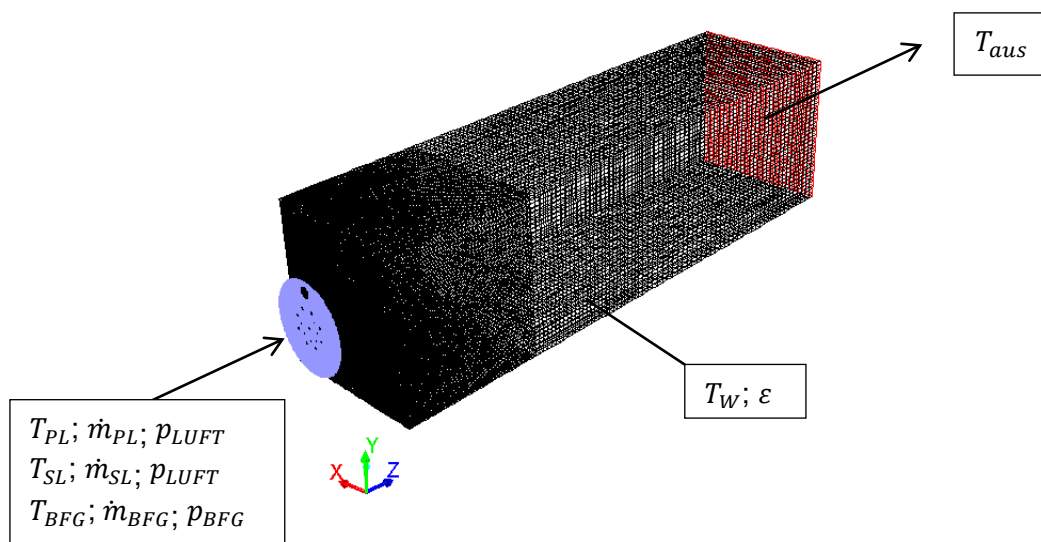


Abbildung 7-1: Netzgitter für die Simulation des Gichtgasbrenners

Der Brenner ist am vorderen Bereich der Brennkammer angeschlossen. Dort werden die Massenströme des Brennstoffs ( $\dot{m}_{BFG}$ ) und des Oxidators ( $\dot{m}_{PL}$ ,  $\dot{m}_{SL}$ ) mit gegebenem Druck ( $p_{LUFT}$ ,  $p_{BFG}$ ) und gegebener Temperatur ( $T_{PL}$ ,  $T_{SL}$ ,  $T_{BFG}$ ) eingebracht. Der Mantel der Brennkammer und die Wand, die den runden Einlass umgibt, haben die konstante Wandtemperatur  $T_W$ . Bei Berücksichtigung der Strahlung besitzen dieselben Wände einen Emissionsgrad  $\varepsilon$  von 0,9. Im hinteren Bereich der Brennkammer wird die Austrittstemperatur  $T_{aus}$  vorgegeben.

Tabelle 7-1: Randbedingungen

Randbedingungen		
Massenstrom Primärluft	$\dot{m}_{PL}$	14,257 kg/s
Massenstrom Sekundärluft	$\dot{m}_{SL}$	2,358 kg/s
Massenstrom BFG	$\dot{m}_{BFG}$	19,46 kg/s
Temperatur Primärluft	$T_{PL}$	451,7 K
Temperatur Sekundärluft	$T_{SL}$	451,7 K
Temperatur Gichtgas	$T_{BFG}$	503,8 K
Eintrittsdruck Luft	$p_{LUFT}$	67,7 mbar
Eintrittsdruck BFG	$p_{BFG}$	39,9 mbar
Emissionsgrad	$\varepsilon$	0,9 -
Wandtemperatur	$T_W$	1273 K
Austrittstemperatur	$T_{aus}$	1373 K

## 7.1 Verbrennungsmodelluntersuchung

In diesem Abschnitt werden die mit der 2D-Simulation eingeschränkten Verbrennungsmodelle am Gichtgasbrenner angewandt. Dabei hat die fiktive Wand, welche die Brennkammer begrenzt, die konstante Wandtemperatur  $T_W$ . Die Strahlung wird in der ersten Untersuchung, um die Rechenzeit zu verkürzen, nicht berücksichtigt. Anschließend werden ähnliche Untersuchungen mit Berücksichtigung der Wärmestrahlung durchgeführt. Als Turbulenzmodell dient das Realizable k- $\varepsilon$  Modell, welches bei drallbehafteten Strömungen gute Ergebnisse liefert (Ansys, 2010). Durch Verwendung verschiedener Reaktionsmechanismen und Verbrennungsmodelle werden Vergleiche hinsichtlich Temperatur, Geschwindigkeit und Spezies gemacht.

### 7.1.1 Verbrennungsmodelluntersuchung ohne Strahlung

Nachfolgend in Abbildung 7-2 der Überblick über die durchgeführten Simulationen zur Verbrennungsmodelluntersuchung.

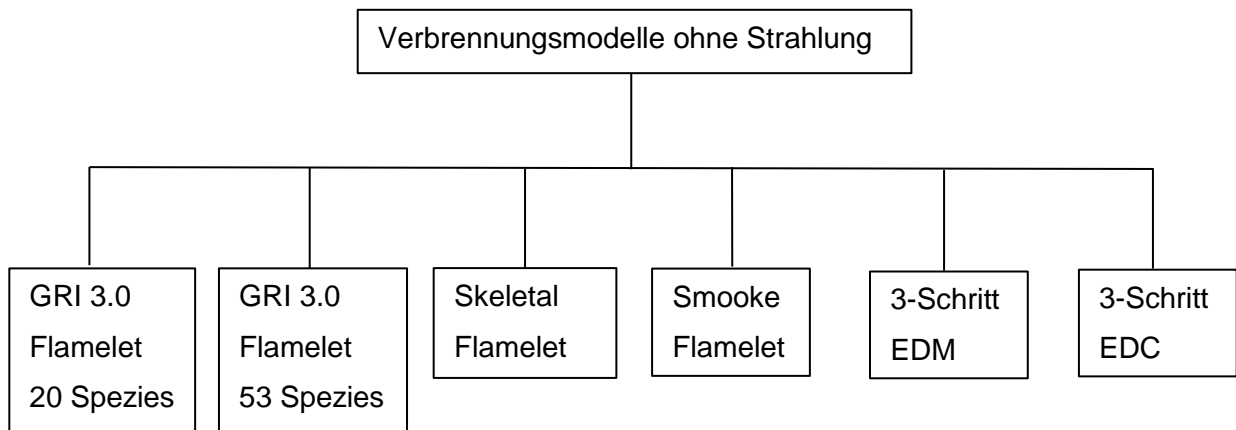


Abbildung 7-2: Verbrennungsmodelle ohne Strahlung

Zusätzlich zu den in den 2D-Simulationen untersuchten GRI und Skeletal Mechanismen wurde der Mechanismus nach Smooke für die Simulation des Gichtgasbrenners verwendet. Dieser Mechanismus verwendet 46 Reaktionen und 16 Spezies. Der GRI 3.0 Mechanismus verwendet grundsätzlich 53 verschiedene Spezies. Um bei Erstellung der PDF den Rechenaufwand zu verringern, wurde die maximale Anzahl der Spezies auf 20 limitiert. Fluent wählt die Spezies mit den größten Molanteilen aus. Die Auswirkung der Limitierung auf 20 Spezies ist gering. Bei Verwendung aller 53 Spezies können weitere Zwischenspezies betrachtet werden (Abbildung 7-4). Gut ersichtlich ist, dass diese Zwischenspezies in sehr geringen Konzentrationen auftreten. In Abbildung 7-3 sind die Temperaturprofile der Flameletmodelle, des EDM und des EDC-Modells dargestellt. Das EDM und EDC-Modell verwenden beide den 3-Schritt Holzgas Mechanismus, da dieser für das Gichtgas am besten funktioniert. In die Brennkammer sind Schnittebenen gelegt. Auf diesen sind die Temperaturprofile ersichtlich. Bei den Flameletmodellen sind die Felder sehr ähnlich und die Größenordnung der Maximaltemperatur liegt in der Nähe der adiabaten Flammentemperatur von ca. 1650 K. Das EDM und EDC-Modell überschätzen die Temperatur aufgrund des „mixed=burnt“ Ansatzes. Aufgrund der Skalierung der Temperatur mit maximal 1700 K entstehen in den Temperaturprofilen weiße Bereiche. In diesen Bereichen ist die Temperatur höher als 1700 K. Bei allen sechs Ansichten ist zu beobachten, dass die Flamme entlang der Z-Achse nach rechts und in die negative Richtung der Y-Achse wandert. Es lässt sich daraus schließen, dass die Ursache dafür in der Brennergeometrie liegt.

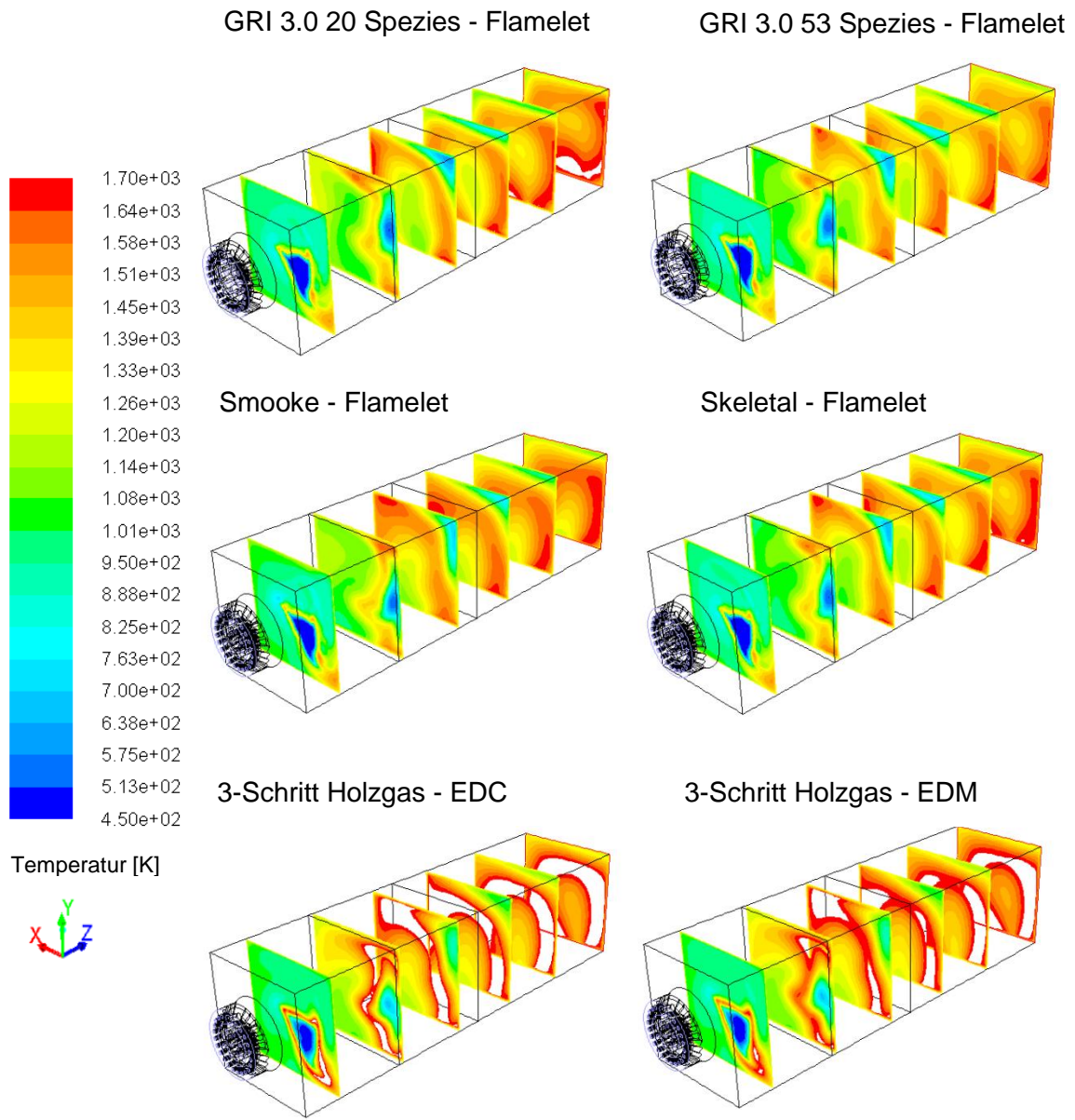


Abbildung 7-3: Temperaturprofile in XY-Schnittebenen

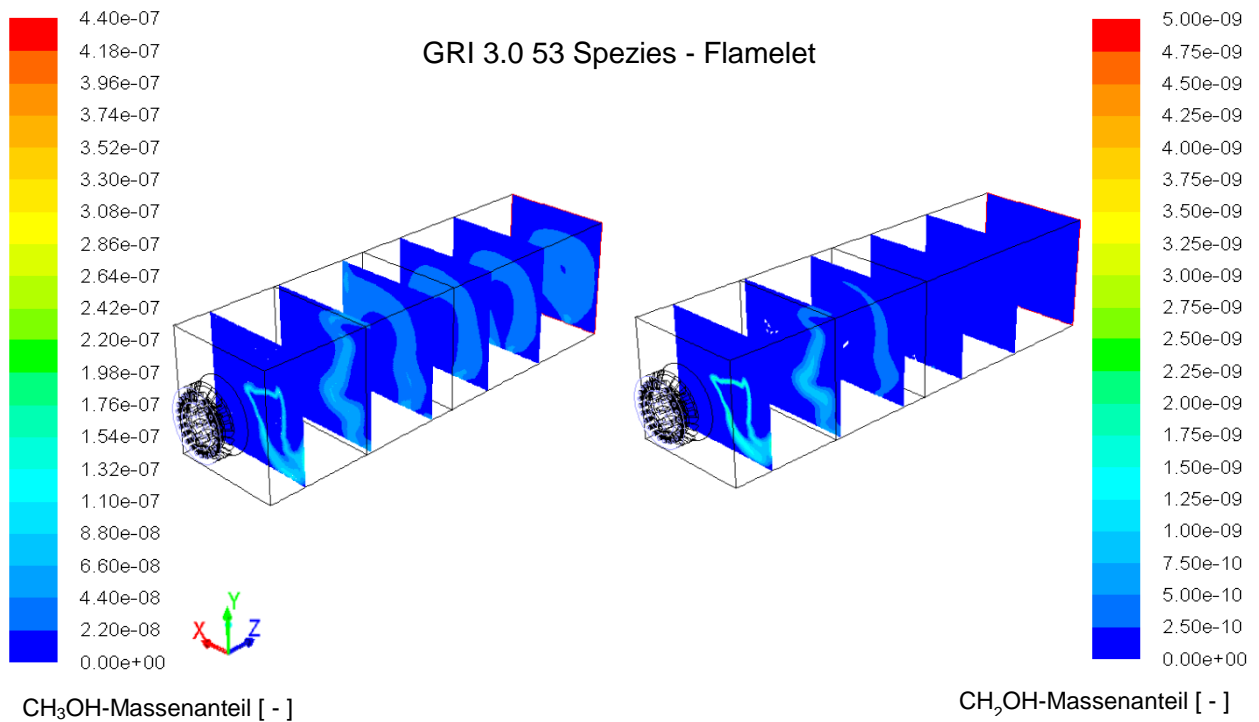


Abbildung 7-4:  $\text{CH}_3\text{OH}$ - und  $\text{CH}_2\text{OH}$  Massenanteile

Die Geschwindigkeitsprofile der Gichtgasverbrennung sind im horizontalen Mittelschnitt (XZ-Ebene), sowie im vertikalen Mittelschnitt (YZ-Ebene) in der folgenden Abbildung 7-5 dargestellt. Zwischen den Geschwindigkeitsprofilen der Flameletmodelle mit den unterschiedlichen Reaktionsmechanismen sind keine Unterschiede zu erkennen. Aufgrund dessen ist hier auch nur ein Vergleich zwischen dem Skeletal-Flamelet und dem 3-Schritt EDM abgebildet. In der Reaktionszone sind beim EDM leicht höhere Geschwindigkeiten zu erkennen. Bei Betrachtung des Vertikalschnitts erkennt man die stark nach unten gerichtete Strömung.

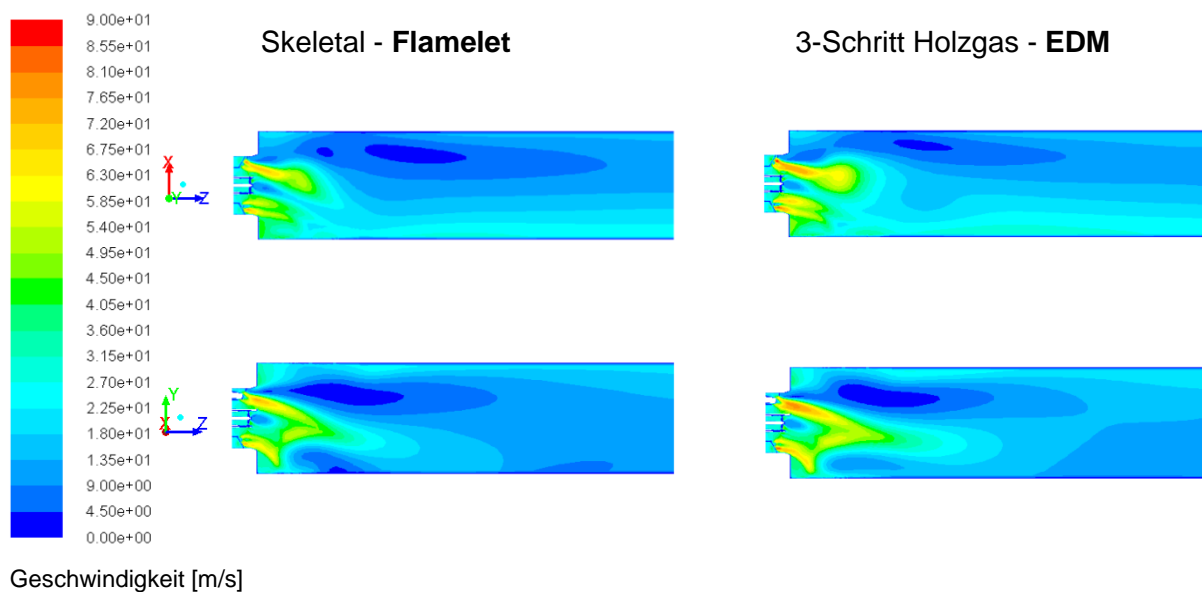




Abbildung 7-5: Geschwindigkeitsprofile im Horizontal (XZ)- und Vertikalschnitt (YZ)

In Abbildung 7-6 ist der OH-Massenanteil dargestellt. Das OH-Radikal ist eine Zwischenspezies der Verbrennung. Die Änderung in einem bestimmten Bereich charakterisiert die Flammenfront (Poinsot & Veynant, 2005). Ein weiterer Grund für die Betrachtung des OH-Radikales ist, dass es in Experimenten mit der LIF-Spektroskopie (laserinduzierte Fluoreszenz) visualisiert werden kann (Warnatz, Maas, & Dibble, 2001). Bei beiden Modellen ist neben der Flammenfront der Hauptreaktionszone eine Flammenfront ausgehend von der oberen Brennkammerwand zu erkennen. Das Gichtgas entzündet sich an der heißen Brennkammerwand. Beim Skeletal-Flamelet ist am Austritt eine dritte Flammenfront vorhanden. Diese ist beim GRI 3.0 kaum auszumachen.

Die Auswertung von Zwischenspezies kann nur mit Mechanismen erfolgen, welche deren Bildung berücksichtigen. Beim EDM ist dies nicht möglich. Bei den EDC-Modellen ergeben sich bei Anwendung von umfangreichen Mechanismen, welche das OH-Radikal berücksichtigen, zu große Rechenzeiten.

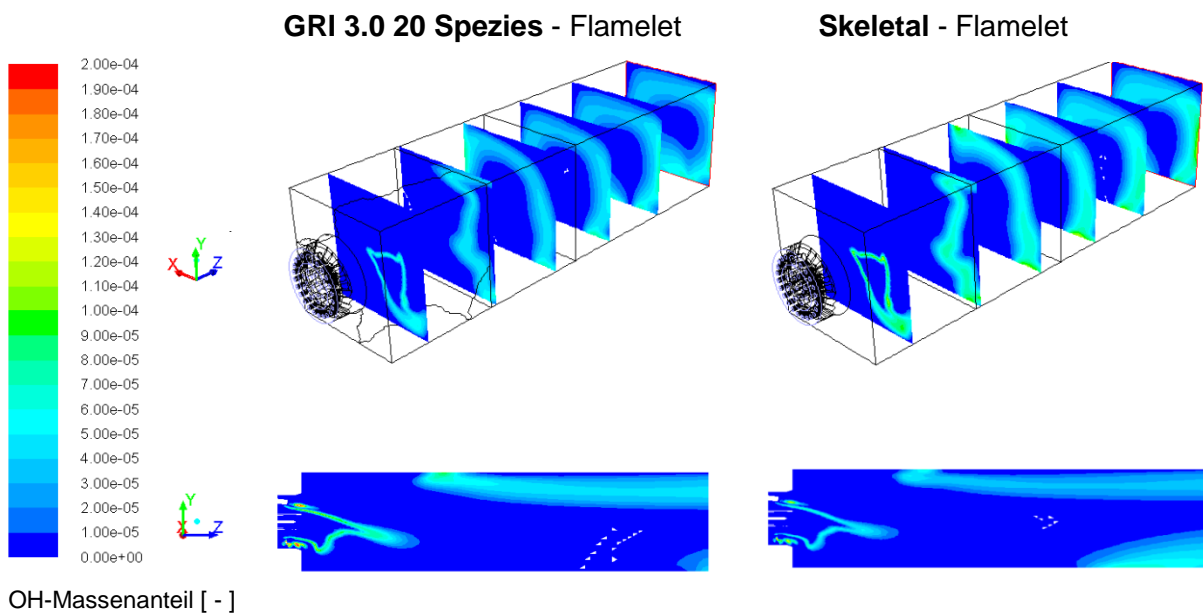


Abbildung 7-6: OH-Massenanteile in XY-Ebenen und YZ-Ebene

Eine weitere Zwischenspezies der Verbrennung ist das Formaldehyd ( $\text{CH}_2\text{O}$ )-Radikal. Es eignet sich als Indikator-Radikal für die Zündung, da es die maximalen Konzentrationen in Bereichen großer Wärmefreisetzung erreicht (Joos, 2006). Das  $\text{CH}_2\text{O}$ - und das OH-Radikal sind in allen für die Flameletmodelle verwendeten Mechanismen vorhanden.

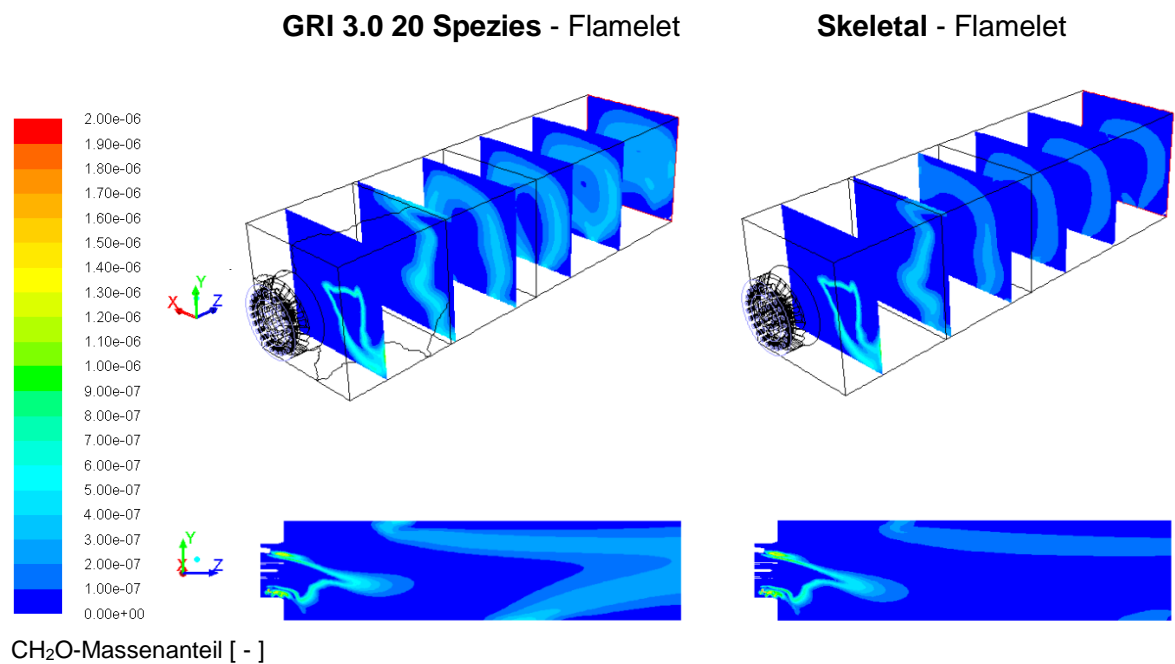


Abbildung 7-7: CH<sub>2</sub>O-Massenanteile in XY-Ebenen und YZ-Ebene

Die Zonen hoher CH<sub>2</sub>O-Massenanteile liegen in den gleichen Bereichen wie die Zonen hoher OH-Konzentrationen (Abbildung 7-7). Auffällig ist, dass die Reaktionszone stark nach unten gerichtet ist. Beim GRI 3.0 ist der Bereich auftretender CH<sub>2</sub>O-Radikale am Austritt etwas größer wie beim Skeletal-Mechanismus. Dies ist darauf zurückzuführen, dass der GRI 3.0 mehr Reaktionen enthält in denen CH<sub>2</sub>O gebildet wird. Abbildung 7-8 zeigt links den CO- und rechts den OH-Massenanteil bei Simulation mit dem Mechanismus nach Smooke. Gut ersichtlich ist, dass in Zonen mit null OH-Massenanteil CO auftritt. Dies lässt sich darauf zurückführen, dass dort das eingebrachte Brennstoff-Kohlenmonoxid noch nicht verbrannt ist und somit den Kernbereich der Flamme darstellt. In den Zonen hoher CO-Massenanteile ist die Temperatur nicht so hoch, während sie dort am Größten ist, wo OH-Radikale auftreten (Abbildung 7-9).

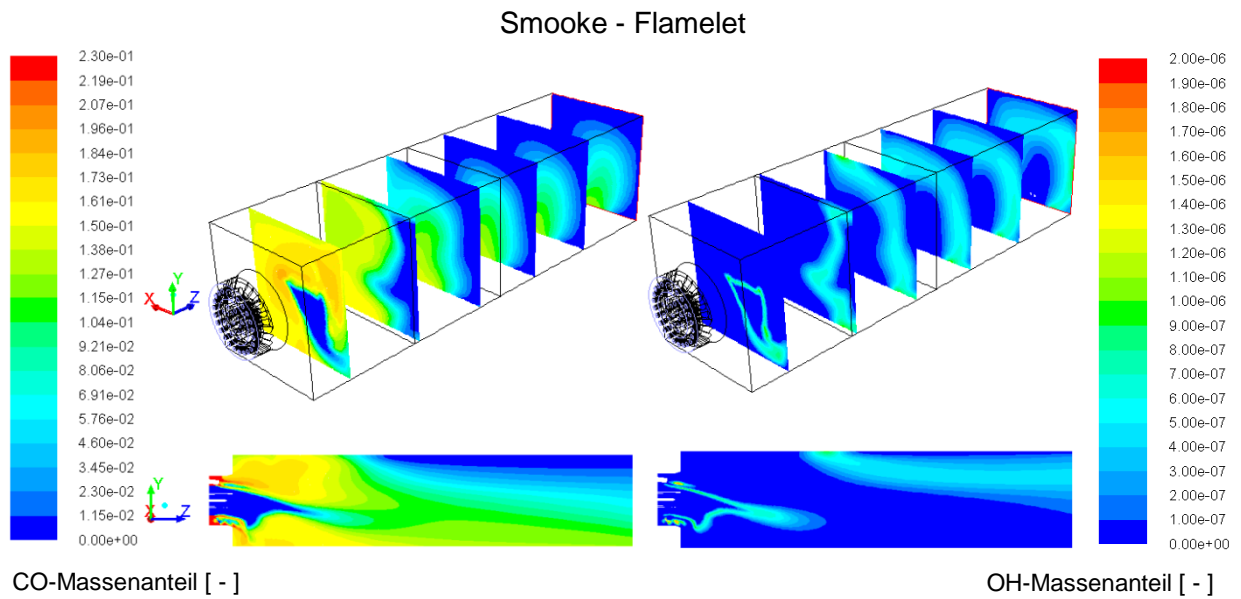


Abbildung 7-8: CO- und OH-Massenanteile in XY-Ebenen und YZ-Ebene

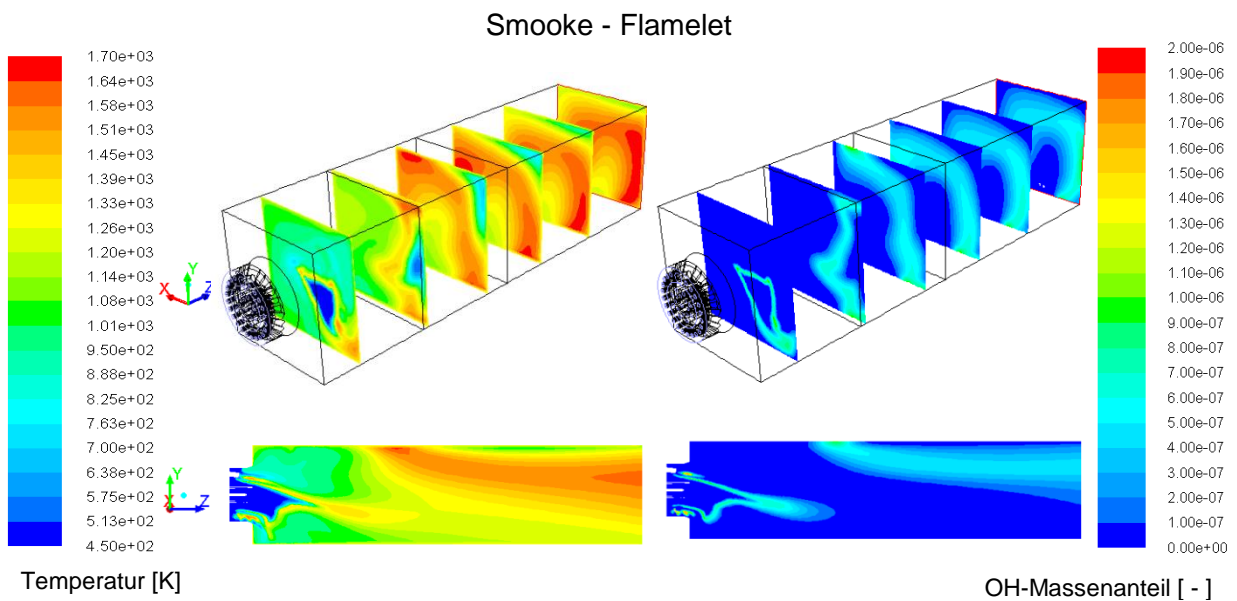


Abbildung 7-9: Temperaturprofile und OH-Massenanteile in XY-Ebenen und YZ-Ebene

Der Vergleich der verschiedenen Verbrennungsmodelle liefert einen großen Unterschied in den Temperaturprofilen zwischen den Flameletmodellen (GRI 3.0, Skeletal, Smooke) und dem EDM bzw. EDC-Modell. Zwischen dem EDM und EDC-Modell selbst sind keine nennenswerten Unterschiede vorhanden. In Tabelle 7-2 sind die flächengemittelte Temperatur und die Molanteile von Kohlenmonoxid und Kohlendioxid angeführt. Das Temperaturniveau der Flameletmodelle ist mindestens um 100 K niedriger, was der chemisch realistischere Ansatz bedingt. Aufgrund des „mixed=burnt“-Prinzips reagieren die brennbaren Bestandteile beim EDM und EDC-Modell schneller aus. Daraus lässt sich der Schluss ziehen, dass die Molanteile des Kohlenmonoxids

am Brennkammeraustritt dieser Modelle im Vergleich zu den Flameletmodellen niedriger sind. Niedrigere Molanteile des Kohlenmonoxids ergeben höhere Molanteile des Kohlendioxids.

Tabelle 7-2: Flächengemittelte Austrittswerte

Surface Integrals at Outlet (Area-weighted average):	GRI 3.0 20 Spez.	Skeletal	Smooke	EDM	EDC
Temperatur $T$ [K]	1541,7	1520,6	1491,6	1638,3	1643,0
Molanteil $v_{CO}$ [-]	0,03447	0,03837	0,03744	0,02160	0,01817
Molanteil $v_{CO_2}$ [-]	0,22952	0,22796	0,21961	0,24360	0,24773

### 7.1.2 Verbrennungsmodelluntersuchung mit Strahlung (DO-Modell)

Nach Untersuchung der Verbrennungsmodelle ohne Berücksichtigung der Strahlung wird deren Einfluss anhand eines Vergleichs am Skeletal-Flameletmodell erläutert. Dazu wird das DO-Modell und als Graugasmodell das Weighted-Sum-of-Gray-Gas Modell (WSGGM) verwendet. In weiterer Folge werden neben den Ergebnissen des GRI 3.0 (20 Spezies) und des EDM die Ergebnisse der Simulation des Gichtgasbrenners mit dem chemischen Gleichgewicht angegeben (Abbildung 7-10).

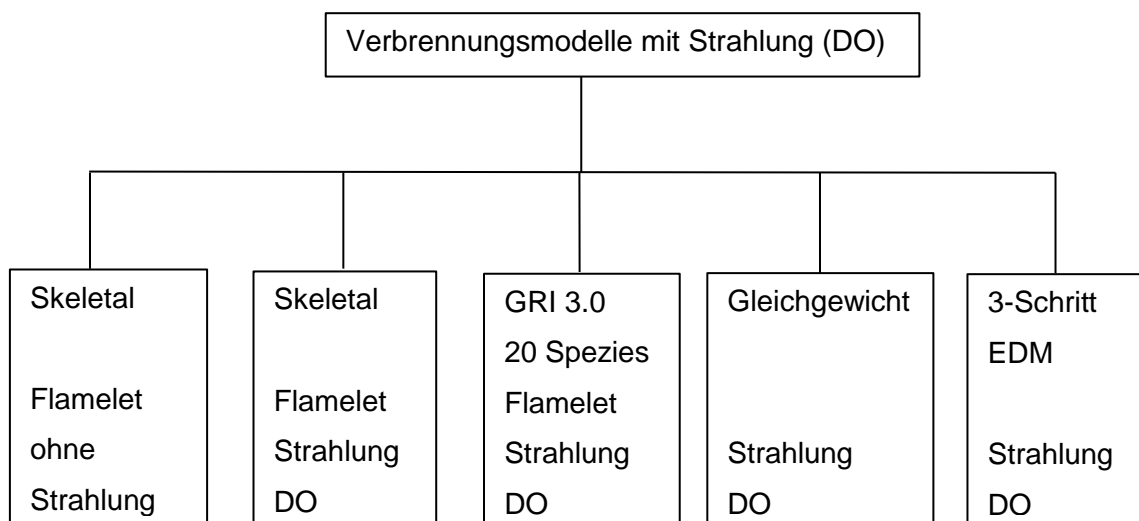


Abbildung 7-10: Verbrennungsmodelle mit Strahlung (DO)

Abbildung 7-11 zeigt die in die Brennkammer ein- und austretenden spezifischen Wärmeströme. In der linken Spalte sind die Wärmestromdichten des Flamelet-Skeletal bei Nichtberücksichtigung der Strahlung dargestellt. Der Brennkammer wird auf den Wandflächen, wo die Wandtemperatur  $T_w$  die Gastemperatur  $T$  übersteigt, ein Wärmestrom zugeführt.

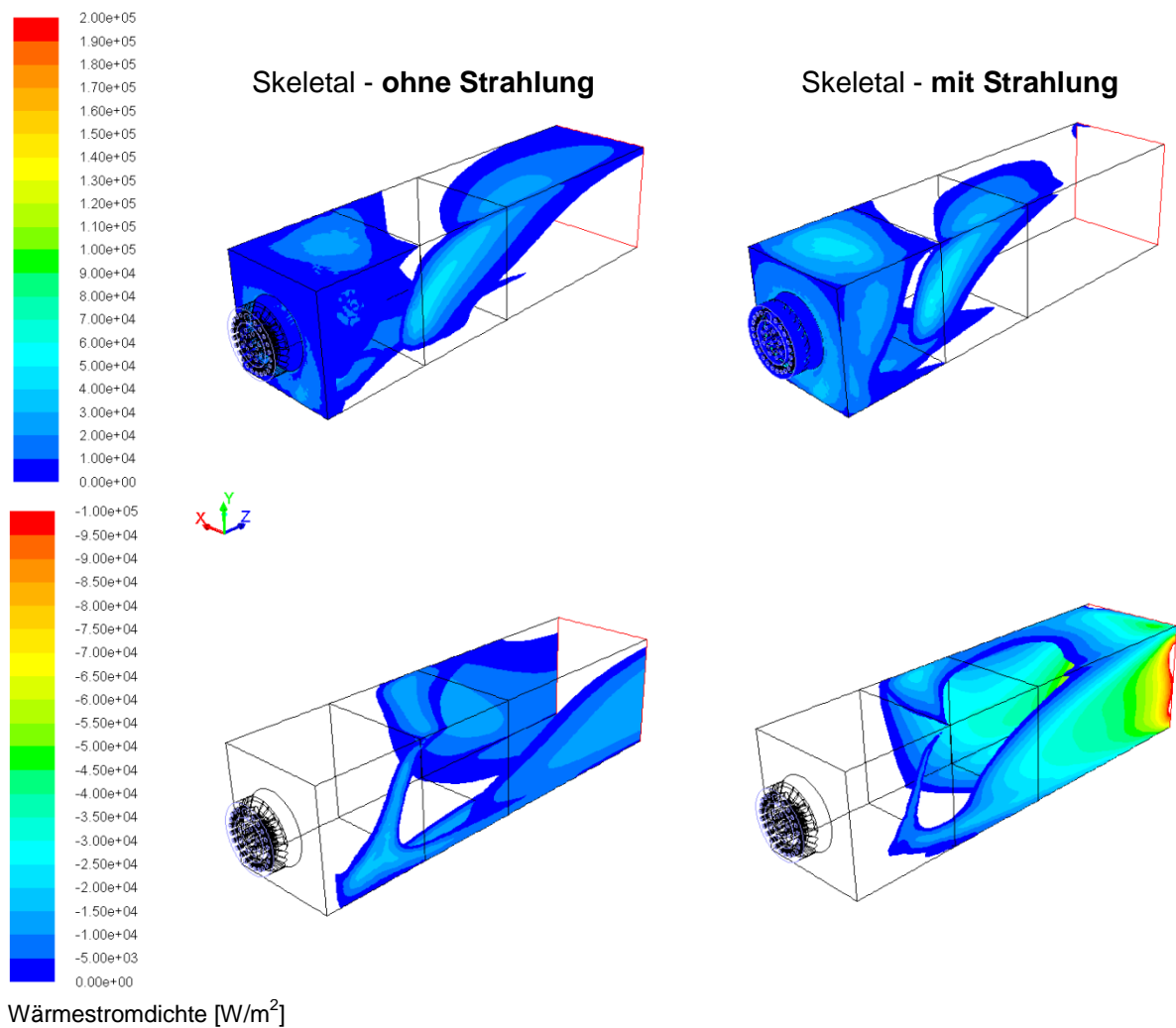


Abbildung 7-11: Wärmestromdichte auf der Brennkammerwand

Bei Betrachtung des Horizontal- und Vertikalschnitts ist dies gut ersichtlich (Abbildung 7-12). Wärmezufuhr ist in jenen Bereichen der Brennkammerwand zu beobachten, in denen die Verbrennungstemperatur unter der Wandtemperatur von 1273 K liegt. Wird die Strahlung (hier mit dem DO-Modell) berücksichtigt, wird das Niveau der zu- und abgeführten Wärme angehoben. Bemerkenswert ist allerdings, dass dies auf die Temperatur in der Brennkammer nur eine geringe Auswirkung hat. Bei Einbeziehen eines Strahlungsmodells ist ein leichter Rückgang im Temperaturniveau festzustellen.

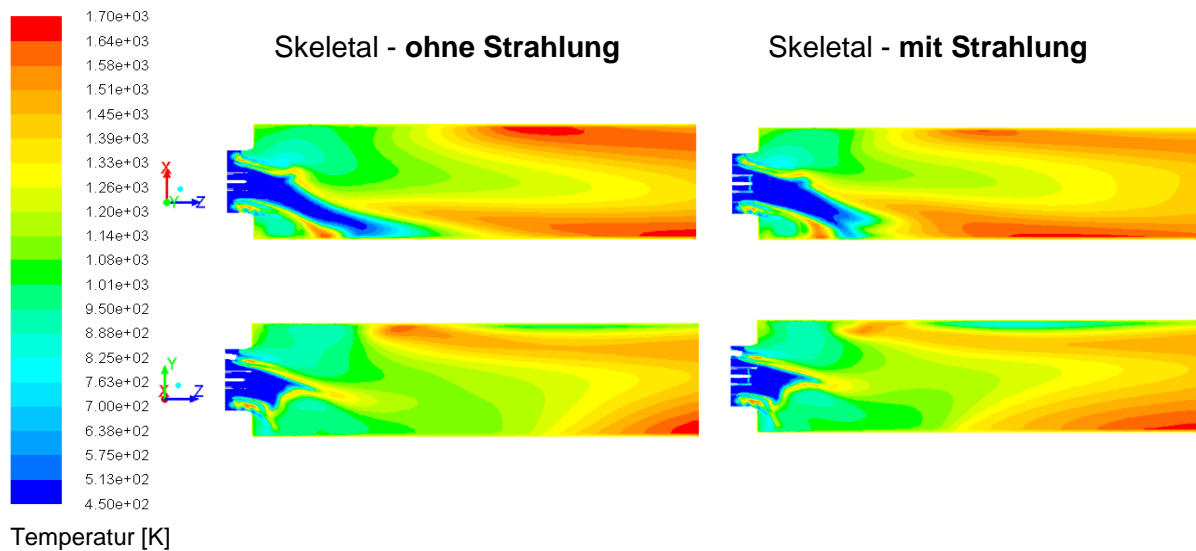


Abbildung 7-12: Skeletal-Temperaturprofile im Horizontal- und Vertikalschnitt

Bei Vergleich des GRI 3.0-Flameletmodells mit dem chemischen Gleichgewicht sind in den Temperaturprofilen der Abbildung 7-13 kaum Unterschiede feststellbar. Im YZ-Schnitt ist die Temperatur im Austrittsbereich geringfügig größer. Dies gilt ebenfalls für die Wärmestromdichten. Bei Betrachtung der Zwischenspezies OH sind erkennbare Unterschiede vorhanden (Abbildung 7-14). Da der GRI 3.0 mehr Spezies betrachtet als das chemische Gleichgewicht, ergeben sich auch leicht höhere Anteile des OH-Radikales.

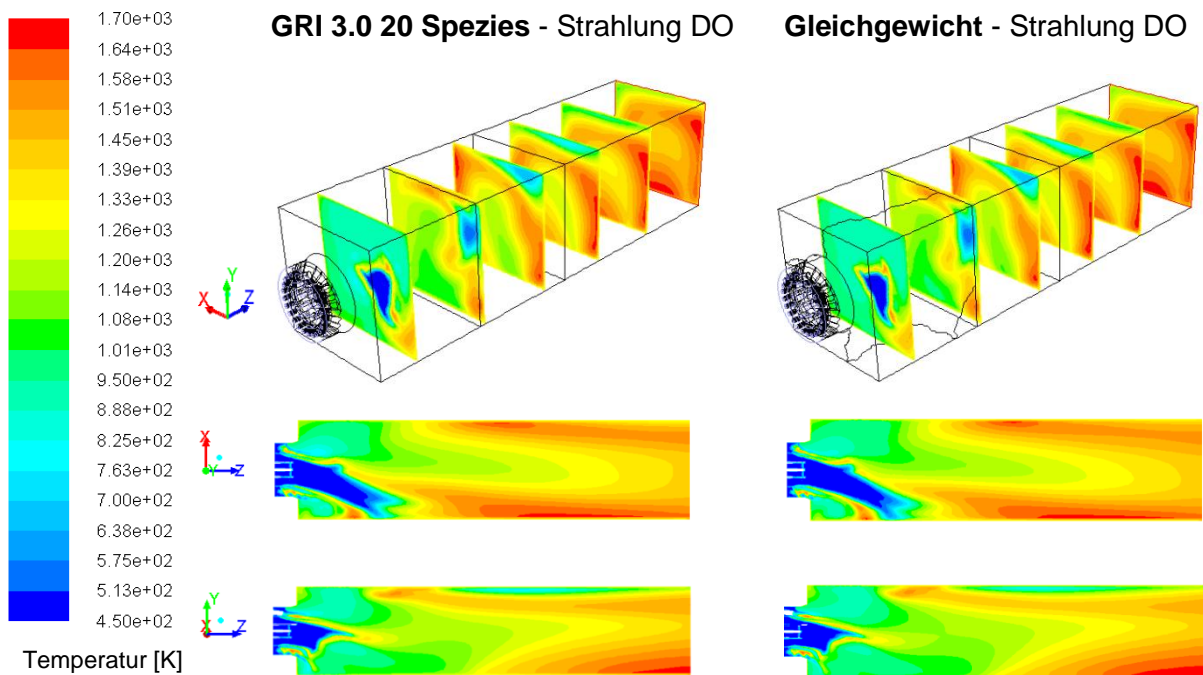


Abbildung 7-13: Vergleich der Temperaturprofile des GRI 3.0 und des Gleichgewichts

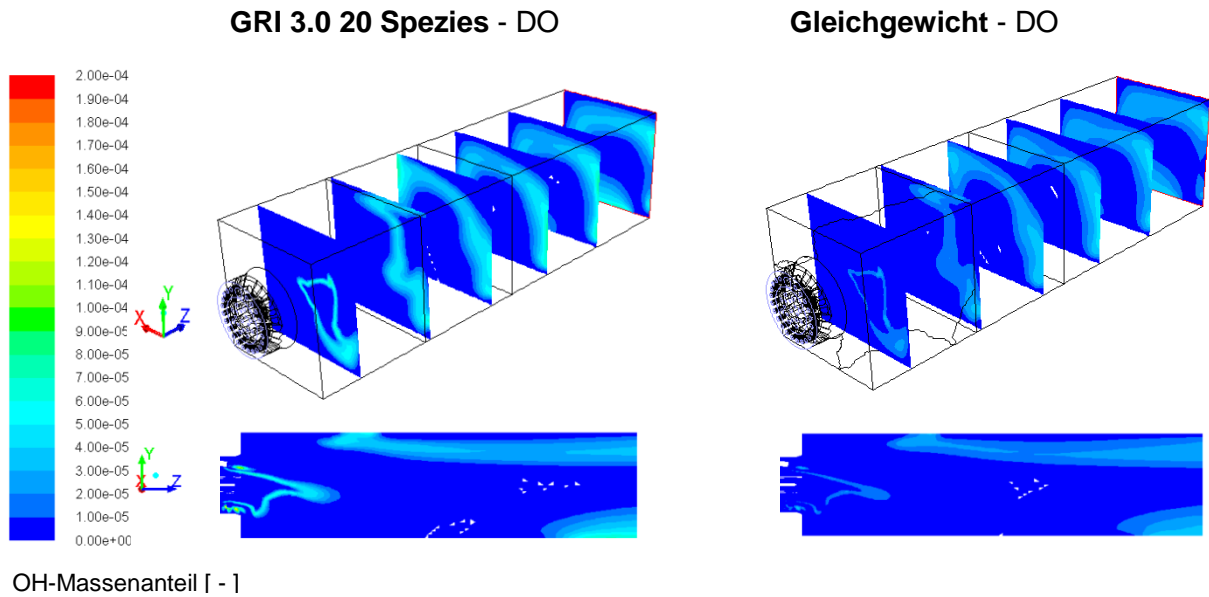


Abbildung 7-14: Vergleich der OH-Massenanteile des GRI 3.0 und des Gleichgewichts

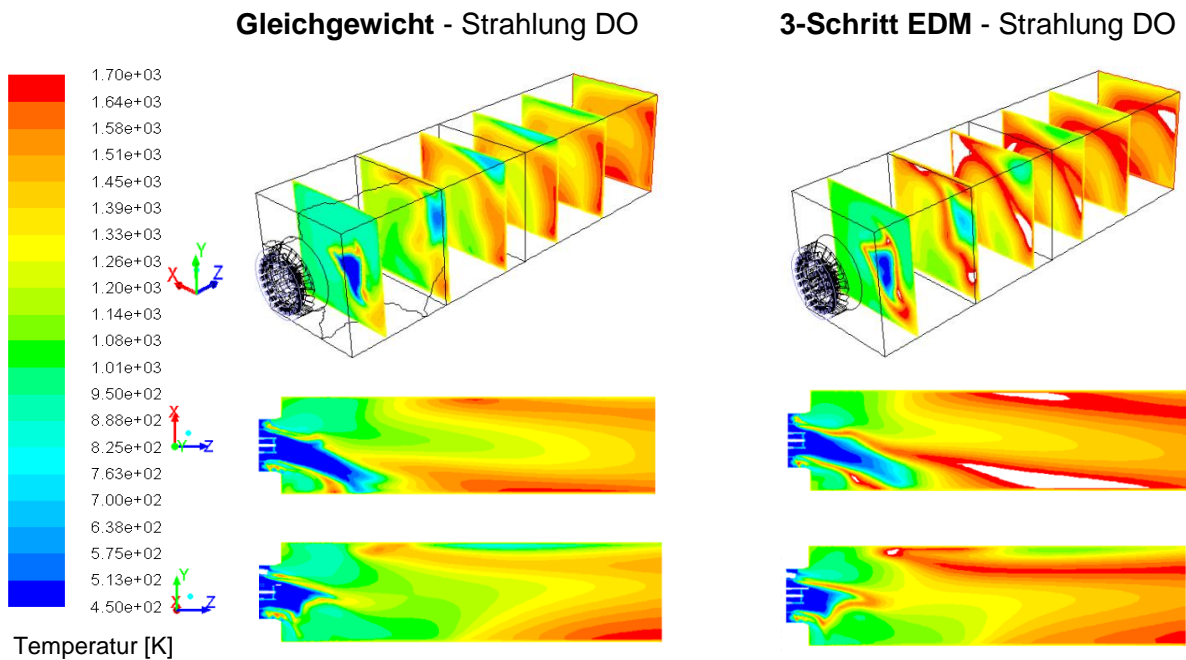


Abbildung 7-15: Vergleich der Temperaturprofile des Gleichgewichts des 3-Schritt EDM

Wiederum höhere Temperaturen, auch bei Berücksichtigung der Strahlung, liefert die Simulation mit dem EDM 3-Schritt Modell (Abbildung 7-15). Da die Temperatur beim EDM teilweise höher als 1700 K ist, sind gewisse Teile der Schnitte nicht vollständig farblich gekennzeichnet. Diese Bereiche höherer Temperatur sind weiß dargestellt. Die Ausrichtung der Flamme und ihre Form im Brennraum werden von allen Modellen annähernd gleich abgebildet. Bei Betrachtung der gemittelten Austrittswerte erkennt man die niedrigeren Temperaturen bei Berücksichtigung der Strahlung mit dem Skeletal, dem GRI 3.0 und dem chemischen Gleichgewicht im Vergleich



mit dem Skeletal ohne Strahlung (Tabelle 7-3). Wiederum sind die Brennstoffkomponenten beim EDM früher ausreagiert und am Austritt ergeben sich somit kleinere Molanteile ( $v_{CH_4}$ ,  $v_{CO}$ ).

Tabelle 7-3: Flächengemittelte Austrittswerte bei Strahlungsberücksichtigung

Surface Integrals at Outlet (Area-weighted average):	Skeletal ohne Strahlung	Skeletal DO	GRI 3.0 20 Spez. DO	Gleichgewicht DO	EDM DO
Temperatur $T$ [K]	1520,58	1485,76	1484,59	1491,33	1549,08
Molanteil $v_{CH_4}$ [-]	6,75E-04	7,27E-04	5,40E-04	1,87E-06	1,90E-04
Molanteil $v_{CO}$ [-]	3,84E-02	4,17E-02	4,13E-02	4,14E-02	2,71E-02

### 7.1.3 Verbrennungsmodelluntersuchung mit Strahlung (P1-Modell)

In einer weiteren Untersuchung wurde das P1-Strahlungsmodell auf unterschiedliche Verbrennungsmodelle angewandt (Abbildung 7-16). In diesem Fall ist erkennbar, dass dieses Modell mit dem Skeletal und dem 3-Schritt EDM nicht funktioniert, da die Simulation nach dem Start sofort divergiert. Mit dem GRI 3.0 (20 Spezies) und dem chemischen Gleichgewicht funktioniert das P1-Modell. Der Unterschied zwischen diesen beiden ist, wie bereits in 7.1.2 erwähnt, sehr gering. Der Unterschied in den Ergebnissen zwischen dem P1- und dem DO-Strahlungsmodell wird im nächsten Abschnitt beschrieben.

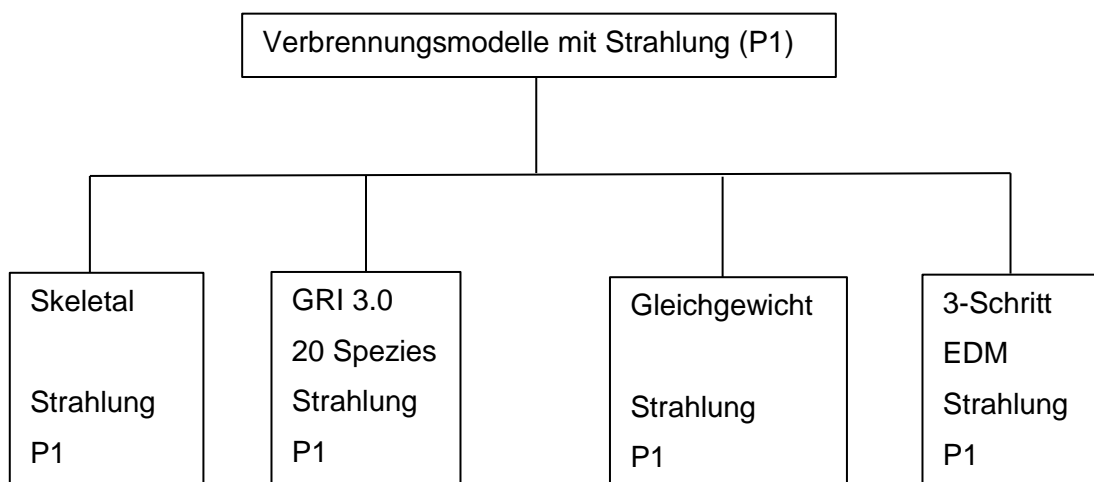


Abbildung 7-16: Verbrennungsmodelle mit Strahlung (P1)

## 7.2 Strahlungsmodelluntersuchung

In diesem Abschnitt werden die Auswirkungen auf die Ergebnisse der Simulation des Gichtgasbrenners bei Verwendung verschiedener Strahlungsmodelle angeführt (Abbildung 7-17). Die Randbedingungen wurden bereits am Beginn des Kapitels erwähnt. Als Verbrennungsmodell



wird das Flameletmodell mit dem GRI 3.0 (20 Spezies) und zur Turbulenzmodellierung, wie bisher, das Realizable k- $\epsilon$  Modell verwendet.

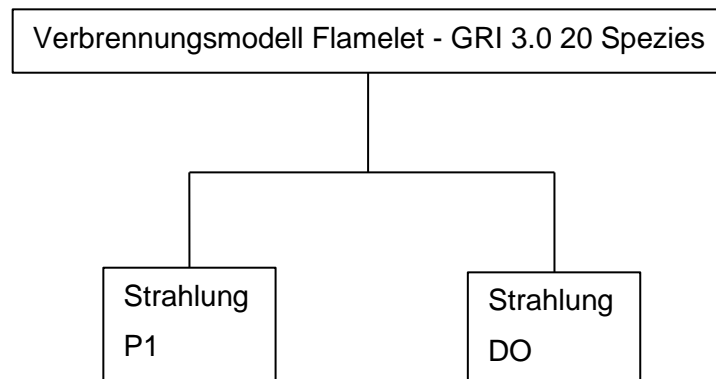


Abbildung 7-17: Vergleich der Strahlungsmodelle

Die Temperaturprofile unterscheiden sich bei Verwendung unterschiedlicher Strahlungsmodelle nur geringfügig (Abbildung 7-18). In der isometrischen Ansicht ist erkennbar, dass am Austritt der Brennkammer das Temperaturniveau beim DO-Strahlungsmodell geringfügig höher ist. Dies bestätigt sich auch, wenn man die flächengemittelten Temperaturen vergleicht. Das DO-Modell liefert am Austritt eine Temperatur von 1484,6 K, während sich beim P1-Modell eine Temperatur von 1476,2 K einstellt.

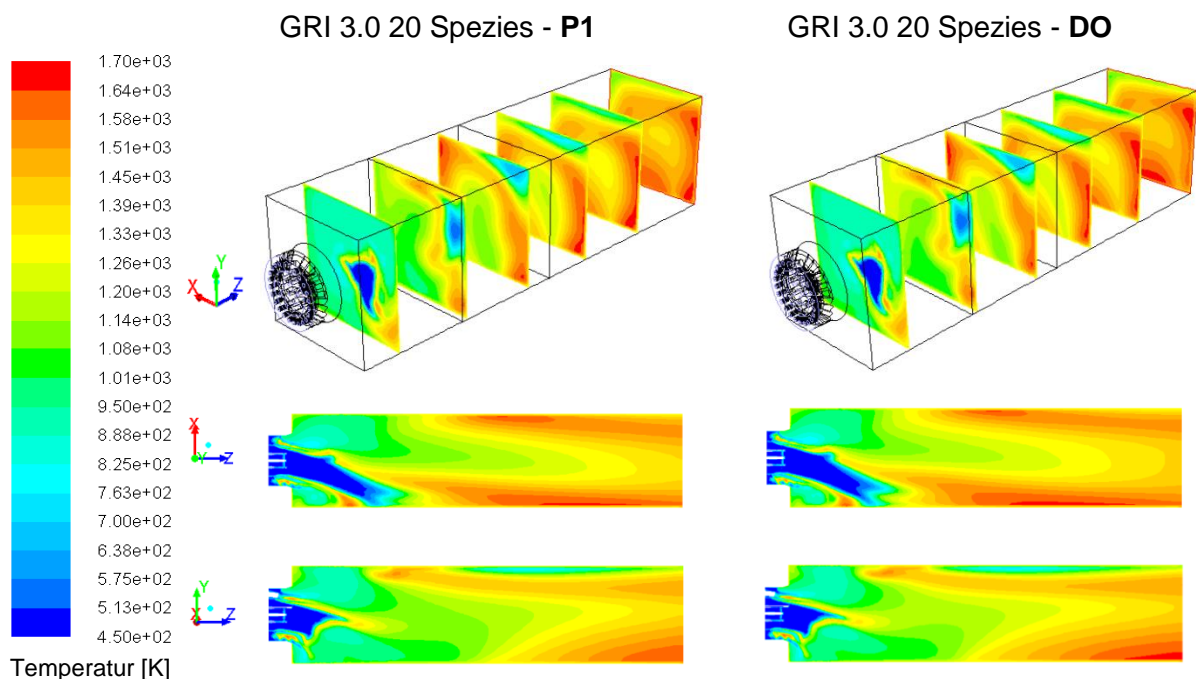


Abbildung 7-18: Vergleich der Temperaturprofile bei unterschiedlichen Strahlungsmodellen

Das Geschwindigkeitsprofil wird durch die unterschiedlichen Modelle zur Strahlungsberücksichtigung nicht beeinflusst. Ebenso stimmen die Verteilungen der Massenanteile der Zwischenspezies (OH, CH<sub>2</sub>O) überein (Abbildung 7-19).

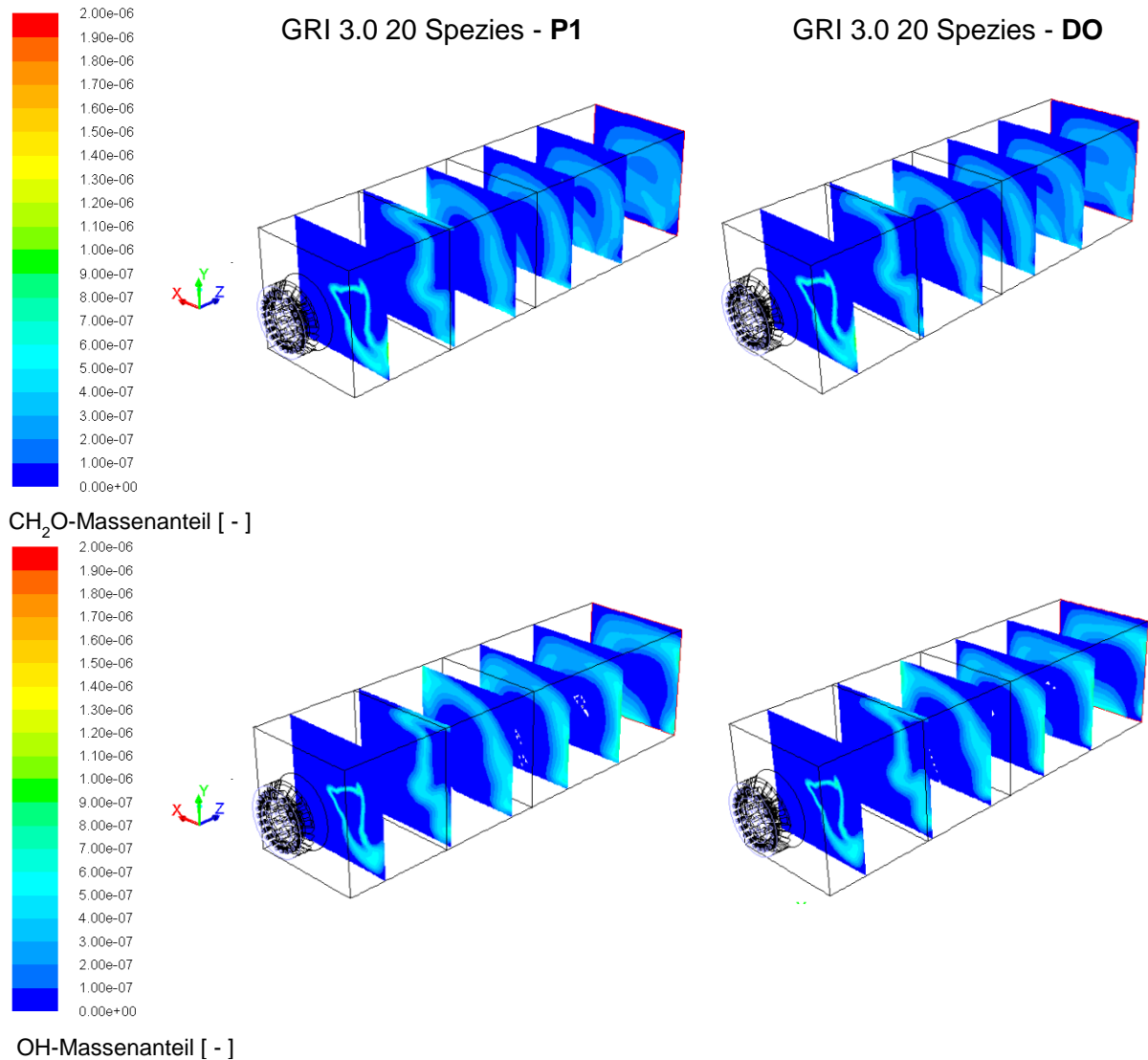


Abbildung 7-19: OH- und CH<sub>2</sub>O-Massenanteile bei unterschiedlichen Strahlungsmodellen

Der wesentliche Unterschied zwischen dem P1- und dem DO-Strahlungsmodell liegt in der unterschiedlichen Vorhersage der Wärmeströme. Das P1-Modell überschätzt die Wärmestromdichten. Darauf verweist auch die Literatur (Ansys, 2010). In Abbildung 7-20 sind die spezifischen Wärmeströme dargestellt. In der linken Spalte sind die Ergebnisse des P1-Modells und in der rechten Spalten die des DO-Modells dargestellt. Vor allem im vorderen Bereich der Brennkammer, dort wo Wärme zugeführt wird, ist die Wärmestromdichte des P1-Modells wesentlich höher als bei Berücksichtigung der Strahlung mit dem DO-Modell. Im hinteren Teil sind die Unterschiede der beiden Modelle weniger gravierend. Zu erwarten wäre, dass aufgrund der deutlich größeren eingebrachten Wärmeströme beim P1-Modell ein höheres Temperaturniveau

in der Brennkammer erreicht wird. Jedoch sind mit dem P1-Modell die Temperaturen, bei Vergleich mit dem DO-Modell, sogar geringfügig niedriger. Daraus kann man schließen, dass trotz der deutlich unterschiedlichen Bestimmung der Wärmestromdichten das Temperaturprofil kaum beeinflusst wird.

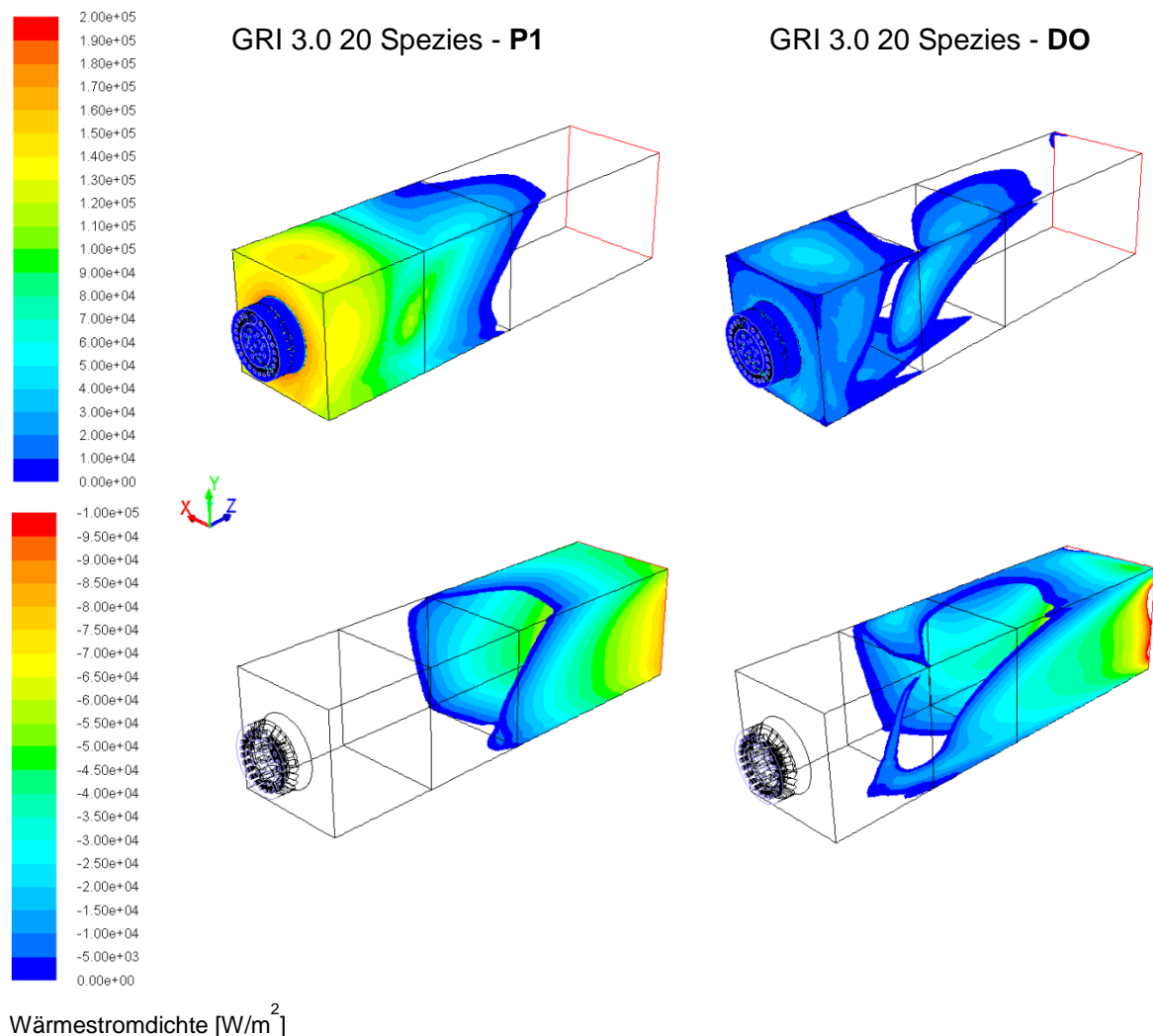


Abbildung 7-20: Wärmestromdichten bei unterschiedlicher Strahlungsmodellierung

### 7.3 Turbulenzmodelluntersuchung

Zur Simulation der reaktiven Strömung wurden das Realizable  $k-\epsilon$  und das RSM Turbulenzmodell verwendet. Der Einfluss des jeweiligen Modells wurde an einem Flamelet Verbrennungsmodell mit GRI 3.0 (20 Spezies) und P1-Strahlungsmodell untersucht (Abbildung 7-21). Diese Berechnungen basieren ebenfalls auf den bisherigen Randbedingungen. Um den Rechenaufwand klein zu halten wird die RSM-Simulation mit den Ergebnissen einer Realizable  $k-\epsilon$  Simula-

tion initialisiert. Außerdem treten bei direkter Verwendung des RSM oft Konvergenzprobleme auf.

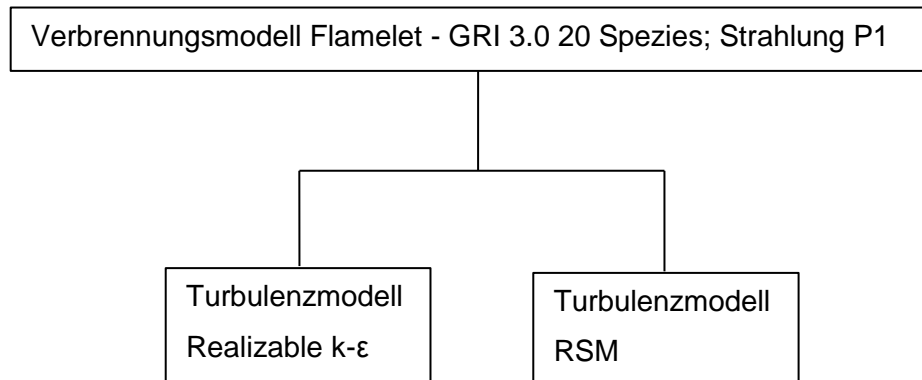


Abbildung 7-21: Vergleich der Turbulenzmodelle

Das Turbulenzmodell hat einen erheblichen Einfluss auf die Flammenform und somit auch auf das Temperaturprofil (Abbildung 7-22). Im Horizontalschnitt (XZ-Ebene) ist zu erkennen, dass beim RSM die Flamme weniger stark nach unten abgelenkt wird und sich nicht so stark an die Wand anlegt. Der YZ-Schnitt zeigt, dass beim RSM die Flammenfront wesentlich länger ist. Deutlicher ist dies bei Betrachtung der Zwischenspezies  $\text{CH}_2\text{O}$  auszumachen (Abbildung 7-23). Die Reaktionszone ist ausgehend von der Brennkammerwand mit der Hauptreaktionszone verbunden. Bei Betrachtung der isometrischen Ansicht sieht man, dass die Temperaturen mit der Realizable  $k-\epsilon$  Simulation etwas höher sind. Ein wesentlicher Grund für die Unterschiede zwischen den beiden Modellen liegt darin, dass das RSM die Richtungsabhängigkeit des Spannungstensors berücksichtigt, was die vorliegende stark verdrallte Strömung besser abbildet.

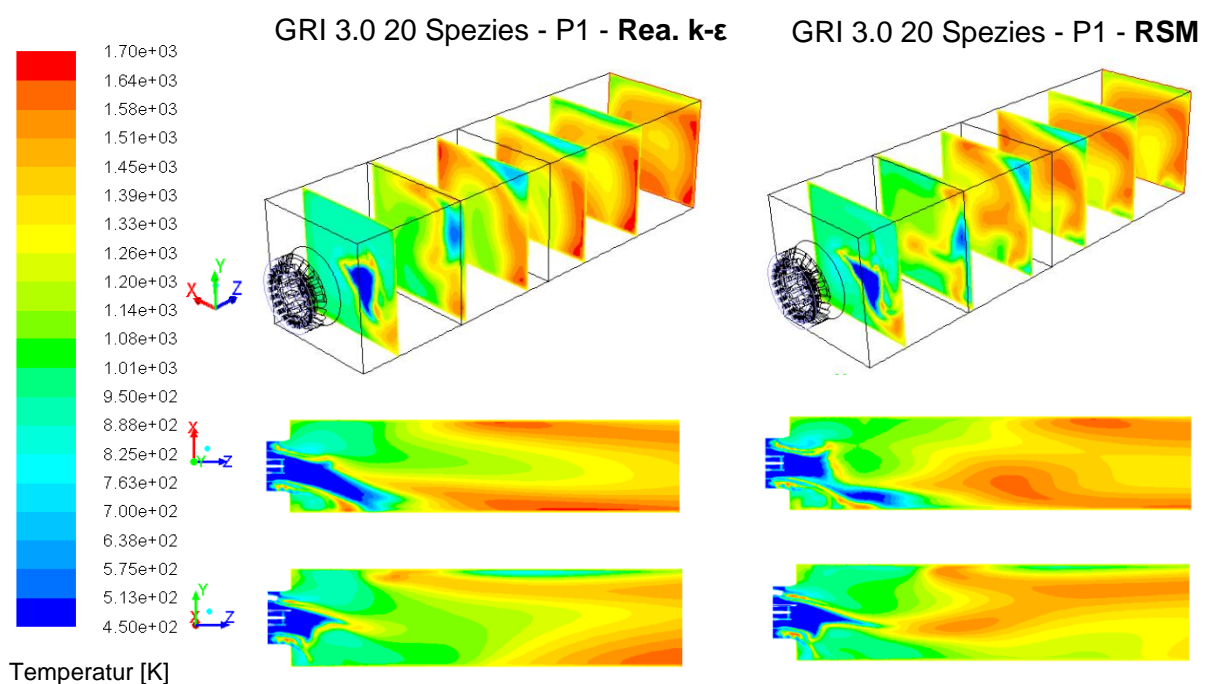


Abbildung 7-22: Vergleich der Temperaturprofile bei unterschiedlichen Turbulenzmodellen

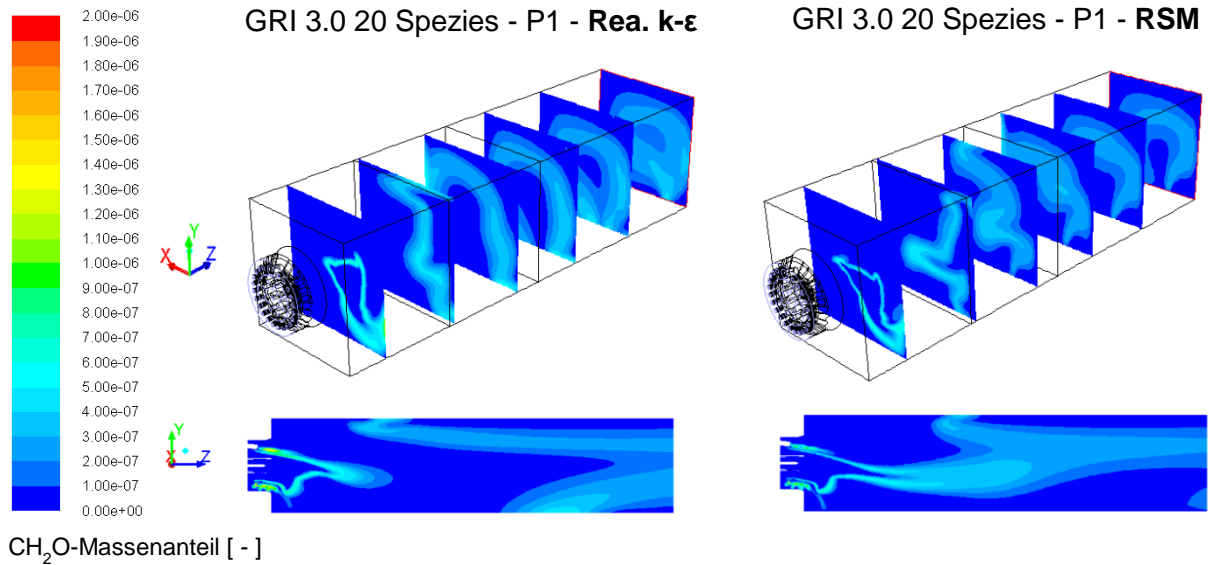


Abbildung 7-23: CH<sub>2</sub>O-Massenanteile bei unterschiedlichen Turbulenzmodellen

In den Geschwindigkeitsprofilen der Abbildung 7-24 sind Unterschiede zwischen den beiden Turbulenzmodellen feststellbar. Das Strömungsprofil beim RSM ist nicht so gestreckt und Verwirbelungen und Rückströmungen werden besser abgebildet.

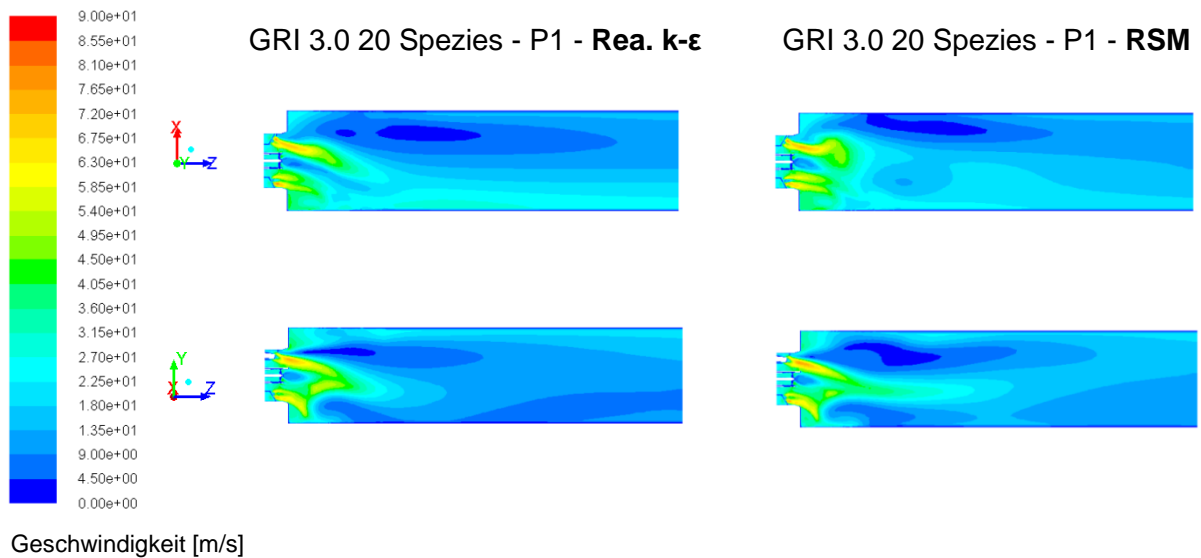


Abbildung 7-24: Vergleich der Geschwindigkeitsprofile bei unterschiedlichen Turbulenzmodellen

**Fazit:**

Für hochturbulente reaktive Strömungen ist die Wahl des Turbulenzmodells von entscheidender Bedeutung. Es hat starken Einfluss auf die Flammenform und das Temperaturprofil. Der vorliegende Gichtgasbrenner erzeugt zudem einen starken Drall und stellt daher zusätzliche Anforder-

rungen an das Turbulenzmodell. Bei Vergleich des Realizable k- $\epsilon$  und des RSM zeigt sich, dass das RSM den Einfluss des Dralls besser berücksichtigt und Wirbelstrukturen besser auflöst.

## 7.4 Variation der Brennkammerwandtemperatur

In diesem Abschnitt wird der Einfluss der Wandtemperaturrandbedingung erläutert. Es wird ein Vergleich zwischen der ursprünglichen Wandtemperatur von 1273 K und der neuen Wandtemperatur von 773 K an einem Flameletmodell angestellt (Abbildung 7-25). Die restlichen Randbedingungen werden nicht verändert.

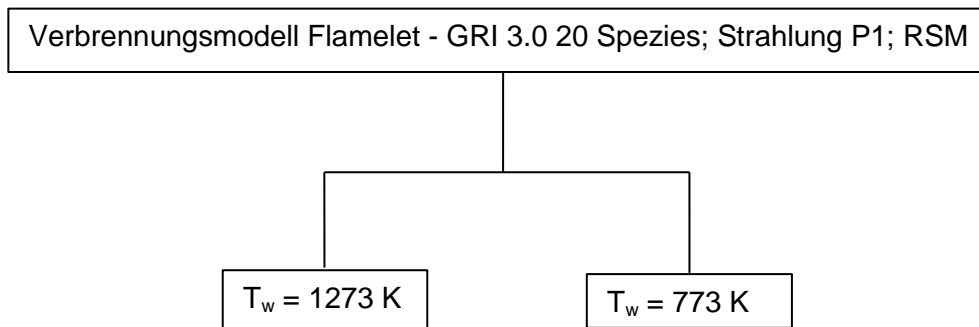


Abbildung 7-25: Vergleich der Brennkammerwandtemperatur

Auf Grund der Höhe der Wandtemperatur wird das Temperaturprofil und somit die Wärmefreisetzung in der Brennkammer entscheidend beeinflusst. Bei einer Wandtemperatur, welche höher als die durch die Verbrennung entstehende Temperatur ist, wird Wärme in die Brennkammer eingebracht. Dies beeinflusst selbstverständlich die Wärmefreisetzung der Verbrennungsreaktion. In Abbildung 7-26 sind in den Temperaturprofilen der linken Spalte ( $T_w = 1273$  K) leicht höhere Temperaturen, als in der rechten Spalte ( $T_w = 773$  K) feststellbar.

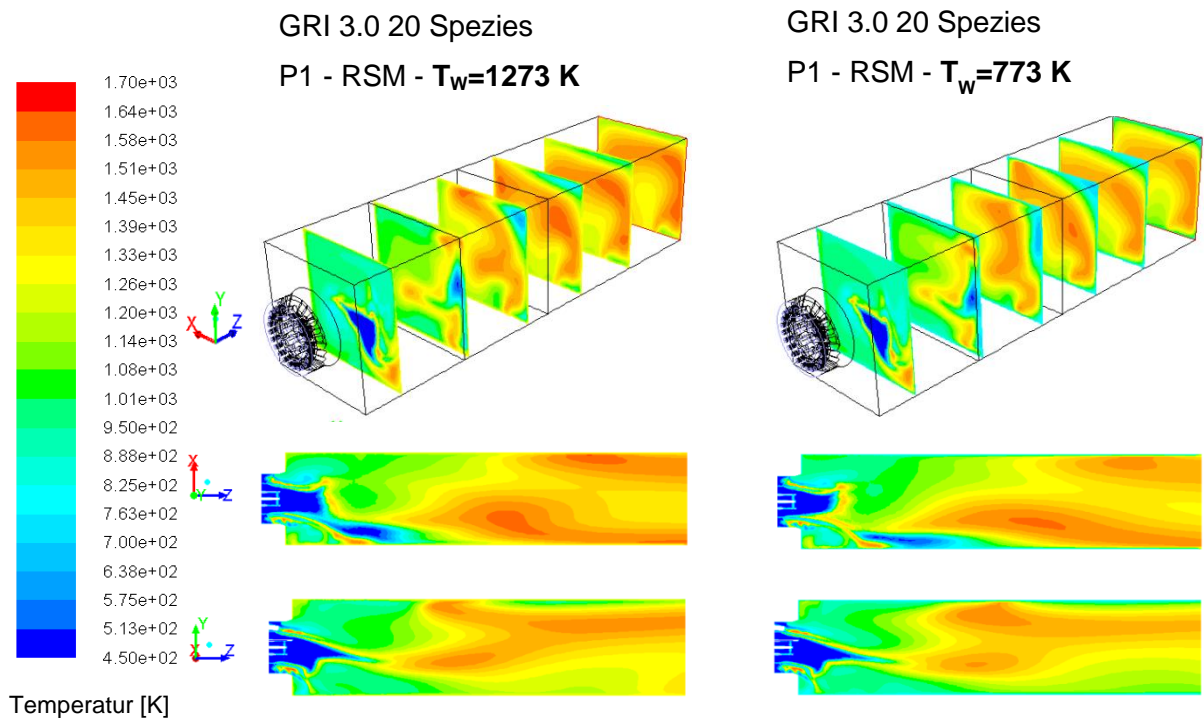


Abbildung 7-26: Vergleich der Temperaturprofile bei unterschiedlichen Wandtemperaturen

Grund dafür ist, dass bei der höheren Wandtemperatur vor allem im vorderen Bereich der Brennkammer Wärme eingebracht wird (Abbildung 7-27). Bei Herabsetzen der Wandtemperatur auf 773 K tritt keine Wärme mehr in die Brennkammer ein und die Verbrennungsreaktion wird nicht beeinflusst. Trotz der beträchtlichen eingebrachten Wärmemenge wird die Flammenform nicht beeinflusst. Dies wird besonders gut ersichtlich, wenn man die Zwischenspezies  $\text{CH}_2\text{O}$  betrachtet (Abbildung 7-28).

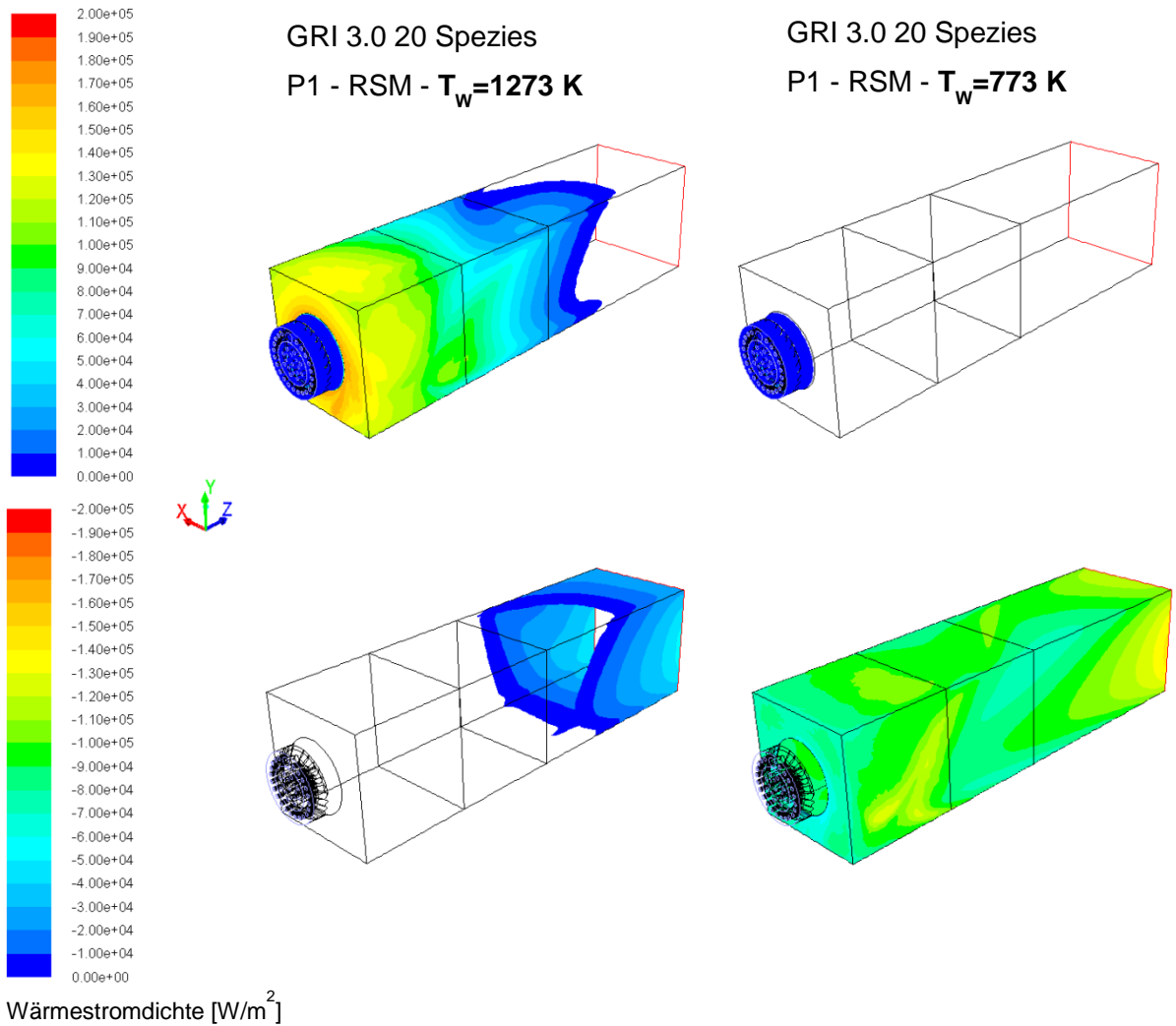


Abbildung 7-27: Wärmestromdichten bei unterschiedlichen Brennkammerwandtemperaturen

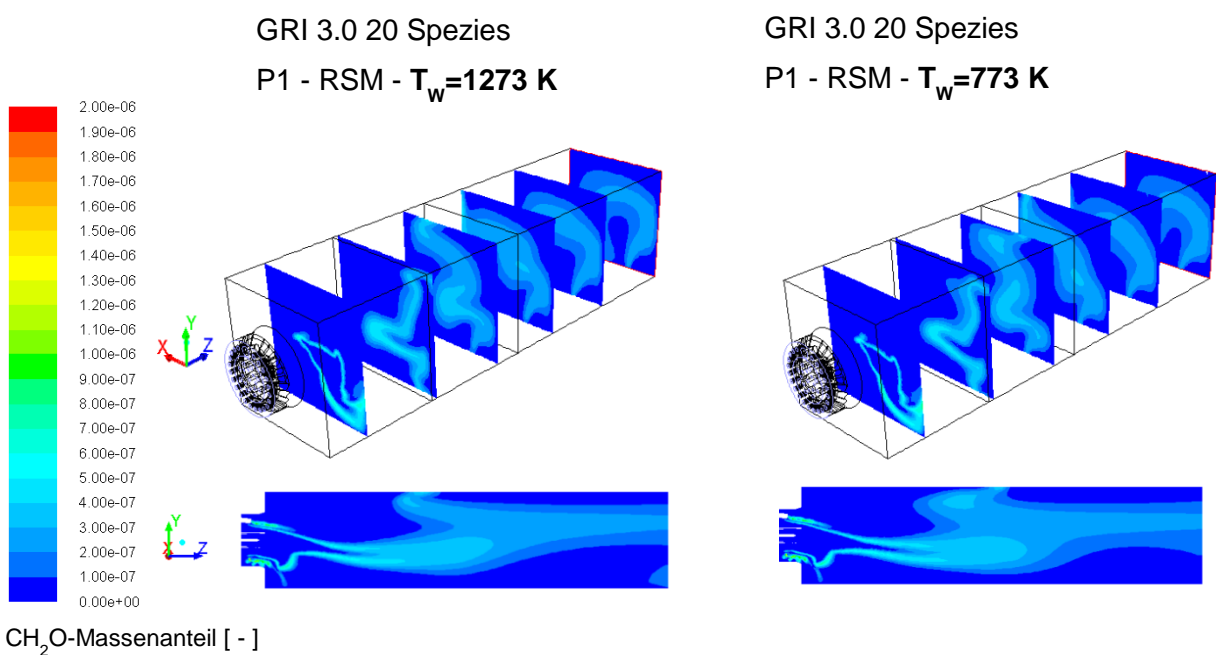


Abbildung 7-28:  $CH_2O$ -Massenanteile bei unterschiedlichen Brennkammerwandtemperaturen



## 7.5 Domainvergleich

In einer weiteren Untersuchung wurde die Seitenlänge des ursprünglichen quadratischen Querschnitts der Brennkammer einmal um 50% und einmal um 100% erhöht (Abbildung 7-29). Die Wandtemperatur wurde wiederum mit 1273 K festgelegt und die restlichen Randbedingungen wurden beibehalten. Ein Grund für das Vergrößern des Querschnitts ist, dass die eintretende Wärmemenge reduziert wird und somit der Einfluss auf die Verbrennung verkleinert wird. Außerdem reduziert sich bei Vergrößern des Querschnitts die Strömungsgeschwindigkeit und somit kann deren Einfluss auf die Verbrennung ebenfalls untersucht werden.

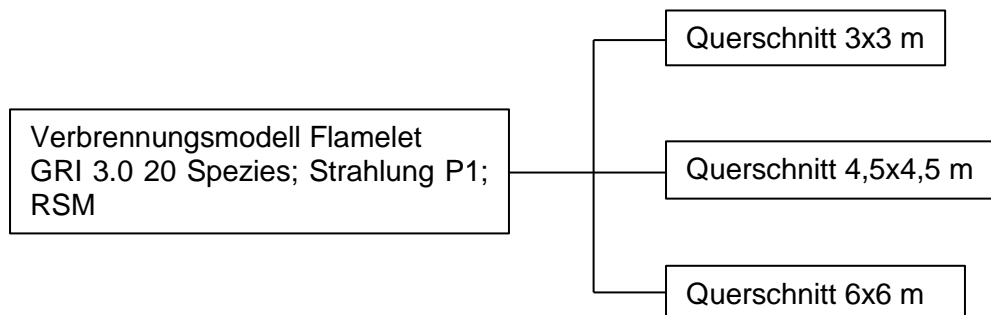


Abbildung 7-29: Vergleich unterschiedlicher Brennkammerquerschnitte

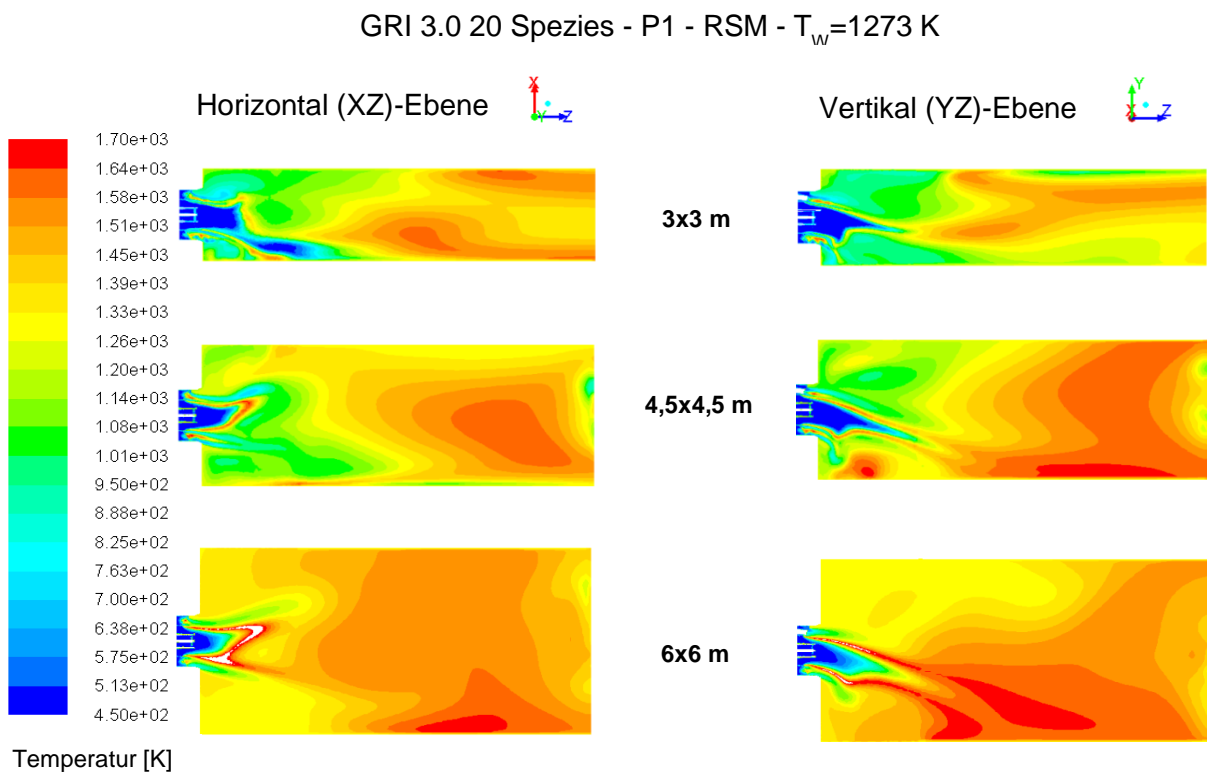


Abbildung 7-30: Temperaturprofile bei unterschiedlichen Domainquerschnitten

In Abbildung 7-30 werden die Temperaturprofile bei unterschiedlichen Querschnitten angeführt. Aufgrund der größeren Querschnitte ändert sich die Strömungsgeschwindigkeit und dadurch auch die Flammenform. Das Gas hat aufgrund der geringeren Strömungsgeschwindigkeit mehr Zeit auszubrennen. Verglichen zum kleinen Querschnitt ergeben sich somit bei den Domainquerschnitten mit 4,5 m und 6 m Seitenlänge größere Bereiche für die heißen Zonen. Bei Betrachtung der CO-Massenanteile in der nachstehenden Abbildung 7-31 ist der Einfluss des Querschnitts bei gleichem Massenstrom besonders gut zu erkennen. Beim kleinen Querschnitt ist aufgrund der höheren Strömungsgeschwindigkeit die CO-Konzentration am höchsten. Mit zunehmendem Querschnitt sinkt die CO-Konzentration da die Strömungsgeschwindigkeit abnimmt und somit mehr Zeit für die Verbrennung zur Verfügung steht. Dadurch kann der Brennstoff besser ausreagieren.

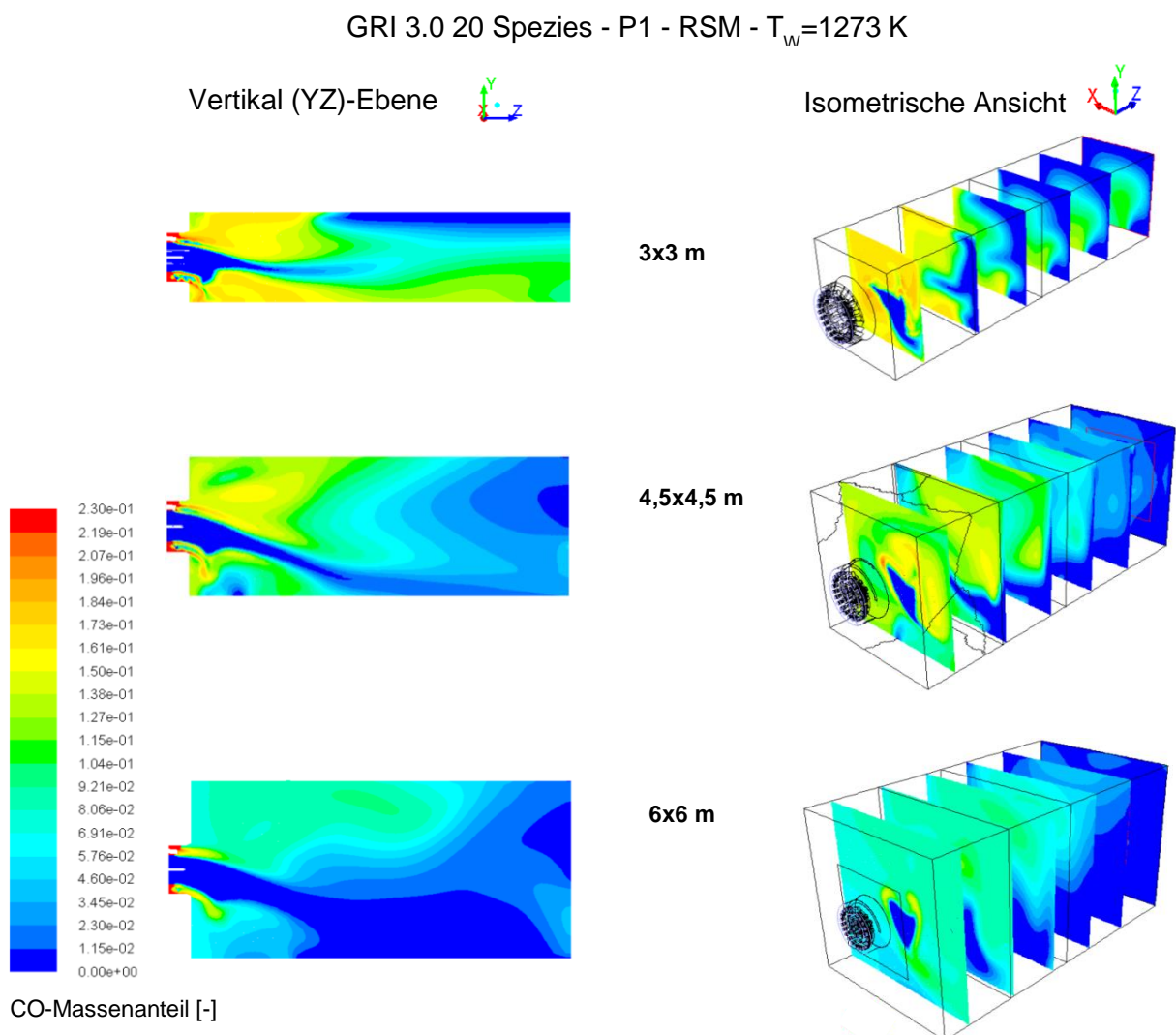


Abbildung 7-31: CO-Massenanteile bei unterschiedlichen Domainquerschnitten

Die Strömungsgeschwindigkeiten sind in Abbildung 7-32 dargestellt. Mit zunehmendem Querschnitt reduziert sich die Geschwindigkeit und es treten vermehrt Rückströmungen innerhalb

der Domain auf (Abbildung 7-33). Die Geschwindigkeitsvektoren sind in mehreren Ebenen normal zur Hauptströmungsrichtung abgebildet. Der Austrittsbereich ist zusätzlich vergrößert dargestellt. Zu erkennen sind Geschwindigkeitsvektoren, welche entgegen der Hauptströmungsrichtung ausgerichtet sind.

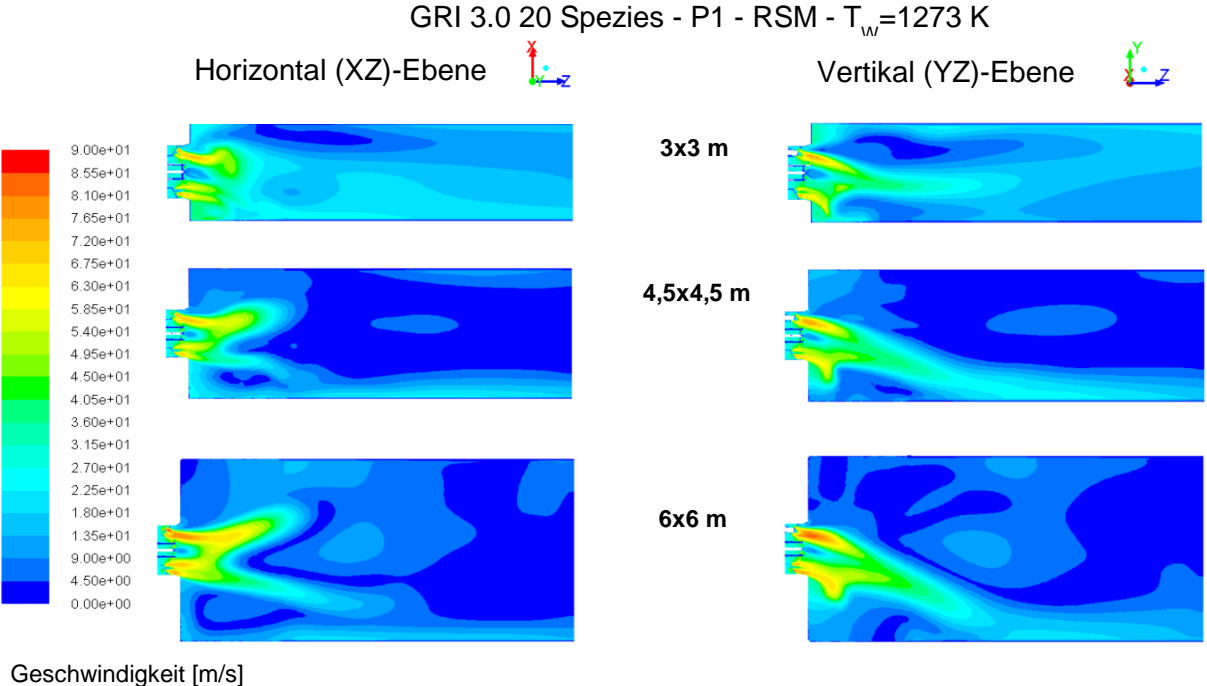


Abbildung 7-32: Geschwindigkeitsprofile bei unterschiedlichen Domainquerschnitten

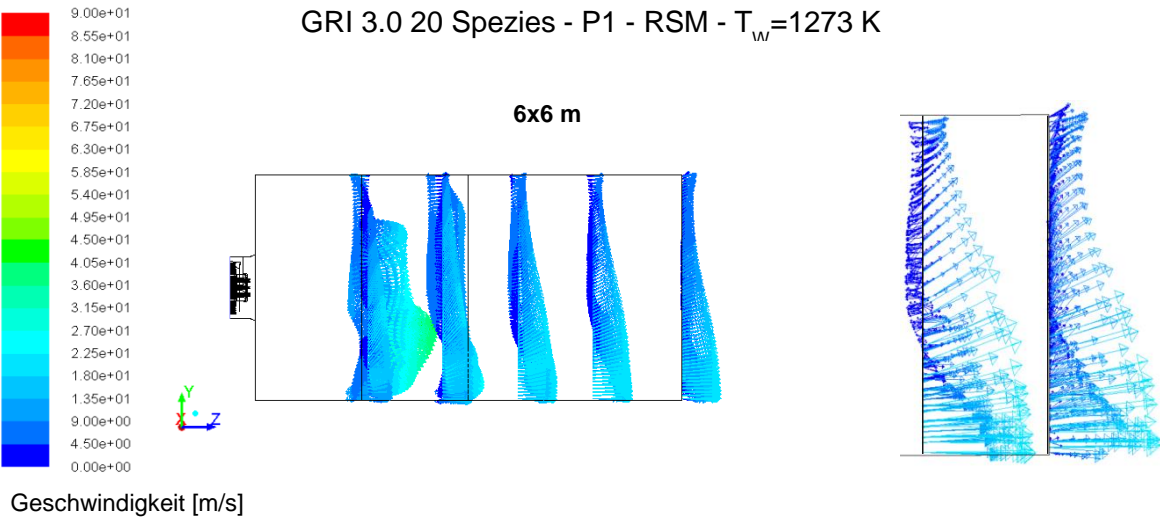


Abbildung 7-33: Rückströmungen am Austritt (6x6 m)

Abbildung 7-34 zeigt die Wärmestromdichten der unterschiedlichen Domainquerschnitte. Bei Vergrößern des Querschnitts wird die eintretende Wärmestromdichte reduziert. Beim größten Querschnitt tritt keine Wärme mehr in die Brennkammer ein, da die heiße Zone sich über die gesamte Länge erstreckt.

GRI 3.0 20 Spezies - P1 - RSM -  $T_w=1273$  K

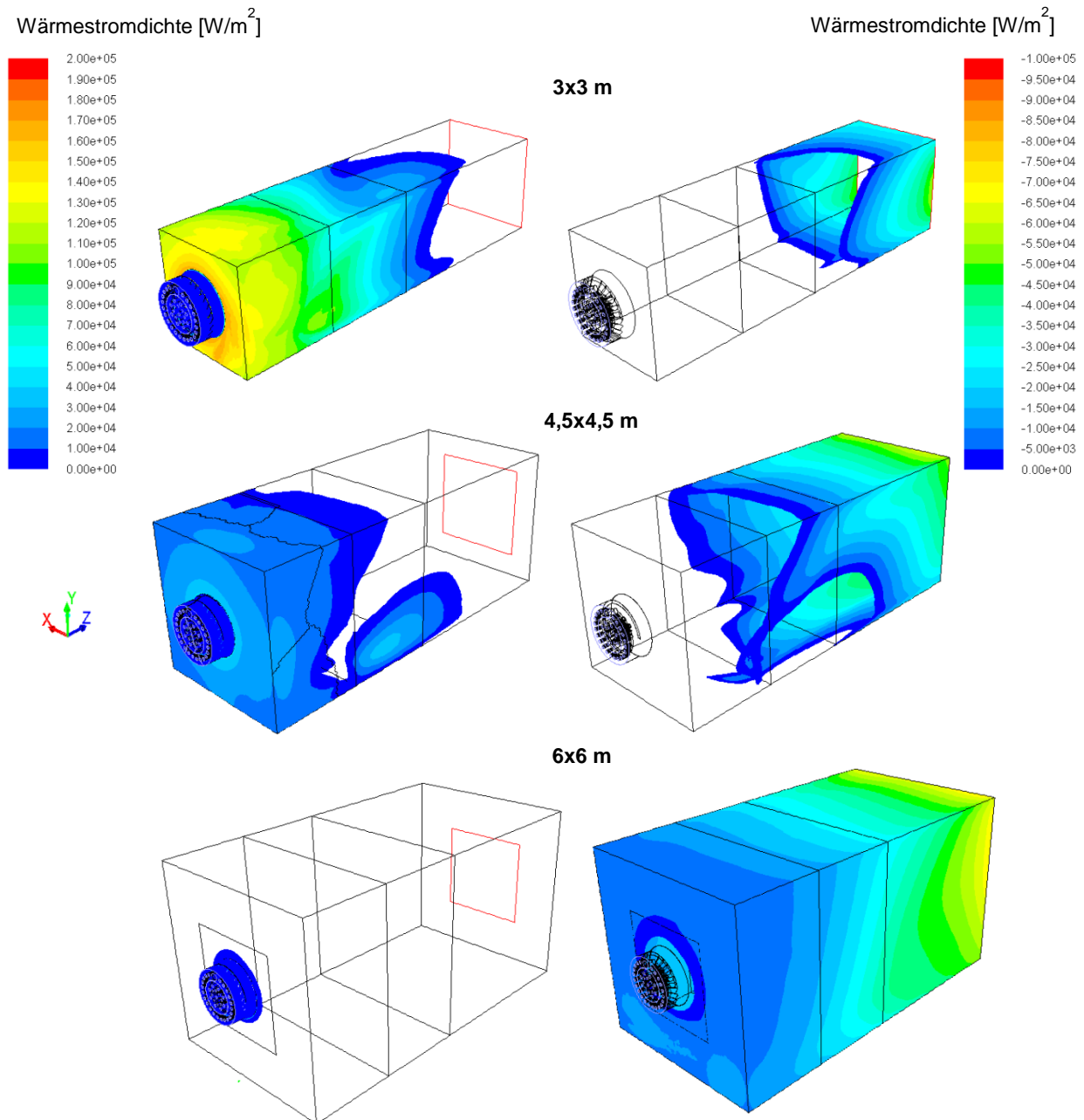


Abbildung 7-34: Wärmestromdichten bei unterschiedlichen Domainquerschnitten

In Tabelle 7-4 sind die flächengemittelten Austrittswerte der unterschiedlichen Querschnitte angeführt. Aufgrund der Rückströmungen sinkt die Temperatur mit zunehmendem Querschnitt. Die Geschwindigkeit nimmt ebenfalls ab. Die brennbaren Anteile sind am Austritt der größeren Domainquerschnitte geringer, da dort der Brennstoff besser ausreagiert.

Tabelle 7-4: Flächengewichtete Austrittswerte bei unterschiedlichen Domainquerschnitten

Surface Integrals at Outlet (Area-weighted average):	Small Domain	Medium Domain	Large Domain
Temperatur $T$ [K]	1433,53	1407,51	1374,82
Geschwindigkeit $v$ [m/s]	15,32	7,38	5,41
Molanteil $v_{CH_4}$ [-]	8,13E-04	6,61E-04	6,79E-04
Molanteil $v_{CO}$ [-]	5,03E-02	3,46E-02	2,93E-02

## 7.6 Netzgitterstudie

In diesem Abschnitt wird der Einfluss des Netzgitters auf die Berechnung untersucht. Dazu werden drei verschiedene Netzgitter mit unterschiedlicher Zellenanzahl verglichen (Abbildung 7-35). Auf eine Abbildung der drei verschiedenen Netzgitter wird hier verzichtet, da der Unterschied in der Netzauflösung nicht darstellbar ist. Der Vergleich wird an der Domain mit dem kleinen Querschnitt durchgeführt. Als Randbedingungen werden die zu Beginn des Kapitels erwähnten Bedingungen verwendet.

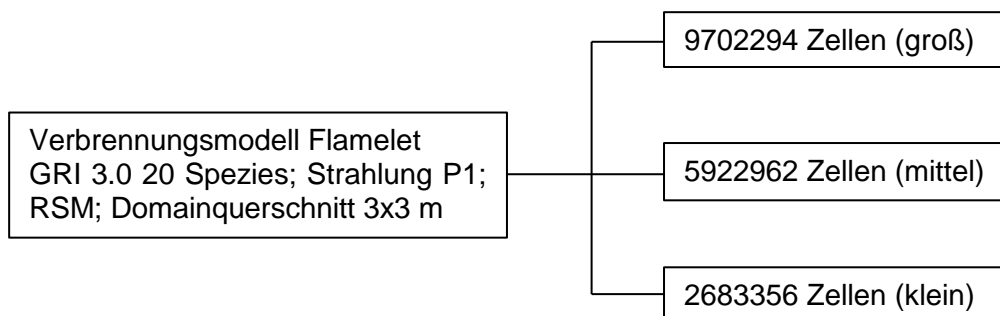


Abbildung 7-35: Netzgittervergleich

In Tabelle 1-1 sind die Werte zur Charakterisierung der Netzqualität angeführt. Werte für die Minimum Orthogonal Quality näher bei null weisen auf eine schlechte Qualität hin, während Werte die näher bei eins liegen auf eine gute Netzqualität schließen lassen (Ansys, 2010). Das kleine und mittlere Netz weisen eine ähnliche Netzqualität auf. Das mittlere Netz hat die geringste Netzqualität.

Tabelle 7-5: Netzqualität

	klein	mittel	groß
Zellenanzahl	9702294,0	5922962,0	2683356,0
Minimum Orthogonal Quality	4,085E-02	2,465E-02	4,706E-02

Die Temperaturprofile zwischen dem Netzgitter mit der großen und der kleinen Zellenanzahl stimmen gut überein (Abbildung 7-36). Ebenso ist die Flammenform annähernd gleich. Das

mittlere Netzgitter weist ein etwas anderes Temperaturprofil auf. Die Flamme wird stärker nach unten abgelenkt und am Austritt ist die Temperatur leicht erhöht. Gut zu erkennen ist, dass beim mittleren Netzgitter am Austritt eine heiße Zone vorhanden ist. Die Reaktionszonen unterscheiden sich somit vom großen und kleinen Netzgitter.

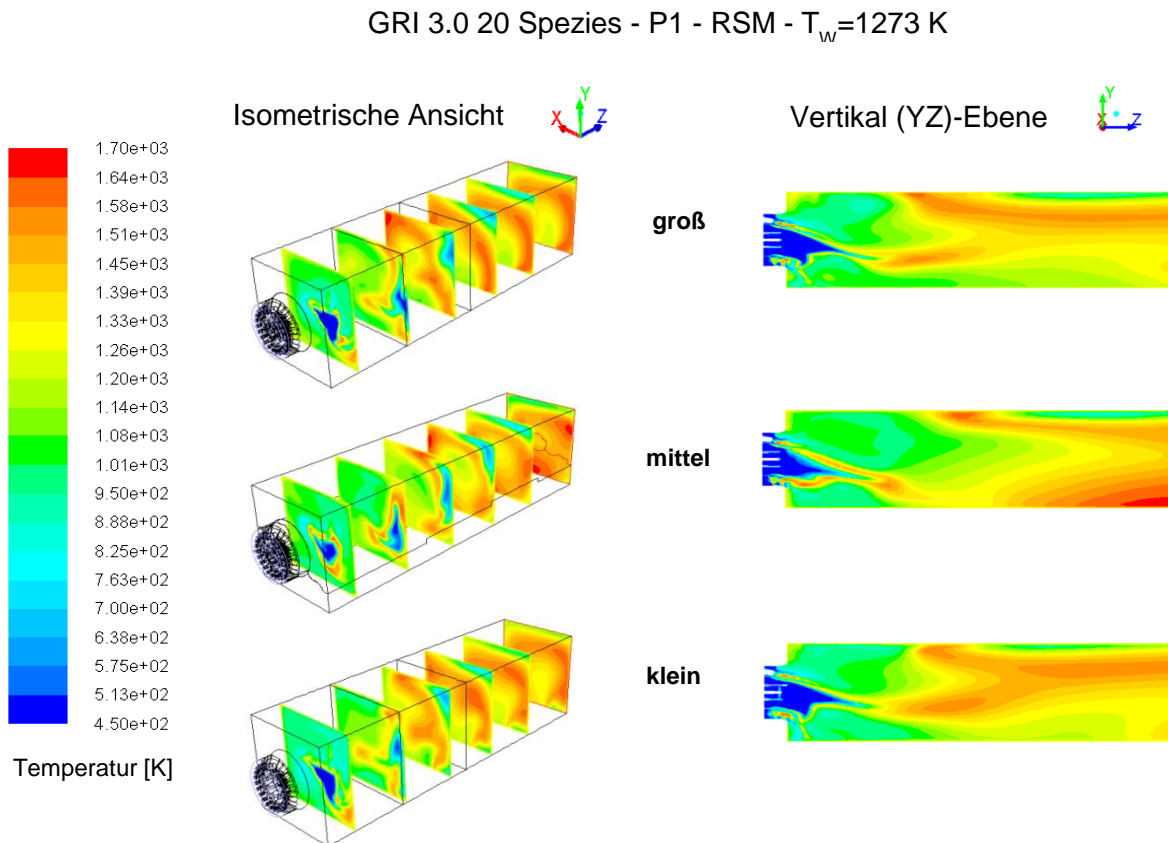


Abbildung 7-36: Temperaturprofile bei unterschiedlichen Netzgittern

Betrachtet man die Zwischenspezies  $\text{CH}_2\text{O}$  in Abbildung 7-37 bestätigt dies die Aussage, dass die Reaktionszone beim mittleren Netzgitter im Vergleich zu den anderen zwei Netzen unterschiedlich ist. Beim großen und kleinen Netzgitter liegt eine geschlossene Reaktionszone vor. Beim mittleren Netzgitter wird die Flamme stärker nach unten abgelenkt und die Hauptreaktionszone im vorderen Bereich ist von einer weiteren Reaktionszone am Austrittsbereich getrennt.

GRI 3.0 20 Spezies - P1 - RSM -  $T_w=1273$  K

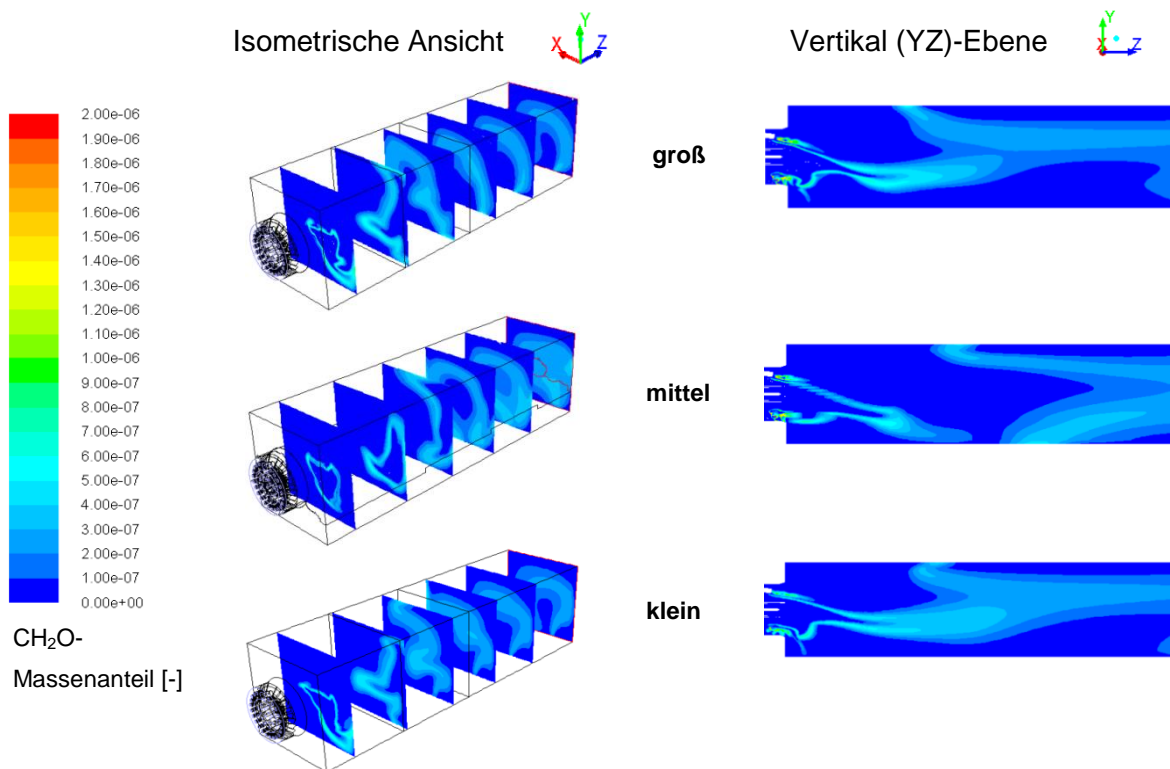


Abbildung 7-37: CH<sub>2</sub>O-Massenanteile bei unterschiedlichen Netzgittern

### Fazit:

Der Grund für das Abweichen bei gleichen Modelleinstellungen kann auf die Qualität des Netzgitters zurückgeführt werden. Die Netzgitter mit der großen und kleinen Zellenanzahl haben einen ähnlichen Wert für die Minimum Orthogonal Quality. Bei Vergleich der Ergebnisse zeigt sich, dass sie trotz beträchtlichem Unterschied in der Zellenanzahl sehr ähnliche Ergebnisse liefern. Die Genauigkeit der Ergebnisse wird somit nicht zwangsläufig durch eine hohe Zellenanzahl erhöht. Das mittlere Netzgitter hat die geringste Netzqualität. Es liefert, verglichen mit den anderen zwei Netzgittern, deutlich unterschiedliche Ergebnisse.



## 8 Ergebnisse der Gesamtkesselsimulation

Nach Abschluss der Untersuchungen am einzelnen Gichtgasbrenner wurde der Gesamtkessel simuliert. Dazu wurde die gleiche Gichtgaszusammensetzung wie für die Einzelbrennersimulation verwendet. Das verwendete Netzgitter ist in Abbildung 8-1 dargestellt. Es ist aus 11889914 Zellen aufgebaut und hat eine Minimum Orthogonal Quality von 1,647E-02. Das Netz ist aus Hexaeder- und Tetraeder-Elementen aufgebaut.

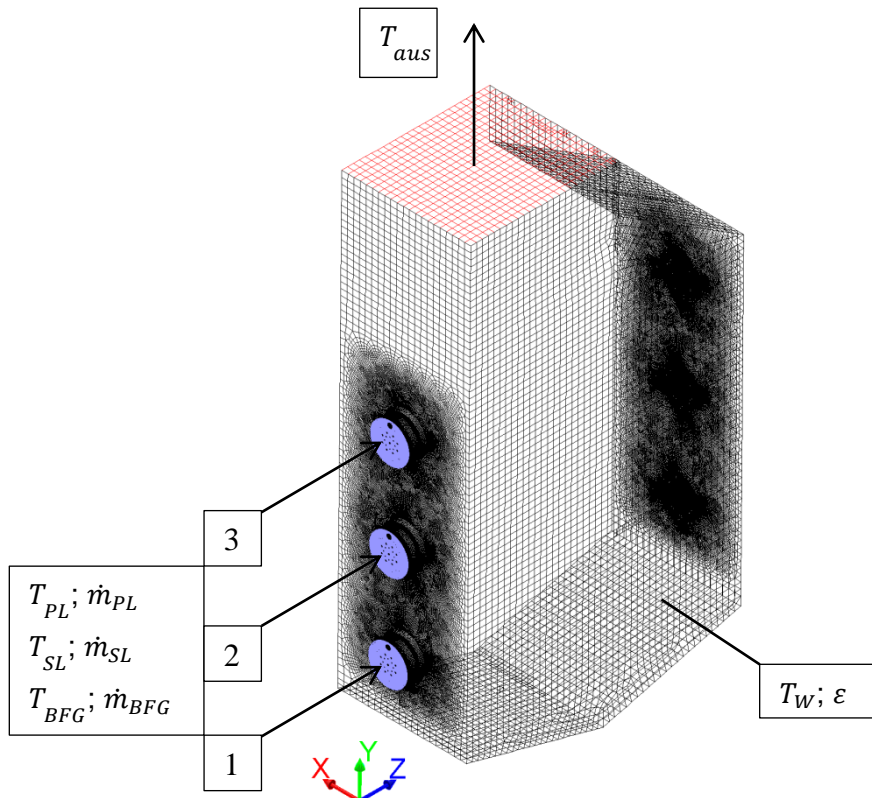


Abbildung 8-1: Netzgitter für die Simulation des Gesamtkessels

Aufgrund der Symmetrie wird nur die Hälfte des Gesamtkessels mit drei Brennern simuliert. Die Brenner mit der Nummer 1 und 2 besitzen höhere Massenströme, verglichen zu Brenner 3. Die Maße des Kessels sind in Kapitel 3 in Abbildung 3-3 angeführt. Das Netzgitter ist im Bereich der Reaktionszone feiner aufgelöst. In Tabelle 8-1 sind die Werte für die Randbedingungen angegeben.

Für die Simulation des Gesamtkessels werden die Erkenntnisse der Gichtgasbrennersimulation angewandt. Als Verbrennungsmodell wird ein Flameletmodell mit GRI 3.0 Mechanismus verwendet. Um den Rechenaufwand zu begrenzen wird das Modell mit 20 Spezies limitiert. Die Turbulenz wird zunächst mit dem Realizable k- $\epsilon$  Turbulenzmodell simuliert. Anschließend wird das RSM Turbulenzmodell mit der Realizable k- $\epsilon$  Lösung initialisiert. Für die Strahlungsmodellierung wird das DO-Modell verwendet. Grund dafür ist, dass mit diesem Strahlungsmodell die Wärmeströme besser bestimmt werden können.



Tabelle 8-1: Randbedingungen für die Gesamtkesselsimulation (Leiter, 2011)

Randbedingungen		1, 2	3	[ ]
Massenstrom Primärluft	$\dot{m}_{PL}$	17,997	13,589	kg/s
Massenstrom Sekundärluft	$\dot{m}_{SL}$	3,454	2,600	kg/s
Massenstrom BFG	$\dot{m}_{BFG}$	19,71	13,40	kg/s
Temperatur Primärluft	$T_{PL}$	452	452	K
Temperatur Sekundärluft	$T_{SL}$	452	452	K
Temperatur Gichtgas	$T_{BFG}$	493	493	K
Emissionsgrad	$\varepsilon$	0,85	-	
Wandtemperatur	$T_W$	670		K
Austrittstemperatur	$T_{aus}$	1200		K

In Abbildung 8-2 ist das Temperaturprofil des Gesamtkessels dargestellt. Gut zu erkennen ist, dass beim untersten Brenner eine gerade Flammenform auftritt. Bei den beiden oberen Brennern wird die Flamme hingegen nach oben abgelenkt. Grund dafür ist, dass die Strömung nach oben ausgerichtet ist. Zusätzlich wird die Flammenform durch den verengenden Querschnitt des Kessels beeinflusst. Das Geschwindigkeitsprofil und die Geschwindigkeitsvektoren sind in Abbildung 8-3 angeführt. Deutlich sind die Verwirbelungen im Bereich der Flamme bei Betrachtung der Geschwindigkeitsvektoren zu erkennen. Im Austrittsbereich sind die Geschwindigkeitsvektoren in Richtung des Auslasses ausgerichtet, da der obere Bereich des Kessels als Düse wirkt und daher die Strömung beschleunigt.

GRI 3.0 20 Spezies - DO - RSM

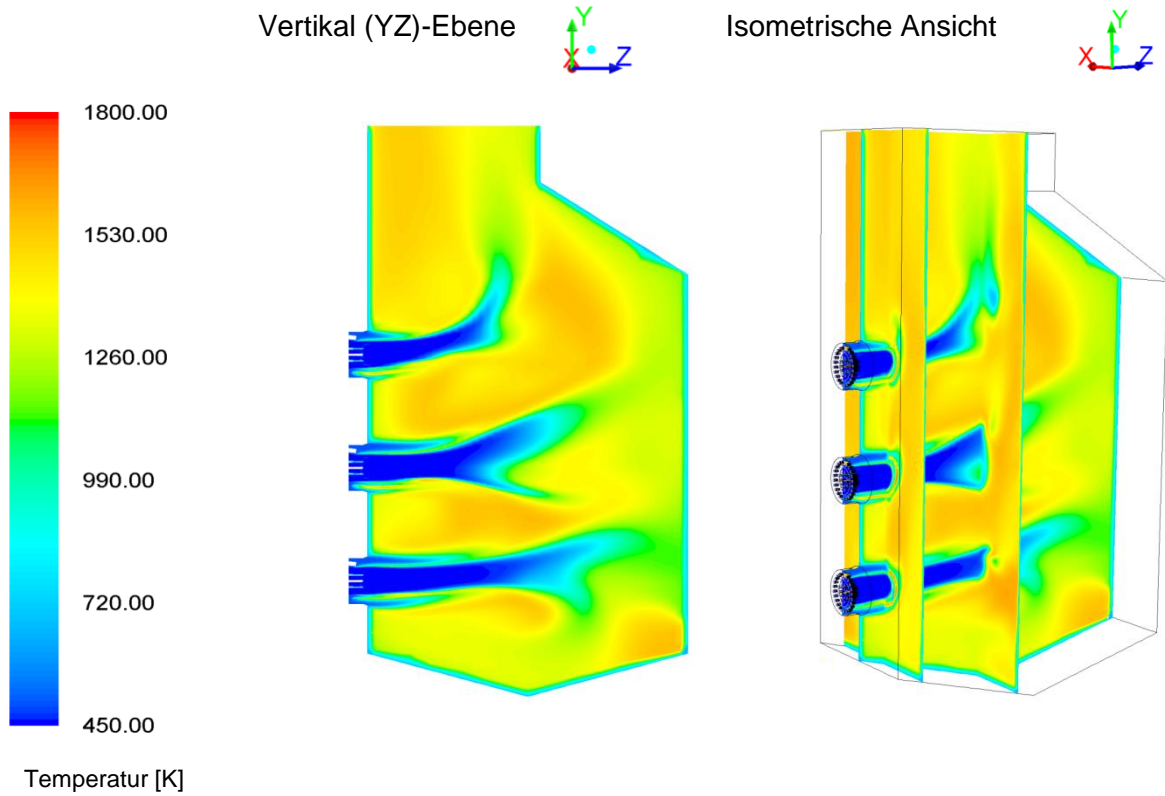


Abbildung 8-2: Temperaturprofil des Gesamtkessels

GRI 3.0 20 Spezies - DO - RSM

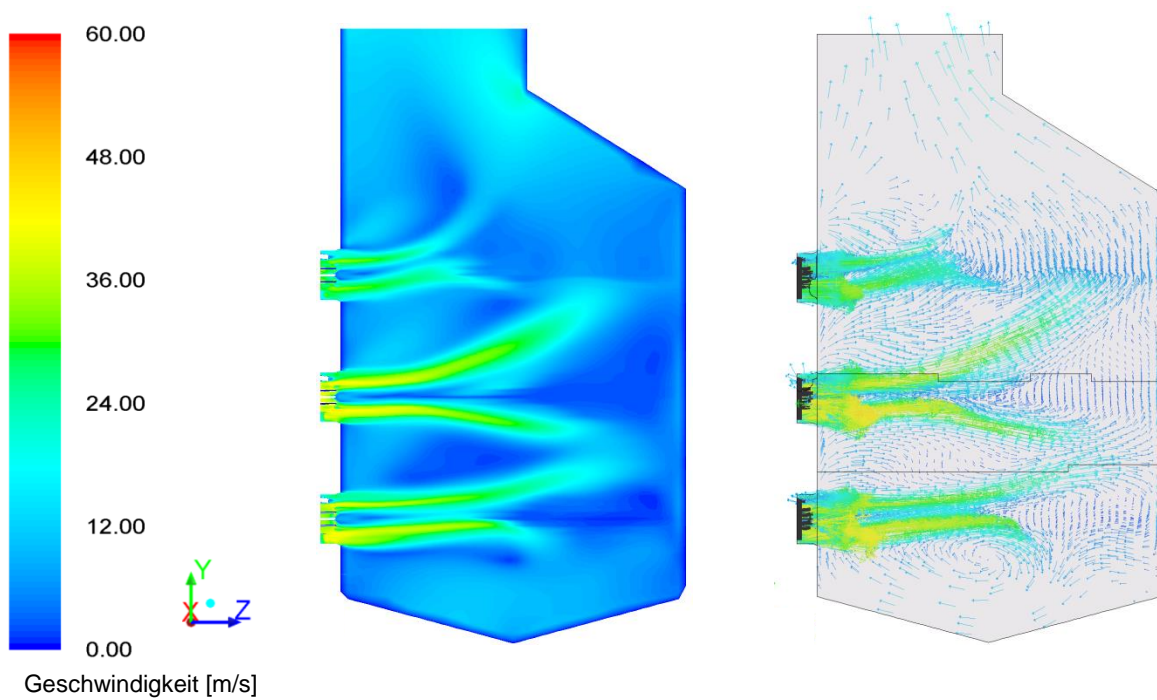


Abbildung 8-3: Geschwindigkeitsprofil des Gesamtkessels in der YZ-Ebene

### GRI 3.0 20 Spezies - DO - RSM

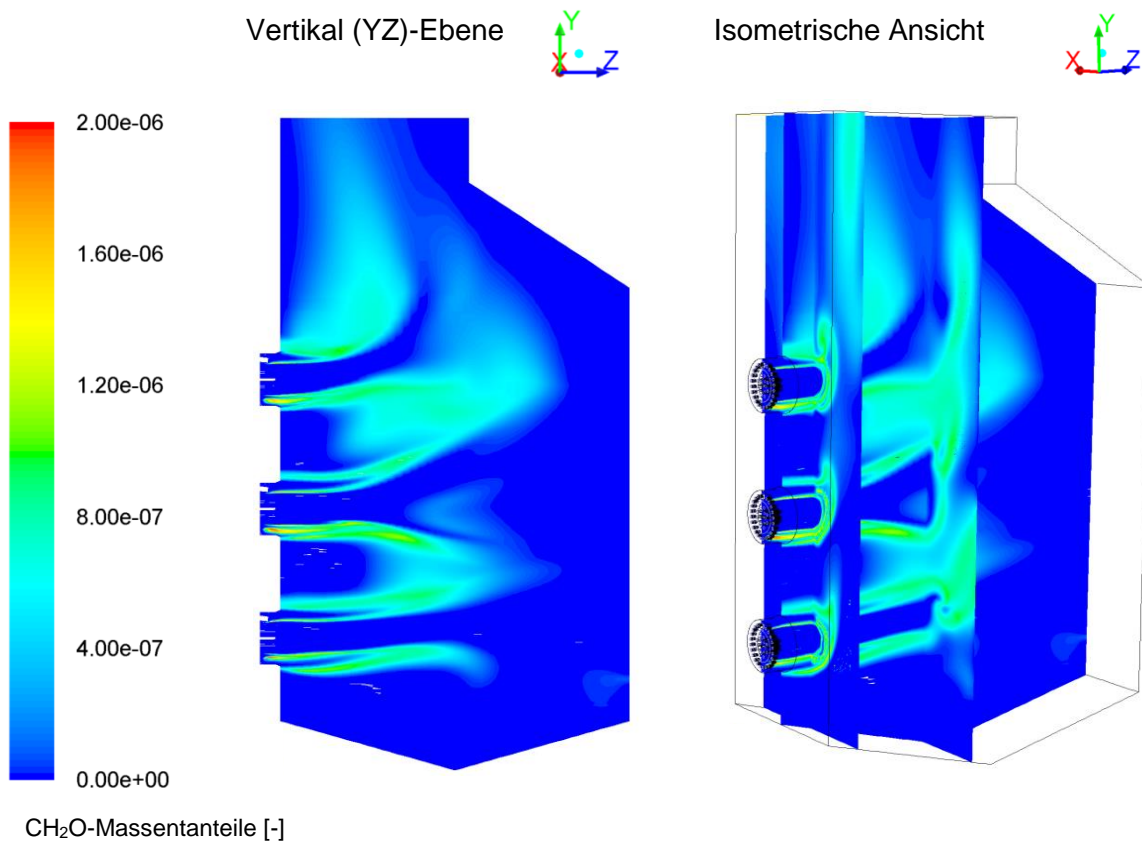


Abbildung 8-4: CH<sub>2</sub>O-Massenanteile des Gesamtkessels

Die Reaktionszonen der Gichtgasverbrennung im Gesamtkessel sind in Abbildung 8-4 dargestellt. Wiederum deutlich sind die nach oben gerichteten Flammenfronten zu erkennen. Abbildung 8-5 zeigt die Wärmestromdichte an der Kesselwand. Die Größe des Wärmestromes liegt im Mittel im Bereich von ca. 80 kW/m<sup>2</sup>.

GRI 3.0 20 Spezies - DO - RSM

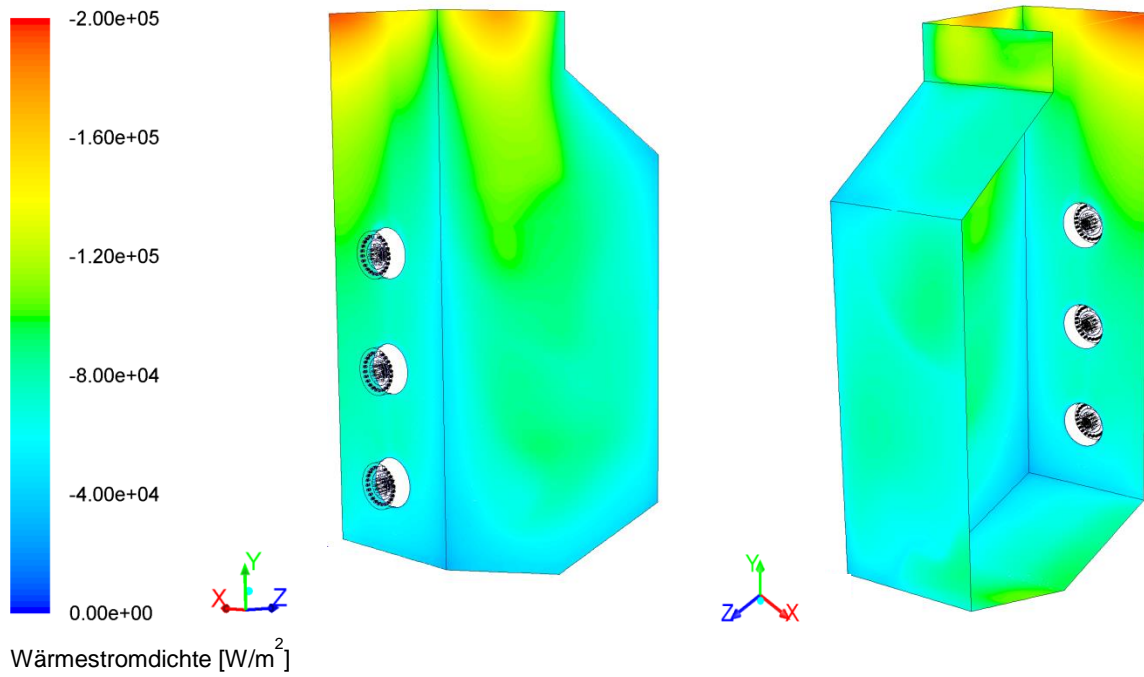


Abbildung 8-5: Wärmestromdichte an der Kesselwand des Gesamtkessels

## 9 Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick

In dieser Masterarbeit wurden Modelle zur Simulation einer reaktiven Strömung analysiert. Dafür wurden eingehend die theoretischen Grundlagen untersucht. Im Rahmen der Literaturstudie wurde nach Reaktionsmechanismen für die Gichtgasverbrennung recherchiert. Es zeigte sich, dass nur wenige Reaktionsmechanismen gezielt für die Gichtgasverbrennung entwickelt wurden. Im Kapitel 6 wurden die der Literatur entnommenen Reaktionsmechanismen auf ihre Eignung zur Simulation der Gichtgasverbrennung untersucht und für die weiteren 3D-Simulationen eingeschränkt. Diese Validierungssimulation zeigte, dass keine der Reaktionsmechanismen brauchbare Ergebnisse lieferte. Grund dafür ist, dass die Reaktionsmechanismen mehr als zwei Reaktionsgleichungen verwenden und somit in Verbindung mit dem Eddy Dissipation Model falsche Ergebnisse liefern. Aufgrund dieser Tatsache wurde die Gichtgasverbrennung mit dem Flameletmodell simuliert. Dafür wurde eine Reihe von Reaktionsmechanismen getestet. Allen war gemein, dass sie brauchbare Ergebnisse lieferten. Um einen Vergleich des Flameletmodells mit einem anderen Verbrennungsmodell zu erhalten wurde weiter nach einem Reaktionsmechanismus für das Eddy Dissipation Model gesucht. Mit dem Reaktionsmechanismus für die Ausbrandreaktion von Holzgas konnten gute Ergebnisse erzielt werden.

Der Vergleich der Verbrennungsmodelle am Einzelbrenner in Kapitel 7 zeigte kaum Unterschiede zwischen dem EDM und dem EDC-Modell. In das Flamelet-Verbrennungsmodell wurden die Reaktionsmechanismen GRI 3.0, Smooke und Skeletal implementiert. Sie lieferten alle sehr gute Ergebnisse und die Flammenform wurde mit allen drei Mechanismen sehr ähnlich bestimmt. Der GRI 3.0 ist der aufwändigste Mechanismus und berücksichtigt die größte Anzahl an Spezies (53), was einen dementsprechend großen Rechenaufwand bedeutet. Daher wurde die Zahl der Spezies mit 20 limitiert und für die weiteren Untersuchungen ein reduzierter GRI 3.0 (20 Spezies) verwendet. Die Untersuchung des Einflusses der Wärmestrahlung zeigte, dass ihr Einfluss auf die Verbrennung sehr gering ist. Durch Berücksichtigung der Wärmestrahlung wird die zugeführte Wärmemenge in die Brennkammer erhöht. Dies hat allerdings nur einen geringen Einfluss auf das Temperaturprofil. Die Flammentemperatur verringerte sich bei Berücksichtigung der Strahlung mit dem DO- und dem P1-Modell nur geringfügig. Ein großer Unterschied wurde jedoch zwischen den beiden Strahlungsmodellen festgestellt. Das P1-Modell lieferte deutlich höhere Wärmeströme verglichen mit dem DO-Modell. Die Flammenform wird stark vom Turbulenzmodell beeinflusst. Das Realizable  $k-\epsilon$  bildete eine stark gestreckte Flamme ab, während das RSM eine verwirbelte Flammenstruktur abbildete. Das RSM kann turbulente Strömungen mit Drall besser wiedergeben und daher eignet es sich besser zur Simulation des Gichtgasbrenners. In einer weiteren Untersuchung wurde die Temperaturrandbedingung für die Brennkammer betrachtet. Mit einer Temperatur von 1273 K wird Wärme in die Brennkammer eingebracht. Durch verringern der Wandtemperatur auf 773 K wird die zugeführte Wärme reduziert. Der Einfluss auf die Verbrennungsreaktion ist jedoch gering und die beträchtliche Reduk-

tion der zugeführten Wärme führte nur zu einer geringen Absenkung der Verbrennungstemperatur. Im Domainvergleich wurden unterschiedliche Querschnitte der Brennkammer geprüft. Durch Vergrößern des Querschnitts wird bei gleichbleibendem Massenstrom die Geschwindigkeit verringert. Dies hat einen großen Einfluss auf die Flammenform und Flammentemperatur. Der Brennstoff hat bei den größeren Querschnitten aufgrund der geringeren Geschwindigkeit mehr Zeit auszureagieren. Die Netzgitterstudie bildete den Abschluss der Einzelbrennersimulation. Die Simulationen mit dem großen und dem kleinen Netzgitter lieferten ähnliche Ergebnisse. Das Netz mit der mittleren Zellenanzahl weist die schlechteste Qualität auf und das Temperaturprofil ist verglichen mit den anderen zwei Netzgittern unterschiedlich. Bei identischen Randbedingungen wird die Flamme stärker nach unten abgelenkt.

Die Simulation des Gesamtkessels wurde auf Basis der Untersuchungen am Einzelbrenner durchgeführt. Daher wurde als Verbrennungsmodell das Flameletmodell mit dem auf 20 Spezies limitierten Reaktionsmechanismus GRI 3.0 verwendet. Als Turbulenzmodell kam das RSM zum Einsatz. Die Strahlung wurde mit dem DO-Modell berücksichtigt, da dieses Modell die Wärmeströme im Vergleich zum P1-Modell besser bestimmt. Außerdem sind die Rechenzeiten bei Verwendung mit dem DO-Modell geringer.

In dieser Arbeit wurden geeignete Modelle zur numerischen Strömungs- und Verbrennungssimulation des Gichtgasbrenners gefunden. Zusätzlich wurde der Einfluss der Randbedingungen untersucht. Den Abschluss bildete die Gesamtkesselsimulation, welche auf den Erkenntnissen der Modelluntersuchungen basieren. Für weiterführende Arbeiten wäre eine detaillierte Betrachtung des Flameletmodells interessant. Die Anzahl der Flamelets kann erhöht und in der Folge untersucht werden, ob dadurch eine bessere Auflösung der Flammenstruktur erreicht werden kann. Eine vertiefte Betrachtung zu den Einstellungen des RSM-Turbulenzmodells könnte ebenfalls durchgeführt werden. Beispielsweise kann der Einfluss der Diskretisierungsmethode auf die Vorhersage der Stromlinien analysiert werden. Als Alternative zum RSM wäre es interessant eine Large Eddy Simulation des Einzelbrenners durchzuführen. Für zukünftige Arbeiten sind zusätzliche Recherchen hinsichtlich der Reaktionsmechanismen anzustellen und deren Einfluss auf die Verbrennung zu untersuchen.

## 10 Literaturverzeichnis

- Andersen, J. (2008). *Global Combustion Mechanisms for Use in CFD Modeling under Oxy-Fuel Conditions*. Technical University of Denmark, Lyngby: Energy & Fuels.
- Ansys. (2010). *Ansys Fluent Theory Guide*. Canonsburg: Ansys.
- Fang, Q. (2011). *Numerical Simulation of Multifuel Combustion in a 200 MW Tangentially Fired Utility Boiler*. Huazhong University of Science and Technology, Wuhan: Energy & Fuels.
- Ferziger, J. H., & Peric, M. (2002). *Numerische Strömungsmechanik*. Heidelberg: Springer.
- Frenklach, M., Bowmann, T., Smith, G., & Gardiner, B. (2013). *GRI-Mech*. Von [www.me.berkeley.edu/gri\\_mech](http://www.me.berkeley.edu/gri_mech) abgerufen
- GE Jenbacher. (2013). *Gases from steel production can provide an energy source*. Von [http://www.ge-energy.com/content/multimedia/\\_files/downloads/steelgases.pdf](http://www.ge-energy.com/content/multimedia/_files/downloads/steelgases.pdf) abgerufen
- Gerlinger, P. (2004). *Numerische Verbrennungssimulation; Effiziente numerische Simulation turbulenter Verbrennung*. Berlin: Springer.
- Glarborg, P., & Bentzen, L. L. (2008). *Chemical Effects of a High CO<sub>2</sub> Concentration in Oxyfuel-Combustion of Methane*. Technical University of Denmark, Lyngby: Energy Fuels.
- Hochenauer, C. (2013). *Wärmetechnik 2*. TU Graz, Institut für Wärmetechnik.
- Hou, S. S. (2009). *Firing blast furnace gas without support fuel in steel mill boilers*. Kun Shan University Tainan, Taiwan: Elsevier.
- Joos, F. (2006). *Technische Verbrennung; Verbrennungstechnik, Verbrennungsmodellierung, Emissionen*. Hamburg: Springer.
- Klell. (2012). *Höhere Thermodynamik*. TU Graz, Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik.
- Leiter, A. (2011). *Numerische Berechnung eines Gichtgasbrenners*. Diplomarbeit, TU Graz, Institut für Wärmetechnik.
- Liu, Y. (2009). *Experimental Investigations on Combustion Characteristics of the Blast Furnace Gas*. Shandong University of Technology, Zibo, China.
- Lüders, C. (2005). *Vergleich von Strahlungs- und Turbulenzmodellen zur Modellierung von Lichtbögen in SF<sub>6</sub>-Selbstblasleistungsschaltern*. Dissertation, RWTH Aachen.
- Nasa. (2001). *nasa.gov*. Von <http://earthobservatory.nasa.gov/IOTD/view.php?id=1254> abgerufen
- Nikolaou, Z. M. (2012). *A 5-step reduced mechanism for combustion of CO/H<sub>2</sub>/H<sub>2</sub>O/CH<sub>4</sub>/CO<sub>2</sub> mixtures with low hydrogen/methane and high H<sub>2</sub>O content*. Cambridge University, Department of Engineering, Cambridge: Elsevier.
- Offner, G. (2012). *Numerische Methoden in der angewandten Thermodynamik*. TU Graz, Institut für Verbrennungskraftmaschinen und Thermodynamik.

- Poinsot, T., & Veynant, D. (2005). *Theoretical and Numerical Combustion, 2nd Edition*. Philadelphia: Edwards.
- Sanz, W. (2011). *Computational Fluid Dynamics*. TU Graz, Institut für thermische Turbomaschinen und Maschinendynamik.
- Schwarze, R. (2013). *CFD-Modellierung; Grundlagen und Anwendungen bei Strömungsprozessen*. Heidelberg: Springer.
- Sigloch, H. (2007). *Technische Fluidmechanik*. Eningen: Springer.
- Stefanidis, G. D. (2005). *CFD Simulations of steam cracking furnaces using detailed combustion mechanisms*. Ghent University, Belgium: Elsevier.
- Steiner, H. (2010). *Höhere Strömungslehre und Wärmeübertragung*. TU Graz, Institut für Strömungslehre und Wärmeübertragung.
- Taube, K. (1998). *Stahlerzeugung kompakt*. Voerde: Vieweg.
- Warnatz, J., Maas, U., & Dibble, R. (2001). *Verbrennung; Physikalisch-Chemische Grundlagen, Modellierung und Simulation, Experimente, Schadstoffentstehung*. Heidelberg: Springer.
- Wünning, J. G. (2011). *Handbuch der Brennertechnik für Industrieöfen*. Essen: Vulkan.