



**Auslegung, experimentelle Untersuchung und numerische
Simulation unter besonderer Berücksichtigung der
Strahlungsmodellierung eines
2,5 MW_{th} Oxyfuel-Kohlenstaubbrenners**

von

Lorenz Griendl

als

DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades

DOKTOR DER TECHNISCHEN WISSENSCHAFTEN

der Studienrichtung

MASCHINENBAU

am Institut für Wärmetechnik angefertigt

Begutachter:

Prof. Dr.-Ing. Jürgen Karl

Ao.Univ.-Prof. Dipl.-Ing. Dr.techn. Wolfgang Sanz

August 2012

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, August 2012

.....

Vorwort

„So eine Arbeit wird eigentlich nie fertig, man muss sie für fertig erklären, wenn man nach Zeit und Umständen das Mögliche getan hat.“ (J.W. von Goethe 1787, Italienische Reise)

Ebenso verhält es sich mit der vorliegenden Dissertation, die im Rahmen meiner Tätigkeit als wissenschaftlicher Assistent am Institut für Wärmetechnik der Technischen Universität Graz entstand. Durch die Möglichkeit, die mir mein Doktorvater Herr Prof. Dr.-Ing. Jürgen Karl geboten hat, an unterschiedlichen Projekten mitzuwirken und eigene Ideen oder „Denkanstöße“ ungehindert zu verwirklichen, konnte ich meinem „Spieltrieb“ freien Lauf lassen, wodurch ich neben der vorliegenden Arbeit ebenso im Bereich anderer Fachgebiete meinen Horizont erweitern konnte. Dafür möchte ich mich herzlich bedanken.

Ebenso danke ich Herrn Ao. Prof. Dipl.-Ing. Dr.-techn. Wolfgang Sanz für das Interesse an meiner Arbeit und die Übernahme der Zweitbegutachtung.

Mein besonderer Dank gilt Ulrich Hohenwarter für sein Vertrauen und die Unterstützung, bei unterschiedlichen Brennerentwicklungen mitzuwirken und diese auch zu testen, sowie für die fachlichen und freundschaftlichen Gespräche.

Durch das besonders kollegiale Arbeitsklima am Institut für Wärmetechnik ist es schwierig, einzelne Personen hervorzuheben. Dennoch möchte ich mich besonders bei meinen Bürokollegen Andrea Janics und Martin Hauth für ihre Unterstützung auch bei „unlösbaren“ Problemen bedanken. Ebenso danke ich Ulrike Gerhard, Karoline Kirchsteiger und Hermann Schranzhofer für die abwechslungsreichen Gespräche im Hof und die Unterstützung, falls ein Tief zu durchtauchen war. Herrn Ao. Prof. Dipl.-Ing. Dr.-techn. Rene Rieberer danke ich für die kollegiale Zusammenarbeit und die Möglichkeit, meine Arbeit am Institut für Wärmetechnik fertigzustellen. Ebenfalls möchte ich mich bei meinen Kollegen in der Werkstätte bedanken, die mich bei der Realisierung des einen oder anderen Projektes auch außerhalb der Dienstzeit unterstützt haben. Durch die Vielzahl außerberuflicher Aktivitäten mit meinen nun leider ehemaligen Arbeitskollegen konnte ich sehr viele außergewöhnliche Momente erleben, wobei ich mir dessen bewusst bin, dass ein derartiges Arbeitsklima nicht selbstverständlich ist. Deshalb vielen Dank für die wunderbaren Erinnerungen!

Neben den Rahmenbedingungen meiner Tätigkeit ist für mich der private Rückhalt von besonderer Bedeutung. Deshalb möchte ich mich bei meinen Freunden und meiner inzwischen stark angewachsenen Familie für ihr Verständnis und Interesse an meiner Arbeit danken. Besonders bedanke ich mich bei meiner Schwester Helene für die Korrektur des, für eine Germanistin zugegebenermaßen trockenen, Stoffes.

Mein größter Dank gilt allerdings meiner Frau Karin. Ohne ihr Verständnis, ihre Unterstützung und ihre Ermutigungen wäre mir diese Arbeit nicht möglich gewesen.

Kurzfassung

Die Oxyfuel-Technologie stellt eine Möglichkeit dar, den durch kohlenstoffhaltige Brennstoffe verursachten CO_2 -Ausstoß in die Atmosphäre zu reduzieren. Aufgrund der hohen spezifischen CO_2 -Emissionen bei der Kohlenverbrennung, ist die Oxyfuel-Technologie diesbezüglich von besonderem Interesse. Obwohl die Verbrennung von Brennstoffen mit nahezu reinem Sauerstoff bei Spezialanwendungen bereits genutzt wird, besteht für die Oxyfuel-Technologie im Kraftwerkssektor Forschungsbedarf. Dies betrifft einerseits einzelne Systemkomponenten des Kraftwerks als auch Modelle zur numerischen Simulation von Einzelkomponenten oder Gesamtsystemen.

Im Rahmen dieser Arbeit wird zu Beginn auf den derzeitigen Stand der Technik in Bezug auf gängige Brennerdesigns für den kohlenstaubgefeuerten Oxyfuel-Prozess und mögliche Modellansätze zur Simulation von Oxyfuel-Brennkammern eingegangen. Aufgrund der veränderten Brennkammeratmosphäre ist es erforderlich, einige für die Verbrennungssimulation notwendige Modelle den veränderten Gegebenheiten anzupassen und anhand von experimentellen Ergebnissen zu überprüfen, um validierte Modelle zur Berechnung von Brennkammern für große Leistungsbereiche zur Verfügung stellen zu können.

Bei dem infolge eines F&E-Projektes in Kooperation mit der AE&E neu konstruierten Kohlenstaubversuchsbrenner mit einer thermischen Leistung von 2,5 MW handelt es sich um eine Weiterentwicklung des im Rahmen des EU-Projektes „Friendly Coal“ entstandenen Brenners. Die Weiterentwicklung des Brenners basiert auf allgemeinen Konstruktionsprinzipien von Kohlenstaubbrennern und den aus den erhaltenen Versuchsdaten des Vorgängermodells abgeleiteten Modifikationen. Die experimentellen Untersuchungen wurden mit einer Versuchsanlage der Fa. ENEL in Livorno, Italien, durchgeführt, wobei während der Versuche Temperatur- und Konzentrationsprofile innerhalb der Brennkammer sowie die Gesamt- und Strahlungswärmeströme entlang der Brennkammerwand gemessen wurden. Auf Basis der erhaltenen Versuchsdaten wurden die für die numerische Simulation notwendigen Randbedingungen abgeleitet.

Aufgrund der hohen Temperaturen innerhalb des Brennraums dominiert der Strahlungswärmeaustausch die Wärmeübertragung, wobei sich dieser durch die höheren CO_2 - und H_2O -Partialdrücke im Vergleich zu konventionellen Verbrennungssystemen deutlich ändert und somit derzeit verwendete Berechnungsmodelle häufig die Strahlungssituation innerhalb der Brennkammer nur bedingt wiedergeben können. Aus diesem Grund wurde eine Berechnungsroutine entwickelt, anhand derer die Berechnung von speziell für den Anwendungsfall des jeweiligen Oxyfuel-Prozesses angepasste Parameter für ein für die numerische Simulation gut geeignetes Berechnungsmodell (WSGGM) möglich ist. Da bei der

Kohlenstaubfeuerung ein Gas-Feststoff-Gemisch vorliegt, wurden des Weiteren Berechnungen der Strahlungseigenschaften der Kohlenstaubflamme anhand der Mie-Theorie durchgeführt, um die notwendigen Parameter zur zusätzlichen Berücksichtigung der Strahlungsinteraktion von Gas- und Partikelphase zu erhalten. Durch die Berechnungsroutine ist es möglich, sowohl für vereinfachte Berechnungsverfahren als auch die numerische Simulation, die notwendigen Partikelparameter für die jeweiligen Randbedingungen zu berechnen.

In weiterer Folge wurden numerische Simulationen der untersuchten Brennkammer mit dem kommerziellen Softwarepaket ANSYS Fluent durchgeführt und die Berechnungsergebnisse mit den experimentellen Ergebnissen verglichen. Dabei wurden einerseits die in ANSYS Fluent implementierten Modelle und andererseits das in Form von User-Defined-Functions implementierte modifizierte WSGG-Modell verwendet.

Die Berechnungsergebnisse zeigen eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Messergebnissen. Es konnte gezeigt werden, dass das modifizierte WSGG-Modell genauere Ergebnisse in Bezug auf Temperaturprofile und Strahlungswärmestromdichten liefert, als das in ANSYS Fluent implementierte Modell. Ebenso ergeben sich sehr ähnliche Ergebnisse bei Berücksichtigung der Strahlungsinteraktion zwischen Gas- und Partikelphase. Somit ist es gelungen, ein validiertes Strahlungsberechnungsmodell für Oxyfuel-Bedingungen zur Verfügung zu stellen, das aufgrund der speziell auf den jeweiligen Anwendungsfall abgestimmten Modellparameter für die numerische Simulation von Großkraftwerkskesseln eingesetzt werden kann.

Abstract

The Oxyfuel-Technology represents one possibility to reduce CO₂-Emissions which originate from power generation with fossil fuels. Due to the high specific CO₂-Emissions while coal combustion, Oxyfuel-Technology is of particular interest in this field. Although the combustion of fossil fuels with nearly pure oxygen is already state of the art for special applications, some research for the application of the Oxyfuel-Technology within the power generation sector is necessary. This concerns both the individual system components of the power plant as well as models for the numerical simulation of single components or the complete system.

At the beginning of this work the current state of the art in terms of the design of pulverized coal burners for Oxyfuel-Combustion and possible modelling approaches for the simulation of Oxyfuel-Combustion chambers are discussed. Due to the change of the combustion chamber atmosphere compared to conventional air combustion atmospheres, it is necessary to adjust and review some sub-models in order to make validated models for the simulation of coal fired boilers available.

As a result of an R&D-Project in cooperation with AE&E a new 2.5 MW_{th} burner for pulverized coal for both conventional air and Oxyfuel-Combustion was designed. The burner construction bases on the one hand on general construction principles of pulverized coal burners and on the other hand on the experimental experiences of the previous designed burner within the framework of the RFCS-Project "Friendly Coal". The experimental investigations were carried out at an experimental test plant of the company ENEL in Livorno, Italy, whereas detailed measurements in terms of in-flame temperature and gas concentration profiles and total as well as radiative heat flux measurements along the combustion chamber wall were performed. Subsequently boundary conditions for the numerical simulations were derived on basis of the experimental data.

Due to the high temperatures within the combustion chamber, radiative heat transfer dominates the overall heat transfer. Because of the higher CO₂ and H₂O partial pressures compared to conventional combustion with air, it is only partially possible to reproduce the radiative heat transfer with standard models. For this reason, a calculation routine was developed with which it is possible to calculate the specific parameters for a computational efficient model (the Weighted Sum of Grey Gases Model) for the particular case of application. Since coal particles participate in radiative heat transfer further investigations were performed using the Mie-Theory in order to deduce the necessary parameters for the additional consideration of the radiation interaction of the gas and particle phase. A new programmed calculation routine enables the possibility to calculate the necessary parameters for simplified model approaches as well as for the numerical simulation particle radiation interaction.

Subsequently, numerical simulations of the investigated combustion chamber with the commercial software package ANSYS Fluent were performed and the simulation results were compared with the experimental results. Therefore the in ANSYS Fluent implemented models as wells the modified WSGG model in the form of User-Defined-Functions were used.

The simulation results show good agreement compared to the measured data. It could be shown that the modified WSGG model provides more accurate results in terms of temperature profiles and radiative heat flux compared to the standard model. The simulation results, including particle radiation interaction, show comparable results. Due to the specific WSGG-parameter calculation it is possible to provide a validated radiation simulation model for Oxyfuel-Conditions which can be used for the numerical simulation of large power plant boilers.

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung und Zielsetzung	1
2	Stand der Technik	6
2.1	Kohlenstaubbrenner	10
2.2	Numerische Simulation von Oxyfuel-Kohlenstaubflammen.....	12
3	Oxyfuel-Versuche mit einem 2,5 MW _{th} Kohlenstaubbrenner	18
3.1	Versuchsanlage Fo.Sper	18
3.1.1	Eingesetzte Messtechnik.....	21
3.1.2	Allgemeines Hochfahrprozedere und Umschalten in den Oxyfuel-Betrieb	25
3.2	Grundlagen zu Kohlenstaubbrennern	26
3.2.1	Allgemeine Konstruktionsprinzipien	26
3.2.2	Allgemeine Auslegungskriterien	30
3.2.3	Versuchsergebnisse beim „Friendly Coal“-Brenner	33
3.3	„AE&E“-Brenner	38
3.3.1	Materialwahl	43
3.3.2	Versuchsmatrix und Testergebnisse des „AE&E“-Brenners.....	44
3.4	Ableitung der Randbedingungen für die CFD-Simulation.....	54
4	Strahlungswärmeaustausch	60
4.1	Strahlungseigenschaften der Gasphase ohne Partikel	62
4.1.1	Modelle zur Berechnung des Absorptions- und Emissionsgrades	69
4.1.2	Anwendung des Globalmodells für Oxyfuel-Atmosphären.....	78
4.1.3	Berechnung der WSGG-Koeffizienten für die Rauchgaszusammensetzung während der Experimente mit dem „AE&E“-Brenner	83
4.2	Strahlungseigenschaften von Partikeln.....	86
4.3	Vereinfachte Berechnung des Emissionsgrades von Gas-Partikel-Gemischen	97
5	Numerische Simulation.....	101
5.1	Geometrieerzeugung und Gittergenerierung	101
5.2	Modellwahl und Randbedingungen	106

5.2.1	Turbulenzmodell.....	106
5.2.2	Partikel- und Gasphasen-Modellierung.....	107
5.2.3	Strahlungsmodell	109
5.2.4	Randbedingungen.....	113
5.3	Durchgeführte Simulationen	114
5.3.1	Berechnungsergebnisse mit den Standardmodellen ohne Partikel- Strahlungs-Interaktion	115
5.3.2	Berechnungsergebnisse mit dem modifizierten WSGG-Modell ohne Partikel-Strahlungs-Interaktion	121
5.3.3	Berechnungsergebnisse mit dem modifizierten WSGG-Modell und Partikel- Strahlung-Interaktion	123
5.3.4	Vergleich der mit unterschiedlichen Modellen berechneten Strahlungswärmeströme.....	125
6	Zusammenfassung und Ausblick.....	128
7	Abbildungsverzeichnis.....	131
8	Tabellenverzeichnis.....	137
9	Literaturverzeichnis	139
10	Anhang.....	148

Abkürzungsverzeichnis

CCS	Carbon Capture and Storage
CFD	Computational Fluid Dynamics
DNS	Direkte Numerische Simulation
DO	Discrete-Ordinates
EOR	Enhanced Oil Recovery
EWBM	Exponential-Wide-Band-Modell
GSMA	Gesamt-Sauerstoff-Massenstrom-Anteil
IFRF	International Flame Research Foundation
IGCC	Integrated Gasification Combined Cycle
LES	Large-Eddy-Simulation
LZA	Luftzerlegungsanlage
RANS	Reynolds Averaged Navier Stokes
RFCS	Research Fund for Coal and Steel
RSM	Reynolds-Stress-Modell
RTE	Radiative Transfer Equation
SNBM	Statistical-Narrow-Band-Model
UDF	User Defined Function
VBA	Visual Basic for Applications
WSGG	Weighted-Sum-of-Gray-Gases

Formelzeichen und Einheiten

A	Fläche [m ²]
a	Gewichtungsfaktor WSGGM [-]
C	lineare Phasenfunktion [-]
c	Partikelabstand [μm] Lichtgeschwindigkeit [m·s ⁻¹] Koeffizient [-]
D	Drehimpulsstrom [kg·m ² ·s ⁻²]
E	Energie [J]
f	Frequenz [s ⁻¹]
I	Strahldichte [W·m ⁻³ Sr ⁻¹]
l	Länge [m]
k	Brechungsindex, Imaginärteil [-]
N	Partikelanzahl [-]
m	komplexer Brechungsindex [-]
n	Brechungsindex, Realteil [-]
p	Druck, Partialdruck [bar]
P	Axialimpulsstrom [kg·m·s ⁻²]
Q	optischer Wirkungsfaktor [-]
q	Wärmestrom [W·m ⁻²]
r	Radius [m]
Re	Reynoldszahl [-]
s	geometrische Weglänge [m]
S	Quellterm [W·m ⁻³]
SN	Drallzahl (Swirl Number) [-]
t	Zeit [s]
T	Temperatur [K]
u	Geschwindigkeit [m·s ⁻¹]

x Größenparameter [-]

Griechische Symbole

α	Wärmeübergangskoeffizient [$\text{W}\cdot\text{m}^{-2}$] Absorptionsgrad [-]
β	Extinktionskoeffizient [m^{-1}]
ε	Emissionsgrad [-]
κ	Absorptionskoeffizient [m^{-1}]
λ	Wärmeleitkoeffizient [$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}$] Wellenlänge [μm]
μ	Koeffizient allgemein [-]
ν	Molanteil [$\text{kmol}\cdot\text{kmol}^{-1}$]
ρ	Dichte [$\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$]
σ	Abweichung [-] Stefan-Boltzmann Konstante $5,669\times 10^{-8}$ [$\text{W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-4}$] Streukoeffizient [-]
τ	Transmissionsgrad [-]
ϕ	Phasenfunktion [-]
χ	Summe der Fehlerquadrate [-]
Ω	Raumwinkel [Sr]
\hbar	Planck'sches Wirkungsquantum $6,626\times 10^{-34}$ [$\text{J}\cdot\text{s}^{-1}$]

Indizes

a	außen oder axial
abs	Absorption
B	Schwarzer Körper
BM	Brennermündung
CO ₂	Kohlendioxid
D	Diffusor
em	Emission
G	Gasphase
H ₂ O	Wasserdampf
i	innen Gas i (WSGG-Modell)
min	Minimum
mittel	Mittelwert
N ₂	Stickstoff
O ₂	Sauerstoff
opt	optische Weglänge [bar·m]
P	Partikel
ref	Referenz
rstr	Rückstreuung
S	Streuung
SNB	Statistical Narrow Band
St	Strahlung
t	tangential
x	x-Richtung
λ	Wellenlänge
μ	Platzhalter für β, σ, κ

1 Einleitung und Zielsetzung

Es ist unbestritten, dass der weltweite Energiebedarf in den nächsten Jahrzehnten weiterhin deutlich ansteigen wird (IEA 2010b). Diesem steht jedoch der verantwortungsvolle Umgang mit der Umwelt entgegen. Aufgrund der Tatsache, dass der derzeitige Primärenergiebedarf zu 80 % durch fossile Energieträger gedeckt wird, und dieser Anteil auch in absehbarer Zukunft nicht signifikant sinken wird, kann von einer umweltschonenden Energiebereitstellung nicht ausgegangen werden (IEA 2009).

Es existiert jedoch ein allgemeiner Konsens, dass die mit der Energiebereitstellung verbundenen CO₂-Emissionen deutlich reduziert werden müssen, wobei als primär treibende Kraft die Diskussion der Treibhausgasemissionen und deren Einfluss auf den Klimawandel zu nennen ist. Soll sich die CO₂-Konzentration in der Atmosphäre auf 450ppm einpendeln, dann müssen eine Vielzahl von Technologien zum Einsatz kommen (Blue Map Szenario, IEA 2010c). Neben den erneuerbaren Energieträgern spielt die Energieeffizienz, sowohl im Bereich der Energiebereitstellung als auch im privaten Sektor, eine zentrale Rolle. Den Carbon Capture and Storage (CCS) Technologien wird ebenfalls ein erhebliches Potential zur Erreichung einer Konzentrationsstabilisierung in einem akzeptablen Bereich zugeschrieben. Diese Technologien haben gemeinsam, dass bei der Energiebereitstellung entstehendes CO₂ nicht in die Atmosphäre emittiert, sondern abgeschieden und in Speicherstätten verpresst wird. Es ist nicht von der Hand zu weisen, dass diese Technologie lediglich eine Verschiebung des Problems darstellt. Dennoch erscheint es mittelfristig notwendig, auch auf diese Technologien zurückzugreifen, da eine kurzfristige Umstellung auf nicht fossile Energieträger unter ökonomischen Gesichtspunkten kaum möglich erscheint.

In Abbildung 1-1 sind die derzeit meist diskutierten CCS-Technologien schematisch dargestellt. Bei jeder dieser Technologien wird primär das Ziel verfolgt, das bei der Verbrennung von kohlenstoffhaltigen Brennstoffen, wie zum Beispiel Erdgas, Kohle oder Biomasse, entstandene CO₂ nicht in die Atmosphäre zu emittieren, sondern abzuscheiden und zu speichern.

Beim Pre-Combustion-Prozess wird weitestgehend der Integrated Gasification Combined Cycle (IGCC) mit zusätzlicher CO₂-Abscheidung diskutiert (IPCC 2006). Der Brennstoff wird mit reinem Sauerstoff vergast, wobei das daraus entstandene Produktgas hauptsächlich aus CO, CO₂ und H₂ besteht. Entweder durch das Abscheiden von H₂ oder durch eine weitere Shiftstufe, um den H₂-Anteil weiter zu erhöhen, und darauffolgender Abscheidung von CO₂ wird der so gewonnene Wasserstoff in weiterer Folge thermisch genutzt. Den geringen Wirkungsgradeinbußen (ca. 7,5 Prozentpunkte) steht eine verringerte Verfügbarkeit

gegenüber (IEA 2010a, Falcke et al. 2011, Chen, Rubin 2009). Ebenso ist eine nachträgliche Implementierung in eine bestehende Anlage nur erschwert möglich.

Beim Post-Combustion-Prozess wird der Brennstoff in einer konventionellen Feuerungsanlage verbrannt und danach das CO₂ durch Amin-Wäscher abgeschieden. Durch die hohen Volumenströme einerseits und die geringe CO₂-Konzentration andererseits ist der Aufwand der CO₂-Abscheidung deutlich größer im Vergleich zum Pre-Combustion-Prozess. Der Vorteil dieses Konzepts liegt darin, dass bestehende Kraftwerksblöcke relativ einfach umgerüstet werden können, wobei mit einem Wirkungsgradverlust von ca. 10,5 Prozentpunkten gerechnet wird (IEA 2010a).

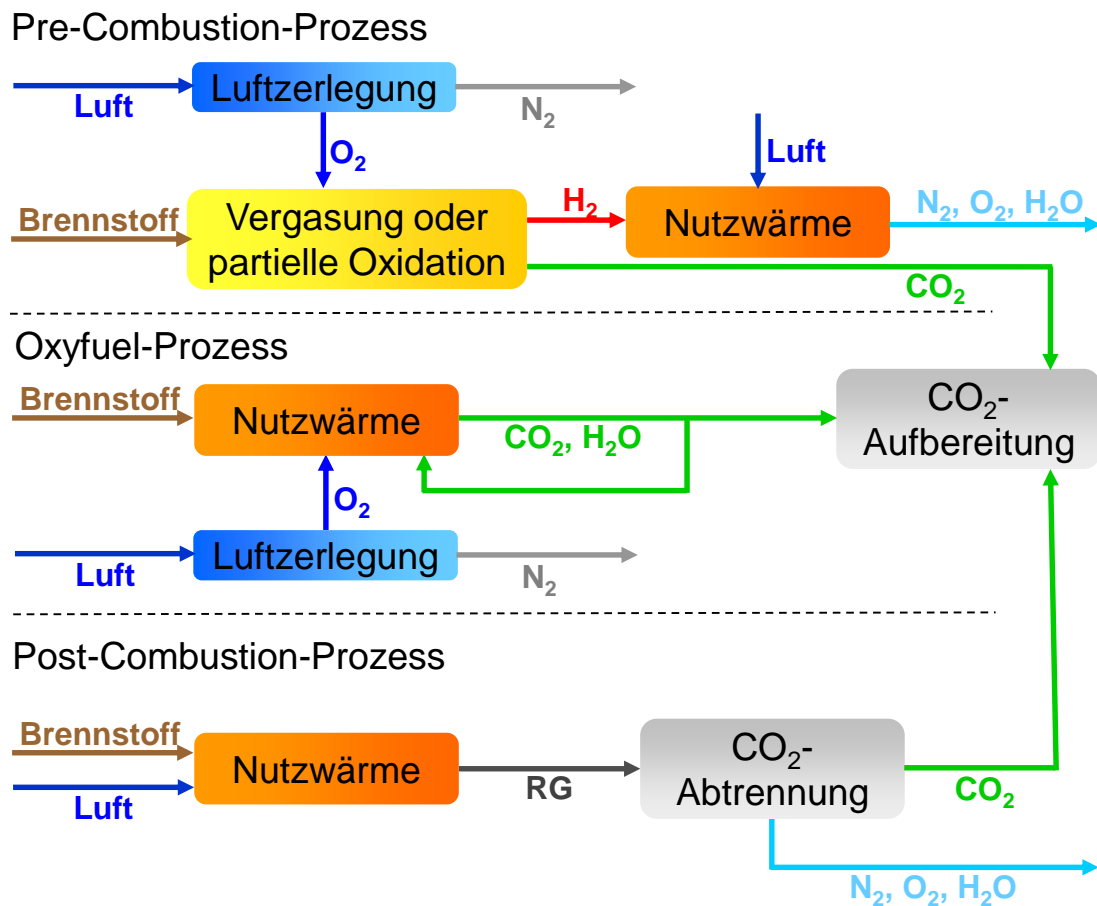


Abbildung 1-1: Prinzip-Schaltbilder der CCS-Technologien (vgl. IPCC 2006)

Beim Oxyfuel-Prozess wird ein kohlenstoffhaltiger Brennstoff mit nahezu reinem Sauerstoff (>95 Vol.%) verbrannt. Durch das Fehlen des Luftstickstoffs im Oxidator kann durch alleiniges Kondensieren des Wasserdampfanteils im Rauchgas eine Kohlendioxidkonzentration von über 90 Vol.% erreicht werden. Je nach Konzept kann die Oxyfuel-Technologie ebenfalls bei bestehenden Kraftwerken nachgerüstet werden. Ausgehend von

einem konventionellen kohlenstaubgefeuerten Kraftwerk ist mit einer Wirkungsgradeinbuße von 9,6 Prozentpunkten zu rechnen (IEA 2010a).

Das abgeschiedene CO₂ wird in weiterer Folge in geeigneten geologischen Lagerstätten gespeichert, wie zum Beispiel Gas- und Öllagerfelder und saline Aquifere (Stefan 2008). Diese werden unter den Gesichtspunkten der tatsächlichen maximalen Kapazität, der möglichen Injektionsrate pro Tag und sicherheitstechnischen Aspekten der Speicherung ausgewählt.

Als Brennstoff für den Oxyfuel-Prozess wird meist Kohle diskutiert. Dies liegt einerseits darin begründet, dass gerade bei der Stromerzeugung der prozentuelle Anteil von Kohle als Energieträger weltweit mit 40,6 % (IEA 2010b) am größten ist. Andererseits spielt Kohle durch die weltweite Verfügbarkeit und dem geringen Preis nach wie vor und auch in näherer Zukunft eine wichtige Rolle als Energieträger (IEA 2010b, Wall 2007). Des Weiteren sind im Vergleich zu anderen kohlenstoffhaltigen Brennstoffen die spezifischen äquivalenten CO₂-Emissionen bei Kohle deutlich höher (z.B. Erdgas 400 bis 500 g·kW⁻¹·h⁻¹, Kohle: 750 bis 1200 g·kW⁻¹·h⁻¹, Wagner et al. 2007), womit sich ein erhebliches Potential zur Reduktion der CO₂-Emissionen in die Atmosphäre ergibt.

In Abbildung 1-2 ist qualitativ der derzeitige Stand der Technik der jeweiligen Anlagenkomponenten für den Oxyfuel-Prozess mit Kohle dargestellt.

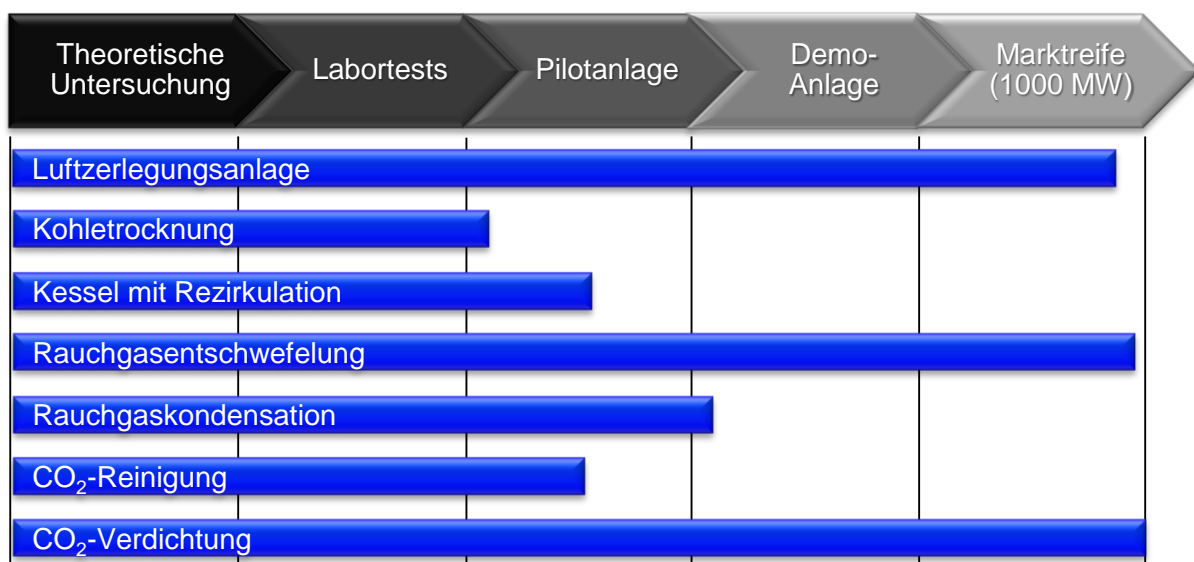


Abbildung 1-2: Entwicklungsstand des Oxyfuel-Prozesses (vgl. Burchhardt 2009)

Um den Prozess in thermischen Kraftwerken realisieren zu können, sind einige zusätzliche Komponenten im Vergleich zu konventionellen Kraftwerken notwendig. So müssen eine Anlage zur Gewinnung des reinen Sauerstoffs (z.B. Luftzerlegungsanlage), eine CO₂-

Verflüssigungsanlage und CO₂-Verdichter vorgesehen werden. Ebenso müssen einzelne Systemkomponenten für den Einsatz unter Oxyfuel-Bedingungen angepasst werden. Während bereits einige notwendige Technologien für den Oxyfuel-Prozess zur großtechnischen Umsetzung verfügbar sind, besteht Forschungsbedarf im Bereich der Kohletrocknung, dem Kesseldesign inklusive Brennern, der Rauchgaskondensation und der CO₂-Reinigung (Burchhardt 2009).

Aufgrund der fehlenden Betriebserfahrungen mit der Oxyfuel-Technologie im Kraftwerkssektor ist es jedoch nicht möglich, auf empirisch entwickelte Auslegehilfen und Know-how zurückzugreifen. Dies trifft sowohl auf den Gesamtprozess als auch auf Einzelkomponenten zu. Eine Möglichkeit stellt sicherlich die Nutzung von numerischen Simulationen dar, um die Funktionalität einzelner Systemkomponenten oder auch gesamter Baugruppen vorab abschätzen zu können. Dafür ist es jedoch notwendig, die einzelnen Berechnungsmodelle auf deren Einsetzbarkeit für den Oxyfuel-Prozess zu überprüfen. Beispiele hierfür sind Kohlenstaubbrennmodelle (Pyrolyse, Koksabbrenn), Gasphasenreaktionsmodelle, Strahlungsmodelle (Gasstrahlung, Partikelstrahlung) und einige andere Modelle, die notwendig sind, um ein derart komplexes System wie eine Feuerung akkurat darstellen zu können. Durch die veränderte Brennkammeratmosphäre müssen diese modifiziert und validiert werden, um auch plausible und belastbare Ergebnisse erzielen zu können (Scheffknecht 2009). Aufgrund der Tatsache, dass derzeit keine im großtechnischen Maßstab gebauten Oxyfuel-Anlagen existieren, muss zur Validierung des Gesamtmodells auf kleinere Versuchsanlagen zurückgegriffen werden.

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen einiger Projekte, deren Fokus in der Entwicklung von Kohlenstaubbrennern unter Einsatz von numerischen Simulationen lag. Im Rahmen des europäischen Research Fund for Coal and Steel (RFCS) Projektes „Friendly Coal“ wurde bereits unter Nutzung des kommerziellen Simulationsprogramms ANSYS Fluent ein Versuchsbrenner mit einer thermischen Leistung von 2,5 MW konstruiert und in einer Versuchsanlage in Livorno, Italien, getestet. In einem darauffolgenden Forschungs- und Entwicklungsprojekt in Kooperation mit der damaligen Austrian Energy & Environment (jetzt Andritz Energy & Environment, AE&E) wurden die Erkenntnisse dazu genutzt, einerseits die notwendigen Modelle zur Simulation von kohlenstaubgefeuerten Oxyfuel-Brennern zu verbessern und einen Folgebrenner mit einer thermischen Leistung von 2,5 MW zu konstruieren und detailliert in der zuvor genannten Versuchsanlage zu testen. Während der Bearbeitung der einzelnen Projekte kristallisierte sich heraus, dass besonders im Bereich der Strahlungssimulation (Strahlungseigenschaften von Gas-Feststoff-Gemischen) neue beziehungsweise modifizierte Modelle notwendig sind, um die Strahlungssituation in Oxyfuel-Kesseln genauer berechnen zu können.

Neben der allgemeinen Beschreibung des derzeitigen Standes der Technik in Bezug auf den Oxyfuel-Prozess werden im folgenden Abschnitt aktuelle Brennerdesigns und deren Auslegungskriterien genauer erläutert. Ebenfalls werden derzeit gängige Modellansätze und die zugrundeliegenden Versuchsdaten zur numerischen Simulation von Oxyfuel-Flammen beschrieben.

In Abschnitt 3 werden sowohl die Versuchsanlage „Fo.Sper“ der Fa. ENEL und die eingesetzte Messtechnik als auch das neue Brennerdesign, die durchgeführten Versuche und die Versuchsergebnisse genauer beschrieben. Auf Basis der Messdaten werden die Randbedingungen für die numerische Simulation abgeleitet.

In weiterer Folge wird detailliert auf die Strahlungseigenschaften sowohl der Gas- als auch der Partikelphase eingegangen. Dabei werden theoretische Ansätze zur Berechnung der Wärmestrahlung von Gasen und den Strahlungseigenschaften von Partikeln zur Ableitung der einzelnen Strahlungsmodelle beziehungsweise Modellparameter verwendet.

Zur Überprüfung der neu berechneten Modellparameter wurden diese in das kommerzielle Simulationsprogramm ANSYS Fluent implementiert und die Simulationsergebnisse mit den aus den Versuchen erhaltenen Messdaten verglichen.

2 Stand der Technik

Während die Oxyfuel-Technologie im Rahmen der CCS-Technologien seit den achtziger Jahren des vorigen Jahrhunderts diskutiert wird (Davidson, Santos 2010), wurde diese im Bereich der Hochtemperaturtechnik, wie zum Beispiel der Glaserzeugung oder Metallverarbeitung, bereits deutlich früher angewendet (Baukal 2003).

Wie bereits im vorhergehenden Abschnitt angeführt, ist die Oxyfuel-Technologie aufgrund der hohen spezifischen CO_2 -Emissionen bei der Kohleverbrennung von besonderem Interesse. In Abbildung 2-1 ist ein Prinzip-Schaltbild eines konventionellen kohlenstaubgefeuerten Kessels mit den zusätzlich notwendigen Komponenten dargestellt.

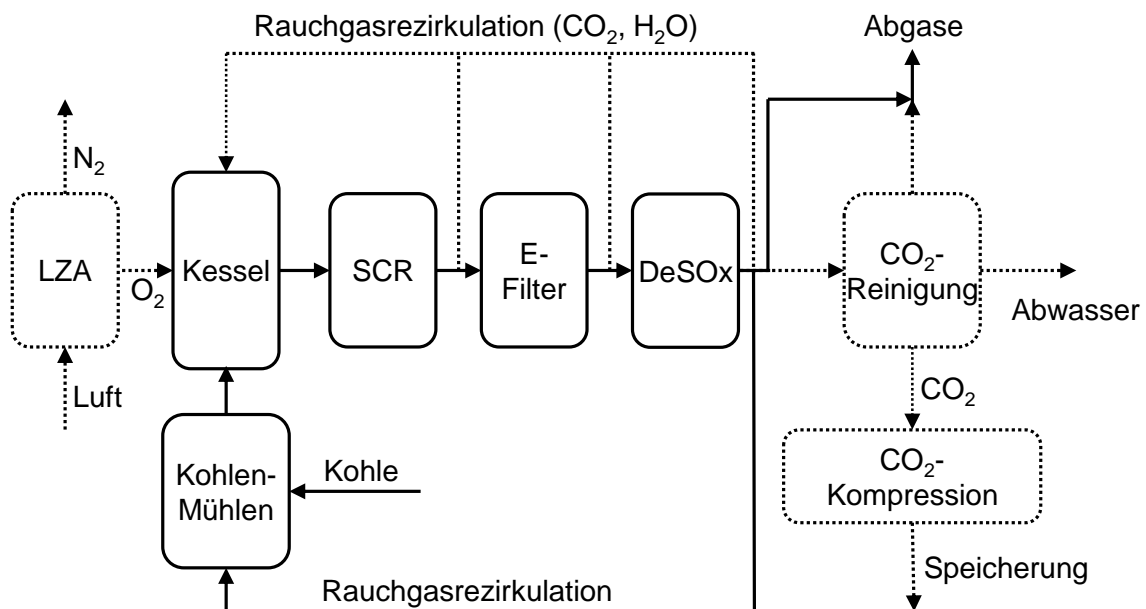


Abbildung 2-1: Mögliches Schaltbild eines kohlenstaubgefeuerten Oxyfuel-Prozesses. LZA: Luftzerlegungsanlage, SCR: Selective Catalytic Reduction (Entstickung), DeSOx: Entschwefelung (vgl. Toftegaard et al. 2010)

Die punktierten Linien stellen die zusätzlichen Komponenten für den Oxyfuel-Prozess im Vergleich zu einem konventionellen Kessel dar. Es ist ersichtlich, dass neben den Hauptkomponenten eines konventionellen Kraftwerks zusätzliche Aggregate implementiert werden müssen. Zur Bereitstellung des reinen Sauerstoffs (>95 Vol.% O_2) werden derzeit hauptsächlich konventionelle kryogene Luftzerlegungsanlagen (LZA) vorgesehen, da diese bereits auch für größere Sauerstoffmassenströme den Stand der Technik darstellen (Higginbotham et al. 2011, Kownatzki et al. 2011). Da die Reinheit des Sauerstoffs einen direkten Einfluss auf die CO_2 -Aufbereitung hat, kann ein Optimum in Bezug auf den Energiebedarf beider Komponenten berechnet werden, das sich, unter Berücksichtigung der

Luftinfiltration, bei etwa 95 Vol.% O₂ einstellt (Toftegaard et al. 2010). Bei der CO₂-Reinigung, zum Beispiel durch kryogene Destillation, werden die Verunreinigungen, die nach der Kondensation des Wasserdampfes im Rauchgas noch vorhanden sind, noch vor der Verdichtung entfernt. Diese stammen von der verwendeten Kohle, der Luftinfiltration und dem Sauerstoffüberschuss nach der Verbrennung. Die geforderte Reinheit des Kohlendioxids hängt maßgeblich von der geforderten Reinheit für die jeweilige Lagerstätte ab, wobei es diesbezüglich noch keine klaren Vorgaben gibt (Kownatzki et al. 2011, Toftegaard et al. 2010). Die Unreinheiten beeinflussen in weiterer Folge die CO₂-Kompression (100-110 bar, >31,1 °C, überkritisch), da der kritische Druck bei verunreinigtem CO₂ ansteigt.

Neben den zusätzlich benötigten Komponenten für den Oxyfuel-Prozess verändern sich aufgrund der veränderten Rauchgaszusammensetzung ebenfalls die Betriebsbedingungen des Kessels und der Rauchgaslinie im Vergleich zu einem konventionellen Kraftwerk. Durch den deutlich höheren Anteil von CO₂ sind die spezifische Wärmekapazität und Dichte des Rauchgases deutlich größer. Ebenso verändern sich die Strahlungseigenschaften durch die höheren Partialdrücke von CO₂ und H₂O (Scheffknecht 2009).

Bei der Kesseltechnologie besteht das Grundproblem des Oxyfuel-Prozesses darin, dass durch das Verbrennen mit reinem Sauerstoff die Verbrennungstemperaturen deutlich über der adiabaten Verbrennungstemperatur von konventionellen Feuerungen liegen. Um die maximal zulässigen Temperaturen nicht zu überschreiten, wird in der Regel das Konzept der Rauchgasrezirkulation angewendet, wodurch ein ähnlich temperatursenkender Effekt wie der durch Luftstickstoff erreicht wird. Wie viel Rauchgas rezirkuliert werden muss, ist jedoch vom Auslegungskonzept des Kraftwerkes abhängig. Einerseits werden bereits existierende Kraftwerke für den Oxyfuel-Betrieb umgerüstet (z.B. Callide, vgl. Spero 2009; Young-dong, vgl. Kim, Lee 2009), andererseits werden neue Kohlekraftwerke speziell für den Oxyfuel-Betrieb mit Rauchgasrezirkulation geplant (z.B. Jänschwalde, vgl. Hultqvist et al. 2009; Black Hills, vgl. McCauley 2009).

Für die Umrüstung eines konventionellen Kraftwerkes auf Basis der Oxyfuel-Technologie müssen einige Randbedingungen eingehalten werden, um einen effizienten Betrieb zu gewährleisten. Durch die veränderte Strahlungssituation im Kessel (höhere CO₂- und H₂O-Partialdrücke) muss darauf geachtet werden, dass die maximal zulässige Wärmestromdichte im Verdampfer nicht überschritten wird. Des Weiteren ist es notwendig, dass der Volumenstrom innerhalb des Kessels annähernd konstant gehalten wird, um einerseits in den konvektiven Wärmeübertragungszonen ähnliche Wärmeströme realisieren zu können und andererseits den Austrag von Flugasche aus dem Kessel zu gewährleisten. Ebenso

müssen die Flammenform und die Flammenlänge im Oxyfuel-Betrieb jenen im konventionellen Betrieb ähnlich sein (Tigges et al. 2009, Kakaras et al. 2007).

In Abbildung 2-2 sind zwei derzeit gängige Kesselbauformen dargestellt, um die Zuordnung von Strahlungs- und Konvektionsheizflächen (rot bzw. gelb markierte Bereiche) zu veranschaulichen. Meist wird lediglich der Verdampfer als Strahlungsheizfläche ausgeführt, wobei nur ein Teil der Rohroberfläche im Strahlungsaustausch mit der Brennkammer steht. Da bei konvektiven Heizflächen die vollständige Rohroberfläche wirksam ist, überwiegt bereits bei Temperaturen unter 1200°C die konvektive Wärmeübertragung (Strauß 2009).

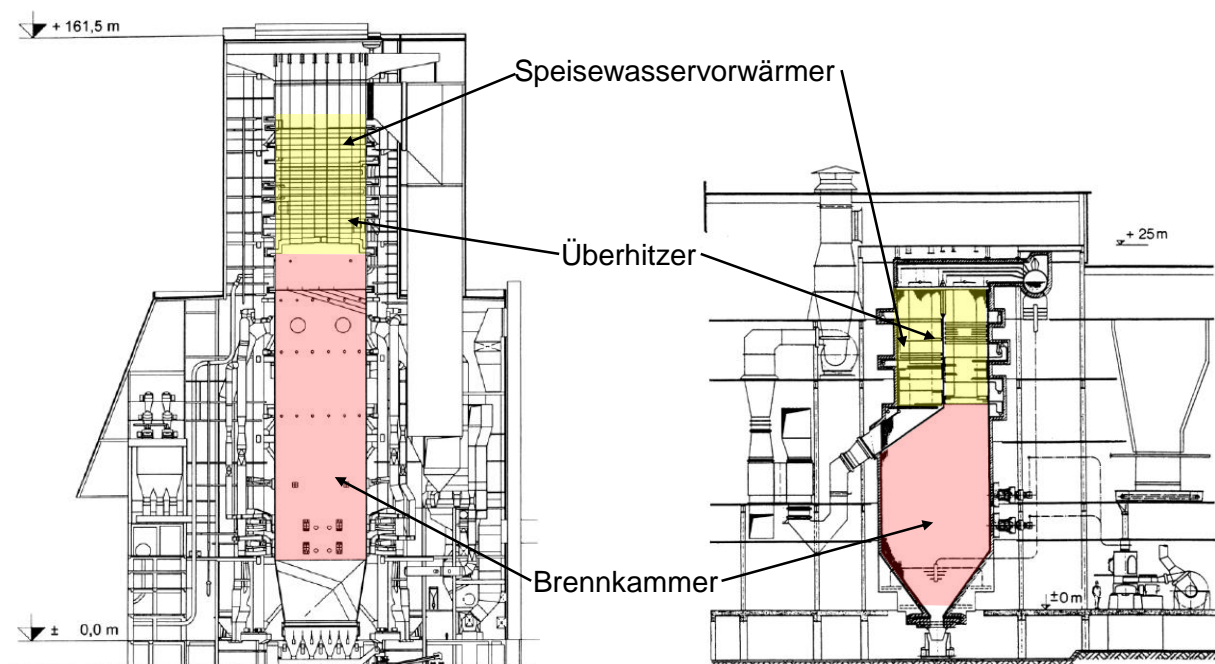


Abbildung 2-2: Zwangdurchlaufdampferzeuger mit Tangentialfeuerung mit einfacher Zwischenüberhitzung (links, vgl. Strauß 2009) und 1 1/2-Zug-Naturumlaufdampferzeuger mit Frontfeuerung (rechts, vgl. Effenberger 2000)

Handelt es sich beim Kraftwerkskonzept um eine Neuauslegung beziehungsweise um einen Neubau, kann die Kesselgeometrie den neuen Randbedingungen in Bezug auf Volumenströme und Strahlungssituation im Kessel adaptiert werden.

In Abbildung 2-3 sind exemplarisch die Änderungen der adiabaten Flammentemperatur, des Strahlungsanteils der Wärmeübertragung und des Volumenstroms bei der Oxyfuel-Verbrennung in Abhängigkeit von der Rezirkulationsrate (feuchtes Rauchgas, 200°C) für Steinkohle (Anhang 9) dargestellt. Ohne Rauchgasrezirkulation (Rezirkulationsrate=0 %) steigen die Verbrennungstemperaturen im Vergleich zu einem mit Luft berechneten Fall bei gleicher Stöchiometrie ($\lambda=1.05$) erheblich an. Um eine maximal zulässige Rauchgastemperatur von 1200°C am Übergang der Strahlungs- zu den Konvektionsheizflächen nicht zu überschreiten und um eine ähnliche Aufteilung der Wärmeübertragungsanteile wie im

luftgefeuerten Fall zu erreichen, wäre in diesem Fall eine Rezirkulationsrate von 74,65 % notwendig (entspricht einem O₂-Gehalt von ca. 26,7 Vol.% trocken im rezirkulierten Rauchgas). Somit kann der Strahlungsanteil durch die Rauchgasrezirkulation entscheidend gesenkt werden.

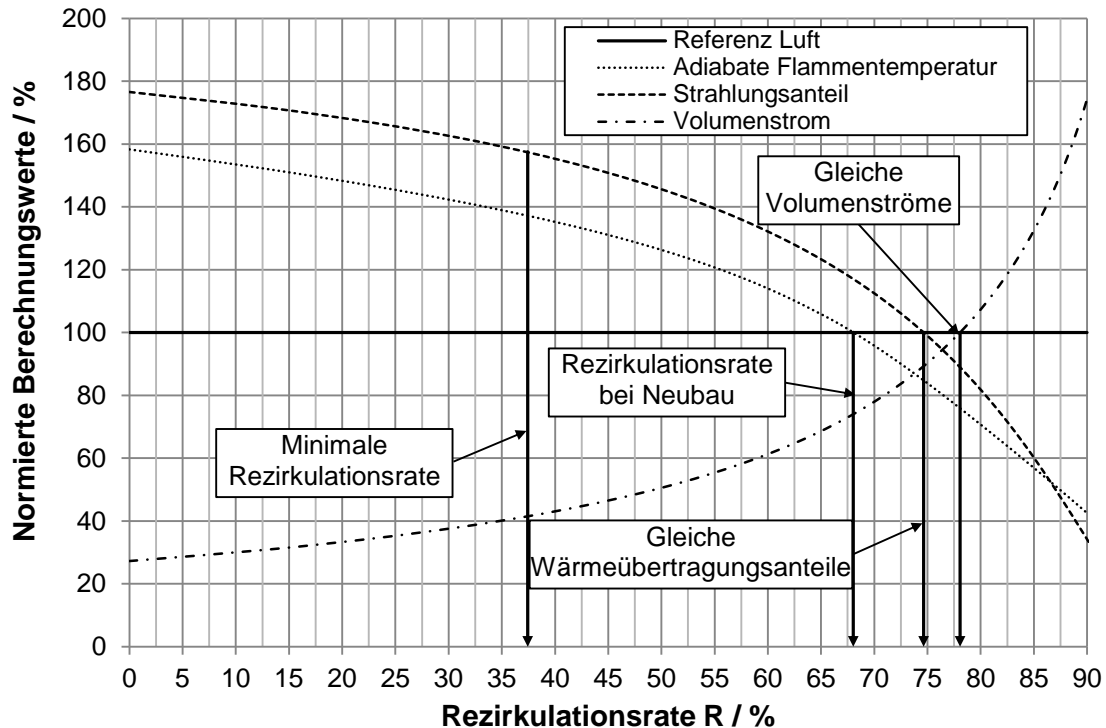


Abbildung 2-3: Normalisierte Berechnungswerte der adiabaten Flammentemperatur, des Strahlungsanteils und des Volumenstroms bezogen auf einen mit Luft berechneten Fall

Soll jedoch der gleiche Volumenstrom wie im luftgefeuerten Fall realisiert werden, so müsste die Rezirkulationsrate auf ca. 78 % gesteigert werden, wodurch die Kesselaustrittstemperatur deutlich sinkt und die Wärmeübertragung durch Strahlung abnimmt. Bei einer Neuauslegung des Kessels könnte die Rezirkulationsrate im Vergleich zum Umrüstungsfall gesenkt werden, wodurch der durch Strahlung abgeführte Anteil ansteigt. Bei einer Rezirkulationsrate von ca. 68 % wird eine vergleichbare adiabate Flammentemperatur zum Referenzfall erreicht (vgl. Scheffknecht 2009). Das theoretische untere Limit der Rauchgasrezirkulation wird durch den für den Kohlenstaubtransport notwendigen Rauchgasvolumenstrom erreicht (Annahme: Massenstromverhältnis von Trägergas zu Brennstoff beträgt 2, typische Werte liegen zwischen 1,8 und 3 (Zelkowski 2004)). Wie in Abbildung 2-3 ersichtlich ist, ist der Anteil der Wärmeübertragung durch Strahlung infolge der sehr hohen Temperaturen in diesem Bereich bereits deutlich größer, woraus Probleme in Bezug auf einsetzbare Materialien im Brennermündungsbereich und der Brennkammer im Allgemeinen entstehen können.

Aufgrund der veränderten Betriebsbedingungen kommt ebenfalls den Brennern eine besondere Bedeutung zu, da nur durch eine geeignete Flammgeometrie eine gleichmäßige Wärmestromdichte innerhalb der Brennkammer erzeugt werden kann.

2.1 Kohlenstaubbrenner

Obwohl auch im Bereich der Kohleverbrennung mit reinem Sauerstoff Tangentialfeuerungen zum Einsatz kommen (Marion et al. 2009), werden derzeit hauptsächlich Drallstufenbrenner (Rundbrenner mit Drall und gestufter Volumenstromzuführung, siehe Abschnitt 3.2, Seite 26) genauer untersucht (Davidson, Santos 2010). Dies liegt durchwegs darin begründet, dass aufgrund der hohen Variabilität von Rundstrahlbrennern der Kesselbetrieb sowohl konventionell mit Luft als auch mit reinem Sauerstoff realisierbar ist.

Erste Versuche mit Drallstufenbrennern für den Oxyfuel-Betrieb wurden bereits Mitte der neunziger Jahre im Rahmen des EU-Projektes Joule II (Joint Opportunities for Unconventional or Long-Term Energy Supply) durchgeführt (Europäische Kommission 1997). Im Rahmen des Programms wurden an unterschiedlichen Versuchsanlagen (thermische Leistung 0,3–3 MW) experimentelle Untersuchungen durchgeführt, um einerseits die grundsätzliche Durchführbarkeit des Oxyfuel-Betriebs zu überprüfen und andererseits aus den erhaltenen Daten Grundlagen für weitere technologische und ökonomische Überlegungen für die Umrüstung eines konventionellen Kohlekraftwerks abzuleiten.

Neben den bisher beschriebenen Regelmechanismen bei Rundstrahlbrennern ergibt sich beim Oxyfuel-Betrieb ein weiterer Freiheitsgrad durch die Beimischung von reinem Sauerstoff, wobei dieser entweder einzelnen Volumenströmen beigemischt oder direkt in den Brennermündungsbereich injiziert werden kann, wie dies bei den ersten Oxyfuel-Versuchskampagnen der Fall war (Woycenko et al. 1994, Kimura et al. 1995). Während der Versuche stellte sich heraus, dass durch die gezielte Sauerstoffinjektion in den Brennermündungsbereich deutlich stabilere Flammen generiert werden können und ein deutlich besserer Ausbrand des Brennstoffes erreicht wird. Deshalb wurden auch in weiterer Folge bei Low-NO_x-Brennerweiterentwicklungen häufig Sauerstoffinjektionslanzen oder eigens dafür vorgesehene koaxial angeordnete Kanäle im Bereich des Brennstoffkanals vorgesehen (Chui et al. 2004, Fry et al. 2011, Cumbo et al. 2009, Kluger et al. 2009, Woycenko et al. 1994).

Während im Rahmen der ersten Oxyfuel-Versuche von instabilen Flammen bei keiner Sauerstoffinjektion und reiner Beimischung des benötigten Sauerstoffs zu einzelnen Volumenströmen berichtet wurde, wurden in den letzten Jahren einige Brenner vorgestellt,

die ohne Sauerstoffinjektion betrieben werden können (Tigges et al. 2009, Rehfeldt et al. 2011b, Habermehl et al. 2011).

Zu Beginn der Entwicklung von Oxyfuel-Kohlenstaubbrennern war der Fokus zunächst auf die Flammenstabilität und möglichst vollständigen Ausbrand des Brennstoffes gerichtet. In den letzten Jahren wurde er auf die Reduktion der Schadstoffemissionen durch Primärmaßnahmen erweitert.

Während die SO_2 -Emissionen im Vergleich zur konventionellen Verbrennung mit Luft beim Oxyfuel-Prozess näherungsweise gleich bleiben (Buhre et al. 2005), können die NO_x -Emissionen durch gezielte Sauerstoffzuführung deutlich verringert werden (Mackrory 2008). Dadurch sollte es bei einer spezifischen Auslegung des Brenners für Oxyfuel-Bedingungen möglich sein, dass die NO_x -Emissionen unter die gesetzlich geregelten Grenzwerte gesenkt werden können (Châtel-Pélage et al. 2006). Nach den derzeit gültigen Bestimmungen in Österreich (BGBl. I Nr. 65/2010 2010) werden die Emissionsgrenzwerte auf Normkubikmeter bezogen, wodurch sich unterschiedliche Grenzwerte ergeben. Um dennoch leicht vergleichbare Ergebnisse zu erhalten, werden die Emissionsgrenzwerte auf die eingebrachte thermische Energie referenziert (Burchhardt, Radunsky 2007). Somit ergibt sich ein Emissionsgrenzwert für kohlegefeuerte Kesselanlagen mit einer thermischen Leistung von über 500 MW von $75 \text{ mg} \cdot \text{MJ}^{-1}$. Wird dieser Grenzwert unterschritten, muss keine zusätzliche Rauchgasentschwefelungsanlage vorgesehen werden, wodurch die Investitionskosten deutlich gesenkt werden könnten.

Die Bildungsmechanismen von Stickoxiden im Oxyfuel-Betrieb sind bisher noch nicht gänzlich geklärt (Mackrory, Tree 2008). Es wird jedoch davon ausgegangen, dass durch die geringeren Partialdrücke von Stickstoff und dem bereits vorhandenen NO_x im rezirkulierten Rauchgas bei entsprechend hohen Temperaturen ($>1200\text{K}$) die Zeldovich-Reaktionen (thermische NO_x -Bildung) invers ablaufen (Andersson et al. 2008). Des Weiteren wird die Bildung von Brennstoff- NO_x durch das im rezirkulierten Rauchgas enthaltene NO_x reduziert, wobei dieser Effekt mit steigenden O_2 -Konzentrationen geringer wird (Liu et al. 2005). Obwohl in der Literatur von höheren NO_x -Konzentrationen im Rauchgas bei Sauerstoffinjektion berichtet wird (Cumbo et al. 2009), wurden bei für den Oxyfuel-Betrieb ausgelegten Brennern deutlich geringere NO_x -Emissionen dokumentiert (Châtel-Pélage et al. 2006).

Aus den bisherigen Erfahrungen kann geschlossen werden, dass einerseits derzeit verwendete Low- NO_x -Kohlenstaubbrenner (siehe Abbildung 3-9, Seite 29) auch für den Oxyfuel-Betrieb eingesetzt werden können. Es erscheint jedoch sinnvoll, die Low- NO_x -

Brenner in Bezug auf die Sauerstoffinjektion zu optimieren, um die zuvor angeführten NO_x senkenden Effekte nutzen zu können (Châtel-Pélage et al. 2006).

In Anhang C ist eine Übersicht zu durchgeführten Projekten in Bezug auf mögliche Brennerdesigns angeführt. Trotz der durchgeführten Versuche mit Kohlenstaubbrennern im Oxyfuel-Betrieb sind dennoch kaum Erfahrungen bei Großanlagen vorhanden, wodurch die Auslegung eines Oxyfuel-Kessels deutlich erschwert wird. Daher kommt der numerischen Simulation bei der Entwicklung von neuen Kraftwerkskonzepten eine besondere Bedeutung zu, um für die Auslegung und Konstruktion von Oxyfuel-Kesseln relevante Eckdaten zu erhalten. Im folgenden Abschnitt wird auf den derzeitigen Stand der numerischen Simulation in Bezug auf die Oxyfuel-Technologie und im Speziellen im Bereich der Kesselsimulation eingegangen.

2.2 Numerische Simulation von Oxyfuel-Kohlenstaubflammen

Die rasche Entwicklung der Rechnerleistung und der damit einhergehenden stetigen Weiterentwicklung von genaueren Modellen zur Berechnung von einzelnen Systemkomponenten haben dazu geführt, dass die numerische Simulation ein wichtiges Werkzeug neben der experimentellen Erforschung zur Auslegung beziehungsweise Optimierung dieser Komponenten geworden ist. Diese Entwicklung ist darauf zurückzuführen, dass im Speziellen bei großen Anlagen, wie zum Beispiel kalorischen Kraftwerken, experimentelle Untersuchungen deutlich kostenintensiver im Vergleich zu Simulationen sind und somit Simulationsmodelle auch in der Industrie verstärkt verwendet werden. Diese Tendenz wird zusätzlich durch kommerziell angebotene Simulationsprogramme unterstützt, die bereits über eine umfassende Modellbibliothek verfügen und somit die Möglichkeit bieten, bei korrekter Anwendung, qualitativ hochwertige und physikalisch repräsentative Ergebnisse zu erhalten.

Zur Simulation eines kohlenstaubgefeuerten Feuerraumes ist (je nach Detaillierungsgrad) eine Vielzahl von Modellen, die miteinander gekoppelt sind, notwendig. Allgemein müssen für eine derartige Simulationsaufgabe zumindest folgende Mechanismen berücksichtigt werden (Epple et al. 2009):

- Modell zur Berechnung der turbulenten Strömung
- Modell zur Berechnung der Kohlenstaubpartikelbewegung
- Modelle zur Berechnung der Verbrennungsmechanismen:
 - Pyrolyse der Kohlepartikel
 - Heterogene Verbrennung (Kokspartikel)

- Homogene Verbrennung (Gasphase)
- Modelle zur Berechnung der Wärmeübertragung:
 - Konvektive Wärmeübertragung
 - Strahlungswärmeübertragung:
 - Partikelstrahlung
 - Gasstrahlung
- Modelle zur Berechnung der Schadstoffbildung

Die Schwierigkeit bei derartigen Simulationsaufgaben liegt darin, dass durch die geringen Erfahrungswerte und den somit fehlenden Referenzwerten bei großtechnischen kohlenstaubgefeuerten Oxyfuel-Anlagen eine Überprüfung des Gesamtmodells nicht oder nur eingeschränkt möglich ist. Daher ist man auf den Vergleich der numerischen Gesamtsimulation mit experimentellen Untersuchungen im Labormaßstab oder semiindustriellen Maßstab (<5 MW_{th}) oder spezifische Untersuchungen limitiert, wobei auf Basis der einzeln überprüften Modelle nicht a priori davon ausgegangen werden kann, dass das Gesamtmodell die tatsächlich auftretenden physikalischen Verhältnisse akkurat darstellt. Deshalb bedarf es einer umsichtigen und kritischen Interpretation der berechneten Ergebnisse (Ferziger, Perić 2008).

Bei der numerischen Simulation von Oxyfuel-Kesseln kann davon ausgegangen werden, dass die zur Berechnung von konventionellen Kohlenstaubfeuerungen verwendeten Modelle gleich bleiben und lediglich die Parameter den veränderten Betriebsbedingungen angepasst werden müssen. Dieser Ansatz spiegelt sich ebenfalls bei derzeit gängigen Simulationsansätzen wieder (in Anhang D sind derzeit aktuelle numerische Simulationen und die verwendeten Submodelle in Bezug auf kohlenstaubgefeuerte Oxyfuel-Prozesse angeführt). Bei den angeführten Beispielen handelt es sich um durchgeführte Gesamtsimulationen von Oxyfuel-gefeuerten Brennkammern, wobei vorhandene Versuchsanlagen simuliert wurden und somit die Berechnungsergebnisse den Versuchsergebnissen gegenübergestellt werden konnten. Aufgrund der Vielzahl von Submodellen kann an dieser Stelle lediglich ein kurzer Überblick gegeben werden. In Abschnitt 5 wird in weiterer Folge genauer auf die verwendeten Modelle eingegangen.

Verbrennungsprozesse werden meist von der vorliegenden Turbulenz dominiert, die einerseits die chemischen Reaktionen und andererseits den konvektiven Wärmetransport stark beeinflusst. Im Bereich der Turbulenzmodellierung wird nach wie vor häufig das Standard-k-ε-Modell verwendet (Chui et al. 2003, Al-Abbas et al. 2011, Habermehl et al.

2011). Wie jedoch unter anderem Untersuchungen von Brunetti (Brunetti et al. 2009) zeigen, können genauere Berechnungsergebnisse mit dem Renormalization-Group (RNG) k - ϵ -Modell oder dem relizable- k - ϵ -Modell erzielt werden. Ebenso wird das Reynolds Stress Modell (RSM) eingesetzt (Brunetti et al. 2009, Edge et al. 2010), wobei der Berechnungsaufwand gegenüber den k - ϵ -Modellen deutlich steigt und abzuwägen ist, ob der höhere Berechnungsaufwand durch die erhaltenen Ergebnisse gerechtfertigt ist. Aufgrund der hohen Komplexität der numerischen Simulation von Kohlenstaubflammen wurden bisher kaum Large-Eddy-Simulationsansätze (LES) in diesem Bereich eingesetzt (Edge et al. 2010), da der Berechnungsaufwand im Vergleich zum RSM nochmals deutlich höher liegt. Bei den verwendeten Turbulenzmodellen handelt es sich durchwegs um Modelle, die standardmäßig in kommerzielle Berechnungsprogramme implementiert sind.

Zur Berechnung der homogenen Gasphasenreaktionen werden derzeit zwei unterschiedliche Modellansätze eingesetzt. Häufig wird zur Simulation der homogenen Gasphasenreaktion das Finite-Rate/Eddy-Dissipation-Modell eingesetzt (Edge et al. 2010, Brunetti et al. 2009, Habermehl et al. 2011). Bei diesem Modellansatz wird die Turbulenz-Reaktionsinteraktion durch zwei Gleichungen beschrieben (Magnussen 1981). Bei nicht vorgemischten Flammen wird davon ausgegangen, dass der Mischvorgang von Brennstoff und Oxidator im Vergleich zu den chemischen Reaktionen langsamer stattfindet. Die Reaktionsrate wird zum einen auf Basis der Geschwindigkeit des Mischvorgangs berechnet (Turbulenz). Um zu verhindern, dass bei teilvorgemischten Flammen der Verbrennungsprozess bereits bei Eintritt in das Berechnungsgebiet beginnt, wird zum anderen zusätzlich die Reaktionsrate anhand einer Arrhenius-Gleichung berechnet. Die Nettoreaktionsgeschwindigkeit wird durch den kleineren berechneten Wert der beiden Ansätze bestimmt. Da in der Regel die Eintrittstemperaturen in den Brenner sehr gering sind, dominiert in diesem Bereich der Arrhenius-Ansatz. Erst im Bereich hoher Temperaturen (zum Beispiel dem Brennermündungsbereich) limitiert die Reaktionsrate des Eddy-Dissipation-Modells die Verbrennungsgeschwindigkeit, wodurch verhindert wird, dass ein frühzeitiges Zünden des Brennstoffes stattfindet (Ansys 2011a). Zur Berechnung des chemischen Umsatzes werden entweder die in kommerzielle Simulationsprogramme implementierten Reaktionsgleichungen verwendet oder den Oxyfuel-Bedingungen angepasste Reaktionsgleichungen (Toporov et al. 2008).

Eine weitere Möglichkeit zur Berechnung der Rauchgaszusammensetzung bietet das Non-Premixed-Combustion-Modell (Chui et al. 2004, Khare et al. 2008). Bei diesem Modellansatz wird davon ausgegangen, dass ebenso wie beim Eddy-Dissipation-Modell die chemischen Reaktionen von der Mischungsgeschwindigkeit limitiert sind. Anstatt einzelne Gleichungen für die jeweilige Spezies zu berechnen, werden die Spezieskonzentrationen anhand eines Mischungsbruches und einer zuvor berechneten Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionstabelle,

in diesem speziellen Fall auf Basis der Minimierung der Gibbs'schen Energie, berechnet. In ANSYS Fluent ist es notwendig, den Oxidator und den Brennstoff getrennt voneinander in die Brennkammer einzubringen, wobei zusätzlich ein dritter Stoffstrom, das rezirkulierte Rauchgas, eingeführt werden muss. Durch die programmbedingten Limitationen ist es bei einem Dreistromsystem lediglich möglich, die Rauchgaszusammensetzung auf Basis des chemischen Gleichgewichts zu berechnen. Aufgrund der zuvor berechneten Tabellenwerte ist die Berechnung der Rauchgaszusammensetzung weniger rechenzeitintensiv, wodurch wiederum unter Abwägung der geforderten Genauigkeit deutlich schneller Berechnungsergebnisse im Vergleich zum Finite-Rate/Eddy-Dissipation-Modell erzielt werden können (Ansys 2011a).

Aufgrund der veränderten Brennkammerbedingungen lag in den letzten Jahren der Fokus im Bereich der Weiterentwicklung von Submodellen speziell beim Kohlenstaubabbrand (Murphy, Shaddix 2006, Shaddix, Molina 2010, Molina, Shaddix 2007, Toftegaard et al. 2010, Bejarano, Levendis 2008, Liu et al. 2006, Brix et al. 2010) und der Berechnung der Strahlungseigenschaften der Gasphase (Johansson et al. 2010, Krishnamoorthy et al. 2010, Gupta et al. 2006). Aufgrund der starken Unterschiede bei den einzelnen Kohlen, ist es jedoch nach wie vor schwierig, ein allgemeines Modell für die Verbrennungsvorgänge wie Pyrolyse und Koksabbrand anzugeben, infolgedessen die Komplexität der Modelle stark variieren kann.

Bei unterschiedlichen Untersuchungen in Bezug auf die Pyrolyse wurden widersprüchliche Ergebnisse publiziert. Während bei einigen Untersuchungen der Pyrolyse im Vergleich zu konventionellen Verbrennungsatmosphären kaum Unterschiede festgestellt werden konnten (Borrego, Alvarez 2007, Brix et al. 2010), wird in anderen Publikationen von signifikanten Unterschieden bei der Pyrolyse bei Oxyfuel- und Luft-Atmosphären berichtet, wobei bei Oxyfuel-Atmosphären sowohl höhere (Rathnam et al. 2009) als auch geringere CO_2 -Konzentrationen gemessen wurden (Borrego, Alvarez 2007). Die höheren CO_2 -Konzentrationen werden auf einen möglichen Vergasungsprozess zurückgeführt, der während der Pyrolyse durch die erhöhte CO_2 -Konzentration in der Brennkammer durch das rezirkulierte Rauchgas mit dem Restkoks stattfindet. Untersuchungen von Brix (Brix et al. 2010) weisen jedoch darauf hin, dass dies möglicherweise an der jeweiligen Versuchsanordnung liegen könnte (Aufheizrate, Temperatur des Trägergases und Verweilzeit) und somit nicht zwingend ein Vergasungsprozess während der Pyrolyse vorliegen muss. Ein häufig eingesetztes Modell zur Berechnung des Pyrolyseprozesses ist das Single-Kinetic-Rate-Modell (Badzioch, Hawksley 1970). Bei diesem Modell wird vorausgesetzt, dass die Freisetzung der flüchtigen Bestandteile des Kohlenstaubpartikels linear von den im Partikel verbleibenden flüchtigen Bestandteilen abhängt, wobei die

Reaktionsrate anhand einer Arrhenius-Gleichung berechnet wird. Für dieses Modell sind allerdings experimentelle Daten zur jeweiligen Kohle notwendig. Aufgrund der geringen Unterschiede in Bezug auf die Freisetzungsgeschwindigkeit zwischen Oxyfuel- und konventionellen Bedingungen werden einerseits Parameter von in konventioneller Atmosphäre untersuchten Kohlen (Al-Abbas et al. 2011) oder spezifisch für den Oxyfuel-Prozess untersuchte Kohlen (Khare et al. 2008) verwendet. Sollen anhand der numerischen Berechnungen Untersuchungen in Bezug auf den Zündzeitpunkt durchgeführt werden, kam ebenfalls das Chemical-Percolation-Devolatilization-Modell (CPD-Modell) zum Einsatz (Fletcher et al. 1992). Bei diesem Modell werden auf Basis der chemischen Struktur der Kohle die Anteile der leicht flüchtigen und langkettigen Kohlenwasserstoffe berechnet. Um Berechnungen durchführen zu können, sind lediglich Strukturparameter der jeweiligen Kohle notwendig, die teilweise in tabellarischer Form vorliegen (Fletcher et al. 1992).

Neben der Pyrolyse wurde ebenfalls der Restkoksabbrand im Detail untersucht (Rathnam et al. 2009, Brix et al. 2010, Bejarano, Levendis 2008, Hercog et al. 2011, Murphy, Shaddix 2006, Shaddix et al. 2009). Im Vergleich zu Sauerstoff-Stickstoff-Atmosphären findet der Koksabbrand in Oxyfuel-Atmosphären langsamer statt. Dies wird auf die langsamere Diffusion von O_2 in CO_2 -Atmosphären zurückgeführt. Während bei einigen Versuchsergebnissen kein signifikanter Unterschied des Koksabbrands bei CO_2/O_2 - und N_2/O_2 -Atmosphären festgestellt wurde (Brix et al. 2010, Bejarano, Levendis 2008), wurden ebenfalls höhere CO_2 -Konzentration und geringere Restkohlenstoffanteile in der Asche bei Oxyfuel-Bedingungen gemessen (Rathnam et al. 2009). Als mögliche Ursache wird diesbezüglich die Boudouard-Reaktion genannt (Scheffknecht et al. 2011). Wie groß der tatsächliche Einfluss der Vergasung auf den Koksabbrand ist, ist jedoch nicht restlos geklärt, wobei Untersuchungen von Shaddix zeigen, dass unter bestimmten Voraussetzungen (geringe O_2 -Konzentrationen, hohe Temperaturen und Verweilzeiten) der Einfluss von CO_2 auf den Koksabbrand relevant sein kann (Shaddix et al. 2009). Aus diesem Grund werden lediglich bei Berechnungen mit dem Ziel den Kohlenstoffgehalt der Asche und die CO -Konzentrationen im Rauchgas genauer zu bestimmen, neben der Oxidation des Kohlenstoffs die Boudouard-Reaktion und heterogene Wassergasshift-Reaktion zusätzlich berücksichtigt (Toporov et al. 2008, Habermehl et al. 2011). Aufgrund des höheren Berechnungsaufwands bei Verwendung der Einzelreaktionen wird jedoch häufig das einfachere Kinetics-Diffusion-Limited-Surface-Reaction-Modell verwendet (Baum, Street 1971), bei dem lediglich die Oxidation des Kohlenstoffs berücksichtigt wird. Durch die zu erwartenden Temperaturen und O_2 -Konzentrationen im Brennerbereich kann der Koksabbrand entweder durch die Grenzschichtdiffusion oder durch die Reaktionsgeschwindigkeit und innere Porendiffusion limitiert sein (Wall et al. 2009), wobei bei Oxyfuel-Bedingungen der Koksabbrand langsamer

stattfindet. Daher ist es notwendig, die erforderlichen Modellparameter empirisch zu bestimmen, wobei diesbezüglich einige Untersuchungen mit unterschiedlichen Kohlen durchgeführt wurden (Murphy, Shaddix 2006, Karlstrom et al. 2011) und somit notfalls darauf zurückgegriffen werden kann.

Obwohl bereits modifizierte Modelle zur Berechnung der Strahlungseigenschaften der Gasphase abgeleitet wurden (Johansson et al. 2010, Johansson et al. 2011, Rehfeldt et al. 2011a), gestaltet sich die Implementierung dieser Modelle in die Berechnungsroutine als schwierig, demzufolge häufig auf die in das Simulationsprogramm implementierten Berechnungsroutinen zurückgegriffen wird (Khare et al. 2008, Al-Abbas et al. 2011, Brunetti et al. 2009). Aufgrund des geringen zusätzlichen Berechnungsaufwands werden häufig modifizierte Modellparameter für das Weighted-Sum-of Grey-Gases-Modell (WSGGM, meist 3-4 Modellgleichungen Kangwanpongpan et al. 2011, Edge et al. 2010) oder Exponential-Wide-Band-Modelle (EWBM, meist 6-10 Modellgleichungen; Habermehl et al. 2011) verwendet. In Abschnitt 4.1 wird genauer auf mögliche Berechnungsansätze und in Abschnitt 5.2 auf in ANSYS Fluent implementierte Lösungsansätze zur Berechnung der Strahlungstransfergleichung eingegangen.

Da neben der Gasstrahlung ebenfalls die in der Brennkammer befindlichen Partikel Einfluss auf die Strahlung nehmen, muss die Partikel-Strahlungs-Interaktion ebenfalls berücksichtigt werden (Scheffknecht et al. 2011). Bei den im Anhang D angeführten Simulationen ist jedoch häufig kein Hinweis auf die Berücksichtigung der Strahlungsinteraktion mit Partikeln zu finden. Ebenso werden im Falle einer Berücksichtigung der Strahlungsinteraktion mit Partikeln keine genaueren Hinweise auf die gewählten Parameter gegeben. In Übersichtsarbeiten werden mögliche Berechnungsansätze auf Basis der Mie-Theorie angeführt, wobei in deren Rahmen nicht genauer darauf eingegangen wird (Scheffknecht et al. 2011, Edge et al. 2011). In Abschnitt 4.2 wird daher ein möglicher Berechnungsansatz zur Abschätzung der Strahlungseigenschaften von Partikeln präsentiert.

3 Oxyfuel-Versuche mit einem 2,5 MW_{th} Kohlenstaubbrenner

In diesem Abschnitt wird zu Beginn die Versuchsanlage für die 2,5 MW_{th} Brennertests beschrieben. In weiterer Folge werden allgemeine Grundlagen zur Kohlenstaubbrennerkonstruktion und der am Institut für Wärmetechnik entwickelte Brenner, sowie die Versuchsdurchführung und die Versuchsergebnisse erläutert. Abschließend werden die für die numerische Simulation notwendigen Randbedingungen abgeleitet.

3.1 Versuchsanlage Fo.Sper

Bei der für die Brennertests verwendeten Versuchsanlage handelt es sich um eine modifizierte International Flame Research Foundation (IFRF) Brennkammer der Fa. ENEL in Livorno, Italien. Abbildung 3-1 zeigt die Außenansicht der Versuchsanlage mit einigen Systemkomponenten. Rechts außerhalb des Bildes befinden sich die Kohlenstaubzudosierungseinheit und die Leitwarte.

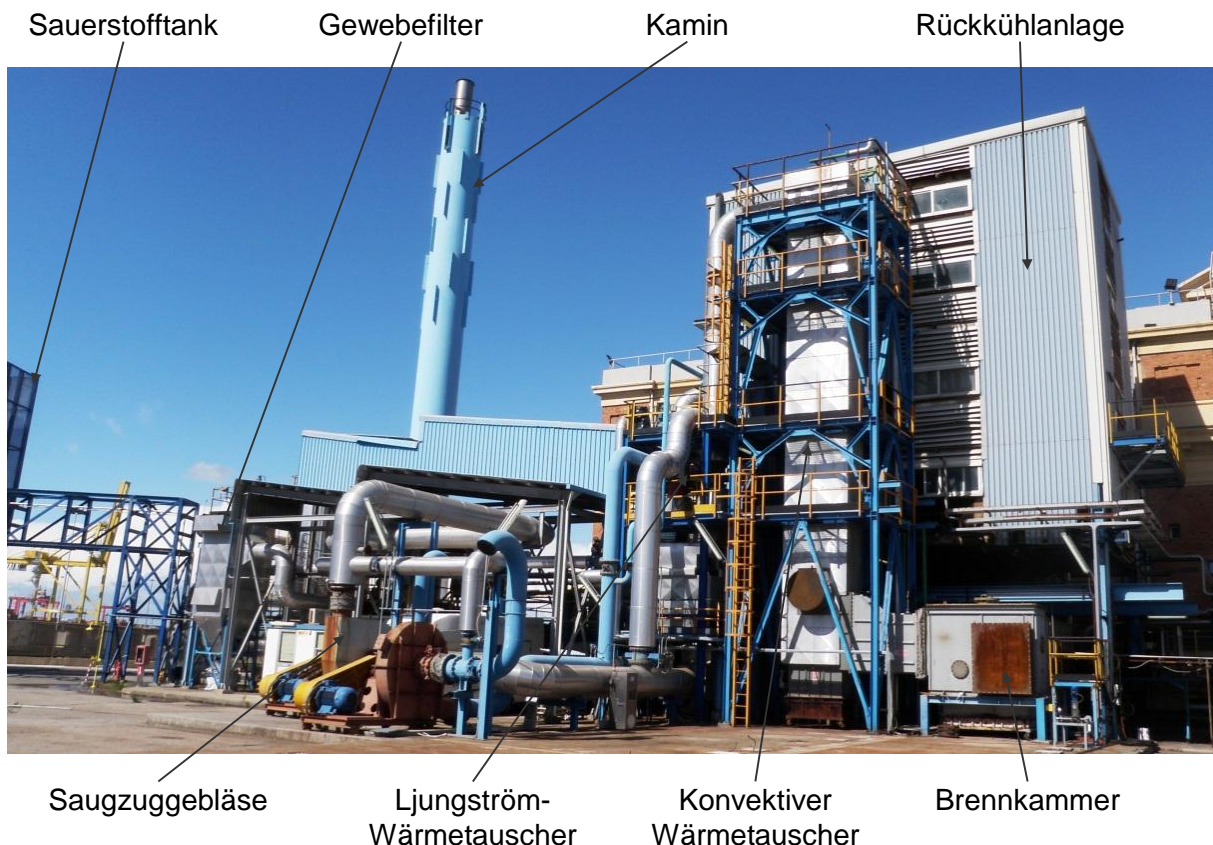


Abbildung 3-1: Ansicht der Versuchsanlage der Fa. ENEL in Livorno, Italien

In Abbildung 3-2 ist ein Schema der Versuchsanlage dargestellt. Aufgrund der vorgenommenen Modifikationen an der Versuchsanlage (blaue und pinke Linien) kann die Anlage sowohl im konventionellen Luftbetrieb als auch im Oxyfuel-Betrieb betrieben werden.

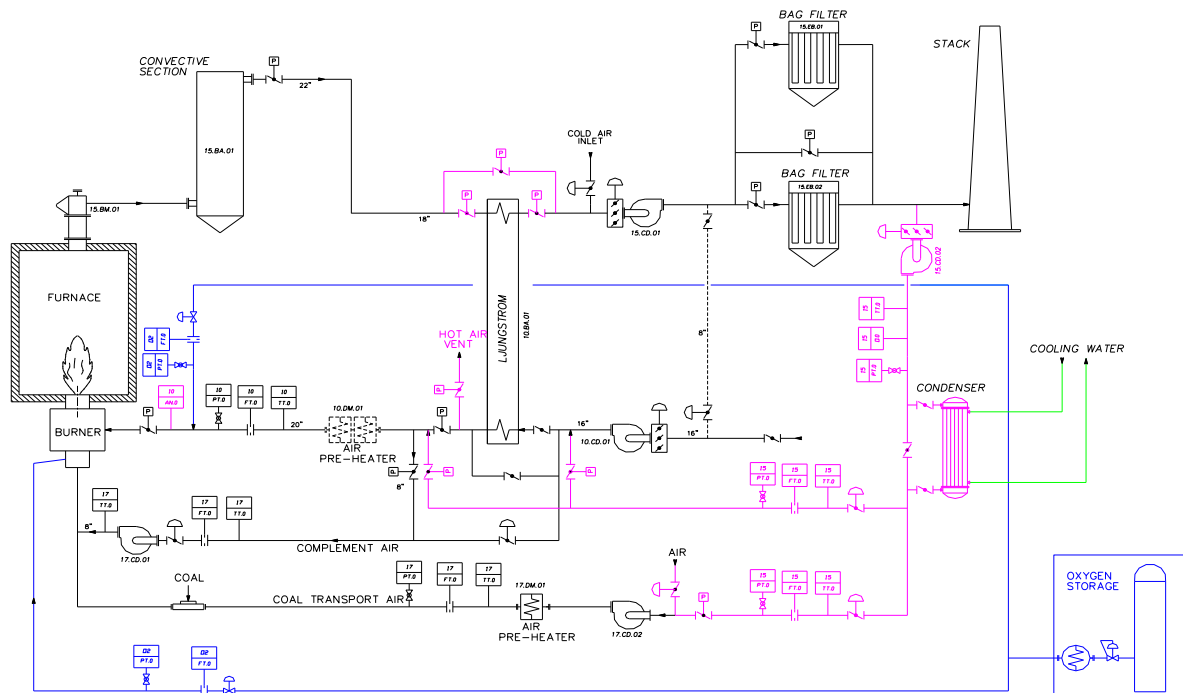


Abbildung 3-2: Schema der Versuchsanlage der Fa. ENEL in Livorno, Italien (vgl. Rossi et al. 2009a)

Beim Betrieb mit Luft wird der notwendige Luftvolumenstrom durch zwei Gebläse angesaugt. Der Primärstrom kann durch einen Vorwärmer auf 70°C vorgewärmt werden, wobei der Massenstrom bei etwa 500 kg/h liegt. Der Massenstrom ist jedoch als Richtwert zu sehen, da je nach Rauchgastemperatur ein dementsprechender Volumenstrom eingestellt werden muss, um einen einwandfreien Kohlenstaubtransport durch die Verbindungsleitung von der Zudosierungseinheit bis zum Brenner zu gewährleisten. Der Sekundärstrom kann durch einen Vorwärmer auf maximal 250°C erwärmt werden. Die Brennkammer ist für eine maximale Brennstoffleistung von 5 MW_{th} ausgelegt, wobei 50 % der Wärmeleistung innerhalb der Brennkammer übertragen werden. Im Anschluss der Brennkammer befinden sich ein konvektiver Wärmetauscher und ein Ljungström-Wärmetauscher, um die Rauchgastemperatur auf maximal 250°C zu senken, da ansonsten die Gewebefilter beschädigt werden könnten.

Bei Oxyfuel-Betrieb wird nach dem Rauchgasfilter ein Teil des Rauchgases durch ein Gebläse angesaugt und zum Kondensator transportiert, in dem der enthaltene Wasserdampf bei etwa 40°C kondensiert wird. Nach dem Kondensator wird der Rauchgasstrom wiederum

in den Primär- beziehungsweise Sekundärstrom aufgeteilt. Dem Sekundärstrom kann nach dem Vorwärmer reiner Sauerstoff zugeführt werden. Da die Rauchgasvorwärmtemperatur limitiert ist und die Sauerstofftemperatur von der Umgebungstemperatur (O_2 -Verdampfer bei Umgebungstemperatur) abhängig ist, ist die Austrittstemperatur nach der Beimischung von der Menge des zugeführten Sauerstoffs abhängig und liegt zumeist deutlich unter 250°C . Aus sicherheitstechnischen Gründen ist es nicht möglich, den Sauerstoff direkt mit dem Primärstrom zu vermischen, da der Primärstrom als Trägermedium für den Brennstoff verwendet wird. Aus diesem Grund ist eine weitere Sauerstoffleitung, die direkt zum Brenner führt, installiert, um den Sauerstoff optional innerhalb des Brenners in den Primärstrom zu injizieren.

Die Brennkammer der Versuchsanlage besteht aus elf Segmenten (Abbildung 3-3), wobei die letzten acht Segmente mit sowohl koaxialen Kühlrohren als auch mit einem Kühlkreislauf ausgestattet sind. Die Außenseite ist doppelwandig ausgeführt, um eine zusätzliche Kühlung mit Wasser realisieren zu können. Die Brennkammer hat eine Innenlänge von ca. 6,3 m und eine Innenquerschnittsfläche von $2 \times 2 \text{ m}^2$.

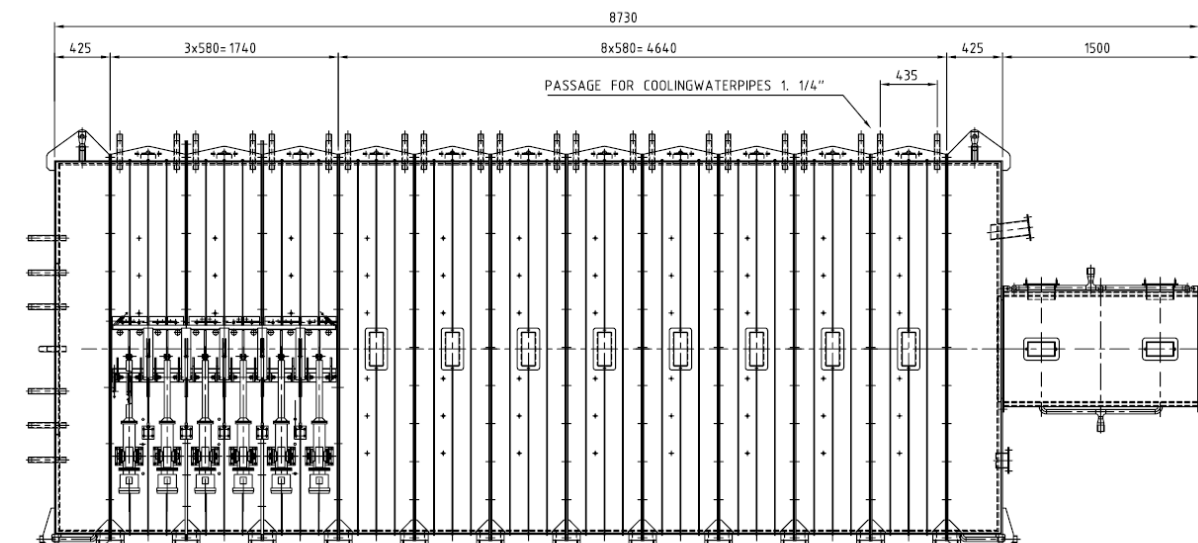


Abbildung 3-3: Darstellung der Versuchsbrennkammer der Fa. ENEL (vgl. Rossi et al. 2009a)

Um Messungen innerhalb der Brennkammer durchführen zu können, ist jedes Segment mit einem druckluftbeaufschlagbaren 2-Zoll-Messstutzen ausgestattet. Die zusätzliche Spülung während des Einführens der Messsonde ist notwendig, um zu verhindern, dass heiße Rauchgase aus der unter leichtem Überdruck befindlichen Brennkammer austreten.

3.1.1 Eingesetzte Messtechnik

Für den Betrieb der Versuchsanlage wurden die einzelnen Volumenströme von Primär- und Sekundärstrom (Blendenmessung) sowie die zugehörigen Temperaturen und Drücke gemessen. Ebenso wurden die Drücke und Temperaturen nach der Brennkammer, nach dem Wärmetauscher und nach dem Kondensator erfasst. Im Oxyfuel-Betrieb wurden zusätzlich der Sauerstoffvolumenstrom, Temperatur und Druck für die jeweilige Versorgungslinie aufgezeichnet. Zur Kontrolle der Brennkammertemperatur sind in den einzelnen Segmenten sowohl an der Wandoberfläche als auch innerhalb der Dämmung Thermoelemente angebracht. Ebenso wurden für jeden wassergekühlten Kreislauf die Austrittstemperatur und die zugehörigen Volumenströme aufgezeichnet. Die wichtigsten Messstellen für den Betrieb der Versuchsanlage sind in Abbildung 3-2 eingezeichnet.

Während der Versuche wurden neben den Messgeräten, die zur Online-Erfassung der Betriebsparameter für die Leitwarte notwendig waren, Messgeräte zur Erfassung der Flammentemperatur, des Strahlungswärmestroms, des Gesamtwärmestroms, der Gaszusammensetzung in der Brennkammer und im Flammenbereich (GA 3) eingesetzt. Zusätzlich wurde an zwei Messpunkten, einerseits vor dem Vorwärmer der Sekundärleitung (GA 1) und andererseits nach der Brennkammer (GA 2), die Gaszusammensetzung des Rauchgases erfasst (eine Aufstellung der verwendeten Gasanalysatoren findet sich in Anhang A).

Da die zusätzlich verwendeten Messsonden wichtige Informationen für die Überprüfung der numerischen Simulation liefern, werden diese im Folgenden kurz erläutert.

3.1.1.1 Absaugsonden-Pyrometer

Die Temperatur in einzelnen Bereichen der Flamme wurde mit einem Absaugsonden-Pyrometer gemessen. In Abbildung 3-4 ist eine Prinzipskizze der Absaugsonde dargestellt. Das hier eingesetzte Platin-Rhodium-Thermoelement (Type S) ist bei dieser Ausführung durch eine Keramik gegen chemische Substanzen geschützt. Zwei weitere koaxial angeordnete Schutzkeramiken schirmen das Thermoelement gegen die direkte Strahlung ab. Das Rauchgas wird anhand eines Injektors, der mit Druckluft betrieben wird, über das Thermoelement mit hoher Geschwindigkeit (ca. $100 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$) durch die stromabwärts ausgerichtete Absaugbohrung abgesaugt, wodurch die gemessene Temperatur näherungsweise jener des Rauchgases entspricht. Aufgrund der hohen Absauggeschwindigkeiten kann jedoch nicht mehr von einer punktuellen Temperaturmessung ausgegangen werden. Nach Angaben der IFRF wird im Umkreis der Sonde von ca. 2,5 cm das Gas durch die Messung beeinflusst, woraus ein Mittelwert für diesen Bereich gemessen wird. Abschätzungen

vonseiten der IFRF bezüglich der Messunsicherheit ergeben eine maximale Messabweichung von $8,6^{\circ}\text{C}$ (Biasci, Coraggio 2010). Da jedoch Kohlenstaub als Brennstoff eingesetzt wird, kommt es laufend zu einer Verschmutzung der Absaugsonde, wodurch tendenziell die gemessene Temperatur unter jener in der Flamme liegt.

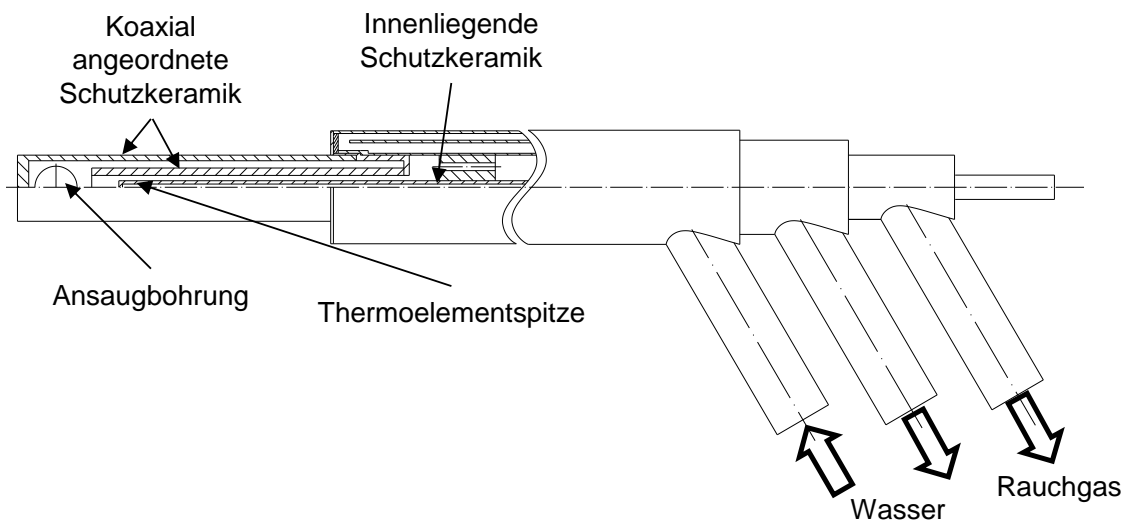


Abbildung 3-4: Prinzipskizze des Absaugsonden-Pyrometers (vgl. Biasci, Coraggio 2010)

Die Messung des Temperaturprofils innerhalb der Brennkammer und im Speziellen im Flammenbereich ist für die Überprüfung des numerischen Gesamtmodells besonders wichtig, da Aussagen einerseits über die Wärmefreisetzung und andererseits das Flammenprofil getroffen werden können.

3.1.1.2 Absaugsonde zur Rauchgasanalyse innerhalb der Brennkammer

Zur Messung der Gaszusammensetzung innerhalb der Flamme wird eine mit Wasser gekühlte Sonde, die dem Absaug-Pyrometer ähnelt, verwendet. Aufgrund der hohen Partikelbelastung ist es jedoch erforderlich, einen größeren Strömungskanal zu wählen, um ein zu schnelles Verlegen des Kanals mit Kohlenstaub zu verhindern. Die Strömungsgeschwindigkeit wird so gewählt, dass in möglichst kurzer Zeit das Rauchgas auf eine Temperatur abgesenkt wird, bei der keine Reaktionen mehr stattfinden. Dies ist speziell in jenen Flammenbereichen notwendig, in denen der vollständige Abbrand der Kohle noch nicht stattgefunden hat. Die Absaugung des Rauchgases wird ebenso mit einem druckluftbetriebenen Injektor realisiert. Am Ende der Absaugsonde ist ein beheizbarer Analyseschlauch angeschlossen, durch den ein Teil des abgesaugten Rauchgases zur Gasanalyse gelangt (GA 3).

Ebenso wie bei der Temperaturmessung können durch die Messung der Gaszusammensetzung an verschiedenen Punkten der Brennkammer Daten für den

Vergleich mit dem numerischen Simulationsmodell generiert werden. Aufgrund der Messanordnung kann jedoch nicht gewährleistet werden, dass es innerhalb der Sonde zu keinen weiteren Reaktionen bis zum Unterschreiten der dafür notwendigen Temperaturen kommt. Somit sind die Messdaten speziell im Bereich der reaktiven Zone kritisch zu betrachten. Des Weiteren ist mit diesem Messgerät keine punktuelle Messung möglich, da durch die hohe Absauggeschwindigkeit und den großen Kanalquerschnitt ein größerer Bereich im Vergleich zum Absaugsonden-Pyrometer beeinflusst wird.

3.1.1.3 Messung des Gesamtwärmestroms

Bei diesem Messgerät handelt es sich um eine Eigenentwicklung der IFRF. In Abbildung 3-5 ist eine Prinzipskizze der Messsonde dargestellt. An der Spitze der Sonde ist ein Metallzylinder mit bekannter Wärmeleitfähigkeit, der durch zwei weitere Ringe aus demselben Material geschützt wird, angebracht. Die Metallringe sollen den radialen Wärmestrom verhindern, um den tatsächlichen Wärmestrom in axialer Richtung zwischen den Thermoelementen bestimmen zu können. Mit einem Thermoelement wird die Temperatur an der Spitze des Metallzylinders, mit einem weiteren Thermoelement die Temperatur an der gekühlten Seite des Metallzylinders gemessen. Mit den erhaltenen Messwerten kann somit die Wärmestromdichte ($W \cdot m^{-2}$) berechnet werden. Da an der Außenseite der Sonde Wärmestrahlung, Leitung und Konvektion auftreten, wird die Summe aller drei Wärmeübertragungsmechanismen gemessen.

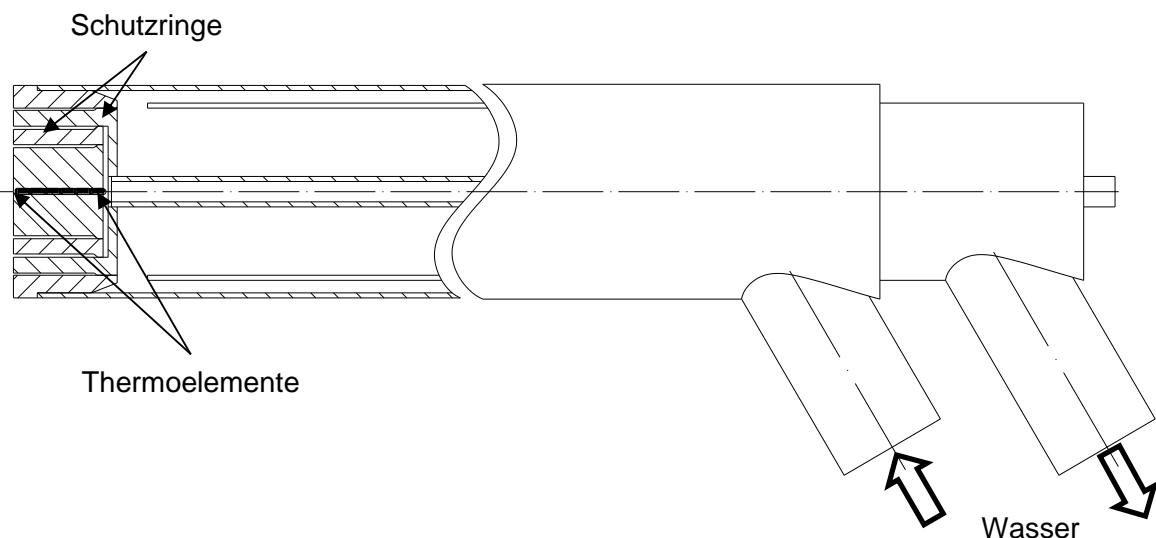


Abbildung 3-5: Prinzipskizze der Messsonde zur Bestimmung der Gesamtwärmestromdichte (vgl. Biasci, Coraggio 2010)

Um genauere Messergebnisse zu erhalten, wird die Sonde vor den Messungen in einem Hohlraumstrahler bei unterschiedlichen Temperaturen kalibriert. Bei geringen Wärmestromdichten (ca. $175 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$) liegt die relative Abweichung bei etwa 17 %. Bei höheren Wärmestromdichten (ca. $425 \text{ kW}\cdot\text{m}^{-2}$) sinkt die relative Abweichung auf etwa 11 % (Biasci, Coraggio 2010).

3.1.1.4 Ellipsoides Radiometer

Anhand des Strahlungsmessgeräts wird nur die Wärmeübertragung durch Strahlung gemessen. In Abbildung 3-6 ist eine Prinzipskizze der Messsonde dargestellt. Der Hohlraum hat die Form eines Ellipsoids, wobei in einem Brennpunkt ein Thermoelement, im anderen Brennpunkt die Apertur angeordnet ist. Durch die spezielle Geometrie ist es möglich, die hemisphärische Wärmestromdichte zu bestimmen, wobei die Anzahl der Reflexionen innerhalb des Hohlraums auf ein Minimum reduziert wird. Um die Absorption an der Wandinnenseite so gering wie möglich zu halten, ist diese mit Gold beschichtet. Zum Schutz der Hohlraumbeschichtung und des Thermoelements ist die Messöffnung durch ein ZnSe-Fenster verschlossen und das System wird mit Stickstoff gespült. Dadurch kann ebenfalls der Einfluss von konvektiver Wärmeübertragung verhindert werden. Die Messsonde wird über die gesamte Länge mit Wasser gekühlt. Untersuchungen zeigen, dass das ellipsoide Radiometer eine Messunsicherheit von ca. 5 % aufweist (Oliveira, Yanagihara 2008).

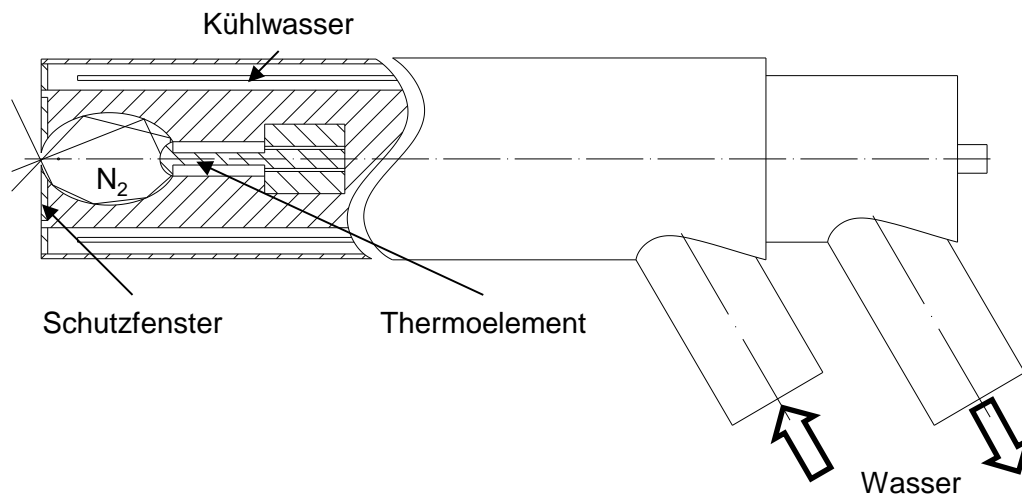


Abbildung 3-6: Prinzipskizze der Messsonde zur Bestimmung der Strahldichte (vgl. Biasci, Coraggio 2010)

Aufgrund der soliden Ausführung der Messsonde können damit keine dynamischen Prozesse, sondern nur quasistationäre Prozesse erfasst werden. Da mit diesem Messgerät die hemisphärische Wärmestromdichte erfasst wird, ist die Kenntnis der Oberflächentemperaturen innerhalb der Brennkammer besonders wichtig, da in diesem Fall kein

Hintergrundstrahler in axialer Richtung als Referenz herangezogen werden kann. Somit ergibt sich das Problem, dass je nach optischer Dichte des zu vermessenden Mediums die Wandoberflächentemperaturen einen großen Einfluss haben können. In optisch dichten Medien, wie es zum Beispiel im Flammenbereich der Fall ist, spielt dieser Einfluss eine geringere Rolle.

3.1.2 Allgemeines Hochfahrprozedere und Umschalten in den Oxyfuel-Betrieb

Sowohl während der Aufheizphase als auch über Nacht wurde die Brennkammer mit Erdgas befeuert. Daher ist im Zentralrohr des Versuchsbrenners eine Durchführung für eine Gaslanze vorgesehen, mit der die Brennkammer mit ca. 2 MW_{th} befeuert werden kann. Nach dem Aufheizen der Brennkammer, das in etwa zwei Tage in Anspruch nimmt, bis alle Systemkomponenten der Versuchsanlage auf Betriebstemperatur sind, kann mit dem eigentlichen Betrieb des Kohlenstaubbrenners begonnen werden. Der Brenner wird mit maximaler Leistung mit Erdgas betrieben. Während der Kohlenstaubmassenstrom, der durch eine Zudosierungseinheit geregelt werden kann, langsam gesteigert wird, wird der Erdgasmassenstrom verringert, wobei darauf geachtet wird, dass der Sauerstoffüberschuss ausreichend groß ist (ca. 10 Vol.% trocken), um eventuelle Kohlenstaubmassenstromschwankungen kompensieren zu können. Durch diese Vorgehensweise soll verhindert werden, dass es zu einer teilweisen Vergasung der Kohle in der Brennkammer kommt und unverbrannter Brennstoff in die nachfolgenden Bauteile der Versuchsanlage gelangt. Ist die Erdgasversorgung vollständig geschlossen, wird die Brennerkonfiguration auf Kohlebetrieb eingestellt. Danach wird der Kohlenstaubmassenstrom bis zum Erreichen der Nennleistung des Brenners erhöht. Durch die Messstutzen, die Wahlweise mit Sichtfenstern ausgestattet werden können, ist es möglich, die Flamme in Bezug auf deren Position in der Brennkammer optisch zu beurteilen.

Aufgrund von sicherheitstechnischen Maßnahmen wird nicht während des konventionellen Betriebs mit Kohlenstaub in den Oxyfuel-Betrieb gewechselt, sondern über den Oxyfuel-Betrieb mit Erdgas. Dies erscheint jedoch nicht nachteilig, da die Versuchsanlage über Nacht ohnehin mit Erdgas beheizt wird und somit die Dauer des Umschaltens in den Oxyfuel-Betrieb in etwa gleich bleibt. Ein Vorteil dieser Methode ist jedoch, dass die Zudosierung von Erdgas leichter zu regeln ist, da es gerade beim Hochfahren des Rezirkulationsgebläses zu deutlichen Volumenstromschwankungen kommen kann. Zuerst wird ein geringer Teil des Rauchgases rezirkuliert und der Luft beigemischt. Danach werden die Sauerstoffleitungen mit Stickstoff gespült, um sicherzustellen, dass sich keine Fremdstoffe in den Rohrleitungen, speziell in Brennernähe, befinden. In weiterer Folge wird Sauerstoff in einer geringen Menge dem Sekundärstrom beigemischt, bis der Sauerstoffgehalt des Rauchgases am Ende der

Brennkammer einen Wert von über 10 Vol. % trocken erreicht. Parallel zur Reduktion des Luftvolumenstroms wird der Rauchgasvolumenstrom erhöht und der Sauerstoffmassenstrom nachgeführt, bis letztendlich keine Luft mehr zugeführt wird. In weiterer Folge wird mit der Kohlenstaubzudosierung begonnen, wobei ebenso wie beim zuvor beschriebenen Umschaltvorgang darauf geachtet wird, dass genügend Sauerstoff vorhanden ist, um eine unterstöchiometrische Verbrennung zu vermeiden.

Während des gesamten Versuchszeitraums wird die Flamme innerhalb der Brennkammer einerseits durch zwei Sensoren (IR und UV) und andererseits über ein Videosignal, das in die Leitwarte übertragen wird, überwacht.

3.2 Grundlagen zu Kohlenstaubbrennern

Da in der Versuchsbrennkammer Fo.Sper in Livorno, Italien, nur Rundbrenner experimentell untersucht werden können (siehe Abschnitt 3.1, Seite 18), wurde der Versuchsbrenner ebenso als Rundbrenner konzipiert. Neben einer kurzen Darstellung derzeitiger Konstruktionsprinzipien und der allgemeinen Auslegungskriterien für Kohlenstaubbrenner, werden die erhaltenen Versuchsergebnisse aus den Tests mit dem „Friendly Coal“-Brenner erläutert, auf deren Basis wichtige Auslegungskriterien für den neuen Brenner generiert werden konnten.

3.2.1 Allgemeine Konstruktionsprinzipien

Wie bereits zuvor erwähnt, muss das Brennerkonzept den jeweiligen Randbedingungen im Oxyfuel-Betrieb angepasst werden. Maßgebliche Parameter hierbei sind die Höhe der Rauchgasrezirkulation (trocken oder feucht), die Sauerstoffkonzentrationen sowie die Eintrittsgeschwindigkeiten der einzelnen Volumenströme und deren Temperaturniveaus. Durch die Möglichkeit, den Sauerstoff einzelnen Volumenströmen beizumischen oder reinen Sauerstoff zu injizieren, ergeben sich zusätzliche Freiheitsgrade in Bezug auf das Brennerkonzept.

Die grundlegende Aufgabe eines Brenners liegt darin, den Brennstoff mit dem Oxidator derart zu vermischen, sodass günstige Bedingungen für eine kontinuierliche Verbrennung gewährleistet sind. Bei jedem Brenner müssen jedoch folgende Anforderungen erfüllt sein:

- bestmögliche Strömungsverhältnisse in der Brennkammer
- stabile Zündung
- möglichst vollständiger Ausbrand
- geringe Bildung von Schadstoffen (NO_x , SO_x)

- Regelbarkeit über weite Betriebsbereiche
- sicherer Betrieb
- Vermeidung von Verschlackung der Brennkammerwände
- gleichmäßige Wärmeabstrahlung in alle Richtungen
- lange Lebensdauer der Brennermündung

Die Art des Prozesses, die Eigenschaften des Brennstoffes und des Oxidators und eine Vielzahl weiterer Parameter bestimmen die Brennerbauart. Bei der Kohlenstaubverbrennung kommen zwei Brennertypen zum Einsatz: Rundbrenner mit oder ohne Drall (Decken- oder Stirnwandfeuerung) und Strahlbrenner (hauptsächlich Eckenfeuerung). Während bei Strahlbrennern der Kohlenstaub und der Oxidator getrennt in die Brennkammer geleitet und erst nach der Zündung des Staubes miteinander vermischt werden, wird bei Mischbrennern ohne Drall der Kohlenstaub noch im Brenner oder direkt nach dem Brenner vor beziehungsweise nach der Zündung mit dem Oxidator vermischt (Effenberger 1965). Die für die schnelle Verbrennung notwendige Turbulenz wird zum Teil durch die spezielle Anordnung der Strahlbrenner zueinander erzeugt (Effenberger 2000). In Abbildung 3-7 sind die Wirkungsprinzipien eines Drall- beziehungsweise eines Strahlbrenners grafisch dargestellt.

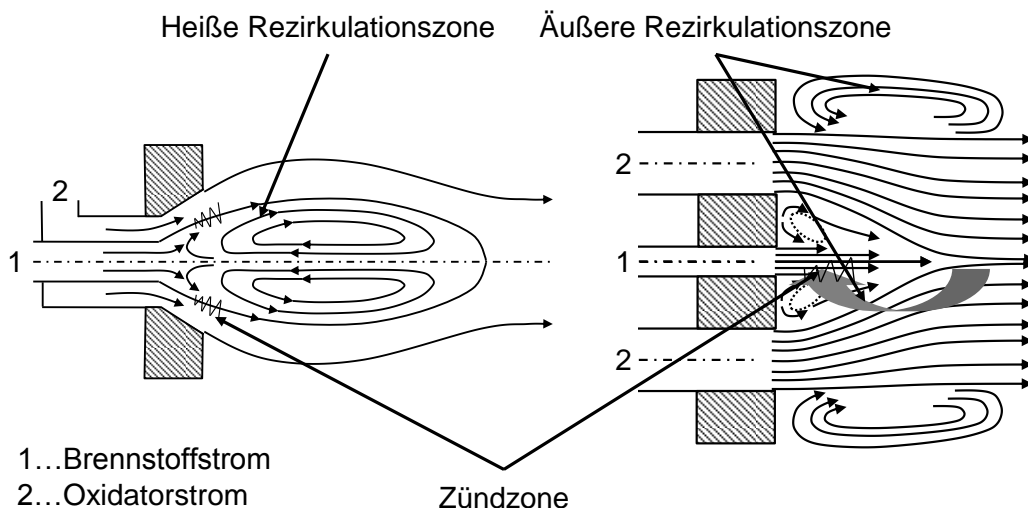


Abbildung 3-7: Wirkungsprinzip eines Drallbrenners (links, vgl. Leuckel et al. 1970) und eines Strahlbrenners (rechts, vgl. Zelkowski 2004)

Im einfachsten Fall werden bei Rundbrennern die einzelnen Volumenströme durch zueinander konzentrisch angeordnete Kanäle ohne Tangentialgeschwindigkeitskomponente in die Brennkammer eingeblasen. Die Vermischung des Oxidators mit dem Brennstoff resultiert aus der Geschwindigkeitsdifferenz der einzelnen Volumenströme, wobei eine lang

gezogene Flamme entsteht. Ist eine kompakte Flamme erwünscht, um zum Beispiel ein Auftreffen der Flamme auf der gegenüberliegenden Brennkammerwand zu vermeiden, werden Drallbrenner eingesetzt. Durch die aufgeprägte Tangentialgeschwindigkeit wird die Turbulenz in Brennernähe erhöht, wodurch es zu einer schnelleren Durchmischung von Oxidator und Brennstoff kommt. Daher erhöht sich der Freiheitsgrad bei der Anordnung der Brenner innerhalb der Brennkammer, da die für die stabile Verbrennung des Brennstoffes notwendige Turbulenz hauptsächlich durch den Brenner erzeugt wird und somit im geringeren Maße von einer speziellen Anordnung der Brenner, wie es bei einer Tangentialfeuerung der Fall ist, abhängig ist. Mit Hilfe von Dralleinrichtungen kann den einzelnen Volumenströmen eine Tangentialgeschwindigkeitskomponente aufgeprägt werden, wodurch es in radialer Richtung nach außen zu einem Druckanstieg kommt. Aufgrund dessen wird die Kernströmung aufgeweitet und im Inneren sinkt der Druck ab. Ist die Geschwindigkeitskomponente in tangentialer Richtung jedoch nicht zu groß, werden die Stromlinien nach der Strahlaufweitung wieder zur Strahlachse zurückgeleitet. Durch die Geschwindigkeitsabnahme innerhalb der Brennkammer steigt stromabwärts der statische Druck, wodurch eine Rezirkulationsströmung entgegen der Hauptströmungsrichtung entsteht. Bei richtiger Auslegung des Brenners wird mittels dieser Rezirkulationsströmung heißes Rauchgas zur Brennermündung zurückgeführt, wodurch die zur Zündung notwendige Energie nicht wie im Fall von Strahlbrennern vom heißen Rauchgas im Brennraum, sondern durch das in der Flamme rezirkulierte heiße Rauchgas zur Verfügung gestellt wird. Folglich entstehen gänzlich unterschiedliche Flammenformen. In Abbildung 3-8 sind Flammentypen nach dem Klassifikationssystem der IFRF dargestellt.

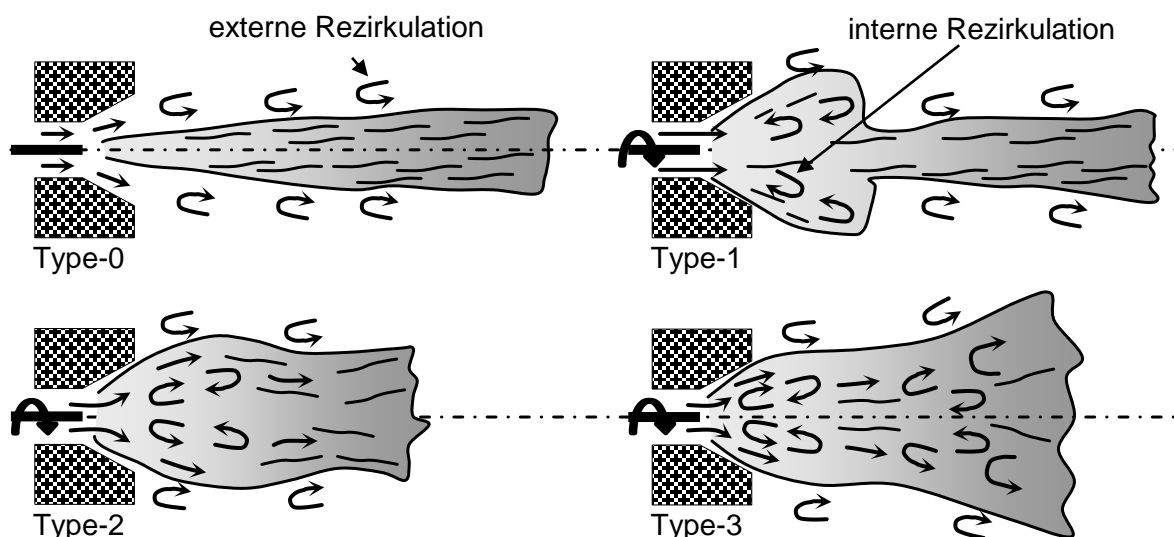


Abbildung 3-8: IFRF-Flammenklassifikationssystem (vgl. Woycenko et al. 1994)

Bei Strahlbrennern und Rundbrennern ohne Drall entsteht eine Flamme der Type-0. Im Vergleich dazu entsteht bei Drallbrennern eine Flamme der Type-2, die deutlich kürzer und

breiter als die Flamme eines Strahlbrenners ausfällt. Eine Flamme der Type-1 entsteht, wenn die Volumenströme zwar verdrallt werden, der Axialimpuls jedoch zu hoch ist und die Rezirkulationsströmung durchbricht. Wird den Volumenströmen eine sehr hohe Tangentialgeschwindigkeitskomponente aufgeprägt (Type-3), wird die Flamme durch die höheren Fliehkräfte aufgeweitet beziehungsweise kann diese aufplatzen und sich an die Brennkammerwand anlegen.

Durch die intensive Durchmischung des Oxidators mit dem Brennstoff und den daraus resultierenden hohen Verbrennungstemperaturen kommt es jedoch zu einer verstärkten Bildung von Stickoxiden (Baukal 2003). Eine Möglichkeit, die Stickoxidbildung zu reduzieren, besteht darin, den Oxidator oder den Brennstoff gestuft in die Brennkammer einzubringen (Drallstufenbrenner). Dadurch entstehen brennstoffreiche und brennstoffarme Bereiche, wobei in beiden Fällen die Temperatur deutlich sinkt. Durch die gestufte Einbringung entsteht eine längere Flamme und der Gehalt an unverbranntem Brennstoff und CO steigt, wobei dies stark von der Verbrennungsführung abhängig ist. Ebenso ist eine NO_x -Reduktion möglich, ohne die Flammenlänge zu vergrößern oder die Flammentemperatur zu senken. Im Bereich der Brennermündung wird eine sehr heiße unterstöchiometrische Verbrennungszone generiert, wodurch einerseits das Sauerstoffangebot zur NO_x -Bildung gering gehalten wird und andererseits sehr aktive CH-Radikale entstehen. In weiterer Folge wird bereits entstandenes NO_x durch die CH-Radikale reduziert (de Kluiver, Gast 1995). In Abbildung 3-9 ist eine Skizze eines Low- NO_x -Brenners dargestellt.

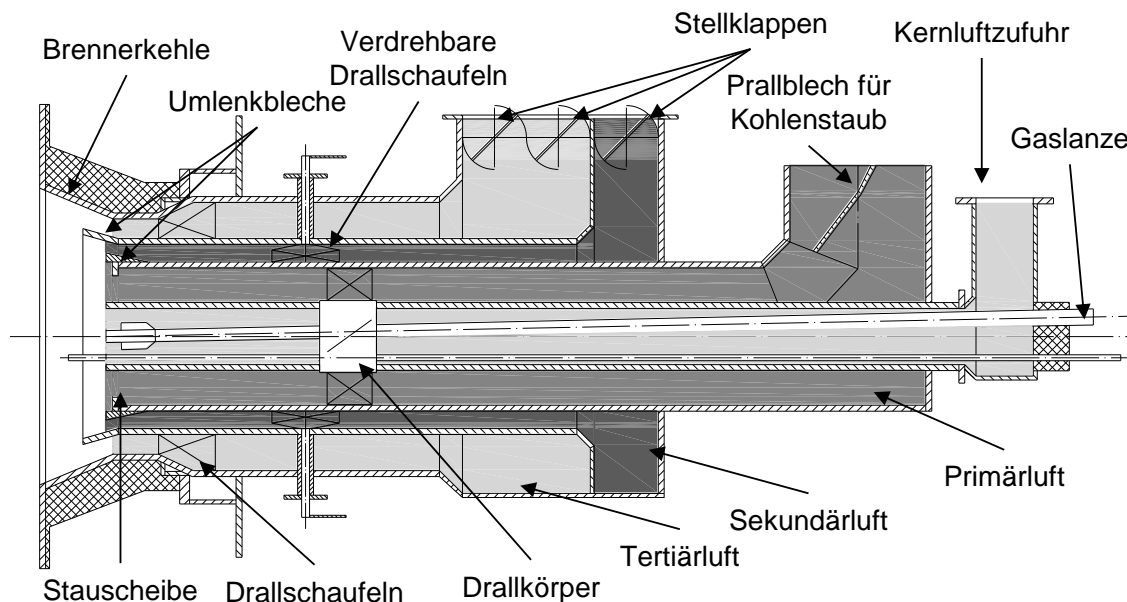


Abbildung 3-9: Skizze eines Low- NO_x -Drallstufenbrenners (vgl. Leisse 2008 VGB)

Der Sekundär- und Tertiärkanal werden meist durch eine gemeinsame Zuleitung versorgt. Um die Volumenströme auf die einzelnen Kanäle einstellen zu können, werden Regelmechanismen, wie zum Beispiel Stellklappen, vorgesehen. Je nach Systemanforderung und Brennstoff können die Drallerzeuger in den einzelnen Kanälen fix oder variabel gestaltet werden. Letzteres hat den Vorteil, dass der Betriebsbereich des Brenners deutlich erhöht werden kann.

3.2.2 Allgemeine Auslegungskriterien

Zur genauen Auslegung von konventionellen Kohlenstaubbrennern steht wenig Literatur zur Verfügung. Dies kann eventuell dadurch begründet werden, dass die Auslegungsparameter und Konstruktionsdetails der Brenner für die jeweiligen Firmen einen Technologievorsprung bedeuten und deshalb zum Großteil nicht oder nur unvollständig veröffentlicht werden. Ebenso verhält es sich mit Oxyfuel-Kohlenstaubbrennern, die meist auf Designkonzepten von Low-NO_x-Brennern basieren, wobei zusätzliche Fragestellungen in Bezug auf den Ort der Sauerstoffinjektion und Einflüsse der veränderten Atmosphäre berücksichtigt werden müssen. Bei bisherigen Brennerkonzepten wurde jedoch stets darauf geachtet, den Betriebsbereich möglichst flexibel zu gestalten, um optimale Betriebspunkte für den Oxyfuel-Betrieb herausfiltern zu können (Hercog et al. 2011, Toshihiko et al. 2011, Hercog et al. 2011, Rehfeldt et al. 2011b, Paschedag 2011, Habermehl et al. 2011).

Durch den Einsatz von numerischen Simulationen können unterschiedliche Konstruktionsdetails betrachtet und auf deren Einfluss auf den Betrieb des Brenners untersucht werden. Für die grundsätzliche Geometrie des Brenners muss jedoch auf Richtwerte in der Literatur zurückgegriffen werden.

Die Austrittsquerschnitte der einzelnen Zuführungskanäle spielen bei der Grundkonzeption eine zentrale Rolle, da durch diese die Austrittsgeschwindigkeiten bei Betriebsbedingungen fixiert werden. Der angegebene Bereich von Betriebsgeschwindigkeiten richtet sich nach der Art des verwendeten Brennstoffes (Steinkohle, Braunkohle) beziehungsweise nach dessen Feuchtegehalt. In Tabelle 3-1 sind Richtwerte für die Axialaustrittsgeschwindigkeiten für unterschiedliche Kohlen aufgelistet. Mit steigendem Wassergehalt des Kohlenstaubes bei nicht vorgetrockneter Kohle müssen die Austrittsgeschwindigkeiten reduziert werden, da die Zündung des Kohlenstaubes aufgrund der vorhergehenden Verdampfung des Wassers verzögert stattfindet. Bei Staubgeschwindigkeiten über 25 m·s⁻¹ hingegen erhöht sich der Verschleiß und die Flammenstabilität wird negativ beeinflusst (Effenberger 2000). Durch die im Verhältnis zur Primärgeschwindigkeit höhere Sekundärgeschwindigkeit wird am Rand der

Flamme eine Drucksenke erzeugt, durch die heiße Rauchgase aus der Umgebung und der Primärstrahl eingesaugt werden.

Tabelle 3-1: Axialgeschwindigkeiten für verschiedenen Kohlen (vgl. Basu et al. 2000)

Axialgeschwindigkeit	Steinkohle	Fettkohle	Gasflammkohle	Braunkohle
Primär m·s ⁻¹	15-16	16-20	20-26	20-26
Sekundär m·s ⁻¹	15-22	20-25	30-40	25-35
Tertiär m·s ⁻¹		40-60		

Neben den Austrittsgeschwindigkeitsverhältnissen stellt die Drallzahl (SN, Swirl Number) eine wichtige Kennzahl für Drallstufenbrenner dar.

Die Drallzahl ist definiert als das Verhältnis von Drehimpulsstrom (D) zu Axialimpulsstrom (P) bezogen auf den Außendurchmesser des äußersten Kanals r_a .

$$SN = \frac{D}{P \cdot r_a} \quad - \quad (3-1)$$

Der Drehimpuls ergibt sich aus

$$D = \int_{\dot{m}} u_t \cdot r \cdot d\dot{m} = \int_A u_t \cdot r \cdot u_a \cdot \rho \cdot dA = 2 \cdot \pi \cdot \rho \cdot \int_0^R u_t \cdot u_a \cdot r^2 \cdot dr \quad \text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \quad (3-2)$$

Nach Integration ergibt sich für einen Austrittsström folgender Ausdruck:

$$D = 2 \cdot \pi \cdot \rho \cdot u_t \cdot u_a \cdot \int_{r_i}^{r_a} r^2 \cdot dr = \frac{2}{3} \cdot \pi \cdot \rho \cdot u_t \cdot u_a \cdot (r_a^3 - r_i^3) \quad \text{kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-2} \quad (3-3)$$

Der Axialimpulsstrom kann mit folgender Gleichung berechnet werden:

$$P = \int_{\dot{m}} u_a \cdot d\dot{m} + \int_A \Delta p \cdot dA = \int_A u_a^2 \cdot \rho \cdot dA + \int_A \Delta p \cdot dA \quad \text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-2} \quad (3-4)$$

Der Axialstrahlimpuls beinhaltet eine Druckkraft in axialer Richtung, die bei gleichmäßiger Verteilung von Geschwindigkeit und Dichte in den Düsen vernachlässigt wird (Krüger 1970), woraus

$$P = \int_A u_a^2 \cdot \rho \cdot dA = \int u_a^2 \cdot \rho \cdot 2 \cdot r \cdot \pi \cdot dr = u_a^2 \cdot \rho \cdot \pi \cdot (r_a^2 - r_i^2) \quad \text{kg} \cdot \text{m} \cdot \text{s}^{-2} \quad (3-5)$$

folgt.

Zur Berechnung der Drallzahl für den gesamten Brenner werden die Axial- und Drehimpulsströme jeweils aufsummiert. Somit kann für einen Rundstrahlbrenner folgende Gleichung angegeben werden:

$$SN = \frac{2 \cdot \sum_{j=1}^n \rho_j \cdot u_{t,j} \cdot u_{a,j} \cdot (r_{a,j}^3 - r_{i,j}^3)}{3 \cdot r_{a,n} \cdot \sum_{j=1}^n \rho_j \cdot u_{a,j}^2 \cdot (r_{a,j}^2 - r_{i,j}^2)} \quad - \quad (3-6)$$

Experimentelle Untersuchungen an Brennern zeigen (Altmann, Lux 1989, Zelkowski 2004), dass die Zündung des Brennstoffes mit der Erhöhung der Drallzahl von einer rein externen Zündung und dem Durchgang eines kritischen Bereichs ($SN=0,75$ bis $0,85$), in dem es zu externer und interner Zündung kommt, auf eine innere Zündung umschlägt. Durch die Erhöhung der Drallzahl wird ebenso die interne Rezirkulation deutlich erhöht, wobei bei zu hohen Drallzahlen negative Nebeneffekte auftreten. Durch die zu hohe Turbulenz kommt es einerseits zu einer zu schnellen Durchmischung der Volumenströme, wodurch die Maximaltemperaturen ansteigen, und andererseits zu einer zu schnellen Verdünnung des Kohlenstaub-Trägergas-Gemisches, wodurch negative Auswirkungen auf die Flammenstabilität resultieren können (Zelkowski 2004). Aus diesem Grund erscheint es als sinnvoll, variable Dralleinrichtungen bei Drallstufenbrennern vorzusehen, da die optimale Drallzahl von der verwendeten Kohle und den Eintrittsbedingungen der einzelnen Volumenströme abhängig ist.

Neben den in Abschnitt 3.2.1 bereits erwähnten konstruktiven Möglichkeiten zur Intensivierung der inneren Rezirkulation hat die Form der Brennerkehle (siehe Abbildung 3-9; Seite 29) ebenfalls einen großen Einfluss. Im Vergleich zu einem Brenner ohne Brennerkehle kann die Rezirkulationsintensität um das Fünffache erhöht werden, wobei der Öffnungswinkel und die Brennerkehlenlänge ausschlaggebend sind (Zelkowski 2004).

Umgesetzte Öffnungswinkel variieren zwischen 40° und 56°. In Basu (Basu et al. 2000) wird die Brennerkehlenlänge mit der Gleichung

$$l_D = 2 \cdot r_a \cdot 0,4 \quad \text{m} \quad (3-7)$$

angegeben, wobei r_a der Außendurchmesser des äußersten Kanals ist.

Auf Basis der in diesem Abschnitt angegebenen Richtwerte ist es grundsätzlich möglich, eine Basisgeometrie für Oxyfuel-Kohlenstaubbrenner zu berechnen. Inwiefern die angegebenen Werte, die aus Untersuchungen von konventionellen Drallstufenbrennern abgeleitet wurden, für Oxyfuel-Kohlenstaubbrenner geeignet sind, ist bis dato noch nicht gänzlich geklärt. Dies kann unter anderem auch dadurch begründet werden, dass sich durch die unterschiedlichen Rauchgasrezirkulationsraten und Sauerstoffinjektionspositionen gänzlich unterschiedliche Brennerkonfigurationen ergeben (Paschedag 2011).

Da jedoch mehrere Oxyfuel-Brenner auf Basis von Low-NO_x-Brennern für die konventionelle Verbrennung ausgelegt wurden (Kluger et al. 2006, Allen 1995, Kimura et al. 1995), erscheint es plausibel, diese Randbedingungen als Ausgangsbasis für die Oxyfuel-Brennerentwicklung zu wählen.

3.2.3 Versuchsergebnisse beim „Friendly Coal“-Brenner

Auf Basis der zuvor genannten Auslegungsprinzipien von Kohlenstaubbrennern wurde im Rahmen des RFCS-Projektes „Friendly Coal“ ein Versuchsbrenner mit einer thermischen Leistung von 2,5 MW konstruiert und in der Versuchsanlage Fo.Sper getestet (Griendl 2008, Griendl et al. 2008). Die aus den Versuchen gewonnenen Erkenntnisse bildeten eine wichtige Grundlage für die Entwicklung des Nachfolgemodells und werden daher im folgenden Abschnitt diskutiert.

Zur besseren Nachvollziehbarkeit der durchgeführten Versuche ist in Abbildung 3-10 eine Prinzipskizze des „Friendly Coal“-Brenners dargestellt. Im Zentrum des Brenners befindet sich ein Schutzrohr für die Montage einer Gaslanze zur Gewährleistung der Brennkammertemperatur während der Nacht. Im darauffolgenden Kanal wird der Sauerstoff für die Injektion in den Primärstrom geführt. Durch drei am Umfang befindliche Öffnungen, deren Querschnitt durch ein koaxial angeordnetes Verschiebeblech variiert werden kann, wird der Sauerstoff noch vor dem Austritt in die Brennkammer dem Primärstrom beigemischt. Der Primärstrom, bestehend aus rezirkuliertem Rauchgas und Kohlenstaub, wird unverdrallt in die Brennkammer eingebracht. An der Austrittsöffnung befindet sich eine axial verschiebbare Stauplatte, durch die die Intensität der inneren Rezirkulation beeinflusst werden kann.

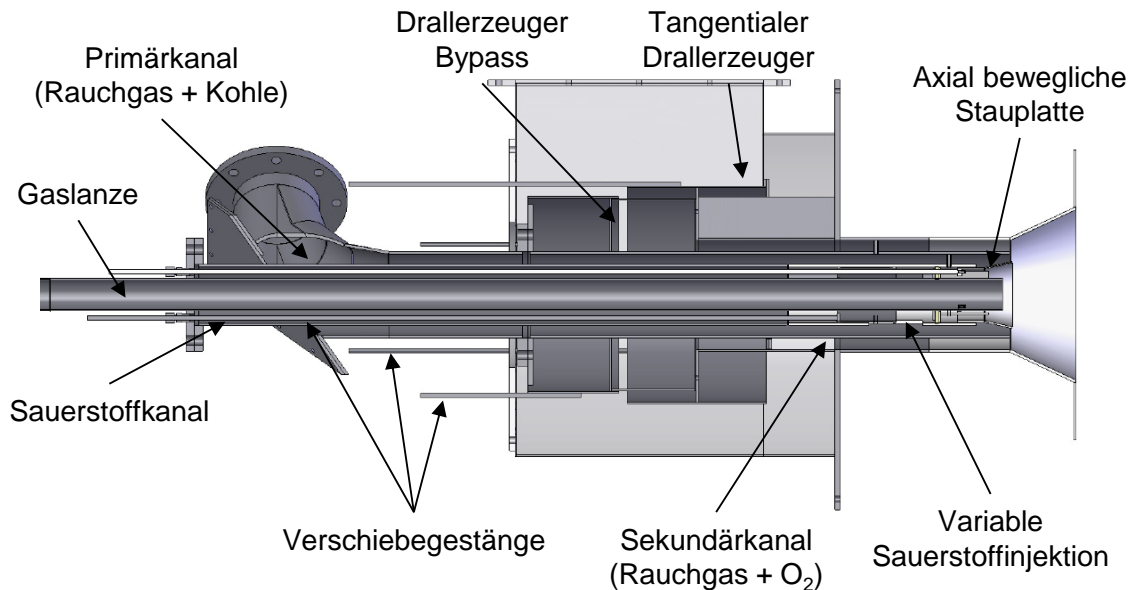


Abbildung 3-10: Prinzipskizze des „Friendly Coal“-Brenners OPCB2c5

Um die Drallzahl in einem möglichst großen Betriebsbereich einstellen zu können, kann dem Sekundärstrom durch einen Tangentialdrallerzeuger mit variablem Querschnitt eine Tangentialgeschwindigkeitskomponente aufgeprägt werden. Aufgrund der Bauform des Drallerzeugers ist ein Bypass erforderlich, um die Tangentialgeschwindigkeit auch auf null reduzieren zu können. Diese Bauart wurde gewählt, um bereits während der Experimente auf die tatsächlich eingestellte Drallzahl schließen zu können. Auf einen Tertiärkanal wurde bewusst verzichtet, da der Fokus bei den Versuchen auf die grundlegenden Einflussfaktoren von Sauerstoffinjektion, Stauplattenposition und Verdrallung gerichtet war.

Aufgrund der Vielzahl von Brennerkonfigurationen wurde bereits vor den Versuchen eine Versuchsmatrix erstellt. Anhand der unterschiedlichen Testkonfigurationen sollte der beste Betriebspunkt in Bezug auf Flammenstabilität und NO_x -Emissionen, aus Gründen, die bereits in Abschnitt 2.1 diskutiert wurden, herausgefiltert werden.

Während der gesamten Versuchskampagne mit Kohlenstaub und reinem Sauerstoff erschien die Kohlenstaubflamme bei den jeweiligen Konfigurationen stabil zu brennen. Es konnte jedoch beobachtet werden, dass die Flammenwurzel sehr nahe an der Brennermündung lag, wobei ohne Sauerstoffinjektion die Flammenwurzel am weitesten von der Brennermündung entfernt war. Durch das Beimischen des Sauerstoffs in den Primärkanal, in dem das Kohlenstaub-Rauchgas-Gemisch zugeführt wird, kann der Brennstoff schneller zur Zündung gebracht werden. Dieser Effekt konnte auch während der Versuche insofern beobachtet werden, als die Flammenwurzel mit Sauerstoff näher zur Brennermündung wanderte.

Während der Versuche wurden mehrmals Ascheproben entnommen und untersucht. Dabei stellte sich heraus, dass während der Versuchskampagne mit Kohlenstaub weniger als 1 m.% Restkohlenstoff in der Asche enthalten war.

Während der Versuche wurde bei unterschiedlichen Stauplattenpositionen die Drallzahl variiert. Des Weiteren wurde der Einfluss der Sauerstoffinjektion mit unterschiedlichen Injektionsmengen untersucht. In Tabelle 3-2 ist die Versuchsmatrix für die Oxyfuel-Kohlenstaubtests dargestellt.

Tabelle 3-2: Brennerkonfigurationen und zugehörige NO-Emissionen ⁽¹⁾

SP=Stauplattenposition, Distanz zwischen Primärkanalaustritt und Stauplatte in axialer Richtung; ²⁾ TP=Tangentialdrallerzeugerposition, Öffnungslänge des Tangentialdrallerzeugers; ³⁾ Aufteilung des gesamt benötigten Sauerstoffs zwischen Sekundär und Primärstrom, bei 0/100 % wird der gesamte Sauerstoff dem Sekundärstrom beigemischt; ⁴⁾ geplanter Restsauerstoffgehalt im Rauchgas auf trockener Basis)

Konfiguration	SP ¹⁾	TP ²⁾	O ₂	% O ₂ ⁴⁾	NO mg·MJ ⁻¹
	mm	mm	Primär/Sekundär ³⁾		
1	0	240	0/100 %	1-3	527
2	0	265	0/100 %	1-3	606
3	0	305	0/100 %	1-3	574
4	+20	240	0/100 %	1-3	551
5	+20	265	0/100 %	1-3	610
6	+20	305	0/100 %	1-3	549
7	0	240	10/90 %	1-3	472
8	0	265	10/90 %	1-3	448
9	0	305	10/90 %	1-3	501
10	+20	240	10/90 %	1-3	521
11	+20	265	10/90 %	1-3	538
12	+20	305	10/90 %	1-3	560
13	0	240	20/80 %	1-3	476
14	0	265	20/80 %	1-3	391
15	0	305	20/80 %	1-3	459
16	+20	240	20/80 %	1-3	335
17	+20	265	20/80 %	1-3	415
18	+20	305	20/80 %	1-3	358

Zur besseren Veranschaulichung der Versuchsergebnisse sind diese in Abbildung 3-11 grafisch dargestellt. Im Diagramm sind die unterschiedlichen Messergebnisse bei konstantem Sauerstoffinjektionsanteil und verschiedenen Brennerkonfigurationen

veranschaulicht. Aufgrund der unterschiedlichen Volumenstromaufteilung auf Primär- und Sekundärstrom durch die Sauerstoffinjektion wird in diesem Fall auf die Angabe der Drallzahl verzichtet und nur die Öffnungslänge der Tangentialkanäle angegeben, wobei mit steigender Tangentialkanallänge die Drallzahl kleiner wird.

Es ist augenscheinlich, dass die Sauerstoffinjektion in den Primärstrom den größten Einfluss auf die NO-Konzentrationen im Rauchgas hat. Durch das Steigern des Injektionsmassenstroms auf 20 % des gesamt benötigten Sauerstoffs können die NO-Emissionen um ca. 40 %, bezogen auf den Fall ohne Injektion, gesenkt werden.

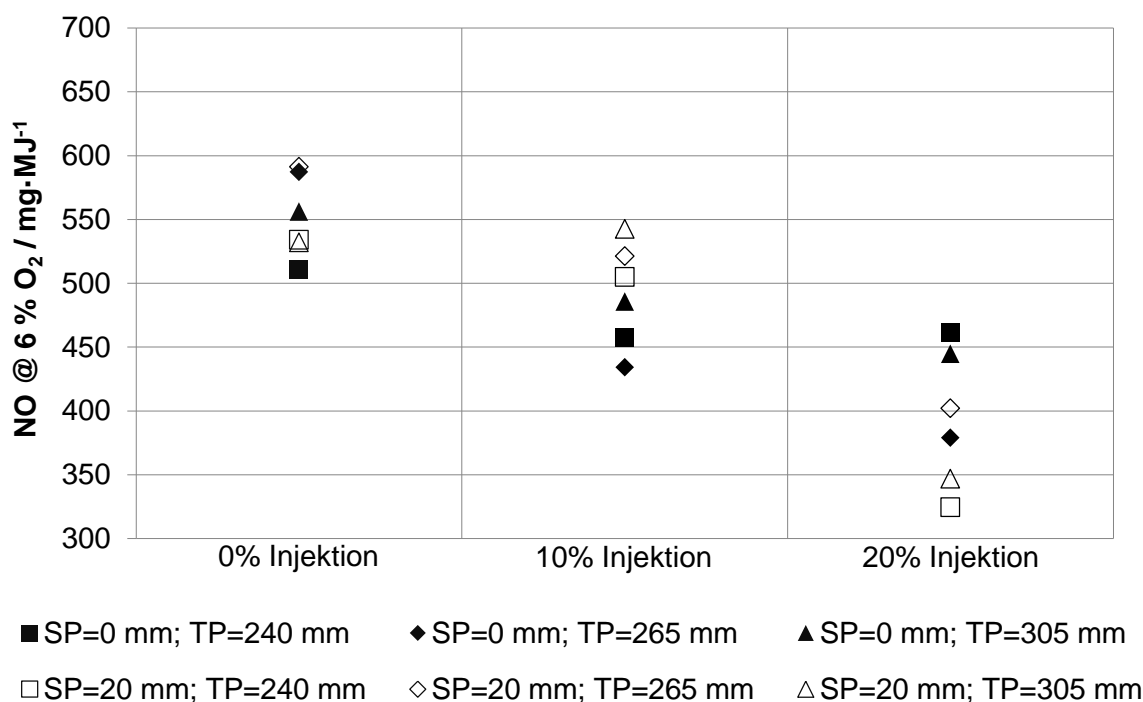


Abbildung 3-11: NO-Konzentrationen bei unterschiedlichen Sauerstoffinjektionsanteilen in Abhängigkeit von verschiedenen Brennerkonfigurationen (Stauplatten- und Drallerzeugerposition)

Wird ein Teil des Sauerstoffs (10 %) in den Primärstrom injiziert, sind die NO-Emissionen bei einer Stauplattenposition direkt an der Brennermündung geringer. Im Gegensatz dazu ist bei 20-prozentiger Injektion in den Primärstrom eine um 20 mm axial nach vorne versetzte Stauplattenposition wirkungsvoller. Trotz des deutlich positiven Einflusses der Sauerstoffinjektion auf die NO-Konzentration im Rauchgas kann bei keiner Brennerkonfiguration der gesetzlich vorgeschriebene Emissionsgrenzwert unterschritten werden. Die höheren NO-Emissionen ohne Sauerstoffinjektion können darauf zurückgeführt werden, dass durch das Fehlen von Sauerstoff im Flammenkern keine Reduktionszone gebildet wird und somit die Verbrennung nicht gestuft stattfindet. Wie in Abschnitt 3.2 bereits beschrieben, wird bei unterstöchiometrischer Verbrennung die NO_x -Bildung durch das

geringere Sauerstoffangebot gehemmt und ebenso die Bildung von CH-Radikalen gefördert, wodurch in weiterer Folge wiederum NO_x reduziert wird. Um diesen Effekt jedoch zu erreichen, muss die Beimischung des Sekundärstroms verzögert stattfinden, um eine ausreichend große Reduktionszone generieren zu können. Dieser Fall könnte für die geringeren NO-Konzentrationen sowie Konzentrationsunterschiede bei den getesteten Brennerkonfigurationen bei Sauerstoffinjektion in den Primärkanal zutreffen.

Da bei diesen Versuchen keine Messungen in der Flamme vorgenommen wurden, ist es schwierig, konkrete Aussagen bezüglich des Zusammenwirkens von Stauplattenposition und Drallstärke und deren Auswirkungen auf die NO-Produktion zu treffen. Die Stickoxidkonzentrationen scheinen jedoch tendenziell zu steigen, wenn die Stauplatte direkt an der Primärkanalmündung positioniert ist und ein hoher Drall eingestellt ist oder die Stauplatte axial nach vorne verschoben ist und eine mittlere Drallstärke vorherrscht. Dies könnte darauf zurückgeführt werden, dass durch die zuvor genannten Konfigurationen die Vermischung des Primärstroms mit dem Sekundärstrom schneller stattfindet, da in diesen Fällen die beginnende Beimischung des Sekundärstroms zum Primärstrom mit dem durch die Stauplatte in radialer Richtung verursachten Impuls zusammenfällt und somit die O_2 -Konzentrationen einerseits höher liegen und andererseits die unterstöchiometrische Zone sowie die Reduktionszone kleiner werden.

Aus den Versuchsergebnissen kann abgeleitet werden, dass die Primäraustrittsgeschwindigkeit zu gering gewählt wurde, da bereits bei keiner Sauerstoffinjektion in den Primärkanal die Flamme sehr nahe an der Brennerkehle war. Ebenso erscheint es vorteilhaft zu sein, die Sauerstoffinjektionsgeschwindigkeit in die Primärzone variabel zu gestalten. Dadurch sollte es möglich sein, die Drallzahl nach den Gesichtspunkten der Flammenstabilität einzustellen und dennoch eine zu schnelle Durchmischung von Primär- und Sekundärstrom zu verhindern. Aufgrund des einerseits hohen Druckverlustes durch den Drallerzeuger und andererseits der kurzen und somit heißen Flamme erscheint es ebenfalls sinnvoll, die Sekundäraustrittsgeschwindigkeit zu reduzieren, um einer zu schnellen Durchmischung vorzubeugen und die NO-Emissionen zu verringern.

3.3 „AE&E“-Brenner

Der „AE&E“-Kohlenstaubbrenner wurde im Rahmen eines Forschungs- und Entwicklungsprojektes in Kooperation mit Austrian Energy and Environment (AE&E, seit Februar 2011 Andritz Energy and Environment) entwickelt und an der Versuchsanlage Fo.Sper in Livorno, Italien, getestet. Das Brennerdesign basiert hauptsächlich auf den Betriebserfahrungen des vorhergehenden Brenners, der im Rahmen des Research Fund for Coal and Steel (RFCS) Projektes „Friendly Coal“ entwickelt wurde.

Bei der Konzeption des neuen Brenners wurden einige Konstruktionselemente des „Friendly Coal“-Brenners übernommen, wobei zusätzliche Sicherheitsmaßnahmen berücksichtigt wurden. In Abbildung 3-12 ist eine Schnittdarstellung des neu konzipierten Brenners dargestellt.

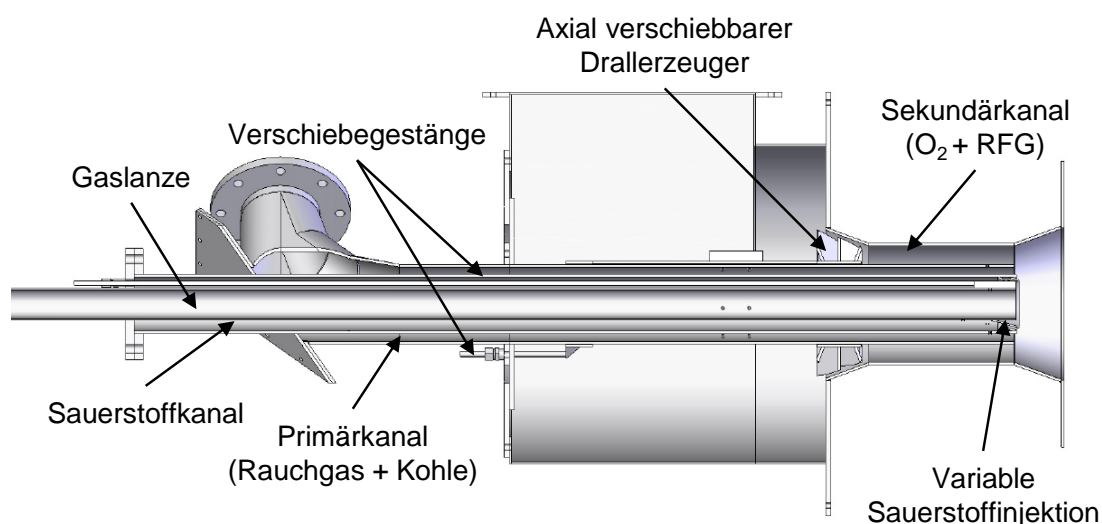


Abbildung 3-12: Prinzipskizze des neu konstruierten „AE&E“-Brenners

Wie bereits bei der vorhergehenden Version des Kohlenstaubdrallbrenners wurde auch beim neuen Brenner auf einen Tertiärkanal, wie bei derzeit gängigen Low-NO_x-Brennern üblich, verzichtet. Dies liegt darin begründet, dass mit Hilfe einer variablen Sauerstoffinjektion in den Flammenkern beziehungsweise einer variablen Verdrallung des Sekundärstroms eine Reduktionszone generiert werden kann, die für eine Verringerung der Brennstoff-NO-Produktion ausreichend erscheint. Des Weiteren vereinfacht sich die Brennerkonstruktion deutlich, wodurch einerseits zusätzliche Stellmechanismen vermieden werden und andererseits die Datenauswertung und in weiterer Folge die numerische Simulation leichter erfolgen kann, da keine isothermen Tests in Bezug auf die Strömungsaufteilung und Geschwindigkeitsverhältnisse durchgeführt werden müssen, um auf die tatsächliche Volumenstromaufteilung schließen zu können.

Da Kohlenstaub aufgrund der eingeschränkten Bunkermöglichkeit und aus Kostengründen nur während der Versuche als Brennstoff verwendet wird, ist im Brennerzentrum eine Gaslanze mit 2-Zoll-Anschluss vorgesehen, um die Brennkammer außerhalb der Testzeiten auf Betriebstemperatur zu halten. Im Anschluss an die Gaslanze ist ein Sauerstoffkanal vorgesehen, durch den eine Sauerstoffinjektion in den Flammenkern ermöglicht wird. Die Strömungsgeschwindigkeit im Sauerstoffkanal für den Auslegepunkt (20 % des benötigten Sauerstoffs werden injiziert) wurde mit $6 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ gewählt, um zu verhindern, dass Kohlenstaub in den Sauerstoffkanal gelangt. Des Weiteren soll die Strömungsgeschwindigkeit im Sauerstoffkanal nicht zu hoch gewählt werden, da einerseits ein zu hoher Eintrittsimpuls zu einer zu schnellen Durchmischung führen kann und andererseits der Regelbereich der Sauerstoffinjektion eingeschränkt wird. Das Konstruktionsprinzip ist in Abbildung 3-13 dargestellt. Im Gegensatz zur vorhergehenden Brennerkonstruktion wird hier der Sauerstoff direkt in die Brennermündung eingebracht.

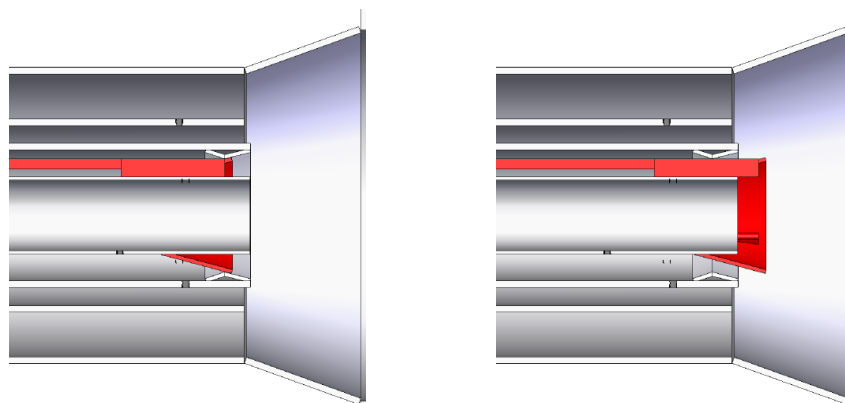


Abbildung 3-13: Konstruktionsprinzip der Sauerstoffinjektion (links: geschlossen, rechts: geöffnet)

Wie in Abbildung 3-13 ersichtlich, ist der Injektionskanal konisch ausgeformt. Durch die zusätzliche radiale Strömungskomponente und den variablen Querschnitt, wodurch die Austrittsgeschwindigkeit variiert werden kann, soll ein ähnlicher Effekt wie bei einer Stauplatte erzielt und die innere Rezirkulation beeinflusst werden. Aus diesem Grund wurde auf eine Stauplatte im Primärkanal am Kanalaustritt verzichtet. Ein weiterer Vorteil dieser Konstruktion besteht darin, dass durch den Stellmechanismus die Injektionsgeschwindigkeit unabhängig vom Sauerstoffvolumenstrom ist. Bei Sauerstoffanlagen ist die Konstruktion für eine variable Sauerstoffinjektion um einiges aufwendiger. Ebenso ist im Primärkanal keine Dralleinheit vorgesehen. Dies resultiert aus der Überlegung, dass Einbauten in partikelbeladenen Fluidströmen starker Abrasion ausgesetzt sein können und somit die Standzeit des Brenners negativ beeinflusst werden kann. Aus diesem Grund erscheint es

sinnvoll, auf Einbauten in partikelbeladenen Strömen zu verzichten, sofern diese nicht unbedingt notwendig sind. Aufgrund der gleichen Zuströmgeometrie im Vergleich zum „Friendly Coal“-Brenner, bei dem während der Versuche keine ungleichmäßige Verteilung des Kohlenstaubs zu beobachten war, wurde auf Einbauten zur Vergleichmäßigung der Kohlenstaubverteilung verzichtet. Bei den vorhergehenden Tests mit dem „Friendly Coal“-Brenner konnte festgestellt werden, dass durch die Sauerstoffinjektion in den Primärkanal einerseits und die langsame Primäreintrittsgeschwindigkeit von $18 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ andererseits die Zündung des Brennstoffes sehr nahe an der Brennermündung stattfand und somit sehr hohe Temperaturen an der Brennerkehle vorherrschten. Durch die hohen Temperaturen wird das eingesetzte Material an der Brennermündung sehr stark belastet, wodurch die Standzeiten deutlich kürzer ausfallen können. Um die Zündung des Brennstoffes unter Beibehaltung der Sauerstoffinjektion stromabwärts zu verschieben, wurde deshalb die Primäraxialgeschwindigkeit auf $23 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ erhöht.

Bei der vorhergehenden Brennervariante wurde aufgrund der geforderten hohen Variabilität ein Tangentialdrallerzeuger gewählt. Beim neuen Brennerdesign wurde ein axial verschiebbarer, konisch ausgeformter Axialdrallerzeuger vorgesehen. Dieser weist zwar den Nachteil auf, dass der Regelbereich im Vergleich zum Tangentialdrallerzeuger geringer ist (die maximale Tangentialgeschwindigkeitskomponente ist durch Schaufelwinkel limitiert), der Druckverlust im Auslegungspunkt des Schaufelgitters jedoch geringer ist. Die vorhergehenden Tests weisen darauf hin, dass für einen optimalen Betrieb des Brenners eine Drallzahl zwischen 0,6 und 0,9 notwendig ist und somit der Drallerzeuger dahingehend berechnet wurde. Die detaillierte Auslegung des Schaufelgitters wurde vom Projektpartner AE&E übernommen. Die Sekundäraxialgeschwindigkeit wurde mit $29 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ im Vergleich zum Vorgängerbrenner ($32 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$) etwas langsamer gewählt, um die Durchmischung vom Primärstrom mit dem Sekundärstrom etwas zu verzögern, da diese durch die Tangentialgeschwindigkeitskomponente ohnehin wiederum intensiviert werden kann.

Die im Vergleich zu den Einbauten recht groß ausgefallene Airbox war notwendig, um die Anschlussmaße der Versuchsanlage einhalten zu können. Durch das vollständige zurückziehen des Drallerzeugers wird die Strömung von diesem kaum mehr beeinflusst. Ist der Drallerzeuger vollständig in den Konus eingeschoben, wird in etwa eine Drallzahl von 1 erreicht. Um einerseits eine möglichst gute Führung zu gewährleisten und andererseits die Auflagefläche der Verschiebeeinheit so gering wie möglich zu halten, wird der Schaufelträgerring nur durch drei Verbindungsbleche mit dem Verschiebering, auf dem die Verschiebestangen angebracht sind, verbunden (Abbildung 3-14). Die Verbindungsbleche werden von jeweils zwei L-förmigen Profilen geführt, um ein Verkanten der Dralleinheit zu

verhindern und das bei der Umlenkung der Strömung entstehende Rotationsmoment abzustützen. Die Durchführungen für die Verschiebestänge sowohl für die Sauerstoffinjektion als auch für den Drallerzeuger müssen gasdicht ausgeführt sein. Eine einfache Möglichkeit bietet hierbei eine Klemmringverschraubung mit einem Teflon-Dichtring.

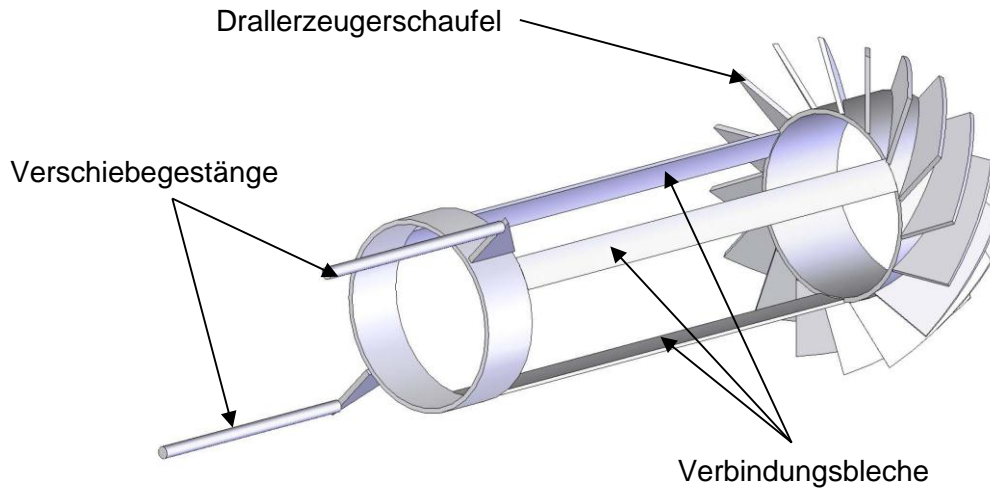


Abbildung 3-14: Prinzipskizze des Drallerzeugers

Anhand der in Abschnitt 3.2.2 angegebenen Strömungsgeschwindigkeiten kann die Basisgeometrie des Brenners berechnet werden. In Abbildung 3-15 sind die gewählten Rohrdimensionen und die Brennerkehlenabmessung des neuen Brenners dargestellt.

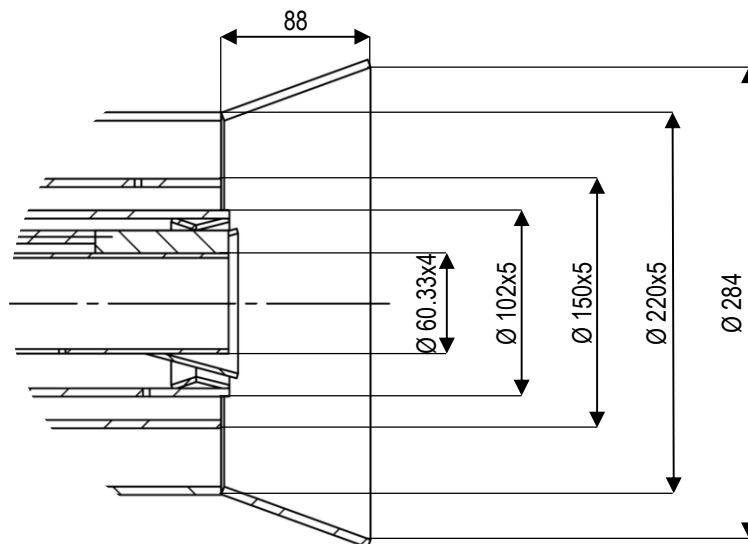


Abbildung 3-15: Gewählte Rohrdurchmesser und Brennerkehlenabmessung des neu ausgelegten Brenners (Abmessungen in mm)

Am Brennerkehlenende ist ein Brennkammerring angebracht. Der Brennkammerring ist notwendig, um das Durchgangsloch für die Brennerinstallation vor zu hohen Temperaturen

zu schützen. Die Brennerkehle ist als einfacher Konus ausgeführt. Die Länge wurde mit Gleichung (3-7) berechnet und der Öffnungswinkel wurde mit 20° fixiert, woraus der Brennerkehlenaußendurchmesser berechnet werden kann.

Um einen Überblick bezüglich der Geschwindigkeitsverhältnisse im Brennermündungsbereich zu erhalten, ist es sinnvoll, die Geschwindigkeitsverläufe in Abhängigkeit vom Verhältnis des dem Sekundärstrom beigemischten Sauerstoffmassenstroms zum gesamt benötigten Sauerstoffmassenstroms zu definieren (Gleichung (3-8), $GSMA_{sec}$ =Gesamt-Sauerstoff-Massenstrom-Anteil im Sekundärstrom).

$$GSMA_{sec} = \frac{\text{dem Sekundärstrom beigemischter Sauerstoffmassenstrom}}{\text{Gesamt benötigter Sauerstoffmassenstrom}} \cdot 100 \quad \% \quad (3-8)$$

In Abbildung 3-16 sind die Geschwindigkeiten innerhalb der einzelnen Kanäle in Abhängigkeit vom $GSMA_{sec}$ dargestellt.

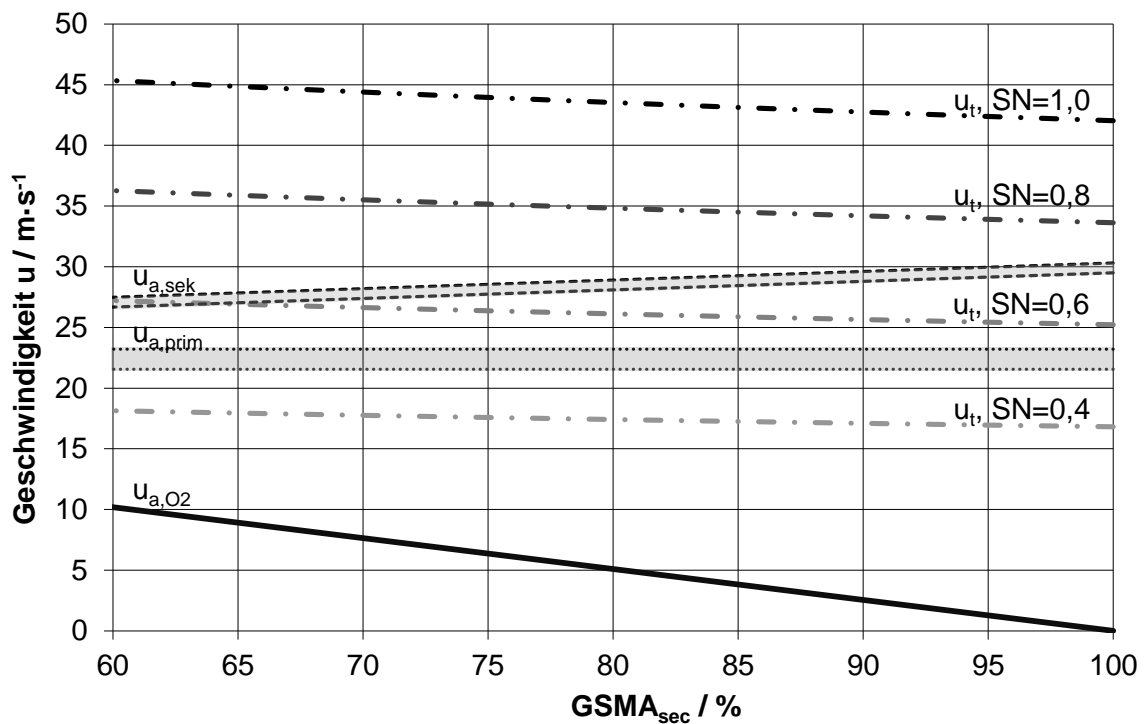


Abbildung 3-16: Geschwindigkeitsverläufe der einzelnen Brennerkanäle und Tangentialgeschwindigkeitsverläufe bei konstanten Drallzahlen in Abhängigkeit vom $GSMA_{sec}$

Aufgrund der betriebsbedingten unterschiedlichen Aufteilung von Primär- und Sekundärstrom sind im Diagramm die zu erwartenden Geschwindigkeitsbereiche von Primär- und Sekundärstrom dargestellt.

Es ist ersichtlich, dass die Axialgeschwindigkeit des Sekundärstroms bei steigender Sauerstoffinjektion in den Flammenkern sinkt. Die Primäraxialgeschwindigkeit wird jedoch nicht beeinflusst, da die Sauerstoffinjektion in die Brennermündung erfolgt. Die strichpunktierten Linien stellen die notwendigen Tangentialgeschwindigkeiten im Sekundärstrom dar, um bestimmte Drallzahlen zu erreichen. Mit steigender Sauerstoffinjektion muss auch eine höhere Tangentialgeschwindigkeit realisiert werden, da der Massenstrom im Sekundärkanal abnimmt und somit der Drallimpulsstrom bei gleichbleibender Tangentialgeschwindigkeit abnehmen würde.

3.3.1 Materialwahl

Die Materialwahl bei einem mit reinem Sauerstoff betriebenen Brenner ist von besonderer Bedeutung, da zusätzliche sicherheitsrelevante Aspekte beachtet werden müssen. Dies liegt darin begründet, dass durch steigende Sauerstoffkonzentrationen und Drücke Verbrennungsreaktionen deutlich intensiver ablaufen, wobei die dafür notwendige Zündtemperatur sowie Zündenergie für den Beginn der Verbrennungsreaktion geringer werden. Dadurch können ebenfalls Materialien, die bei Luft-Atmosphäre nicht entzündet werden können, bei sauerstoffangereicherten Atmosphären in Brand geraten. Dies trifft ebenfalls auf nichtlegierte Stähle zu. Um zu verhindern, dass es zu einem Brand der mit Sauerstoff im Kontakt befindlichen Materialien kommt, können einerseits konstruktive Maßnahmen getroffen werden (ASTM Standard G88 2005) oder Materialien gewählt werden, bei denen sichergestellt ist, dass sie bei den gegebenen Betriebsbedingungen keinesfalls entzündet werden können (ASTM Standard G124 2003). Neben den konstruktiven Maßnahmen müssen bei unlegierten Stählen in Abhängigkeit vom Betriebsdruck ebenfalls Strömungsgeschwindigkeiten eingehalten werden, da durch das Aufprallen eines im Rohr befindlichen Partikels mit einer höheren Geschwindigkeit als der maximal zulässigen bereits ein Brand entstehen kann (EIGA 2002).

Daher müssen speziell die Bereiche, in denen es zu höheren Sauerstoffkonzentrationen im Vergleich zu jener bei Luft kommt, genauer betrachtet werden. Beim neuen Brenner sind der Sauerstoffinjektionskanal und der Sekundärkanal von besonderem Interesse. Als Basis für einen Materialvorschlag dient ein von der European Industrial Gases Association veröffentlichter Leitfaden (EIGA 2002). Aufgrund der hohen Temperaturen im Brennermündungsbereich und den partikelbeladenen Volumenströmen wurden ausschließlich die im Anhang des Leitfadens angeführten Stähle verwendet. Während für den hinteren Bereich des Brenners, bei dem keine Temperaturen über 250°C auftreten, 1.4401 als Material verwendet wurde, wurde in den hochtemperaturbelasteten Zonen, wie

dem Brennermündungsbereich, ein Hitzebeständiger Stahl gewählt. Ebenso wurde nach der Fertigung der Brenner gebeizt und somit von eventuellen Rückständen gereinigt.

Um die Sicherheit des Betriebspersonals und die der Versuchsanlage zu erhöhen, wurden folgende zusätzliche Sicherheitsmaßnahmen während des Brennerbetriebs beachtet:

- Wenn keine Sauerstoffinjektion während des Betriebs benötigt wird, muss der Injektionskanal geschlossen sein.
- Vor Inbetriebnahme der Sauerstoffinjektion muss die Sauerstoffleitung mit Stickstoff gespült werden.

3.3.2 Versuchsmatrix und Testergebnisse des „AE&E“-Brenners

Bei den Versuchen mit dem neuen „AE&E“-Brenner wurde ähnlich verfahren, wie beim vorhergehenden „Friendly Coal“-Brenner. Während der Versuche wurden parallel Berechnungen mit IPSEpro durchgeführt, um möglichst genau die vorgesehenen Betriebsparameter überprüfen beziehungsweise adaptieren zu können.

Bereits zu Beginn der Versuchskampagne wurde festgestellt, dass die neu eingebaute Kohlenstaubzudosierungseinheit keinen konstanten Massenstrom zulässt. Es konnte beobachtet werden, dass in etwa alle 15 Minuten der Kohlenstaubmassenstrom kurzfristig stark anstieg und danach wiederum den Vorgabewert erreichte. In Abbildung 3-17 ist exemplarisch der zeitliche Verlauf des Kohlenstaubmassenstroms dargestellt.

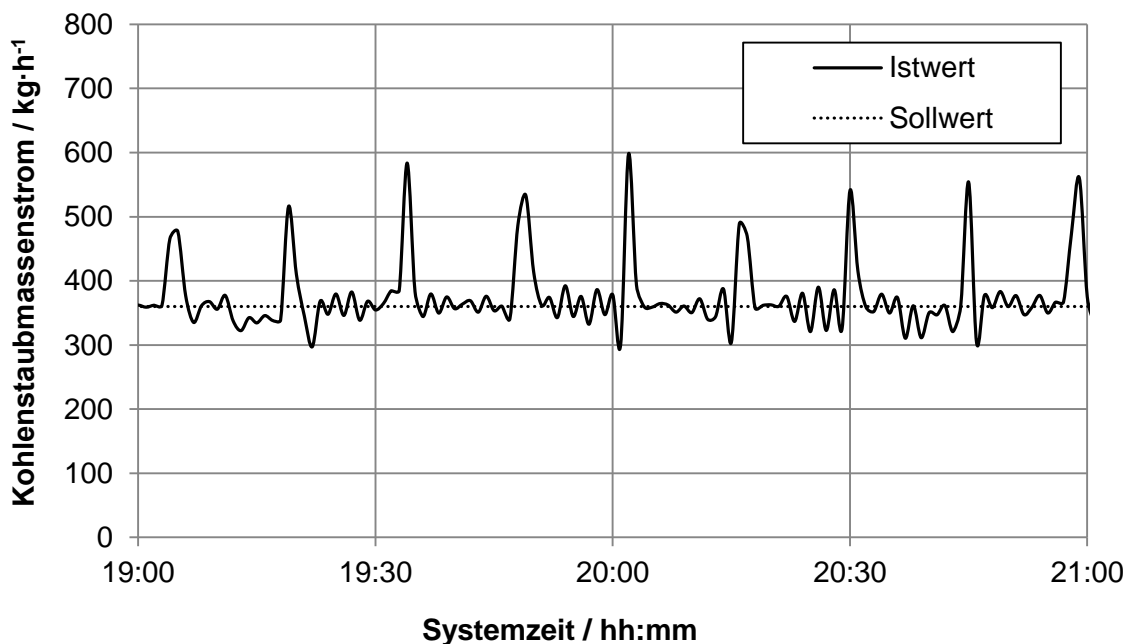


Abbildung 3-17: Exemplarischer zeitlicher Verlauf des Kohlenstaubmassenstroms

Da eine kurzfristige Behebung des Fehlers weder vom Betriebspersonal noch vom Hersteller möglich war, musste für jede einzelne Messung so lange gewartet werden, bis einerseits der Kohlenstaubmassenstrom den Sollwert erreichte und andererseits die Sauerstoff- und Kohlendioxidkonzentrationen wiederum den Wert vor dem jeweiligen „Peak“ erreichten.

Zu Beginn der Versuchskampagne wurden mögliche Brennerkonfigurationen des Brenners für den Betrieb mit Luft getestet. Dabei wurden einerseits die Drallerzeugerposition und andererseits der Restsauerstoffgehalt im Rauchgas am Brennkammeraustritt variiert. Der maximale Drall wurde aufgrund des hohen Druckverlustes nicht realisiert.

In Tabelle 3-3 sind die jeweiligen Brennerkonfigurationen aufgelistet. Ein Restsauerstoffgehalt zwischen 2 und 3 Vol.% auf trockener Basis im Rauchgas entspricht hierbei einem Luftüberschuss zwischen 10 und 15 %, welcher ebenfalls bei konventionellen Kohlekraftwerken eingestellt wird (Kather et al. 2007). Bei den Versuchen mit sehr geringem Restsauerstoffgehalt im Rauchgas (0,4 Vol.% tr.) wurde die Flammenstabilität überprüft.

Tabelle 3-3: Brennerkonfigurationen während des Betriebes mit Luft bei einer thermischen Leistung von 2,5 MW (¹ AP=Axialdrallerzeugerposition, 0 mm entsprechen maximaler Verdrallung; ² geplanter Restsauerstoffgehalt im Rauchgas auf trockener Basis)

Konfiguration	AP ¹⁾ mm	Primärmassenstrom kg·h ⁻¹	Sekundärmassenstrom kg·h ⁻¹	% O ₂ ²⁾
1	10	560	2935	3 %
2	10	520	2791	2 %
3	10	520	2627	0.4 %
4	20	560	2935	3 %
5	20	520	2791	2 %
6	20	520	2627	0.4 %
7	40	560	2935	3 %
8	40	520	2791	2 %
9	40	520	2627	0.4 %
10	67	560	2935	3 %
11	67	520	2791	2 %
12	67	520	2627	0.4 %

Während der gesamten Versuchsreihe konnte visuell keine Flammeninstabilität festgestellt werden, obwohl der Brenner zwischenzeitlich durch die starken Schwankungen des Kohlenstaubmassenstroms stark unterstöchiometrisch betrieben wurde. Die CO-Emissionen lagen bei den Versuchen mit einem Restsauerstoffgehalt zwischen 2 und 3 Vol.% tr. unter

20 ppm im Rauchgas. Lediglich bei einem sehr geringen Sauerstoffgehalt (0,4 Vol.% tr. → ca. 5 % Luftüberschuss) im Rauchgas wurden CO-Werte mit bis zu 40 ppm gemessen. Dies lässt darauf schließen, dass durch den geringen Luftüberschuss, die Verbrennung innerhalb der Brennkammer nicht mehr vollständig stattgefunden hat.

In Abbildung 3-18 sind die NO-Konzentrationen bei konventionellem Betrieb mit Luft der jeweiligen Brennerkonfiguration dargestellt. Es ist gut zu erkennen, dass bei einem höheren Restsauerstoffgehalt im Rauchgas die NO-Konzentration ebenfalls höher liegt. Bei keiner Verdrallung des Sekundärstroms (AP=68 mm), werden jedoch die höchsten NO-Emissionen erreicht. Während bei einer Restsauerstoffkonzentration von 2 Vol.% keine signifikanten Unterschiede zwischen den einzelnen Drallerzeugerkonfigurationen zu erkennen sind, scheint bei einem höheren Sauerstoffüberschuss eine größere Tangentialgeschwindigkeitskomponente (AP=10 oder 20 mm) von Vorteil zu sein. Aufgrund des engen Zeitplans wurde auf Messungen der Gaskonzentrationen und des Temperaturprofils innerhalb der Brennkammer bei Luftbetrieb verzichtet.

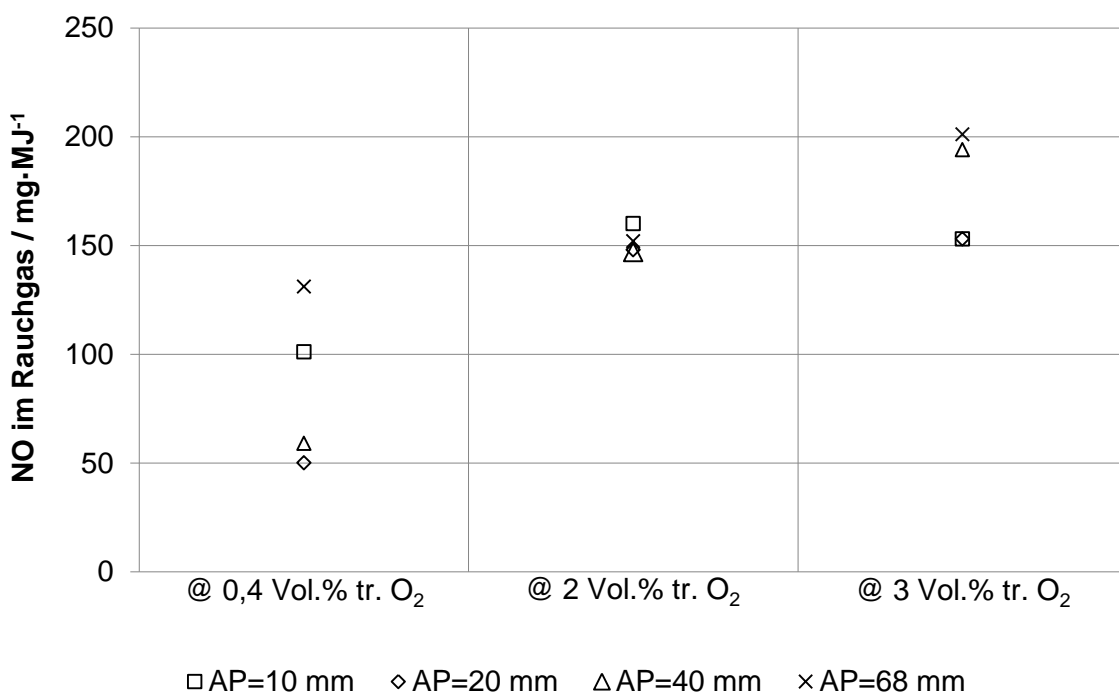


Abbildung 3-18: NO-Konzentrationen im Rauchgas bei unterschiedlichen Drallerzeugerpositionen (AP=0 → maximaler Drall) und Sauerstoffkonzentrationen (in Vol.% trocken) im Rauchgas bei Betrieb mit Luft

Im Anschluss an die ersten Messungen wurde in den Oxyfuel-Betrieb umgeschaltet. Um die beste Brennerkonfiguration zu ermitteln, wurden wiederum unterschiedliche Einstellungen getestet, wobei hierbei der Anteil des in den Primärstrom injizierten Sauerstoffs und die Injektionsgeschwindigkeit als weitere Variationsparameter in die Versuchsmatrix

aufgenommen wurden. In Tabelle 3-4 sind die Brennerkonfigurationen angeführt. Aufgrund der Betriebserfahrungen mit dem „Friendly Coal“-Brenner wurden zu Beginn der Oxyfuel-Tests 20 % des benötigten Sauerstoffs in den Brennermündungsbereich injiziert und lediglich die Axialdrallerzeugerposition (AP) und die Injektorposition (IP) verändert, um die beste Konfiguration in Bezug auf die NO-Emissionen im Rauchgas festzustellen (Konfigurationen 1 bis 10). Die durchschnittliche CO₂-Konzentration am Austritt der Brennkammer lag während der Versuche bei 67,2 Vol.% tr. (Details siehe Abschnitt 3.4, Seite 54).

Tabelle 3-4: Brennerkonfigurationen während des Oxyfuel-Betriebs bei 2,5 MW_{th} ⁽¹⁾
 AP=Axialdrallerzeugerposition, 0 mm → maximale Verdrallung; ⁽²⁾ IP=Injektorposition, 0 mm → geschlossener Injektor; ⁽³⁾ Aufteilung des Sauerstoffs zwischen Sekundär- und Primärstrom, bei 0/100 % wird der gesamte Sauerstoff dem Sekundärstrom beigemischt; ⁽⁴⁾ geplanter Restsauerstoffgehalt im Rauchgas auf trockener Basis)

Konfiguration	AP ⁽¹⁾	IP ⁽²⁾	O ₂	% O ₂ ⁽⁴⁾
	mm	mm	Primär/Sekundär ⁽³⁾	
1	10	35	20/80 %	1-3
2	20	25	20/80 %	1-3
3	20	35	20/80 %	1-3
4	30	15	20/80 %	1-3
5	30	25	20/80 %	1-3
6	40	15	20/80 %	1-3
7	40	25	20/80 %	1-3
8	40	35	20/80 %	1-3
9	50	25	20/80 %	1-3
10	50	35	20/80 %	1-3
11	40	20	10/90 %	1-3
12	40	20	30/70 %	1-3
13	40	20	20/80 %	1-3

In Abbildung 3-19 sind die Versuchsergebnisse grafisch dargestellt. Bei Betrachtung der Basiskonfiguration (Sauerstoffinjektion von 20 %) ist ersichtlich, dass die NO-Emissionen von der Kombination der Drallerzeuger- und Injektorposition abhängen. So scheinen die Kombinationen hoher Drall und hohe Sauerstoffinjektionsgeschwindigkeit und geringer Drall und geringe Sauerstoffinjektionsgeschwindigkeit die NO-Produktion zu unterstützen. Im Gegensatz dazu können vergleichsweise geringere NO-Emissionen beobachtet werden, wenn eine hohe Tangential- und eine geringe Sauerstoffinjektionsgeschwindigkeit oder umgekehrt realisiert werden. Dies erscheint auch insofern plausibel, wenn davon ausgegangen wird, dass durch die gleichzeitige Vermischung bei den zuvor genannten

Kombinationen mit hoher NO-Produktion von Primärstrom, Sekundärstrom und Sauerstoffinjektion keine Reduktionszone gebildet wird. Werden jedoch die Eintrittsgeschwindigkeiten so gewählt, dass die Beimischung des Sekundärstroms mit dem Primärstrom an anderer Stelle stattfindet als die Beimischung des Sauerstoffinjektionsstroms mit dem Primärstrom, kommt es zu einer gestuften Verbrennung und somit größeren Reduktionszone, wodurch die NO-Produktion reduziert wird.

In Abbildung 3-19 ist zu erkennen, dass bei einer Axialdrallerzeugerposition von 40 mm tendenziell die geringsten NO-Konzentrationen bei gleichbleibendem Injektionsanteil gemessen wurden, wobei die geringste NO-Konzentration bei Konfiguration 7 festgestellt werden konnte.

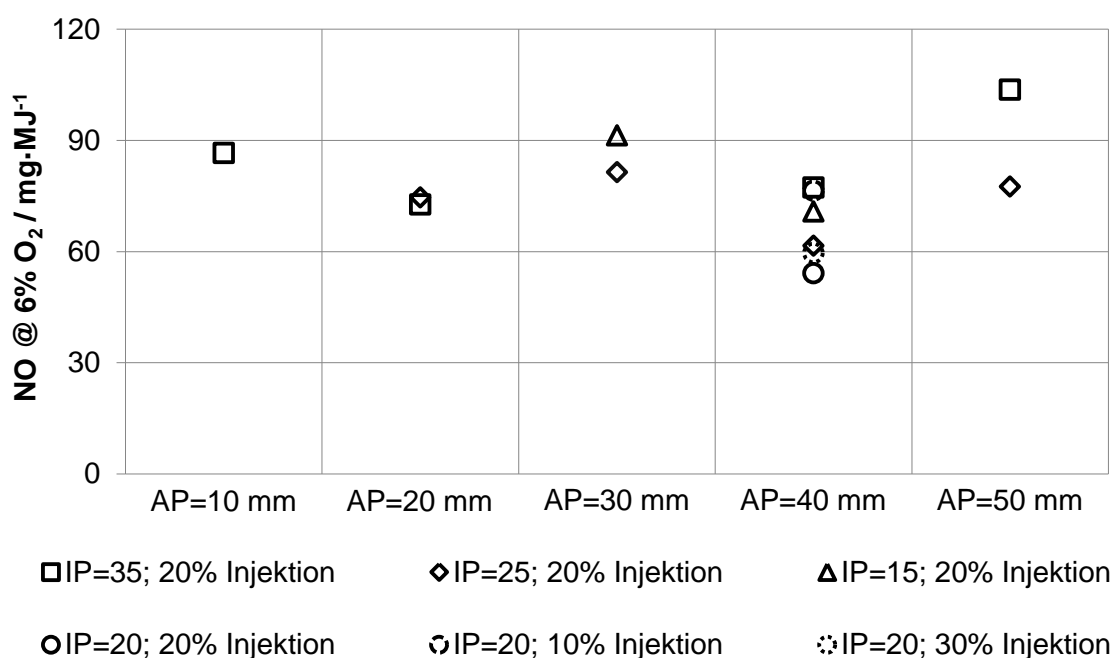


Abbildung 3-19: NO-Konzentrationen im Rauchgas bei unterschiedlichen Drallerzeugerpositionen (AP=0 mm → maximaler Drall), Sauerstoffinjektionsanteilen in den Primärstrom und Sauerstoffinjektorpositionen (IP=0 → Injektor geschlossen) im Oxyfuel-Betrieb bei einer thermischen Leistung von 2,5 MW

Aus diesem Grund wurde für eine konstante Axialdrallerzeugerposition von 40 mm nochmals die Injektorposition so lange variiert, bis die NO-Emissionen ein Minimum erreichten (IP=20 mm). Für diese Konfiguration wurde in weiterer Folge die Sauerstoffaufteilung nochmals variiert. Dabei konnte festgestellt werden, dass bei einer Verringerung des Sauerstoffinjektionsanteils, wodurch bei gleichbleibender Sauerstoffinjektorposition die Injektionsgeschwindigkeit sinkt, in Kombination mit einem vergleichsweise geringen Drall die NO-Konzentration wiederum deutlich zunimmt. Wird jedoch der Sauerstoffinjektionsanteil auf

30 % erhöht, wodurch ebenfalls die Injektionsgeschwindigkeit steigt, steigen die NO-Emissionen nur leicht an.

Um den Einfluss der Sauerstoffinjektion auf die NO-Emissionen zu verdeutlichen, sind in Abbildung 3-20 die Messergebnisse der Versuchskampagnen beider Brenner in Abhängigkeit vom Sauerstoffinjektionsanteil in den Primärstrom dargestellt.

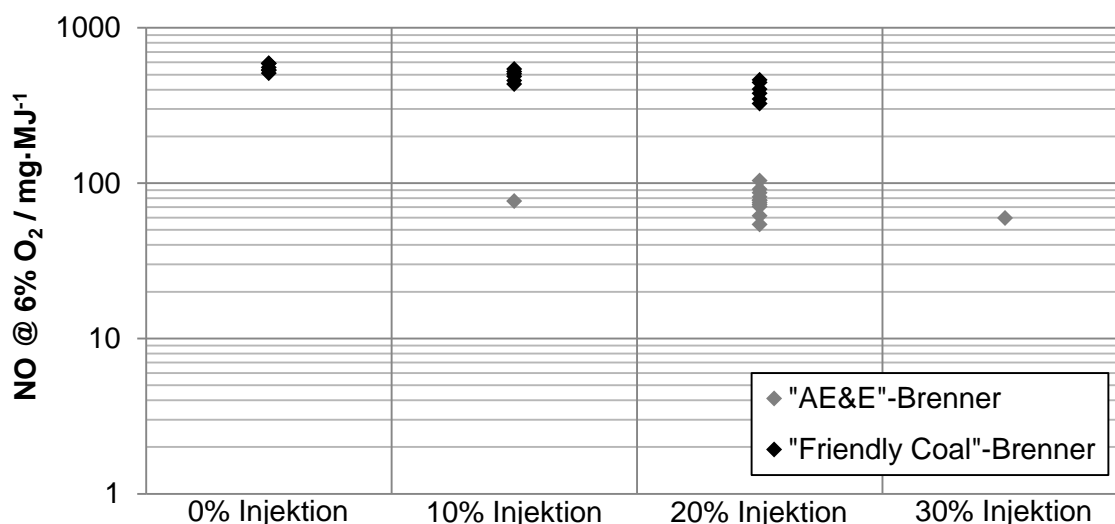


Abbildung 3-20: NO-Konzentrationen im Rauchgas beider untersuchter Brenner in Abhängigkeit vom Sauerstoffinjektionsanteil

Es ist offensichtlich, dass die NO-Emissionen beim weiterentwickelten „AE&E“-Brenner im Vergleich zum Vorgängermodell deutlich gesenkt werden konnten. Dieser Umstand dürfte auf die modifizierten Austrittsgeschwindigkeiten des Primär- und Sekundärstroms sowie der Überarbeitung der Sauerstoffinjektion zurückzuführen sein. Die Unterschiede in Bezug auf die NO-Konzentrationen bei konstanter Sauerstoffinjektion der einzelnen Brenner sind auf die jeweils getesteten Brennerkonfigurationen zurückzuführen, wobei deren Einfluss auf die NO-Konzentrationen im Rauchgas in den vorhergehenden Abschnitten bereits diskutiert wurde. Beim NO-Verlauf des „Friendly Coal“-Brenners können Überschneidungen der NO-Konzentrationen bei den unterschiedlichen Sauerstoffinjektionsanteilen erkannt werden, wobei im Mittel die Tendenz, dass die NO-Konzentrationen sinken, wenn der Sauerstoffinjektionsanteil erhöht wird, gut ersichtlich ist. Da bei der Messkampagne mit dem neuen Brenner der Fokus in Bezug auf die Sauerstoffinjektion bereits auf einen 20 % Anteil gerichtet war sowie durch den engen Zeitplan bedingt, sind nur zwei Datenpunkte (10 bzw. 30 % Sauerstoffinjektionsanteil) erfasst worden. Aufgrund dessen kann daher kaum eine Aussage über den optimalen Sauerstoffinjektionsanteil getroffen werden, wobei eine ähnliche Tendenz wie beim „Friendly Coal“-Brenner vorliegen dürfte. Bei beiden Versuchsergebnissen konnte jedoch beobachtet werden, dass Kombinationen aus starkem

Drall und moderater Stauplatten beziehungsweise Injektorposition oder umgekehrt zu geringeren NO-Emissionen, im Vergleich zu anderen Betriebseinstellungen, geführt haben. Dadurch kann die Annahme, dass eine durch Stufung der einzelnen Volumenströme hervorgerufene Reduktionszone zu einer weiteren Verringerung der NO-Emissionen führt, untermauert werden.

Auf Basis dieser Messergebnisse wurde für die weiteren Untersuchungen Konfiguration 13 (AP=40 mm, IP=20 mm bei 20 % Sauerstoffinjektionsanteil) gewählt. In Tabelle 3-5 sind die Betriebsbedingungen für die weiteren Messungen angegeben. Zusätzlich sind die Standardabweichungen bezogen auf die Mittelwerte des gesamten Versuchszeitraums und die Standardabweichungen bezogen auf die Mittelwerte der Messzeiträume angeführt. Anhand der Daten ist zu erkennen, dass trotz der hohen Peaks des Kohlenstaubmassenstroms zumindest die Betriebsparameter in Anbetracht der Größe der Versuchsanlage innerhalb eines akzeptablen Bereichs für den gesamten Versuchszeitraum gehalten werden konnten. Diese Aussage ist insofern von besonderer Bedeutung, da diese Parameter zur Definition der Randbedingungen für die numerische Simulation notwendig sind. In Abschnitt 3.4 wird genauer auf die Datenauswertung eingegangen.

Tabelle 3-5: Betriebsbedingungen für die Messungen innerhalb der Brennkammer im Oxyfuel-Betrieb

		Abweichung für den gesamten Versuchszeitraum	Mittlere Abweichung der punktuellen Messungen
		%	%
Kohlenstaubmassenstrom	360 kg·h ⁻¹	-	-
Primärmassestrom	538 kg·h ⁻¹	± 2,7	± 2,9
Primärtemperatur	36,5 °C	± 2,9	± 2,8
Sekundärmassestrom	1157 kg·h ⁻¹	± 5,3	± 5,0
Sekundärtemperatur	90 °C	± 2,1	± 2,0
Rezirkulationsrate	63 %	-	-
Sauerstoffmassestrom	670 kg·h ⁻¹	± 4,7	± 2,7
Sauerstofftemperatur	24,5 °C	± 5,5	± 4,6
Anteil der Sauerstoffinjektion	20 %	-	-
Kondensatortemperatur	37,7 °C	± 2,6	± 2,1

Die vollständige Durchführung der Messungen wurde auf drei Versuchstage aufgeteilt, da durch die wiederkehrenden Kohlenstaubmassenstromschwankungen die Messungen häufig

unterbrochen wurden und abgewartet werden musste, bis wieder konstante Bedingungen erreicht waren. Die auf diese Art erhaltenen Messergebnisse sind in Anhang E angeführt.

Bei den Messergebnissen ist jedoch zu beachten, dass durch die Kohlenstaubmassenschwankungen die punktuellen Gaskonzentrationsmessungen wesentlich stärker beeinflusst wurden als die Temperaturmessungen in der Flamme. Dies kann dadurch begründet werden, dass durch die durchwegs konstanten Eintritts- und Brennkammerwandtemperaturen während der Temperaturmessung keine großen Schwankungen auch während eines Kohlenstaubmassenstrompeaks beobachtet werden konnten, wohingegen ein deutlicher Einfluss auf die Gaszusammensetzung für einen längeren Zeitraum (ca. 5 Minuten) beobachtet werden konnte. Ebenso erscheinen aufgrund des Messprinzips genauere Messungen mit dem Absaugsonden-Pyrometer möglich.

In Abbildung 3-21 sind die Messergebnisse in Bezug auf den Gesamtwärmestrom und den Strahlungswärmestromverlauf in axialer Richtung dargestellt.

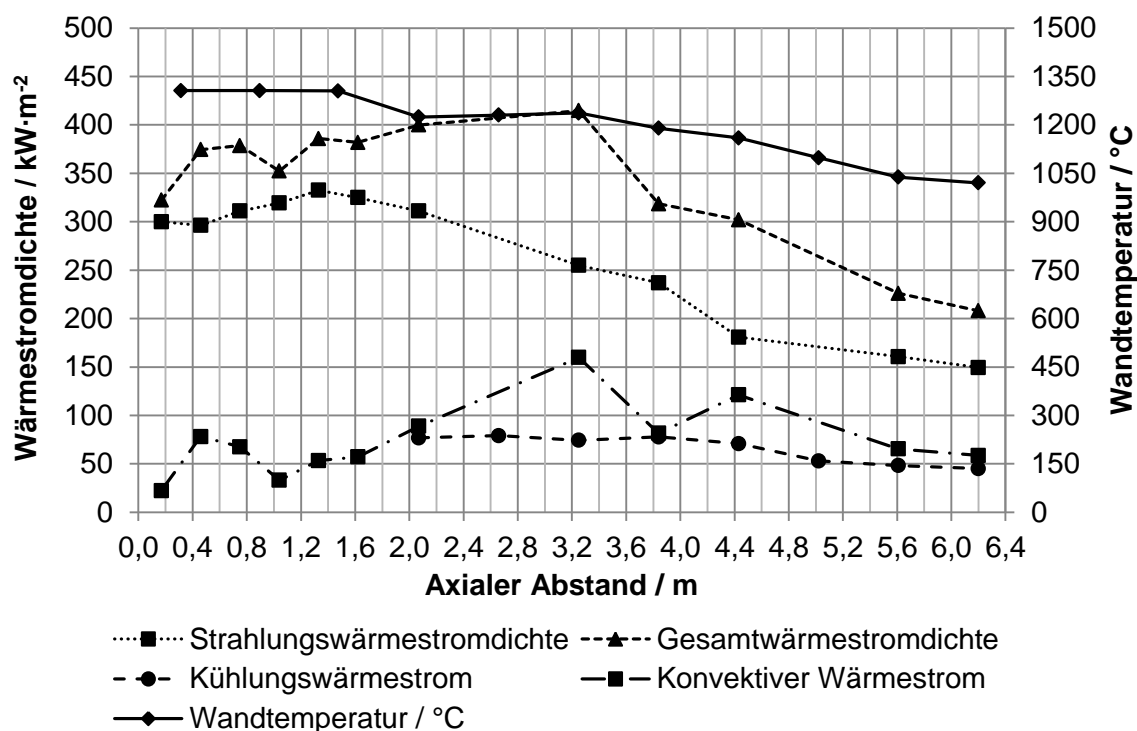


Abbildung 3-21: Gemessene Wärmestromdichten und Brennkammerwandtemperaturen entlang der Brennkammer

Es ist zu erkennen, dass im Brennermündungsbereich der Strahlungswärmestrom den Gesamtwärmestrom deutlich dominiert und 1,3 m von der Brennermündung entfernt ein Maximum erreicht. Danach sinkt der Strahlungswärmestrom, wobei er bei einer axialen Distanz von 2 m deutlich abnimmt. Der Bereich bis ca. 2 m Abstand von der Brennermündung deutet auf die sichtbare Flammenlänge (luminous) hin. Während der

Strahlungswärmestrom ab diesem Bereich bis zum Brennkammerende kontinuierlich abnimmt, steigt hingegen der Gesamtwärmestrom bis zu einer Distanz von 3,2 m durch eine kontinuierliche Steigerung des konvektiven Wärmestroms an. Dies kann als Indiz gewertet werden, dass in diesem Gebiet die Flamme bereits weit geöffnet ist und somit die Strömungsgeschwindigkeiten in Wandnähe im Vergleich zu den umgrenzenden Flächen deutlich höher sind. Bei Betrachtung des Temperaturverlaufs ist gut ersichtlich, dass bis zu einem Abstand von ca. 1,5 m eine annähernd konstante Wandtemperatur herrscht. Dies ist auf die ungekühlten ersten drei Segmente der Brennkammer zurückzuführen. Der weitere Wandtemperaturverlauf in axialer Richtung korreliert mit dem Verlauf der Gesamtwärmestromdichte.

Auf Basis der gemessenen Ein- und Austrittstemperaturen und der gemessenen Massenströme der einzelnen Kühlsegmente wurden die übertragenen Wärmemengen berechnet und auf die Fläche der einzelnen Kühlkreise bezogen. Die somit erhaltenen Wärmestromdichten entlang der Brennkammer zeigen einen sehr ähnlichen Verlauf im Vergleich zum Wandtemperaturverlauf und dem Verlauf der Gesamtwärmestromdichte.

In Abbildung 3-22 sind die Wandtemperaturverläufe und die durch die Kühlkreisläufe entzogenen Wärmestromdichten für den Betrieb mit Luft- und den Oxyfuel-Betrieb dargestellt, wobei die Messdaten am selben Versuchstag und bei der gleichen Brennkammeraustrittstemperatur (920°C) herangezogen wurden, um den Einfluss der Ascheanpackungen an der Brennkammerwand so gering wie möglich zu halten.

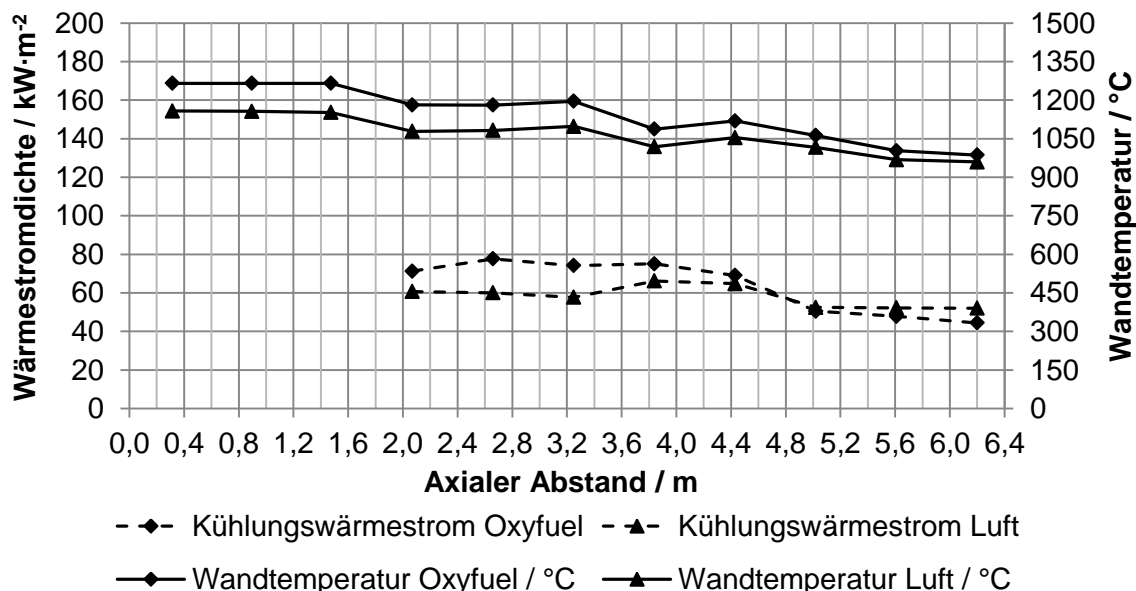


Abbildung 3-22: Vergleich der Wandtemperaturverläufe und der Wärmestromdichten der Kühlkreisläufe für den Betrieb mit Luft- und Oxyfuel-Betrieb bei gleicher thermischer Leistung (2,5 MW_{th})

Es ist zu erkennen, dass sowohl der Wandtemperaturverlauf als auch die berechneten Wärmestromdichten entlang der Brennkammerwand bei Betrieb mit Luft bei gleicher Feuerungsleistung geringer ausfallen als jene bei Oxyfuel-Betrieb. Lediglich am Ende der Brennkammer wird beim Betrieb mit Luft eine höhere Wärmestromdichte über die Kühlkreisläufe erreicht, wodurch ebenfalls die Temperaturdifferenz der Wandtemperaturen zwischen dem Luft- und Oxyfuel-Fall geringer wird. Wie bereits in Abschnitt 2 angedeutet, ist bei einer Rezirkulationsrate von 63 % notwendig eine höhere Wärmestromdichte innerhalb der Brennkammer zu realisieren, um ähnliche Rauchgasaustrittstemperaturen wie bei einem konventionellen Betrieb mit Luft zu erhalten. Dieser Umstand ist in Abbildung 3-22 gut ersichtlich, da die entzogene Wärmeleistung im Oxyfuel-Betrieb deutlich über jener im Luft-Betrieb liegt, wobei die Austrittstemperatur gleich ist.

In Abbildung 3-23 sind die gemessenen Temperaturprofile für den Luft- und Oxyfuel-Betrieb in einem Abstand von 0,17 m von der Brennermündung dargestellt.

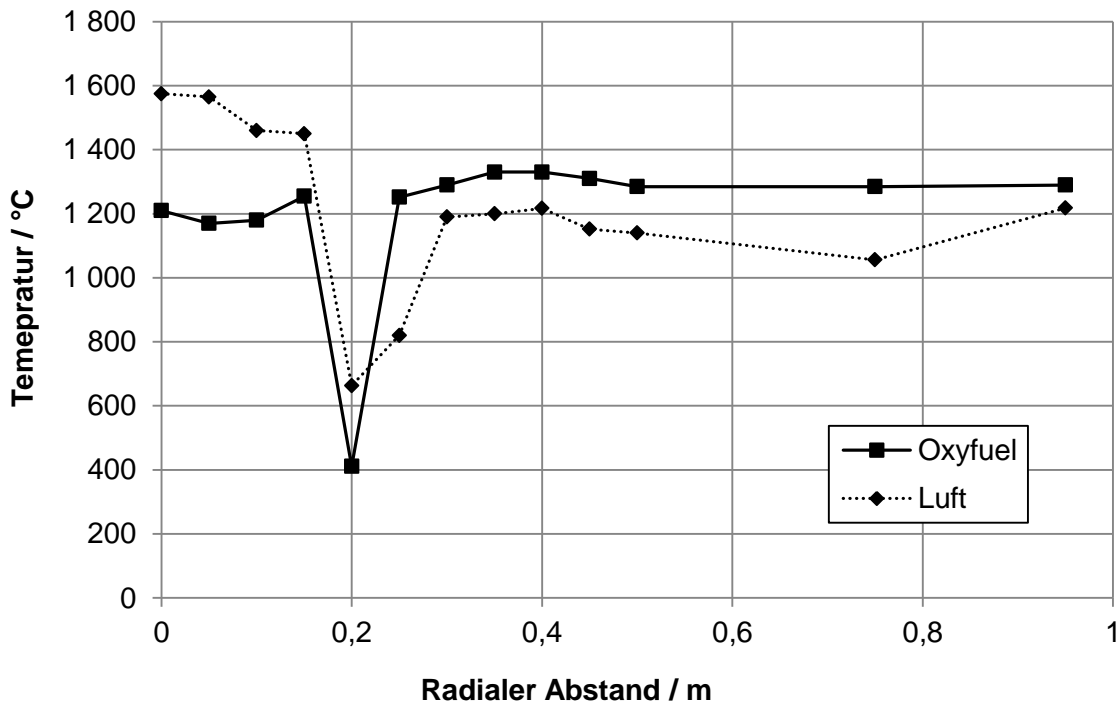


Abbildung 3-23: Vergleich der Temperaturprofile (Oxyfuel und Luft) in einem axialen Abstand von 0,17 m von der Brennermündung

Es ist zu erkennen, dass im Flammenzentrum bei Luft-Betrieb die Temperaturen deutlich höher liegen als bei Oxyfuel-Betrieb. In beiden Fällen ist der Einfluss des Sekundärstroms in Form eines starken Temperaturabfalls im Bereich von 0,2 m in radialer Richtung von der Brennerachse zu erkennen. Außerhalb des Sekundärstrahldurchbruchs liegt jedoch die Brennkammer-temperatur im Oxyfuel-Betrieb höher als im Luft-Betrieb, wobei die Peak-Temperatur im Flammenkern wiederum beim Luft-Betrieb höher ist.

Leider konnten aufgrund des engen Zeitplans keine weiteren Temperaturprofile im Luftbetrieb gemessen werden, wodurch eine genauere Analyse nicht möglich ist. Auf Basis der hier gezeigten Daten kann jedoch geschlossen werden, dass durch die höheren Temperaturen in der Brennkammer im Oxyfuel-Betrieb die Wärmeübertragung durch Strahlung im Bereich der Flamme im Vergleich zum Luft-Betrieb deutlich höher liegt. Ebenso können die theoretischen Überlegungen aus Abschnitt 2.1 anhand der Messungen bestätigt werden. Durch die deutlich höhere Kerntemperatur im Luft-Betrieb können ebenfalls die höheren NO-Emissionen im Luftbetrieb erklärt werden.

Basierend auf den in diesem Abschnitt beschriebenen Messdaten werden im folgenden Kapitel die Randbedingungen für die numerische Simulation abgeleitet.

3.4 Ableitung der Randbedingungen für die CFD-Simulation

Die Versuchsanlage Fo.Sper wurde ursprünglich für Brenntests im konventionellen Betrieb mit Luft gebaut. Im Rahmen des RFCS-Projektes „Friendly Coal“ wurde die Versuchsanlage der Fa. ENEL erweitert, um einen Oxyfuel-Betrieb zu ermöglichen (siehe Abschnitt 3.1, Seite 18). Während der Umbauphase wurde bereits darauf geachtet, dass die neu installierten Rauchgasleitungen möglichst dicht ausgeführt wurden, um die Luftinfiltration in die Versuchsanlage so gering wie möglich zu halten. Ebenso wurden die bereits bestehenden Rauchgasgebläse und die bestehenden Leitungen so weit wie möglich einer Revision unterzogen. Dennoch war es nicht möglich, die Luftinfiltration vollständig zu verhindern. Dies lag einerseits daran, dass zur Kühlung einzelner Messgeräte zur Flammenüberwachung weiterhin Druckluft verwendet wurde und andererseits einzelne Rohrabschnitte aufgrund ihrer schweren Zugänglichkeit nicht vollständig abgedichtet werden konnten.

Auf Basis der Betriebserfahrungen, die im Rahmen des Projektes „Friendly Coal“ gemacht wurden, war es jedoch möglich, die Betriebsbedingungen derart anzupassen, dass die Bereiche, in denen Unterdruck gegenüber dem Atmosphärendruck herrscht, zu reduzieren.

In Abbildung 3-24 sind Differenzdrücke gegenüber dem Atmosphärendruck für einzelne Anlagenkomponenten während der Versuche mit dem „Friendly Coal“-Brenner und dem „AE&E“-Brenner dargestellt. Im Bereich der Rauchgasrezirkulation, des Kondensators und der Aufteilung der einzelnen Massenströme konnte die Versuchsanlage durch das Rezirkulationsgebläse unter Überdruck gehalten werden, wodurch ein Ansaugen von Luft aus der Umgebung unterbunden wird. Bei den Versuchen mit dem „Friendly Coal“-Brenner wurde aufgrund der geringen Erfahrung im Oxyfuel-Betrieb die Brennkammer unter geringem Unterdruck gehalten, um zu verhindern, dass heiße Rauchgase in die unmittelbare Umgebung des Betriebs- und Messpersonals austreten. Dies wurde unter anderem auch

deswegen durchgeführt, da in den ersten drei Segmenten der Brennkammer hydraulische Klappen eingebaut sind, die für die genaue Vermessung des Brennerbereichs im Betrieb mit Luft vorgesehen waren, im Oxyfuel-Betrieb jedoch nicht dicht verschlossen werden konnten beziehungsweise während des Betriebs undicht wurden. Durch die Anordnung des Saugzuggebläses nach dem Ljungström-Wärmetauscher, der während der Versuche nicht durchströmt wurde, kam es in weiterer Folge zu einem starken Unterdruck nach der Brennkammer beziehungsweise vor dem konvektiven Wärmetauscher.

Vor den Versuchen mit dem „AE&E“-Brenner wurden das Saugzuggebläse und die Messöffnungen der ersten drei Brennkammersegmente nochmals abgedichtet. Des Weiteren wurden das Saugzug- und das Rauchgaszirkulationsgebläse während des Betriebes durch das Betriebspersonal aufeinander abgestimmt, um möglichst überall Überdruck gegenüber dem Atmosphärendruck zu erreichen.

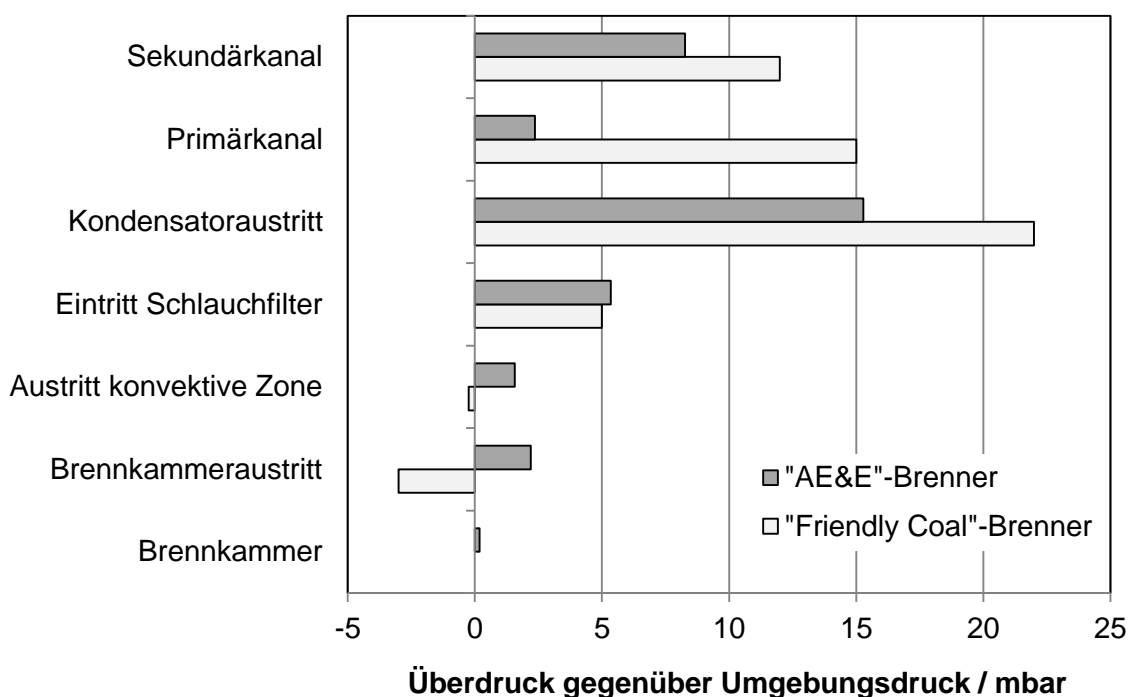


Abbildung 3-24: Überdrücke gegenüber Umgebungsdruck an unterschiedlichen Anlagenkomponenten während des Betriebs mit dem „Friendly Coal“-Brenner (vgl. Rossi et al. 2009b) und dem „AE&E“-Brenner

Lediglich im Bereich des Saugzuggebläses konnte ein geringer Unterdruck festgestellt werden. Somit konnte der Bereich der potentiellen Luftinfiltration eingeschränkt werden.

Um die Luftinfiltration quantifizieren zu können, wurden Berechnungen mit dem thermodynamischen Kreisprozesssimulationsprogramm IPSEpro durchgeführt. Als Randbedingungen wurden die in Tabelle 3-5 angeführten Betriebsparameter verwendet.

Während der Versuche wurden die Konzentrationen von CO₂ und O₂ auf trockener Basis am Brennkammeraustritt und vor der Sauerstoffbeimischung in den Sekundärstrom gemessen. Des Weiteren wurden die O₂-Konzentrationen sowohl beim Kondensatoraustritt als auch nach der Sauerstoffbeimischung in den Sekundärstrom gemessen. Die gemittelten Messwerte sind in Tabelle 3-6 dargestellt.

Tabelle 3-6: Zeitlich gemittelte Konzentrationen von CO₂ und O₂ bei unterschiedlichen Messstellen während der Messungen innerhalb der Flamme

Messstellenbeschreibung	Messwert	Einheit
CO ₂ nach Brennkammer (GA 2)	78,45	Vol.% trocken
O ₂ nach Brennkammer (GA 2)	2,21	Vol.% trocken
CO ₂ Sekundärstrom nach Vorwärmer	71,37	Vol.% trocken
O ₂ Sekundärstrom nach Vorwärmer	3,06	Vol.% trocken
O ₂ Sekundärstrom nach Injektion	38,95	Vol.% feucht
O ₂ nach Kondensator	2,10	Vol.% feucht

Zur Berechnung der Luftinfiltration wurden lediglich die Messwerte auf trockener Basis herangezogen, da die O₂-Konzentrationsmessungen zusätzlich von der Rauchgasfeuchte abhängig sind und diese zu diesem Zeitpunkt noch nicht bekannt. Als Berechnungsgrundlage wurde die Minimierung der Fehlerquadrate herangezogen. Dabei werden die Differenzen zwischen den Messergebnissen und den Berechnungsergebnissen auf den jeweiligen Messwert bezogen und quadriert. Die Quadratwurzel aus der Summe der Fehlerquadrate ergibt in weiterer Folge den durchschnittlichen prozentuellen Fehler (3-9).

$$\sigma_{\min} = 100 \cdot \sqrt{\sum_{i=1}^N \left(\frac{v_{i,gem} - v_{i,ber}}{v_{i,gem}} \right)^2} \quad \% \quad (3-9)$$

Die Berechnung des durchschnittlichen prozentuellen Fehlers wurde in IPSEpro anhand einer „Free Equation“ implementiert. In Abbildung 3-25 ist zum besseren Verständnis des Berechnungsmodells ein Modellschaltbild der Versuchsanlage zur Berechnung der Luftinfiltration und der Rauchgasfeuchte des rezirkulierten Rauchgases dargestellt.

Aufgrund der Analyse der Differenzdrücke gegenüber dem Atmosphärendruck wurde angenommen, dass lediglich im Bereich zwischen Brennkammeraustritt und Saugzuggebläse Luftinfiltration stattfindet, wobei unerheblich ist, wo genau diese stattfindet, da es sich hierbei nur um eine Rauchgaslinie handelt. Der Luftinfiltrationsmassenstrom 2 wurde mit 0 angenommen, da vor dem Rezirkulationsgebläse während der Versuche kein

Unterdruck festgestellt werden konnte. Der Parameter Luftinfiltration 1 wurde in weiterer Folge so lange variiert (PSExcel), bis ein Minimum bei der Summe der Fehlerquadrate erreicht wurde. Der gesamte prozentuelle Fehler für die vier verwendeten Messwerte liegt bei 4,9 %. Das größte Fehlerquadrat (Abbildung 3-25) tritt bei dieser Berechnung beim CO₂-Messwert im Sekundärstrom auf.

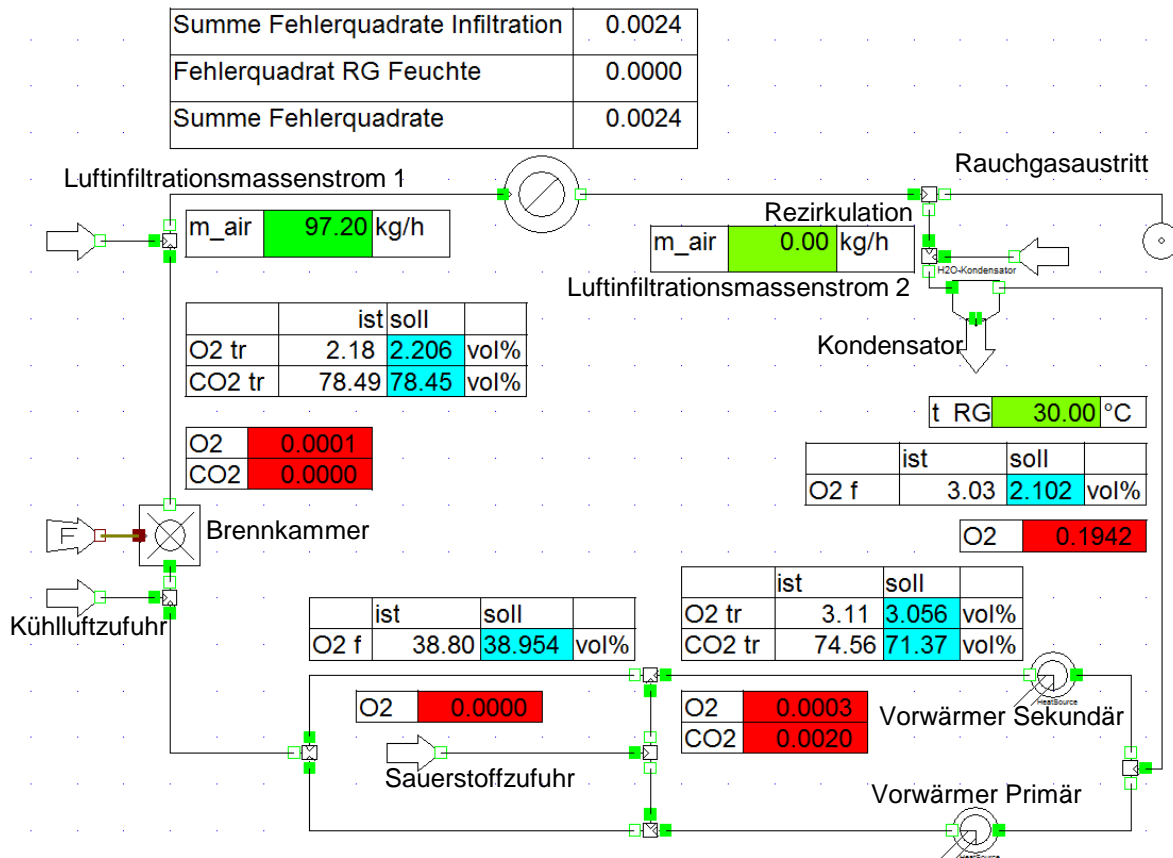


Abbildung 3-25: IPSEpro-Modellschaltbild der Versuchsanlage zur Berechnung des Luftinfiltrationsmassenstroms und der Rauchgasfeuchte des rezirkulierten Rauchgases (Rotes Feld=Fehlerquadrat, türkises Feld=gemessene Sollwerte; weißes Feld=berechnete Werte, grünes Feld=variable Werte)

Die Analyse der Messdaten im Betrieb mit Luft zeigt jedoch, dass zumindest der Nullpunkt der CO₂-Messung korrekt eingestellt war. Zu Beginn der Versuchskampagne wurden zwar die Gasanalysegeräte kalibriert, inwiefern diese einer Drift unterzogen waren, konnte jedoch nicht festgestellt werden. Unter Berücksichtigung der bisherigen Annahmen, Mittelwertbildung über die Messzeitperioden und Gaskonzentrationen im Rauchgas erscheint dieses Ergebnis dennoch ausreichend zu sein, um daraus die Randbedingungen für die numerische Simulation ableiten zu können.

Neben der Abschätzung der Luftinfiltration ist die Berechnung der tatsächlichen Rauchgasfeuchte von besonderer Bedeutung, da diese maßgeblich die H_2O -Konzentration und somit die Strahlungssituation innerhalb der Brennkammer beeinflusst. Zu Beginn der Versuche wurde daher ein Feuchtesensor im Bereich des Ljungström-Wärmetauschers installiert, da dies die einzig zugängliche Stelle im Bereich der Rauchgasrezirkulation darstellte. Aufgrund der hohen Luftinfiltration durch den Betrieb mit dem Ljungström-Wärmetauscher wurde dieser gebypassed, wodurch keine Messungen mit dem Feuchtesensor mehr möglich waren. Um dennoch die Rauchgasfeuchte berechnen zu können, liegt es nahe, die O_2 -Messergebnisse auf feuchter Basis nach dem Kondensator und vor der Sauerstoffbeimischung in den Sekundärstrom heranzuziehen. Werden jedoch beide Messwerte zur Berechnung herangezogen, ist es nicht möglich, vernünftige und plausible Berechnungsergebnisse zu erhalten. Dies kann dadurch begründet werden, dass das Rauchgas zwischen dem Kondensator und den Vorwärmern weiter abkühlt und somit zusätzlich Wasserdampf aus dem Rauchgas auskondensiert. Dies kann durch die Rauchgastemperaturmessungen nach dem Kondensator beziehungsweise an den folgenden Messstellen untermauert werden. Nach dem Kondensator beträgt die Rauchgastemperatur ca. 35°C . Bei den Messpunkten vor den jeweiligen Vorwärmern beträgt die Rauchgastemperatur nur noch 30°C . Wird als Kondensationstemperatur 30°C angenommen, ergibt sich somit ein prozentueller Fehler für den Messwert nach der Sauerstoffbeimischung von 0 %, wobei der relative Fehler zwischen Messwert und Berechnungswert bei 0,4 % liegt. Auf den ersten Blick erscheint das Ergebnis plausibel, es ist jedoch darauf zu achten, dass das Messgerät mit einer Messunsicherheit behaftet ist und somit die Rauchgasfeuchte deutlich vom berechneten Wert abweichen kann. Werden jedoch die gemessenen Temperaturen vor den Vorwärmern zusätzlich herangezogen, ist es zumindest möglich, den Rauchgasfeuchtebereich einzugrenzen. Mit der Annahme, dass die Rauchgaszusammensetzung in der Brennkammer vornehmlich der Produktgaszusammensetzung entspricht, kann durch Variation der Rauchgastemperatur vor den Vorwärmern deren Einfluss auf die Produktgaszusammensetzung überprüft werden. In Abbildung 3-26 ist die relative Abweichung der H_2O - und CO_2 -Konzentrationen im Rauchgas am Brennkammeraustritt in Abhängigkeit von der Rauchgastemperatur nach dem Kondensator dargestellt.

Während erwartungsgemäß die relative Abweichung der CO_2 -Konzentration im Rauchgas nur geringfügig variiert, liegt die Abweichung in Bezug auf die H_2O -Konzentration bei etwa $\pm 5\%$. Da in Hinblick auf die Strahlungssimulation die Änderung der Summe der Partialdrücke von CO_2 und H_2O vernachlässigbar und das Partialdruckverhältnis von H_2O zu CO_2 annähernd konstant ist, erscheinen die in diesem Abschnitt berechneten Parameter als hinreichend genau für die numerische Simulation.

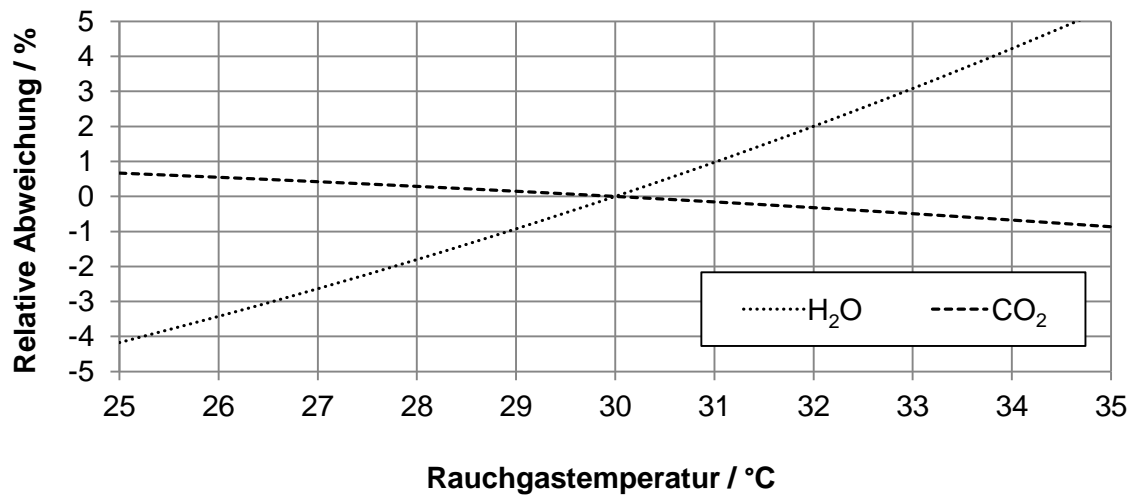


Abbildung 3-26: Einfluss der Rauchgastemperatur nach dem Kondensator auf die H₂O- und CO₂-Konzentrationen am Austritt der Brennkammer (Bezugstemperatur: 30°C)

In Anhang F sind die berechneten Rauchgaszusammensetzungen des Primär- und Sekundärstroms und weitere Randbedingungen für die numerische Simulation angeführt.

4 Strahlungswärmeaustausch

Bei Verbrennungsprozessen wird aufgrund der hohen Temperaturen innerhalb des Feuerraums die Wärmeübertragung vom Rauchgas und der Flamme auf die Brennkammerwände durch Strahlung dominiert (Gupta et al. 2006, Coppalle, Vervisch 1983). Dies ist auch durch folgende Überlegung leicht ersichtlich:

Die Wärmeleitung kann anhand des Fourier'schen Gesetzes beschrieben werden

$$\dot{q}_x = -\lambda \frac{\partial T}{\partial x} \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \quad (4-1)$$

wobei q_x den Wärmestrom in x-Richtung beschreibt.

Die konvektive Wärmeübertragung wird durch

$$\dot{q} = \alpha \cdot (T - T_\infty) \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \quad (4-2)$$

beschrieben, wobei T_∞ die Referenztemperatur darstellt. Im Vergleich dazu ist die Wärmübertragung durch Strahlung proportional zur Differenz der Temperaturen zur vierten Potenz:

$$\dot{q} \propto (T^4 - T_\infty^4) \quad (4-3)$$

Unter der Voraussetzung, dass die Koeffizienten sich nicht ändern, wird beim Vergleich der drei Wärmeübertragungsmechanismen ersichtlich, dass bei steigender Temperaturdifferenz die Wärmeübertragung durch Strahlung deutlich stärker zunimmt als jene durch Wärmeleitung und Konvektion.

Die genaue Kenntnis der tatsächlich auftretenden Wärmestromdichten innerhalb eines Kessels in Bezug auf Effizienz und Betriebssicherheit ist von besonderer Bedeutung. Wird die auftretende Wärmestromdichte überschätzt, hat dies zur Folge, dass der Kessel größer dimensioniert wird, um eine ausreichende Sicherheit in Bezug auf eine mögliche Siedekrise und somit Zerstörung der Verdampferheizfläche zu gewährleisten. Dies hat jedoch zur Folge, dass bei tatsächlich geringeren Wärmestromdichten die Auslegungstemperaturen gegebenenfalls nicht erreicht werden können und einzelne Rohre stillgelegt werden müssen. Dadurch wird jedoch mehr Rohrmaterial als nötig verbaut, wodurch die Materialkosten deutlich höher liegen als notwendig wäre. Wird die tatsächlich auftretende Wärmestromdichte unterschätzt, kann dies bei geplanter Nennlast zu hohen Materialtemperaturen und in weiterer Folge zu einem Materialschaden führen. Um dies zu

verhindern, muss der Brennstoffmassenstrom verringert werden, wodurch die Nennleistung des Kessels nicht erreicht wird und ebenso ein finanzieller Schaden entsteht. Während bei konventionellen Feuerungen bereits einige Jahrzehnte an Betriebserfahrungen gesammelt werden konnten und somit auch oft firmeninternes Know-how generiert werden konnte, ist dies bei Oxyfuel-Anlagen nicht der Fall, da sich durch die veränderte Brennkammeratmosphäre die Wärmestromdichte durch Strahlung im Vergleich zur konventionellen Verbrennung deutlich ändert. Daher ist es notwendig, bestehende Berechnungsmodelle auf deren Anwendbarkeit bei Oxyfuel-Bedingungen zu überprüfen.

Die wirksamen Mechanismen, die bei der Strahlungswärmeübertragung auftreten, sind stark vom zu betrachtenden System abhängig. In Brennkammern tritt einerseits Festkörperstrahlung an den umschließenden Wärmetauscherflächen auf, andererseits handelt es sich bei dem in der Brennkammer befindlichen Rauchgas, in dem zusätzlich Partikel, wie zum Beispiel Ruß, Kohlenstaub und Asche, vorhanden sein können, um ein absorbierendes, emittierendes und streuendes Medium, das die Strahlung beeinflusst. Bei der numerischen Berechnung werden die umhüllenden Flächen meist als diffus-graue Oberflächen angenommen. Diese Annahme vereinfacht die Berechnung des Strahlungswärmeaustausches deutlich, da sowohl Emission als auch Reflexion definitionsgemäß winkel- und wellenlängenunabhängig sind und somit der Emissionsgrad nur noch eine Funktion der Oberflächentemperatur ist. Diese Annahme darf unter der Voraussetzung getroffen werden, dass die umhüllende Oberflächentemperatur als gleichförmig angenommen werden kann, was bei einem Dampferzeuger aufgrund der isothermen Phasenänderung des Wassers durchwegs vertretbar erscheint. Der zur Berechnung notwendige Emissionsgrad kann aus der Literatur entnommen werden (Effenberger 2000). Diese Annahme soll jedoch nicht darüber hinwegtäuschen, dass diese Einschränkung nur für die wenigsten Materialien zutrifft.

Im folgenden Abschnitt werden die grundlegenden Mechanismen der Strahlung in Brennkammern erläutert. Es werden einige Modelle zur Berechnung der Strahlungseigenschaften von Gasen vorgestellt und untereinander bei unterschiedlichen Randbedingungen verglichen. Auf Basis der somit erhaltenen Daten wurde eine Berechnungsroutine für ein spezifisch den jeweiligen Anforderungen angepasstes Berechnungsmodell entwickelt, das aufgrund seiner Einfachheit effizient bei numerischen Simulationen verwendet werden kann.

In Abschnitt 4.2 wird auf die Strahlungsinteraktion für bei Kohlenstaubfeuerungen typische Partikel eingegangen und werden mögliche Berechnungsmethoden zur Abschätzung der für die numerische Simulation notwendigen Parameter vorgestellt.

Abschließend wird ein möglicher Berechnungsansatz zur Abschätzung der Berechnungsparameter von Gas-Feststoff-Suspensionen erläutert, durch den ebenfalls spektrale Betrachtungen des Emissionsgrades möglich sind.

4.1 Strahlungseigenschaften der Gasphase ohne Partikel

Während die Annahme eines grauen Strahlers bei den umhüllenden Flächen hinreichend genau ist, führt dieser Ansatz im Falle der Gasphase zu erheblichen Fehlern. Dies soll in Abbildung 4-1 veranschaulicht werden. Im Diagramm sind einerseits die spektrale Strahlendichte eines idealen schwarzen Körpers und andererseits einer diffus-grauen Oberfläche mit einem Emissionsgrad von 0,8 bei einer Temperatur von 1300 K dargestellt.

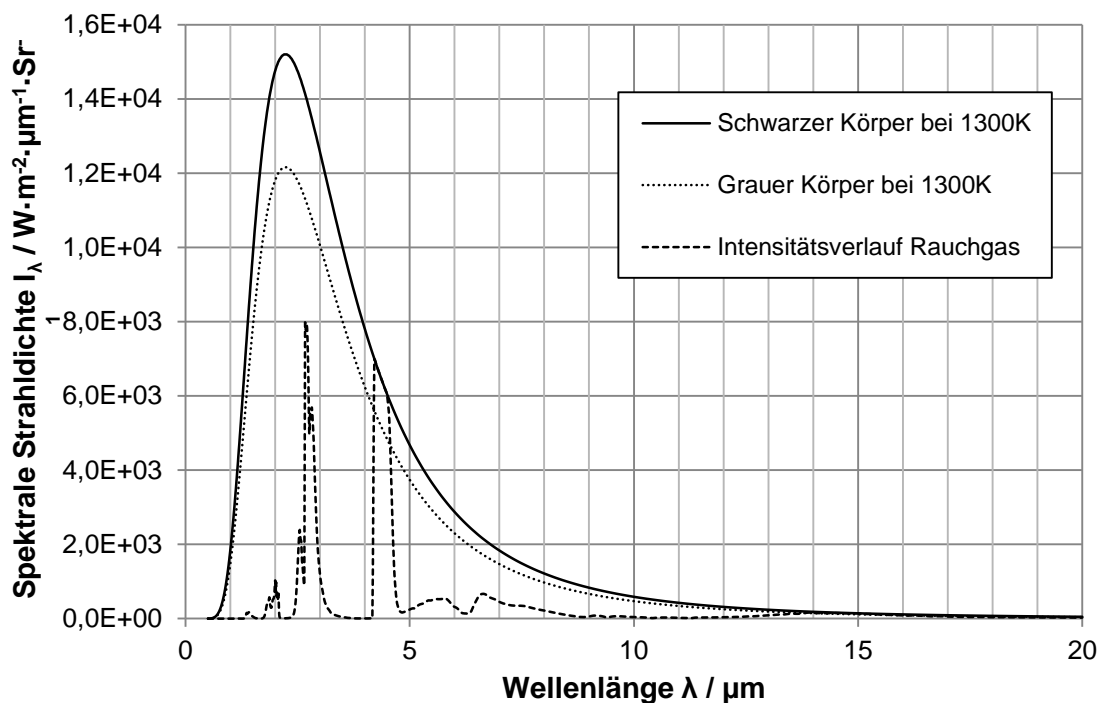


Abbildung 4-1: Spektrale Strahlendichte eines schwarzen Körpers bei 1300 K, eines grauen Strahlers mit einem Emissionsgrad von 0,8 bei 1300 K und eines Rauchgases ($p_{\text{H}_2\text{O}}=0,0749$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,1521$ bar, $p_{\text{O}_2}=0,0263$ bar, $p_{\text{N}_2}=0,7468$ bar) bei einer geometrischen Weglänge von 6 m und 1300 K, jeweils mit RADCAL berechnet

Es ist ersichtlich, dass durch die Annahme eines grauen Strahlers die spektrale Strahlendichte I_λ im Vergleich zum idealen schwarzen Körper proportional zum Emissionsgrad geringer ist. Die spektrale Strahlendichte I_λ ist eine gerichtete spektrale Größe, mit der die Wellenlängen- und Richtungsverteilung der ausgestrahlten Energie detailliert beschrieben wird (Baehr, Stephan 2010).

Für einen schwarzen Strahler kann $I_{\lambda,B}$ durch das Planck'sche Gesetz

$$I_{\lambda,B} = \frac{c_1 \cdot \lambda^{-5}}{e^{\left(\frac{c_2}{T \cdot \lambda}\right)} - 1} \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{Sr}^{-1} \quad (4-4)$$

mit $c_1=5,955 \cdot 10^{-15} \text{ W} \cdot \text{m}^2$ und $c_2=0.01438786 \text{ m} \cdot \text{K}$ berechnet werden (Siegel et al. 1993).

Die strichlinierte Linie in Abbildung 4-1 stellt den spektralen Strahldichteverlauf eines für eine konventionelle Steinkohlefeuerung typischen Rauchgases am Brennkammeraustritt dar (Luftüberschuss 15 %). Es ist zu erkennen, dass die Strahldichte nur bei diskreten Wellenlängen ungleich null ist und sich deutlich vom Strahldichteverlauf eines grauen oder schwarzen Strahlers unterscheidet. Dies kann durch die Eigenschaften eines strahlungsaktiven Gases erklärt werden. Ein Gas kann aus Molekülen, Atomen, Ionen und freien Elektronen bestehen (Siegel et al. 1993), wobei sich diese in unterschiedlichen Energiezuständen befinden. Wird nun ein Photon absorbiert oder emittiert, nimmt die Energie des Partikels um ein Energiequant zu beziehungsweise ab. Auf Basis der Quantentheorie kann ein Partikel nur diskrete Energiezustände einnehmen (z.B. angeregter Zustand). Dieser Zusammenhang kann durch

$$E = \hbar \cdot f \quad \text{J} \quad (4-5)$$

beschrieben werden, wobei \hbar das Planck'sche Wirkungsquantum ($\hbar=6,626 \times 10^{-34} \text{ J} \cdot \text{s}^{-1}$) und f die Frequenz darstellen. Dieser Energieübergang wird in drei unterschiedliche Arten eingeteilt: zwischen zwei gebundenen Zuständen, zwischen gebundenem und ungebundenem Zustand und zwischen zwei ungebundenen Zuständen (Modest 2003). Da Energieübergänge zwischen gebundenem und ungebundenem Zustand oder zwischen zwei ungebundenen Zuständen erst bei sehr hohen Temperaturen, bei denen es zu sehr starken Ionisationseffekten kommt, an Wichtigkeit gewinnen, werden diese Effekte bei technischen Anwendungen vernachlässigt, womit dem Energieübergang zwischen zwei gebundenen Energiezuständen eine besondere Bedeutung zukommt. Hierbei handelt es sich um elektronisch angeregte Zustände. Dies gilt sowohl für Atome und Moleküle und Rotations- und/oder Schwingungszustände, die nur bei Molekülen vorkommen. Da die Änderung der Energiezustände nur zwischen bestimmten Energielevels möglich ist, können diese einer bestimmten Frequenz zugeordnet werden, woraus spektrale Absorptions- beziehungsweise Emissionslinien bei den zugehörigen Wellenlängen resultieren. Die spektralen Linien sind jedoch nur theoretischer Natur, da es durch unterschiedliche Effekte zu einer Linienverbreiterung kommt. Bei technischen Anwendungen liefert die Stoß-Verbreiterung den größten Anteil. Durch die hohe Dichte der Moleküle steigt die Häufigkeit der Zusammenstöße

von Molekülen beziehungsweise Atomen, wodurch die Energieniveaus der kollidierenden Atome oder Moleküle beeinflusst werden (Siegel et al. 1993). Zusätzlich kann es zur Streuung eines Photons an einem Partikel kommen, wobei dies bei Gasmolekülen, die ebenfalls als sehr kleine Partikel angesehen werden können, im Gegensatz zu Festkörperpartikeln bei technischen Anwendungen vernachlässigt wird (Modest 2003).

Wie zuvor beschrieben, resultieren die spektralen Linien aus der Änderung der Rotations- und Vibrationsschwingungsmodi beziehungsweise durch elektronisch angeregte Zustände. Bei der Änderung des elektronisch angeregten Zustands wird im Vergleich zu den Rotations- und Vibrationsschwingungsmodi relativ viel Energie benötigt, wodurch die Absorptions- und Emissionslinien im ultravioletten beziehungsweise sichtbaren Bereich des Spektrums liegen. Im Vergleich dazu liegen die Vibrationsschwingungsmodi der Moleküle im mittleren Infrarotbereich (1 bis 15 μm), wobei die notwendige Energie für eine Änderung geringer ist. Rotationsenergieänderungen finden im mittleren bis fernen Infrarot statt ($>10 \mu\text{m}$). Aufgrund der Überlappung der Rotations- und Vibrationsschwingungsmodi kommt es in diesem Bereich zur Überlappung einzelner spektraler Linien, die als Schwingungs-Rotationsbanden bezeichnet werden. Bei technischen Anwendungen, und im Speziellen bei verbrennungstechnischen Betrachtungen, liegt das Strahlungsdichtemaximum im nahen bis mittleren Infrarotbereich (siehe Abbildung 4-1). Somit sind die Rotations- und Vibrationsschwingungsänderungen von besonderem Interesse. Die Anzahl der möglichen Rotations- und Vibrationsschwingungsmodi hängt von der Art des Moleküls und dessen Anzahl der Freiheitsgrade (Anzahl der Freiheitsgrade = $3 \times$ Anzahl der Atome - 3) ab. Bei zweiatomigen Molekülen beträgt die Anzahl der Freiheitsgrade drei, wobei zwei Rotationsmodi und ein Vibrationsschwingungsmodus vorliegen. Bei dreiatomigen Molekülen kann zwischen linearen (CO_2) und nichtlinearen (H_2O) Molekülen unterschieden werden, wobei bei linearen dreiatomigen Molekülen ein Vibrationsmodus mehr und ein Rotationsmodus weniger im Vergleich zu einem nichtlinearen dreiatomigen Molekül vorliegt. Aufgrund der unterschiedlichen Strukturen der Moleküle wird ersichtlich, dass diese zum Teil unterschiedliche Absorptions- beziehungsweise Emissionsbanden aufweisen. Bei der Strahlungsberechnung von Brennkammern sind sicherlich H_2O und CO_2 die wichtigsten zu berücksichtigenden Komponenten, wobei SO_2 , CO und NO_x durchaus die Strahlungseigenschaften des Gases beeinflussen können. In Tabelle 4-1 sind die wichtigsten Absorptions- beziehungsweise Emissionsbanden von CO_2 und H_2O dargestellt (Gupta et al. 2006).

Tabelle 4-1: Haupt- und Nebenbanden der Moleküle CO₂ und H₂O

Molekül	Hauptbanden / μm	Nebenbanden / μm
H ₂ O	2,7; 6,3; 20	1,1; 1,38; 1,4; 1,9
CO ₂	2,7; 4,3; 15	1,4; 1,6; 2,0; 4,8; 5,2; 9,4; 10,4

Geht ein Strahl durch ein strahlungsaktives Gasgemisch (z.B. CO₂ und H₂O) so verringert sich die Energie durch Absorption und Streuung. Zunächst soll nur die Absorption betrachtet werden. Die Änderung der spektralen Strahldichte beim Durchlaufen der Wegstrecke s kann mit

$$\frac{dI_\lambda}{I_\lambda} = -\kappa_\lambda \cdot ds \quad - \quad (4-6)$$

beschrieben werden. κ_λ ist der spektrale Absorptionskoeffizient, der von der Wellenlänge λ , der Temperatur T dem Druck p und dem Partialdruck des strahlungsaktiven Gases abhängt. Durch Integration von Gleichung (4-6) erhält man für heterogene Gasgemische, bei denen sich κ_λ entlang des Weges ändert, folgenden Ausdruck (Siegel et al. 1993):

$$\ln \frac{I_\lambda(s)}{I_\lambda(s=0)} = -\int_0^s \kappa_\lambda \cdot ds \quad - \quad (4-7)$$

Wird ein homogenes Gasgemisch vorausgesetzt, bei dem sich die Temperatur, Druck und Konzentration des Gasgemisches nicht ändern, dann ist der Absorptionskoeffizient unabhängig von der zurückgelegten Wegstrecke s und es folgt

$$\ln \frac{I_\lambda(s)}{I_\lambda(s=0)} = -\kappa_\lambda \cdot s \quad - \quad (4-8)$$

Diese Gleichung entspricht dem Gesetz von Bouguer. Je nach Strahlrichtung und somit zurückgelegter Weglänge kommt es zu einer unterschiedlichen Schwächung des einfallenden Strahls. Durch Umstellung von Gleichung (4-8) resultiert folgender Ausdruck

$$\tau_\lambda = \frac{I_\lambda(s)}{I_\lambda(s=0)} = e^{-\kappa_\lambda \cdot s} \quad - \quad (4-9)$$

τ wird als Transmissionsgrad bezeichnet und entspricht dem Verhältnis der aus dem System austretenden Strahldichte zur in das System eintretenden Strahldichte.

Der zu einer bestimmten Richtung gehörende gerichtete spektrale Absorptionsgrad α_λ , der durch das Verhältnis der absorbierten Strahldichte zur einfallenden Strahldichte definiert ist, ist in Gleichung (4-10) angegeben

$$\alpha_\lambda = \frac{I_\lambda(s=0) - I_\lambda(s)}{I_\lambda(s=0)} \quad - \quad (4-10)$$

Für ein homogenes Gasgemisch kann durch Kombination der Gleichungen (4-9) und (4-10) der gerichtete spektrale Absorptionsgrad mit

$$\alpha_\lambda = 1 - e^{-\kappa_\lambda \cdot s} \quad - \quad (4-11)$$

angegeben werden. Somit kann für ein strahlungsaktives Gas der Zusammenhang zwischen Absorptions- und Transmissionsgrad durch Kombination der Gleichungen (4-9) und (4-11) mit

$$\tau_\lambda = 1 - \alpha_\lambda \quad - \quad (4-12)$$

angegeben werden.

Neben dem Absorptionsvermögen eines realen Gasgemisches spielt das Emissionsvermögen ebenfalls eine wichtige Rolle. Dem Kirchhoff'schen Gesetz zufolge emittiert ein realer Körper und somit auch ein Gasgemisch in einem definierten Volumen bei gegebener Temperatur in jede Richtung und bei jeder Wellenlänge gleich viel Strahlungsenergie, wie er die Strahlung eines schwarzen Körpers bei derselben Temperatur absorbiert. Somit stimmen der gerichtete spektrale Emissionsgrad und der gerichtete spektrale Absorptionsgrad überein und es folgt

$$\varepsilon_\lambda = 1 - e^{-\kappa_\lambda \cdot s} \quad - \quad (4-13)$$

Somit kann die Strahldichteänderung mit

$$\frac{dI_\lambda}{I_{\lambda,B}} = -\kappa_\lambda \cdot ds \quad - \quad (4-14)$$

angegeben werden, wobei $I_{\lambda,B}$ die spektrale Strahldichte eines schwarzen Körpers mit derselben Temperatur des Gasgemisches ist.

Anhand des Emissionsgrades kann in weiterer Folge die emittierte spektrale Strahldichte eines Gasgemisches durch

$$I_{\lambda,em}(s) = I_{\lambda,B} \cdot \left(1 - e^{-\kappa_{\lambda} \cdot s}\right) \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{Sr}^{-1} \quad (4-15)$$

berechnet werden.

Für einfache technische Berechnungen sind sowohl der gerichtete spektrale Emissionsgrad als auch der gerichtete spektrale Absorptionsgrad nicht geeignet, da diese je nach zurückgelegter Weglänge variieren. Im Falle eines Gaskörpers in Form einer Halbkugel ist jedoch der zurückgelegte Weg (R) zum Kugelmittelpunkt gleich. Aus dieser Überlegung resultiert in weiterer Folge die Definition der gleichwertigen Schichtdicke s_{gl} . Für eine beliebige Geometrie wird eine Halbkugel mit dem Radius $R = s_{gl}$ definiert, bei der die gleiche Bestrahlungsstärke auf dem Flächenelement in deren Mittelpunkt auftritt, wie bei einem bestimmten Flächenelement der Begrenzungsoberfläche eines beliebig geformten Gasvolumens (Baehr, Stephan 2010). Die gleichwertige Schichtdicke kann für unterschiedliche Geometrien Tabellen entnommen (Siegel et al. 1993) oder mit der Näherungsgleichung

$$s_{gl} = 3,6 \cdot \frac{V}{A} \quad \text{m} \quad (4-16)$$

berechnet werden, wobei V das Volumen und A die Umhüllungsfläche des Gaskörpers darstellen. Unter der Voraussetzung, dass ein homogenes Gasgemisch vorliegt, können somit globale Emissionsgrade für eine bestimmte Geometrie berechnet werden.

Da der Emissionsgrad das Verhältnis der tatsächlich emittierten Strahldichte zur Strahldichte eines schwarzen Körpers bei derselben Temperatur ist, ergibt sich für das gesamte Spektrum der globale Emissionsgrad mit

$$\varepsilon = \frac{\int_0^{\infty} I_{\lambda,B}(T) \cdot \left(1 - e^{-\kappa_{\lambda} \cdot s_{gl}}\right) \cdot d\lambda}{\int_0^{\infty} I_{\lambda,B}(T) \cdot d\lambda} = \frac{\int_0^{\infty} I_{\lambda,B}(T) \cdot \varepsilon_{\lambda} \cdot d\lambda}{\int_0^{\infty} I_{\lambda,B}(T) \cdot d\lambda} \quad - \quad (4-17)$$

Bei vereinfachten Berechnungsverfahren (z.B. nach dem VDI-Wärmeatlas Verein Deutscher Ingenieure 2006) wird der globale Emissionsgrad ε zur Berechnung der Strahlungswärmeübertragung herangezogen. Anhand der Daten der Basisarbeiten von

Hottel (Hottel, Sarofim 1967) und Leckner (Leckner 1972) im Bereich der Berechnung des Strahlungswärmeaustauschs in Brennkammern können für Gasgemische aus CO₂ und H₂O bei unterschiedlichen Temperaturen und Partialdrücken globale Emissionsgrade berechnet werden.

Für detailliertere Berechnungen müssen zusätzlich die Effekte der Streuung berücksichtigt werden. Bei Streuung kann einerseits die Strahlung aus der betrachteten Strahlrichtung abgelenkt werden oder Strahlung in die betrachtete Strahlrichtung gestreut werden.

Im ersten Fall kann anhand des Streukoeffizienten $\sigma_{S,\lambda}$ ebenso wie bei der Schwächung durch Absorption die Schwächung der einfallenden Strahlung, unter der Voraussetzung eines homogenen Systems, berechnet werden.

$$\frac{dl_{\lambda}}{l_{\lambda}} = -\sigma_{S,\lambda} \cdot ds \quad - \quad (4-18)$$

Gleichung (4-18) entspricht dem Gesetz von Bouguer für reine Streuung (Baehr, Stephan 2010). Häufig werden der Absorptionskoeffizient κ_{λ} und der Streukoeffizient $\sigma_{S,\lambda}$ zusammengefasst und durch den Extinktionskoeffizienten β_{λ} beschrieben

$$\beta_{\lambda} = \alpha_{\lambda} + \sigma_{S,\lambda} \quad m^{-1} \quad (4-19)$$

Woraus folgende Gleichung angegeben werden kann

$$\frac{dl_{\lambda}}{l_{\lambda}} = -(\kappa_{\lambda} + \sigma_{S,\lambda}) \cdot ds = -\beta_{\lambda} \cdot ds \quad - \quad (4-20)$$

Zur Berechnung der einfallenden Streustrahlung ist zusätzlich die Richtungsverteilung der gestreuten Strahlung notwendig, die anhand einer winkelabhängigen Phasenfunktion ϕ_{λ} beschrieben werden kann, wobei häufig die vektorielle Schreibweise $\phi_{\lambda}(\hat{s}_i, \hat{s})$ verwendet wird. Findet nun Streuung in einem strahlungsaktiven Medium statt, dann wird ebenfalls ein Teil der gestreuten Strahlung aus anderen Strahlrichtungen \hat{s}_i wieder in die betrachtete Strahlrichtung \hat{s} oder in den betrachteten Raumwinkel $d\Omega_i$ gestreut und kann mit folgender Gleichung angegeben werden:

$$\frac{dl_{\lambda}}{ds} = \frac{\sigma_{S,\lambda}}{4 \cdot \pi} \cdot \int_{4\pi} I_{\lambda}(\hat{s}_i) \cdot \phi_{\lambda}(\hat{s}_i, \hat{s}) \cdot d\Omega_i \quad W \cdot m^{-4} \cdot Sr^{-1} \quad (4-21)$$

Werden die einzelnen Effekte aus den Gleichungen (4-6), (4-14), (4-18) und (4-21) umgeformt und zusammengefasst, resultiert die Strahlungstransfergleichung (RTE: Radiative Transfer Equation, Gleichung 4-22).

Anhand dieser Gleichung wird die Änderung der Strahldichte in Abhängigkeit vom zurückgelegten Weg, der Zeit, der Wellenlänge und der Strahlrichtung beschrieben (Modest 2003).

$$\frac{1}{c} \cdot \frac{\partial I_\lambda}{\partial t} + \frac{\partial I_\lambda}{\partial s} = \kappa_\lambda \cdot I_{B,\lambda} - \kappa_\lambda \cdot I_\lambda - \sigma_{s,\lambda} \cdot I_\lambda + \frac{\sigma_{s,\lambda}}{4 \cdot \pi} \cdot \int_{4\pi} I_\lambda(\hat{s}_j) \cdot \phi_\lambda(\hat{s}_i, \hat{s}) \cdot d\Omega_j \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-4} \cdot \text{Sr}^{-1} \quad (4-22)$$

Diese Gleichung ist jedoch nur dann gültig, wenn sich ein homogenes, nicht polarisierendes Medium im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht befindet und ein konstanter Brechungsindex des Mediums vorliegt. Der erste Term auf der linken Seite stellt die zeitliche Änderung der Strahldichte dar. Aufgrund der Tatsache, dass die Lichtgeschwindigkeit im Vergleich zur Zeitskala und Längenskala bei technischen Anwendungen sehr groß ist, wird dieser Term meist vernachlässigt. Der zweite Term auf der linken Seite beschreibt die Änderung der spektralen Strahldichte in Abhängigkeit vom zurückgelegten Weg durch ein Medium. Der erste Term auf der rechten Seite stellt die Emission des Mediums innerhalb der betrachteten Weglänge dar und ist proportional zur Strahldichte eines schwarzen Körpers bei derselben Temperatur und Wellenlänge. Die beiden negativen Terme beschreiben einerseits die Absorption der einfallenden Strahlung beziehungsweise die Streuung des einfallenden Strahls von der Strahlrichtungsachse. Der letzte Term auf der rechten Seite beschreibt die Einstreuung in die betrachtete Strahlrichtung, wobei anhand der Phasenfunktion ϕ bei nicht isotroper Streuung die Streuintensität in Abhängigkeit von der Strahlungsrichtung angegeben wird. Auf die numerische Berechnung der RTE wird in Abschnitt 5.2.3 genauer eingegangen.

Zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten und in weiterer Folge des Absorptions- und Emissionsgrades von Gasgemischen stehen eine Vielzahl von Modellen zur Verfügung. Die Grundprinzipien dieser Modelle werden in weiterer Folge kurz beschrieben.

4.1.1 Modelle zur Berechnung des Absorptions- und Emissionsgrades

Grundsätzlich können die Modelle grob in vier unterschiedliche Gruppen eingeteilt werden (Modest 2003):

- Line-by-Line-Modelle
- Schmalbandenmodelle (SNB: Statistical-Narrow-Band-Modell)
- Breitbandenmodelle (WB: Wide-Band-Modell)
- Globalmodelle (z.B. WSGGM: Weighted-Sum-of-Grey-Gases-Modell)

Mit einem Line-by-Line-Modell sind die genauesten Berechnungen möglich. Hierbei werden die einzelnen spektralen Linien einzeln berechnet. Die für die Berechnung notwendigen

Daten werden meist der HITRAN-Datenbank (Rothman et al. 2009) entnommen. Diese Datenbank enthält für eine Vielzahl von unterschiedlichen Molekülen detaillierte Informationen über einzelne Spektrallinien, die einerseits experimentell und andererseits auf quantentheoretischer Basis ermittelt wurden. Derartige Berechnungen sind mit einem hohen Aufwand verbunden, da je nach Temperatur und Moleküldichte die Bandenverbreiterungen variieren und diese berücksichtigt werden müssen. Zur Berechnung von verbrennungsprozessstypischen Spektren muss des Weiteren auf extrapolierte Daten zurückgegriffen werden, da ein Großteil der spektralen Daten bei Umgebungstemperatur ermittelt wurden.

Bei Schmalbandenmodellen (Statistical-Narrow-Band-Modell, SNBM) werden die Spektrallinien in Banden zusammengefasst, die einerseits nahe genug beieinanderliegen, dass die Strahldichte eines schwarzen Körpers innerhalb der Bande als konstant angenommen werden kann, andererseits so breit sind, dass eine größere Anzahl von Spektrallinien zusammengefasst werden kann. Dadurch wird der rechnerische Aufwand deutlich reduziert. Als Beispiele für derartige Modelle sollen an dieser Stelle RADCAL (Grosshandler 1993) und em2c (Soufiani, Taine 1997) genannt werden, da für beide Modelle frei zugängliche Quellcodes zur Verfügung stehen (Modest 2003). Der Unterschied zwischen den beiden Modellen liegt einerseits in der Datenbasis zur Berechnung der CO₂- und H₂O-Banden und andererseits in der Formulierung der Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion zur Berechnung der starken beziehungsweise schwachen Banden.

Im Vergleich zu den Schmalbandenmodellen werden bei Breitbandenmodellen (z.B. Exponential-Wide-Band-Modell, EWB) gesamte Schwingungs-Rotationsbanden zusammengefasst. Dabei wird unterstellt, dass sich die Schwarzkörperstrahlung innerhalb der gesamten Bande nur geringfügig ändert. Aufgrund der einfachen Implementierung des Modells (Lallemant, Weber 1996) wird dieses Modell auch häufig als Referenzmodell zur Berechnung von Globalmodellen herangezogen (Coppalle, Vervisch 1983, Gupta et al. 2006, Krishnamoorthy 2010). Hierbei erscheint es jedoch wichtig, darauf hinzuweisen, dass es unterschiedliche Berechnungsmethoden zur Weitbandenberechnung gibt und somit EWB-Modelle sich deutlich voneinander unterscheiden können. Des Weiteren werden EWB-Modelle meist auf Basis von SNB-Modellen berechnet, wobei diese untereinander ebenfalls unterschiedliche Berechnungsergebnisse liefern, wie später noch gezeigt wird.

Bei Globalmodellen wird der Emissionsgrad meist durch die Gewichtung grauer Gase (Weighted-Sum-of-Gray-Gases, WSGG) berechnet (Hottel, Sarofim 1967). Die ersten derartigen Modelle basieren auf experimentellen Ergebnissen (Hottel charts), wobei diese

von Leckner (Leckner 1972) teilweise überarbeitet wurden, woraus ebenso ein Modell zur Berechnung des Emissionsgrades von H₂O-CO₂-Gasgemischen entstand.

Meist wird bei globalen Modellen der Gesamtemissionsgrad ε durch

$$\varepsilon = \sum_{i=0}^I a_i(T) \cdot \left(1 - e^{-\kappa_i p \cdot s}\right) \quad - \quad (4-23)$$

beschrieben. Dabei stellen a_i die Gewichtungsfaktoren des jeweiligen Emissionsgrades dar, wobei diese lediglich von der Gastemperatur abhängig sind. κ_i beschreibt den jeweiligen Absorptionskoeffizienten des Gases i , p die Summe der Partialdrücke der strahlungsaktiven Gase und s die geometrische Weglänge. Der Gewichtungsfaktor a_0 , der mit

$$a_0 = 1 - \sum_{i=1}^I a_i(T) \quad - \quad (4-24)$$

berechnet werden kann, wird mit einem nicht strahlungsaktiven Gas ($\kappa_0=0$) multipliziert, womit Bereiche, in denen keine Absorption stattfindet, berücksichtigt werden. Diese Randbedingung folgt aus der Überlegung, dass der Emissionsgrad bei steigender optischer Weglänge maximal einen Wert von 1 annehmen kann und somit auch die Summe der Gewichtungsfaktoren 1 ergeben muss. Ebenso müssen die Gewichtungsfaktoren positiv sein. Die Anzahl I der Gewichtungsfaktoren beziehungsweise der Absorptionskoeffizienten richtet sich nach der gewünschten Genauigkeit des Berechnungsmodells. Meist sind jedoch drei oder vier graue Gase und ein nichtabsorbierendes Gas ausreichend (Johansson et al. 2010).

In Tabelle 4-2 sind die für die weiteren Berechnungen für konventionelle Verbrennungsfälle im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Modelle dargestellt. Die in FORTRAN programmierten SNB-Modelle wurden in Form von Ausführungsdateien in Excel VBA implementiert, wobei zur besseren Datenaufbereitung die Quellcodes um zusätzliche Ausgaberroutinen erweitert wurden. Durch die automatische Erstellung der Eingabedatei für die Berechnungsroutinen in Microsoft Excel ist es möglich, Variationsberechnungen ohne großen Aufwand durchzuführen. Zur weiteren Auswertung, wie zum Beispiel die Berechnung der Emissionsgrade in Abhängigkeit von der geometrischen Weglänge, wurden weitere Subroutinen implementiert. Aufgrund der Einfachheit des EWB-Modells sowie der WSGG-Modelle war es möglich, diese direkt in Microsoft Excel zu implementieren.

Tabelle 4-2: Verwendete Modelle zur Berechnung des Emissionsgrades beziehungsweise der Strahldichte für konventionelle Verbrennung; T=Temperatur, p_{ges} =Gesamtdruck, s=geometrische Weglänge, $p_{ratio}=p_{H_2O}/p_{CO_2}$ =Partialdruckverhältnis

Modell	Anzahl der RTE	Gültigkeitsbereich
em2c (Soufiani, 1997)	367 ($\lambda=1$ bis $67 \mu\text{m}$)	$300 \leq T \leq 2900 \text{ K}$
RADCAL (Grosshandler, 1993)	446 ($\lambda=1$ bis $67 \mu\text{m}$)	$300 \leq T \leq 2500 \text{ K}$ $p_{ges} \leq 10 \text{ bar}$ $s \leq 50 \text{ m}$
EWBM (Modest, 2003)	8	$300 \leq T \leq 2000 \text{ K}$
WSGG Fluent (Smith, 1982)	4	$600 \leq T \leq 2400 \text{ K}$ $0,001 \leq p \cdot s \leq 10 \text{ atm} \cdot \text{m}$ $p_{ratio}=1$ oder 2
WSGG VDI (Johnson, 1973)	4	$1100 \leq T \leq 1800 \text{ K}$ $0,2 \leq s \leq 6 \text{ m}$ $0,5 \leq p_{ratio} \leq 2$

Bei den SNB-Modellen werden jeweils nur die spektralen Daten von 1 bis $67 \mu\text{m}$ berechnet. Auf Basis der Anteilfunktion $F_{\lambda_1-\lambda_2}$ kann der Strahlungsanteil des im betrachteten Wellenlängenbereichs $\lambda_1-\lambda_2$ im Verhältnis zur gesamten Strahlung eines schwarzen Strahlers bei gegebener Temperatur angegeben werden und eignet sich daher zur Abschätzung, ob der betrachtete Wellenlängenbereich ausreichend groß gewählt wurde. Dabei wird die hemisphärische spektrale spezifische Ausstrahlung $M_{\lambda,B}$, die mit

$$M_{\lambda,B}(\lambda) = \pi \cdot I_{\lambda,B}(\lambda) \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-3} \quad (4-25)$$

berechnet wird, herangezogen. Die Anteilfunktion ergibt sich somit zu

$$F_{\lambda_1-\lambda_2} = \frac{\int_{\lambda_1}^{\lambda_2} M_{\lambda,B}(\lambda) \cdot d\lambda}{\int_0^{\infty} M_{\lambda,B}(\lambda) \cdot d\lambda} = \frac{1}{\sigma \cdot T^4} \cdot \int_{\lambda_1}^{\lambda_2} M_{\lambda,B}(\lambda) \cdot d\lambda \quad - \quad (4-26)$$

wobei σ die Stefan-Boltzmann'sche Strahlungskonstante ($\sigma=5,6705 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$) ist (Siegel et al. 1993).

Der letzte Integral kann durch zwei Integrale mit einer unteren Integrationsgrenze $\lambda=0$ ausgedrückt werden.

$$F_{\lambda_1-\lambda_2} = \frac{1}{\sigma \cdot T^4} \cdot \left[\int_0^{\lambda_2} M_{\lambda,B}(\lambda) \cdot d\lambda - \int_0^{\lambda_1} M_{\lambda,B}(\lambda) \cdot d\lambda \right] = F_{0-\lambda_2} - F_{0-\lambda_1} \quad - \quad (4-27)$$

Für das Produkt $\lambda \cdot T$ sind Tabellenwerte für die Anteilsfunktionen tabellarisch aufgelistet (Siegel et al. 1993), wodurch eine schnelle Abschätzung möglich ist. Für den im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Wellenlängenbereich ergibt sich ein Anteil von 99,6 % an der Gesamtstrahlung, der als ausreichend erscheint, um repräsentative Ergebnisse für den gesamten Emissionsgrad zu liefern.

Das WSGG-Fluent-Modell wurde gewählt, da es sich hierbei um das in Fluent verwendete Standardmodell handelt, wobei die Parameter von Copalle (Coppalle, Vervisch 1983) und Smith (Smith et al. 1982) stammen. Obwohl das Partialdruckverhältnis von H_2O zu CO_2 fixiert ist, ist dieses Modell für die numerische Simulation interessant, da es auch für sehr kurze geometrische Weglängen geeignet ist und somit auch bei sehr feinen Berechnungsgittern verwendet werden kann. Dies ist dann notwendig, wenn keine repräsentative geometrische Weglänge für die umhüllende Geometrie, sondern die Berechnungszellenlänge als geometrische Weglänge für die Berechnung des Absorptions- beziehungsweise Emissionsgrades herangezogen wird. Das zweite WSGG-Modell (Johnson, Beer 1973) wird im VDI-Wärmeatlas (Verein Deutscher Ingenieure 2006) angegeben und erscheint aufgrund des großen möglichen Bereichs von Partialdruckverhältnissen interessant für unterschiedlichste Rauchgaszusammensetzungen bei unterschiedlichen Brennstoffen.

In Abbildung 4-2 sind die berechneten Emissionsgrade für einen konventionellen Verbrennungsfall von Kohle mit Luft dargestellt. Beim Vergleich der Ergebnisse der beiden SNB-Modelle fällt auf, dass der mit dem em2c-Modell berechnete Emissionsgrad tendenziell geringer ist, wobei die relative Abweichung bei geringen geometrischen Weglängen größer ist (ca. 16 %) und bei größer werdenden geometrischen Weglängen abnimmt (ca. 1,5 %). Beide SNB-Modelle sowie einige Line-by-Line-Modelle, auf Basis unterschiedlicher Datenbanken, wurden mit experimentellen Ergebnissen für Oxyfuel-Bedingungen (keine Gemische, sondern nur CO_2 und H_2O bei den entsprechenden Temperaturen und optischen Weglängen) verglichen, wobei beide SNB-Modelle eine maximale Abweichung von der gemessenen Transmission von 3 % aufwiesen (Becher et al. 2011). Da die Bandenbreite bei der Berechnung mit RADCAL kleiner ist, werden die mit RADCAL berechneten Ergebnisse als Referenz für den Vergleich mit den weiteren Modellen herangezogen. Der mit dem EWB-Modell berechnete Emissionsgradverlauf liegt bei geringen geometrischen Weglängen unter

dem des Referenzmodells (bis zu 15 %) und übersteigt den Emissionsgradverlauf bei großen geometrischen Weglängen um bis zu 8 %. Innerhalb der vorgegebenen Grenzen des WSGG-VDI-Modells steigt die relative Abweichung des Emissionsgrades in Bezug auf das Referenzmodell nicht über 8 %. Während bei geometrischen Weglängen $<0,2$ m die Abweichung bis zu 61 % betragen kann, bleibt dieser bei geometrischen Weglängen bis zu 40 m unter 12,5 %. Es ist jedoch zu erkennen, dass ab einer Weglänge von 20 m der Emissionsgrad nicht mehr weiter ansteigt und somit bei größeren zurückgelegten Wegstrecken die Strahldichte ebenfalls nicht mehr weiter zunimmt. Dieser modellbedingte, physikalisch nicht korrekte Effekt ist beim WSGG-Fluent-Modell in diesem Fall nicht erkennbar.

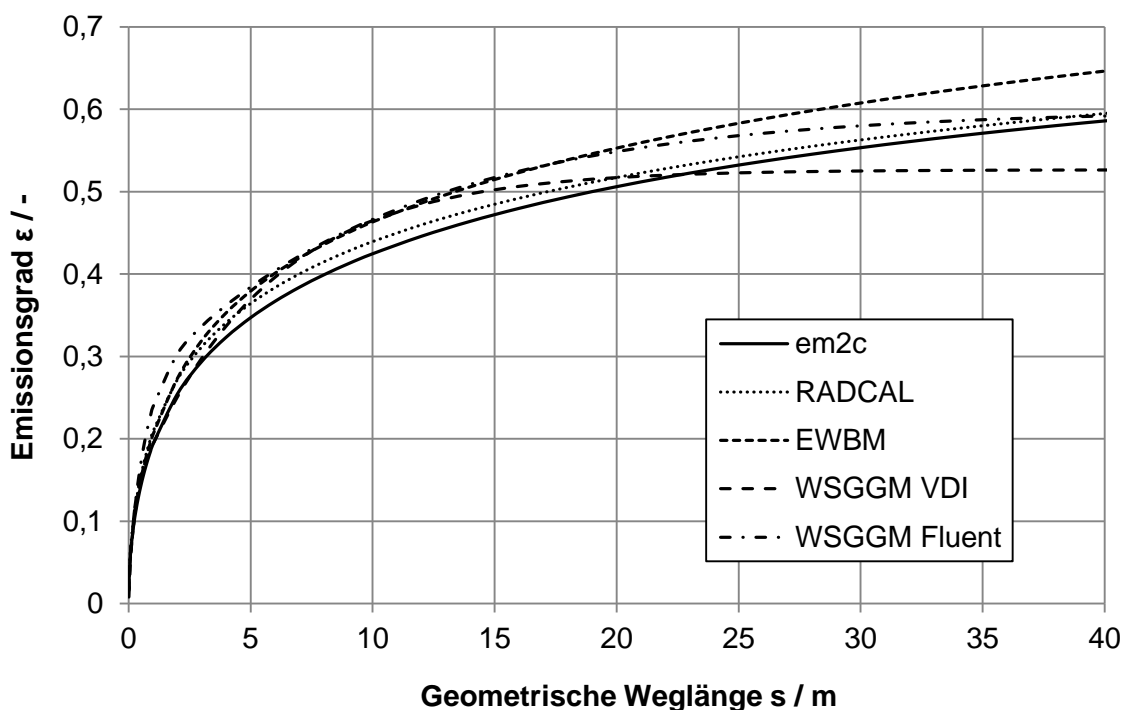


Abbildung 4-2: Berechnete Emissionsgrade bei Verbrennung mit Luft bei 1300K Rauchgastemperatur ($p_{\text{H}_2\text{O}}=0,0748$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,1521$ bar, $p_{\text{O}_2}=0,0263$ bar, $p_{\text{N}_2}=0,7468$ bar) und unterschiedlichen geometrischen Weglängen (0,01 bis 40 m)

Obwohl beim WSGG-Fluent-Modell das minimale Partialdruckverhältnis von H_2O zu CO_2 1 beträgt, werden auch in diesem Berechnungsfall ($p_{\text{H}_2\text{O}}/p_{\text{CO}_2}=0,5$) überraschend gute Ergebnisse erzielt. Die maximale relative Abweichung beträgt 23 % (bei sehr geringen geometrischen Weglängen).

Auf Basis der bisher dargestellten Daten kann darauf geschlossen werden, dass unter Berücksichtigung der angegebenen Grenzen der globalen Modelle gute Ergebnisse erzielt werden können. Diese Annahme kann durch die bereits recht großen Unterschiede zwischen den SNB-Modellen gestützt werden.

Aufgrund des deutlich geringeren Berechnungsaufwands bei den einfacheren Modellen, scheinen diese deutlich besser für numerische Simulationsberechnungen geeignet.

Nach genauerer Betrachtung der Berechnungsergebnisse für einen konventionellen Verbrennungsprozess mit Luft, ist zu hinterfragen, inwiefern im speziellen die globalen Modelle zur Berechnung des Emissionsgrades bei Oxyfuel-Atmosphären zutreffen, da diese durch das Fehlen des Luftstickstoffs deutlich höhere CO_2 - und gegebenenfalls höhere H_2O -Partialdrücke aufweisen.

In Abbildung 4-3 sind die berechneten Emissionsgrade bei 1300 K in Abhängigkeit von der geometrischen Weglänge für eine Oxyfuel-Kohle-Verbrennung mit einer Rauchgasrezirkulationsrate von 63 % ohne Wasserdampfkondensation aus dem Rauchgas, einem Sauerstoffverhältnis von 1,15 und unter der Voraussetzung, dass keine Luft in das System gelangt, dargestellt.

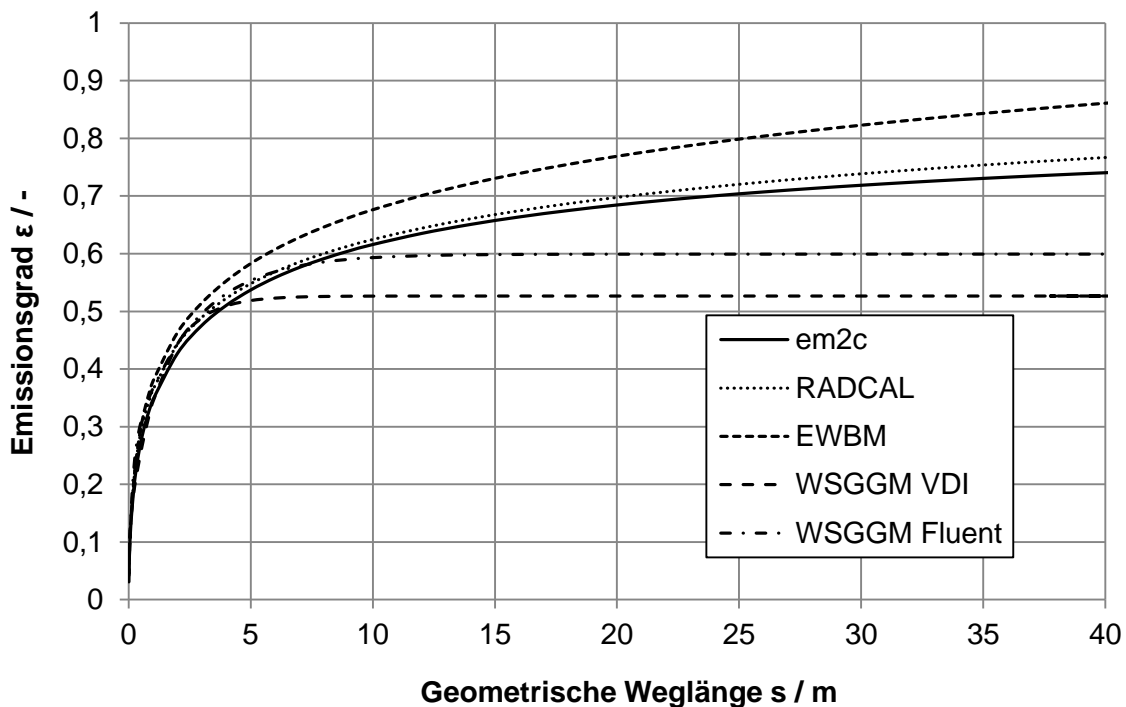


Abbildung 4-3: Berechnete Emissionsgrade bei Oxyfuel-Verbrennung bei feuchter Rauchgasrezirkulation bei 1300K Rauchgastemperatur ($p_{\text{H}_2\text{O}}=0,3148$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,6397$ bar, $p_{\text{O}_2}=0,0399$ bar, $p_{\text{N}_2}=0,0056$ bar) und unterschiedlichen geometrischen Weglängen (0,01 bis 40 m)

Aufgrund der höheren Partialdrücke von CO_2 und H_2O sind die Emissionsgrade im Vergleich zum konventionellen Feuerungsfall deutlich höher. Die erhaltenen Berechnungsergebnisse mit den beiden SNB-Modellen sehen sehr ähnlich aus, wobei wiederum die mit RADCAL berechneten Emissionsgrade etwas über jenen von em2c liegen. Die maximale relative Abweichung liegt in diesem Fall bei 6,5 % im Bereich geringer geometrischer Weglängen.

Ab einer geometrischen Weglänge von ca. 1 m liegt die relative Abweichung unter 5 %. Bei den mit dem EWB-Modell generierten Ergebnissen liegen die Emissionsgrade bei geringen geometrischen Weglängen ca. 17 % unter jenen des Referenzmodells und bei großen geometrischen Weglängen maximal 12,5 % darüber. Beim Vergleich der relativen Abweichungen zwischen konventioneller Feuerung und Oxyfuel-Feuerung ist die Abweichung vom Referenzmodell im Oxyfuel-Fall vom Referenzmodell größer. Bei den WSGG-Modellen ist es offensichtlich, dass diese speziell bei großen geometrischen Weglängen keine genauen Ergebnisse mehr liefern. Die maximale relative Abweichung liegt beim WSGG-VDI-Modell bei ca. 49 % und beim WSGG-Fluent-Modell bei 22 %. Diese Abweichungen liegen jedoch außerhalb der vorgesehenen geometrischen Weglänge. Innerhalb der Randbedingungen ergeben sich für das WSGG-VDI-Modell eine maximale Abweichung von 12,5 % und für das WSGG-Fluent-Modell von 10,6 %.

Im folgenden Graphen sind die berechneten Emissionsgrade für Oxyfuel-Kohle-Verbrennung bei trockener Rauchgasrezirkulation dargestellt.

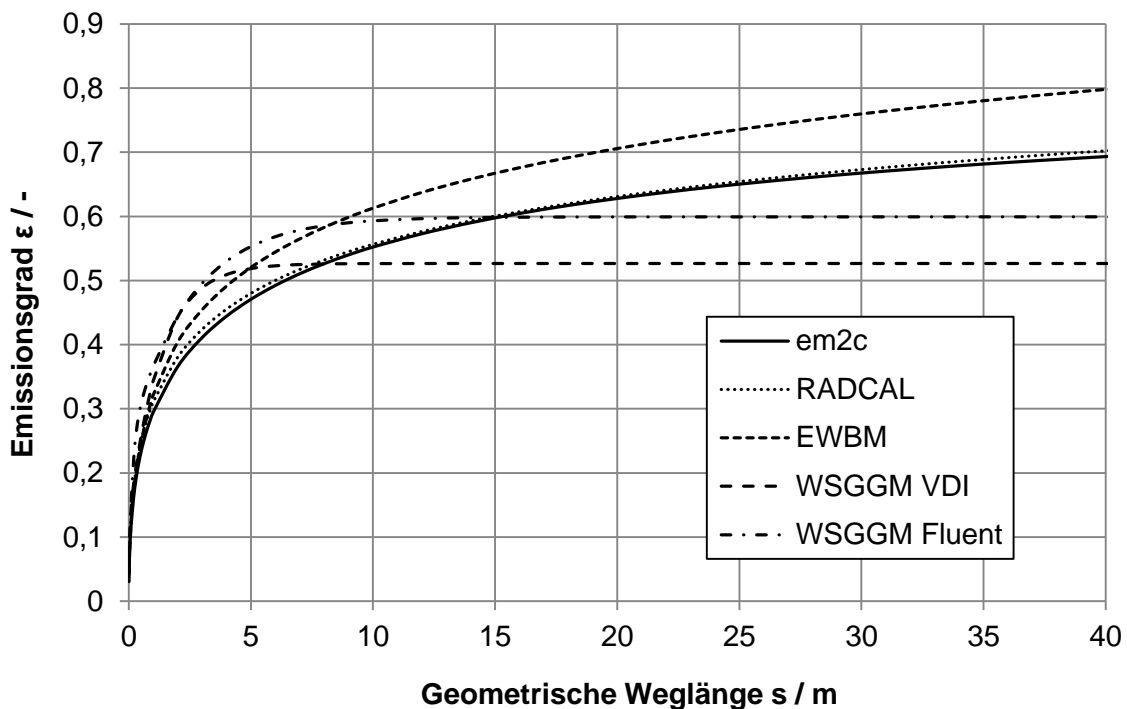


Abbildung 4-4: Berechnete Emissionsgrade bei Oxyfuel-Verbrennung bei trockener Rauchgasrezirkulation und 1300K Rauchgastemperatur ($p_{\text{H}_2\text{O}}=0,1701$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,7797$ bar, $p_{\text{O}_2}=0,0434$ bar, $p_{\text{N}_2}=0,0068$ bar) und unterschiedlichen geometrischen Weglängen (0,01 bis 40 m)

Ebenso wie in den Berechnungsfällen zuvor wurde eine Rauchgastemperatur von 1300 K, eine Rauchgasrezirkulationsrate von 63 %, ein Sauerstoffverhältnis von 1,15 und keine Luftleckage angenommen.

Obwohl die Summe der Partialdrücke von CO_2 und H_2O in etwa gleich groß wie im vorhergehenden Fall ist, sind die Emissionsgrade deutlich geringer. Dies hat mit dem geringeren Partialdruck des Wasserdampfes zu tun, da die alleinig vom H_2O besetzten Banden nun einen deutlich geringeren Einfluss haben. In diesem Fall stimmen die beiden SNB-Modelle gut überein. Die maximale relative Abweichung liegt bei 7 %, wobei diese bei größer werdenden geometrischen Weglängen unter 1 % sinkt. Wie schon bei den zuvor gezeigten Berechnungsergebnissen weicht das EWB-Modell deutlich vom Referenzmodell ab, wobei die maximale Abweichung bei 16 % liegt. Bei den WSGG-Modellen ändert sich der Emissionsgrad mit steigenden geometrischen Weglängen nicht mehr, wobei innerhalb des Vorgabebereiches beim WSGG-VDI-Modell eine maximale relative Abweichung von 16 % und beim WSGG-Fluent-Modell von 27 % auftritt. Diese doch recht große Abweichung kann dadurch erklärt werden, dass bei trockener Rauchgasrezirkulation das Partialdruckverhältnis von H_2O zu CO_2 0,22 beträgt und somit deutlich kleiner als das Partialdruckverhältnis von 1 ist.

Beim Vergleich der beiden Oxyfuel-Beispiele mit feuchter und trockener Rauchgasrezirkulation ist ersichtlich, dass die WSGG-Modelle näherungsweise gleiche Ergebnisse liefern (maximal 0,5 % relative Abweichung). Dieser Umstand ist jedoch nicht überraschend, da bei beiden Modellen die Summe der Partialdrücke von CO_2 und H_2O zur Berechnung des Gesamtemissionsgrades herangezogen wird und diese in beiden Oxyfuel-Beispielen in etwa gleich hoch sind (ca. 0,95 bar) und das Partialdruckverhältnis im Gleichungssystem nicht berücksichtigt wird. Aufgrund dessen wird jedoch auch ersichtlich, dass bei WSGG-Modellen sehr genau auf deren angedachten Einsatzbereich geachtet werden muss, um auch korrekte Ergebnisse zu erhalten.

Aus diesen Ergebnissen kann geschlossen werden, dass die WSGG-Modelle für spezifische Bereiche in Bezug auf die geometrische Weglänge und Partialdruckverhältnisse gute Ergebnisse liefern. Werden diese als Berechnungsmodell im Rahmen einer numerischen Simulation verwendet, ergibt sich das Problem, dass deren Gültigkeitsbereich im Falle von abweichenden Rauchgaszusammensetzungen doch deutlich eingeschränkt ist. Eine Implementierung eines EWB-Modells scheint auf Basis dieser Daten als nicht sinnvoll, da einerseits der Berechnungsaufwand bereits deutlich steigt und andererseits die Abweichungen vom Referenzmodell recht groß ausfallen. Es sei jedoch darauf hingewiesen, dass diese Feststellung nur für das hier verwendete EWB-Modell mit den zugehörigen Berechnungsparametern gilt, da bei anderen EWB-Modellen mit anderen Berechnungsansätzen und Parametern durchwegs bessere Ergebnisse erzielt werden können (Johansson et al. 2010).

Bei numerischen Simulationen wird meist versucht, die einzelnen Modelle derart zu gestalten, dass trotz eines möglichst geringen Rechenaufwands bestmögliche Ergebnisse erreicht werden. Wird diese Prämisse zur Berechnung des Emissions- beziehungsweise Absorptionsgrades zu Grunde gelegt, dann folgt daraus, dass ein globales Modell die beste Variante darstellt. Ist die mittlere Rauchgaszusammensetzung innerhalb der Brennkammer bekannt, so besteht die Möglichkeit, auf Basis von SNB-Modellen die Koeffizienten für ein globales Modell spezifisch für den jeweiligen Anwendungsfall zu berechnen. Im nächsten Abschnitt wird die Berechnung der Koeffizienten für ein globales Modell und der Vergleich des neuen Modells mit bereits bestehenden spezifisch für den Oxyfuel-Fall adaptierten Modellen dargestellt.

4.1.2 Anwendung des Globalmodells für Oxyfuel-Atmosphären

Wie bereits zuvor beschrieben, müssen neue Parameter für Globalmodelle berechnet werden, um auch bei Atmosphären mit hohen Partialdrücken von CO_2 und H_2O den globalen Emissionsgrad berechnen zu können. Bei vielen Veröffentlichungen wird von einer repräsentativen Rauchgaszusammensetzung beim Oxyfuel-Prozess ausgegangen, wobei meist zwischen trockener und feuchter Rezirkulation unterschieden wird (Johansson et al. 2010, Gupta et al. 2006, Krishnamoorthy 2010). Da die Rauchgaszusammensetzung jedoch stark vom eingesetzten Brennstoff, der Kondensationstemperatur und der Luftleckage abhängig ist, können diese modifizierten Modelle nur bedingt eingesetzt werden. Ebenso wurden Modellparameter für einen größeren Anwendungsbereich beim Oxyfuel-Prozess berechnet (Rehfeldt et al. 2011a, Johansson et al. 2011), wobei diese ebenfalls auf deren Anwendbarkeit für den jeweiligen Fall überprüft werden müssen und somit die Genauigkeit leiden kann. Eine andere Möglichkeit besteht jedoch darin, die Koeffizienten für das Globalmodell den jeweiligen Gaszusammensetzungen anzupassen. Je nach eingesetztem Brennstoff und den jeweiligen Randbedingungen kann die Rauchgaszusammensetzung anhand einfacher thermodynamischer Simulationsprogramme (zum Beispiel IPSEpro) abgeschätzt werden. Auf Basis dieser Rauchgaszusammensetzung werden Variationsberechnungen mit einem SNB-Modell in Bezug auf Temperatur und geometrische Weglänge durchgeführt und in weiterer Folge die Koeffizienten für ein Globalmodell berechnet. Diese können in einem numerischen Simulationsprogramm zur Berechnung der Strahldichte herangezogen werden.

Dieser Ansatz wurde im Rahmen dieser Arbeit verfolgt, wobei folgende Rahmenbedingungen gewählt wurden:

- einfache Bedienbarkeit des Berechnungsprogramms
- Benutzung von Software, die entweder frei verfügbar oder als Standard auf jedem Rechner vorausgesetzt werden kann
- einfache Erweiterungsmöglichkeiten des Programms durch Subroutinen
- einfache Datenauswertung

Wie bereits zuvor erwähnt, sind sowohl RADCAL als auch em2c in der Programmiersprache FORTRAN geschriebene SNB-Modelle, die frei verfügbar sind. Als Compiler zur Erstellung der Ausführungsdateien wurde das Open-Source-Programm Open Watcom 1.8 verwendet. Sowohl die Erstellung der Eingabedateien, der Ausführungsbefehl und das Auslesen der Ausgabedatenfiles als auch die weiteren Berechnungen auf Basis des Ausgabefiles wurden mit Hilfe des Programms Microsoft Excel in Form von VBA-Routinen realisiert. Dadurch ist es grundsätzlich möglich, die Berechnungen ohne zusätzliche Software durchzuführen.

Als Globalmodell wurde die mathematische Formulierung von Smith (Smith et al. 1982) verwendet (siehe auch Abschnitt 4.1.1, Seite 69). Aus Gründen der Übersichtlichkeit wird das zugrundeliegende Gleichungssystem an dieser Stelle nochmals angeführt.

Der globale Emissionsgrad ε wird durch folgende Gleichung berechnet:

$$\varepsilon = \sum_{i=0}^I a_i(T) \cdot \left(1 - e^{-\kappa_i \rho \cdot s}\right) \quad - \quad (4-28)$$

I stellt die Anzahl der grauen Gase dar. κ_i ist der jeweilige Absorptionskoeffizient zum jeweiligen Gas i . $a_i(T)$ ist der jeweilige Gewichtungsfaktor für den zugehörigen Emissionsgrad des grauen Gases i und kann durch einen Polynomansatz berechnet werden (Gleichung 4-29), wobei dieser lediglich von der Temperatur des Rauchgases abhängig ist.

$$a_i = \sum_{j=1}^J c_{i,j} \cdot \left(\frac{T}{T_{ref}}\right)^{j-1} \quad - \quad (4-29)$$

Der Bezug der Gastemperatur auf eine Referenztemperatur ($T_{ref}=1200$ K) erhöht die Stabilität der Lösungsprozedur deutlich (Johansson et al. 2010).

Die Gewichtungsfaktoren a_i können als der Anteil der Strahlung eines schwarzen Körpers für jene spektralen Bereiche, in denen der Absorptionskoeffizient dem zugehörigen κ_i entspricht,

interpretiert werden (Smith et al. 1982). Dieser Ansatz ist physikalisch nicht vollständig korrekt, da diese Bereiche von der lokalen Temperatur und Konzentration abhängig sind (Johansson et al. 2010). a_0 ist der Gewichtungsfaktor für jene spektralen Bereiche, in denen keine Strahlungsinteraktion stattfindet und wird mit

$$a_0 = 1 - \sum_{i=1}^I a_i(T) \quad - \quad (4-30)$$

berechnet. Die Summe der Gewichtungsfaktoren muss 1 ergeben, wobei jeder Gewichtungsfaktor positiv sein muss (Randbedingung). Die Berechnungsprozedur der einzelnen Koeffizienten basiert auf der Minimierung der Summe der Fehlerquadrate, wobei die Koeffizienten, die variablen Zellen und die Summe der Fehlerquadrate die Zielzelle für den SOLVER in Microsoft Excel darstellen. Die Summe der Fehlerquadrate kann durch einfaches Aufsummieren der in einem Tabellenblatt dargestellten Matrizenwerte berechnet werden. Wenn M die Anzahl der unterschiedlichen geometrischen Weglängen und N die Anzahl der unterschiedlichen gewählten Temperaturen ist, dann ergibt sich für die Summe der Fehlerquadrate folgender Ausdruck:

$$\chi = \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^N \left(\frac{\varepsilon_{SNB,m,n} - \varepsilon_{m,n}}{\varepsilon_{SNB,m,n}} \right)^2 \quad - \quad (4-31)$$

$\varepsilon_{SNB,m,n}$ bezeichnet dabei den für eine gegebene Weglänge und Temperatur exakt mit RADCAL berechneten Emissionsgrad (nach Gleichung 4-17). $\varepsilon_{m,n}$ beschreibt den zugehörigen mit dem Globalmodell berechneten Emissionsgrad nach Gleichung (4-28). Dabei werden die Koeffizienten $c_{i,j}$ aus Gleichung (4-29) und die Absorptionskoeffizienten κ_i variiert. Ist durch die Variation der Koeffizienten ein Minimum der Summe der Fehlerquadrate χ gefunden, können diese Koeffizienten verwendet werden, um ohne den aufwändigen Einsatz von RADCAL den Emissionsgrad ε für die gegebene Weglänge und Temperatur zu berechnen. Aus Gleichung (4-31) kann auch die mittlere prozentuelle Abweichung für das gesamte Berechnungsgebiet mit

$$\sigma_{mittel} = \sqrt{\frac{\chi}{M \cdot N}} \cdot 100 \quad \% \quad (4-32)$$

berechnet werden. Während der Variationsberechnungen hat sich herausgestellt, dass deutlich bessere Ergebnisse erzielt werden, wenn zu Beginn Gleichung (4-31) als Zielzelle für den Solver definiert wird und danach Gleichung (4-32).

Um die Berechnungsroutine auf deren Funktionalität zu überprüfen, wurde ein von Johansson et al. (Johansson et al. 2010) veröffentlichtes Modell nachvollzogen. Die Koeffizienten sind in Tabelle 4-3 dargestellt. Als Referenzmodell wurde von Johansson das SNB-Modell em2c verwendet. Der Molanteil sowohl von CO₂ als auch H₂O wurde mit 0,48 gewählt, wobei der Gesamtdruck 1 bar beträgt. Die Datensätze wurden von 500 bis 2500 K in 100 K-Schritten und von 0,01 bis 60 m in variablen Schritten (0,01-0,1 in 0,001 Schrittweite; 0,1 bis 1 in 0,1 Schrittweite; usw.) berechnet.

Tabelle 4-3: Koeffizienten für WSGG-Modell mit vier grauen Gasen ($p_{\text{CO}_2}=0,48$, $p_{\text{H}_2\text{O}}=0,48$, $s=0,01\text{-}60$ m, $T=500\text{-}2500$ K) nach Johansson (Johansson et al. 2010)

i	K_i	$C_{i,1}$	$C_{i,2}$	$C_{i,3}$
1	0,0668	0,2887	-0,076	0,0604
2	0,6818	0,133	0,303	-0,1426
3	5,9261	0,361	-0,2112	0,0332
4	86,0137	0,1843	-0,1545	0,0347

Es erwies sich als vorteilhaft, nicht nur die zuvor angegebenen Randbedingungen zu definieren, da bei diesem Datensatz zwar die mittlere relative Abweichung im Vergleich zum bestehenden Modell deutlich geringer war, die maximale Abweichung jedoch deutlich größer ausfiel. Aus diesem Grund wurden Randbedingungen definiert, anhand derer die Unter- und Obergrenze der relativen Abweichung vorgegeben wurden. Dabei wurde darauf geachtet, dass die Toleranzweiten gleich groß gehalten wurden. Aufgrund der hohen Anzahl der Randbedingungen war es jedoch nicht möglich, von Beginn an alle Randbedingungen zu verwenden. Zuerst wurde der Solver ohne zusätzliche Randbedingungen gestartet, bis ein Minimum der Summe der Fehlerquadrate erreicht wurde. Danach wurden die Ober- und Untergrenze definiert. Abschließend wurde nochmals die Berechnung mit der Maximierung des prozentuellen Anteils innerhalb der $\pm 5\%$ -Grenze relativer Abweichung durchgeführt. Zur einfachen und qualitativen Beurteilung der Berechnungsergebnisse wurden Flächendiagramme erstellt, anhand derer schnell ersichtlich ist, in welchen Bereichen es zu größeren Abweichungen kommt. Dabei stellte sich heraus, dass speziell im definierten Randbereich starke relative Abweichungen auftreten. Aufgrund dessen wurde das Berechnungsgebiet in Bezug auf geometrische Weglängen und Temperaturen erweitert, wobei das endgültige Modell wiederum nur auf das zuvor angegebene Gebiet bezogen ist. Durch diese Maßnahme konnte eine deutliche Reduzierung der maximalen relativen Abweichung erreicht werden. In Tabelle 4-3 sind die neu berechneten Koeffizienten für das WSGG-Modell dargestellt. Beim Vergleich der Tabellenwerte ist schnell ersichtlich, dass sich

die Koeffizienten deutlich unterscheiden, wobei sich die Unterschiede aus der Lösungsstrategie und den Randbedingungen bei der Koeffizientenberechnung ergeben.

Tabelle 4-4: Koeffizienten für neu berechnetes WSGG-Modell mit vier grauen Gasen ($p_{\text{CO}_2}=0,48$, $p_{\text{H}_2\text{O}}=0,48$, $s=0,01-60$ m, $T=500-2500$ K)

i	K_i	$C_{i,1}$	$C_{i,2}$	$C_{i,3}$
1	0,05097	0,26442	-0,09152	0,06256
2	0,44012	0,16293	0,24287	-0,11106
3	4,40868	0,33563	-0,11449	-0,00374
4	70,7545	0,21286	-0,17736	0,03928

Um die beiden Modelle miteinander vergleichen zu können, wurde für beide Fälle die relative Abweichung zum Referenzmodell bei jedem Datenpunkt berechnet. Ein genauerer Vergleich der beiden Modelle ergibt jedoch, dass beim neu berechneten Modell 97,9 % aller berechneten Emissionsgrade innerhalb eines Bereiches von ± 5 % vom Referenzwert ($\epsilon_{\text{em}2\text{c}}$) liegen (beim bestehenden Modell 98,6 %). Die mittlere relative Abweichung liegt beim bestehenden Modell bei 0,73 % und bei dem mit Excel berechneten Modell bei 0,76 %. Einzig innerhalb des $\pm 2,5$ %-Bereichs scheint das bestehende Modell etwas besser zu sein.

In Abbildung 4-5 ist eine Gegenüberstellung zwischen den berechneten Emissionsgraden des Referenzmodells ($\epsilon_{\text{em}2\text{c}}$) und dem neu berechneten WSGG-Modell dargestellt.

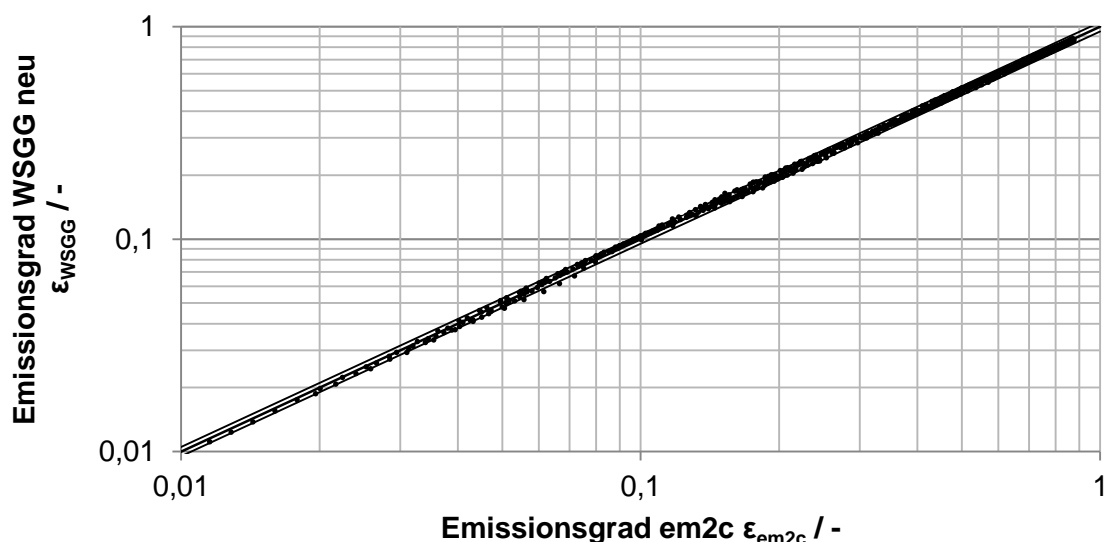


Abbildung 4-5: Vergleich der berechneten Emissionsgrade zwischen dem Referenzmodell ($\epsilon_{\text{em}2\text{c}}$) und dem modifizierten WSGG-Modell mit ± 5 %-Fehlergrenzen

In dieser Darstellung ist die gute Übereinstimmung in Bezug auf die berechneten Emissionsgrade zwischen dem Referenzmodell (em2c) und dem modifizierten WSGG-Modell ersichtlich.

In Abbildung 4-6 sind die prozentuellen Abweichungen des Modells mit den modifizierten Parametern gegenüber dem Referenzmodell (em2c) dargestellt. Es ist zu erkennen, dass die relative Abweichung des neu berechneten Modells gegenüber dem Referenzmodell im Bereich der zu erwartenden Temperaturen und der geometrischen Weglänge unter 2 % liegt.

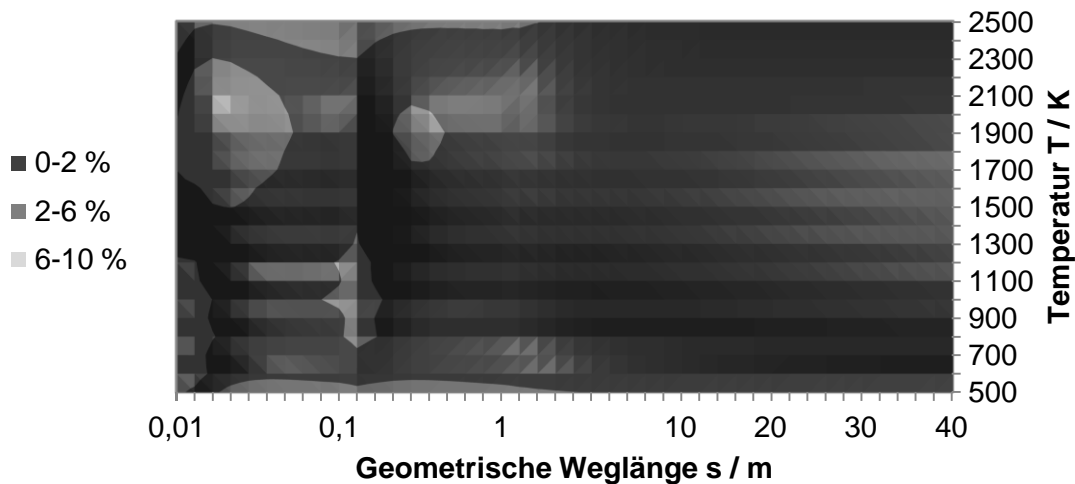


Abbildung 4-6: Prozentuelle Abweichung der Emissionsgrade zwischen dem WSGG-Modell und em2c ($p_{\text{H}_2\text{O}}=0,48$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,48$ bar, $p_{\text{ges}}=1$ bar, $s=0,01$ bis 40 m, $T=500$ -2500 K)

Ausgehend von diesen Ergebnissen kann festgestellt werden, dass es ebenso möglich ist, ein WSGG-Modell in Microsoft Excel zu berechnen, obwohl der Solver nicht die Möglichkeiten bietet, die bei einer mathematischen Berechnungssoftware zur Verfügung stehen. Anhand der hier beschriebenen Vorgehensweise ist es nun möglich, spezifische WSGG-Modelle je nach Bedarf innerhalb kürzester Zeit zu erstellen, die in weiterer Folge in die numerische Simulation eingebunden werden können.

4.1.3 Berechnung der WSGG-Koeffizienten für die Rauchgaszusammensetzung während der Experimente mit dem „AE&E“-Brenner

Die in 3.4 berechneten Randbedingungen können nun zur Berechnung der Koeffizienten des WSGG-Modells herangezogen werden. Ebenso ist es möglich, anhand vorhergehender numerischer Berechnungen, die CO_2 - und H_2O -Konzentrationen innerhalb der Brennkammer zu verwenden. Weitere Hinweise können aus den Konzentrationsmessungen innerhalb der Brennkammer bezogen werden (Anhang E). Aus den Konzentrationsprofilen ist ersichtlich, dass lediglich im unmittelbaren Brennmündungsbereich die CO_2 -Konzentrationen stark

variieren. Diese Zone kann in einen Bereich mit einem Abstand von 1,5 m in axialer Richtung entlang der Brennerachse und in einem Radius von ca. 0,5 m, wobei dieser mit steigendem axialem Abstand von der Brennermündung kleiner wird, eingegrenzt werden. Somit können in erster Näherung die CO_2 - und H_2O -Partialdrücke im umliegenden Bereich der Flamme herangezogen werden. Unter Verwendung der in Abschnitt 4.1.2 beschriebenen Berechnungsroutine wurden die in Tabelle 4-5 angegebenen Parameter berechnet.

Tabelle 4-5: Koeffizienten für neu berechnetes WSGG-Modell auf Basis von Berechnungen mit RADCAL mit vier grauen Gasen ($p_{\text{CO}_2}=0,697$, $p_{\text{H}_2\text{O}}=0,1263$, $s=0,01-42$ m, $T=500-2500$ K)

i	K_i	$C_{i,1}$	$C_{i,2}$	$C_{i,3}$
1	0,08953009	0,32574905	0,010551011	0,002202485
2	1,179468458	0,146554723	0,153176332	-0,08672668
3	12,26240495	0,129862608	-0,04254259	-0,00114046
4	204,0832256	0,06972205	-0,02930954	0,000665456

Die Vergleichsberechnungen ergaben, dass über 90 % der berechneten Emissionsgrade weniger als ± 5 % vom Referenzmodell (RADCAL) abweichen und 99 % der berechneten Emissionsgrade innerhalb von ± 10 % liegen (siehe Abbildung 4-7).

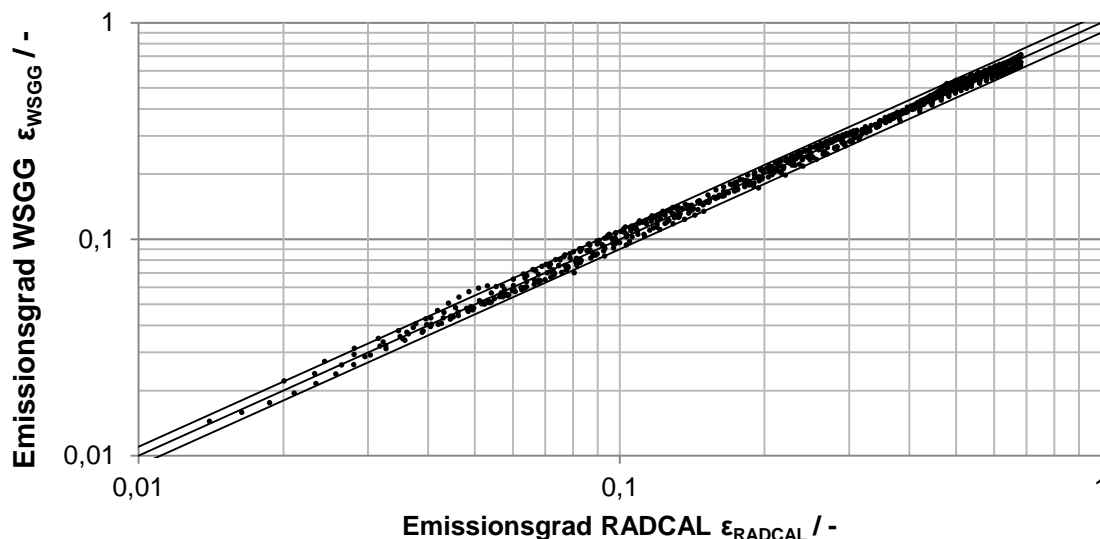


Abbildung 4-7: Vergleich der berechneten Emissionsgrade zwischen dem Referenzmodell (RADCAL) und dem modifizierten WSGG-Modell mit ± 10 %-Fehlergrenzen ($p_{\text{H}_2\text{O}}=0,697$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,1263$ bar, $p_{\text{ges}}=1$ bar, $s=0,01-40$ m, $T=500-2500$ K)

Im Vergleich zu den vorhergehenden Berechnungsergebnissen sind die Fehlergrenzen etwas größer.

In Abbildung 4-8 ist ein Flächendiagramm mit den prozentuellen Abweichungen vom Referenzmodell für die einzelnen Berechnungspunkte dargestellt. Die in der Legende angegebenen Grenzen gelten sowohl in positiver als auch negativer Richtung. Im Diagramm ist zu erkennen, dass lediglich in einem kleinen Bereich die prozentuelle Abweichung zwischen den beiden Modellen innerhalb der Grenzen von $\pm 7,5\text{--}12,5\%$ liegt. Da im Flammenkern die Konzentrationen deutlich von jenen im umliegenden Bereich abweichen, ist davon auszugehen, dass das WSGG-Modell in dieser Zone keine korrekten Berechnungsergebnisse liefert. Durch eine Variantenberechnung mit unterschiedlichen Partialdrücken von CO_2 und H_2O wurde versucht, abzuschätzen, mit welchen Fehlern gerechnet werden muss.

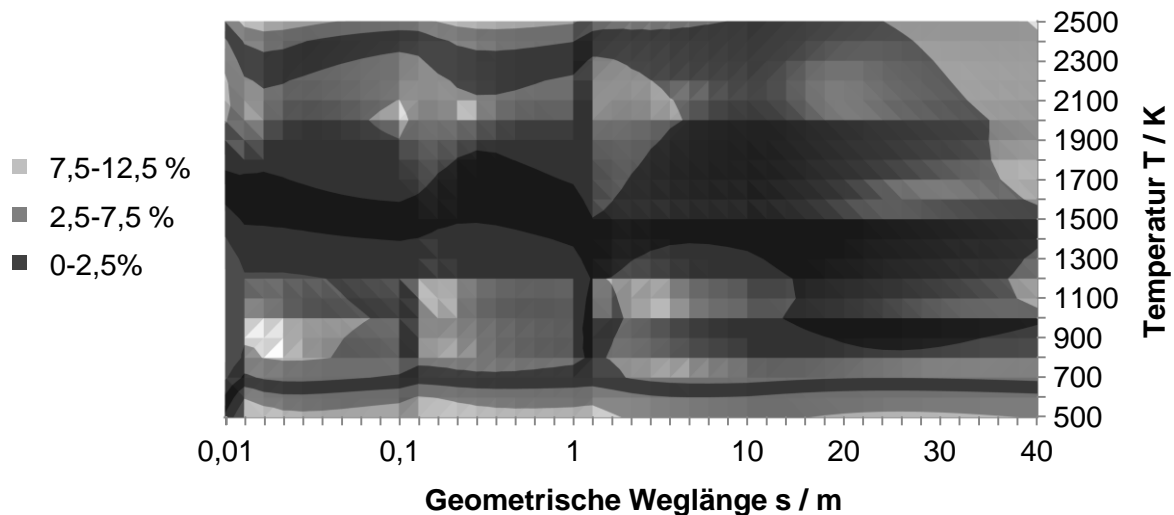


Abbildung 4-8: Prozentuelle Abweichung der Emissionsgrade zwischen dem WSGG-Modell und RADCAL ($p_{\text{H}_2\text{O}}=0,697$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,1263$ bar, $p_{\text{ges}}=1$ bar, $s=0,01\text{--}40$ m, $T=500\text{--}2500$ K)

Aus Tabelle 4-6 ist ersichtlich, dass die Berechnungsergebnisse stärker von den Referenzberechnungen abweichen, wenn nur der H_2O -Partialdruck gesenkt wird. Werden die Partialdrücke von CO_2 und H_2O zu gleichen Teilen oder nur der CO_2 -Partialdruck gesenkt, dann beträgt die mittlere Abweichung maximal 2,5 %. Somit kann daraus geschlossen werden, dass die Koeffizienten für das WSGG-Modell nicht nur exakt für die zur Berechnung verwendeten Partialdrücke verwendet, sondern innerhalb einer gewissen Bandbreite in Bezug auf die Summe der Partialdrücke und dem Partialdruckverhältnis verwendet werden können.

Tabelle 4-6: Prozentuelle Abweichung des WSGG-Modells (Parameter aus Tabelle 4-5) bezogen auf das Referenzmodell RADCAL bei unterschiedlichen Partialdrücken und geometrischen Weglängen ($s=0,01-42$ m) und einer Temperatur von 1500K

p_{CO_2}	p_{H_2O}	Max. Abweichung	Mittlere Abweichung
bar	bar	%	%
0,697	0,1263	4,2	1,3
0,6273	0,1137	4,2	1,5
0,5576	0,1010	5,2	1,6
0,697	0,1137	4,6	2,3
0,697	0,1010	7,3	4,2
0,6273	0,1263	3,9	1,4
0,5576	0,1263	5,4	2,5

Wie in Abschnitt 4.2 gezeigt wird, wird gerade im Flammenbereich, in dem die Partikelkonzentration am höchsten ist, die Strahlung durch den Partikeleinfluss dominiert und somit kann angenommen werden, dass der Einsatz eines spezifisch berechneten WSGG-Modells innerhalb einer Brennkammer eingesetzt werden kann.

4.2 Strahlungseigenschaften von Partikeln

Wie bereits erwähnt, interagieren neben den Gasmolekülen in einem Gas-Feststoff-Gemisch ebenfalls die darin enthaltenen Partikel mit elektromagnetischen Wellen. Wie bei der Gasstrahlung können die im Gas enthaltenen Partikel Strahlung absorbieren und emittieren, wobei zusätzlich die Streuung der Strahlung eine Rolle spielt, die bei der Gasstrahlung in Brennkammern vernachlässigt werden kann.

Bei Streuung von Strahlung an Partikeln wird zwischen drei unterschiedlichen Mechanismen

- der Reflexion,
- der Refraktion und
- der Diffraktion

unterschieden (Abbildung 4-9).

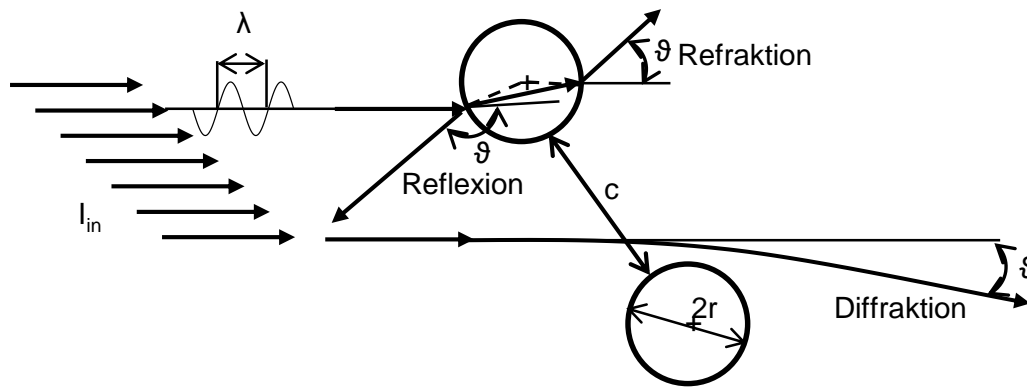


Abbildung 4-9: Schematische Darstellung der Streuemechanismen an Partikeln (vgl. Modest 2003)

Bei der Diffraction (Beugung) wird die Strahlrichtung, ohne Kollision mit dem Partikel, abgelenkt. Trifft ein Strahl am Partikel auf, kann dieser entweder reflektiert werden (Reflexion) oder in das Partikel eindringen, teilweise absorbiert und in eine andere Richtung gelenkt werden (Refraktion). In der Regel werden alle drei Phänomene unter dem Begriff Streuung zusammengefasst (Modest 2003). Somit kann neben der Berechnung des Absorptionskoeffizienten der Streukoeffizient berechnet werden, wobei beide Koeffizienten zusammengefasst den Extinktionskoeffizienten β ergeben.

$$\alpha = 1 - e^{-(\kappa_{P,\lambda} + \sigma_{P,\lambda}) \cdot s} = 1 - e^{-(\beta_\lambda) \cdot s} \quad - (4-33)$$

Sowohl für den Streu- als auch den Absorptionskoeffizienten liegen Werte für unterschiedliche Brennstoffe aus experimentellen Ergebnissen oder Schätzwerte vor (Modest 2003, Verein Deutscher Ingenieure 2006, Manickavasagam, Menguc 1993, Bahador, Sundén 2008), wobei diese stark von den jeweiligen Versuchsbedingungen und Messverfahren abhängen und somit nur bedingt allgemein verwendet werden können. Um dennoch für den jeweiligen Anwendungsfall Parameter zur Verfügung stellen zu können, besteht die Möglichkeit, diese auf theoretischer Basis zu generieren.

Wie stark der Einfluss der Partikel auf die Strahlungssituation ausfällt, hängt hauptsächlich von folgenden Partikelparametern ab (Modest 2003):

- Partikelform
- Partikelgröße
- Abstand zwischen den Partikeln beziehungsweise Beladungsdichte
- Materialeigenschaften, meist durch den komplexen Brechungsindex ($m=n+i \cdot k$) beschrieben

Bei theoretischen Überlegungen wird die Partikelform meist sphärisch angenommen, wobei diese Annahme durchaus berechtigt ist, da bei einer Partikelwolke mit einer großen Anzahl von unregelmäßigen Partikeln diese Unregelmäßigkeiten im Mittel ausgeglichen werden. Je nach Partikelgröße müssen unterschiedliche Modellansätze verwendet werden, um die Interaktion zwischen der Partikelschar und der Strahlung berechnen zu können. Das zu verwendende Berechnungsmodell wird durch den Größenparameter

$$x = \frac{2 \cdot \pi \cdot r}{\lambda} \quad - \quad (4-34)$$

festgelegt. Der Größenparameter x kann anhand des Partikelradius r (in μm) und der Wellenlänge λ des zu betrachtenden Bereichs berechnet werden. Ist $x \ll 1$, dann tritt Rayleigh-Streuung auf. Liegt die Größe der Partikel im Bereich der zu betrachtenden Wellenlänge, woraus $x = \mathcal{O}(1)$ folgt, kann die Streuung anhand der Mie-Theorie berechnet werden. Wenn $x \gg 1$ ist, können die Gesetze der geometrischen Optik angewendet werden. Bei vielen technischen Anwendungen, wie zum Beispiel Verbrennungssystemen, entspricht $x = \mathcal{O}(1)$, womit die Mie-Theorie, unter der Voraussetzung, dass das Verhältnis

$$\frac{c}{\lambda} \gg 1 \quad - \quad (4-35)$$

und somit unabhängige Streuung vorliegt, zur Berechnung der Streuungseigenschaften herangezogen werden kann.

In Abbildung 4-10 ist ein Übersichtsdiagramm dargestellt, mit dem anhand des Partikelparameters und dem Partikelvolumenanteil zwischen abhängiger beziehungsweise unabhängiger Streuung unterschieden werden kann. Für Kohlenstaubverbrennungssysteme kann anhand des Diagramms abgeleitet werden, dass unabhängige Streuung vorliegt, und somit können die Strahlungseigenschaften der Partikel durch die Anwendung der Mie-Theorie abgeschätzt werden.

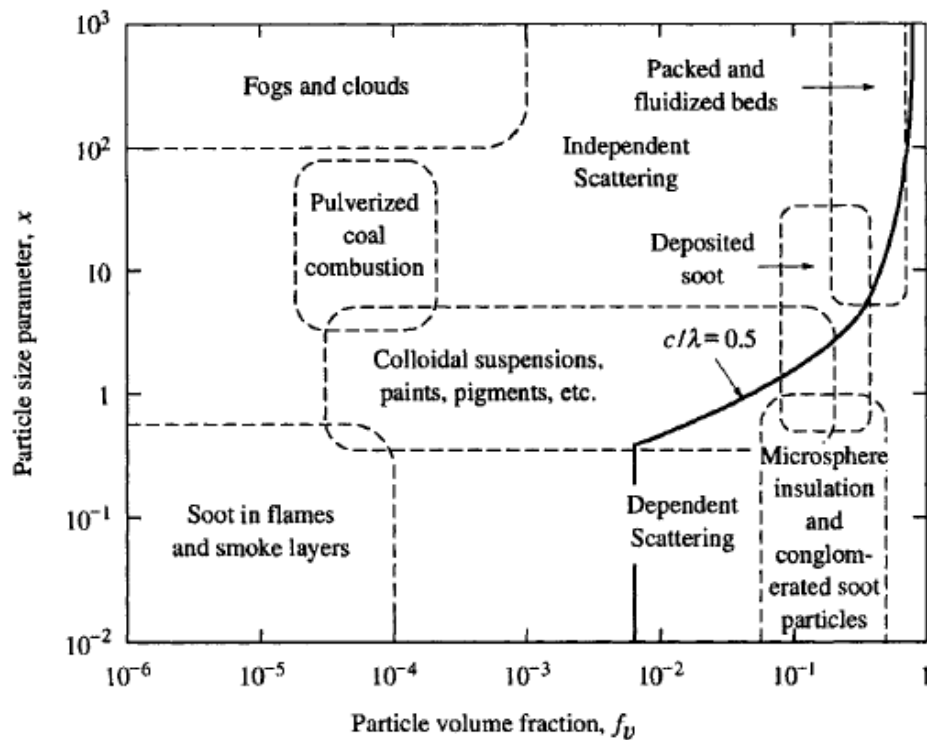


Abbildung 4-10: Übersichtsdigramm zur Bestimmung von abhängiger bzw. unabhängiger Streuung in Abhängigkeit von Partikelgrößenparameter und Staubbelastung (Modest 2003)

Aufgrund der hohen Komplexität der Mie-Theorie werden in weiterer Folge nur die notwendigen Gleichungen zur Berechnung der benötigten Parameter unter Nutzung von frei zugänglichen Berechnungsroutinen angeführt. Eine genaue Herleitung und Beschreibung der zugrundeliegenden Berechnungsansätze ist in Huffman (Bohren, Huffman 1983) zu finden.

Meist werden zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten $\kappa_{P,\lambda}$ und des Streukoeffizienten $\sigma_{P,\lambda}$ optische Wirkungsfaktoren (Q) verwendet, wobei für Einzelpartikel (pro Volumeneinheit)

$$\mu_{P,\lambda} = Q_{\mu,\lambda} \cdot r_P^2 \cdot \pi \quad \text{m}^{-1} \quad (4-36)$$

und für Partikelwolken mit konstanten Partikelradien

$$\mu_\lambda = Q_{\mu,\lambda} \cdot r_P^2 \cdot \pi \cdot N_P \quad \text{m}^{-1} \quad (4-37)$$

gilt. μ_λ steht jeweils für den Koeffizienten für Extinktion (β), Streuung (σ_P) und Absorption (κ) und Q_μ für den jeweiligen Wirkungsfaktor. Das Produkt aus Partikelquerschnittsfläche ($r^2 \cdot \pi$) und Anzahl der Partikel N_p ergibt die effektive Projektionsfläche der Partikelwolke pro

Volumeneinheit. Mit dem spektralen Wirkungsfaktor $Q_{\mu,\lambda}$ wird der jeweilige Anteil der Streuung, Absorption und Extinktion ausgedrückt.

Zur Berechnung der Wirkungsfaktoren wurden zwei frei zugängliche Berechnungsprogramme verwendet. Einerseits die in MATLAB programmierten Berechnungsroutinen von Mätzler (Mätzler 2002) und andererseits die in FORTRAN programmierte Berechnungsroutine MMMIE (Modest 2003). Zur Berechnung des Wirkungsfaktors beziehungsweise der Phasenfunktion ϕ müssen der komplexe Brechungsindex m und die Partikelgröße bekannt sein. Während die Partikelgröße ein relativ einfach zu bestimmender Parameter ist, muss häufig in Bezug auf den komplexen Brechungsindex auf Tabellen zurückgegriffen werden. Biermann untersuchte spezifische unterschiedliche Kohlenaschen (Biermann, Vortmeyer 1969), wobei die Daten von Brummel (Brummel, Kakaras 1990, Brummel, Vortmeyer 1992) zusammengefasst wurden und für Kesselaschen ein repräsentativer komplexer Brechungsindex von $m=1,5-i0,0055$ abgeleitet wurde. Während der Realteil des komplexen Brechungsindex eine vergleichsweise geringe Sensitivität aufweist (1,4 bis 1,6 laut Gupta (Gupta, Wall 1985)) schwankt der Imaginärteil erheblich (Manickavasagam, Menguc 1993, Brummel, Kakaras 1990) zwischen 0,002 und 0,02. Dies kann unter anderem auch darauf zurückgeführt werden, dass der Imaginärteil des komplexen Brechungsindex sehr stark wellenlängenabhängig ist und somit das Messverfahren zur Bestimmung des Brechungsindex ausschlaggebend ist (Manickavasagam, Menguc 1993). Wird der Brechungsindex lediglich durch eine Messung in einem sehr eingeschränkten Wellenlängenbereich bestimmt, kann dieser deutlich vom mittleren Brechungsindex abweichen.

Mit beiden zuvor genannten Berechnungsroutinen ist es möglich, die Wirkungsfaktoren für Absorption und Streuung sowie die Phasenfunktion zu berechnen. Mätzler (Mätzler 2002) implementierte ebenfalls die Berechnung des Rückstreuwirkungsfaktors auf Basis der Radar-Rückstreuung (Bohren, Huffman 1983), wobei dieser Berechnungsansatz für den Rückstreuwirkungsfaktor nicht geeignet ist (Brummel 2006). Die Berechnung des Rückstreuwirkungsfaktors Q_{rstr} sowie des Wirkungsfaktors für Vorwärtsstreuung Q_{vstr} ist bei vereinfachten Modellansätzen von besonderer Bedeutung (siehe Abschnitt 4.3, Seite 97). Da bereits der Streuungswirkungsfaktor $Q_{\sigma,\lambda}$ bekannt ist, können diese auf Basis der Phasenfunktion ϕ berechnet werden.

Da die Phasenfunktion einer normierten Verteilung der Streuung von 0 bis 180° entspricht, kann durch Integrieren der Phasenfunktion von 0 bis 90° der Anteil der vorwärtsgestreuten Strahlung auf Basis des Streuungswirkungsfaktors berechnet werden.

$$Q_{Vstr,\lambda} = Q_{\sigma,\lambda} \cdot \int_0^{90} \phi(\varphi) \cdot d\varphi \quad - \quad (4-38)$$

Analog dazu ergibt sich der Wirkungsfaktor für Rückwärtsstreuung mit

$$Q_{Rstr,\lambda} = Q_{\sigma,\lambda} \cdot \int_{90}^{180} \phi(\varphi) \cdot d\varphi \quad - \quad (4-39)$$

In Abbildung 4-11 sind die Phasenfunktion und Wirkungsfaktoren eines Einzelpartikels für den zuvor angegebenen Bereich des komplexen Brechungsindex dargestellt.

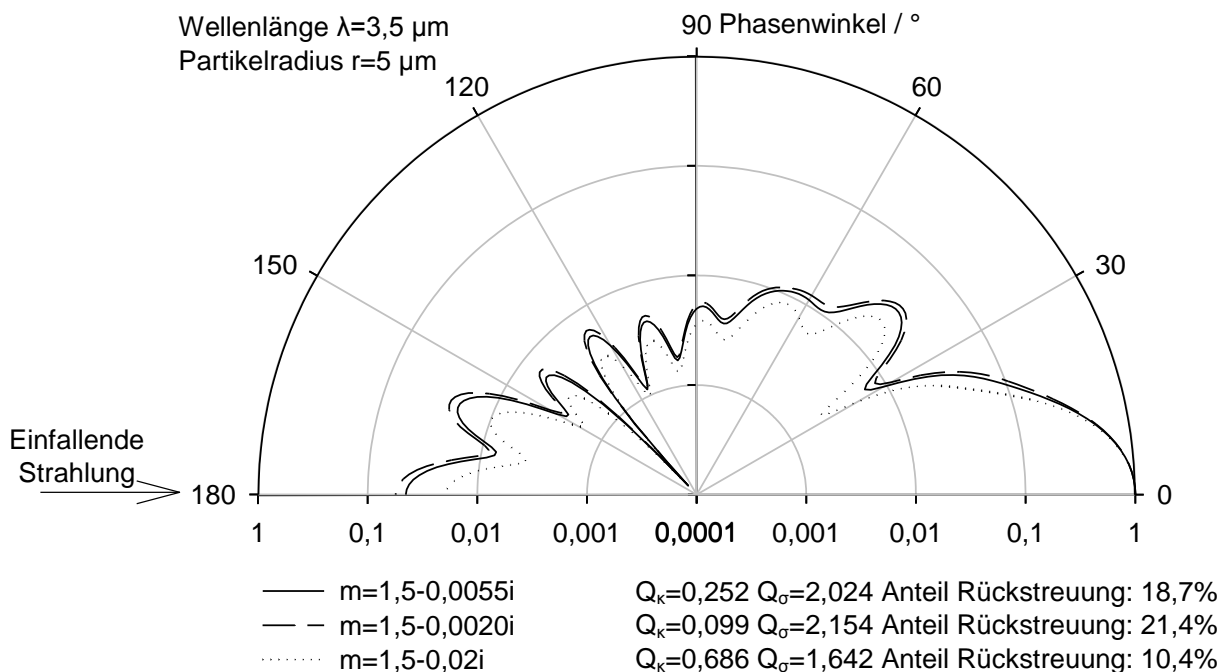


Abbildung 4-11: Normierte Streuungsphasenfunktionen bei konstantem Realteil (1,5) und unterschiedlichen Imaginärteilen des komplexen Brechungsindex sowie die zugehörigen Wirkungsfaktoren und der prozentuelle Anteil der Rückwärtsstreuung bei konstanter Wellenlänge und konstantem Partikelradius

Bei Betrachtung der Phasenfunktion erscheint der Unterschied zwischen den Ergebnissen mit den Imaginärteilen von 0,0055 und 0,002 recht gering, wohingegen bereits ein deutlicher Unterschied des Berechnungsergebnisses bei einem Imaginärteil von 0,02 zu erkennen ist. Beim Vergleich der Ergebnisse in Bezug auf die Wirkungsfaktoren schwanken diese sehr

stark, wobei der Anteil der zurückgestreuten Strahlung zwischen 10,4 und 21,4 % liegt. Da bei der Berechnung des Extinktionskoeffizienten die Wirkungsfaktoren zusammengezählt werden, variieren die Ergebnisse bezogen auf den repräsentativen Brechungsindex um ca. $\pm 2\%$. Während sich die Streuungsphasenfunktion und die Wirkungsfaktoren bei Partikelwolken mit gleichbleibenden Partikelradien nicht ändern, ist es erforderlich, diese Parameter bei Partikelwolken mit variabler Partikelgröße, wie es bei der Kohlenstaubverbrennung der Fall ist, zu gewichten.

Da bei den Berechnungsroutinen von Mätzler lediglich die Streuungsphasenfunktion, die Wirkungsfaktoren und somit auch die Koeffizienten für Einzelpartikel berechnet werden können, mussten die Routinen erweitert werden. Im Falle einer Partikelwolke, die aus unterschiedlichen Partikelgrößen besteht, gilt

$$\mu_{\lambda} = \pi \cdot \int_0^{\infty} Q_{\mu} \cdot r^2 \cdot n(r) \cdot N_P \cdot dr \quad \text{m}^{-1} \quad (4-40)$$

wobei $n(r)$ eine Partikelgrößenverteilungsfunktion und N_P die gesamte Partikelanzahl pro Volumeneinheit darstellen (Manickavasagam, Menguc 1993). Die prozentuelle Aufteilung je nach Partikelgröße innerhalb der Wolke kann unter anderem durch eine erweiterte Gammafunktion

$$n(r) = A \cdot r^{\gamma} \cdot e^{(-B \cdot r^{\delta})} \quad - \quad (4-41)$$

beschrieben werden, wobei die Koeffizienten anhand einer zugrundeliegenden Siebkurve berechnet werden können. Numerisch kann Gleichung (4-41) mit

$$\mu_{\lambda} = \sum_i Q_{\mu,i} \cdot r_i^2 \cdot \pi \cdot N_P \cdot n(r_i) \cdot \delta r_i \quad \text{m}^{-1} \quad (4-42)$$

berechnet werden. Es ist ersichtlich, dass für jede Partikelgröße der zugehörige Wirkungsfaktor berechnet werden muss, um den gewichteten Wirkungsfaktor für die jeweilige Wellenlänge mit

$$Q_{\mu,\lambda} = \frac{\sum_i Q_{\mu,i} \cdot r_i^2 \cdot N_P \cdot n(r_i) \cdot \delta r_i}{\sum_i r_i^2 \cdot N_P \cdot n(r_i) \cdot \delta r_i} \quad - \quad (4-43)$$

berechnen zu können (Manickavasagam, Menguc 1993).

In Abbildung 4-12 sind die Streuungsphasenfunktion und die Wirkungskfaktoren für eine Partikelwolke mit unterschiedlichen Partikelradien bei verschiedenen Imaginärteilen dargestellt.

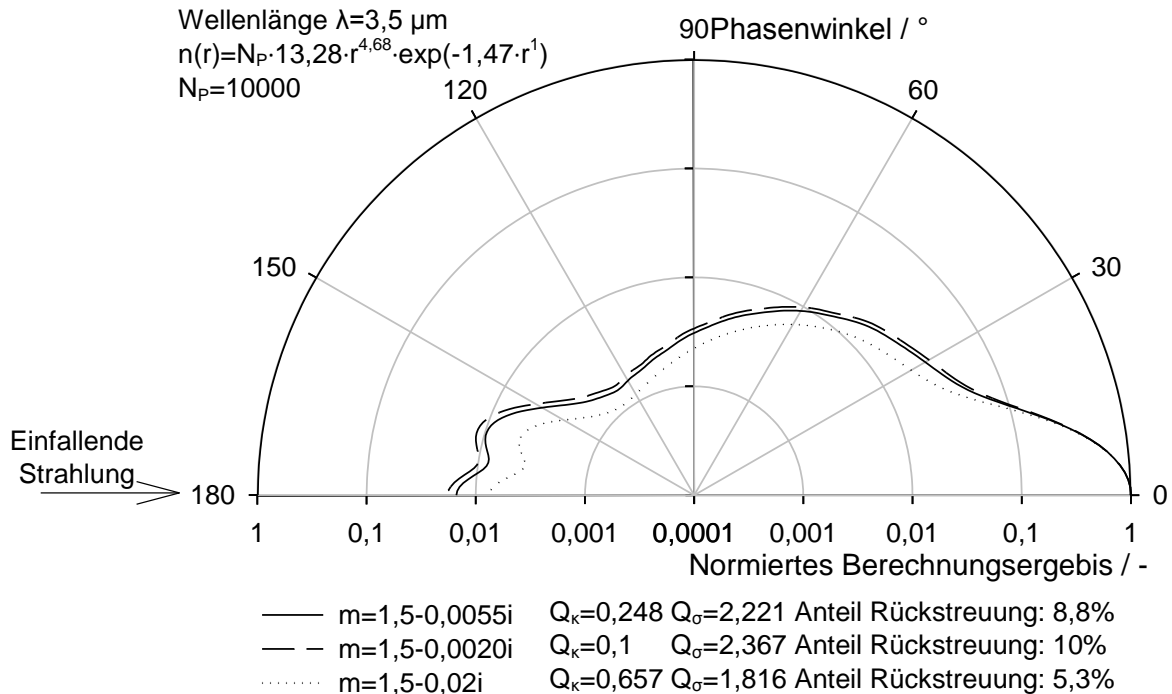


Abbildung 4-12: Normierte Streuungsphasenfunktionen bei konstantem Realteil (1,5) und unterschiedlichen Imaginärteilen des komplexen Brechungsindex sowie die zugehörigen Wirkungskfaktoren und der prozentuelle Anteil der Rückwärtsstreuung bei konstanter Strahlungswellenlänge und einer Partikelwolke

Im Vergleich zum vorhergehenden Diagramm kann erkannt werden, dass die Streuungsphasenfunktionen deutlich glatter verlaufen. Während die Absorptionswirkungskfaktoren näherungsweise gleich bleiben, steigen die Streuungswirkungskfaktoren um ca. 10 % gegenüber jenen der Einzelpartikel an, wobei die Anteile der rückgestreuten Strahlung um über 40 % sinken.

Bisher wurden lediglich Phasenfunktionen und Wirkungskfaktoren am Einzelpartikel oder für Partikelwolken mit unterschiedlichen Partikelradien bei einer konstanten Wellenlänge betrachtet. Wie bereits zuvor erwähnt, können diese jedoch stark mit der Wellenlänge variieren, da sich durch die Änderung der Wellenlänge der Größenparameter x nach Gleichung (4-35) ebenfalls ändert. In Abbildung 4-13 ist dieser Sachverhalt für eine Partikelwolke mit unterschiedlichen Partikelradien bei unterschiedlichen Wellenlängen dargestellt.

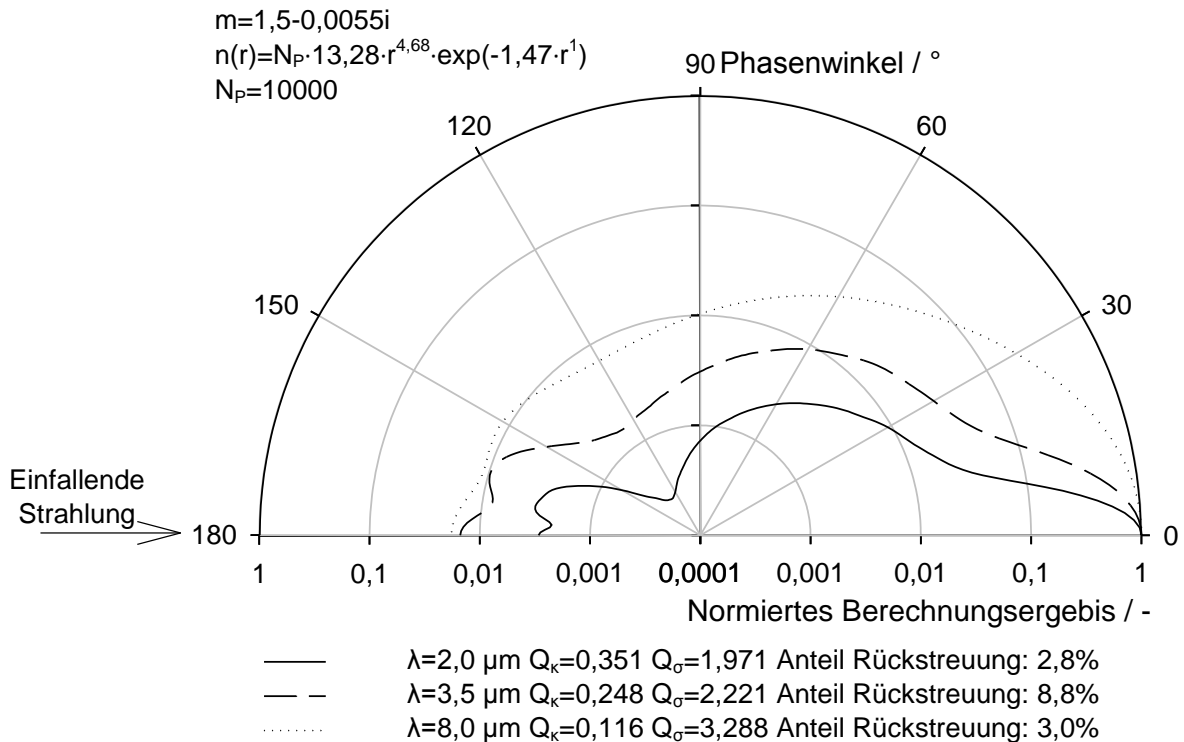


Abbildung 4-13: Normierte Streuungsphasenfunktionen bei konstantem komplexen Brechungsindex bei unterschiedlichen Wellenlängen sowie die zugehörigen Wirkungskfaktoren und der prozentuelle Anteil der Rückwärtsstreuung einer Partikelwolke mit unterschiedlichen Partikelradien

Es ist zu erkennen, dass sich einerseits die Streuungsphasenfunktionen und andererseits die Wirkungskfaktoren sehr stark mit der Wellenlänge der auf das Partikel auftreffenden Strahlung ändern.

Um jedoch ein allgemeines Modell zur Berechnung von Wirkungskfaktoren und Streuungsphasenfunktionen zu erhalten, muss dieser Sachverhalt berücksichtigt werden. Da die Strahldichte der jeweiligen Wellenlänge wiederum temperaturabhängig ist, bietet es sich an, als Gewichtungsfunktion (J_λ) die Intensitätsverteilung des schwarzen Strahlers, die anhand des Planck'schen Gesetzes berechnet werden kann, zu verwenden. Somit kann für die gewichteten Wirkungskfaktoren folgende Gleichung verwendet werden:

$$\bar{Q}_\mu = \frac{\int_0^\infty Q_{\mu,\lambda} \cdot J_\lambda \cdot d\lambda}{\int_0^\infty J_\lambda \cdot d\lambda} \quad - \quad (4-44)$$

wobei

$$J_{\lambda} = \frac{c_1 \cdot \lambda^{-5}}{e^{\left(\frac{c_2}{T \cdot \lambda}\right)} - 1} \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-3} \quad (4-45)$$

mit $c_1=0.1191062 \cdot 10^{-15} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$ und $c_2=0.01438786 \text{ m} \cdot \text{K}$ berechnet wird (Brummel, Kakaras 1990).

In Abbildung 4-14 sind drei gewichtete Streuungsphasenfunktionen bei unterschiedlichen mittleren Partikelradien dargestellt.

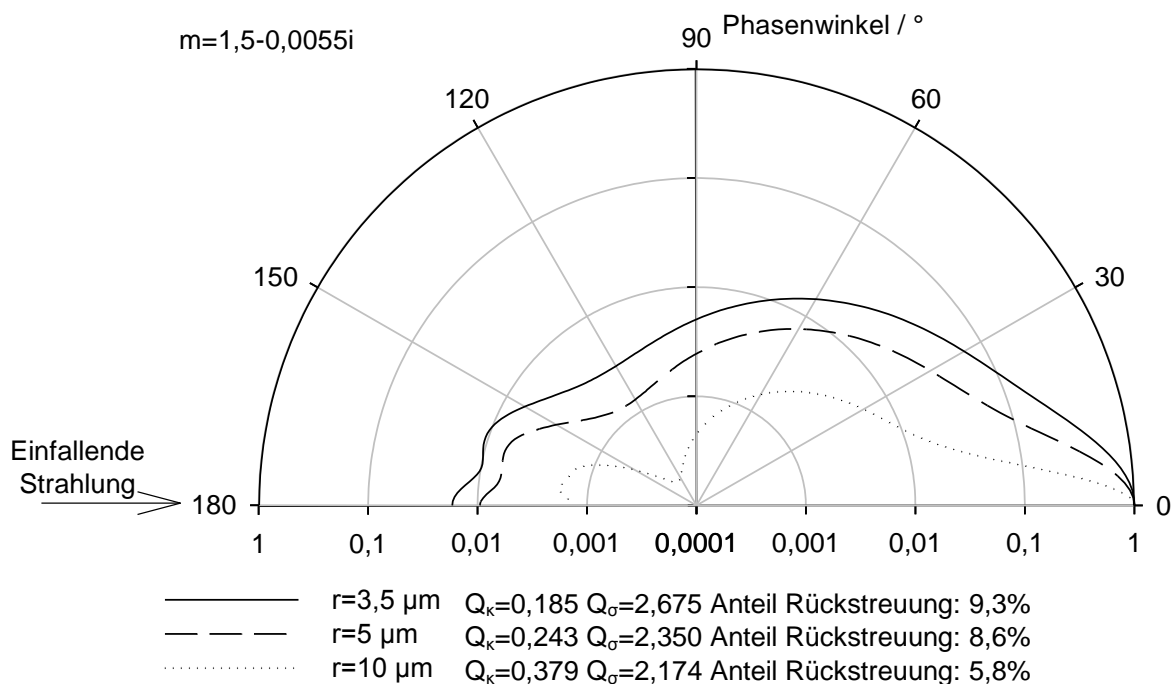


Abbildung 4-14: Normierte gewichtete Streuungsphasenfunktionen bei konstantem komplexen Brechungsindex bei unterschiedlichen Partikelradien sowie die zugehörigen Wirkungskoeffizienten und der prozentuelle Anteil der Rückwärtsstreuung ($T=1200 \text{ K}$)

Durch die Gewichtung der einzelnen Streuungsphasenfunktionen bei unterschiedlichen Wellenlängen wird der Verlauf der Streuungsphasenfunktion geglättet. Dieser Effekt konnte bereits in Abbildung 4-12 und Abbildung 4-13 für Partikelwolken mit unterschiedlichen Partikelradien beobachtet werden. Dies kann darauf zurückgeführt werden, dass es sich in beiden Fällen um eine Gewichtung bei variablem Größenparameter x handelt, wobei die Wirkungskoeffizienten deutliche Unterschiede aufweisen. Des Weiteren kann erkannt werden, dass für Kohlenstaubaschen eine stark vorwärtsgerichtete Streuung stattfindet und der Anteil der Rückwärtsstreuung durchwegs unter 10 % von der gesamten Streuung liegt.

Auf Basis der hier dargestellten Berechnungsverfahren ist es nun möglich, Berechnungen für den einzelnen Anwendungsfall in Bezug auf Korngrößenverteilung und Partikeleigenschaften durchzuführen und den Absorptions- und Rückstreuwirkungsfaktor zu berechnen. Anhand der in Anhang B angeführten Randbedingungen ergibt sich somit ein Rückstreuanteil von 4 % von der gesamten Streuung. Um vereinfachte Berechnungen durchzuführen, erscheint jedoch die Berechnung der spezifischen Wirkungsfaktoren sehr aufwändig, da sich zum Beispiel in Hinblick auf die Kohlenstaubverbrennung einerseits die Partikeleigenschaften und andererseits die Korngrößenverteilung während der Verbrennung ändern. Eine Alternative stellt hierbei die Berechnung von gewichteten Wirkungsfaktoren auf Basis von gemittelten Partikelradien dar (Abbildung 4-15). Die Berechnung wurde mit den zuvor beschriebenen Berechnungsgleichungen und dem eigens dafür erweiterten Programm von Mätzler (Mätzler 2002) durchgeführt.

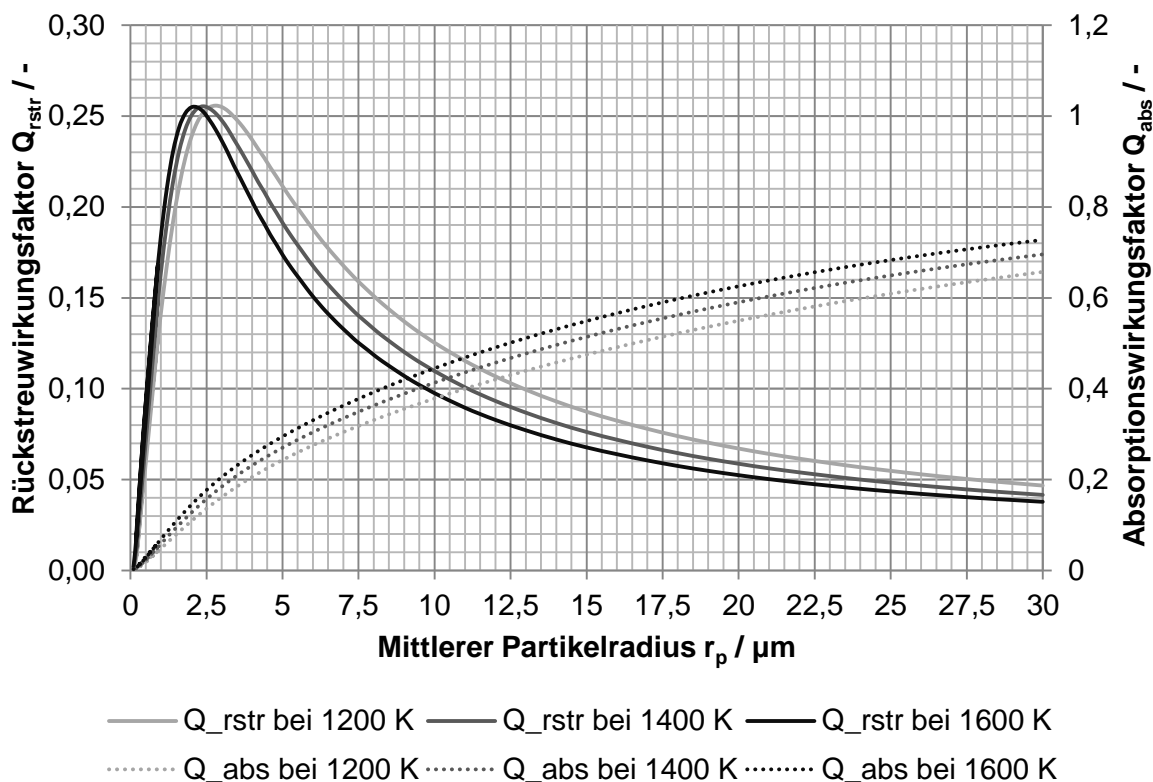


Abbildung 4-15: Absorptions- und Rückstreuwirkungsfaktoren bei unterschiedlichen Temperaturen und mittleren Partikelradien ($m=1,5-0,0055i$)

Anhand des Diagramms ist ersichtlich, dass der Rückstreuwirkungsfaktor im Bereich von ca. 8 μm ein Maximum erreicht und danach wiederum abnimmt. Es ist ebenfalls ersichtlich, dass bei steigenden Partikelradien der prozentuelle Anteil der Rückwärtsstreuung bezogen auf den Absorptionswirkungsfaktor deutlich kleiner wird und zur Vereinfachung der Strahlungsberechnung bei großen Partikelradien auch vernachlässigt werden kann. Bei

Betrachtung der Wirkungsfaktorverläufe bei unterschiedlichen Temperaturen ist ersichtlich, dass das Maximum des Rückstreuwirkungsfaktors mit steigender Temperatur in Richtung kleinerer Partikelradien verschoben wird, wobei im Schnitt bei größeren Partikelradien, bei steigender Temperatur, der Rückstreuwirkungsfaktor kleiner ausfällt. In Bezug auf den Absorptionswirkungsfaktor kann erkannt werden, dass mit steigender Temperatur ebenso der Absorptionswirkungsfaktor zunimmt. Auf Basis der in diesem Abschnitt gezeigten Berechnungsergebnisse ist es nun möglich, vereinfachte Strahlungsberechnungen für Gas-Partikel-Gemische durchzuführen und Randbedingungen für die numerische Simulation abzuleiten.

4.3 Vereinfachte Berechnung des Emissionsgrades von Gas-Partikel-Gemischen

In den zwei vorhergehenden Abschnitten wurden mögliche Berechnungsansätze zur Abschätzung der Strahlungseigenschaften von Gasen und Partikeln getrennt dargestellt. Zur Berechnung der Strahlungseigenschaften beziehungsweise der Strahlungsintensität der Gas-Partikel-Suspension müssen diese zusammengeführt werden.

Ein einfacher Berechnungsansatz wurde von Biermann (Biermann, Vortmeyer 1969) auf Basis eines Zweiflussmodells entwickelt, welcher von Brummel (Brummel, Kakaras 1990) durch die Berücksichtigung der Rückwärtsstreuung der Strahlung durch Partikel erweitert wurde. Streng genommen hat dieser Berechnungsansatz nur dann Gültigkeit, wenn sowohl für die Gasphase als auch die Partikel eine gleiche Schichtdicke angenommen werden kann und eine konstante Temperatur innerhalb des zu betrachtenden Bereichs vorliegt. Auf Basis dieser Annahmen ergibt sich folgender Berechnungsansatz:

$$\varepsilon_{G+P} = (1 - \xi) \cdot \frac{1 - e^{-(Q_{abs} \cdot A_P \cdot B_P + \kappa_G) \cdot s_{gl} \cdot \psi}}{1 + \xi \cdot e^{-(Q_{abs} \cdot A_P \cdot B_P + \kappa_G) \cdot s_{gl} \cdot \psi}} \quad - \quad (4-46)$$

$$\xi = \frac{\psi - 1}{\psi + 1} \quad - \quad (4-47)$$

$$\psi = \left(1 + \frac{2 \cdot Q_{rstr}}{Q_{abs}} \right)^{0,5} \quad - \quad (4-48)$$

Aufgrund der zuvor getroffenen Annahmen überlagern sich die Absorptionskoeffizienten der Gas- und Partikelphase additiv. Aus Gleichung (4-46) kann ebenfalls der Emissionsgrad der Partikelphase durch Streichen des Absorptionskoeffizienten der Gasphase berechnet werden, wobei A_P und B_P die spezifische Projektionsfläche der Partikel (in $\text{m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$)

beziehungsweise die Beladungsdichte (in $\text{kg}\cdot\text{m}^{-3}$) darstellen. Q_{abs} beziehungsweise Q_{rstr} können für die vorliegende Brennkammertemperatur und den mittleren Partikelradius der Feststoff-Phase aus Abbildung 4-15 entnommen werden. Der Absorptionskoeffizient der Gasphase k_{λ} kann anhand unterschiedlicher Modelle (z.B. VDI-Wärmeatlas Verein Deutscher Ingenieure 2006) berechnet werden. Die hier gezeigte Berechnungsmethode eignet sich ebenfalls gut zur Berechnung des spektralen Emissionsgrades. Dies kann insofern von Interesse sein, wenn Strahlungsmessungen an Gas-Feststoff-Suspensionen durchgeführt werden. Ebenso können somit Variationsberechnungen durchgeführt werden, um den Einfluss der Partikelphase auf den Gesamtemissionsgrad untersuchen zu können.

In Abbildung 4-16 ist der Einfluss von Partikeln auf den Gesamtemissionsgrad gegenüber reiner Gasstrahlung abgebildet.

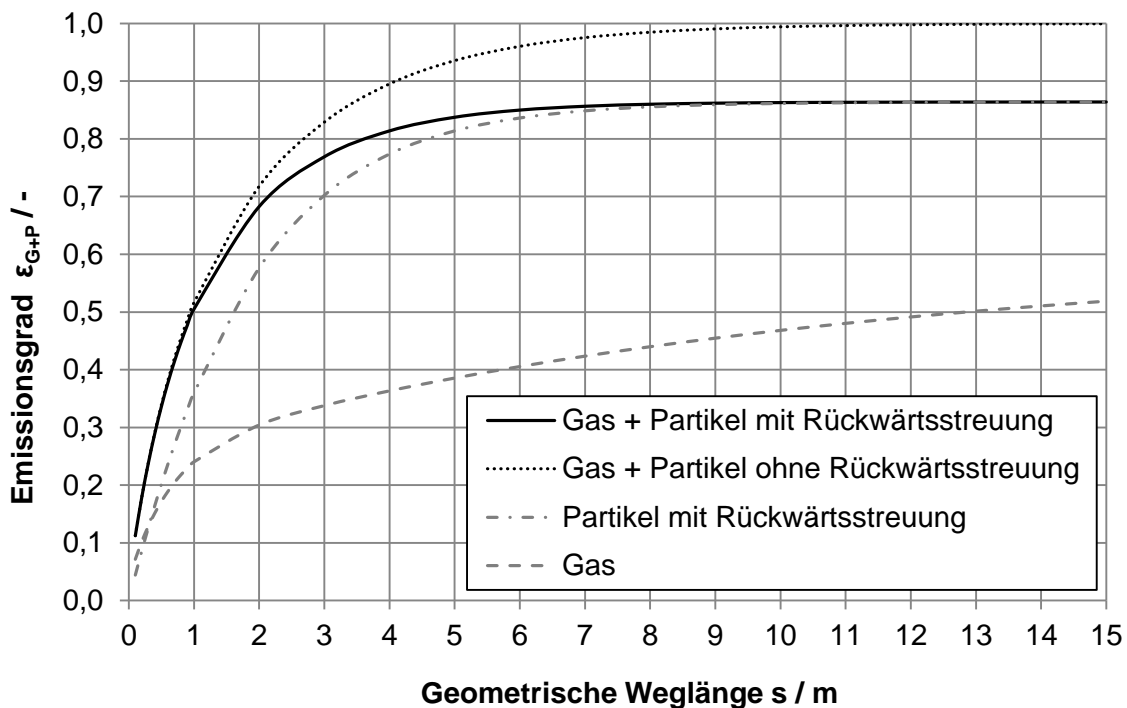


Abbildung 4-16: Emissionsgradverläufe bei variabler geometrischer Weglänge und konstanter Partikelbeladung ($B_P=0,02 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$, schwarze Linien), nur Partikel mit Rückwärtsstreuung (Partikeldurchmesser $d_P=20 \text{ }\mu\text{m}$, $Q_{\text{abs}}=0,38$, $Q_{\text{rstr}}=0,12$, $A_P=60 \text{ m}^2\cdot\text{kg}^{-1}$) und der Gasphase (1300 K Rauchgastemperatur, $p_{\text{H}_2\text{O}}=0,0748 \text{ bar}$, $p_{\text{CO}_2}=0,1521 \text{ bar}$, $p_{\text{O}_2}=0,0263 \text{ bar}$, $p_{\text{N}_2}=0,7468 \text{ bar}$)

Es ist zu erkennen, dass die Partikel in der Gasphase einen deutlichen Einfluss auf den Gesamtemissionsgrad haben. Im Diagramm sind zwei Gesamtemissionsgradverläufe dargestellt (schwarze Linien). Während bei der gepunkteten Linie lediglich Absorption durch Partikel berücksichtigt wurde, wurde bei der durchgezogenen Linie die Rückwärtsstreuung der Partikel miteinbezogen, wodurch der Gesamtemissionsgrad deutlich geringer ausfällt. Dies deutet darauf hin, dass je nach Beschaffenheit der Partikel der

Einfluss der Rückwärtsstreuung berücksichtigt werden sollte. Während bei geringen geometrischen Weglängen die auftretende Strahlung der Gasphase den Gesamtemissionsgrad in diesem Fall noch beeinflusst, dominieren die Partikel ab einer geometrischen Weglänge von etwa sieben Metern die Strahlung der Gas-Feststoff-Suspension, trotz eines weiteren Ansteigens des Gasemissionsgrades, wie am Emissionsgradverlauf der Partikel mit Rückwärtsstreuung und dem Gasemissionsgradverlauf zu erkennen ist. Während im zuvor gezeigten Diagramm die Feststoffbeladung konstant gehalten wurde, wurde in der Berechnung für Abbildung 4-17 die Beladung bei zwei unterschiedlichen geometrischen Weglängen der Gasphase mit Partikeln variiert.

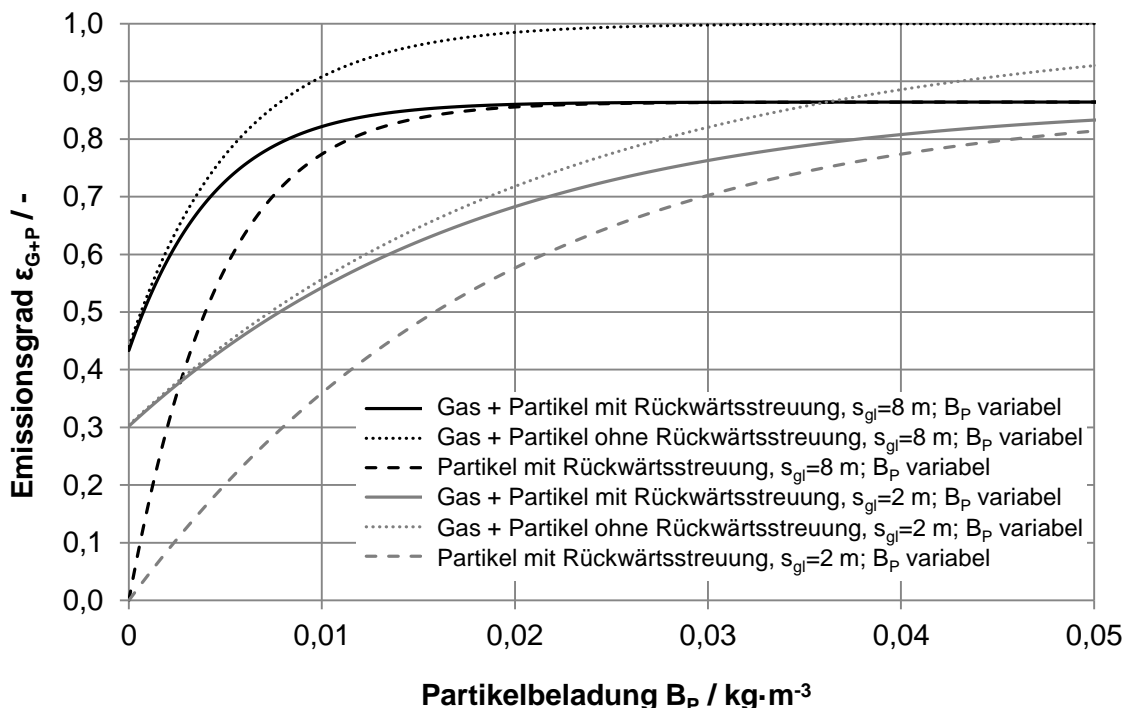


Abbildung 4-17: Gesamtemissionsgradverläufe bei variabler Partikelbeladung und konstanten geometrischen Weglängen ($s_{gf}=2$ und 8 m , Partikeldurchmesser $d_p=20\text{ }\mu\text{m}$, $Q_{abs}=0,38$, $Q_{rstr}=0,12$, $A_P=60\text{ m}^2\cdot\text{kg}^{-1}$, 1300 K Rauchgastemperatur, $p_{H_2O}=0,0748\text{ bar}$, $p_{CO_2}=0,1521\text{ bar}$, $p_{O_2}=0,0263\text{ bar}$, $p_{N_2}=0,7468\text{ bar}$)

Es ist zu erkennen, dass der Gesamtemissionsgrad und ebenfalls der Einfluss der Rückwärtsstreuung auf den Gesamtemissionsgrad von der Partikelbeladung abhängig sind. Wie schon beim vorhergehenden Diagramm ersichtlich, dominiert bei größeren geometrischen Weglängen (8 m) die Strahlung durch Partikel, wobei bei schwach beladenen Systemen bis zu einer Beladungsdichte von ca. $0,02\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ die Gasstrahlung den Gesamtemissionsgrad beeinflusst. Bei geringeren geometrischen Weglängen (2 m) dominiert die Partikelstrahlung erst bei gesteigerter Beladungsdichte den Gesamtemissionsgrad. Auf Basis der zwei gezeigten Diagramme ist zu erkennen, dass bei

partikelbeladenen Systemen die Strahlungseigenschaften von Partikeln eine wichtige Rolle spielen können und somit bei der Berechnung der Wärmeübertragung durch Strahlung in kohlenstaubgefeuerten Brennkammern berücksichtigt werden sollten.

5 Numerische Simulation

Für die numerische Simulation der in Abschnitt 3.3.2 beschriebenen Versuche wurde im Rahmen dieser Arbeit das kommerzielle CFD-Simulationsprogramm ANSYS Fluent 14.0 verwendet, da bei diesem Programm bereits Modelle für die in Abschnitt 2.2 erwähnten Mechanismen zur Verfügung stehen beziehungsweise die Möglichkeit besteht, eigene Modelle oder Submodelle durch User Defined Functions (UDF) in die Simulation zu implementieren.

In den folgenden Abschnitten werden die Geometrieerzeugung und Gittergenerierung sowie die gewählten Submodelle mit den zugehörigen Randbedingungen beschrieben. In weiterer Folge werden die Vorgehensweise während der Simulation und die Simulationsergebnisse mit unterschiedlichen Berechnungsmodellen in Bezug auf die Berechnung der Strahlungseigenschaften der Gas- und Partikelphase dargestellt.

5.1 Geometrieerzeugung und Gittergenerierung

Zur Erzeugung der Brenner- und Brennkammergeometrie und zur Gittergenerierung wurde das Programm Gambit 2.4.6 verwendet. Da keine genauen Messungen in Bezug auf den Drallerzeuger durchgeführt wurden und daher keine Daten vorliegen, inwiefern eine gleichmäßige Verdrallung des Sekundärvolumenstroms stattfindet, wurde der gesamte Brenner sowie die Brennkammer der Versuchsanlage der Fa. ENEL dreidimensional dargestellt. Wie in Abschnitt 3.1 bereits beschrieben, besteht die Brennkammer aus 11 Segmenten (siehe Abbildung 3-3, Seite 20). Die ersten drei Segmente der Brennkammer (linke Seite) werden nicht gekühlt, die weiteren acht Segmente können über Kühlkreisläufe und koaxiale Kühlrohre gekühlt werden.

Da die Implementierung der gesamten Geometrie der innenliegenden Teile der Brennkammer äußerst aufwändig und nicht zielführend erscheint, wurden bei der Geometrieerzeugung die Brennkammersegmente in jeweils drei Untersegmente unterteilt, wobei diese zur Vorgabe von Wärmestromdichten oder Temperaturprofilen genutzt werden können (siehe Abbildung 5-1).

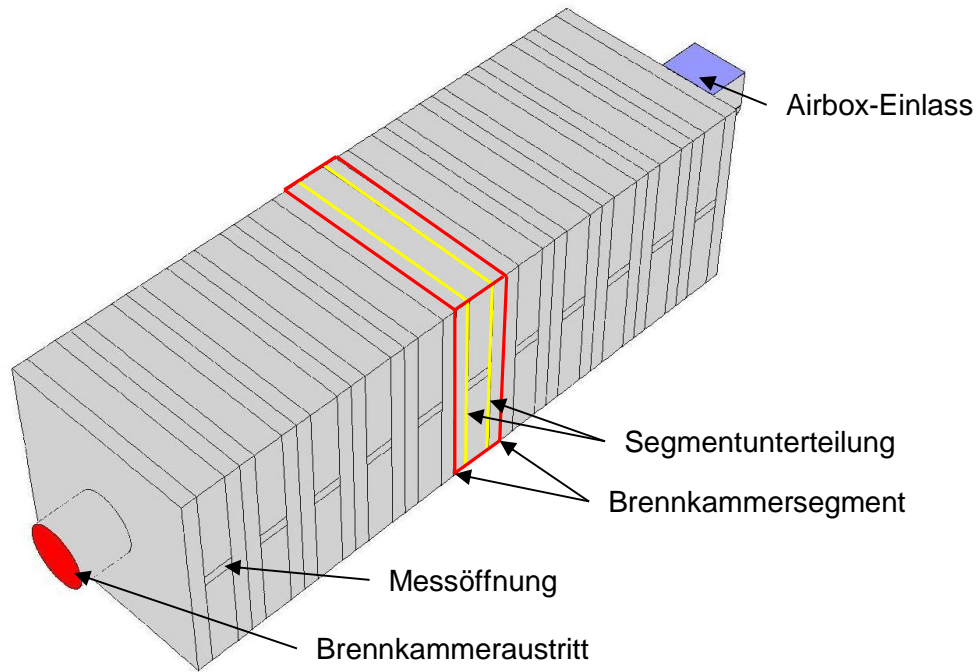


Abbildung 5-1: Geometrie und Flächenunterteilung der modellierten Versuchsbrennkammer

Bei der Geometrierzeugung des Brenners wurde der Drallerzeuger des Sekundärstroms ebenfalls implementiert, da eine Abschätzung der Tangentialgeschwindigkeitskomponente mit den vorhandenen Daten nicht möglich ist. In Abbildung 5-2 ist ein Schnittbild durch den Brenner mit den zugehörigen Kanälen dargestellt.

Da die Volumenströme des Sauerstoff- und Primärstroms nicht verdrallt werden, wurden die Masseneinlässe 300 mm beziehungsweise 350 mm vor der Brennermündung definiert. Da lediglich der im Detail untersuchte Betriebsfall simuliert werden soll, wurde die Sauerstoffinjektorposition mit 20 mm fixiert (siehe Tabelle 3-4, Seite 47). Ebenso wurde die Drallerzeugerposition mit 40 mm fixiert. In Abbildung 5-2 ist die in Gambit erzeugte Drallerzeugergeometrie dargestellt.

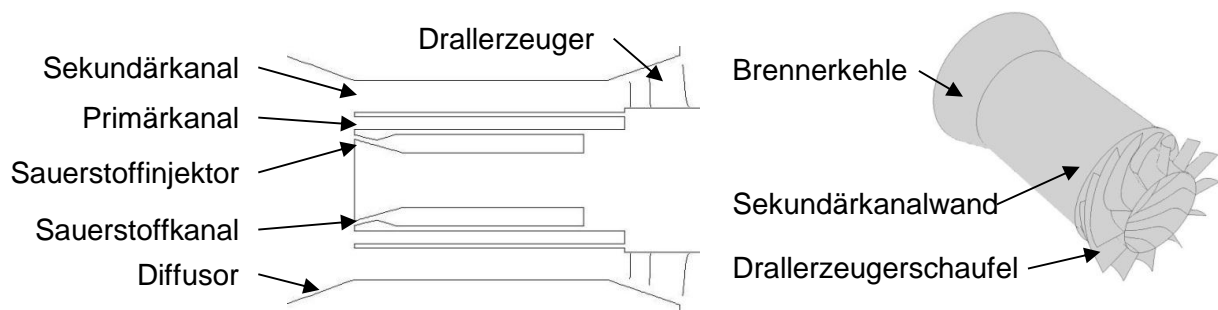


Abbildung 5-2: Schnitt durch den Brenner mit den zugehörigen Zuströmkanälen (links) und Detaildarstellung des Drallerzeugerschaukelgitters (rechts)

Nach der Fertigstellung der Geometrie wurde mit der Gittergenerierung begonnen. Da bei der Turbulenzmodellierung Standard-Wandfunktionen verwendet werden, musste zuvor die Lage der ersten Knotenpunkte von der jeweiligen Wand abgeschätzt werden. Dabei wurde nach den Vorlesungsunterlagen von Martens (Martens 2010) vorgegangen. Zur Berechnung der Reynoldszahl (Re) wurden die berechneten Volumenströme aus dem thermodynamischen Kreisprozesssimulationsprogramm IPSEpro und die Auslegungsquerschnitte des Brenners herangezogen. Zur Abschätzung der Oberflächenreibungskoeffizienten \bar{c}_f für Rohr-strömungen wurde folgende Gleichung verwendet:

$$\frac{\bar{c}_f}{2} \approx 0,039 \cdot Re^{-0,2} \quad - \quad (5-1)$$

womit die Wandschubspannungsgeschwindigkeit u_τ anhand

$$u_\tau = U \cdot \sqrt{\frac{\bar{c}_f}{2}} \quad \text{m} \cdot \text{s}^{-1} \quad (5-2)$$

berechnet werden kann. Durch die Wahl eines entsprechenden y^+ -Wertes (für Standard-Wandfunktionen sollte dieser zwischen 30 und 300 liegen) kann der Abstand des ersten Knotenpunktes y_P mit

$$y_P = \frac{y_P^+ \cdot \nu}{u_\tau} \quad \text{m} \quad (5-3)$$

unter Verwendung der kinematischen Viskosität ν des jeweiligen Fluids berechnet werden.

Bei komplexen Geometrien werden häufig tetraederförmige Berechnungsgitter verwendet, da diese deutlich flexibler einsetzbar sind und meist automatisch generiert werden können. Aufgrund der schlechten Raumauffüllung von Tetraedern (ein Tetraeder hat nur 1/6 des Volumens im Vergleich zu einem Quader mit gleicher Kantenlänge) ist eine deutlich höhere Anzahl an Volumenelementen notwendig, um eine ähnliche Auflösung im Vergleich zu einem Gitter aus Hexaedern zu erreichen.

Durch sinnvolles Aufteilen der jeweiligen Volumina, speziell im Bereich des Drallerzeugers, war es möglich, ein Berechnungsgitter aus Hexaedern für die gesamte Brenner- und Brennkammergeometrie zu erzeugen. In Abbildung 5-3 ist der Brennermündungsbereich mit dem erzeugten Berechnungsgitter dargestellt.

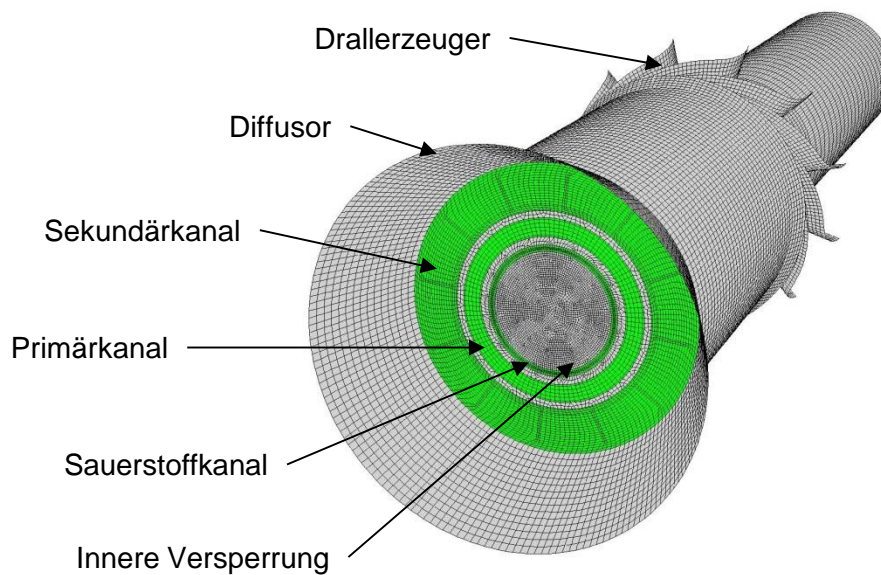


Abbildung 5-3: Darstellung des Brennermündungsbereichs mit Berechnungsgitter

Da ebenfalls auf „non-conformal“-Berechnungsgitter verzichtet wurde, war es notwendig, die Gitterfeinheit durch die gesamte Brennkammer beizubehalten, woraus in Summe für das gesamte Berechnungsgebiet 3,7 Millionen Volumina resultieren. Während der Erstellung des Berechnungsgitters wurde fortlaufend die Gitterqualität anhand folgender Indikatoren überprüft:

Beim Squish Index werden die Skalarprodukte der Vektoren vom Zellenmittelpunkt zu den Flächenmittelpunkten der umhüllenden Flächen ($\vec{r}_{c0,i}$) und den zugehörigen Flächenvektoren ($\vec{A}_{c0,i}$) berechnet:

$$\max \left(1 - \frac{\vec{A}_i \cdot \vec{r}_{c0,i}}{|\vec{A}_i| \cdot |\vec{r}_{c0,i}|} \right) \quad - \quad (5-4)$$

Im schlechtesten Fall nimmt der Index den Wert 1 an.

Es sei darauf hingewiesen, dass sich bei den einzelnen Programmversionen von ANSYS Fluent die Definition des Squish Index insofern ändert, als bei neueren Versionen die Subtraktion von 1 in Gleichung (5-4) weggelassen wird und somit der bestmögliche Squish Index den Wert 1 annimmt. Der Index kann somit als Maß für die Abweichung von der Orthogonalität der Flächenelemente der jeweiligen Zelle interpretiert werden. Beim erstellten Berechnungsgitter weisen 99,5 % der Zellen einen Squish Index $<0,25$ auf (ausgehend von Gleichung 5-3), wobei das schlechteste Element einen Squish Index von 0,8 hat.

Welchen Wert der Squish Index maximal annehmen darf, ist nicht genau fixiert, es wird jedoch als Faustregel die Obergrenze mit 0,99 für alle Zellentypen angegeben (Ansys 2011b).

Als weiteres Qualitätskriterium zur Bewertung der generierten Volumenelemente wird häufig der Aspect Ratio herangezogen, anhand dessen die Dehnung der Berechnungsvolumina angegeben wird. Dabei wird das Verhältnis von Maximum und Minimum der Abstände zwischen dem Zellenmittelpunkt und den Zellenflächen und den Zellenknotenpunkten berechnet.

$$\frac{\max[e_1, e_2, \dots, e_n]}{\min[e_1, e_2, \dots, e_n]} \quad - \quad (5-5)$$

Generell sollte sich der Aspect Ratio in Bereichen hoher Gradienten des Strömungsfeldes nicht stark ändern und gering gehalten werden (<10). Daher wurde im zu erwartenden Flammenbereich darauf geachtet, dass dieser Wert nicht überschritten wird. Stromabwärts in der Brennkammer wurden Werte <35 realisiert, um die Anzahl der Berechnungsvolumina möglichst gering zu halten.

Zusätzlich wurde die Equiangle Skewness überprüft, durch die die Abweichung der Zellenwinkel vom equilateralen Winkel angegeben wird (bei Hexaedern 90°).

$$\max \left[\frac{\Theta_{\max} - \Theta_e}{180 - \Theta_e}, \frac{\Theta_e - \Theta_{\min}}{\Theta_e} \right] \quad - \quad (5-6)$$

Im schlechtesten Fall ergibt sich für die Equiangle Skewness der Wert 1. In Tabelle 5-1 ist eine qualitative Bewertung der Zellelemente in Abhängigkeit von der Equiangle Skewness angeführt.

Tabelle 5-1: Qualität der Berechnungsgitter in Abhängigkeit von der Equiangle Skewness (Fluent Inc. 2006)

Equiangle Skewness (ES)	Qualität
0	Idealfall
0<ES≤0,25	Sehr Gut
0,25<ES≤0,5	Gut
0,5<ES≤0,75	Ausreichend
0,75<ES≤0,9	Schlecht
0,9<ES<1	Sehr schlecht
ES=1	Unbrauchbar

Beim vorliegenden Berechnungsgitter liegt der Wert bei 90 % der Zellen unter 0,25, bei 99,5 % der Zellen unter 0,5 und für 100 % der Zellen unter 0,75.

In weiterer Folge wurde mit dem ersten Simulationssetup (Abschnitt 5.3.1) das Berechnungsgitter in Bezug auf die y^+ -Werte überprüft. Aufgrund der hohen Anzahl an Berechnungsvolumina wurde keine generelle Verfeinerung des Berechnungsgitters durchgeführt, um die Gitterunabhängigkeit zu überprüfen, sondern in ANSYS Fluent das Berechnungsgitter unter Zuhilfenahme der Temperaturgradienten adaptiert und das daraus resultierende Berechnungsergebnis mit dem vorhergehenden Ergebnis verglichen. Dabei stellte sich heraus, dass der Unterschied zwischen den Berechnungsergebnissen mit dem adaptierten und dem Basisberechnungsgitter sehr gering war. Folglich wurde auf das Basisgitter zurückgegriffen.

5.2 Modellwahl und Randbedingungen

Wie bereits in Abschnitt 2.2 beschrieben, ist eine Vielzahl von Submodellen notwendig, um eine kohlenstaubgefeuerte Brennkammer numerisch zu simulieren. In den folgenden Abschnitten wird auf die Auswahl der einzelnen Submodelle eingegangen, wobei wiederum der Schwerpunkt bei der Strahlungsmodellierung liegt. Bei der Modellwahl wurde versucht, die zur Verfügung stehenden Rechnerkapazitäten zu berücksichtigen, um auch für die Industrie ein Werkzeug zur Verfügung stellen zu können, mit dem bereits gute Simulationsergebnisse erreicht werden können.

5.2.1 Turbulenzmodell

Sehr viele technisch relevante Strömungen sind turbulent. Grundsätzlich wird die Turbulenz durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben, wobei eine Direkte-Numerische-Simulation (DNS) bei derzeit gängigen Rechnerleistungen nur bei geringen Reynolds-Zahlen möglich beziehungsweise sinnvoll erscheint. Dies liegt darin begründet dass durch das Rechengitter ebenfalls die kleinsten Turbulenzstrukturen (Kolmogorov-Skalen) erfasst werden müssen, wodurch der Berechnungsaufwand in etwa zur dritten Potenz der Reynolds-Zahl steigt (Gerlinger 2005, Epple 2009, Ferziger, Perić 2008). Eine Möglichkeit, den Berechnungsaufwand zu verringern, stellt die Large-Eddy-Simulation (LES) dar. Dabei werden lediglich die kleineren Wirbel (Subgrid Scale) modelliert und die größeren Wirbel durch eine direkte numerische Simulation berechnet. Trotz der zu erwartenden höheren Genauigkeit der LES gegenüber Reynolds-Averaged-Navier-Stokes-Gleichungen (RANS) wurde die LES bisher kaum bei der Simulation von kohlegefeuerten Brennern

beziehungsweise Brennkammern verwendet (Edge et al. 2010). Ein Grund dafür ist der dennoch verhältnismäßig hohe Berechnungsaufwand gegenüber RANS-Modellen.

Bei RANS-Modellen werden die durch die Geschwindigkeitsfluktationen verursachten Schwankungen der darin transportierten Größen in einen Mittelwert und einen Schwankungswert aufgeteilt, woraus ein nicht geschlossenes Gleichungssystem resultiert. Um das Gleichungssystem letztlich zu schließen, müssen Modellgleichungen verwendet werden.

In ANSYS Fluent stehen einige Modelle zur Turbulenzmodellierung zur Verfügung. Sehr häufig werden Zweigleichungsmodelle für industrielle Anwendungen eingesetzt (k - ϵ , k - ω , etc.), wobei das k - ϵ -Modell (Launder, Spalding 1974) und dessen Derivate nach wie vor sehr häufig eingesetzt werden (siehe auch Anhang D, Seite 153). Ein Nachteil des k - ϵ -Modells ist, dass die turbulenten Eigenschaften isotrop behandelt werden, wodurch für nicht gewundene Stromlinien deutlich bessere Vorhersagen als bei verdrallten Strömungen erzielt werden (Epple et al. 2009). Daher wurden Modellverbesserungen vorgenommen, aus denen zum Beispiel das RNG- k - ϵ -Modell (Renormalization Group, RNG) und das relizable- k - ϵ -Modell hervorgingen, wobei mit beiden Modellen deutlich bessere Ergebnisse bei drallbehafteten Strömungen erzielt werden.

Beim Reynolds-Stress-Modell (RSM) werden anstatt der Annahme einer isotropen Strömung die Reynolds-Spannungen in Kombination mit einer Gleichung zur Berechnung der Dissipationsrate berechnet, wodurch sich im dreidimensionalen Fall sieben zusätzliche Gleichungen ergeben. Da nun die Effekte starker Stromlinienkrümmungen berücksichtigt werden, eignet sich das RSM besonders zur Berechnung von Zyklonabscheidern oder hochverdrallten Strömungen in Brennkammern. Aufgrund der höheren Anzahl an Gleichungen, die gelöst werden müssen, wird das RSM nicht generell für verdrallte Strömungen empfohlen (Ansys 2011a).

Letztlich wurde das RSM gewählt, da im Rahmen des „Friendly Coal“-Projektes bereits gute Erfahrungen mit dem Modell gesammelt wurden und ebenfalls Referenzflammen der IFRF mit hoher Genauigkeit (Brunetti et al. 2009) berechnet werden konnten.

5.2.2 Partikel- und Gasphasen-Modellierung

In ANSYS Fluent steht zur Berechnung der diskreten Phase das Discrete-Phase-Modell (DPM) zur Verfügung, das auf einem Euler-Lagrange-Ansatz beruht (Ansys 2011a). Während die Fluidphase durch die Navier-Stokes-Gleichungen beschrieben wird, werden die im System befindlichen Partikel durch Trajektorien bei bestimmten Intervallen berechnet,

wobei die Interaktionen der Partikel mit der Gasphase in Form von Impuls-, Energie- und Massenaustausch berücksichtigt werden.

In ANSYS Fluent besteht die Möglichkeit, unterschiedliche am Partikel angreifende äußere Kräfte zu berücksichtigen, wobei im Falle einer Kohlenstaubverbrennung der Strömungswiderstand dominiert und nur dieser berücksichtigt wird, da sowohl die Gewichtskraft als auch die Auftriebskraft vergleichsweise gering sind. Zur Berechnung der Trajektorien stehen ebenfalls unterschiedliche Modelle zur Verfügung, wobei das Stochastic-Tracking-Modell gewählt wurde. Anhand des Modells werden die Trajektorien auf Basis der momentanen Geschwindigkeiten des Fluids berechnet, wodurch bei einer genügend hohen Anzahl von Partikeln (Number of Tries) die zufälligen Effekte der Turbulenz berücksichtigt werden können (Ansys 2011a). Da die Kohlenstaubpartikel keine einheitliche Größe haben, kann eine Rosin-Rammler-Durchmesser-Verteilung anhand des mittleren Durchmessers und des Verteilungskoeffizienten vorgegeben werden (siehe Anhang B, Seite 149).

Je nach den jeweiligen Anforderungen müssen zur Berechnung des Massen- und Energieaustauschs zwischen Partikel- und Gasphase zusätzliche Modelle definiert werden, anhand derer der Partikelzustand berechnet wird. Im Falle der Kohlenstaubverbrennung müssen die Aufheizphase, die Pyrolyse, der Koksabbrand und anschließend der inerte Zustand des Partikels berücksichtigt werden, wobei dies in ANSYS Fluent durch sogenannte „Laws“ geschieht.

So werden die Partikel als inert angesehen, bevor diese die Pyrolysetemperatur erreicht haben oder nachdem der Koksabbrand abgeschlossen ist (Law 1 bzw. Law 6). Da die Partikel inert sind, findet kein Masseaustausch zwischen der Gas- und Partikelphase statt und es wird lediglich der Energieaustausch berechnet.

Wird die vorgegebene Pyrolysetemperatur der Partikel überschritten, wird das Pyrolysemodell aktiviert. Wie bereits in Abschnitt 2.2 beschrieben, stehen unterschiedliche Modelle zur Berechnung der Pyrolyse zur Verfügung. Im Rahmen dieser Arbeit wurde das Single-Kinetic-Rate-Modell verwendet, da durch den einfachen Berechnungsansatz Rechenzeit eingespart werden kann und aufgrund des recht ähnlichen Pyrolyseverhaltens des Kohlenstaubs bei Oxyfuel-Bedingungen im Vergleich zur konventionellen Verbrennung bereits Parameter für untersuchte Kohlen zur Verfügung stehen.

Hat die Masse des Partikels so weit abgenommen, dass keine Pyrolyse mehr stattfindet, wird das Koksabbrandmodell aktiviert. Da ebenfalls noch nicht gänzlich geklärt ist, welchen Einfluss eine Vergasung des Kokes auf den Abbrand des Restkokes hat, wurde mit dem Kinetics-Diffusion-Limited-Rate-Modell ebenfalls ein numerisch weniger aufwändiges Modell gewählt.

Sowohl die flüchtigen Bestandteile als auch die entstandenen Produktgase beim Koksabbrand müssen in der Gasphase berücksichtigt werden. Aufgrund des vergleichsweise großen Berechnungsgitters wurde daher das Non-Premixed-Combustion-Modell gewählt. Bei diesem Berechnungsansatz werden nicht wie beim Finite-Rate/Eddy-Dissipation-Modell einzelne Transportgleichungen der im System befindlichen Spezies gelöst, sondern jene mit einer Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion berechnet, wobei die Rauchgaszusammensetzung anhand einer oder in diesem Fall zweier Variablen, den Mischungsbrüchen, beschrieben werden und somit die Berechnung einzelner Speziestransportgleichungen umgangen werden kann. Dabei wird jedoch vorausgesetzt, dass die Strömung turbulent und die Diffusionskoeffizienten der einzelnen Spezies gleich sind. Der Nachteil des Modells liegt darin, dass zur Berechnung der Rauchgaszusammensetzung von einem chemischen Gleichgewicht ausgegangen wird, welches bei der Bildung von Stickoxiden nicht vorliegt und daher für detaillierte Untersuchungen in Bezug auf Schadstoffbildung nicht geeignet ist (Joos 2006).

Durch die vorgegebenen Zusammensetzungen der einzelnen Stoffströme am Brennkammereintritt wird eine angenommene Wahrscheinlichkeitsdichtefunktion (preassumed PDF) für nicht adiabate Systeme auf Basis der Minimierung der Gibbs'schen Energie berechnet, wobei zu deren Berechnung der β -Funktionsansatz gewählt wurde (Ansys 2011a). Mit diesem Ansatz wird jene Zeitspanne beschrieben, die das Fluid in dem vom Mischungsbruch definierten Zustand verbleibt, wobei dieser von den turbulenten Fluktuationen abhängig ist. Die Berechnung wird vor dem Beginn der eigentlichen Simulation durchgeführt und die berechneten Werte in Tabellen abgespeichert. Während der Simulation werden anhand sogenannter Mischungsbrüche die gemittelten Werte für die Massenanteile der einzelnen Spezies, Dichte und Temperatur durch Interpolation der zuvor gespeicherten Tabellenwerte berechnet.

Für die in diesem Abschnitt beschriebenen Modelle sind die verwendeten Parameter in Anhang F aufgelistet.

5.2.3 Strahlungsmodell

In ANSYS Fluent werden einige Modelle zur Verfügung gestellt, anhand derer der Strahlungswärmeaustausch zwischen dem Rauchgas und den umschließenden Wänden berechnet werden kann. Dazu ist es erforderlich, die Strahlungstransfergleichung (RTE, siehe Gleichung 4-22, Seite 69) zu lösen. Da es sich hierbei um eine Integro-Differentialgleichung handelt, die eine Funktion der Geometrie, des vorliegenden Temperatur- und Konzentrationsfelds der strahlungsaktiven Gase ist, die ihrerseits stark

wellenlängenabhängigen Charakter haben, ist eine exakte Lösung nur auf sehr stark vereinfachte Problemstellungen begrenzt. Zur numerischen Berechnung der RTE stehen einige Berechnungsansätze zur Verfügung, die teilweise in ANSYS Fluent implementiert sind. Grundsätzlich können die Berechnungsansätze in folgende Methoden eingeteilt werden (Epple et al. 2009):

- statistische Methoden
- Zonen-Methoden
- differentielle Methoden

Unter der Voraussetzung, dass der Einfluss von Kohlenstaubpartikeln nicht vernachlässigbar ist, stehen in ANSYS Fluent zwei Modelle zur Verfügung, mit denen die Kopplung des Strahlungsaustauschs zwischen Partikel- und Gasphase möglich ist: das P1-Modell und das Discrete-Ordinates-Modell (DO-Modell). Das P1-Modell wird speziell bei optischen Weglängen $\alpha \cdot s \gg 1$ eingesetzt. Ist diese Bedingung nicht erfüllt, können die Berechnungsergebnisse zu deutlich höheren Wärmestromdichten führen als jene, die tatsächlich auftreten. Aufgrund des variableren Einsatzbereiches des DO-Modells im Vergleich zum P1-Modell (Krishnamoorthy et al. 2010, Edge et al. 2009) wurde das DO-Modell gewählt, auf dessen Anwendung in weiterer Folge etwas genauer eingegangen wird. Beim DO-Modell wird die RTE für mehrere diskrete Raumwinkel gelöst und kann somit als finite Differentiation der Richtungsabhängigkeit der RTE gedeutet werden. Eine detaillierte Beschreibung des DO-Modells kann zum Beispiel in Modest (Modest 2003) nachgelesen werden. In Gleichung (5-7) ist die Strahlungstransfergleichung für das DO-Modell unter Berücksichtigung des Partikeleinflusses dargestellt (Ansys 2011a), welche direkt als Quellterm in die Energiegleichung eingeht.

$$\nabla \cdot (I \cdot \vec{s}) + (\kappa_G + \kappa_P + \sigma_{s,P}) \cdot I(\vec{r}, \vec{s}) = \kappa_G \cdot n^2 \cdot I_B + E_P \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-3} \quad (5-7)$$

Die RTE weist große Ähnlichkeiten mit Gleichung (4-22) (Seite 69) auf. Der zweite Term auf der linken Seite beschreibt die Schwächung der einfallenden Strahlung durch Absorption und Streuung. κ_G entspricht dem Absorptionskoeffizienten der Gasphase, der durch Umstellen von Gleichung (4-13) (Seite 66) direkt aus dem anhand des WSGG-Modells berechneten Emissionsgrad resultiert, wobei ausschließlich die gleichwertige Schichtdicke s_{gl} zur Berechnung der Emissionsgrade herangezogen werden sollte (siehe Anhang G, Seite 162).

κ_P ist der Absorptionskoeffizient der Partikelphase und wird in ANSYS Fluent mit

$$\kappa_P = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^N \varepsilon_{P,n} \cdot \frac{A_{P,n}}{V} \quad \text{m}^{-1} \quad (5-8)$$

berechnet, wobei V dem jeweiligen Zellenvolumen entspricht. $A_{P,n}$ ist die Projektionsfläche des jeweiligen Partikels und kann mit

$$A_{P,n} = \frac{d_{P,n}^2 \cdot \pi}{4} \quad \text{m}^2 \quad (5-9)$$

berechnet werden. $\varepsilon_{P,n}$ ist der Emissionsgrad des jeweiligen Partikels n und kann nach Bohren (Bohren, Huffman 1983) dem Absorptionswirkungsfaktor gleichgesetzt werden. Somit kann dieser für den mittleren Partikeldurchmesser aus dem Graphen in Abbildung 4-15 (Seite 96) abgelesen werden. Im Rahmen dieser Arbeit wurde der Absorptionswirkungsfaktor nochmals mit einer angenommenen Gewichtungstemperatur von 1800 K berechnet, woraus ein Emissionsgrad $\varepsilon_{P,n}=0,8$ resultierte.

Bei Berücksichtigung der Partikel-Strahlungs-Interaktion wird die Streuung durch die Gasphase in ANSYS Fluent vernachlässigt. Daher ist lediglich der Streukoeffizient der Partikelphase $\sigma_{S,P}$ in Gleichung (5-8) angegeben.

$$\sigma_{S,P} = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^N (1 - f_{P,n}) \cdot (1 - \varepsilon_{P,n}) \cdot \frac{A_{P,n}}{V} \quad \text{m}^{-1} \quad (5-10)$$

$f_{p,n}$ ist der Streufaktor, mit dem der Anteil der nach vorne gestreuten Strahlung angegeben wird. Es gibt über diesen Berechnungsansatz keine genauen Angaben in der Literatur. Er kann jedoch wie folgt interpretiert werden: Unter der Annahme, dass der Absorptionsgrad dem Emissionsgrad entspricht, beschreibt der Term $1 - \varepsilon_{P,n}$ den Transmissionsgrad. Mit dem Faktor $f_{P,n}$, der bei vollständiger Vorwärtsstreuung den Wert 1 annimmt, kann durch den Anteil, der nicht nach vorne gestreut wird ($1 - f_{P,n}$) der Streukoeffizient berechnet werden. Somit besteht die Möglichkeit, diesen Faktor auch anhand der in Abschnitt 4.2 beschriebenen Berechnungsroutine abzuschätzen. Für den konkreten Anwendungsfall wurde $f_{P,n}$ mit 0,96 bestimmt.

Auf der rechten Seite von Gleichung (5-8) ist einerseits die Strahldichteänderung durch die Strahlungsemission der Gasphase und andererseits die Eigenemission der Partikel E_P angegeben, wobei E_P mit

$$E_P = \lim_{V \rightarrow 0} \sum_{n=1}^N \varepsilon_{P,n} \cdot \frac{A_{P,n} \cdot \sigma \cdot T_{P,n}^4}{V \cdot \pi} \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-3} \quad (5-11)$$

berechnet wird. $T_{P,n}$ entspricht hierbei der Partikeltemperatur und σ der Stefan-Boltzmann-Konstante.

Derzeit wird in ANSYS Fluent keine Phasenfunktion für die Partikelphase berücksichtigt, wodurch der Term für die Einstreuung in Strahlungsrichtung in Gleichung (4-22) in Gleichung (5-7) fehlt.

Gleichung (5-7) ist in diesem Fall nur für graue Körper gültig. Dennoch besteht die Möglichkeit für die Gasphase entweder einzelne spektrale Bereiche oder mehrere graue Banden (WSGGM) zu definieren. Die Strahldichten I_B für die definierten spektralen Bereiche werden dabei auf Basis von Anteilfunktionen berechnet (siehe Abschnitt 4.1.1 Gleichung 4-27, Seite 73). Beim WSSG-Modellansatz wird die gesamte Strahldichte des schwarzen Körpers herangezogen und durch die Gewichtungsfaktoren gewichtet. Für jeden definierten spektralen Bereich beziehungsweise für jede graue Bande wird die Strahldichte I_λ anhand der RTE berechnet und durch Summenbildung der Strahldichten I_λ der jeweiligen Bereiche die Gesamtstrahldichte I für jede einzelne Zelle n in die jeweilige Richtung berechnet.

Neben der Berücksichtigung der spektralen Eigenschaften wird beim DO-Modell die RTE für mehrere diskrete Raumwinkel gelöst und kann somit als finite Differentiation der Richtungsabhängigkeit der RTE gedeutet werden. Die Berechnungsgenauigkeit des DO-Modells hängt somit von der Anzahl der Diskretisierungswinkel ab. In ANSYS Fluent wird die Anzahl der diskreten Ordinaten durch die Angabe der Anzahl der Polar- und Azimuth-Winkel (N_φ , N_θ) in jedem Oktanten vorgegeben, die auf das kartesische Koordinatensystem des Gesamtsystems bezogen sind. Somit ergeben sich für den dreidimensionalen Fall $8 \cdot N_\varphi \cdot N_\theta$ Transferegleichungen für jedes zu berechnende Band. Die Standardeinstellung in ANSYS Fluent ist eine 2x2 Diskretisierung. Es wird jedoch empfohlen eine höhere Diskretisierung zu verwenden (Edge et al. 2009), wobei dadurch die Berechnungsdauer pro Iteration stark zunimmt (im konkreten Fall wurde $N_\varphi=N_\theta=4$ gewählt). Da die für die Diskretisierung definierten Winkel auf das globale Koordinatensystem des Modells bezogen sind, führt dies speziell bei ungeordneten Berechnungsgittern dazu, dass eine durch die Winkel aufgespannte Fläche nicht vollständig innerhalb einer Berechnungszelle liegt. Dadurch

gelangt jedoch ein Teil der Strahlung in die Berechnungszelle und ein Teil tritt aus der Berechnungszelle aus (Overhanging). Durch die Aufteilung der Kontrollfläche in Pixel (Pixelation), kann der Anteil der Strahlung, der die Kontrollfläche verlässt beziehungsweise über die Kontrollfläche in das Volumen eintritt, berechnet werden. Nach Braun (Braun 2005) ist eine Unterteilung der Kontrollflächen in 3x3 Felder ausreichend. Beim DO-Modell sei darauf hingewiesen, dass zwar die RTE für diskrete Strahlrichtungen gelöst wird, dies jedoch nur für das jeweilige Berechnungsvolumen geschieht. Somit werden nicht, wie im Falle des Discrete-Transfer-Radiation-Modell (DTRM), einzelne Strahlen durch das gesamte Berechnungsgebiet verfolgt.

Bei der Berechnung in ANSYS Fluent wurde einerseits das bereits implementierte WSGG-Modell verwendet, wobei die gleichwertige Schichtdicke zur Berechnung der gewichteten Graugasapproximation gewählt wurde (siehe Anhang G, Seite 162). Andererseits wurden die neu berechneten Parameter aus Tabelle 4-5 in Abschnitt 4.1.3 (siehe Seite 84) durch UDFs implementiert. Dazu war es notwendig, anhand einer DEFINE_ADJUST die Gewichtungsfaktoren und Produkte aus Absorptionskoeffizienten und der Summe der Partialdrücke zu berechnen, die abgespeichert wurden. Durch die Makros

DEFINE_GRAY_ABS_COEFFICIENT und

DEFINE_EMISSIVITY_WEIGHTING_FACTOR

werden die abgespeicherten Werte aufgerufen und zur Berechnung der RTE verwendet. An dieser Stelle erscheint es jedoch wichtig, darauf hinzuweisen, dass die Gewichtungsfaktoren in diesem Fall berücksichtigt werden müssen, da ansonsten die Gewichtungsfaktoren des implementierten WSGG-Modells verwendet werden.

5.2.4 Randbedingungen

Für die vollständige Definition des Simulationssetups sind noch zusätzlich die Randbedingungen in Bezug auf Gaszusammensetzungen, Temperaturen und Massenströme notwendig. Für die einzelnen Zuströmkanäle des Brenners wurden für die Massenströme und Temperaturen die in Anhang F angeführten Werte vorgegeben. Die Gaskonzentrationen der einzelnen Volumenströme wurden jeweils anhand der zwei Mischungsbrüche definiert. Während die Brennerwände als adiabat angenommen wurden, wurden für die Brennkammerseitenwände die in Anhang F angeführten Temperaturen verwendet, wobei ein konstanter Emissionsgrad der Wände mit 0,85 angenommen wurde. Zur Auswertung der Wärmestromdichte wurden nach dem Erreichen eines konvergenten Ergebnisses die Wandtemperaturen im Bereich der Messöffnungen auf 300 K reduziert (dies entspricht in etwa der Kühlwassertemperatur der Messsonde) und der Emissionsgrad mit 1

definiert, um die tatsächliche Wärmestromdichte, die mit dem ellipsoiden Radiometer gemessen wurde, berechnen zu können.

5.3 Durchgeführte Simulationen

Grundlegendes Ziel der durchgeführten Simulationen war es einerseits, den Modellansatz mit spezifisch berechneten Koeffizienten für das WSGG-Modell mit experimentellen Daten zu überprüfen und andererseits den Einfluss der Strahlungsinteraktion der Partikel auf das Simulationsergebnis zu untersuchen.

Die erste Simulation wurde nur mit den in ANSYS Fluent implementierten Standardmodellen ohne Strahlungsinteraktion der Kohlepartikel mit der Gasphase durchgeführt. Um ein konvergentes Ergebnis zu erhalten, war es jedoch notwendig, eine geeignete Lösungsstrategie zu entwickeln.

Nach der Initialisierung des Berechnungsgebiets mit den Startwerten werden zu Beginn lediglich die Gleichungen für die Strömung und Turbulenz für 299 Iterationen berechnet. Danach werden alle weiteren Berechnungsgleichungen (Energie, P1, PDF nach jeweils 10 Iterationen, DPM nach jeweils 20 Iterationen) hinzugeschaltet und für 500 Iterationen berechnet, wobei für die jeweiligen Gleichungen eine First-Order-Upwind-Diskretisierung verwendet wird. Danach wird das DO-Modell aktiviert und weitere 500 Iterationen durchgeführt, bis die Berechnung näherungsweise konvergiert ist. Dies kann einerseits durch die Residuen der einzelnen Modellgleichungen und anhand zusätzlicher Parameter beurteilt werden. Bei dieser Simulationsaufgabe bietet es sich an, die Brennkammeraustrittstemperatur, die Rauchgasdichte am Brennkammeraustritt und die Wärmestromdichte innerhalb der Brennkammer zu überprüfen. Entsprechen die Residuen den Abbruchkriterien und ändern sich die zusätzlich definierten Parameter nicht mehr für mehrere Iterationsschritte, kann von einer konvergenten Berechnung ausgegangen werden. Nach dem Erreichen einer Näherungslösung wird für alle Modellgleichungen auf Second-Order-Upwind umgestellt und so lange weiteriteriert, bis ein konvergentes Ergebnis erreicht wird (ca. 3000 Iterationen).

Das so erreichte Simulationsergebnis wurde als Ausgangsbasis für die weiteren Berechnungen verwendet, da es nicht möglich war, mit akzeptablen Berechnungszeiten das modifizierte WSGG-Modell von Beginn an zu nutzen. Dies liegt darin begründet, dass die verwendeten UDFs bei jeder Iteration berechnet werden. Um dies zu umgehen, wurden in die UDFs Abfrageroutinen implementiert, anhand derer die UDFs mit der jeweiligen Berechnung des DO-Modells zusammenfallen. Im Rahmen der Tests der Subroutinen in einem stark vereinfachten Simulationsmodell stellte sich jedoch heraus, dass offensichtlich

die vom Benutzer definierten Parameter nach jeder Iteration wieder verloren gehen und somit keine plausiblen Ergebnisse generiert werden können. Somit müssen bei jeder Iteration die zusätzlich definierten UDFs berechnet werden, wodurch der Berechnungsaufwand signifikant steigt.

Ausgehend vom ersten Simulationsergebnis wurden die Berechnung mit dem modifizierten WSGG-Modell und die Berechnung der Partikel-Strahlungs-Interaktion mit dem in Fluent implementierten WSGG-Modell durchgeführt. Während bei den Berechnungen mit dem modifizierten WSGG-Modell keine nennenswerten Probleme auftraten, war es äußerst schwierig, die Partikel-Strahlungs-Interaktion zu berücksichtigen. Die von ANSYS Fluent vorgeschlagenen Lösungsstrategien beziehungsweise in der Literatur angegebenen Strategien führten nicht zum gewünschten Erfolg. Durch eine Analyse im stark vereinfachten Modell konnte festgestellt werden, dass insbesondere der zusätzliche Quellterm in der Energiegleichung zu Beginn zu starken Temperaturänderungen führt. Daher wurde zur Berechnung der Strahlungsinteraktion folgende Lösungsstrategie entwickelt.

Da gerade zu Beginn der Berechnung starke Änderungen der Temperatur durch den Quellterm hervorgerufen werden, wurde die Berechnungshäufigkeit des DPM auf jede fünfte Iteration und die Berechnung des DO-Modells auf jede zweite Iteration sowie die Aktualisierung der Stoffeigenschaften anhand der PDF-Tabelle auf ebenfalls 2 Iterationen gesetzt. Durch die Verringerung des Unterrelaxationsfaktors für das DPM auf Werte kleiner 0,1 war es zuletzt möglich, ein konvergentes Ergebnis zu erhalten. Bei iterativen Berechnungsverfahren ist es häufig notwendig, die Änderungsschrittweite zwischen dem vorhergehenden und dem aktuellen Berechnungsergebnis mit einem Unterrelaxationsfaktor ζ , der kleiner eins ist, zu multiplizieren, um Divergenz zu vermeiden. Dadurch wird zwar die Rechenzeit erhöht, allerdings kann häufig nur durch das Setzen geeigneter Relaxationsfaktoren eine Lösung gefunden werden.

5.3.1 Berechnungsergebnisse mit den Standardmodellen ohne Partikel-Strahlungs-Interaktion

Wie bereits zuvor beschrieben, wurde zu Beginn die Berechnung mit den in ANSYS Fluent implementierten Modellen ohne Partikel-Strahlungs-Interaktion durchgeführt und auf Basis der ersten Berechnungsergebnisse die Gitterunabhängigkeit überprüft. In Abbildung 5-4 ist das Temperaturprofil innerhalb der Brennkammer dargestellt. Ebenso wurden zur besseren Übersichtlichkeit der Messergebnisse in den folgenden Abschnitten die während der Experimente verwendeten Messpunkte eingezeichnet.

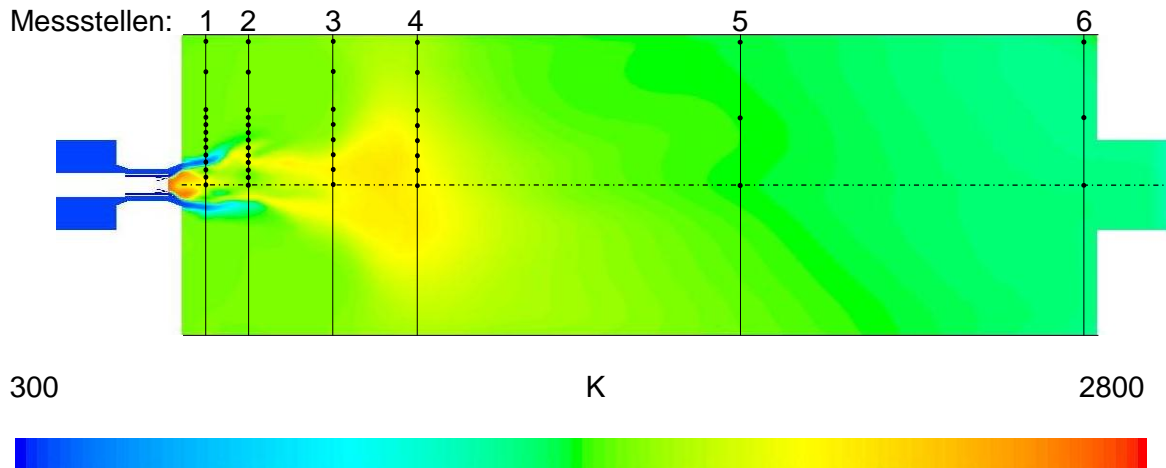


Abbildung 5-4: Berechnetes Temperaturprofil der Brennkammer (horizontaler Schnitt auf Höhe der Brennerachse) mit Positionsmarkierungen der Messpunkte

Es ist deutlich zu erkennen, dass die Flamme nicht symmetrisch ist. Wie jedoch in Abbildung 5-5 gezeigt wird, kann die Asymmetrie der Flamme auf eine etwas ungleichmäßige Anströmung des Drallerzeugers zurückgeführt werden, wodurch es zu einer Schiefelage der Flamme innerhalb der Brennkammer kommt.

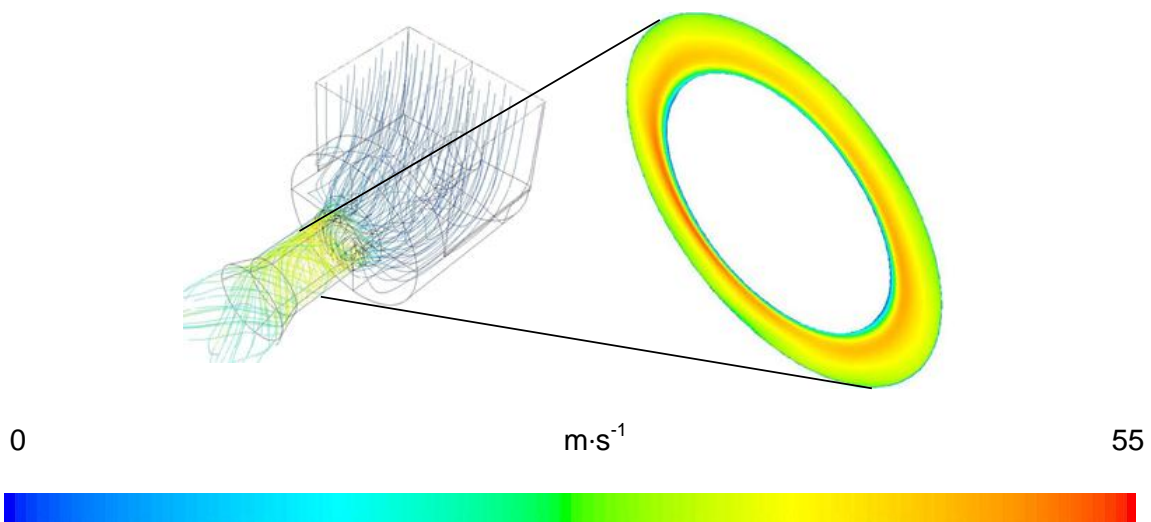


Abbildung 5-5: Asymmetrische Geschwindigkeitsverteilung im Sekundärkanal

Direkt an der Brennermündung ist ein Bereich mit sehr hohen Temperaturen zu erkennen, während am Diffusor des Brenners die Temperaturen durch den Sekundärvolumenstrom äußerst gering ausfallen, was auch während der Versuche durch mehrere Messstellen beobachtet wurde. Da das Zentralrohr des Brenners stark vereinfacht in die Geometrie implementiert wurde, ist diesbezüglich zu hinterfragen, ob die hohen Temperaturen an der Brennermündung repräsentativ sind, da nach den Versuchen an der Brennermündung kein

Hinweis auf sehr hohe Temperaturen gefunden wurde. Zur weiteren Datenauswertung wurden die Simulationsergebnisse für die einzelnen Messpositionen ausgewertet.

Da die Messungen jeweils nur bis zur Brennerachse durchgeführt wurden, sind für die nachfolgenden Diagramme die Versuchsergebnisse gespiegelt, wobei die Messergebnisse auf der positiven x-Achse den tatsächlichen Messpositionen entsprechen. In Abbildung 5-6 sind die berechneten Temperaturprofile den experimentell ermittelten Temperaturprofilen gegenübergestellt.

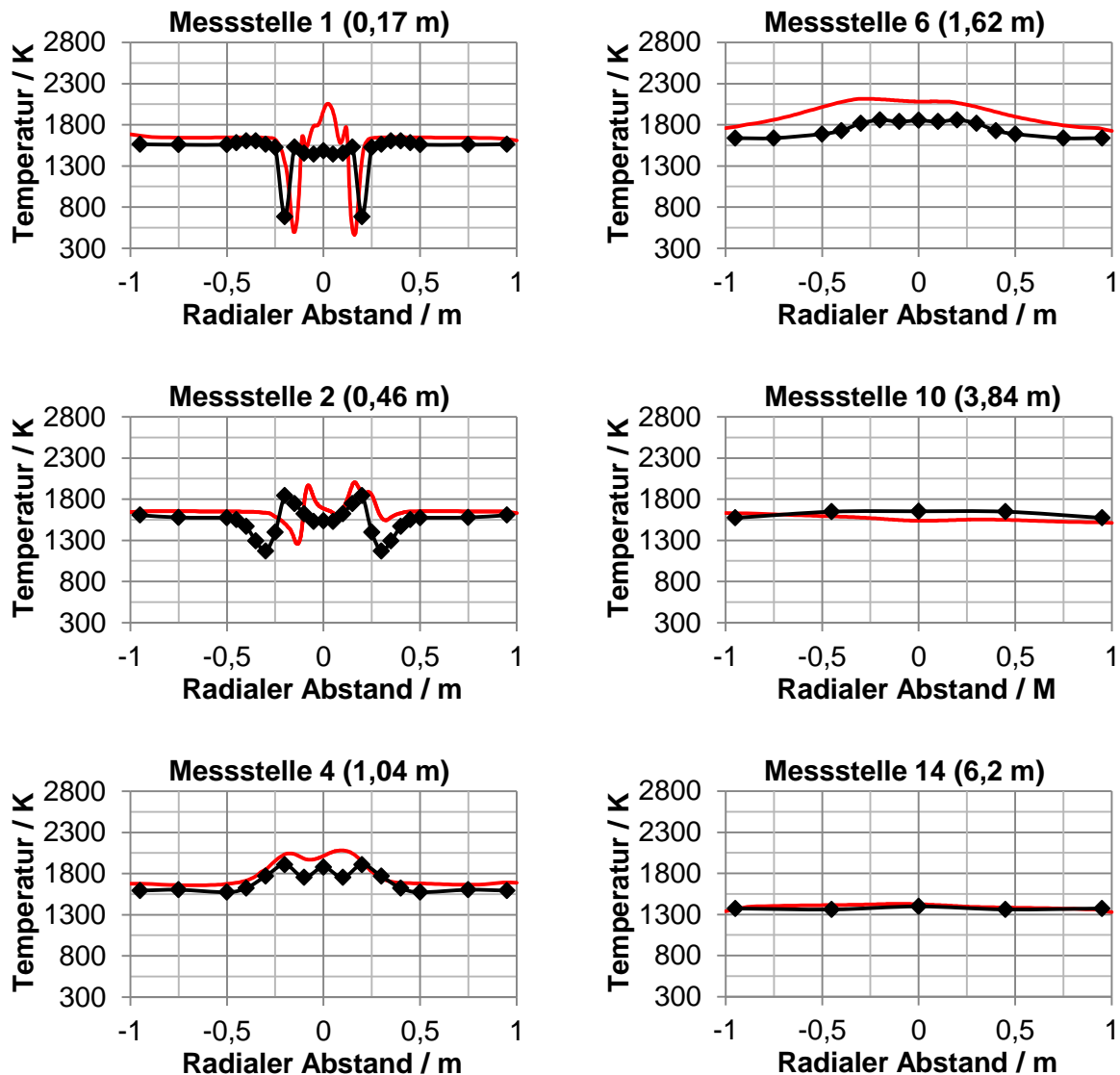


Abbildung 5-6: Vergleich der experimentell ermittelten Temperaturprofile mit den auf Basis der Standardmodelle berechneten Temperaturprofilen

Erwartungsgemäß sind die berechneten Temperaturprofile nicht symmetrisch, wobei diese mit den tatsächlich gemessenen Temperaturprofilen gut übereinstimmen. Im Brennerbereich (0,17 m) ist der durch den Sekundärstrom verursachte starke

Temperaturabfall gut ersichtlich, wobei die berechnete Minimaltemperatur unter jener der gemessenen Temperatur liegt. Ebenso liegen die berechneten Temperaturen im Flammenkern deutlich über den gemessenen Temperaturen. Im Bereich der Messstelle 2 kann erkannt werden, dass der durch den Sekundärvolumenstrom verursachte Temperaturabfall unterschätzt wird, wobei die radiale Position gut mit den Messergebnissen auf der tatsächlich gemessenen Seite übereinstimmt. Des Weiteren ist zu erkennen, dass in den Bereichen außerhalb der Flamme die gemessenen Temperaturen mit den berechneten gut übereinstimmen. Bei Messstelle 6 ist zu erkennen, dass das Temperaturprofil bereits stark vergleichmäßig ist, was darauf hindeutet, dass in diesem Bereich keine Verbrennung mehr stattfindet. Außerhalb des Verbrennungsbereichs weichen die Berechnungsergebnisse von den messtechnisch ermittelten Ergebnissen um maximal +7 % ab.

In Abbildung 5-7 sind die gemessenen O_2 -Konzentrationen im Bereich direkt beim Brenner und am Brennkammeraustritt den berechneten O_2 -Konzentrationen gegenübergestellt. Während die Sauerstoffmaxima direkt an der Brennermündung gut übereinstimmen, liegen die berechneten Konzentrationen im Randbereich deutlich unter den gemessenen.

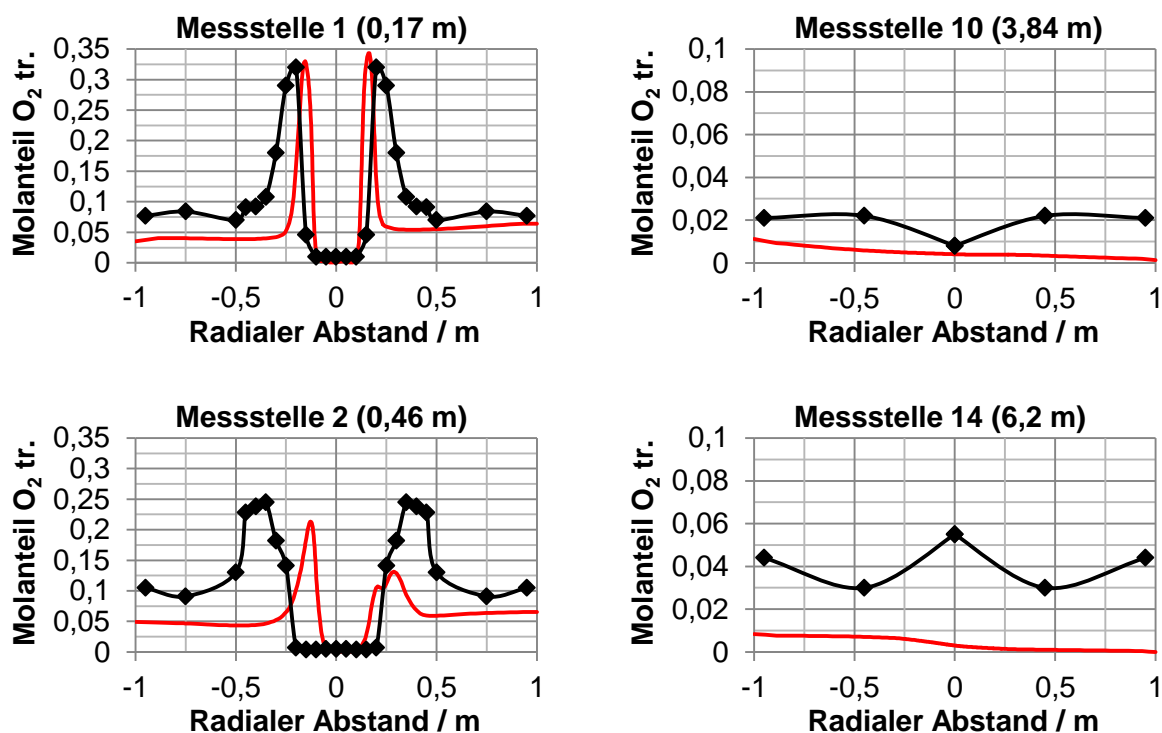


Abbildung 5-7: Vergleich der experimentell ermittelten O_2 -Konzentrationen mit den auf Basis der Standardmodelle berechneten O_2 -Konzentrationen

Bei einer Entfernung von 0,46 m von der Brennermündung ist ersichtlich, dass die berechneten Sauerstoffkonzentrationen durchwegs unter den gemessenen liegen. Beim Vergleich der Messergebnisse zwischen Messstelle 10 und 14 ist jedoch ersichtlich, dass die

gemessene Sauerstoffkonzentration bei Messstelle 10 unter jener von Messstelle 14 liegt. Wenn davon ausgegangen wird, dass in diesem Bereich der Brennkammer keine Falschlufft angesaugt wird, dann erscheinen die Messergebnisse widersprüchlich, wobei die Konzentrationsmessungen ohnehin kritisch zu hinterfragen sind (siehe Abschnitt 3.1.1.2, Seite 22).

In Abbildung 5-8 sind die gemessenen CO_2 -Konzentrationen den berechneten Konzentrationen gegenübergestellt. Es ist schnell ersichtlich, dass die CO_2 -Konzentrationen der Berechnungsergebnisse im Brennernahbereich deutlich über den gemessenen Konzentrationen liegen. Am Brennkammeraustritt ist der Unterschied zwischen den Ergebnissen deutlich geringer, wobei die berechneten CO_2 -Konzentrationen um ca. 5 Vol.% über den gemessenen liegen. Ebenso ist ersichtlich, dass im Brennernahbereich die ausgeprägten Spitzen des CO_2 -Konzentrationsverlaufs nur rudimentär wiedergegeben werden. Durch den Vergleich der O_2 - und CO_2 -Konzentrationen kann geschlossen werden, dass die Abbrandgeschwindigkeit der Kohle bei der Simulation überschätzt wird, da einerseits im Brennernahbereich die Sauerstoffkonzentrationen unterschätzt beziehungsweise die CO_2 -Konzentrationen überschätzt werden.

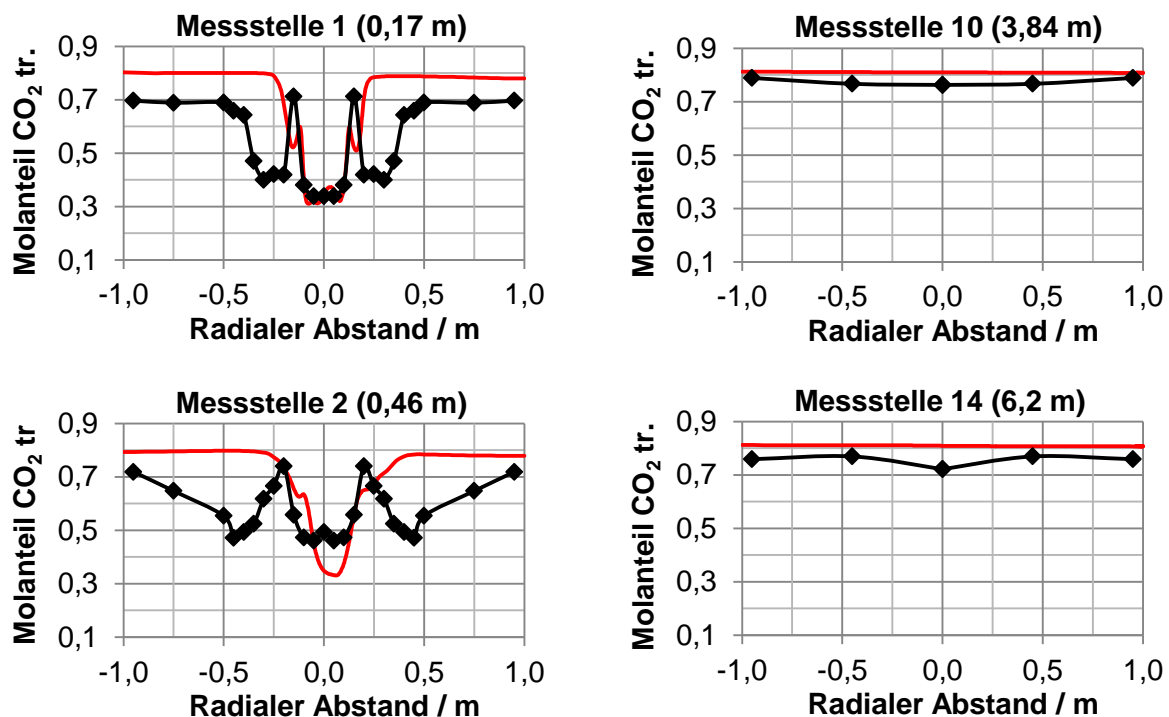


Abbildung 5-8: Vergleich der experimentell ermittelten CO_2 -Konzentrationen mit den auf Basis der Standardmodelle berechneten CO_2 -Konzentrationen

Aufgrund dessen, dass im Brennernahbereich außerhalb der Flamme die gemessenen CO_2 -Konzentrationen deutlich von den berechneten Konzentrationen abweichen, wobei diese in etwa gleich groß im Vergleich zum Brennkammeraustrittsbereich und zusätzlich die

berechneten O_2 -Konzentrationen tendenziell geringer sind als die gemessenen Werte, kann dies als Indiz gewertet werden, dass in die Brennkammer im Bereich der hydraulischen Messöffnungen Luftinfiltration stattgefunden hat. Dadurch wurden lokal die CO_2 -Konzentration gesenkt und die O_2 -Konzentration etwas erhöht. Ebenso muss berücksichtigt werden, dass die Abschätzung der Randbedingungen aus den Messergebnissen durch die zeitliche Mittelung ebenfalls fehlerbehaftet ist. Die erhöhten CO_2 -Konzentrationen können ebenso durch eine etwas abweichende Kohlenstaubbzusammensetzung mit einer höheren Kohlenstoffkonzentration als jene, die für die Berechnung verwendet wurde, erklärt werden.

In Abbildung 5-9 sind die gemessenen Wärmestromdichten den rechnerisch ermittelten Wärmestromdichten entlang der Brennkammerwände gegenübergestellt.

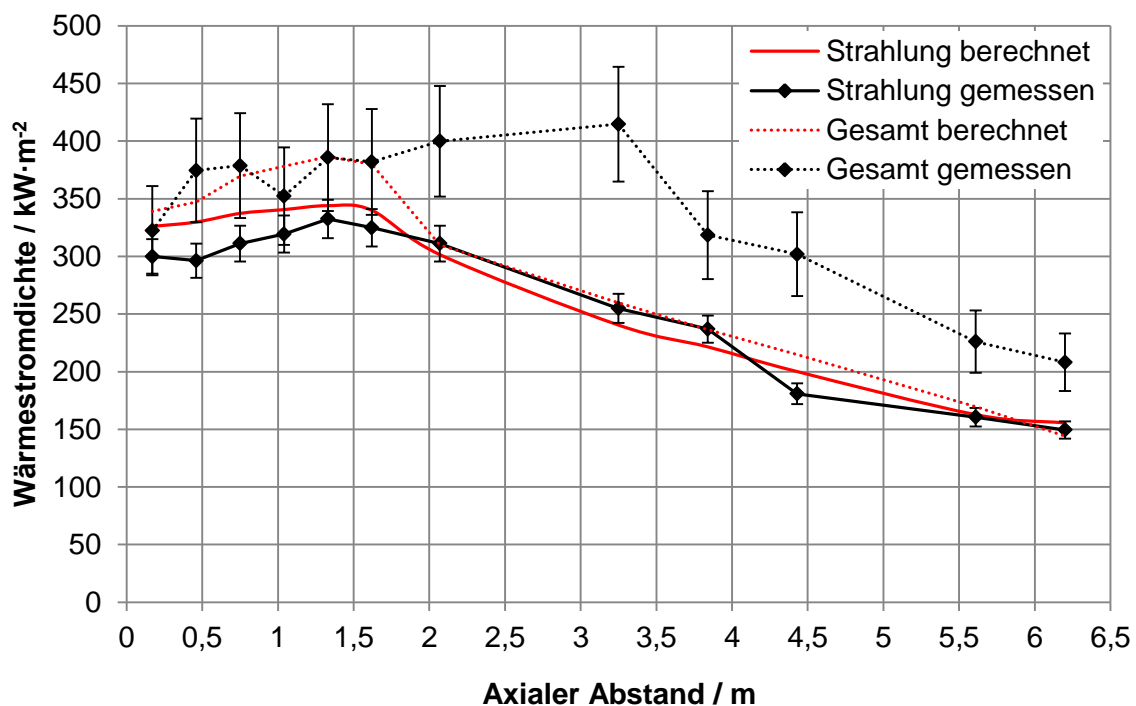


Abbildung 5-9: Vergleich der experimentell ermittelten Strahlungs- und Gesamtwärmeströme (5 % bzw. 12 % Messunsicherheit) mit den auf Basis der Standardmodelle berechneten Wärmeströme

Während bereits mit den Standardmodellen die Strahlungswärmestromdichte gut wiedergegeben wird - die maximale Abweichung zu den Messergebnissen liegt bei ca. 12 % - stimmen die Berechnungsergebnisse der Gesamtwärmestromdichte nur noch im Brennermündungsbereich gut überein. Ab ca. 2 m Abstand von der Brennermündung wird die Gesamtwärmestromdichte stark unterschätzt. Eine Erklärung dafür ist, dass im Brennernahbereich keine Einbauten in der Brennkammer vorliegen und somit die für die Simulation erzeugte Geometrie mit der realen Geometrie übereinstimmt.

Da innerhalb der Segmente 4 bis 11 Kühlkreisläufe und koaxiale Kühlrohre eingebaut sind, die die Strömung im Randbereich stark beeinflussen und somit die Turbulenz und den konvektiven Wärmeübergang erhöhen, diese jedoch beim Modell nicht berücksichtigt werden, erscheinen die Berechnungsergebnisse plausibel. Da bei geringeren geometrischen Schichtdicken davon ausgegangen werden kann, dass durch das in ANSYS Fluent implementierte WSGG-Modell nicht allzu große Fehler entstehen, erscheinen die gewählten Randbedingungen in Bezug auf den Emissionsgrad der Wände und die gemessenen Wandtemperaturen korrekt zu sein.

Auf Basis der Ergebnisse kann geschlossen werden, dass die Asymmetrie der Flamme (siehe Abbildung 5-4, Seite 116), die durch die etwas ungleichmäßige Anströmung des Drallerzeugers zustande kommt, durchwegs plausibel erscheint. Ebenso zeigen die berechneten Temperaturprofile eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Ergebnissen. Durch die notwendige Abschätzung der Rauchgaszusammensetzung einerseits und aufgrund des Messprinzips zur Konzentrationsmessung innerhalb der Brennkammer andererseits weisen die Ergebnisse speziell im Brennernahbereich deutliche Unterschiede auf. Trotz der Verwendung des in ANSYS Fluent implementierten WSGG-Modells werden in Bezug auf die Strahlungswärmestromdichte gute Ergebnisse erzielt, wobei in diesem Fall noch keine Partikel-Strahlungs-Interaktion berücksichtigt ist. Im Vergleich dazu können die Gesamtwärmestromdichten speziell stromabwärts nicht mehr korrekt berechnet werden, wobei die Vermutung nahe liegt, dass durch die Vereinfachung der Brennkammergeometrie, die Turbulenz und somit der konvektive Wärmeübergang in diesem Bereich unterschätzt wird.

5.3.2 Berechnungsergebnisse mit dem modifizierten WSGG-Modell ohne Partikel-Strahlungs-Interaktion

Aufbauend auf dem Simulationsergebnis mit den Standardmodellen ohne Partikel-Strahlungs-Interaktion wurden die Berechnungen mit dem durch UDFs implementierten WSGG-Modell fortgeführt.

Im Vergleich zu den vorhergehenden Ergebnissen liegen die berechneten Temperaturen geringfügig unter den zuvor berechneten, wodurch außerhalb der Flamme am Brennkammerende eine maximale Abweichung zu den messtechnisch ermittelten Temperaturen von +6 % vorliegt. Ebenso sind keine signifikanten Abweichungen zwischen den beiden Berechnungsergebnissen in Bezug auf die Rauchgaskonzentrationsprofile feststellbar und daher an dieser Stelle nicht angeführt.

In Abbildung 5-10 sind die berechneten Wärmeströme den gemessenen Wärmeströmen gegenübergestellt. In diesem Fall liegen die berechneten Strahlungswärmeströme etwas niedriger im Vergleich zu den vorhergehenden Ergebnissen, wobei im Brennernahbereich die Berechnungsergebnisse etwas besser übereinstimmen und die maximale Abweichung zu den Messergebnissen 8 % beträgt. In Bezug auf die Gesamtwärmestromdichte werden diese bereits im Brennernahbereich etwas unterschätzt, wobei die Differenz der berechneten Wärmestromdichten aus beiden Berechnungsergebnissen in etwa gleich ausfällt.

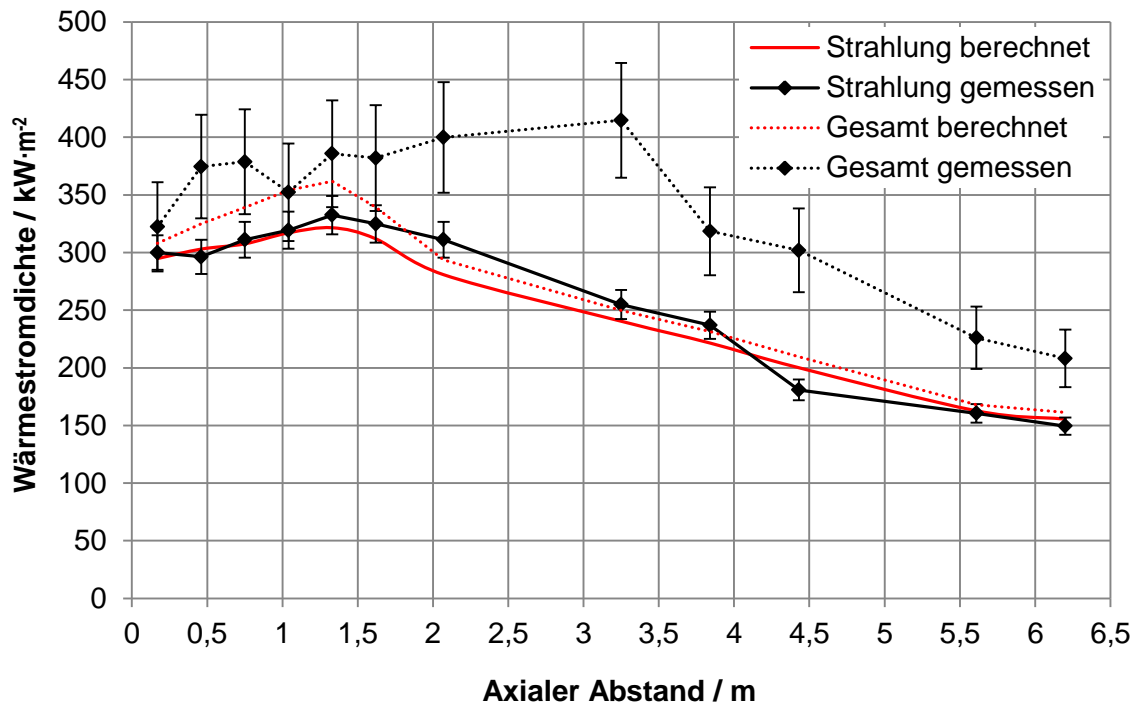


Abbildung 5-10: Vergleich der experimentell ermittelten Strahlungs- und Gesamtwärmeströme (5 % bzw. 12 % Messunsicherheit) mit den auf Basis des modifizierten WSGG-Modells berechneten Wärmeströme

Auf Basis der Berechnungsergebnisse kann gezeigt werden, dass die neu implementierten WSGG-Modellparameter gut zur Berechnung der Strahlungssituation einer Oxyfuel-Brennkammer geeignet sind. Aufgrund der geringen geometrischen Weglänge bei der Simulation der ENEL-Brennkammer sind jedoch die Ergebnisunterschiede zwischen den in ANSYS Fluent implementierten und dem modifizierten WSGG-Modell nur gering. Aufgrund der spezifischen Berechnung der WSGG-Modellparameter für den jeweiligen Prozess kann jedoch davon ausgegangen werden, dass bei größeren geometrischen Weglängen, wie sie bei großen Dampferzeugern vorliegen, die Strahlungssituation im Kessel mit dem neuen Modell deutlich genauer berechnet werden kann (siehe auch Abschnitt 4.1, Seite 62).

5.3.3 Berechnungsergebnisse mit dem modifizierten WSGG-Modell und Partikel-Strahlung-Interaktion

Ausgehend von den Berechnungsergebnissen mit dem modifizierten WSGG-Modell wurde die Simulation um die Partikel-Strahlungs-Interaktion erweitert, wobei nach der in Abschnitt 5.3 beschriebenen Lösungsstrategie vorgegangen wurde.

In Abbildung 5-11 sind die experimentell ermittelten den berechneten Temperaturprofilen gegenübergestellt.

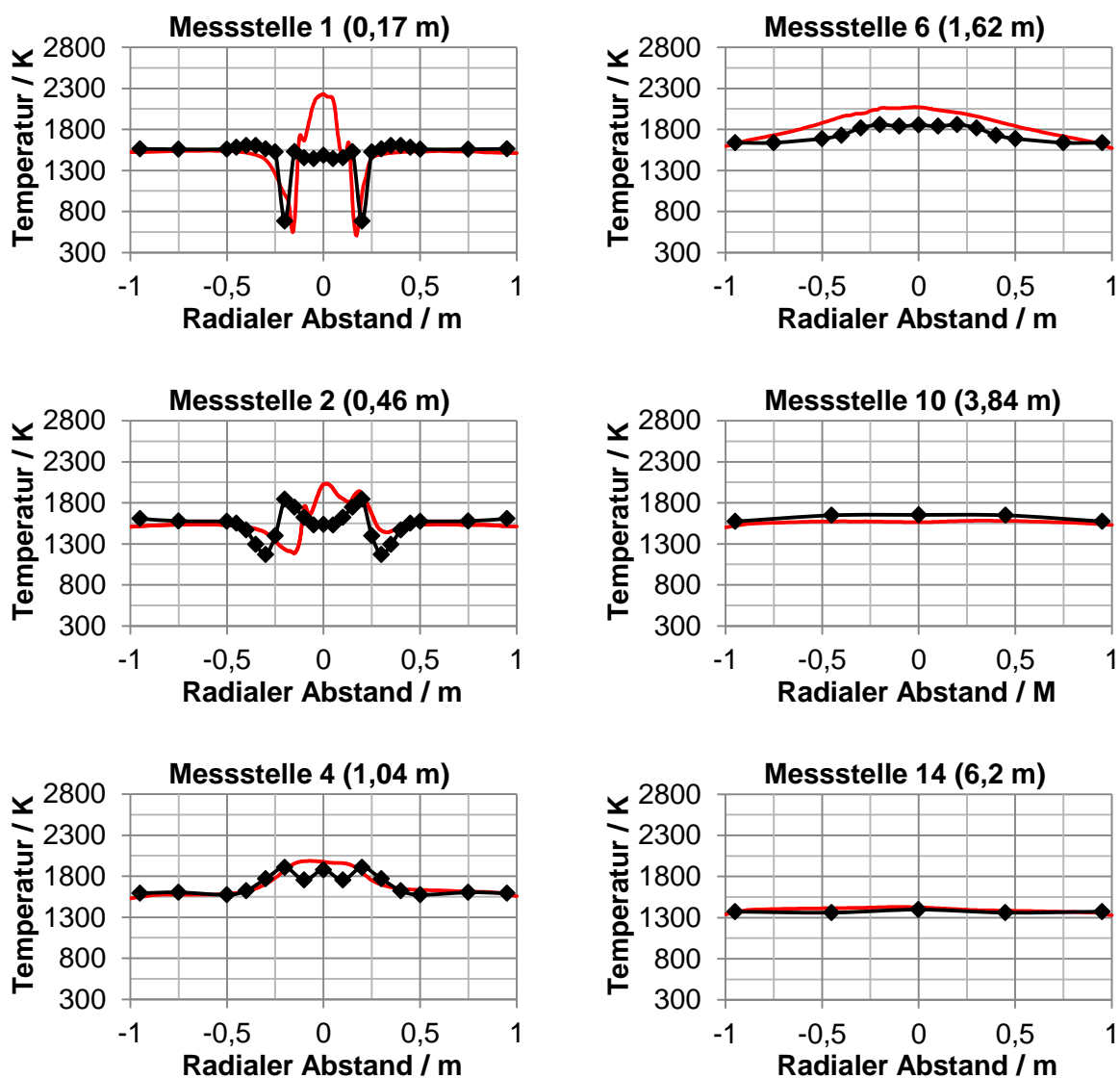


Abbildung 5-11: Vergleich der experimentell ermittelten Temperaturprofile mit den auf Basis des modifizierten WSGG-Modells und der Berücksichtigung der Partikel-Strahlungs-Interaktion ermittelten Simulationsergebnissen

Im Vergleich zu den vorhergehenden Berechnungsergebnissen liegt die maximale Abweichung der Temperatur außerhalb des Flammenbereichs unter 5 %, wodurch somit das

beste Berechnungsergebnis diesbezüglich erzielt wurde. Wie in den Graphen für die Messstellen 1 und 2 zu entnehmen ist, ist im Flammenkern die Maximaltemperatur jedoch deutlich höher, wobei der Einfluss des Sekundärstroms wiederum am besten dargestellt wird. Die Berechnungsergebnisse in Bezug auf die CO_2 - und H_2O -Konzentrationen sind wieder näherungsweise identisch im Vergleich zu den Berechnungsergebnissen mit den Standardmodellen und werden daher an dieser Stelle nicht angeführt.

In Abbildung 5-12 sind die gemessenen Strahlungs- und Gesamtwärmeströme den berechneten Wärmeströmen gegenübergestellt.

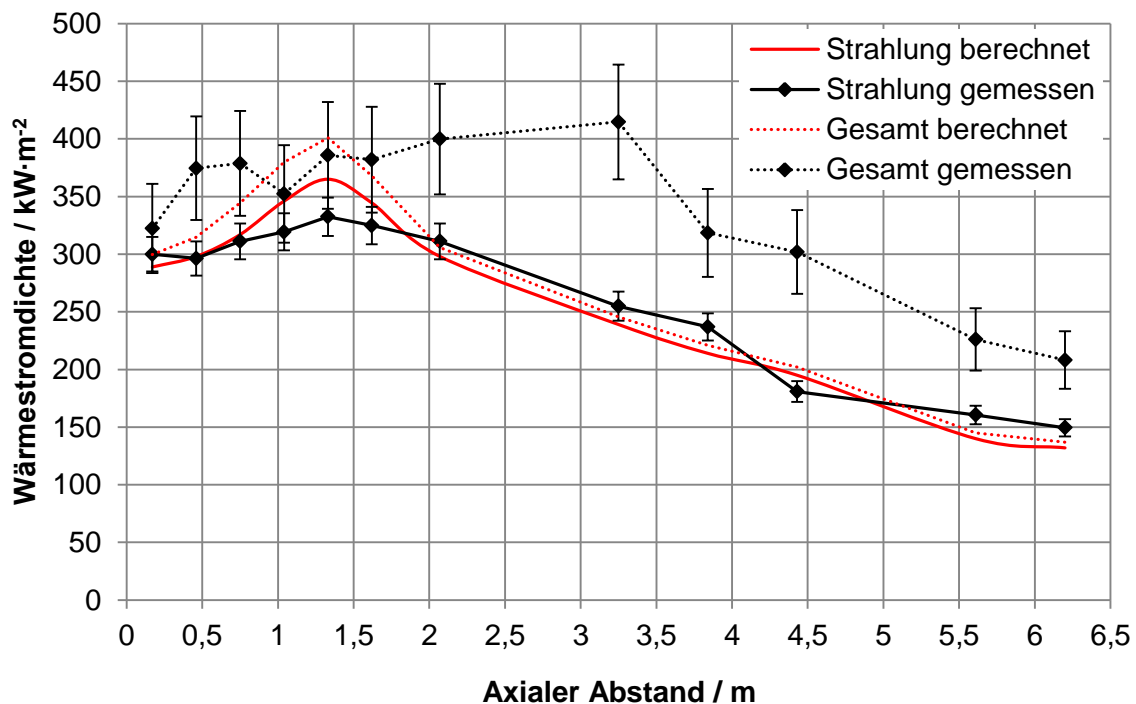


Abbildung 5-12: Vergleich der experimentell ermittelten Strahlungs- und Gesamtwärmeströme (5 % bzw. 12 % Messunsicherheit) mit den auf Basis des modifizierten WSGG-Modells unter Berücksichtigung der Partikel-Strahlungs-Interaktion berechneten Wärmeströme

Wie bereits bei den vorhergehenden Berechnungsergebnissen wird der Gesamtwärmestrom im hinteren Bereich der Brennkammer nicht korrekt wiedergegeben. In Bezug auf die Strahlungswärmestromdichte wird aufgrund des Partikeleinflusses die maximale Wärmestromdichte etwas überschätzt beziehungsweise am Brennkammerende unterschätzt, wobei die Berechnungsergebnisse maximal um 10 % von den gemessenen Strahlungswärmestromdichten abweichen.

5.3.4 Vergleich der mit unterschiedlichen Modellen berechneten Strahlungswärmeströme

Zum leichteren Vergleich der mit den unterschiedlichen Modellansätzen erhaltenen Berechnungsmethoden werden die Berechnungsergebnisse einander gegenübergestellt. Da nur geringe Unterschiede in Bezug auf die berechneten Konzentrations- und Temperaturprofile auftreten, werden lediglich die Strahlungswärmestromdichten verglichen (Abbildung 5-13).

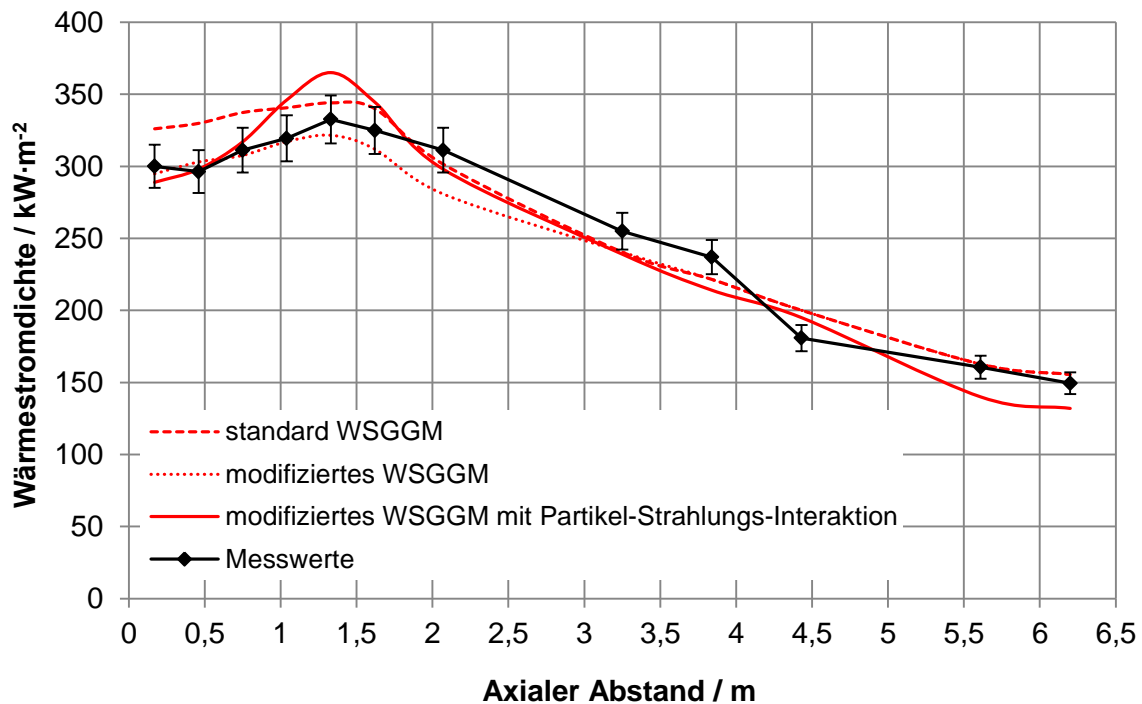


Abbildung 5-13: Vergleich der experimentell ermittelten Strahlung (5 % Messunsicherheit) mit den auf Basis des Standard-WSGG-Modells, des modifizierten WSGG-Modells und des modifizierten WSGG-Modells unter Berücksichtigung der Partikel-Strahlungs-Interaktion berechneten Wärmeströme

Im direkten Vergleich ist ersichtlich, dass im Brennernahbereich die anhand des Standard-WSGG-Modells berechneten Strahlungswärmeströme im Schnitt am stärksten überschätzt werden, wobei die maximale Wärmestromdichte beim modifizierten WSGG-Modell mit Partikel-Strahlungs-Interaktion auftritt. Ebenso ist ersichtlich, dass die in der Brennkammer befindlichen Partikel nur einen geringen Einfluss auf die Strahlungswärmestromdichte zu haben scheinen. Lediglich in jenen Bereichen, bei denen mit einer hohen Partikelkonzentration gerechnet werden muss, wie dem unmittelbaren Brennernahbereich nach der Aufheizphase, kann eine deutlich höhere Strahlungswärmestromdichte im Vergleich zu den Berechnungsergebnissen mit dem modifizierten WSGG-Modell ohne Partikel-Strahlungs-Interaktion ausgemacht werden. Ebenso ist ersichtlich, dass durch die

Berücksichtigung der Partikel bei der Strahlungsberechnung die Strahlungswärmestromdichte stromabwärts tendenziell unterschätzt wird.

Aus den Berechnungsergebnissen kann geschlossen werden, dass für den hier dargestellten Anwendungsfall anhand des in ANSYS Fluent implementierten WSGG-Modells ähnliche Ergebnisse im Vergleich zu den Berechnungsergebnissen mit dem modifizierten WSGG-Modell resultieren. Der Einfluss der Partikel scheint in diesem Fall zwar gering zu sein, jedoch ist ersichtlich, dass speziell im Flammenbereich die Strahlungswärmeströme durch die zusätzliche Partikelstrahlung deutlich ansteigen. Ebenso wird deutlich, dass durch die zusätzliche Absorption und Streuung der Partikelwolke die Strahlungswärmeströme stromabwärts im Vergleich zu den Berechnungsergebnissen, bei denen nur Gasstrahlung berücksichtigt wurde, etwas geringer sind. Dieser Umstand kann speziell bei größeren geometrischen Weglängen, wie sie in Kesseln vorliegen, und höheren Partikelbelastungen die Strahlungssituation deutlich beeinflussen.

Aufgrund der geringen Unterschiede zwischen den in ANSYS Fluent implementierten Standardmodellen und den modifizierten Modellen zur Berechnung der Strahlungswärmestromdichte sowie der guten Übereinstimmung aller Berechnungsergebnisse mit den experimentellen Daten, erscheint es in diesem Fall nicht sinnvoll, zusätzliche Rechnerkapazitäten für die Berechnung der UDFs aufzuwenden. Allerdings kann abgeleitet werden, dass anhand der gewählten Modellansätze gute Simulationsergebnisse generiert werden konnten, obwohl häufig stark vereinfachte Modelle verwendet wurden.

Wie bereits in Abschnitt 4.1.1 (Seite 69) gezeigt wurde, sind die Unterschiede der berechneten Emissionsgrade zwischen den genaueren SNB-Modellen und den WSGG-Modellen bei geringen geometrischen Weglängen beziehungsweise gleichwertigen Schichtdicken, wie es bei der Versuchsbrennkammer der Fall ist, gering. Ebenso wurde gezeigt, dass bei größeren geometrischen Weglängen die Berechnungsergebnisse stark voneinander abweichen, wobei bei den WSGG-Modellen der Emissionsgrad und somit der Einfluss der Gasstrahlung stark unterschätzt wird. Zusätzlich ist die tatsächliche Rauchgaszusammensetzung zu berücksichtigen. Während die Emissionsgradunterschiede bei trockener Rauchgasrezirkulation beim in ANSYS Fluent implementierten WSGG-Modell im Vergleich zu den genaueren SNB-Modellen bei geringen geometrischen Weglängen noch akzeptabel erscheinen, sind bei feuchter Rauchgasrezirkulation bereits gravierende Unterschiede zu erkennen, wodurch deutlich größere modellbedingte Fehler zu erwarten sind.

Während bei geringen geometrischen Weglängen beziehungsweise gleichwertigen Schichtdicken und trockener Rauchgasrezirkulation eventuell das Standardmodell verwendet

werden kann, ist dies bei feuchter Rauchgasrezirkulation sowie bei großen Geometrien, wie zum Beispiel einem Großkraftwerkskessel, nicht zu empfehlen. Eine Grundlage zur Abschätzung, mit welchen Fehlern gerechnet werden muss, ist durch eine Vergleichsberechnung mit einem SNB-Modell und dem Standard-WSGG-Modell bei den jeweiligen Parametern durchwegs gegeben. Ebenso ist bei Großkraftwerkskesseln davon auszugehen, dass der Einfluss der Partikelstrahlung signifikant größer als bei kleinen Brennkammern ist und somit berücksichtigt werden sollte. Aufgrund der geringen Datenlage in Bezug auf die Strahlungseigenschaften von Partikeln ist es schwierig, geeignete Parameter zu finden. Anhand der Mie-Theorie und dem erstellten Berechnungsprogramm ist es möglich, die für die numerische Simulation in ANSYS Fluent benötigten Parameter abzuschätzen, ohne auf das Standardsetup zurückgreifen zu müssen. An dieser Stelle sei darauf hingewiesen, dass bei der auftretenden Partikelgröße sowie dem gewählten komplexen Brechungsindex der Rückstreungsanteil sehr gering ist. Ändern sich jedoch die Parameter, so kann der Rückstreungsanteil deutlich größer werden, wodurch der Einfluss der Partikel auf die Strahlung ebenso größer werden kann. Deshalb sollte gerade bei staubbeladenen Simulationsaufgaben vorab überprüft werden, welchen Einfluss die Partikel-Strahlungs-Interaktion auf das Berechnungsergebnis haben kann.

Soll eine möglichst hohe Genauigkeit erreicht und sichergestellt werden, dass zumindest die Berechnung der Strahlungseigenschaften der Gasphase korrekte Ergebnisse liefert, so scheint der in dieser Arbeit gezeigte Berechnungsansatz gut geeignet. Durch die einfache und schnelle Berechnung der spezifischen Parameter für den jeweiligen Anwendungsfall kann davon ausgegangen werden, dass näherungsweise identische Berechnungsergebnisse im Vergleich zu einem in ANSYS Fluent implementierten SNB-Modell generiert werden können, wobei der Berechnungsaufwand deutlich geringer ausfällt.

6 Zusammenfassung und Ausblick

Aufgrund des weltweit hohen Energiebedarfs ist es erforderlich, neben der Effizienzsteigerung von derzeit gängigen Energiesystemen und der Erforschung beziehungsweise Weiterentwicklung der Energiebereitstellung durch erneuerbare Energieträger ebenfalls CCS-Technologien zur Reduktion der CO₂-Emissionen in die Atmosphäre einzusetzen. Im Rahmen dieser Arbeit wurde auf die Oxyfuel-Technologie eingegangen, wobei besonderes Augenmerk auf die Entwicklung eines Kohlenstaubbrenners und dessen experimentelle Untersuchung und die numerische Simulation des Brenners gelegt wurde.

Auf Basis der Versuchsergebnisse des im Rahmen des RFCS-Projektes „Friendly Coal“ entstandenen Brenners und allgemeiner Konstruktionsprinzipien wurde infolge eines F&E-Projektes in Kooperation mit der AE&E ein neuer Versuchsbrenner mit einer thermischen Leistung von 2,5 MW entwickelt und in einer Versuchsanlage der Fa. ENEL in Livorno, Italien, getestet. Dabei wurden Versuche mit unterschiedlichen Brennerkonfigurationen sowohl im konventionellen Betrieb mit Luft als auch im Oxyfuel-Betrieb durchgeführt. Die Versuchsergebnisse zeigen, dass das Brennerkonzept speziell für den Oxyfuel-Betrieb gut geeignet ist und durchwegs im Vergleich mit derzeit im Einsatz befindlichen Oxyfuel-Brennern gute Ergebnisse in Bezug auf Schadstoffemissionen und Koksabbrand erzielt werden konnten.

Nach Auswahl eines geeigneten Betriebspunktes in Bezug auf geringe NO-Emissionen wurden detaillierte Untersuchungen der Flamme im Oxyfuel-Betrieb vorgenommen, wobei sowohl Flammentemperatur- und Konzentrationsprofile innerhalb der Brennkammer als auch Gesamt- und Strahlungswärmestromdichten entlang der Brennkammerwand gemessen wurden. Auf Basis der erhaltenen Versuchsdaten wurden in weiterer Folge die für die numerische Simulation notwendigen Randbedingungen abgeleitet, wobei thermodynamische Kreisprozesssimulationen notwendig waren, um nicht direkt messbare Einflussfaktoren wie die Luftinfiltration in die Versuchsanlage und die Rauchgasfeuchte des rezirkulierten Rauchgases abschätzen zu können.

Neben der Beschreibung von derzeit gängigen Modellen zur numerischen Berechnung von Oxyfuel-Brennkammern wurde genauer auf die Modellierung der Strahlungssituation innerhalb von Oxyfuel-gefeuerten Brennkammern eingegangen. Aufgrund der veränderten Brennkammeratmosphäre können derzeit verfügbare Modelle zur Berechnung der Gasstrahlung nur bedingt eingesetzt werden, wobei festgestellt werden konnte, dass speziell bei größeren geometrischen Weglängen, wie es bei kohlenstaubgefeuerten Kesseln

größerer Leistung ($>300 \text{ MW}_{\text{th}}$) der Fall ist, die modellbedingten Abweichungen größer werden. Deshalb wurde ein Berechnungsprogramm entwickelt, anhand dessen es möglich ist, spezifisch für den jeweiligen Anwendungsfall Modellparameter für das Weighted-Sum-of-Grey-Gases-Modell (WSGGM) zu berechnen, wobei die dazu notwendigen Daten durch den Einsatz von Statistical-Narrow-Band-Modellen generiert wurden. Da nur Programme verwendet wurden, die entweder auf jedem handelsüblichen PC installiert werden können oder als Freeware verfügbar sind, besteht grundsätzlich die Möglichkeit, die Berechnungsroutinen ohne weitere Einschränkungen zu verwenden.

Da es sich bei einer Kohlenstaubfeuerung um ein Gas-Feststoff-Gemisch innerhalb der Brennkammer handelt, muss neben der Gasstrahlung ebenfalls der Einfluss der Partikel berücksichtigt werden. Aufgrund der geringen Informationen bezüglich der Strahlungseigenschaften von Kohlenstaub beziehungsweise Kohlenasche wurden Berechnungen basierend auf der Mie-Theorie durchgeführt, um im Speziellen die Absorptions- und Streueigenschaften der Partikelwolke abschätzen zu können. Auf Basis der Berechnungen konnte gezeigt werden, dass bei Kohlenstaubpartikeln die Vorwärtsstreuung überwiegt. Anhand der Berechnungsroutinen besteht nun die Möglichkeit, die Strahlungseigenschaften der jeweiligen Partikelwolke sowie der Einzelpartikel genauer abzuschätzen und diese bei der numerischen Simulation zu berücksichtigen.

Um die neu berechneten Modellparameter überprüfen zu können, wurden numerische Simulationen des Versuchsbrenners mit dem kommerziellen Simulationsprogramm ANSYS Fluent durchgeführt und diese mit den Versuchsergebnissen verglichen. Dabei wurden zu Beginn ausschließlich die in ANSYS Fluent implementierten Modelle verwendet. Aufgrund der nach wie vor unklaren Eigenschaften der Kohlenstaubpartikel in Bezug auf Pyrolyse und Koksabbrand unter Oxyfuel-Bedingungen wurden stark vereinfachte Berechnungsmodelle verwendet, um die Berechnungszeit in einem akzeptablen Bereich zu halten.

Auf Basis der ersten Simulationsergebnisse ohne Partikel-Strahlungs-Interaktion konnte gezeigt werden, dass die Brennerflamme nicht symmetrisch ist, wobei die berechneten Ergebnisse mit den Versuchsergebnissen gut übereinstimmen. Aus diesem Grund war es jedoch nicht möglich, die Symmetrie der Brennkammer auszunutzen, um die Größe des Berechnungsgitters und somit die Rechenzeit zu reduzieren. In weiterer Folge wurde das modifizierte WSGG-Modell mit den eigens für den Anwendungsfall berechneten Parametern in Form von UDFs in die Simulation integriert. Aufgrund der Notwendigkeit, die UDFs bei jeder Iteration aufzurufen, da ansonsten die Parameter nicht korrekt übergeben werden, stieg der Berechnungsaufwand im Vergleich zur Simulation mit den Standardmodellen enorm an. Die Berechnungsergebnisse mit dem modifizierten WSGG-Modell und mit dem

Standard-WSGG-Modell von ANSYS Fluent weisen nur geringe Unterschiede auf, wobei in Bezug auf die mit dem modifizierten WSGG-Modell berechneten Strahlungswärmestromdichten und Temperaturprofile etwas bessere Ergebnisse erzielt werden konnten.

Die Berechnungsergebnisse mit dem modifizierten WSGG-Modell unter Berücksichtigung der Partikel-Strahlungs-Interaktion weisen ebenfalls nur geringe Unterschiede im Vergleich zu den zuvor genannten Berechnungsergebnissen auf. Es konnte gezeigt werden, dass in Bereichen hoher Temperaturen, wie in unmittelbarer Brennernähe, höhere Strahlungswärmestromdichten resultieren, wohingegen stromabwärts geringere Strahlungswärmestromdichten durch den Partikeleinfluss in Form von Absorption und Streuung festzustellen sind.

Durch den direkten Vergleich von experimentellen Versuchsergebnissen und Berechnungsergebnissen konnte gezeigt werden, dass der Berechnungsansatz mit dem modifizierten WSGG-Modell eine gute Alternative zu weitaus globaler ausgelegten Modellen darstellt. Da bei dem in ANSYS Fluent implementierten Berechnungsmodell nicht sichergestellt ist, dass damit gute Berechnungsergebnisse die Strahlungswärmestromdichte speziell bei Oxyfuel-Kesseln mit feuchter Rauchgasrezirkulation betreffend erreicht werden, wird der Einsatz von spezifisch berechneten Modellparametern beziehungsweise erweiterter Modelle dringend empfohlen.

Die im Rahmen dieser Arbeit programmierten Berechnungsroutinen können als Werkzeug zur Abschätzung der Strahlungssituation in Brennkammern verwendet werden. Die somit erhaltenen Berechnungsergebnisse können als wichtige Beurteilungsgrundlage herangezogen werden, inwiefern die Modellparameter der jeweiligen Modelle für Gas- und Partikel-Strahlungs-Interaktion modifiziert werden müssen.

7 Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1-1: Prinzip-Schaltbilder der CCS-Technologien (vgl. IPCC 2006).....	2
Abbildung 1-2: Entwicklungsstand des Oxyfuel-Prozesses (vgl. Burchhardt 2009).....	3
Abbildung 2-1: Mögliches Schaltbild eines kohlenstaubgefeuerten Oxyfuel-Prozesses. LZA: Luftzerlegungsanlage, SCR: Selective Catalytic Reduction (Entstickung), DeSOx: Entschwefelung (vgl. Toftegaard et al. 2010)	6
Abbildung 2-2: Zwangdurchlaufdampferzeuger mit Tangentialfeuerung mit einfacher Zwischenüberhitzung (links, vgl. Strauß 2009) und 1 1/2-Zug- Naturumlaufdampferzeuger mit Frontfeuerung (rechts, vgl. Effenberger 2000)	8
Abbildung 2-3: Normalisierte Berechnungswerte der adiabaten Flammentemperatur, des Strahlungsanteils und des Volumenstroms bezogen auf einen mit Luft berechneten Fall	9
Abbildung 3-1: Ansicht der Versuchsanlage der Fa. ENEL in Livorno, Italien	18
Abbildung 3-2: Schema der Versuchsanlage der Fa. ENEL in Livorno, Italien (vgl. Rossi et al. 2009a)	19
Abbildung 3-3: Darstellung der Versuchsbrennkammer der Fa. ENEL (vgl. Rossi et al. 2009a).....	20
Abbildung 3-4: Prinzipskizze des Absaugsonden-Pyrometers (vgl. Biasci, Coraggio 2010).....	22
Abbildung 3-5: Prinzipskizze der Messsonde zur Bestimmung der Gesamtwärmestromdichte (vgl. Biasci, Coraggio 2010)	23
Abbildung 3-6: Prinzipskizze der Messsonde zur Bestimmung der Strahldichte (vgl. Biasci, Coraggio 2010)	24
Abbildung 3-7: Wirkungsprinzip eines Drallbrenners (links, vgl. Leuckel et al. 1970) und eines Strahlbrenners (rechts, vgl. Zelkowski 2004).....	27
Abbildung 3-8: IFRF-Flammenklassifikationssystem (vgl. Woycenko et al. 1994).....	28
Abbildung 3-9: Skizze eines Low-NO _x -Drallstufenbrenners (vgl. Leisse 2008 VGB)	29
Abbildung 3-10: Prinzipskizze des „Friendly Coal“-Brenners OPCB2c5.....	34

Abbildung 3-11: NO-Konzentrationen bei unterschiedlichen Sauerstoffinjektionsanteilen in Abhängigkeit von verschiedenen Brennerkonfigurationen (Stauplatten- und Drallerzeugerposition)	36
Abbildung 3-12: Prinzipskizze des neu konstruierten „AE&E“-Brenners	38
Abbildung 3-13: Konstruktionsprinzip der Sauerstoffinjektion (links: geschlossen, rechts: geöffnet)	39
Abbildung 3-14: Prinzipskizze des Drallerzeugers	41
Abbildung 3-15: Gewählte Rohrdurchmesser und Brennerkehlenabmessung des neu ausgelegten Brenners (Abmessungen in mm)	41
Abbildung 3-16: Geschwindigkeitsverläufe der einzelnen Brennerkanäle und Tangentialgeschwindigkeitsverläufe bei konstanten Drallzahlen in Abhängigkeit vom $GSMA_{sec}$	42
Abbildung 3-17: Exemplarischer zeitlicher Verlauf des Kohlenstaubmassenstroms.....	44
Abbildung 3-18: NO-Konzentrationen im Rauchgas bei unterschiedlichen Drallerzeugerpositionen ($AP=0 \rightarrow$ maximaler Drall) und Sauerstoffkonzentrationen (in Vol.% trocken) im Rauchgas bei Betrieb mit Luft.....	46
Abbildung 3-19: NO-Konzentrationen im Rauchgas bei unterschiedlichen Drallerzeugerpositionen ($AP=0$ mm \rightarrow maximaler Drall), Sauerstoffinjektionsanteilen in den Primärstrom und Sauerstoffinjektorpositionen ($IP=0 \rightarrow$ Injektor geschlossen) im Oxyfuel-Betrieb bei einer thermischen Leistung von 2,5 MW	48
Abbildung 3-20: NO-Konzentrationen im Rauchgas beider untersuchter Brenner in Abhängigkeit vom Sauerstoffinjektionsanteil.....	49
Abbildung 3-21: Gemessene Wärmestromdichten und Brennkammerwandtemperaturen entlang der Brennkammer	51
Abbildung 3-22: Vergleich der Wandtemperaturverläufe und der Wärmestromdichten der Kühlkreisläufe für den Betrieb mit Luft- und Oxyfuel-Betrieb bei gleicher thermischer Leistung ($2,5 MW_{th}$).....	52
Abbildung 3-23: Vergleich der Temperaturprofile (Oxyfuel und Luft) in einem axialen Abstand von 0,17 m von der Brennermündung	53

Abbildung 3-24: Überdrücke gegenüber Umgebungsdruck an unterschiedlichen Anlagenkomponenten während des Betriebs mit dem „Friendly Coal“-Brenner (vgl. Rossi et al. 2009b) und dem „AE&E“-Brenner.....	55
Abbildung 3-25: IPSEpro-Modellschaltbild der Versuchsanlage zur Berechnung des Luftinfiltrationsmassenstroms und der Rauchgasfeuchte des rezirkulierten Rauchgases (Rotes Feld=Fehlerquadrat, türkises Feld=gemessene Sollwerte; weißes Feld=berechnete Werte, grünes Feld=variable Werte).....	57
Abbildung 3-26: Einfluss der Rauchgastemperatur nach dem Kondensator auf die H ₂ O- und CO ₂ -Konzentrationen am Austritt der Brennkammer (Bezugstemperatur: 30°C).....	59
Abbildung 4-1: Spektrale Strahldichte eines schwarzen Körpers bei 1300 K, eines grauen Strahlers mit einem Emissionsgrad von 0,8 bei 1300 K und eines Rauchgases (p _{H₂O} =0,0749 bar, p _{CO₂} =0,1521 bar, p _{O₂} =0,0263 bar, p _{N₂} =0,7468 bar) bei einer geometrischen Weglänge von 6 m und 1300 K, jeweils mit RADCAL berechnet.....	62
Abbildung 4-2: Berechnete Emissionsgrade bei Verbrennung mit Luft bei 1300K Rauchgastemperatur (p _{H₂O} =0,0748 bar, p _{CO₂} =0,1521 bar, p _{O₂} =0,0263 bar, p _{N₂} =0,7468 bar) und unterschiedlichen geometrischen Weglängen (0,01 bis 40 m).....	74
Abbildung 4-3: Berechnete Emissionsgrade bei Oxyfuel-Verbrennung bei feuchter Rauchgasrezirkulation bei 1300K Rauchgastemperatur (p _{H₂O} =0,3148 bar, p _{CO₂} =0,6397 bar, p _{O₂} =0,0399 bar, p _{N₂} =0,0056 bar) und unterschiedlichen geometrischen Weglängen (0,01 bis 40 m)	75
Abbildung 4-4: Berechnete Emissionsgrade bei Oxyfuel-Verbrennung bei trockener Rauchgasrezirkulation und 1300K Rauchgastemperatur (p _{H₂O} =0,1701 bar, p _{CO₂} =0,7797 bar, p _{O₂} =0,0434 bar, p _{N₂} =0,0068 bar) und unterschiedlichen geometrischen Weglängen (0,01 bis 40 m)	76
Abbildung 4-5: Vergleich der berechneten Emissionsgrade zwischen dem Referenzmodell (em2c) und dem modifizierten WSGG-Modell mit ±5 %-Fehlergrenzen.....	82
Abbildung 4-6: Prozentuelle Abweichung der Emissionsgrade zwischen dem WSGG-Modell und em2c (p _{H₂O} =0,48 bar, p _{CO₂} =0,48 bar, p _{ges} =1 bar, s=0,01 bis 40 m, T=500-2500 K)	83

Abbildung 4-7: Vergleich der berechneten Emissionsgrade zwischen dem Referenzmodell (RADCAL) und dem modifizierten WSGG-Modell mit $\pm 10\%$ -Fehlergrenzen ($p_{\text{H}_2\text{O}}=0,697$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,1263$ bar, $p_{\text{ges}}=1$ bar, $s=0,01-40$ m, $T=500-2500$ K)	84
Abbildung 4-8: Prozentuelle Abweichung der Emissionsgrade zwischen dem WSGG-Modell und RADCAL ($p_{\text{H}_2\text{O}}=0,697$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,1263$ bar, $p_{\text{ges}}=1$ bar, $s=0,01-40$ m, $T=500-2500$ K)	85
Abbildung 4-9: Schematische Darstellung der Streuungsmechanismen an Partikeln (vgl. Modest 2003).....	87
Abbildung 4-10: Übersichtsdiagramm zur Bestimmung von abhängiger bzw. unabhängiger Streuung in Abhängigkeit von Partikelgrößenparameter und Staubbeladung (Modest 2003)	89
Abbildung 4-11: Normierte Streuungsphasenfunktionen bei konstantem Realteil (1,5) und unterschiedlichen Imaginärteilen des komplexen Brechungsindex sowie die zugehörigen Wirkungsfaktoren und der prozentuelle Anteil der Rückwärtsstreuung bei konstanter Wellenlänge und konstantem Partikelradius.....	91
Abbildung 4-12: Normierte Streuungsphasenfunktionen bei konstantem Realteil (1,5) und unterschiedlichen Imaginärteilen des komplexen Brechungsindex sowie die zugehörigen Wirkungsfaktoren und der prozentuelle Anteil der Rückwärtsstreuung bei konstanter Strahlungswellenlänge und einer Partikelwolke.....	93
Abbildung 4-13: Normierte Streuungsphasenfunktionen bei konstantem komplexen Brechungsindex bei unterschiedlichen Wellenlängen sowie die zugehörigen Wirkungsfaktoren und der prozentuelle Anteil der Rückwärtsstreuung einer Partikelwolke mit unterschiedlichen Partikelradien	94
Abbildung 4-14: Normierte gewichtete Streuungsphasenfunktionen bei konstantem komplexen Brechungsindex bei unterschiedlichen Partikelradien sowie die zugehörigen Wirkungsfaktoren und der prozentuelle Anteil der Rückwärtsstreuung ($T=1200$ K).....	95
Abbildung 4-15: Absorptions- und Rückstreuwirkungsfaktoren bei unterschiedlichen Temperaturen und mittleren Partikelradien ($m=1,5-0,005i$).....	96
Abbildung 4-16: Emissionsgradverläufe bei variabler geometrischer Weglänge und konstanter Partikelbeladung ($B_p=0,02$ kg·m ⁻³ , schwarze Linien), nur Partikel mit Rückwärtsstreuung (Partikeldurchmesser $d_p=20$ μm , $Q_{\text{abs}}=0,38$, $Q_{\text{rstr}}=0,12$,	

$A_p=60 \text{ m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$) und der Gasphase (1300 K Rauchgastemperatur, $p_{\text{H}_2\text{O}}=0,0748$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,1521$ bar, $p_{\text{O}_2}=0,0263$ bar, $p_{\text{N}_2}=0,7468$ bar)	98
Abbildung 4-17: Gesamtemissionsgradverläufe bei variabler Partikelbeladung und konstanten geometrischen Weglängen ($s_{\text{gl}}=2$ und 8 m, Partikeldurchmesser $d_p=20 \text{ }\mu\text{m}$, $Q_{\text{abs}}=0,38$, $Q_{\text{rstr}}=0,12$, $A_p=60 \text{ m}^2 \cdot \text{kg}^{-1}$, 1300 K Rauchgastemperatur, $p_{\text{H}_2\text{O}}=0,0748$ bar, $p_{\text{CO}_2}=0,1521$ bar, $p_{\text{O}_2}=0,0263$ bar, $p_{\text{N}_2}=0,7468$ bar)	99
Abbildung 5-1: Geometrie und Flächenunterteilung der modellierten Versuchsbrennkammer	102
Abbildung 5-2: Schnitt durch den Brenner mit den zugehörigen Zuströmkanälen (links) und Detaildarstellung des Drallerzeugerschaufelgitters (rechts)	102
Abbildung 5-3: Darstellung des Brennermündungsbereichs mit Berechnungsgitter	104
Abbildung 5-4: Berechnetes Temperaturprofil der Brennkammer (horizontaler Schnitt auf Höhe der Brennerachse) mit Positionsmarkierungen der Messpunkte.....	116
Abbildung 5-5: Asymmetrische Geschwindigkeitsverteilung im Sekundärkanal	116
Abbildung 5-6: Vergleich der experimentell ermittelten Temperaturprofile mit den auf Basis der Standardmodelle berechneten Temperaturprofilen	117
Abbildung 5-7: Vergleich der experimentell ermittelten O_2 -Konzentrationen mit den auf Basis der Standardmodelle berechneten O_2 -Konzentrationen	118
Abbildung 5-8: Vergleich der experimentell ermittelten CO_2 -Konzentrationen mit den auf Basis der Standardmodelle berechneten CO_2 -Konzentrationen.....	119
Abbildung 5-9: Vergleich der experimentell ermittelten Strahlungs- und Gesamtwärmeströme (5 % bzw. 12 % Messunsicherheit) mit den auf Basis der Standardmodelle berechneten Wärmeströme	120
Abbildung 5-10: Vergleich der experimentell ermittelten Strahlungs- und Gesamtwärmeströme (5 % bzw. 12 % Messunsicherheit) mit den auf Basis des modifizierten WSGG-Modells berechneten Wärmeströme.....	122
Abbildung 5-11: Vergleich der experimentell ermittelten Temperaturprofile mit den auf Basis des modifizierten WSGG-Modells und der Berücksichtigung der Partikel-Strahlungs-Interaktion ermittelten Simulationsergebnissen	123
Abbildung 5-12: Vergleich der experimentell ermittelten Strahlungs- und Gesamtwärmeströme (5 % bzw. 12 % Messunsicherheit) mit den auf Basis des	

modifizierten WSGG-Modells unter Berücksichtigung der Partikel-Strahlungs- Interaktion berechneten Wärmeströme.....	124
Abbildung 5-13: Vergleich der experimentell ermittelten Strahlung (5 % Messunsicherheit) mit den auf Basis des Standard-WSGG-Modells, des modifizierten WSGG-Modells und des modifizierten WSGG-Modells unter Berücksichtigung der Partikel-Strahlungs-Interaktion berechneten Wärmeströme.....	125

8 Tabellenverzeichnis

Tabelle 3-1: Axialgeschwindigkeiten für verschiedenen Kohlen (vgl. Basu et al. 2000).....	31
Tabelle 3-2: Brennerkonfigurationen und zugehörige NO-Emissionen ⁽¹⁾ SP=Stauplattenposition, Distanz zwischen Primärkanalausstritt und Stauplatte in axialer Richtung; ⁽²⁾ TP=Tangentialdrallerzeugerposition, Öffnungslänge des Tangentialdrallerzeugers; ⁽³⁾ Aufteilung des gesamt benötigten Sauerstoffs zwischen Sekundär und Primärstrom, bei 0/100 % wird der gesamte Sauerstoff dem Sekundärstrom beigemischt; ⁽⁴⁾ geplanter Restsauerstoffgehalt im Rauchgas auf trockener Basis)	35
Tabelle 3-3: Brennerkonfigurationen während des Betriebes mit Luft bei einer thermischen Leistung von 2,5 MW ⁽¹⁾ AP=Axialdrallerzeugerposition, 0 mm entsprechen maximaler Verdrallung; ⁽²⁾ geplanter Restsauerstoffgehalt im Rauchgas auf trockener Basis).....	45
Tabelle 3-4: Brennerkonfigurationen während des Oxyfuel-Betriebs bei 2,5 MW _{th} ⁽¹⁾ AP=Axialdrallerzeugerposition, 0 mm → maximale Verdrallung; ⁽²⁾ IP=Injektorposition, 0 mm → geschlossener Injektor; ⁽³⁾ Aufteilung des Sauerstoffs zwischen Sekundär- und Primärstrom, bei 0/100 % wird der gesamte Sauerstoff dem Sekundärstrom beigemischt; ⁽⁴⁾ geplanter Restsauerstoffgehalt im Rauchgas auf trockener Basis)	47
Tabelle 3-5: Betriebsbedingungen für die Messungen innerhalb der Brennkammer im Oxyfuel-Betrieb	50
Tabelle 3-6: Zeitlich gemittelte Konzentrationen von CO ₂ und O ₂ bei unterschiedlichen Messstellen während der Messungen innerhalb der Flamme	56
Tabelle 4-1: Haupt- und Nebenbanden der Moleküle CO ₂ und H ₂ O.....	65
Tabelle 4-2: Verwendete Modelle zur Berechnung des Emissionsgrades beziehungsweise der Strahldichte für konventionelle Verbrennung; T=Temperatur, p _{ges} =Gesamtdruck, s=geometrische Weglänge, p _{ratio} =p _{H₂O} /p _{CO₂} =Partialdruckverhältnis	72
Tabelle 4-3: Koeffizienten für WSGG-Modell mit vier grauen Gasen (p _{CO₂} =0,48, p _{H₂O} =0,48, s=0,01-60 m, T=500-2500 K) nach Johansson (Johansson et al. 2010).....	81
Tabelle 4-4: Koeffizienten für neu berechnetes WSGG-Modell mit vier grauen Gasen (p _{CO₂} =0,48, p _{H₂O} =0,48, s=0,01-60 m, T=500-2500 K)	82

Tabelle 4-5: Koeffizienten für neu berechnetes WSGG-Modell auf Basis von Berechnungen mit RADCAL mit vier grauen Gasen ($p_{\text{CO}_2}=0,697$, $p_{\text{H}_2\text{O}}=0,1263$, $s=0,01-42$ m, $T=500-2500$ K)84

Tabelle 4-6: Prozentuelle Abweichung des WSGG-Modells (Parameter aus Tabelle 4-5) bezogen auf das Referenzmodell RADCAL bei unterschiedlichen Partialdrücken und geometrischen Weglängen ($s=0,01-42$ m) und einer Temperatur von 1500K.....86

Tabelle 5-1: Qualität der Berechnungsgitter in Abhängigkeit von der Equiangle Skewness (Fluent Inc. 2006) 105

9 Literaturverzeichnis

- Al-Abbas, A., Naser, J. & Dodds, D. 2011, "CFD modelling of air-fired and oxy-fuel combustion of lignite in a 100 KW furnace", *Fuel*, vol. 90, no. 5, pp. 1778-1795.
- Allen, G. 1995, "Coal combustion in advanced burners for minimal emissions & carbon dioxide reduction technologies", EU JOULE II.
- Altmann, U.S. & Lux, T. 1989, "Strömungsvorgänge in Drallflammen und ihre ingenieurmäßige Modellierung. Voraussetzung zur Beherrschung ballastreicher Brennstoffe in Staubfeuerungen", *Energietechnik*, vol. 39, no. 3, pp. 89-94.
- Andersson, K., Normann, F., Johnsson, F. & Leckner, B. 2008, "NO emission during oxy-fuel combustion of lignite", *Industrial & Engineering Chemistry Research*, vol. 47, no. 6, pp. 1835-1845.
- Ansys, I. 2011a, *ANSYS Fluent 14.0 Theory Guide*, ANSYS, Inc., Canonsburg.
- Ansys, I. 2011b, *ANSYS Fluent 14.0 User Guide*, ANSYS, Inc., Canonsburg.
- ASTM Standard G124 2003, "Standard Test Method for Determining the Combustion Behavior of Metallic Materials in Oxygen-Enriched Atmospheres", *ASTM International, West Conshohocken, PA*, vol. G124-10.
- ASTM Standard G88 2005, "Standard Guide for Designing Systems for Oxygen Service", *ASTM International, West Conshohocken, PA*. DOI: 10.1520/G0088-05, vol. G88-05.2009.
- Badzioch, S. & Hawksley, P.G.W. 1970, "Kinetics of Thermal Decomposition of Pulverized Coal Particles", *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, vol. 9, no. 4, pp. 521-530.
- Baehr, H.D. & Stephan, K. 2010, "Wärmestrahlung" in *Wärme- und Stoffübertragung*, Springer Verlag, Berlin, pp. 589-714.
- Bahador, M. & Sundén, B. 2008, "Investigation on the effects of fly ash particles on the thermal radiation in biomass fired boilers", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 51, no. 9-10, pp. 2411-2417.
- Basu, P., Cen, K. & Jestin, L. 2000, *Boilers and burners: design and theory*, Springer Verlag, Berlin.
- Baukal, C.E. 2003, *Industrial burners handbook*, CRC Press LLC, Boca Raton, Florida, USA.
- Baum, M.M. & Street, P.J. 1971, "Predicting the combustion behaviour of coal particles", *Combustion Science and Technology*, vol. 3, no. 5, pp. 231-243.
- Becher, V., Clausen, S., Fateev, A. & Spliethoff, H. 2011, "Validation of spectral gas radiation models under oxyfuel conditions. Part A: Gas cell experiments", *International Journal of Greenhouse Gas Control*, vol. 5, pp. S76-S99.

-
- Bejarano, P.A. & Levendis, Y.A. 2008, "Single-coal-particle combustion in O₂/N₂ and O₂/CO₂ environments", *Combustion and Flame*, vol. 153, no. 1–2, pp. 270-287.
- BGBI. I Nr. 65/2010 2010, "Gesamte Rechtsvorschrift für Emissionsschutzgesetz für Kesselanlagen"
- Biasci, L. & Coraggio, G. 2010, *AE&E Oxy-coal burner tests*, IFRF Doc. No H100/y/02
- Biermann, P. & Vortmeyer, D. 1969, "Wärmestrahlung staubhaltiger Gase", *Heat and Mass Transfer*, vol. 2, no. 4, pp. 193-202.
- Bohren, C.F. & Huffman, D.R. 1983, *Absorption and scattering of light by small particles*, Wiley, New York.
- Borrego, A.G. & Alvarez, D. 2007, "Comparison of chars obtained under oxy-fuel and conventional pulverized coal combustion atmospheres", *Energy and Fuels*, vol. 21, no. 6, pp. 3171-3179.
- Braun, S. 2005, "Strahlungsmodellierung" in *CFD-Seminar, Strahlungsmodellierung FLUENT*, Darmstadt, Deutschland.
- Brix, J., Jensen, P.A. & Jensen, A.D. 2010, "Coal devolatilization and char conversion under suspension fired conditions in O₂/N₂ and O₂/CO₂ atmospheres", *Fuel*, vol. 89, no. 11, pp. 3373-3380.
- Brummel, H.G. 2006, "Wärmestrahlung von Gas-Feststoff-Gemischen" in *VDI-Wärmeatlas*, Springer Verlag, Berlin.
- Brummel, H.G. & Kakaras, E. 1990, "Wärmestrahlungsverhalten von Gas-/Feststoffgemischen bei niedrigen, mittleren und hohen Staubbeladungen", *Heat and Mass Transfer*, vol. 25, no. 3, pp. 129-140.
- Brummel, H.G. & Vortmeyer, D. 1992, "Die Berechnung der Wärmestrahlung aus Gaskörpern mit Feststoffbeladungen", *Chemie Ingenieur Technik-CIT*, vol. 64, no. 9, pp. 806.
- Brunetti, I., Galletti, C., Rossi, N., Sorrentino, L. & Tognotti, L. 2009, "Numerical Model of Oxy-Fuel Experiments in a Semi-Industrial Furnace", *10th Conferene on Energy for a Clean Environment*, Lisboa, Portugal.
- Buhre, B.J.P., Elliott, L.K., Sheng, C., Gupta, R.P. & Wall, T.F. 2005, "Oxy-fuel combustion technology for coal-fired power generation", *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 31, no. 4, pp. 283-307.
- Burchhardt, U. 2009, "CO₂-Abscheidung – die Oxyfuel-Forschungsanlage und alternative Abscheide-Technologien", *Workshop des Institutes für Energie- und Regulierungstechnik*, Berlin.
- Burchhardt, U. & Radunsky, D. 2007, "Erfahrungen aus der Planung und Genehmigung der Oxyfuel-Forschungsanlage von Vattenfall", *39. Kraftwerkstechnisches Kolloquium: Verfahren und Anlagen der Hochtemperaturtechnik*, Dresden, Germany, pp. 212.
- Châtel-Pélage, F., Varagani, R., Pranda, P., Perrin, N., Farzan, H., Vecchi, S.J., Yongqi, L., Chen, S., Rostam-Abadi, M. & Bose, A.C. 2006, "Applications of oxygen for NO_x control
-

- and CO₂ capture in coal-fired power plants", *Thermal Science*, vol. 10, no. 3, pp. 119-142.
- Chen, C. & Rubin, E.S. 2009, "CO₂ control technology effects on IGCC plant performance and cost", *Energy Policy*, vol. 37, no. 3, pp. 915-924.
- Chui, E.H., Majeski, A.J., Douglas, M.A., Tan, Y. & Thambimuthu, K.V. 2004, "Numerical investigation of oxy-coal combustion to evaluate burner and combustor design concepts", *Energy*, vol. 29, no. 9-10, pp. 1285-1296.
- Chui, E.H., Douglas, M.A. & Tan, Y. 2003, "Modeling of oxy-fuel combustion for a western Canadian sub-bituminous coal☆", *Fuel*, vol. 82, no. 10, pp. 1201-1210.
- Coppalle, A. & Vervisch, P. 1983, "The total emissivities of high-temperature flames", *Combustion and Flame*, vol. 49, no. 1-3, pp. 101-108.
- Cumbo, D., Rossi, N., Benelli, G., Gazzino, M. & Tosi, E. 2009, "Oxy-Coal combustion experiences on a 3 MW test rig facility", 1st OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE, Cottbus, Germany.
- Davidson, R.M. & Santos, S.O. 2010, *Oxyfuel combustion of pulverised coal*, IEA Clean Coal Centre.
- de Kluyver, J.P. & Gast, C.H. 1995, "Betriebserfahrungen mit Low-NO_x-Brennern in kohlenbefeuerten Kesseln in den Niederlanden", *VGB Kraftwerkstechnik*, vol. 75, no. 7, pp. 603-608.
- Edge, P., Gubba, S., Ma, L., Porter, R., Pourkashanian, M. & Williams, A. 2010, "LES modelling of air and oxy-fuel pulverised coal combustion-Impact on flame properties", *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, no. 2, pp. 2709-2716.
- Edge, P., O'Nions, P., Pourkashanian, M., Stephenson, P., Smart, J. & Williams, A. 2009, "A Quantitative Study of the Performance of Commercial Radiation Models for Predicting Behaviour of Oxy-Coal Combustion", 1st OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE, Cottbus, Germany.
- Edge, P., Gharebaghi, M., Irons, R., Porter, R., Porter, R.T.J., Pourkashanian, M., Smith, D., Stephenson, P. & Williams, A. 2011, "Combustion modelling opportunities and challenges for oxy-coal carbon capture technology", *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 89, no. 9, pp. 1470-1493.
- Effenberger, H. 2000, *Dampferzeugung*, 2. Auflage, Springer Verlag, Berlin.
- Effenberger, H. 1965, "Grundlagen der Auslegung von Kohlenstaubfeuerungen", *Energietechnik*, vol. 15. Jg., no. 9, pp. 392-400.
- EIGA 2002, *Oxygen Pipeline Systems IGC Doc 13/02/E*, European Industrial Gas Association, Brussels.
- Epple, B., Leithner, R., Linzer, W. & Walter, H. 2009, *Simulation von Kraftwerken und wärmetechnischen Anlagen*, Springer Verlag, Berlin.
- Europäische Kommission 1997, *Joule II*, Office for Official Publications of the European Communities, Luxembourg.

- Falcke, T.J., Hoadley, A.F.A., Brennan, D.J. & Sinclair, S.E. 2011, "The sustainability of clean coal technology: IGCC with/without CCS", *Process Safety and Environmental Protection*, vol. 89, no. 1, pp. 41-52.
- Ferziger, J.H. & Perić, M. 2008, *Numerische Strömungsmechanik*, Springer Verlag, Berlin.
- Fletcher, T.H., Kerstein, A.R., Pugmire, R.J., Solum, M.S. & Grant, D.M. 1992, "Chemical percolation model for devolatilization. 3. Direct use of ¹³C NMR data to predict effects of coal type", *Energy and Fuels*, vol. 6, no. 4, pp. 414-431.
- Fluent Inc. 2006, *Gambit 2.3 User's Guide*.
- Fry, A., Adams, B., Paschedag, A., Kazalski, P., Carney, C., Oryshchyn, D., Woodside, R., Gerdemann, S. & Ochs, T. 2011, "Principles for retrofitting coal burners for oxy-combustion", *International Journal of Greenhouse Gas Control*, vol. 5, pp. 151-158.
- Gerlinger, P. 2005, *Numerische Verbrennungssimulation*, Springer Verlag, Berlin
- Griendl, L. 2008, *Auslegung eines sauerstoffbetriebenen Kohlenstaubbrenners mit hoher CO₂-Rezirkulationsrate*, Master Thesis, Technische Universität graz, Austria.
- Griendl, L., Hohenwarter, U. & Karl, J. 2008, "CFD aided Design of an Oxycoal Test Burner with High Recirculation Rates", *33rd International Technical Conference on Coal Utilization & Fuel Systems*, Clearwater, Florida.
- Grosshandler, W.L. 1993, *RADCAL--a Narrow-band Model for Radiation Calculations in a Combustion Environment*, National Institute of Standards and Technology, Building and Fire Research Laboratory.
- Gupta, R., Khare, S., Wall, T., Spero, C., Eriksson, K., Lundström, D. & Eriksson, J. 2006, "Adaptation of gas emissivity models for CFD based radiative transfer in large air-fired and oxy-fired furnaces", *31st international technical conference on coal utilization & fuel systems*, Clearwater, Florida.
- Gupta, R. & Wall, T. 1985, "The optical properties of fly ash in coal fired furnaces", *Combustion and Flame*, vol. 61, no. 2, pp. 145-151.
- Habermehl, M., Erfurth, J., Toporov, D., Forster, M. & Kneer, R. 2011, "Experimental and numerical investigations on a swirl oxycoal flame", *Applied Thermal Engineering*, in press.
- Hercog, J., Milewska, A. & Swiatkowski, B. 2011, "Experimental and Numerical Investigations of Devolatilisation and Char Oxidation in Oxycombustion Conditions", *2nd OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Yeppoon, Australia.
- Higginbotham, P., White, V., Fogash, K. & Guvelioglu, G. 2011, "Oxygen supply for oxyfuel CO₂ capture", *International Journal of Greenhouse Gas Control*, vol. 5, pp. 194-203.
- Hottel, H.C. & Sarofim, A.F. 1967, *Radiative transfer*, McGraw-Hill, New York.
- Hultqvist, D., Glausch, M., Meyer, H., Radunsky, D. & Witter, T. 2009, "Vattenfall Oxyfuel Power Plant Development -Engineering of a Coal Fired Power Plant with Oxyfuel Technology", *1st OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Cottbus, Germany.

-
- IEA 2010a, *Cost and Performance of Carbon Dioxide from Power Generation*, OECD/IEA, France.
- IEA 2009, *World Energy Outlook 2009*, OECD/IEA, France.
- IEA 2010b, *World Energy Outlook 2010*, OECD/IEA, France.
- IEA 2010c, *World Energy Outlook 2010, Key Graphs*, OECD/IEA, France.
- IPCC 2006, *Carbon dioxide capture and storage*, Cambridge University Press, UK und USA.
- Johansson, R., Andersson, K., Leckner, B. & Thunman, H. 2010, "Models for gaseous radiative heat transfer applied to oxy-fuel conditions in boilers", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 53, no. 1-3, pp. 220-230.
- Johansson, R., Leckner, B., Andersson, K. & Johansson, F. 2011, "Account for variations in the H₂O to CO₂ molar ratio when modelling gaseous radiative heat transfer with the weighted-sum-of-grey-gases model", *Combustion and Flame*, vol. 158, no. 5, pp. 893-901.
- Johnson, T.R. & Beer, J.M. 1973, "Radiative heat transfer in furnaces: further development of the zone method of analysis", *Symposium (International) on Combustion*, vol. 14, Issue 1, pp. 639–649
- Joos, F. 2006, *Technische Verbrennung*, Springer Verlag, Berlin.
- Kakaras, E., Koumanakos, A., Doukelis, A., Giannakopoulos, D. & Vorrias, I. 2007, "Oxyfuel boiler design in a lignite-fired power plant", *Fuel*, vol. 86, no. 14, pp. 2144-2150.
- Kangwanpongpan, T., Correa, D.S. & Krautz, H.J. 2011, "Prediction of oxy-coal combustion through an optimized weighted sum of gray gases model", *Energy*, vol. 41, no. 1, pp. 244–251.
- Karlstrom, O., Brink, A., Hupa, M. & Tognotti, L. 2011, "Multivariable optimization of reaction order and kinetic parameters for high temperature oxidation of 10 bituminous coal chars", *Combustion and Flame*, vol. 158, no. 10, pp. 2056-2063.
- Kather, A., Hermsdorf, C. & Klostermann, M. 2007, "Der kohlebefeuerte Oxyfuel-Prozess", *VGB PowerTech*, vol. 4, pp. 84-91.
- Khare, S.P., Wall, T.F., Farida, A.Z., Liu, Y., Moghtaderi, B. & Gupta, R.P. 2008, "Factors influencing the ignition of flames from air-fired swirl pf burners retrofitted to oxy-fuel", *Fuel*, vol. 87, no. 7, pp. 1042-1049.
- Kim, S. & Lee, H.D. 2009, "Korean Oxy-Fuel Demonstration Project", *1st OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Cottbus, Germany.
- Kimura, N., Omata, K., Kiga, T., Takano, S. & Shikisima, S. 1995, "The characteristics of pulverized coal combustion in O₂/CO₂ mixtures for CO₂ recovery", *Energy conversion and management*, vol. 36, no. 6-9, pp. 805-808.
- Kluger, F., Lysk, S. & Altmann, H. 2006, "30 MWth Oxyfuel-Pilotanlage – Untersuchungsschwerpunkte und Auslegung des Dampferzeugers", 38. *Kraftwerkstechnisches Kolloquium*, Dresden, Germany.
-

-
- Kluger, F., Möncker, P., Bäck, A., Wang, W., Grubbström, J., Lefasseur, A. & Strand, M. 2009, "Oxy-Combustion Testing in 30 MWth Pilot Plant Schwarze Pumpe", *1st OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Cottbus, Germany.
- Kownatzki, S., Kather, A. & Klaas, G. 2011, "CO₂ Purity in Coal Fired Oxyfuel Processes", *2nd OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Yeppoon, Australia.
- Krishnamoorthy, G. 2010, "A new weighted-sum-of-gray-gases model for CO₂-H₂O gas mixtures", *International Communications in Heat and Mass Transfer*, vol. 37, no. 9, pp. 1182–1186.
- Krishnamoorthy, G., Sami, M., Orsino, S., Perera, A., Shahnam, M. & Huckaby, E.D. 2010, "Radiation modelling in oxy-fuel combustion scenarios", *International Journal of Computational Fluid Dynamics*, vol. 24, no. 10, pp. 69-82.
- Krüger, J. 1970, "Untersuchung von Drallflammen im Wassermmodell", *VDI Berichte*, vol. 146, pp. 85-89.
- Lallemant, N. & Weber, R. 1996, "A computationally efficient procedure for calculating gas radiative properties using the exponential wide band model", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 39, no. 15, pp. 3273-3286.
- Lauder, B. & Spalding, D. 1974, "The numerical computation of turbulent flows", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 3, no. 2, pp. 269-289.
- Leckner, B. 1972, "Spectral and total emissivity of water vapor and carbon dioxide", *Combustion and Flame*, vol. 19, no. 1, pp. 33-48.
- Leuckel, W., Fricker, N. & Hein, K. 1970, "Der Einfluß von Drall auf Zündverhalten und Verbrennungsdichte von Kohlenstaub- und Erdgasflammen", *VDI-Berichte*, vol. 146, pp. 69-80.
- Liu, H., Zailani, R. & Gibbs, B.M. 2005, "Comparisons of pulverized coal combustion in air and in mixtures of O₂/CO₂", *Fuel*, vol. 84, no. 7-8, pp. 833-840.
- Liu, H., Luo, C., Toyota, M., Uemiyama, S. & Kojima, T. 2006, "Kinetics of CO₂/char gasification at elevated temperatures. Part II: Clarification of mechanism through modelling and char characterization", *Fuel Processing Technology*, vol. 87, no. 9, pp. 769-774.
- Mackrory, A.J. 2008, *A mechanistic investigation of nitrogen evolution in pulverized coal oxy-fuel combustion*, Phd Thesis, Brigham Young University, USA.
- Mackrory, A. & Tree, D.E. 2008, "NO_x destruction experiments and modeling in oxy-fuel combustion", *The 33rd international technical conference on coal utilization and fuel systems*, Clearwater, Florida, USA.
- Magnussen, B.F. 1981, "On the structure of turbulence and a generalized eddy dissipation concept for chemical reaction in turbulent flow", *Nineteenth AIAA Meeting*, St. Louis.
- Manickavasagam, S. & Menguc, M.P. 1993, "Effective optical properties of pulverized coal particles determined from FT-IR spectrometer experiments", *Energy & Fuels*, vol. 7, no. 6, pp. 860-869.
-

- Marion, J., Kluger, F. & Levasseur, A. 2009, "Alstom 15 MWth Oxyfuel Test Programme for Tangential Firing", *The 34th International Technical Conference on Clean Coal & Fuel Systems*, Clearwater, Florida, USA.
- Martens, S. 2010, *Strömungsmechanik und Stoffaustausch*, Vorlesungsskriptum, Technische Universität Graz.
- Mätzler, C. 2002, *MATLAB functions for Mie scattering and absorption*, Research Report No. 2002-08, Bern.
- McCauley, K. 2009, "Oxygen Based Combustion for CO₂ Capture and NZEP Performance", *1st OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Cottbus, Germany.
- Modest, M.F. 2003, *Radiative heat transfer*, Academic Press, Oxford.
- Molina, A. & Shaddix, C.R. 2007, "Ignition and devolatilization of pulverized bituminous coal particles during oxygen/carbon dioxide coal combustion", *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 31, no. 2, pp. 1905-1912.
- Murphy, J.J. & Shaddix, C.R. 2006, "Combustion kinetics of coal chars in oxygen-enriched environments", *Combustion and Flame*, vol. 144, no. 4, pp. 710-729.
- Oliveira, A. & Yanagihara, J. 2008, "A SEMI-ELLIPSOIDAL CAVITY RADIOMETER FOR MEASUREMENT OF EMISSIVE POWER", *5th European Thermal-Sciences Conference*, Netherlands.
- Paschedag, A. 2011, "Evolving Oxy-Burner Firing Principles and a Pilot-Scale Burner Design into a Utility Boiler Firing System", *2nd OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Yeppoon, Australia.
- Rathnam, R.K., Elliott, L.K., Wall, T.F., Liu, Y. & Moghtaderi, B. 2009, "Differences in reactivity of pulverised coal in air (O₂/N₂) and oxy-fuel (O₂/CO₂) conditions", *Fuel Processing Technology*, vol. 90, no. 6, pp. 797-802.
- Rehfeldt, S., Kuhr, C., Ehmann, M. & Bergins, C. 2011a, "Modeling of radiative properties of an Oxyfuel atmosphere with a weighted sum of gray gases for variable carbon dioxide and water vapor concentrations", *10th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies*, Amsterdam, Netherlands.
- Rehfeldt, S., Kuhr, C., Schiffer, F., Weckes, P. & Bergins, C. 2011b, "First test results of Oxyfuel combustion with Hitachi's DST-burner at Vattenfall's 30 MWth pilot plant at Schwarze Pumpe", *10th International Conference on Greenhouse Gas Control Technologies*, Amsterdam, Netherlands.
- Rossi, N., Tosi, E. & Cumbo, D. 2009a, *Evaluation of the experiments with existing 3 MW air-coal burner*, Pisa, Italy.
- Rossi, N., Tosi, E. & Cumbo, D. 2009b, *Evaluation of the experiments with the new 3 MW oxy-coal burner*, Pisa, Italy.
- Rothman, L.S., Gordon, I.E., Barbe, A., Benner, D.C., Bernath, P.F., Birk, M., Boudon, V., Brown, L.R., Campargue, A. & Champion, J.P. 2009, "The HITRAN 2008 molecular spectroscopic database", *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 110, no. 9-10, pp. 533-572.

- Scheffknecht, G. 2009, "Research Perspective - Review of the Currents Understanding, Identifying Research Gaps", *1st OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Cottbus, Germany.
- Scheffknecht, G., Al-Makhadmeh, L., Schnell, U. & Maier, J. 2011, "Oxy-fuel coal combustion - A review of the current state-of-the-art", *International Journal of Greenhouse Gas Control*, vol. 5, pp. 16-35.
- Shaddix, C., Hecht, E., Jimenez, S., Lee, S.M. & Molina, A. 2009, "Detailed Investigation of the Effects of Oxy-Fuel Combustion Conditions on Pulverized Coal Ignition and Char Burning Rate", *1st OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Cottbus, Germany.
- Shaddix, C.R. & Molina, A. 2010, "Fundamental investigation of NO_x formation during oxy-fuel combustion of pulverized coal", *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 33, no. 2, pp. 1723–1730.
- Siegel, R., Howell, J.R. & Lohrengel, J. 1993, *Wärmeübertragung durch Strahlung. 3. Strahlungsübergang in absorbierenden, emittierenden und streuenden Medien*, Springer Verlag, Berlin.
- Smith, T.F., Shen, Z.F. & Friedman, J.N. 1982, "Evaluation of coefficients for the weighted sum of gray gases model", *Journal of Heat transfer*, vol. 104, pp. 602.
- Soufiani, A. & Taine, J. 1997, "High temperature gas radiative property parameters of statistical narrow-band model for H₂O, CO₂ and CO, and correlated-k model for H₂O and CO₂", *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 40, no. 4, pp. 987-991.
- Spero, C. 2009, "Callide Oxyfuel Project - Status & Development", *1st OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Cottbus, Germany.
- Stefan, B. 2008, "CO₂ storage in geological media: Role, means, status and barriers to deployment", *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 34, no. 2, pp. 254-273.
- Strauß, K. 2009, *Kraftwerkstechnik: zur Nutzung fossiler, nuklearer und regenerativer Energiequellen*, VDI-Buch, Springer Verlag, Berlin.
- Tigges, K., Klauke, F., Bergins, C., Busekrus, K., Niesbach, J., Ehmann, M., Kuhr, C., Hoffmeister, F., Vollmer, B., Buddenberg, T., Wu, S. & Kukoski, A. 2009, "Conversion of existing coal-fired power plants to oxyfuel combustion: Case study with experimental results and CFD-simulations", *Energy Procedia*, vol. 1, no. 1, pp. 549-556.
- Toftegaard, M.B., Brix, J., Jensen, P.A., Glarborg, P. & Jensen, A.D. 2010, "Oxy-fuel combustion of solid fuels", *Progress in Energy and Combustion Science*, vol. 36, no. 5, pp. 581-625.
- Toporov, D., Bocian, P., Heil, P., Kellermann, A., Stadler, H., Tschunko, S., Forster, M. & Kneer, R. 2008, "Detailed investigation of a pulverized fuel swirl flame in CO₂/O₂ atmosphere", *Combustion and Flame*, vol. 155, no. 4, pp. 605-618.
- Toshihiko, M., Takahiro, M., Kenji, K. & Noriyuki, I. 2011, "Development of and Advanced Oxy-Fuel Combustion Technology with Flue Gas Re-Circulation System, New Types of Burner and characteristics of Mill Performance", *2nd OXYFUEL COMBUSTION CONFERENCE*, Yeppoon, Australia.

Verein Deutscher Ingenieure 2006, *VDI-Wärmeatlas*, Springer Verlag, Berlin.

Wagner, H.J., Koch, M.K., Burkhardt, J., Böckmann, T.G., Feck, N. & Kruse, P. 2007, "CO₂-Emissionen der Stromerzeugung", *BWK*, vol. 59, no. 10.

Wall, T.F. 2007, "Combustion processes for carbon capture", *Proceedings of the Combustion Institute*, vol. 31, no. 1, pp. 31-47.

Wall, T., Liu, Y., Spero, C., Elliott, L., Khare, S., Rathnam, R., Zeenathal, F., Moghtaderi, B., Buhre, B., Sheng, C., Gupta, R., Yamada, T., Makino, K. & Yu, J. 2009, "An overview on oxyfuel coal combustion-State of the art research and technology development", *Chemical Engineering Research and Design*, vol. 87, no. 8, pp. 1003-1016.

Woycenko, D., Ikeda, I. & van de Kamp, W.L. 1994, *Combustion of pulverised coal in a mixture of oxygen and recycled flue gas*, Technical Report IFRF Doc F98, IJmuiden.

Zelkowski, J. 2004, *Kohlecharakterisierung und Kohleverbrennung*, VGB PowerTechn, Essen.

10 Anhang

A. Eingesetzte Messtechnik bei den 2,5 MW_{th} Tests

Eingesetzte Gasanalysatoren:

GA 1

Analysierte Komponente	Modell	gemessene Einheit	Messverfahren
O ₂	Siemens Oxymat	Vol.% trocken	Paramagnetisch
CO ₂	Siemens Ultramat 6E	Vol.% trocken	NDIR
NO _x	Siemens Ultramat 6E	ppm trocken	NDIR
CO	Siemens Ultramat 6E	ppm trocken	NDIR

GA 2

Analysierte Komponente	Modell	gemessene Einheit	Messverfahren
O ₂	Siemens Oxymat	Vol.% trocken	Paramagnetisch
CO ₂	Siemens Ultramat 5E	Vol.% trocken	NDIR
NO _x	Siemens Ultramat 5E	ppm trocken	NDIR
CO	Siemens Ultramat 5E	ppm trocken	NDIR

GA 3

Analysierte Komponente	Modell	gemessene Einheit	Messverfahren
O ₂	ABB EL 3020	Vol.% trocken	Paramagnetisch
CO ₂	Siemens Ultramat 5E	Vol.% trocken	NDIR
NO _x	ABB EL 3020	mg·Nm ⁻³ trocken	NDIR
CO	ABB EL 3020	ppm trocken	NDIR

B. Kohlenstaubbzusammensetzung und Siebanalyse

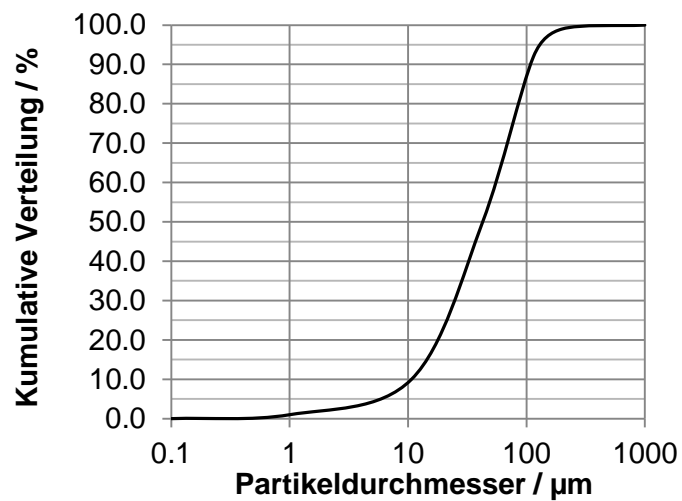
Bei der für die Versuche eingesetzten Kohle handelt es sich um eine Gasflammkohle aus der Mine Sebuku, Indonesien. Die Kohle wurde in einem Kraftwerk der Fa. ENEL gemahlen und in einem Bunker eingelagert. Von diesem Bunker wird die Kohle in einen Tagesbunker weitertransportiert, der mit Stickstoff inertisiert ist. Vom Tagesbunker wird die Kohle über eine Zudosierungseinheit dem Trägergas zugemischt und zum Brenner transportiert. Während der Versuche wurden mehrere Kohlenstaubproben entnommen und in weiterer Folge analysiert. In Tabelle B-1 ist die gemittelte Kohlenstaubanalyse angegeben.

Tabelle B-1: Kohlenstaubanalyse der verwendeten Kohle

Immediatanalyse	As		
	received	wf m. %	waf m. %
Feuchte	7,50		
Asche	9,79	10,58	
Flüchtige	36,33	39,27	43,92
Fixer Kohlenstoff	46,38	50,15	56,08
Elemntaranalyse			
Wasser	7,50		
Asche	9,79	10,58	
Kohlenstoff	63,67	68,83	76,98
Wasserstoff	4,39	4,75	5,31
Stickstoff	1,30	1,41	1,57
Schwefel	0,39	0,42	0,47
Sauerstoff	12,96	14,01	15,67
Heizwert	25222,75 kJ·kg ⁻¹ ·K ⁻¹		

Tabelle B-2: Berechnete Kohlenstaubstoffdaten

Kohlenstaubdichte	1378,5	kg·m ⁻³	
Spezifische Wärmekapazität	1235,8	J·kg ⁻¹ ·K ⁻¹	
Wärmeleitfähigkeit	0,2458	W·m ⁻¹ ·K ⁻¹	Zelkowski 2004
Swelling Coefficient	1,4	-	



Kumulative Siebkurve des Kohlenstaubs

Tabelle B-3: Berechnete Rosin-Rammler-Parameter

Minimaldurchmesser	$1 \cdot 10^{-6}$	m
Maximaldurchmesser	$1 \cdot 10^{-3}$	m
Mittlerer Durchmesser	$6 \cdot 10^{-5}$	m
Verteilungsfaktor	1,24	
Anzahl der diskreten Durchmesser	1,4	-

C. Übersicht über aktuelle Oxyfuel-Brennerentwicklungen

Aktuelle Versuchsbrennerentwicklungen

Institution/Firma	Leistung	Brennerkonfiguration	Schwerpunkte	Ergebnisse
IFRF (Woycenko, Ikeda & van de Kamp 1994)	2,5 MW _{th}	Z: Sauerstoffinjektion möglich 1: RRG + Kohle, k D 2: RRG + O ₂ , v D	Flammenstabilität Rezirkulationsrate	Rezirkulationsrate beeinflusst Flammenstabilität
IHI Kimura (Kimura et al. 1995)	1,2 MW _{th}	Z: Sauerstoffinjektion 1: RRG + Kohle, k D 2: RRG + O ₂ , v D	Flammenstabilität, Sauerstoffaufteilung, Rezirkulationsrate	Sauerstoffinjektion stabilisiert Flamme
CANMET (Chui et al. 2004)	0,3 MW _{th}	<u>Brenner A:</u> Z: Gaslanze 1: CO ₂ 2: O ₂ 3: CO ₂ + Kohle 4: RRG oder CO ₂ + O ₂ , v D <u>Brenner B:</u> Z: Gaslanze 1: CO ₂ + Kohle 2: O ₂ 3: RRG oder CO ₂ + O ₂ , v D	Flammenstabilität, Sauerstoffaufteilung, Rezirkulationsrate	Sauerstoffinjektion war notwendig, um stabile Flamme zu erhalten
ENEL (Cumbo et al. 2009)	3 MW _{th}	Z: Sauerstoffinjektion 1: RRG + Kohle, k D, (FH) 2: RRG + O ₂ , v D 3: RRG + O ₂ , v D	Schadstoffemissionen Rezirkulationsrate Sauerstoffaufteilung	Steigende NO _x Emissionen bei Injektion Rezirkulationsrate bei gleicher Flammentemperatur etwa 63%
Hitachi (Tigges et al. 2009)	1 MW _{th}	Z: RRG + O ₂ 1: RRG + Kohle + O ₂ , v D 2: RRG + O ₂ , v D 3: RRG + O ₂ , v D	ähnliche Flammen- temperaturen bei Luft und Oxyfuel	ca. 71 % Rezi
Siemens / REI (Fry et al. 2011)	1,5 MW _{th}	Z: Sauerstoffinjektion 1: RRG + Kohle 2: RRG + O ₂ , v D 3: RRG + O ₂ , v D	gleiche Strömungs- geschwindigkeit, gleiche Beladung, gleicher Impuls	bei gleichem Impuls ca. 15% geringere Strömungs- geschwindigkeit bei Oxyfuel

Z: Zentralrohr; 1, 2, 3,...Durchnummerierung der koaxialen Kanäle von innen nach außen; RRG: Rezirkuliertes Rauchgas;
k D: konstanter Drall; v D: variabler Drall

Aktuelle Großbrennerentwicklungen

Institution/Firma	Leistung	Brennerkonfiguration	Schwerpunkte	Ergebnisse
Alstom (Kluger et al. 2009)	30 MW _{th}	Type A: Z: Versperrt 1: RRG + Kohle 2: RRG + O ₂ 3: RRG+ O ₂ , v D Injektion: im Sekundärkanal	Variation von O ₂ im Rauchgas NO _x -Emissionen SO ₂ -Emissionen Zwei unterschiedliche Kohlen	Ähnlicher Ausbrand wie bei Luft spezifische SO ₂ Konzentrationen im Vergleich zu Luft gleich geringere NO _x Emissionen (30- 70 mg·MJ ⁻¹) Ähnliche Verschlackungserscheinungen
		Type B: Z: Zündbrenner 1: RRG + Kohle 2: RRG + O ₂ , v D 3: O ₂ 4: RRG + O ₂ , v D	Variation der Rezirkulationsrate	
Hitachi (Rehfeldt et al. 2011)	30 MW _{th}	Z: Versperrung 1: RRG + Kohle 2: RRG + O ₂ , v D 3: RRG + O ₂ , v D	Sauerstoffaufteilung auf die einzelnen Volumenströme, Schadstoffemissionen	stabile Flamme kann auch ohne Injektion generiert werden, Schadstoffemissionen deutlich unter den gesetzlich vorgeschriebenen Grenzwerten
Doosan (Sturgeon et al. 2011)	40 MW _{th}	keine genauen Angaben	Teillast und Schadstoffemissionen	Ähnliches Teillastverhalten wie bei Betrieb mit Luft, Geringere NO _x Emissionen bei Oxyfuel, Gleiche SO _x Emissionen
B&W (McCauley et al. 2009)	30 MW _{th}	keine genauen Angaben, spezielle Sauerstoffinjektion	Oxy-Switching, Flammenform	Umschaltprozedur entwickelt, tendenziell kürzere Flamme

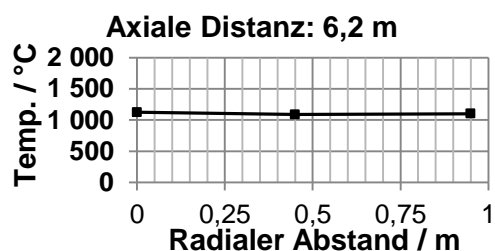
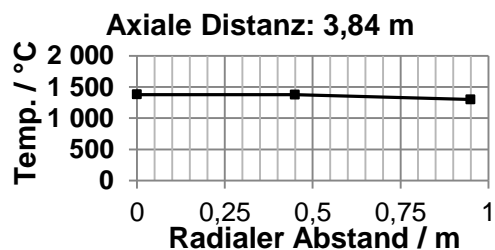
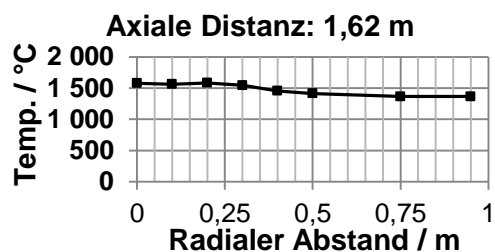
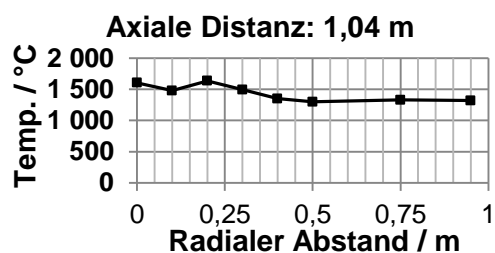
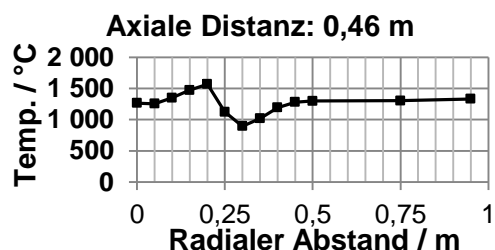
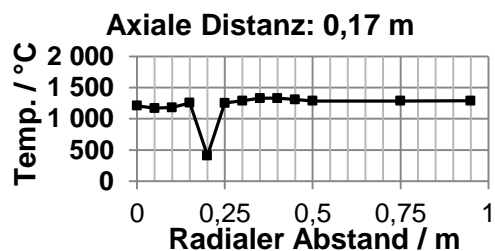
Z: Zentralrohr; 1, 2, 3,...Durchnummerierung der koaxialen Kanäle von innen nach außen; RRG: Rezirkuliertes Rauchgas;
k D: konstanter Drall; v D: variabler Drall

D. Übersicht über aktuelle Oxyfuel-Brennersimulationen

Versuchsanlage/Autor	Software	Verwendete Modelle				
		Turbulenz	Partikel- und Gasphase: 1) Pyrolyse 2) Koksabbrand 3) Gasphase	Strahlungsmodell		
				Gasphase	Partikel	
IHI (Khare et al. 2008)	Fluent 2D	Standart k-ε	-Single kinetic rate ¹⁾ -Kinetics/diffusion limited ²⁾ -PDF, non adiabatic ³⁾	P1	WSGGM cell based	k.A.
Chalmers (Al-Abbas et al. 2011)	AVL Fire 3D	Standart k-ε	Single kinetic rate ¹⁾ Kinetics/diffusion limited ²⁾ EBU ³⁾	DTRM	konstant	Emission
Stuttgart Habermehl et al. 2011	Fluent 3D	Standart k-ε	CPDM ¹⁾ 3 Schritt ²⁾ EDM finite rate ³⁾	DO	EWBM	Emission Streuung
Stuttgart Toporov et al. 2008	Fluent 1/6 3D	Standart k-ε	CPDM ¹⁾ 3 Schritt ²⁾ EDM finite rate ³⁾	DO	WSGGM Fluent	k.A.
Stuttgart Kangwanpongpan et al. 2011	Fluent 1/6 3D	RSM	Single kinetic rate ¹⁾ 3 Schritt ²⁾ EDM finite rate ³⁾	DO	WSGGM modifiziert	k.A.
IFRF Brunetti et al. 2009	Fluent ¼ 3D	Standart k-ε k-ε RNG RSM	Kobayashi ¹⁾ Kinetics/diffusion limited ²⁾ EDM finite rate ³⁾	DO P1	WSGGM Fluent	k.A.
Canmet Chui et al. 2004	CFX Tascflow	Standart k-ε	Single kinetic rate ¹⁾ Kinetics/diffusion limited ²⁾ PDF, non adiabatic ³⁾	k.A.	k.A.	k.A.
Doosan Babcock Edge et al. 2010	Fluent 3D	k-ε RNG RSM LES	Single kinetic rate ¹⁾ Kinetics/diffusion limited ²⁾ EDM finite rate ³⁾	DO	WSGGM/ FSK	Emission Streuung

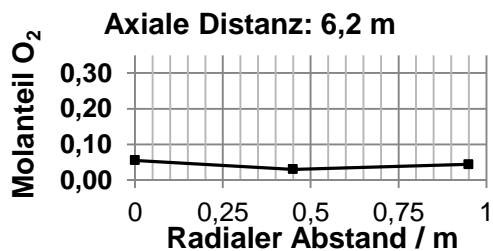
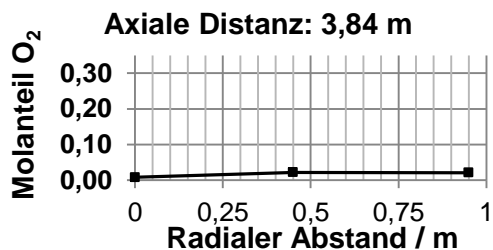
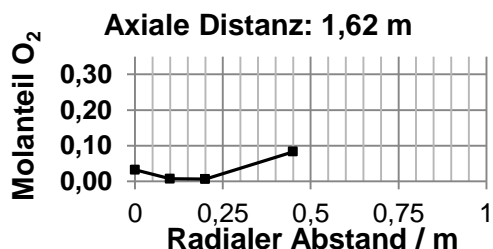
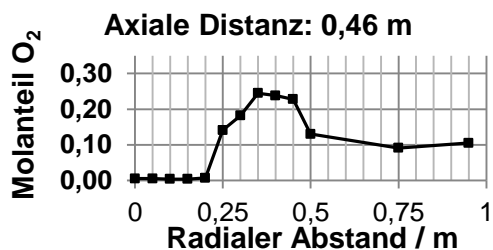
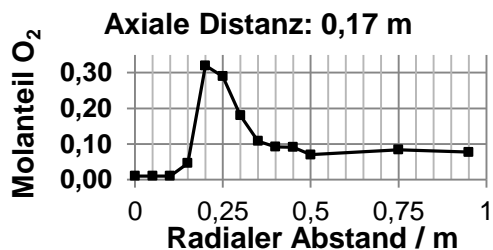
E. Messergebnisse des „AE&E“-Brenners im Oxyfuel-Betrieb

Temperaturmessungen:



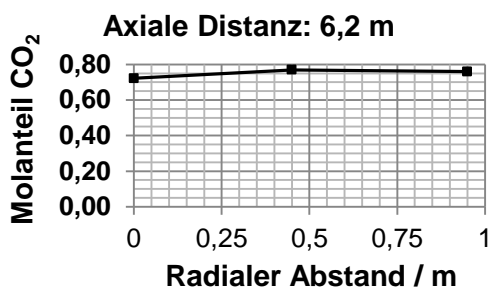
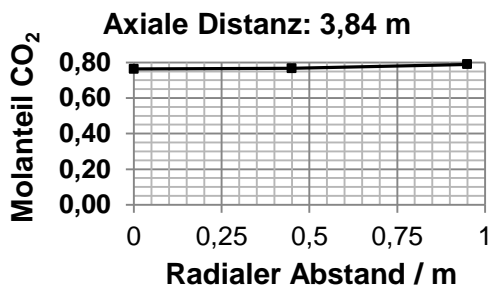
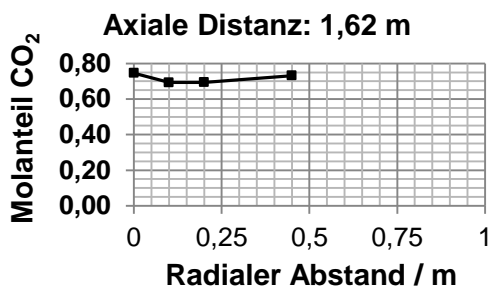
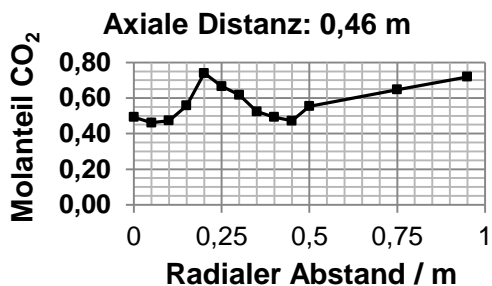
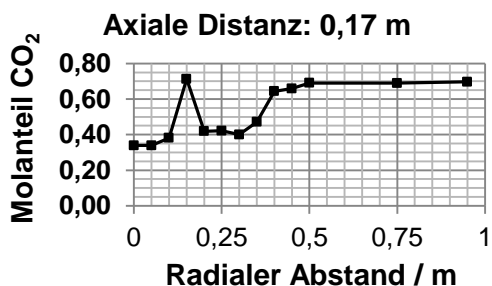
Abstand von Brenner / m	Abstand von Brenner / m	Temperatur °C
axial	radial	
0,17	0,95	1290
0,17	0,75	1285
0,17	0,5	1285
0,17	0,45	1310
0,17	0,4	1330
0,17	0,35	1330
0,17	0,3	1290
0,17	0,25	1252
0,17	0,2	411
0,17	0,15	1255
0,17	0,1	1180
0,17	0,05	1170
0,17	0	1210
0,46	0,95	1333
0,46	0,75	1305
0,46	0,5	1300
0,46	0,45	1280
0,46	0,4	1195
0,46	0,35	1020
0,46	0,3	895
0,46	0,25	1125
0,46	0,2	1570
0,46	0,15	1475
0,46	0,1	1350
0,46	0,05	1255
0,46	0	1265
1,04	0,95	1320
1,04	0,75	1330
1,04	0,5	1300
1,04	0,4	1350
1,04	0,3	1495
1,04	0,2	1635
1,04	0,1	1480
1,04	0	1605
1,62	0,95	1365
1,62	0,75	1365
1,62	0,5	1415
1,62	0,4	1455
1,62	0,3	1545
1,62	0,2	1585
1,62	0,1	1565
1,62	0	1580
3,84	0,95	1300
3,84	0,45	1375
3,84	0	1380
6,2	0,95	1100
6,2	0,45	1088
6,2	0	1125

Sauerstoffkonzentrationen im Oxyfuel-Betrieb

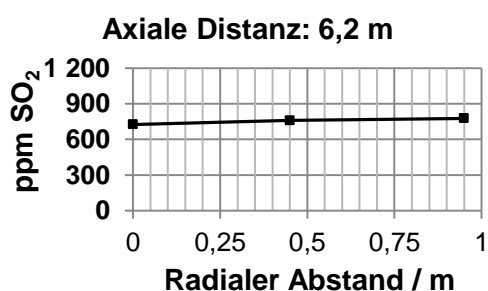
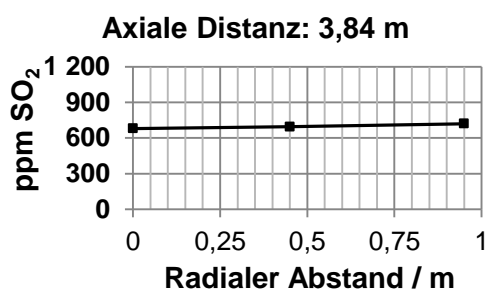
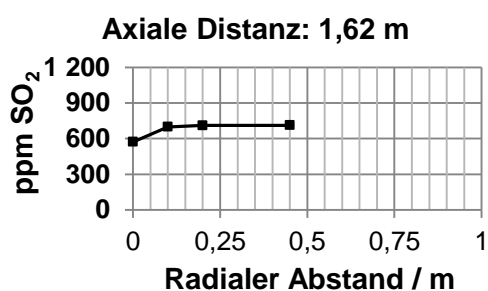
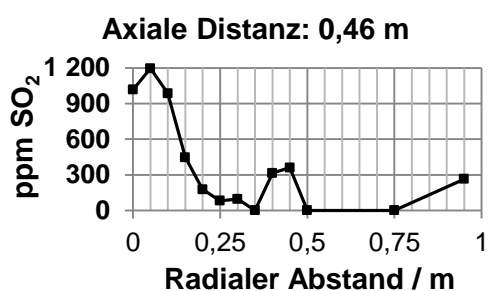
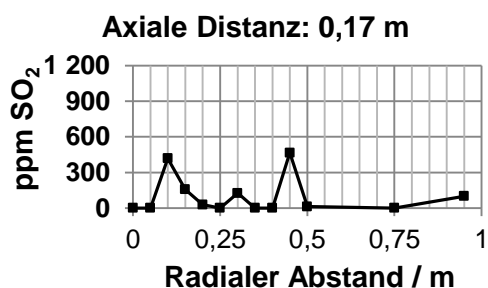


Abstand von Brenner / m		O ₂
axial	radial	Molanteil
0,17	0,95	0,08
0,17	0,75	0,08
0,17	0,5	0,07
0,17	0,45	0,09
0,17	0,4	0,09
0,17	0,35	0,11
0,17	0,3	0,18
0,17	0,25	0,29
0,17	0,2	0,32
0,17	0,15	0,05
0,17	0,1	0,01
0,17	0,05	0,01
0,17	0	0,01
<hr/>		
0,46	0,95	0,11
0,46	0,75	0,09
0,46	0,5	0,13
0,46	0,45	0,23
0,46	0,4	0,24
0,46	0,35	0,25
0,46	0,3	0,18
0,46	0,25	0,14
0,46	0,2	0,01
0,46	0,15	0,00
0,46	0,1	0,00
0,46	0,05	0,01
0,46	0	0,01
<hr/>		
1,62	0,45	0,08
1,62	0,2	0,01
1,62	0,1	0,01
1,62	0	0,03
<hr/>		
3,84	0,95	0,02
3,84	0,45	0,02
3,84	0	0,01
<hr/>		
6,2	0,95	0,04
6,2	0,45	0,03
6,2	0	0,06

Messergebnisse:CO₂

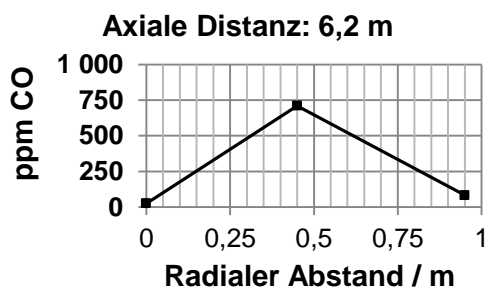
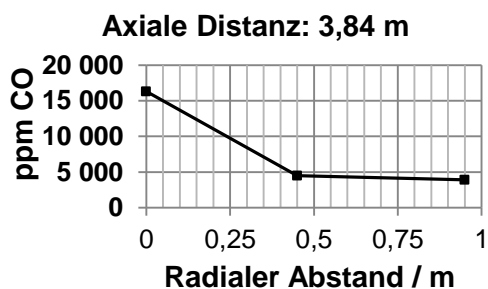
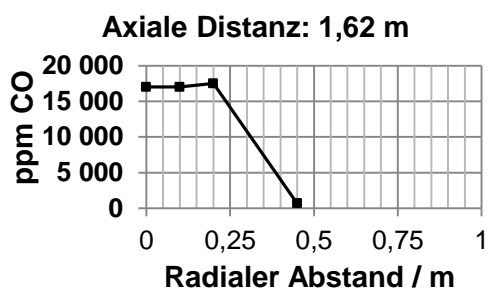
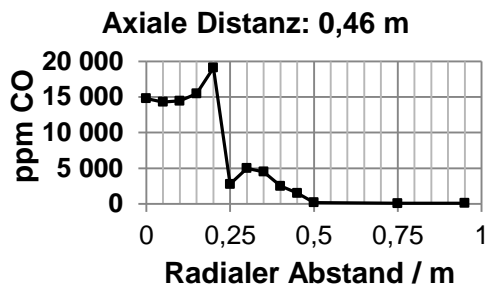
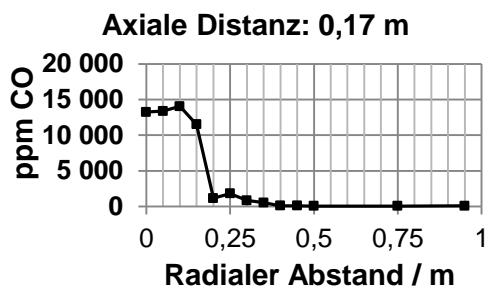


Abstand von Brenner / m		CO ₂
axial	radial	Molanteil
0,17	0,95	0,70
0,17	0,75	0,69
0,17	0,50	0,69
0,17	0,45	0,66
0,17	0,40	0,64
0,17	0,35	0,47
0,17	0,30	0,40
0,17	0,25	0,42
0,17	0,20	0,42
0,17	0,15	0,71
0,17	0,10	0,38
0,17	0,05	0,34
0,17	0,00	0,34
<hr/>		
0,46	0,95	0,72
0,46	0,75	0,65
0,46	0,50	0,55
0,46	0,45	0,47
0,46	0,40	0,49
0,46	0,35	0,52
0,46	0,30	0,62
0,46	0,25	0,67
0,46	0,20	0,74
0,46	0,15	0,56
0,46	0,10	0,47
0,46	0,05	0,46
0,46	0,00	0,49
<hr/>		
1,62	0,45	0,73
1,62	0,20	0,69
1,62	0,10	0,69
1,62	0,00	0,75
<hr/>		
3,84	0,95	0,79
3,84	0,45	0,77
3,84	0,00	0,76
<hr/>		
6,20	0,95	0,76
6,20	0,45	0,77
6,20	0,00	0,72

Messergebnisse: SO₂

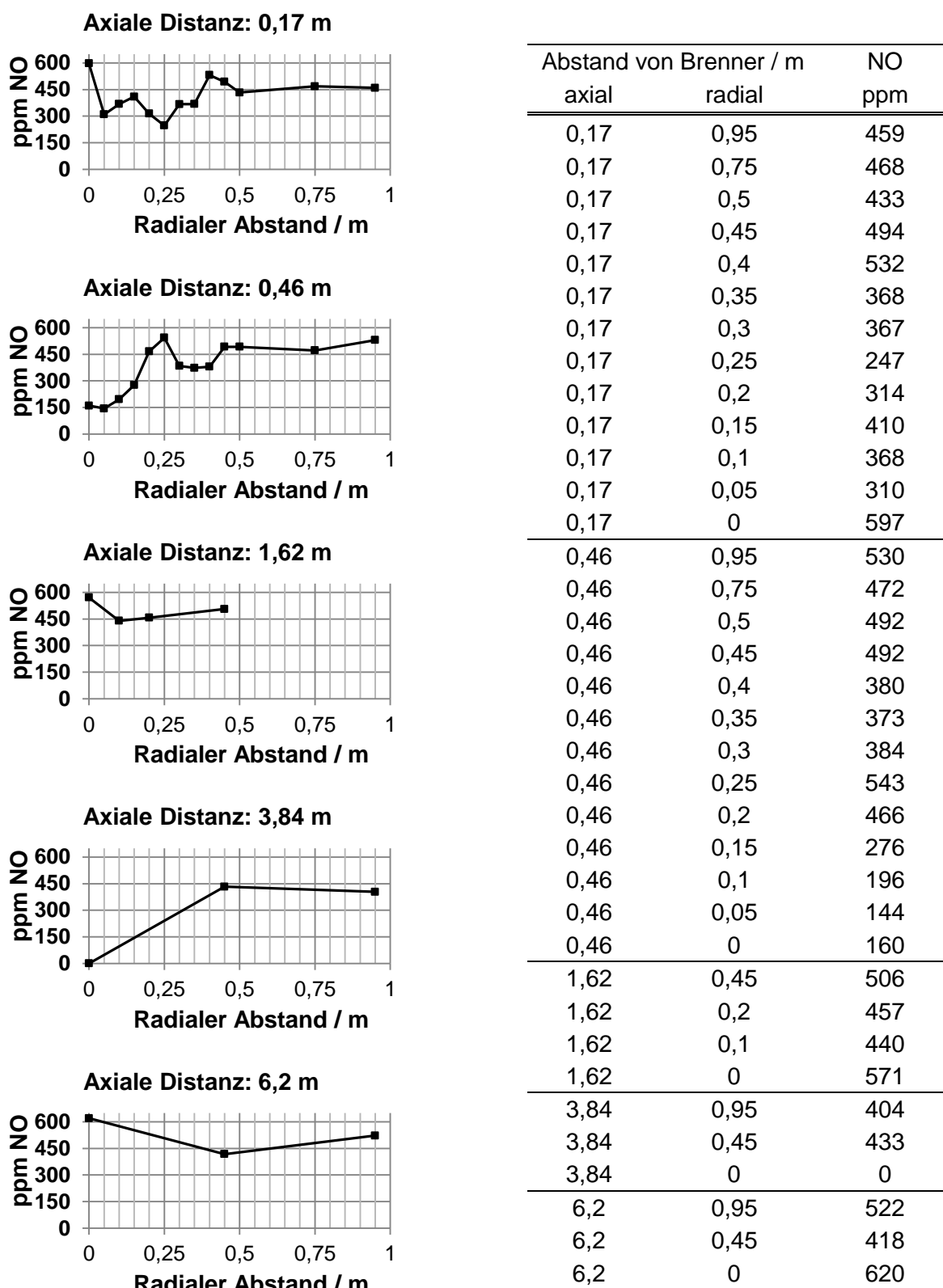
Abstand von Brenner / m		SO2
axial	radial	ppm
0,17	0,95	100
0,17	0,75	0
0,17	0,5	12
0,17	0,45	465
0,17	0,4	0
0,17	0,35	0
0,17	0,3	126
0,17	0,25	0
0,17	0,2	28
0,17	0,15	156
0,17	0,1	418
0,17	0,05	0
0,17	0	0
0,46	0,95	265
0,46	0,75	0
0,46	0,5	0
0,46	0,45	360
0,46	0,4	314
0,46	0,35	0
0,46	0,3	96
0,46	0,25	81
0,46	0,2	177
0,46	0,15	447
0,46	0,1	986
0,46	0,05	1196
0,46	0	1016
1,62	0,45	712
1,62	0,2	710
1,62	0,1	699
1,62	0	572
3,84	0,95	720
3,84	0,45	695
3,84	0	679
6,2	0,95	776
6,2	0,45	759
6,2	0	726

Messergebnisse: CO



Abstand von Brenner / m		CO
axial	radial	ppm
0,17	0,95	72
0,17	0,75	55
0,17	0,5	46
0,17	0,45	84
0,17	0,4	98
0,17	0,35	517
0,17	0,3	840
0,17	0,25	1800
0,17	0,2	1160
0,17	0,15	11500
0,17	0,1	14034
0,17	0,05	13360
0,17	0	13237
0,46	0,95	85
0,46	0,75	64
0,46	0,5	175
0,46	0,45	1500
0,46	0,4	2500
0,46	0,35	4500
0,46	0,3	5000
0,46	0,25	2775
0,46	0,2	19090
0,46	0,15	15450
0,46	0,1	14450
0,46	0,05	14300
0,46	0	14790
1,62	0,45	683
1,62	0,2	17500
1,62	0,1	17000
1,62	0	17000
3,84	0,95	3900
3,84	0,45	4470
3,84	0	16300
6,2	0,95	82
6,2	0,45	710
6,2	0	25

Messergebnisse: NO



F. Randbedingungen für die numerische Simulation mit ANSYS Fluent 14.0

Tabelle F-1: Verwendete Parameter für das Single-Kinetic-Rate und das Kinetic-Diffusion-Limited-Rate-Modell

Präexponentialfaktor Pyrolyse	A_1	$2,81 \cdot 10^5$	s^{-1}	(Badzioch, Hawksley 1970)
Aktivierungsenergie Pyrolyse	E_1	$7,4 \cdot 10^7$	$J \cdot kg \cdot mol^{-1}$	
Diffusionskonstante Koksabbrand	C_1	$4,4 \cdot 10^{-12}$		
Präexponentialfaktor Koksabbrand	C_2	16	s^{-1}	(Khare et al. 2008)
Aktivierungsenergie Koksabbrand	E_2	$7,1 \cdot 10^7$	$J \cdot kg \cdot mol^{-1}$	
Emissionsgrad Partikel	ϵ_p	0,8	-	siehe Abschnitt 5.2.3

Tabelle F-2: Gaszusammensetzungen des Primär- und Sekundärstroms sowie des Oxidators

Spezies	Primär Vol.% f.	Sekundär Vol.% f.	Oxidator Vol.% f.
CO ₂	72,6	45,82	0
H ₂ O	2,63	1,66	0
O ₂	3,03	38,8	100
N ₂	21,74	13,72	0

Tabelle F-3: Massenströme und Zuströmtemperaturen der einzelnen Volumenströme und Brennkammerwandtemperaturen der einzelnen Segmente der Versuchsbrennkammer

Randbedingungsbezeichnung	Wert	Einheit
Kohlenstaubmassenstrom	360,0	kg·h ⁻¹
Primärmassenstrom	537,4	kg·h ⁻¹
Primärtemperatur	36,5	°C
Injektionsmassenstrom	123,5	kg·h ⁻¹
Sauerstofftemperatur	24,5	°C
Sekundärmassenstrom mit O ₂	1702,8	kg·h ⁻¹
Sekundärtemperatur	90,0	°C
Wandtemperaturen:		
Segment 1	1306,0	°C
Segment 2	1306,0	°C
Segment 3	1305,2	°C
Segment 4	1224,4	°C
Segment 5	1230,5	°C
Segment 6	1236,6	°C
Segment 7	1190,0	°C
Segment 8	1159,7	°C
Segment 9	1098,4	°C
Segment 10	1038,1	°C
Segment 11	1020,6	°C

G. Berechnung des Absorptionsgrades mit dem WSGG-Modell für die Gasphase

Sowohl das P1-Modell als auch das DO-Modell haben gemeinsam, dass bei der Berechnung der Strahldichte lediglich die um die Berechnungszelle angrenzenden Zellen berücksichtigt werden. Diese Berechnungsmethode wird als non-correlated bezeichnet und wird speziell bei der numerischen Strahlungssimulation eingesetzt, da der Berechnungsaufwand deutlich gesenkt werden kann (Johansson et al. 2010). Werden nur Emission und Absorption der Gasphase berücksichtigt, ergibt sich für die Strahldichte entlang eines Strahls folgender Ausdruck

$$I_n = I_{n-1} \cdot \tau_{n-1 \rightarrow n} + I_{B,n-1/2} \cdot (1 - \tau_{n-1 \rightarrow n}) \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \quad (10-1)$$

für die nicht korrelierte Berechnungsmethode. Da bei der Modellierung nur die austretende Strahlung aus dem jeweiligen Volumenlement von Interesse ist, wird anstatt des Absorptionsgrades α der Transmissionsgrad τ verwendet (siehe Abschnitt 4.1.1, Seite 69). Es ist zu erkennen, dass zur Berechnung der Strahldichte lediglich die benachbarte Berechnungszelle berücksichtigt wird.

Wird zur Berechnung der Strahldichte ein WSGG-Modell eingesetzt, bestehen unterschiedliche Möglichkeiten, den benötigten Absorptionskoeffizienten zu berechnen. In Ansys Fluent können zwei Berechnungsansätze der Graugasapproximation verwendet werden. Bei beiden Modellansätzen wird zuerst auf Basis des WSGG-Modells ein globaler Emissionsgrad mit

$$\varepsilon = \sum_{i=0}^I a_i(T) \cdot \left(1 - e^{-\kappa_i \cdot p \cdot s}\right) \quad - \quad (10-2)$$

berechnet, wobei p die Summe der Partialdrücke von CO_2 und H_2O ist und s entweder eine charakteristische Zellenlänge (cell based) oder die gleichwertige Schichtdicke (domain based), näherungsweise mit

$$s_{gl} = 3,6 \cdot \frac{V}{A} \quad \text{m} \quad (10-3)$$

berechnet (V ist das Volumen und A die umhüllende Fläche), sein kann.

Der jeweilige Absorptionskoeffizient kann in weiterer Folge mit

$$\kappa_G = -\frac{\ln(1-\varepsilon)}{s} \quad \text{m}^{-1} \quad (10-4)$$

berechnet werden, wobei s wiederum entweder die charakteristische Zellenlänge oder die gleichwertige Schichtdicke sein kann. Für die Strahldichte folgt

$$I_n = I_{n-1} \cdot e^{-\kappa_G \cdot \rho \cdot s} + I_{B,n-1/2} \cdot \left(1 - e^{-\kappa_G \cdot \rho \cdot s}\right) \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \quad (10-5)$$

wobei s in diesem Fall die tatsächlich in der Zelle zurückgelegte geometrische Weglänge ist.

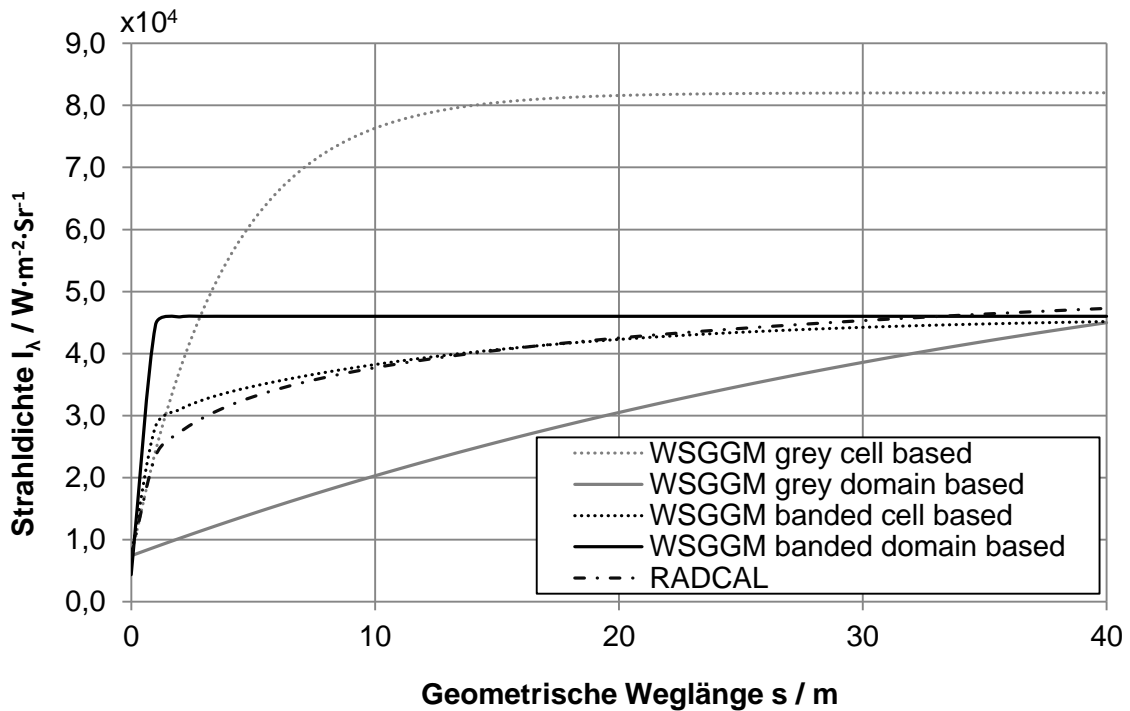
Eine weitere Möglichkeit zur Berechnung der Strahldichte besteht darin, anstatt der Graugasapproximation die Strahldichte für jede Bande (banded formulation) zu berechnen

$$I_{n,i} = I_{n-1,i} \cdot e^{-\kappa_{G,i} \cdot \rho \cdot s} + I_{B,n-1/2,i} \cdot a_i \cdot \left(1 - e^{-\kappa_{G,i} \cdot \rho \cdot s}\right) \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \quad (10-6)$$

wobei die gesamte Strahldichte durch

$$I_n = \sum_i I_{n,i} \quad \text{W} \cdot \text{m}^{-2} \quad (10-7)$$

gegeben ist. In diesem Fall kann wiederum eine repräsentative geometrische Weglänge für das Berechnungsgebiet oder eine charakteristische Zellenlänge zur Berechnung herangezogen werden. In der folgenden Abbildung sind die Strahldichteverläufe für die unterschiedlichen Berechnungsansätze im Vergleich zu den Berechnungsergebnissen mit RADCAL dargestellt. Es ist gut zu erkennen, dass die Graugasapproximation in Kombination mit der jeweiligen charakteristischen Zellenlänge die auftreffende Strahldichte auf der gegenüberliegenden Wand im Vergleich zum Berechnungsergebnis mit RADCAL fast um das Zweifache übersteigt. Im Vergleich dazu wird mit der Graugasapproximation auf Basis der gleichwertigen Schichtdicke s_{gl} zwischen den zwei parallelen Platten die Strahldichte unterschätzt, wobei an der gegenüberliegenden Wand die Strahldichte mit dem Referenzmodell gut übereinstimmt. Wird die Strahldichte zuerst für jede Bande auf Basis der gleichwertigen Schichtdicke berechnet, weicht der Strahldichteverlauf zwar deutlich vom Referenzmodell ab, wobei am Rand die resultierende Strahldichte wiederum mit dem Ergebnis aus der RADCAL-Berechnung übereinstimmt. Das beste Ergebnis wird durch die für jede Bande berechnete Strahldichte auf Basis der jeweiligen Zellenlänge erzielt. Lediglich im Bereich zwischen 1 und 8 m kommt es zu etwas größeren Abweichungen.



Berechnete Strahl-dichte zwischen zwei parallelen Platten mit unendlicher Ausdehnung und einem Abstand von 40 m (in 40 Berechnungszellen unterteilt) mit einer Wandtemperatur von 800 K und einer isothermen Gasschicht mit 1400 K (Gaszusammensetzung: $p_{\text{CO}_2}=0,697$ bar, $p_{\text{H}_2\text{O}}=0,1263$ bar)

Auf Basis der gezeigten Berechnungsergebnisse wird ersichtlich, dass die charakteristische Zellenlänge zur Berechnung eines Gesamtabsorptionskoeffizienten und in weiterer Folge der Strahl-dichte zur korrekten Berechnung der Wärmestromdichten nicht geeignet ist. Ebenso muss bei der Verwendung des WSGG-Modells auf Basis der gleichwertigen Schichtdicke darauf geachtet werden, dass es innerhalb des Berechnungsgebiets zu starken Abweichungen im Vergleich zur realen Strahl-dichte kommen kann, an den umhüllenden Begrenzungsflächen jedoch durchwegs gute Ergebnisse erzielt werden können.